

Bernardo Luis Maito Laitharth

**AVALIAÇÃO DE UM TEXTO DE APOIO PARA  
ABORDAR A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E  
OS ORBITAIS ATÔMICOS DE ÁTOMOS  
HIDROGENÓIDES NUM CURSO DE FORMAÇÃO  
DE PROFESSORES DE FÍSICA**

Passo Fundo

2023

Bernardo Luis Maito Laitharth

AVALIAÇÃO DE UM TEXTO DE APOIO PARA  
ABORDAR A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E  
OS ORBITAIS ATÔMICOS DE ÁTOMOS  
HIDROGENÓIDES NUM CURSO DE FORMAÇÃO  
DE PROFESSORES DE FÍSICA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, do Instituto de Humanidades, Ciências, Educação e Criatividade, da Universidade de Passo Fundo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática, sob a orientação do professor Dr. Carlos Ariel Samudio Perez e coorientação do professor Dr. Alisson Cristian Giacomelli.

Passo Fundo

2023

CIP – Catalogação na Publicação

---

L189a Laitharth, Bernardo Luis Maito

Avaliação de um texto de apoio para abordar a Equação de Schrödinger e os orbitais atômicos de átomos hidrogenóides num curso de formação de professores de física [recurso eletrônico] / Bernardo Luis Maito Laitharth . – 2023.  
4 MB ; PDF.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Ariel Samudio Pérez.

Coorientador: Prof. Dr. Alisson Cristian Giacomelli.

Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática) – Universidade de Passo Fundo, 2023.

1. Física - Estudo e ensino (Superior). 2. Equação de Schrödinger. 3. Orbitais atômicos. 4. Professores - Formação. 5. Teoria quântica. I. Samudio Pérez, Carlos Ariel, orientador. II. Giacomelli, Alisson Cristian, coorientador. III. Título.

CDU: 530.145

---

Catalogação: Bibliotecária Juliana Langaro Silveira - CRB 10/2427

Bernardo Luis Maito Laitharth

AVALIAÇÃO DE UM TEXTO DE APOIO PARA  
ABORDAR A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E  
OS ORBITAIS ATÔMICOS DE ÁTOMOS  
HIDROGENÓIDES NUM CURSO DE FORMAÇÃO  
DE PROFESSORES DE FÍSICA

A banca examinadora abaixo APROVA, em 05 de abril de 2023, a Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade de Passo Fundo, como requisito parcial de exigência para obtenção de grau de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática, na linha de pesquisa de Práticas Educativas em ensino de Ciências e Matemática.

Dr. Carlos Ariel Samudio Perez - Orientador  
Universidade de Passo Fundo - UPF

Dr. Alisson Cristian Giacomelli - Coorientador  
Universidade de Passo Fundo - UPF

Dr. João Carlos Krause  
Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões - URI

Dr. Luiz Marcelo Darroz  
Universidade de Passo Fundo - UPF

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha gratidão a todas as pessoas que contribuíram para a realização deste trabalho.

Primeiramente, agradeço aos meus orientadores, Dr. Carlos Samudio e Dr. Alisson Giacomelli, pela orientação valiosa, suporte e paciência ao longo de todo o processo de elaboração da dissertação. Seus ensinamentos e feedbacks foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço também à Dra. Cleci Werner da Rosa pelo apoio imenso e confiança no meu trabalho. Sua ajuda foi fundamental para a realização desta dissertação e por isso, sou muito grato por ter tido a oportunidade de aprender com alguém tão competente e dedicado ao seu trabalho.

A minha mãe, por sua vez, agradeço por sua paciência e amor incondicional durante todo o período de elaboração da dissertação. Seu apoio e incentivo foram essenciais para que eu pudesse seguir em frente mesmo nos momentos mais difíceis.

Gostaria também de dedicar um agradecimento especial ao meu falecido pai. Ele sempre me apoiou em meus estudos e foi uma fonte constante de inspiração e encorajamento. Embora ele não esteja mais fisicamente presente, sei que ele ainda está olhando por mim e por isso sou grato por tê-lo tido em minha vida.

Gostaria de expressar minha gratidão especial a alguém que, embora não esteja mais presente em minha vida, foi uma fonte inestimável de apoio e encorajamento ao longo do processo de escrita desta dissertação. Seu apoio inimaginável me ajudou a superar as dificuldades e a manter o foco na conclusão deste trabalho. Sou grato por ter tido sua presença em minha vida durante este período crucial.

Por fim, gostaria de agradecer a todas as outras pessoas que passaram pela minha vida durante o processo de escrita dessa dissertação. Sem a contribuição e paciência de cada um de vocês, este trabalho não seria possível.

Muito obrigado a todos!

“Tudo aquilo que chamamos de real é feito de coisas que não podem ser consideradas reais”.

Niels Bohr

## RESUMO

A presente dissertação descreve um estudo que buscou analisar quais as possíveis contribuições de um texto de apoio sobre o tema: as aplicações da Equação de Schrödinger, no estudo dos orbitais atômicos, para a formação inicial de professores de Física, na disciplina de Mecânica Quântica. O texto de apoio elaborado, como produto educacional que acompanha a dissertação, apresenta discussões teóricas construídas tomando, por referência de organização, a Transposição Didática na perspectiva de Chevallard. Essas discussões teóricas são acompanhadas de reflexões sobre o processo de aprendizagem, particularmente, da psicologia cognitiva que são apresentadas na dissertação, como forma de fundamentar o estudo desenvolvido. O principal objetivo do produto educacional é fornecer subsídios teóricos e metodológicos sobre o estudo da Equação de Schrödinger aos professores de Física, em formação inicial. Neste sentido, o presente trabalho parte do entendimento da necessidade de que esse conteúdo tenha maior ênfase nos cursos de formação de professores de Física, de forma a ampliar seu domínio conceitual. A aplicação do produto ocorreu em cinco encontros, sempre preparando as aulas seguindo ideias construtivistas, principalmente as de Ausubel, perfazendo um total de 20 horas/aula, junto a uma turma de um curso de Licenciatura em Física, na Universidade de Passo, localizada no interior do Rio Grande do Sul, no componente curricular de Mecânica Quântica. Como forma de validar o material didático desenvolvido, são estabelecidos dois instrumentos: questionários (pré- e pós-teste) e registros no diário de bordo do pesquisador. Os dados coletados foram estruturados de forma a analisar a aceitação dos alunos em relação ao material elaborado, bem como o impacto que ele teve em sua formação. A pesquisa parece ter sido um sucesso, com a maioria dos alunos demonstrando interesse e aceitação pelo assunto e pelo material utilizado. As aulas práticas e expositivas foram consideradas proveitosas e o ato final de visualização e interação com os orbitais ajudou na fixação do conhecimento. Algumas dificuldades dos alunos foram identificadas, mas foram superadas com o decorrer da pesquisa. A pesquisa é considerada válida, baseada nas avaliações positivas dos questionários de pré e pós-teste e nas descrições dos encontros no diário de bordo. Os resultados sugerem, também, que o texto de apoio tem a possibilidade de ser usado de forma independente, sem a necessidade de materiais externos. O produto educacional, texto de apoio titulado “Equação de Schrödinger: Um Estudo introdutório de Mecânica Quântica para Átomos Hidrogenóides”, que acompanha a dissertação está disponível em: <<http://educapes.capes.gov.br/handle/capes/738240>>.

**Palavras-Chave:** Mecânica Quântica. Orbitais Atômicos. Equação de Schrödinger. Ensino de Física. Produto educacional.

## ABSTRACT

This dissertation describes a study that sought to analyze the possible contributions of a supporting text on the subject: the applications of the Schrödinger Equation, in the study of atomic orbitals, for the initial training of Physics teachers, in the discipline of Quantum Mechanics. The support text prepared, as an educational product that accompanies the dissertation, presents theoretical discussions constructed taking, as an organizational reference, the Didactic Transposition in the perspective of Chevallard. These theoretical discussions are accompanied by reflections on the learning process, particularly on cognitive psychology, which are presented in the dissertation, as a way of substantiating the study developed. The main objective of the educational product is to provide theoretical and methodological subsidies on the study of the Schrödinger Equation to Physics teachers, in initial training. In this sense, the present work starts from the understanding of the need for this content to have greater emphasis in training courses for Physics teachers, in order to expand its conceptual domain. The application of the product took place in five meetings, always preparing the classes following constructivist ideas, mainly those of Ausubel, making a total of 20 hours/class, together with a class of a Degree in Physics course, at the University of Passo, located in countryside of Rio Grande do Sul, in the curricular component of Quantum Mechanics. As a way of validating the teaching material developed, two instruments are established: questionnaires (pre- and post-test) and records in the researcher's logbook. The collected data were structured in order to analyze the acceptance of the students in relation to the material elaborated, as well as the impact it had on their training. The research seems to have been a success, with most students showing interest and acceptance for the subject and the material used. The practical and expository classes were considered useful and the final act of visualization and interaction with the orbitals helped to consolidate knowledge. Some difficulties of the students were identified, but they were overcome during the research. The research is considered valid, based on the positive evaluations of the pre- and post-test questionnaires and the descriptions of the encounters in the logbook. The results also suggest that the supporting text has the possibility of being used independently, without the need for external materials. The educational product, support text entitled "Schrödinger Equation: An Introductory Study of Quantum Mechanics for Hydrogen Like Atoms", which accompanies the dissertation is available at: <<http://educapes.capes.gov.br/handle/capes/738240>>.

**Keywords:** Quantum Mechanics. Atomic Orbitals. Schrödinger's Equation. Physics Teaching. Educational Product.

## LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Produções sobre o ensino de MQ.....	15
Quadro 2 - Descrição das atividades realizadas nos encontros .....	45
Quadro 3 - Questão 1 e 2 do pré-teste e 1 e 2 do pós-teste com as respectivas respostas.....	53
Quadro 4 - Questão 3 do pré-teste e 3 do pós-teste com as respectivas respostas .....	55
Quadro 5 - Questão 4 do pós-teste com as respostas.....	55
Quadro 6 - Questão 5 do pós-teste com as respostas.....	56
Quadro 7 - Questão 6 do pós-teste com as respostas.....	57
Quadro 8 - Questão 7 do pós-teste com as respostas.....	58
Quadro 9 - Questão 8 do pós-teste com as respostas.....	58
Quadro 10 - Questão 9 do pós-teste com as respostas.....	59
Quadro 11 - Questão 10 do pós-teste com as respostas.....	60
Quadro 12 - Questão 11 do pós-teste com as respostas.....	61
Quadro 13 - Questão 12 do pós-teste com as respostas.....	62
Quadro 14 - Questão 13 do pós-teste com as respostas.....	62
Quadro 15 - Questão 4 do pré-teste e 14 do pós-teste com as respostas .....	63
Quadro 16 - Questão 5 do pré-teste e 15 do pós-teste com as respostas .....	64
Quadro 17 - Questão 6 e 7 do pré-teste e 16 do pós-teste com as respostas .....	65
Quadro 18 - Questão 8 do pré-teste e 17 e 18 do pós-teste com as respostas .....	65
Quadro 19 - Questão 9, 10 e 11 do pré-teste e 19, 20 e 21 do pós-teste com as respostas.....	67
Quadro 20 - Questão 12 e 13 do pré-teste e 22, 23 e 24 do pós-teste com as respostas.....	68
Quadro 21 - Questão 12 e 13 do pré-teste e 22, 23 e 24 do pós-teste com as respostas.....	68
Quadro 22 - Questão 14 do pré-teste e 25 do pós-teste com as respostas .....	69

## **LISTA DE FIGURAS**

Figura 1 - Imagem da capa do produto educacional.....	42
---	----

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO .....	10
2 REVISÃO DE LITERATURA .....	15
3 REFERENCIAL TEÓRICO .....	20
3.1 Jean Piaget.....	20
3.2 Lev Vigotsky .....	22
3.3 George Kelly .....	26
3.4 David Ausubel.....	29
3.5 Implicações do referencial teórico para o estudo .....	34
4 O PRODUTO EDUCACIONAL .....	36
4.1 Metodologia de desenvolvimento do produto educacional .....	36
4.2 A Teoria da Transposição Didática .....	38
4.2.1 As características da Transposição Didática .....	40
4.3 Elaboração do produto educacional.....	41
4.3.1 Locus de aplicação e caracterização dos sujeitos .....	44
4.3.2 Cronograma de aplicação do produto educacional.....	44
4.3.3 Descrição dos encontros .....	45
4.3.3.1 Primeiro encontro .....	45
4.3.3.2 Segundo Encontro .....	46
4.3.3.3 Terceiro Encontro.....	47
4.3.3.4 Quarto Encontro .....	48
4.3.3.5 Quinto Encontro .....	49
5 PESQUISA DESENVOLVIDA DURANTE A APLICAÇÃO DO PRODUTO EDUCACIONAL..	51
5.1 Aportes teórico-metodológicos da pesquisa.....	51
5.2 Instrumentos e metodologia para a produção de dados .....	51
5.3 Análise e discussão dos resultados.....	52
5.3.1 Análise do pré-teste e pós-teste .....	53
5.3.1.1 Análise das questões de percepção da proposta contidas no pré-teste e no pós-teste ....	64
5.3.2 Diário de Bordo.....	70
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	79
REFERÊNCIAS .....	82
APÊNDICE A - Questionário pré-teste .....	86
APÊNDICE B - Questionário pós-teste .....	87
APÊNDICE C - Termo de Consentimento Livre e Esclarecido.....	89
APÊNDICE D - Termo de autorização do curso de Física – UPF.....	90

## 1 INTRODUÇÃO

A teoria quântica é o mais bem sucedido conjunto de ideias já elaborado pela Física. Ela explica a tabela periódica dos elementos químicos e como as reações químicas ocorrem. Ela permite previsões exatas acerca da operação de lasers e microchips, da estabilidade do DNA e de como as partículas alfa constroem um túnel para fora do núcleo do átomo, através do tunelamento quântico (MCEVOY; ZARATE, 2012, p. 3).

Nos estudos sobre o átomo, muitas teorias foram criadas para tentar dar sentido ao comportamento atômico, porém, sempre precisando de aperfeiçoamentos. Por isso, para explicar o movimento dos elétrons em torno do núcleo, foi criada por Planck, Bohr, Einstein, Schrödinger, entre outros, uma nova teoria: a da Mecânica Quântica (MQ) (SILVA, 2020).

Desde o início do estudo moderno sobre o átomo, as formas de como interpretá-lo e descrevê-lo sempre estiveram em constante evolução. De acordo com a teoria atômica atual, os elétrons não orbitam o núcleo do átomo de uma maneira harmoniosa, como os planetas orbitam o Sol. Pode-se, somente, realizar aproximações de onde o elétron pode se encontrar dentro da nuvem de probabilidade eletrônica. O modelo da nuvem de elétrons foi desenvolvido por vários cientistas mas, principalmente, por Erwin Schrödinger sendo esse o aspecto da teoria que será explorado nesta proposta de dissertação. Dentro da teoria atômica, se dá o estudo dos orbitais atômicos, analisando o momento e a posição dos elétrons, através da resolução de uma equação de onda. Quando se resolve a equação de onda, uma função de onda é gerada podendo assumir tanto valores positivos como negativos mas, para que ela interprete sistemas reais, como o átomo, todos os valores devem ser positivos e reais. Nesse sentido, Max Born interpretou a função de onda como sendo a densidade de probabilidade de encontrar o elétron em uma posição predeterminada, em torno do núcleo atômico, considerando o quadrado do valor total da função de onda como resultado. Com isso, um novo conceito foi apresentado: o de que existe a probabilidade de um estado quântico determinado existir. Partindo dessa ideia, só existem probabilidades na teoria atômica (MCEVOY; ZARATE, 2012, p. 144).

Portanto, graças a Erwin Schrödinger e suas contribuições na MQ, com seu postulado da equação de onda e com a interpretação probabilística desenvolvida por Max Born, podemos determinar a evolução temporal de um sistema mecânico quântico. Esta equação é chamada de Equação de Schrödinger (ES):

$$HT(q, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} T(q, t) \quad (1)$$

Onde  $H$  é o operador Hamiltoniano, que representa a energia total do sistema;  $\hbar$  representa a constante de Planck reduzida e  $i$  a parte imaginária;  $T(q, t)$  é a função de onda em termos das coordenadas generalizadas espaciais  $q$  e o tempo  $t$  (GRIFFITHS, 2005). A solução desta equação permite obter a função de onda que, por sua vez, aplicada à interpretação probabilística, nos permite conhecer os possíveis estados do sistema quântico.

A ES permite estudar, desde sistemas quânticos simples, como um elétron em um poço de potencial em uma dimensão, até sistemas complexos de múltiplos corpos, como um elemento químico, o ouro (Au) por exemplo, com 79 elétrons, um composto químico ou uma liga metálica. Dado o grande potencial da ES para o estudo de sistemas quânticos, podemos comentar sobre a grande importância de trabalhar este conteúdo, minuciosamente, em sala de aula. Por isso, julgou-se necessário analisar o contexto atual do ensino da MQ em busca de materiais que promovam a produção de novas metodologias e propostas de ensino, assim como em compreender a importância e a necessidade do estudo dela, no ensino superior.

Em minha trajetória formativa, desde cedo, fui instigado a questionar o mundo a minha volta, tendo grande interesse em Biologia, quando mais novo. Desse interesse científico, surgiu meu fascínio por Química, no qual passei boa parte da minha infância estudando. Foi somente quando terminei o ensino fundamental que comecei a questionar e desenvolver um pensamento mais abrangente sobre o mundo, o que me fez, através dessa disposição à Química e Biologia, me aventurar na Física. Então, comecei a descobrir que com ela poderia ter uma visão mais ampla de como as coisas funcionam, podendo expandir em vários campos do conhecimento.

Porém, nunca fui excelente com números, mas o desejo de desbravar o difícil e desconhecido é o que, ainda hoje, me impulsiona. A partir daí, meu interesse pela área só aumentou, especialmente, porque tive um ótimo professor de Física, no ensino médio, o que me fez tomar a decisão de entrar para o curso de licenciatura em Física, na UPF, em 2015. No entanto, antes de ingressar no curso de Licenciatura em Física, decidi me inscrever em um curso técnico em Mecânica Industrial, no Instituto Federal do Rio Grande do Sul (IFSUL). Durante o primeiro ano, desenvolvi muitas habilidades manuais e, por isso, comecei a trabalhar dentro do próprio campus como auxiliar de ferramentaria. Durante um ano, fiquei trabalhando, preparando aulas e peças e, como tinha bastante tempo vago, lendo muitos livros na biblioteca. Nesse campus, eu encontrei uma coleção de livros de Física que, coincidentemente, são os mesmos usados no curso de Física da UPF. A partir daí, com bastante tempo livre e muita vontade de aprender, estudei, vigorosamente, os livros durante o meu turno de trabalho, que era à noite. No segundo ano, tive certeza de que não queria fazer Engenharia Mecânica, pois não houve um

grande interesse de minha parte nas matérias que eram introdutórias à Engenharia, oferecidas pelo curso técnico. Sendo assim, me matriculei no curso de licenciatura em Física, que era o mais próximo do que eu, realmente, almejava na época, que era Engenharia Física, ficando o primeiro ano da graduação estudando à tarde, no IFSUL, e, à noite, na UPF. Esse curso técnico me proporcionou muitas experiências, assim como um intercâmbio para os Estados Unidos, onde estudei Empreendedorismo Global.

Meu período na graduação foi cheio de experiências e oportunidades, conheci muitas pessoas e fiz várias amizades. Nesse período, participei de um projeto de Iniciação do Conhecimento, no qual pude desenvolver minhas habilidades de pesquisa e escrita de artigos. Minha graduação foi finalizada no ano de 2019, com um TCC que tive grande satisfação em escrever cujo título foi: *Diagramas de Feynman, no Ensino da Física de Partículas*. Tive a oportunidade de apresentar esse TCC em um congresso internacional e publicar um resumo dele como um capítulo de livro. Logo, no ano seguinte a minha graduação, decidi continuar minha educação no Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática, na UPF, onde, felizmente, posso trabalhar no limite entre a Química e a Física, na área da MQ. Atualmente, sou professor regente da Escola Estadual de Ensino Básico Monteiro Lobato, onde leciono as disciplinas de Matemática, Matemática Financeira e Introdução ao Conhecimento Científico.

A inserção do estudo da MQ, no ensino básico, e seu aprimoramento, nos cursos de formação de professores de física, se mostra cada vez mais necessária para o avanço científico da sociedade. O profissional Licenciado em Física deve ser capaz de transpor conteúdos modernos e clássicos, estando sempre em busca de aprimorar sua bagagem de conhecimentos e sempre atualizar sua metodologia, tornando as aulas mais instigantes para despertar o interesse dos estudantes. O ensino de Física, no ensino médio e superior, aparenta não acompanhar o desenvolvimento tecnológico, tornando-se um problema, tanto para o professor quanto para o aluno. Por isso, metodologias e práticas pedagógicas estão sendo pesquisadas e desenvolvidas, especialmente, na parte da Física Moderna, para mudar o cenário atual brasileiro (OLIVEIRA et al., 2007, v. 29, p. 447).

A importância da MQ se manifesta nas mais distintas formas de aplicação dos seus conhecimentos em inúmeras áreas da indústria, como computadores, segurança *online*, desenvolvimento de *microchips*, GPS, raios-x, etc, fornecendo as ferramentas e subsídios necessários para o rápido avanço da civilização, melhorando a qualidade de vida e saúde (TAMMOOR, 2018). Por isso, é de grande importância manter o currículo de Física Moderna atualizado com o avanço científico, para diminuir as dificuldades de ensino e aprendizagem.

Cuesta (2018, apud SOUZA, 2020) realizou uma análise de trabalhos publicados sobre o ensino da Física Moderna e Contemporânea, entre os anos de 1986 a 2016, no qual aponta que um dos motivos geradores de dificuldades no processo de formação dos estudantes de Física está na ausência de reflexão conceitual sobre a Física Quântica. Aponta, também, que uma solução para promover melhorias seria reformular este ensino, na formação inicial, de professores.

Partindo dos pressupostos apresentados até aqui, a presente dissertação busca responder à seguinte pergunta: “Quais são as possíveis contribuições de um texto de apoio sobre as aplicações da Equação de Schrödinger, no estudo dos orbitais atômicos para a formação inicial de professores de Física?”. Sendo assim, o objetivo geral desta dissertação é a elaboração de um material de apoio que contemple vários aspectos julgados necessários para auxiliar o ensino de MQ, na formação de professores de Física. Também, apresentamos, como objetivos específicos, a realização de uma pesquisa em livros e artigos; a seleção de conteúdos a serem abordados no material; e a elaboração do texto e dos exercícios com base na TTD e nas teorias construtivistas, e a validação por meio da pesquisa e análise qualitativa desenvolvida perante a aplicação. Tudo isso buscando preencher lacunas no aprendizado e, ao mesmo tempo, proporcionando pontos de apoio ao discente, por meio de reflexões históricas, revisões matemáticas fundamentais, acompanhamento minucioso na resolução de exercícios e relações de objetos abstratos com informações mais tangíveis, tendo sempre presente o objetivo claro para cada item a ser estudado.

A fim de contemplar o objetivo apresentado e trazer possíveis discussões ao problema levantado, organizamos o texto da dissertação em 6 capítulos. Sendo que o primeiro capítulo será dedicado à introdução, onde explicitamos a problemática, a questão de investigação e os objetivos do estudo. O segundo está destinado à apresentação da revisão de literatura que tem como objetivo a identificação de estudos relacionados que possam estabelecer um panorama de como a área do Ensino de Ciências vem se dedicando à temática. O terceiro capítulo apresenta o referencial teórico, que discute o construtivismo como base teórica para a pesquisa e busca fundamentar a análise dos resultados. O capítulo quatro descreve a elaboração e aplicação do produto educacional, utilizando a TTD como um dos meios para fundamentar a elaboração. Esse capítulo apresenta detalhes sobre onde o produto foi aplicado, o cronograma e a descrição dos encontros realizados durante o processo de aplicação. O capítulo cinco apresenta a pesquisa realizada, durante a aplicação do produto, com o objetivo de analisar os questionários e diário de bordo em busca de elementos que evidenciem a construção do conhecimento. Por fim, o

capítulo seis traz as considerações finais da dissertação, avaliando a aplicação do produto educacional, a aprovação dos participantes e a conclusão da pesquisa realizada.

O texto de apoio elaborado como o produto educacional, que acompanha a dissertação, apresenta discussões teóricas construídas tomando por referência de organização a Transposição Didática, na perspectiva de Chevallard, acompanhadas de reflexões sobre o processo de aprendizagem a partir de teorias construtivistas do conhecimento. O texto apresenta a teoria atômica e a estrutura eletrônica dos átomos, focando na resolução de problemas matemáticos e na simulação computacional das formas dos orbitais eletrônicos. O objetivo do material é oferecer uma compreensão aprofundada dos conceitos teóricos por trás da MQ e fornecer aos alunos as habilidades necessárias para resolver problemas quantitativos relacionados à estrutura atômica, por meio do estudo do átomo de hidrogênio.

## 2 REVISÃO DE LITERATURA

Com o intuito de averiguar o que tem sido produzido para melhorar o ensino de MQ no ensino superior, foi realizada uma pesquisa no Portal de Periódicos da CAPES, com as seguintes palavras-chave: *Mecânica Quântica; Licenciatura em Física; Ensino de Física; Orbitais Atômicos; Texto de Apoio; Material de apoio*. Os resultados encontrados apontaram quatro textos que se mostram de grande importância teórica para essa discussão. Os textos selecionados se apresentam no quadro abaixo:

Quadro 1 - Produções sobre o ensino de MQ

Título	Categoria	Autores e Data
Análise de uma proposta didática para o ensino de mecânica quântica, por meio de contextualização histórica, na formação de professores de Física.	Tese de Doutorado	Rafaelle da Silva Souza, 2020.
Uma revisão de literatura sobre os estudos relativos ao ensino da mecânica quântica introdutória.	Artigo	Ileana Maria Greca; Marco Antonio Moreira, 2001.
As controvérsias sobre a interpretação da mecânica quântica e a formação dos licenciados em Física.	Dissertação de Mestrado	Luiza Matos Mota, 2000.
Uma proposta didática para o ensino de mecânica quântica nas licenciaturas: a notação de Dirac.	Dissertação de Mestrado	Marina Valentim Barros, 2011.

Fonte: Autor, 2022.

Esses textos discutem a necessidade do desenvolvimento de materiais de apoio para expandir e incluir mais conteúdos avançados de MQ nas licenciaturas em Física. Partindo dessa análise, foi possível encontrar formas de justificar o desenvolvimento do material de apoio proposto nesta dissertação.

Analisando-os em busca de compatibilidade com a proposta desta dissertação, observa-se uma grande falta de materiais de ensino de MQ. Souza (2020) aponta que implementações didáticas referentes ao estudo da MQ são escassas no Brasil e a falta de padronização forma uma diversidade metodológica. Ressalta, também, o fato de que a existência de uma melhor compreensão da MQ, no ensino superior, pode ser um fator de desenvolvimento de ferramentas metodológicas de melhor qualidade e eficácia no ensino da MQ.

Nesse sentido, foi identificado que a maior dificuldade está em apresentar conceitos contra intuitivos como superposição, dualidade, não localidade e probabilidade, de maneira que tenha algum significado com os conhecimentos que o estudante já possui. Souza (2020) aponta, perante revisões de literatura, que outras dificuldades se apresentam no ensino-aprendizagem a respeito da MQ, como: a associação de novos conteúdos com experiências cotidianas; conhecimento muito superficial dos estudantes sobre MQ; o ensino de MQ sendo reservado somente para o final dos cursos de formação, e a falta de conteúdos essenciais como

superposição de estados e o problema da medida. Souza (2020) ainda apresenta alguns obstáculos na literatura do ensino de MQ, sendo elas: a linguagem difícil utilizada nos materiais disponíveis; a falta de capacitação do profissional ao aplicar o conteúdo, e a falta de tempo dos professores para realizarem a seleção dos assuntos.

Uma das metodologias empregadas na melhoria do ensino de MQ, que mais apareceram nesta análise, é a inserção do conteúdo por meio da História e Filosofia da Ciência que consiste em auxiliar na compreensão mais completa dos conteúdos, tomando como partida o contexto histórico, proporcionando uma visão mais ampla de como a ciência é construída e retirando a sensação de completude dos conteúdos abordados (SOUZA et al., 2021, v. 38, p. 914).

Uma análise realizada por Souza (2020), em estudos selecionados sobre o ensino, metodologia e aplicação da MQ no ensino superior, sendo eles nacionais e internacionais, apontou que, apesar do crescente aumento de estudos e produções de materiais sobre este tema, ainda, a maioria se direciona a bibliografias de consulta para professores, sendo precário o foco com o próprio estudante e suas dificuldades em relação à teoria. A seguir, apresenta-se um resumo da análise de três estudos realizada dentro da tese apresentada no quadro acima.

Um desses estudos buscou identificar quais eram as dificuldades dos estudantes ao estudar a MQ e analisar se isso tem relação ao método de ensino utilizado. Esse estudo, de título *Student understanding of quantum mechanics* (SINGH, 2001), foi realizado utilizando somente o livro didático, abordando alguns dos mesmos conteúdos presentes no produto dessa dissertação, como o formalismo básico da MQ, operadores, autoestados e valores esperados. Segundo Souza (2020), os obstáculos enfrentados pelos alunos são vários, dentre eles a dificuldade de compreender o formalismo matemático e os conceitos mencionados. Essas dificuldades se dão perante à análise do próprio estudo, pela falta de conhecimento conceitual, falha na interpretação, tanto do conteúdo apresentado quanto de conceitos memorizados.

Outro estudo também acrescenta a esse obstáculo observado no aprendizado de MQ com o título: *Interpretações da teoria quântica e as concepções dos estudantes do curso de Física* (MONTENEGRO; PESSOA JR, 2002). Esse estudo buscou identificar como os alunos interpretam os conceitos ao estudarem MQ. Com o uso de um livro didático, foi possível observar que os estudantes acabam se confundindo, na maioria dos conceitos, pelo uso excessivo de cálculos em uma ênfase conceitual e que o constante uso de interpretações pessoais põem em risco o aprendizado da teoria (SOUZA, 2020). Segundo Souza (2020),

A compreensão equivocada dos fenômenos quânticos não apenas cria problemas conceituais, como também pode obstruir o entendimento de como a interpretação padrão (Copenhague) implica que o próprio ato de observação realmente cria o estado em vez de meramente medi-lo (p. 57).

Construindo, em cima dessa problemática, outro estudo aponta as dificuldades enfrentadas pelos alunos durante o estudo da teoria quântica. De título: *Improving students understanding of quantum measurement. I. Investigation of difficulties* (ZHU; SINGH, 2012), o estudo apresenta, por meio do uso do livro didático e atividades propostas, que a grande dificuldade dos alunos está em realizar os cálculos de probabilidade e distinguir as diferenças entre os cálculos do valor possível e do valor esperado (SOUZA, 2020).

Nota-se que o foco dos estudos realizados nas licenciaturas é mais voltado à resolução de equações diferenciais, sem focar muito na discussão de conceitos essenciais, como estados quânticos, observáveis e a abordagem dos primeiros postulados da teoria. Porém,

[...] tais estudos são importantes para a compreensão do contexto analisado, pois nos estudos apontados, explicações dadas por estudantes acerca de conceitos da MQ marcam a falta de compreensão conceitual - o que confirma a aprendizagem superficial, seja por problema com terminologia, conceito de probabilidade, operadores, função de onda, conceito de incerteza, entre outros (SOUZA, 2020, p. 55).

Acrescentando ao problema das metodologias, Greca e Moreira (2001), identificaram, por meio de uma pesquisa em estudos sobre o ensino de MQ, que por mais que existam novos desenvolvimentos metodológicos, uma pequena quantidade apresenta referenciais teóricos. Foi observado, também, a dificuldade que os professores enfrentam ao abordar tais conteúdos em sala de aula. Isso demonstra a necessidade da elaboração de um material de apoio com uma metodologia que guie o estudante através dos conceitos abstratos presentes no conteúdo estudado. Nesse sentido, a forma como um material de apoio é constituído precisa levar em conta a realidade da sala de aula, focando mais nas dificuldades e fraquezas fenomenológica e matemáticas do que ser um material completo e de total exclusividade do professor.

Em sua pesquisa sobre as controvérsias da interpretação da MQ e a formação de licenciados em Física, Mota (2000, p. 134) mostra a “[...] ausência de discussões sobre qual a formação mais adequada, em Física, para o licenciado atualmente.” Demonstra, também, que as disciplinas apresentam muito mais ênfase na parte instrumentalista, deixando de lado a percepção fenomenológica das teorias, focando, principalmente, na resolução de problemas, sem uma atenção mais direcionada às dificuldades dos estudantes. Sendo assim, “[...] apenas com a formação em MQ oferecida pelos cursos de licenciatura, os licenciados não se sentem

capazes de trabalhar com estes conteúdos [...]” (MOTA, 2000, p. 134) posteriormente, em suas carreiras.

Um dos textos chamou atenção por se tratar de um material de apoio aos futuros professores de Física, baseado na aprendizagem significativa de David Ausubel, com o título: *Uma proposta didática para o ensino de mecânica quântica nas licenciaturas: a notação de Dirac*. Esse material se mostrou na mesma linha de elaboração que esta proposta de produto, explorando a fundo a teoria, com um objetivo claro na compreensão da notação de Dirac, apresentando exercícios e proporcionando todas as ferramentas matemáticas e teóricas necessárias para preparar o futuro docente na compreensão de fenômenos quânticos. Além deste material produzido, Barros (2011, p. 13) apresenta pontos importantes sobre o porquê do desenvolvimento de materiais de apoio para a formação de professores. Existe uma grande necessidade da formulação de um ensino de MQ, na licenciatura, que englobe os principais postulados facilitando o contato do licenciado com um assunto de essência para sua carreira. Destaca, também, que o ensino de Física deveria focar menos em aspectos e detalhes minuciosos clássicos e se focar mais na Física moderna.

Portanto, mudanças são necessárias no modo de preparação e ensino de Física moderna,

[...] para avanços no ensino, considera-se necessário tomar algumas decisões pedagógicas. No contexto formativo das licenciaturas em Física, deve-se ter em mente que uma abordagem primordialmente contextual-conceitual permitirá um primeiro contato com a teoria, sendo objetivo a primeira instância uma compreensão mínima da MQ (SOUZA, 2020, p. 75).

Nesse contexto, o presente trabalho toma forma, com o intuito de investigar a aplicação de um texto de apoio para auxiliar tanto o discente, na compreensão inicial da teoria quântica, quanto o docente, como uma alternativa metodológica de abordar o conteúdo, proporcionando um material de apoio em forma textual, tendo como embasamento teórico a Teoria da Transposição Didática (TTD) elaborada por Chevallard e teorias construtivistas, elaboradas por: Piaget, Vygotsky, Kelly e Ausubel. Estas teorias apresentam a importância de adaptar o conhecimento científico, com origem em artigos e produções acadêmicas, em conhecimento apto para ser trabalhado em sala de aula, ou seja, conhecimento didaticamente viável, além de enfatizar a importância da construção do conhecimento, com o próprio aluno como construtor do seu próprio conhecimento.

Portanto, perante a análise dos estudos, fica clara a necessidade do desenvolvimento de um material que contemple o conteúdo de maneira mais didática, tentando diminuir as dificuldades apresentadas pelos autores aqui citados. Nesse sentido, organizamos nosso texto

de apoio de forma que apresente uma breve recapitulação histórica do desenvolvimento da teoria quântica, focando nos seus aspectos principais e introduzindo o formalismo matemático de forma gradativa. Seguindo essa recapitulação, dá-se início ao tema central, trazendo, sempre que necessário, revisões matemáticas ao longo do texto, de forma a fornecer os subsídios matemáticos necessários para a compreensão do conteúdo. Abordou-se a teoria de forma detalhada para facilitar a compreensão do leitor, na qual aspectos fundamentais são explorados, assim como o seu rigor matemático, procurando não pular nenhum passo em nenhuma das várias situações calculadas. O ponto central está na aplicação da Equação de Schrödinger ao átomo de hidrogênio, promovendo a interpretação e visualização dos orbitais atômicos, por meio de cálculos de distribuições probabilísticas aplicados em uma simulação interativa realizada por Fernández e Santos (2012), denominada *Plots of Quantum Probability Density Functions in the Hydrogen Atom*.

A base do material de apoio proposto se dá por meio do estudo e integração de vários textos e artigos e, principalmente, de dois livros didáticos no ramo da Física e Química Quântica, sendo eles: *Principles of Quantum Chemistry* de David V. George; e *Introduction to Quantum Mechanics* de Peter J. Griffiths, proporcionando a interdisciplinaridade necessária para expandir o cerco de conhecimento do estudante. Alvez et al. (2004) dizem que “a ciência não pretende perder de vista a disciplinaridade, mas vislumbra a possibilidade de um diálogo interdisciplinar”, dessa maneira fazendo com que os saberes específicos de cada área se completem e agreguem ainda mais ao avanço cognitivo do estudante. Sendo assim, esta proposta de material de apoio se apresenta com formalismos matemáticos julgados de suma importância na relação entre a parte teórica do fenômeno e a parte teórica matemática.

A elaboração do produto busca dar sentido matemático e teórico para a MQ, proporcionando uma visão mais ampla e aprofundada acerca desse conteúdo. É importante que o futuro docente tenha noção de ideias mais complexas para que possa raciocinar com mais fluidez sobre os conteúdos de forma contextualizada.

### **3 REFERENCIAL TEÓRICO**

A aplicação de novos conhecimentos, em sala de aula, deve ser guiada por estudos e teorias de ensino e aprendizagem para que se tenha um melhor aproveitamento do que está sendo ensinado e, também, para que o aluno consiga construir relações relevantes sobre o conteúdo. Da mesma maneira que o processo de criação de um material didático necessita de um caminho para ser trilhado, para que resulte em um material com potencial pedagógico. Neste trabalho, o enfoque da compreensão de como o indivíduo aprende tem um olhar para a construção cognitiva no processo de aprendizagem do indivíduo e como os objetos do universo são interpretados por ele.

Partindo da concepção de que o conhecimento humano é construído, é necessário refletir sobre como ocorre essa construção, a partir de uma discussão e análise sobre algumas teorias construtivistas que nos ajudam a fundamentar o conhecimento agregado e aplicado no produto educacional desta dissertação. Com o intuito de apresentar uma visão geral sobre o construtivismo, vamos abordar quatro teorias construtivistas que entendemos darem a base para o desenvolvimento e aplicação do produto educacional: a teoria de Piaget, a teoria de Vygotsky, a teoria de Kelly e a teoria de Ausubel.

#### **3.1 Jean Piaget**

Foi um psicólogo, biólogo e filósofo nascido na Suíça, em 1896. Após o seu doutorado, se dedicou à psicologia, em busca do conhecimento sobre o comportamento humano, conhecido principalmente por suas teorias sobre o desenvolvimento infantil. No entanto, suas contribuições não se limitam apenas à pesquisa sobre crianças, mas também oferecem insights valiosos para a educação de adultos. Ele se preocupava com os processos mentais do indivíduo. Acreditava que o conhecimento não era dado à ele mas, sim, construído através das atividades desenvolvidas por ele. Sua abordagem construtivista e foco na aprendizagem significativa fornecem fundamentos sólidos para a criação de ambientes de aprendizagem eficazes no ensino superior.

O enfoque de sua pesquisa foi em epistemologia genética, pesquisa que resultou em uma teoria cognitiva interacionista (MENDES, 2011). Segundo Piaget (1971):

A epistemologia genética tenta explicar o conhecimento, em particular o conhecimento científico, baseado em sua história, sua sociogênese, e especialmente as origens psicológicas das noções e operações das quais se baseia. Essas noções e operações são retiradas em grande parte do senso comum, para que suas origens possam iluminar a sua significância como conhecimento de um tipo de nível maior (tradução livre, p. 1).

Piaget (1971) argumenta que o processo de construção do conhecimento, do desenvolvimento cognitivo, se dá por meio de um equilíbrio e desequilíbrio. Esse equilíbrio está relacionado às ações auto-reguladoras que o indivíduo passa no seu desenvolvimento cognitivo, é um processo de balanço e harmonia entre dois elementos. Sendo assim, o desenvolvimento cognitivo ocorre no ato de equilibrar o que está em desarmonia, quando ocorre um esforço por parte do indivíduo no ato de relacionar e harmonizar dois elementos que estavam previamente desregulados. A partir da reconciliação das mudanças que ocorrem no desenvolvimento cognitivo, por meio do equilíbrio e desequilíbrio dos elementos, Piaget nomeia esse processo de equibração majorante (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 13).

A teoria de Piaget oferece grandes recursos sobre como os indivíduos desenvolvem o raciocínio lógico e matemático. Por isso, seu trabalho tem impacto direto na educação, colocando o aluno como sujeito principal de seu próprio desenvolvimento cognitivo, ou seja, o aprendizado depende de o estudante por a *mão na massa*, na interação com objetos concretos e conhecimentos abstratos, ao invés da transmissão e recepção robótica de informações. O desenvolvimento do indivíduo é entendido como um crescimento cada vez mais complexo da sistematização e mobilidade da estrutura cognitiva, ou seja, aprender é um processo de adaptação ao estímulo do ambiente, dependendo das várias assimilações, acomodações e equibrações do conhecimento (ROUSE, 2021).

No contexto do ensino superior, isso pode ser alcançado por meio de estratégias como discussões em grupo, projetos colaborativos e atividades práticas. Ao envolver os adultos em situações reais de aprendizagem, eles são capazes de conectar conceitos abstratos com suas próprias experiências de vida e conhecimentos anteriores, tornando o aprendizado mais significativo. O papel do educador é facilitar o processo, fornecendo orientação e suporte, estimulando a reflexão e incentivando os adultos a questionarem e explorarem diferentes perspectivas. Dessa forma, os adultos são encorajados a assumir um papel ativo na construção de seu próprio conhecimento, tornando-se aprendizes autônomos e críticos.

O ato de aprender depende do desconforto, do desconhecido para que a mente se transforme e se adapte ao novo conhecimento, sendo esse desconforto aplicado de forma gradual para que o aluno não fique sobrecarregado e desista. Essa adaptação, reestruturação,

que Piaget chama de acomodação, é o que impulsiona o processo de assimilação de novos conhecimentos, até atingir o ponto de equilíbrio, onde o desconhecido é, agora, internalizado. Esse é o processo de equilíbrio majorante, sendo ele responsável pela construção de todo o conhecimento humano, através da interação com o ambiente em que está envolto (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). Podemos resumir a importância dessa teoria nas palavras de Moreira e Ostermann (1999), os quais argumentam que:

Ensinar significa, pois, provocar o desequilíbrio no organismo (mente) do aluno para que ele, procurando o reequilíbrio (equilíbrio majorante) se reestruture cognitivamente e aprenda. O mecanismo de aprender de uma pessoa é a sua capacidade de reestruturar-se mentalmente buscando um novo equilíbrio (novos esquemas de assimilação para adaptar-se à nova situação). O ensino deve ativar esse mecanismo (p. 60).

O processo de aprendizagem deve, portanto, ser individual, cujo desenvolvimento é medido através de conquistas pessoais ao invés de sócio-culturais. Além disso, o processo de descoberta tem um papel fundamental na construção do conhecimento, no qual “[...] os estudantes são convidados a explorar atividades e experiências cuidadosamente planejadas que são pensadas para que eles cheguem a conclusões e idéias chave [do conteúdo]” (ROUSE, 2021). Esses materiais podem ser, por exemplo, exercícios guiados, fazendo com que os alunos consigam assimilar o conteúdo aprendido através da prática e da descoberta pessoal do conhecimento.

Um outro ponto bastante pertinente da teoria de Piaget é o processo clínico aplicado em suas pesquisas, podendo ser de grande valia na hora de avaliar os alunos e retirar informações importantes sobre o seu aprendizado e desenvolvimento. Esse processo contribui bastante, também, na área de pesquisa educacional, no qual esse olhar clínico “[...] pode ser usado em qualquer situação na qual o objetivo é a exploração dos processos de pensamento [do indivíduo]” (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 19).

### **3.2 Lev Vigotsky**

Vygotsky foi um psicólogo russo que, dentre as suas pesquisas, focou na área do desenvolvimento da aprendizagem e como as interações sociais moldam o indivíduo. Diferentemente de Piaget que dizia que o desenvolvimento cognitivo se dá em estágios, Vygotsky, rejeita essa ideia e propõe que o desenvolvimento se dá independente de qualquer estágio mas, sim, ocorre a partir das interações sociais (FRAZÃO, 2017).

A teoria sócio-interativa de Vygotsky nos diz que a criança nasce com quatro funções mentais elementares: atenção, sensação, percepção e memória. A partir desses quatro elementos, a nossa interação com a cultura e a comunidade é que moldam o nosso desenvolvimento cognitivo, possibilitando a evolução das relações mentais do indivíduo. Esse processo de construção mental ocorre, idealmente, na chamada Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP). Segundo Vygotsky (1991, p. 56-57) o aprendizado da criança se dá antes mesmo de começar a frequentar a escola. Ele propõe que há uma grande diferença entre o conhecimento escolar e o conhecimento pré-escolar. O conhecimento escolar difere do pré-escolar por ser um ambiente voltado à assimilação de fundamentos do conhecimento científico, um aprendizado sistematizado, enquanto o pré-escolar não se define como um aprendizado sistematizado. Traz, também, o fato de que “qualquer situação de aprendizado com a qual a criança se defronta na escola tem sempre uma história prévia” (VYGOTSKY, 1991, p. 56). Isso significa que a criança embarca na vida acadêmica já tendo pré conceitos formados no período pré-escolar como, por exemplo, ela já fazia contas matemáticas rudimentares, contando seus brinquedos por exemplo e, na escola, ela aplica esse pré conhecimento de uma maneira mais científica, com foco na aprendizagem. Portanto, podemos definir a ZDP como a distância que existe entre o que a criança consegue aprender e se desenvolver de forma autônoma e o que ela pode realizar com a assistência de um professor ou familiar, passando para um nível mais avançado de desenvolvimento. Esse é o espaço onde ocorre o desenvolvimento cognitivo, onde há um confronto entre as interações sociais onde a criança ou os indivíduos “[...] se encontrem envolvidos com problemas ou situações que remetam à confrontação de pontos de vista diferenciados” (ZANELLA, 1994).

Todo o processo de desenvolvimento cognitivo do indivíduo, durante a aprendizagem, possui um elo intermediário, o uso de signos e instrumentos, introduzidos pelo próprio indivíduo que busca dar sentido no estabelecimento do elo entre estímulo e resposta. Os signos nada mais são do que a linguagem escrita, falada, os numerais, etc., criados pelo próprio homem a fim de dar significado entre as interações homem-ambiente (VYGOTSKY, 1991, p. 11). Segundo Moreira e Ostermann (2005):

O signo possui a característica de ação reversa (i.e, age sobre o indivíduo e não sobre o ambiente), conferindo à operação psicológica formas qualitativamente novas e superiores, permitindo aos seres humanos, com auxílio de signos, controlar o seu próprio comportamento. O uso de signos conduz os seres humanos a uma estrutura específica de comportamento que se destaca do desenvolvimento biológico e cria novas formas de processos psicológicos enraizados na cultura (p. 25).

Nesse sentido, os signos são fundamentais no desenvolvimento e avanço cognitivo do indivíduo e permitem que haja interações sociais que moldam o seu comportamento. Através deles, ocorre a mediação cognitiva, com a ajuda de outro indivíduo mais capaz, como mencionado na ZDP. Essa mediação cognitiva é uma das responsáveis pelo desenvolvimento das funções psicológicas superiores, sendo elas processos mentais não inatos, como a imaginação, planejamento, comparação e memória.

Em suas pesquisas, Vygotsky procurou compreender como o uso de instrumentos e signos agem no desenvolvimento sócio-cultural do indivíduo. A chamada função psicológica superior se refere à combinação entre instrumento e signo na atividade psicológica (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). Essa relação entre signo e instrumento se dá através da atividade. O instrumento é uma função orientada externamente sobre o objeto da atividade, proporcionando interação e modificação, conduzindo à influência humana sobre ele. Já, o signo é uma função interna, não havendo a interação e modificação do objeto. Ela constitui-se por uma atividade interna, a qual o próprio indivíduo controla (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

A internalização, a reconstrução interna de um evento externo, das funções superiores se dá a partir de várias transformações que, segundo Moreira e Ostermann (1999), se caracterizam por:

- Uma operação que inicialmente representa uma atividade externa é reconstruída e começa a ocorrer internamente;
- Um processo interpessoal é transformado num processo intrapessoal. Todas as funções no desenvolvimento da criança aparecem duas vezes: primeiro, no nível social, e, depois, no nível individual; primeiro, entre pessoas (interpsicológica) e, depois, no interior da criança (intrapicológica). Todas as funções superiores originam-se das relações reais entre indivíduos humanos;
- A transformação de um processo interpessoal em processo intrapessoal é o resultado de uma longa série de eventos ocorridos durante o desenvolvimento (p. 27).

Vygotsky estabeleceu sua teoria em torno das interações que o indivíduo tem com o ambiente e a sociedade, onde ele próprio é participante ativo de sua existência, ao contrário do behaviorismo. Ele e Piaget compartilham da mesma ideia de que a atividade é a geradora do desenvolvimento cognitivo, sendo Piaget voltado para estágios específicos que o indivíduo passa, e Vygotsky sobre a sua interação socio-cultural. Vygotsky enfatiza que essas interações ocorrem com o uso conjunto de instrumentos de linguagem ou criados pelo próprio indivíduo e signo, sendo eles de suma importância para a adaptação do ser humano com o ambiente (MOREIRA ; OSTERMANN, 1999).

Nesse sentido, essas ideias podem muito bem serem aplicadas em sala de aula. Vygotsky viu que os indivíduos desenvolvem novas competências cognitivas, como o pensamento lógico matemático, resolução de problemas, processos mentais avançados, primeiramente, pela interação social do que pela descoberta individual. “Por exemplo, um professor pode ajudar o aluno na resolução de um problema matemático trabalhando através de um conjunto de perguntas para identificar o que ele sabe e o que ainda precisa aprender” (ROUSE, 2021). Vygotsky (et al, 1988, apud. MOREIRA; OSTERMANN, 1999) confere a ideia de que aprendizagem e desenvolvimento não são dois fatores que andam juntos. Para ele:

[...] o processo de desenvolvimento é independente do processo de aprendizagem. O aprendizado é considerado um processo puramente externo que não está envolvido ativamente no desenvolvimento e que se utiliza dos avanços do desenvolvimento (segue o desenvolvimento) ao invés de modificá-lo (p. 27).

A teoria de Vygotsky pode ser empregada em muitos momentos por qualquer profissional na área da educação, podendo se usar da cultura, comunidade e ambiente em que o aluno se encontra e, a partir disso, desenvolver um ambiente de ensino e aprendizagem próprio para ele. Há, também, a prática de ensino em pares, onde os estudantes são selecionados e cuidadosamente divididos em pares, onde o professor orienta o par, gerando um avanço na aprendizagem maior do que se as discussões e o conhecimento viessem somente do próprio professor (ROUSE, 2021). Moreira e Ostermann ( 1999), discursam, portanto, que:

Sem a interação social, ou sem intercâmbio de significado, dentro da zona de desenvolvimento proximal do aprendiz, não há ensino, não há aprendizagem e não há desenvolvimento cognitivo. Interação e intercâmbio implicam, necessariamente, que todos os envolvidos no processo ensino-aprendizagem devam falar e tenham oportunidade de falar(p.61).

Podemos concluir que a comunidade e o ambiente em que o aluno se encontra pode ser relacionado ao próprio âmbito universitário, ou até mesmo o seu caminho, seus ideais para chegar até aquele ponto. Portanto, saber usar aspectos dessa comunidade acadêmica, onde o aluno já se sente familiarizado, em favor do desenvolvimento de atividades e materiais de ensino, pode muito bem corroborar para o avanço do desenvolvimento das estruturas cognitivas relacionadas à aprendizagem, facilitando e internalizando, de maneira efetiva, o conhecimento, através das interações sociais e o uso de signos (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

### 3.3 George Kelly

Kelly nasceu em 1905, nos Estados Unidos. Foi um pioneiro na área da psicologia cognitiva e contribuiu com a sua teoria da psicologia dos construtos pessoais, formada por um postulado geral e onze corolários, em meados da década de 1950. A sua teoria sugere que cada pessoa possui sua própria estrutura mental da qual ela interpreta o mundo. Cada pessoa desenvolve seus próprios construtos ou esquemas que usam para interpretar informações e experiências (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p.33).

Diferentemente de Vygotsky, que acompanhava e aplicava suas teorias experimentalmente, avaliando os processos cognitivos em situações controladas e observando o comportamento dos indivíduos, Kelly tem uma abordagem mais clínica, como uma forma de psicoterapia com foco na personalidade do indivíduo.

Essa teoria tem uma posição filosófica chamada alternativismo construtivo. Segundo Kelly, a teoria proposta “[...] não é nem uma filosofia convencional nem uma psicologia convencional. Como uma filosofia, está fundamentada na observação psicológica do ser humano. Como uma psicologia, está preocupada com as perspectivas filosóficas de cada ser humano individual” ((1991, p. 12).

Um dos fundamentos básicos da teoria é a afirmação de que o mundo é real. O universo existe de maneira integrada, estando em constante transformação. Porém, cada pessoa o percebe de uma maneira diferente, podendo ser capaz de mudar seu ponto de vista, ou seja, assume-se que todas as nossas interpretações atuais sobre o universo estão sujeitas à revisão ou substituição (KELLY, 1991) - Isso é o alternativismo construtivo. A essas interpretações de mundo, Kelly dá o nome de construtos pessoais, que reflete a unicidade de cada pessoa, levando em conta os significados pessoais de cada um.

Toda vez que resolvemos engajar em qualquer atividade como, por exemplo, onde sair para jantar, formulamos questionamentos de em que lugar e o que comer, hipóteses de se a comida será boa e o lugar também e, a partir dessas hipóteses, nós testamos elas ao nos depararmos com a situação e, assim, tiramos conclusões sobre todo esse processo que foi envolvido pela tarefa de sair para jantar. Esse processo é muito parecido com o pensamento científico.

Kelly percebeu que, não só ele, mas todos os seus pacientes agiam dessa forma. Para ele, assim como um cientista, o ser humano tem, em si, a busca por controlar e prever eventos (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). As experiências vivenciadas em diversos eventos da vida

do ser humano criam diferentes interpretações e hipóteses para cada indivíduo, assim como as diferentes teorias e pontos de vista dos cientistas (KELLY, 1991).

Vimos que os construtos são criados pelas pessoas a partir de sua interação com o universo e suas transformações. Kelly (1991) aprofunda essa ideia, caracterizando os construtos como

[...] uma maneira pela qual algumas coisas são interpretadas como sendo semelhantes e, de mesma maneira, diferentes de outras coisas. Partimos da lógica convencional assumindo que um construto é tão pertinente para algumas das coisas que são vistas como diferentes quanto para as coisas que são vistas como semelhantes. Por exemplo, suponha que uma pessoa crie um construto em termos de branco vs. preto. Seu campo consiste em uma série de coisas. Algumas delas, como suas camisas, seus tênis, sua casa, o papel com o qual escreve, a pele do seu vizinho, e assim por diante, são suscetíveis ao construto do branco vs. preto. O construto pode ser mal aplicado; ele pode chamar sua camisa de branco enquanto sua esposa vê como preta. Pode ser inapropriado; meramente interpretar a pele de seu vizinho como preta pode não ser uma maneira muito sábia de olhar para ele. Mas, em suma, o construto é aplicável àquelas coisas que para ele podem ser pretas ou brancas. No entanto, há outras coisas na vida da pessoa. Há a hora do dia, seu carinho pelos seus filhos, a distância de seu escritório, e assim por diante, para qual o preto vs. branco é patentemente irrelevante (tradução livre, p. 74).

Os processos psicológicos de um indivíduo são guiados pelos seus construtos, sendo eles de ação antecipatória, ou seja, o indivíduo usa seus construtos para prever o futuro, fazendo com que se tenha uma ideia das suas ações. Dessa maneira, recebemos informações de eventos externos, do mundo, que passam por uma série de filtros, na sua maioria de maneira inconsciente, automática, como nossos valores, atitudes, estratégias, crenças, etc. A partir dessa etapa, interpretamos a realidade internamente. Cada pessoa interpreta de uma maneira, criando, assim, os construtos que são ideográficos, estando eles relacionados ao nosso comportamento e estado emocional que, de mesma maneira, estão relacionados às nossas experiências da vida (WARRILOW, 2022).

Para explicar como funcionam os construtos pessoais, Kelly propõe onze corolários: corolário da construção; corolário da individualidade; corolário da organização; corolário da dicotomia; corolário da escolha; corolário da abrangência; corolário da experiência; corolário da modulação; corolário da fragmentação; corolário da comunalidade, e corolário da sociabilidade. Os corolários são uma série de princípios que compõem a teoria pessoal construtivista proposta por ele. Esses corolários descrevem como as pessoas criam suas próprias realidades subjetivas com base em suas interpretações únicas dos estímulos que recebem do mundo. Eles afirmam que as pessoas são seres ativos e criativos, que estão sempre em busca de significado e entendimento em suas experiências. Os corolários também enfatizam a

importância da expectativa, da antecipação e da interpretação subjetiva na formação da percepção e do comportamento humano. Em resumo, os corolários sugerem que as pessoas constroem suas próprias realidades subjetivas com base em suas experiências passadas e expectativas futuras. Esses corolários destacam a importância de considerar a perspectiva única de cada indivíduo na compreensão do comportamento humano. Eles, também, oferecem uma abordagem para a compreensão da natureza ativa e criativa da mente humana e como ela busca dar sentido e significado às experiências. Por exemplo, o corolário da individualidade leva em conta elementos idiossincráticos do sujeito, no geral, formados por suas experiências individuais. Já, o corolário da sociabilidade está relacionado, no ambiente da sala de aula, pela interação entre indivíduo, professor e os colegas de classe por exemplo.

As ideias propostas por Kelly, sobre os construtos, podem ser observadas em sala de aula. Da mesma maneira que criamos construtos, o conhecimento é, também, uma construção humana, ou seja, se nossos construtos podem sofrer mudanças. É válido considerar que o conhecimento não deve ser dito como definitivo e, portanto, não devemos ensiná-lo como tal (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Dessa forma, o indivíduo também cria construtos sobre os conteúdos que estão sendo estudados, testando-os a todo momento, em diálogos, pesquisas, resolução de problemas, melhorando-os e os refinando. Portanto, quando se pensa em maneiras de utilizar essas ideias em prol do aprendizado do estudante, é importante levar em conta as suas experiências passadas, o modo como seu conhecimento foi construído e quais suas concepções (construtos) desenvolvidos em determinada área que está sendo estudada, e usá-las para promover um aprendizado mais rico, estimulando a ligação e testagem de suas ideias, conceitos e proposições já desenvolvidas em seu sistema de construção, sendo por meio de diálogos, problemas lógicos ou materiais que instiguem esses processos e ajudem na assimilação do assunto (MAYES, 1999; MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

No momento em que estudante e professor estão juntos no processo de aprendizado/ensino eles estão “[...] idealmente, criando, mutualmente, um micro-mundo de discurso” (MAYES, 1999, p.31, tradução livre), onde o objetivo é a modificação/criação, de conceitos à presença de uma nova informação. Essa interação aluno/professor entra no corolário da sociabilidade, onde o indivíduo só poderá expandir os conceitos e ideias sobre e de outro indivíduo a partir do momento em que ocorra uma interação social entre as duas partes. Isso pode promover o avanço do aprendizado, unindo os construtos individuais de cada um e testando-os, modificando-os na presença de construtos externos e visões diferentes (MAYES, 1999).

### 3.4 David Ausubel

Ausubel nasceu em 1918, em Nova Iorque. Ele estudou na Universidade da Pensilvânia, se graduando em Psicologia. Suas contribuições foram muito importantes para o ramo da psicologia cognitiva e da educação de forma geral. Ele postulou, influenciado por Piaget, que o indivíduo adquire o conhecimento através da exposição direta, ao invés da descoberta, ou seja, o caminho para o conhecimento é o raciocínio dedutivo, apresentado através da sua teoria da aprendizagem significativa (TAS) (MICHALAK, 2019).

Ausubel buscou entender como os processos da mente humana ocorrem, como se organizam, assimilam e retém o conhecimento e definiu que esses processos têm uma organização que respeita uma hierarquia conceitual, na qual “[...] elementos mais específicos de conhecimento são ligados (e assimilados) a conceitos, ideias, proposições mais gerais e inclusivos” (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 47) . Ele defende que o que mais importa no aprendizado de uma pessoa é o que ela já sabe, os conhecimentos prévios e, a partir disso, o profissional da educação deve organizar os conteúdos para serem apresentados aos alunos. O conhecimento prévio é nada mais do que a estrutura mental cognitiva do indivíduo, a sua organização, ideias e, propriamente, seus conhecimentos e como ele interliga todos esses aspectos (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

A ideia central da TAS é a relação entre o conhecimento velho e o novo e como essa interação gera um aprendizado significativo, dando novos significados aos conhecimentos velhos ao interpretar os novos conhecimentos em contraste com o já conhecido. Dessa maneira, para Ausubel, a aprendizagem só será significativa se o novo conhecimento se relacionar com o antigo de forma não arbitrária e não literal (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Muito comumente, em sala de aula, é utilizada uma maneira clássica de ensino onde a exposição e memorização são chave para passar em testes e resolver problemas prontos. Esse tipo de aprendizagem, onde não há uma retenção prolongada do conhecimento, sendo ele tratado de forma superficial, sem ser internalizado, é chamado por Ausubel de aprendizagem mecânica. Nesse sentido, essa concepção não prepara o indivíduo para enfrentar problemas que se diferenciam dos encontrados em sala de aula como “receitas de bolo”, problemas prontos e de fácil resolução, gerando dificuldades para aplicar o conteúdo em diferentes perspectivas e ambientes que o aluno possa encontrar (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Por isso, a TAS tem papel fundamental na inserção de um tipo de aprendizadoduradouro e com uma base firme para construir o conhecimento. A ideia central da teoria é a relação entre a nova informação com um “[...] aspecto relevante da estrutura cognitiva do indivíduo”

(MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 46), sendo esse aspecto relevante chamado de *subsunçor*.

A aprendizagem significativa ocorre quando a nova informação é incorporada às estruturas cognitivas relacionando o conhecimento prévio do aluno com uma idéia âncora, o subsunçor. Segundo Moreira e Ostermann (1999),

[...] novas idéias, conceitos, proposições podem ser aprendidos significativamente (e retidos), na medida em que novas idéias, conceitos, proposições, relevantes e inclusivos estejam, adequadamente claros e disponíveis, na estrutura cognitiva do indivíduo e funcionem, dessa forma, como ponto de ancoragem às primeiras (p. 46).

No entanto, o processo de interação entre a nova informação e o conhecimento prévio gera mudanças nesse conhecimento já existente. O fato de haver uma relação entre os dois pode engrandecer, reforçar, ou até mesmo redirecionar o conceito já entendido através da inserção dessa nova informação. Ou seja, os subsunçores são maleáveis, podendo se modificar com a ancoragem do novo conhecimento (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). Moreira (2012) argumenta, também, sobre essa maleabilidade do subsunçor, no sentido de que: “a clareza, a estabilidade cognitiva, a abrangência, a diferenciação de um subsunçor variam ao longo do tempo, ou melhor, das aprendizagens significativas do sujeito. Trata-se de um conhecimento dinâmico, não estático, que pode evoluir e, inclusive, involuir” (p. 4).

É claro que, mesmo havendo a eventual aprendizagem mecânica, ela não é de todo mal, ela não é o oposto da aprendizagem significativa, pode ser considerada como uma parte que vai ocorrer ocasionalmente. Mas, a aprendizagem mecânica não é totalmente vazia, ela apresenta certo grau de relacionamento na estrutura cognitiva, só não ao ponto de ser significativo, de tornar o aprendizado algo que foi entendido e não memorizado. Podemos dizer, também, que, às vezes, a aprendizagem mecânica se faz necessária para apresentar algo inteiramente novo, onde o indivíduo não possui a menor ideia e não tem conceitos prévios, aí sim essa aprendizagem desenvolve um pequeno papel em apresentar conceitos que, posteriormente, podem ser utilizados para ancorar novas informações, moldando esses subsunçores através dessas interações, produzindo um aprendizado significativo (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Existem dois pontos que podem fazer a aprendizagem ser significativa: a estrutura cognitiva do aluno que está estudando e o material que ele está estudando. Se ambos trabalharem em harmonia, irá ocorrer a aprendizagem significativa.

Em se tratando do material, se ele não foi criado para proporcionar situações que contrastem com o conhecimento prévio do aluno, ele não é potencialmente significativo. Agora,

caso o material seja escrito de tal forma que relacione a nova informação, levando em conta o que o aluno já conhece, tendo um significado lógico, sendo intuitivo e fácil de compreender, dentro do que é proposto, ou seja, ser não-arbitrário e não-aleatório em si, poderá ser classificado como um material potencialmente significativo. Esse tipo de material instiga o aluno a usar estratégias de relação e construção cognitiva que o levam a aprender significativamente o conteúdo (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Agora, mesmo o material sendo potencialmente significativo, isso não é garantia de que o aprendizado do próprio aluno seja significativo. Se o aluno não demonstra interesse, se está interessado apenas em decorar e não se esforça para tentar encontrar conceitos ancoradouros para que essa nova informação tome um caminho mais efetivo e, assim, seja melhor entendida, não há material, por melhor que seja, que irá tornar o aprendizado desse aluno significativo. Por isso, a relação de harmonia entre o objeto de estudo e o sujeito é tão importante para a TAS (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Para que ocorra a aprendizagem significativa, se faz necessária a existência de conceitos prévios para servirem de âncora a novos conceitos, por isso, deve existir uma etapa no desenvolvimento humano onde os primeiros subsunçores se formam. Isso se dá na infância, onde a constante exposição a eventos cotidianos forma conceitos primários na estrutura cognitiva da criança (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Esses conceitos são formulados, também, pela aprendizagem por descoberta e com um apoio empírico-concreto, somente auxiliando no desenvolvimento desses conceitos, usando o que já foi concebido, primordialmente, por ela mesma. Após essa etapa, a criança cresce e passa a frequentar as aulas e já possui uma quantidade suficiente de conhecimentos prévios para que ocorra a aprendizagem significativa por recepção, ou seja, “[...] a diferenciação desses conceitos e a aquisição de outros novos ocorre, principalmente, através da assimilação de conceitos [...]” (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 50).

Porém, agora pensemos em uma situação onde o indivíduo já está desenvolvido e, conseqüentemente, capaz de compreender e assimilar “[...] conceitos e proposições apresentados verbalmente, na ausência de apoio empírico-concreto [...]” (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 51), mas, no entanto, não possui conhecimentos prévios para poder fazer a ancoragem definitiva, aprender significativamente. Nesse sentido, uma maneira é, como falamos no parágrafo anterior, se utilizar da aprendizagem mecânica até que, em algum momento, se formem subsunçores simples que, a partir daí, podem crescer e se fortalecer enquanto o aprendizado significativo começa a emergir naturalmente (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Ausubel, no entanto, traz uma proposta para preencher a lacuna entre o que o aluno já sabe e o que ele precisa saber para que ocorra a criação de subsunçores: os organizadores prévios, que servirão de ancoradouro para o novo conhecimento e, então, leve o aluno a desenvolver conceitos subsunçores, que resultará na facilitação da aprendizagem. Os organizadores prévios são materiais apresentados aos alunos antes do conteúdo a ser estudado, mas não na forma de um sumário ou resumo, mas algo mais geral e aproximado à realidade e ao conhecimento que o aluno possui e que possa instigar a formação de conceitos que, posteriormente, servirão para a assimilação de novas informações em subsunçores (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). Esses materiais “[...] podem ser um enunciado, uma pergunta, uma situação-problema, uma demonstração, um filme, [...] as possibilidades são muitas, mas a condição é que preceda a apresentação do material de aprendizagem e que seja mais abrangente, mais geral e inclusivo do que este” (MOREIRA, 2012, p. 11).

Na aprendizagem subordinada, o novo conhecimento se torna subordinado por ideias mais gerais e inclusivas já existentes na estrutura cognitiva. Essa categoria ainda pode ser subdividida em outras duas: subordinada derivativa e subordinada correlativa. Podemos dizer que a aprendizagem é derivativa quando o material de aprendizagem, simplesmente, exemplifica ou reforça uma ideia já existente na estrutura cognitiva do estudante. Quando se trata de uma extensão, elaboração ou clarificação de um limite de proposições ou conceitos já existentes na estrutura cognitiva, a aprendizagem é correlativa.

A aprendizagem superordenada ocorre quando o novo conhecimento se mostra mais geral do que os conhecimentos subsunçores com os quais ele se relaciona no processo de aprendizagem. Nessa categoria, o novo conhecimento se conecta com uma ampla gama de conteúdos genericamente pertinentes presentes na estrutura cognitiva, podendo ser incluído nessa estrutura.

Esse tipo de aprendizagem ocorre, principalmente, na abstração e no raciocínio indutivo, na síntese de ideias ou na própria caracterização e organização do material potencialmente significativo, de modo a induzir-se um tipo de raciocínio (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

A aprendizagem combinatória ocorre quando um novo conhecimento não pode se relacionar com uma proposição ou conceito específico mas, sim, com uma gama mais ampla de conteúdos, em geral, relevantes na estrutura cognitiva do indivíduo (MOREIRA; OSTERMANN, 1999). Nesse caso, a aprendizagem não é nem subordinada nem superordenada, sem se relacionar com um subsunçor específico mas, sim, com uma base cognitiva subsunçora (MOREIRA, 2012). Em outras palavras, Moreira (2012) diz que a

Aprendizagem combinatória é, então, uma forma de aprendizagem significativa em que a atribuição de significados a um novo conhecimento implica interação com vários outros conhecimentos já existentes na estrutura cognitiva, mas não é nem mais inclusiva nem mais específica do que os conhecimentos originais. Tem alguns atributos criterioso, alguns significados comuns a eles, mas não os subordina nem superordena (p. 16).

Podemos ver, assim, que muito frequentemente um conhecimento potencialmente significativo é apresentado mas pode não haver uma ligação direta com um subsunçor, sendo necessária a relação com um conteúdo mais amplo da estrutura cognitiva. Esse processo dá origem à aprendizagem combinatória.

De acordo com a teoria de Ausubel, o desenvolvimento de conceitos pode ser facilitado ao se introduzir elementos mais gerais e inclusivos em um primeiro momento. Posteriormente, ele é progressivamente diferenciado, no que diz respeito a seus detalhes e especificidades. A esse princípio, Ausubel dá o nome de diferenciação progressiva. Essa sequência dos conteúdos deve ser levada em conta, de acordo com Ausubel, na organização dos conteúdos de uma disciplina. Ou seja, inicialmente, é necessário que se identifiquem quais são as ideias mais gerais e inclusivas de uma determinada disciplina, ou parte dessa disciplina. Identificados esses elementos, é necessário que estes sejam apresentados no início, para que, posteriormente, possam ser, progressivamente, diferenciados.

Outro aspecto referente à aprendizagem significativa está no fato de que, muitas vezes, a programação de um conteúdo deve buscar explorar também as relações existentes entre conceitos e proposições, no sentido de identificar diferenças, similaridades e/ou inconsistências, reconciliando-as no processo de aprendizagem. A esse processo de recombinação de elementos, na estrutura cognitiva, Ausubel dá o nome de reconciliação integrativa (MOREIRA; MASINI, 2001). Moreira (2012) traz um exemplo sobre o subsunçor força e como o processo integrador pode ocorrer através dele, durante o decorrer da carreira acadêmica, em Física, do aluno

[...] se o aluno continuar estudando Física, acabará incorporando ao subsunçor força, os significados relativos às forças nucleares forte e fraca. Vários anos terão passado até que esse aluno, tenha, no subsunçor força, significados relativos à força gravitacional, à força eletromagnética, à força nuclear fraca e à força nuclear forte. Ele ou ela poderá ter aprendido também que essas são as únicas forças fundamentais da natureza, pois todas as demais podem ser interpretadas como casos particulares dessas quatro. Mas para chegar aí não bastaria ter refinado e diferenciado progressivamente a idéia de força. Seria preciso também ter feito muitas reconciliações entre diferenças reais ou aparentes entre as muitas forças que aparecem nos livros didáticos (por exemplo, força de atrito, força peso, força motriz, força centrífuga) entre conflitos cognitivos (por exemplo, como pode aumentar a força de atração entre certas partículas elementares quando elas se afastam, se normalmente dá-se o contrário?). Diz-se que teriam sido feitas reconciliações integradoras (p. 6).

Esses processos de reconciliação e integração demonstram o movimento, a dinâmica da estrutura cognitiva do indivíduo, de como os subsunçores conseguem servir de âncora para novas informações e como a hierarquia dessas informações se comportam e se relacionam com ideias, conceitos, proposições e materiais potencialmente significativos (MOREIRA, 2012).

Um dos maiores desafios para a implementação da aprendizagem significativa é a própria estrutura da disciplina que está sendo organizada, sendo que essa deve ser estruturada de maneira que possibilite a formação e estabilização de ideias inter-relacionadas e na utilização de recursos que facilitem essa relação entre a estrutura da disciplina e a estrutura cognitiva do aluno (MOREIRA; MASINI, 1982).

### **3.5 Implicações do referencial teórico para o estudo**

Esta dissertação foi construída tendo como ponto de partida as teorias construtivistas apresentadas nesse capítulo, por meio da experiência dos autores relacionada a essa teoria de ensino/aprendizagem, e pela ideia de que o conhecimento é construído pelo próprio ser humano, ou seja, o próprio aluno constrói seu conhecimento. A teoria construtivista do conhecimento defende que o processo de aprendizagem é uma construção individual, que ocorre a partir da experiência, reflexão e interpretação pessoal. A partir dessa perspectiva, podemos relacionar os resultados da pesquisa com os diferentes teóricos abordados.

Piaget defendia que a construção do conhecimento ocorre a partir de estruturas cognitivas, que se desenvolvem em fases distintas. Nesse sentido, é possível perceber que, na pesquisa realizada, os participantes passaram por diferentes etapas na construção do conhecimento sobre a MQ, desde a identificação de conceitos básicos até a compreensão de equações complexas.

Vygotsky, por sua vez, enfatiza a importância da interação social na construção do conhecimento. Nesse sentido, a metodologia utilizada na pesquisa, que envolveu aulas expositivas e práticas, favoreceu a interação dos participantes com o professor e entre eles, promovendo a troca de ideias e a construção coletiva do conhecimento.

George Kelly, em sua teoria da psicologia dos construtos pessoais, destaca a importância da interpretação pessoal na construção do conhecimento. Na pesquisa, os participantes foram desafiados a aplicar conceitos abstratos da MQ em situações concretas, o que exigiu uma reflexão pessoal e interpretação individual do conteúdo.

Por fim, David Ausubel destaca a importância da organização e estruturação do conhecimento prévio na aprendizagem significativa. Na pesquisa, os questionários aplicados

antes e depois dos encontros permitiram avaliar o conhecimento prévio dos participantes e acompanhar a evolução de suas compreensões ao longo dos encontros.

Podemos concluir, a partir de tudo que foi abordado nesse capítulo, que, mesmo tratando de quatro teorias diferentes, elas têm um foco em comum, a construção do conhecimento a partir do próprio aluno. O olhar para o estudante proporciona um aprendizado mais dinâmico, mais facilitador e significativo. Levar em consideração todos os aspectos que permeiam o ambiente do estudante, suas concepções, suas proposições, seus construtos, seus conhecimentos prévios, para ajudá-lo na assimilação de novos conhecimentos, para guiá-lo além de suas capacidades, deve sempre ser o papel do profissional da educação.

Portanto, deixamos claro aqui, nesse estudo, que a construção do conhecimento se da como um par entre professor e aluno e pode ser uma maneira muito eficaz no desenvolvimento da estrutura cognitiva de um indivíduo. As diversas ferramentas e suportes teóricos que a posição construtivista proporciona é o fator mais relevante para essa dissertação e é por esse motivo que escolhemos fundamentá-la nesta visão.

## 4 O PRODUTO EDUCACIONAL

Este capítulo contempla a teoria educacional utilizada como metodologia para o desenvolvimento do material didático, a descrição do material didático elaborado que caracteriza o produto educacional, o qual encontra-se disponível no endereço <<http://educapes.capes.gov.br/handle/capes/738240>> e que acompanha esta dissertação, assim como a forma como ele foi apresentado e trabalhado junto a um conjunto de alunos de Licenciatura em Física.

### 4.1 Metodologia de desenvolvimento do produto educacional

O estudo do Universo, através da Física, é uma tarefa que requer esforço, dedicação e paciência. A análise dos eventos que podem ser vistos no dia a dia, como os movimentos dos carros, pessoas e animais podem ser simples em seu objetivo mas, também, podem ser complexos, envolvendo inúmeras equações e demandando destreza na resolução de problemas impostos pela Física, mesmo sua fenomenologia sendo tangível. Da mesma forma, as primeiras concepções sobre a Física Moderna podem parecer simples e objetivas. Porém, um entendimento mais aprofundado de suas leis envolve alto nível de abstração e domínio matemático. Levando em conta que, por mais que o ramo da Física Moderna trabalhe com fenômenos na escala macroscópica, a dificuldade encontra-se ainda maior quando entramos no mundo do muito pequeno, na MQ, onde a abstração toma o lugar da linearidade e as incertezas são equilibradas em probabilidades.

Os fenômenos estudados pela MQ têm particularidades que não são comuns nos fenômenos estudados pela Física Clássica. Devido ao fato de que a MQ estuda fenômenos em escala atômica e subatômica, a sua representação, muitas vezes, fica quase que, exclusivamente, matemática e é feita por meio de situações imaginadas. É claro que toda a Física pode ser expressa pela linguagem matemática e pela abstração de situações imaginadas. Porém, nesse caso, esses são os únicos mecanismos para transpor tais conhecimentos e fornecer explicações lógicas e fundamentadas para os fenômenos estudados, visto ser impossível a sua visualização de forma “direta”. Nesse sentido, esta dissertação possibilita um fator de interdisciplinaridade, beirando a fronteira entre a Química e a Física. Segundo Greca e Santos (2005): “[...] enquanto na Química as representações pictóricas jogam um papel principal, na Física, este papel é fundamentalmente constituído pelas representações idealizadas das estruturas matemáticas.”

Esse balanço entre interpretações e representações oferece uma possibilidade de integração de conhecimentos entre as duas áreas através desta dissertação.

Partindo dos pressupostos que serão apresentados, o ato de transposição didática para a MQ é fundamental para a sua implementação em qualquer nível de ensino. A ideia desta dissertação foi transpor um conhecimento complexo e abstrato em algo mais tangível e didático para os estudantes.

Para que o acadêmico se torne um profissional com as competências e habilidades necessárias para a sua atuação, partimos do pressuposto de que é necessário, além dos métodos e práticas de ensino, que ele tenha domínio naquilo que está ensinando. Mesmo não havendo o domínio sobre todos os conhecimentos, é necessário que exista uma compreensão concreta e não superficial, para que todos esses saberes estejam no mesmo patamar e possam ser combinados e explorados para que haja uma harmonia nas concepções do estudante, proporcionando um melhor desempenho quando for sua vez de ir para a sala de aula.

Nesse sentido, para que este estudo esteja coerente com a teoria a ser abordada, foi necessário a elaboração de um plano de organização do conteúdo, o produto educacional, para contextualizar os conhecimentos da MQ oriundos do meio científico em algo apropriado para a sala de aula. A dificuldade observada na compreensão desse conteúdo pode vir da falta de condições de se ancorar as novas informações com conceitos já aprendidos pelos estudantes, ou seja, é um conhecimento muito abstrato. Da mesma maneira que a transição da álgebra para o cálculo é difícil, a transição da Física Clássica para a Física Moderna é comparavelmente complexa e exigente, demandando novas conexões neurais e assimilação de conhecimentos por parte do acadêmico (REIS et al., 2016). A MQ não é terrivelmente incompreensível, porém, os obstáculos, não só de conhecimentos, mas, também, de adequações do novo tipo de pensamento de expansão e reformulação da estrutura cognitiva, são o que a tornam um conteúdo mais exigente.

Para que um conhecimento seja ensinado da melhor forma possível, é necessária a sua modificação, para atender todos os níveis de aprendizado. Chevallard afirma que, quando um conhecimento é teorizado e apresentado ao meio acadêmico em sua forma crua, precisa sofrer transformações para se tornar, didaticamente, viável podendo ser ensinado em sala de aula, só assim se tornará, então, um objeto de ensino. Essa transformação é o que Chevallard chama de transposição didática (POLIDORO; STIGAR, 2010). Portanto, os conhecimentos a serem abordados no produto educacional foram analisados em sua forma apresentada ao meio acadêmico e, posteriormente, transpostos seguindo os pressupostos da TTD. Partindo desses pressupostos, a TTD se constitui como um aspecto central que este produto educacional utiliza

como referencial metodológico de desenvolvimento, “porque o funcionamento didático do saber é distinto do funcionamento acadêmico” (CHEVALLARD, 2000, p. 24, tradução livre).

Sendo assim, o produto educacional elaborado nessa dissertação de mestrado é apresentado de maneira a fornecer subsídios para que esse conhecimento possa ser introduzido em um curso de licenciatura em Física. A ideia foi fornecer certo grau de embasamento histórico aliado a uma recapitulação das ferramentas matemáticas utilizadas ao longo da aplicação do produto educacional. Sendo assim, realizou-se a transposição de textos, artigos e materiais buscados em diversos meios, os adequando para a introdução desses conteúdos em cursos de formação de professores de Física. O produto foi apresentado em forma de um texto de apoio ao professor e aluno de Física do Ensino Superior. A seguir, vamos discutir alguns dos elementos principais desta teoria que auxiliaram para a elaboração do produto educacional.

#### **4.2 A Teoria da Transposição Didática**

Quando um estudo original é realizado, ou seja, uma descoberta ou pesquisa, normalmente, ela se dá de forma bruta, com dados e informações complexas, que somente um grupo seleto de pessoas consegue interpretar na forma que se apresentam. Geralmente, esse tipo de conhecimento é formulado por pesquisadores e estudiosos que beiram a fronteira do conhecimento, trabalhando sempre em prol da expansão desse limite. Esse conhecimento está dentro do meio científico e, para que possa ser exposto para outras pessoas, em outros meios e níveis intelectuais, faz-se necessária uma forma de transportar esse conhecimento para fora desse meio. Nesse sentido, esse é o ponto inicial onde se apoiam os estudos de Yves Chevallard (2000) na formulação da TTD. Para ele, a transposição didática é o caminho que leva o saber científico para o saber ensinado.

Chevallard aponta que existem duas etapas a serem cumpridas para que haja a transformação do saber acadêmico em saber escolar: a primeira sendo uma transposição externa, em livros didáticos, planos curriculares e materiais de apoio, como a presente proposta; e a segunda sendo uma transposição interna, onde cabe ao professor, em ação na sala de aula, na entrega dos conhecimentos aos alunos (POLIDORO; STIGAR, 2010). Sendo assim, a TTD define e caracteriza os tipos de conhecimentos em três esferas do saber: o saber sábio; o saber a ser ensinado e o saber ensinado, onde todos os saberes fazem parte do que é chamado de Noosfera. Caracterizamos a seguir cada um desses saberes.

*Saber sábio* - Esta esfera se refere ao conhecimento que é teorizado, pesquisado e produzido no meio científico, onde o saber se dá em sua forma bruta, crua, na forma de artigos,

em jornais ou revistas científicas. Este conhecimento necessita de refinamento para que possa ser apresentado fora dessa comunidade, ou seja, para o meio acadêmico, onde é necessário que haja a despersonalização do saber (CHEVALLARD, 2000, p. 24).

*Saber a ser ensinado* - Dada a formulação de um novo conhecimento e este sendo julgado próprio, consistente para ser apresentado ao público, tem-se início o processo de refinamento e organização do conhecimento, por meio do desenvolvimento de recursos didáticos, feitos por profissionais da educação, ou seja, especialistas das disciplinas, professores, o poder público e os demais ramos da sociedade que tem papel na educação. Esses materiais desenvolvidos se dão por meio de livros didáticos, textos de apoio ao professor, etc. Segundo Pinho Alves (2000, apud POLIDORO; STIGAR, 2010):

O saber a ensinar é entendido como um novo saber, sua estrutura de origem está localizada fora do contexto acadêmico produtor do saber sábio. Dessa forma, para que na integração entre objetos de ensino não haja prevalência de conceitos sem significado, é recomendado o uso das diferentes fontes de referência, que inspiram e estabelecem a legitimação de um saber (p. 23).

Por isso, a sequência dos conteúdos, como vemos nos livros, não estão, muitas vezes, na ordem cronológica de suas descobertas, isso acontece para que haja uma organização, um sentido linear no decorrer dos conteúdos. Todo esse trabalho de agrupamento e simplificação do conteúdo é classificado por Chevallard como transposição didática externa (CHEVALLARD, 2000, p. 15 – 25).

*Saber ensinado* - Com todo esse conhecimento agrupado e entregue aos profissionais do ensino, cabe a eles desenvolver métodos e articulações de como passar esse conhecimento para os alunos em sala de aula. Nessa última etapa, chamada por Chevallard (2000, p. 44) de transposição didática interna, os profissionais da educação devem elaborar planos de aula, materiais de apoio e métodos de ensino que sejam significativos para a aprendizagem do aluno. Nesse estágio, entram, também, os órgãos administrativos da instituição de ensino onde está sendo aplicada a reprodução do conteúdo, ou seja, o setor pedagógico, o setor de ética, o setor de inclusão, etc. Todas essas pessoas orientam e organizam a forma de como o conteúdo será apresentado aos alunos, apesar de todo o regimento por trás da forma de como o conhecimento será abordado, muitas vezes, deixam o professor sem muita flexibilidade, o mesmo tem o toque final, sendo esse o seu método e afinidades e, também, o que se julga pertinente trazer para a sala de aula (CHEVALLARD, 2000, p. 15 – 18).

*Noosfera* - A noosfera pode ser vista como uma esfera do pensamento humano, onde os três saberes estão localizados, servindo como um ponto de organização, centralização,

operacionalização e condução da transposição didática. Chevallard (2000, p.34, tradução livre) apresenta a noosfera como o “[...] centro operacional do processo de transição [...]”. Ela forma um *link* entre a sociedade e as esferas do saber, viabilizando a manutenção da compatibilidade entre o sistema didático e o seu entorno social, ou seja, é nela que será feita, por exemplo, a seleção de quais conteúdos serão levados para a sala de aula, onde irá ocorrer o refinamento do saber sábio, então designados ao saber a ensinar, por meio da transposição. É um espaço onde os saberes estão em constante conflito para tentar gerar a mudança (CHEVALLARD, 2000, p. 28 - 34). A noosfera é uma construção social, portanto, está sujeita a mudanças e pode não resultar em uma modernização do saber, dependendo de como são abordadas as esferas dentro dela (CHEVALLARD, 2000, p. 35).

#### *4.2.1 As características da Transposição Didática*

Para que a transposição dos saberes ocorra de forma objetiva e significativa, é necessário que os responsáveis pela esfera transformadora do saber levem em conta alguns princípios norteadores no processo. Isso facilitará a identificação e organização das ideias e dos conteúdos que estão sendo desenvolvidos e aperfeiçoados dentro da esfera do saber.

*Dessincretização do saber* - A primeira etapa para que o conhecimento possa ser redirecionado para a sala de aula é a transposição didática externa. Nesse processo, o conhecimento se transforma, ou seja, há uma delimitação dos conteúdos, o que gera uma descontextualização, tirando o conhecimento do invólucro que lhe propõe sentido. É preciso que o conhecimento seja desvinculado do problema de pesquisa em torno do qual foi produzido (CHEVALLARD, 1985, p. 60 apud MENDONZA, 2005, p. 89).

*Despersonalização do saber* - No decorrer da produção do novo conhecimento, o responsável pela sua elaboração deposita, não necessariamente de forma intencional, parte de si em seu trabalho, na forma de motivações pessoais e ideologias. Por isso, Chevallard (1985, p. 61 apud MENDONZA, 2005, p.90) diz que é necessário um processo de despersonalização, para que o conhecimento seja limpo e livre, tornando-o objetivo e pronto para ser recontextualizado em um ambiente de ensino, como a sala de aula.

*Programabilidade do saber* - Quando o conhecimento é, então, disposto em forma textual, necessariamente, ele contém uma sequência, ou seja, uma forma de organização. Dessa maneira, ele se torna estruturado, com começo, meio e fim, para ser levado à sala de aula (CHEVALLARD, 1985, p. 62 apud MENDONZA, 2005, p. 90).

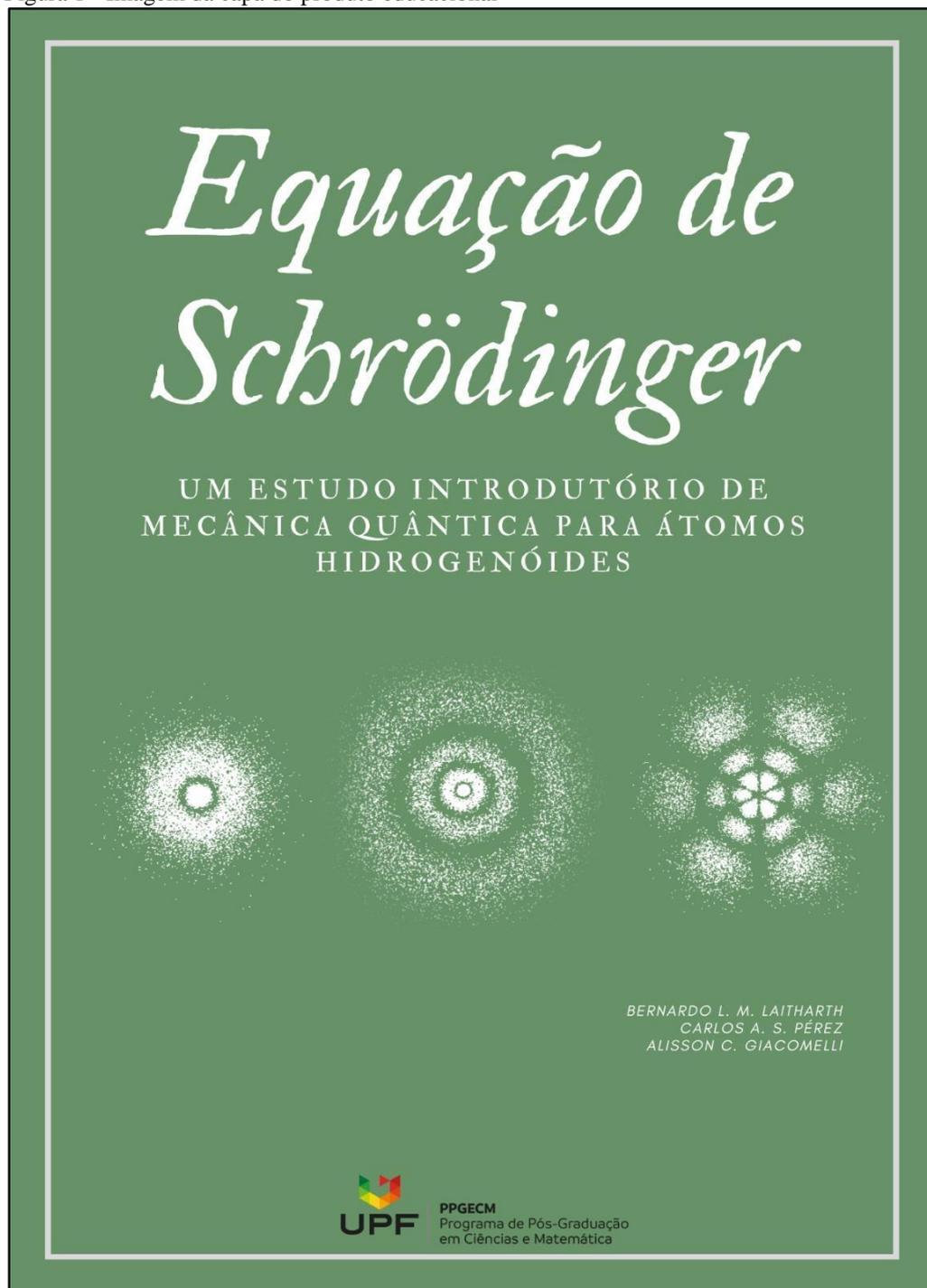
*Publicidade e controle social dos aprendizados* - A publicidade permite evidenciar as finalidades, objetivos e propósitos da transposição didática realizada. Ela consiste em analisar as definições utilizadas na contextualização e compreensão do conhecimento. Nesse sentido, trata-se, também, de um controle social da aprendizagem, analisando os dados do conhecimento e levando em conta todas as suas características no desenvolvimento, até a sua chegada na sala de aula (CHEVALLARD, 1985, p. 62 apud MENDONZA, 2005, p. 90).

A partir das colocações sobre o ensino de MQ e os tipos de materiais disponíveis, assim como a apresentação da metodologia utilizada para o ensino da teoria quântica, a dissertação foi elaborada para seguir as ideias aqui propostas, tentando seguir este referencial teórico da TTD na execução dos exercícios e dos textos, aproximando o conhecimento dos estudantes e explanando sua composição de maneira clara afim de atender o objetivo de transpor o conhecimento em sala de aula. Dessa maneira, na próxima seção, iremos tratar sobre o processo de elaboração do produto e sua aplicação.

### **4.3 Elaboração do produto educacional**

Este material didático foi elaborado perante a problemática apresentada na introdução deste estudo e, também, tendo em vista a falta de materiais instrucionais com foco discente e docente sobre o estudo da física moderna na formação de professores. A criação do material apoia-se na integração de textos, artigos e livros didáticos e surge das inconsistências observadas nos estudos realizados sobre as produções referentes ao ensino de MQ, onde identificamos a dificuldade de abordar conteúdos mais avançados de física com os quais os alunos consigam relacionar os significados com conhecimentos pré existentes, seja através de uma linguagem muito abstrata ou pela falta de um acompanhamento mais minucioso no próprio corpo do material que estimule a construção desse aprendizado. Nesse sentido, apresentamos a seguir, a elaboração do produto educacional presando a sua construção através dos pressupostos metodológicos abordados, anteriormente, sobre a TTD. A Figura 1, a seguir, apresenta a capa do produto.

Figura 1 - Imagem da capa do produto educacional



Fonte: Autor, 2023.

O material foi dividido em duas partes, com sete capítulos ao todo. Os capítulos buscam seguir uma ordem de conteúdos necessários para a compreensão gradativa da teoria quântica, assim como apresentam todos os tópicos respeitando as características do referencial metodológico. Uma descrição completa dos conteúdos abordados se dá a seguir.

A primeira parte do material inicia com o capítulo 1, onde é apresentada uma base histórica, com poucos formalismos matemáticos, tendo como intuito uma breve revisão

cronológica do desenvolvimento da MQ para preparar o caminho para os conteúdos mais avançados. Nesse capítulo, é explanado desde o comportamento ondulatório da luz até os modelos atômicos antigos, finalizando com a introdução do comportamento ondulatório da matéria, que proporciona a deixa para a introdução da teoria quântica.

O capítulo 2 diz respeito à introdução da teoria quântica, onde julgou-se necessário realizar uma revisão matemática referente aos números complexos e probabilidade, com o intuito de sanar possíveis dificuldades matemáticas para a compreensão do conteúdo em si. Essa revisão foi feita tendo em mente o foco do trabalho e, portanto, tentou-se manter uma linha de raciocínio que não saísse muito da teoria quântica. Contém, também, exemplos e sugestões de atividades para melhor compreensão do leitor.

No capítulo 3, inicia-se o estudo da equação de onda e função onda. Nele, deriva-se a Equação de Schrödinger (ES) para estados estacionários, a partir de resultados obtidos experimentalmente, da interpretação de de Broglie sobre a natureza ondulatória da matéria e conceitos da mecânica ondulatória. Após encontrada a equação, inicia-se uma análise de sua real natureza e seu significado para a aplicação Física. Além disso, foram explanadas as restrições e o processo de normalização da função de onda, finalizando com algumas atividades para fixação do conteúdo aplicado.

O capítulo 4 buscou reunir todos os passos dos capítulos anteriores na resolução de um problema clássico da MQ, o de uma partícula em uma caixa rígida. Optou-se por fazer essa abordagem logo em três dimensões. Vale notar que, ao decorrer de toda essa abordagem, todos os passos matemáticos foram apresentados tentando ao máximo excluir qualquer dúvida inerente do formalismo da teoria, fazendo com que o conteúdo seja melhor expressado e não fique preso à resolução de problemas, perdendo o foco da abordagem fenomenológica.

A segunda metade é iniciada no capítulo 5, onde uma introdução dos princípios gerais da MQ é apresentada, explorando os postulados que deram origem à teoria, assim como o formalismo matemático por meio das notações de Dirac. São abordados os temas de ortogonalidade, ortonormalidade e completude da função de onda, comutação de operadores e finaliza-se com a ES para estados estacionários, dessa vez, retirada dos postulados da teoria, obedecendo todas as regras e restrições apresentadas.

O capítulo 6 aborda uma parte mais avançada, tratando do momento angular orbital e o momento angular intrínseco, o spin. Nesse capítulo, é realizada uma breve revisão de análise vetorial necessária para desenvolver o conteúdo subsequente. Após, a derivação dos operadores do momento angular é apresentada, assim como seus autovalores. Por fim, foi construído um

estudo simplificado sobre o spin, mostrando as propriedades e dando uma noção básica de como ele se caracteriza e como surge dentro da teoria quântica.

Por fim, no capítulo 7, realizamos a aplicação da ES para um elétron em um átomo de hidrogênio, resolvendo e separando a parte temporal da ES, convertendo o laplaciano em coordenadas esféricas para, então, resolver, separadamente, as equações angular e radial, utilizando os polinômios de Legendre e Laguerre, respectivamente. Com isso, juntamos as soluções de todas as equações resolvidas e resolvemos a ES independente do tempo em 3D obtendo as funções de onda que dão a forma aos orbitais e os níveis energéticos em átomos do tipo hidrogênio e, conseqüentemente, outros elementos químicos. Nesse sentido, concluiu-se o capítulo com visualizações de tais orbitais através de simulações por meio de um programa criado pelos pesquisadores Carlos Fernández e André Santos (2012).

#### *4.3.1 Locus de aplicação e caracterização dos sujeitos*

A aplicação do produto educacional foi dada na forma de uma proposta didática desenvolvida em uma turma de Licenciatura em Física, na Universidade de Passo Fundo (UPF), localizada no norte do estado do Rio Grande do Sul. A UPF completou, em 2022, 54 anos de existência, nos quais formou mais de 84 mil profissionais. A instituição está entre uma das melhores universidades do mundo, segundo o *ranking* internacional da Times Higher Education. Está dividida em seis unidades acadêmicas, as quais agrupam 74 cursos de graduação, 45 cursos de especialização, 9 MBAs, 8 residências, 15 cursos de mestrado e 9 cursos de doutorado.

O curso de Licenciatura em Física, onde o produto foi aplicado, foi criado em 2003 e continua em atividade segundo a Portaria Seres nº 919, de 27 de dezembro de 2018, e DOU em 28 de dezembro de 2018. O curso tem duração de nove semestres, divididos em atividades práticas e teóricas. A disciplina de MQ, na qual foi aplicado o produto educacional, se encontra no último semestre do curso. A aplicação ocorreu no primeiro semestre de 2022, em que estavam matriculados na disciplina e participaram da aplicação 7 alunos, sendo quatro do sexo masculino e três do sexo feminino.

#### *4.3.2 Cronograma de aplicação do produto educacional*

A aplicação do produto denominado “Um estudo introdutório da Equação de Schrödinger para átomos hidrogenoides” foi estruturada em cinco encontros presenciais com

quatro horas aula cada, totalizando 20 horas. O quadro abaixo mostra a distribuição dos tópicos em cada encontro.

Quadro 2 - Descrição das atividades realizadas nos encontros

Encontros	Horas-aula	Conteúdos
1	4	Apresentação da proposta de estudo. Aplicação do questionário inicial. Discussão e derivação da ES; Interpretação da função de onda, suas restrições e o processo de normalização; Sugestões de atividades complementares.
2	4	Partícula em uma caixa tridimensional.
3	4	Postulados da MQ; Formalismos da teoria quântica; Propriedades da função de onda; Comutação de operadores.
4	4	ES para estados estacionários; Operadores do momento angular orbital; Autovalores dos operadores do momento angular orbital.
5	4	Spin; Aplicação da ES em um átomo de hidrogênio; Análise dos dados com uma simulação; Comparação dos resultados com experimentos reais; Aplicação do questionário final.

Fonte: Autor, 2022.

Além dos conteúdos abordados nos encontros, somam-se as atividades extraclasse de leitura dos materiais e exercícios indicados em cada encontro.

#### 4.3.3 Descrição dos encontros

Nesta seção, vamos apresentar e descrever as atividades que foram realizadas nos encontros, sobre a resolução de exercícios e discussão de conceitos. Os encontros seguiram uma estratégia didática baseada na construção do conhecimento. Portanto, as interações, questionamentos e atividades propostas sempre estavam voltadas a direcionar os alunos na construção de conhecimentos por resgate de ideias e conceitos que pudessem servir nesse propósito, assim como trazendo à tona suas próprias concepções e construtos individuais nas discussões sobre o conteúdo.

Aqui apresentamos a descrição dos encontros, focando na parte das atividades e conteúdos abordados, sendo que as falas, comentários, discussões, sugestões e interações serão abordados como dados de pesquisa em uma análise realizada no próximo capítulo.

##### 4.3.3.1 Primeiro encontro

No Primeiro encontro, foi apresentada aos estudantes a proposta da pesquisa e como os encontros seriam organizados e estruturados. Na sequência, foi aplicado o questionário de pré-teste (APÊNDICE A) que tem por objetivo coletar informações sobre os conhecimentos prévios de cada estudante sobre alguns conhecimentos gerais da teoria quântica, assim como alguns

aspectos específicos e habilidades matemáticas. Em um segundo momento, iniciamos o estudo da MQ por meio de uma breve conversa sobre os modelos atômicos seguindo com uma recapitulação matemática referente aos números complexos e distribuição probabilística. Foi debatido acerca da importância dessa revisão matemática na compreensão da teoria a fim de ficar claro para o estudante a escolha dessa sequência. Após essa breve revisão inicial, prosseguimos para a discussão e “derivação simplificada” da ES através de postulados baseados em experimentos.

Durante o processo de derivação, houve discussões e indagações sobre os processos e caminhos adotados na resolução dos cálculos. Nesse processo, foram discutidos os significados e implicações físicas sobre a função de onda, o que significa o colapso dessa função e como ele ocorre, assim como seu significado físico.

Logo no fim do encontro, discutimos sobre o conceito de normalização e como ele pode ser entendido através do auxílio do capítulo sobre as revisões matemáticas. A aula foi encerrada com atividades propostas sobre o processo de normalização, para serem revistas no próximo encontro.

#### 4.3.3.2 Segundo Encontro

No segundo encontro, iniciamos relembrando alguns dos conceitos vistos na aula anterior, partindo para a explicação do problema de uma partícula em uma caixa tridimensional. Foi destacado, junto aos alunos, a importância da compreensão desse problema para os conteúdos posteriores a serem trabalhados. A escolha de dedicar tamanha atenção a um único problema é a de que a partir da compreensão dos aspectos que o envolvem, o estudante terá contato com conceitos já estudados e que também estão relacionados a outras questões subsequentes da MQ. Ao abordar esse problema, fica evidente como algumas propriedades da MQ surgem naturalmente da matemática que envolve a teoria, como por exemplo, o surgimento dos estados fundamentais de energia, assim como a sua quantização e alguns números quânticos. Iniciamos a montagem da equação para o estado do problema, separamos as variáveis através do método de separação de variáveis, isolamos a variável da energia da variável espacial. Com isso, analisamos as condições de contorno do problema e definimos a equação que representa essa partícula. O último passo foi normalizar essa equação para, assim, obter dados físicos observáveis.

Por fim, foi proposto aos estudantes dois cenários para serem ponderados, como experimentos mentais, sobre o que ocorreria quando a partícula calculada se encontra livre,

dimensões da caixa infinitas, e o que ocorreria se essa partícula existisse no mundo macroscópico. Essa atividade induziu os alunos a discutirem entre si, tornando o ambiente da sala de aula propício para o professor interagir e apresentar, matematicamente, as ideias advindas das discussões. Os estudantes conseguiram distinguir o que aconteceria nos dois cenários, o que auxiliou no momento de demonstrar as duas hipóteses por meio de cálculos. Após as discussões e cálculos realizados pelos alunos sobre os dois cenários, foi realizado o fechamento pelo professor. Esse fechamento teve como principal objetivo discutir os detalhes finais e responder as dúvidas que haviam surgido, no decorrer dos debates. O encontro foi encerrado dando uma breve pauta sobre o que seria visto no próximo encontro e disponibilizado o material para o mesmo. A proposta foi de que os alunos fizessem um estudo prévio do material disponibilizado de forma a enriquecer as discussões da aula seguinte. O material disponibilizado aos estudantes se caracteriza como o capítulo 5 do produto educacional.

#### 4.3.3.3 Terceiro Encontro

No terceiro encontro, inicialmente, foi realizada uma retomada do que foi abordado na aula anterior, seguindo com discussões acerca das dúvidas oriundas da leitura prévia realizada pelos estudantes. Em seguida, foram apresentados os postulados da MQ. Para facilitar o entendimento desse tópico foram utilizados os capítulos anteriores, da “derivação da ES” e do problema da partícula em uma caixa 3D como âncoras na construção destes novos conceitos. O estudo dos postulados foi essencial para fundamentar as concepções sobre a criação e utilização dos operadores, assim como o surgimento da ES. Após a discussão sobre os postulados, o professor apresentou, brevemente, a formalidade existente na teoria por meio dada notação de Dirac e sua proposta como ferramenta facilitadora do trabalho matemático. Essa formalidade foi necessária para subsidiar os alunos com um conhecimento geral da interpretação da teoria quântica, possibilitando que, a partir desse aprendizado, seja possível interpretar outros textos que abordem o mesmo tema.

Em um segundo momento, foi feita a análise de propriedades importantes acerca dos operadores e funções de onda, ou seja, o estudo da ortogonalidade, ortonormalidade e completude da função de onda de forma puramente matemática. Nessa etapa, houve alguns obstáculos que precisaram ser trabalhados devido ao alto teor matemático. Porém, ao serem lembrados alguns conceitos do cálculo, essas dificuldades se tornaram oportunidades para o aprendizado. Em seguida, foi apresentado o conceito de comutação de operadores, utilizando como recurso o que os alunos já haviam visto sobre o princípio da incerteza. Analisou-se o

significado da comutação e quais as suas implicações para a Física. Durante esse processo, foi possível demonstrar o surgimento do princípio da incerteza. A demonstração do princípio da incerteza gerou muitos comentários e discussões que enriqueceram, significativamente, a aula. Por fim, encerramos o encontro respondendo as perguntas referentes ao início da atividade que já não haviam sido respondidas no decorrer da aula e discutindo sobre as implicações físicas do conteúdo estudado. Foi encorajado que os alunos tentassem resolver alguns dos exemplos presentes nos textos a fim de dar mais clareza e significado ao conteúdo estudado. Ao final do encontro, foi disponibilizado o texto contendo o conteúdo da aula seguinte para leitura prévia.

#### 4.3.3.4 Quarto Encontro

No quarto encontro, foi realizada, inicialmente, uma breve revisão referente aos conteúdos trabalhados na aula anterior, seguindo com o estudo da ES para estados estacionários. Utilizamos os postulados estudados no encontro anterior para extrair a ES da teoria quântica através de técnicas de cálculo básicas. Em seguida, foi apresentada uma explicação sobre análise vetorial, para que os alunos lembrassem esse conceito. Deu-se continuidade analisando o momento angular na forma clássica, tomando como recurso didático imagens sobre o movimento de translação e rotação de planetas. Feita essa observação clássica, esses conceitos foram utilizados como uma analogia para introduzir o movimento de um elétron ao redor do núcleo. Em seguida, foram aplicados os elementos de análise vetorial no momento angular e, com eles, os alunos foram desafiados a encontrar os operadores. Utilizando a revisão e as regras de criação de operadores, vistas anteriormente, os estudantes foram capazes de efetuar a verificação de comutação e definir que não podemos saber todas as componentes do momento angular ao mesmo tempo.

Em seguida, foram estudados os autovalores dos operadores do momento angular, resolvendo alguns dos cálculos apresentados e seguindo a sequência lógica dos demais. Após isso, chegamos na mesma equação que vimos no início do encontro, conectando as analogias feitas e fundamentando esse conteúdo. Na sequência, foram destacadas as implicações dos cálculos por meio de imagens que representam a quantização do momento angular.

Ao final do encontro, discutimos o aparecimento dos dois números quânticos  $l$  e  $m$ , assim como foi elaborado um sumário sobre tudo o que foi visto contendo os passos seguidos

nas resoluções. Em seguida, foi entregue o texto para leitura prévia referente ao próximo encontro.

#### 4.3.3.5 Quinto Encontro

No quinto encontro, foi efetuado o término do último conteúdo, abordando o conceito de spin e relacionando-o com o modelo padrão das partículas elementares, assim como demonstrando, matematicamente, a sua existência. Isso foi feito demonstrando que, através dos mesmos métodos que foram usados para as componentes do momento angular, podemos encontrar as componentes do Spin. Após isso, foi feita uma breve revisão e discussão sobre tudo o que havíamos visto desde o primeiro encontro, sobre o significado e utilização de uma função de onda, a importância da normalização, como as técnicas de probabilidade em conjunto com a inserção dos operadores em uma função de onda podem nos dar elementos físicos reais para serem trabalhados, e como todo esse conhecimento é essencial para entender os demais conteúdos.

Sendo assim, deu-se início à parte final da aplicação que se trata do modelo matemático de átomos do tipo hidrogênio. Dentro disso, foi utilizado todo o conhecimento construído até então aplicando-o ao sistema de um elétron orbitando um núcleo atômico. Abordamos vários dos tópicos aprendidos no decorrer das aulas várias vezes. Após a resolução e imersiva discussão sobre a aplicação da ES em um sistema atômico simples, foi definida a equação que descreve o comportamento do elétron e, a partir dela, pôde-se estimar toda a tabela periódica de elementos.

Em um segundo momento, os alunos foram apresentados a um simulador, com nome “*Plots of quantum probability density functions in the hydrogen atom*”, exposto por meio de projeção, onde eles puderam interagir com a equação de onda que acabaram de descobrir e mudar seus valores, para assim observar as formas dos orbitais para cada valor dos números quânticos  $n$ ,  $l$  e  $m$ .

Por fim, foi proposta uma discussão relacionando os resultados das simulações com experimentos reais. Para isso, foi analisado como a teoria prevê a realidade por meio do experimento do microscópio fotoionizante. Em seguida, ao final do encontro, foi aplicado o questionário final, com o objetivo de produzir mais dados que pudessem evidenciar as possíveis potencialidades e fragilidades da proposta.

Destacamos que, ao longo dos encontros, foram produzidos dados de diferentes naturezas com o intuito de validar a proposta de produto educacional. Nesse sentido, o próximo capítulo se dedica a apresentar esses dados e sua análise.

## **5 PESQUISA DESENVOLVIDA DURANTE A APLICAÇÃO DO PRODUTO EDUCACIONAL**

Este capítulo apresenta a pesquisa desenvolvida durante a aplicação do produto educacional levando em consideração o problema e os recortes apresentados na introdução desta dissertação. Nesse sentido, contempla os fundamentos teórico-metodológicos da pesquisa e os instrumentos e a metodologia utilizada para a produção e análise dos dados. Em seguida, são apresentados os dados produzidos durante os encontros, finalizando com discussões referentes a sua análise.

### **5.1 Aportes teórico-metodológicos da pesquisa**

A pesquisa desenvolvida, nesta dissertação, é classificada como de natureza qualitativa. Segundo Gerhardt e Silveira (2009), o melhor momento para utilização da análise qualitativa é onde o objetivos não são dados numéricos mas, sim, a compreensão de um grupo social, neste caso, os estudantes. Assim, a análise qualitativa tem seu foco em aspectos reais “[...] que não podem ser quantificados, centrando-se na compreensão e explicação da dinâmica das relações sociais”(GERHARDT; SILVEIRA, 2009, p. 32). Nesse sentido, essa análise dependeu de vários fatores, tais como a forma como o produto foi aplicado, os instrumentos de análise, o tipo de dados produzidos e que tipo de conhecimentos foram utilizados como base na investigação (GIL, 2002, p. 133).

Dentre os possíveis tipos de pesquisa qualitativa, esta pode ser classificada como um estudo de caso, o qual “tem por objetivo proporcionar vivência da realidade por meio da discussão, análise e tentativa de solução de um problema” (GODOY, 1995, p. 25). Sendo o foco contextual da pesquisa uma situação na qual o controle sobre os resultados é subjetivo às interações e interpretações pessoais de cada indivíduo, aos quais foi aplicado esse material didático, a pesquisa qualitativa apoiada em uma abordagem de estudo de caso se torna útil na procura por respostas às questões de “como” e “por quê” os indivíduos aprendem e interagem com a proposta trabalhada (GODOY, 1995).

### **5.2 Instrumentos e metodologia para a produção de dados**

Como instrumentos para produção de dados, foram utilizados dois tipos: um diário de bordo escrito pelo professor após cada encontro e questionários pré e pós-teste. O diário de

bordo foi utilizado de acordo na perspectiva de Zabalza (2004). De acordo com o autor, este é entendido como um espaço para descrever as atividades, interações e pensamentos sobre as aulas, que foram analisadas após a conclusão da fase de aplicação. Com o auxílio dos questionários, foi realizada uma análise qualitativa, a fim de compreender a evolução dos estudantes e as suas percepções do material ao longo de sua aplicação. Sendo assim, com esses instrumentos à disposição, foi realizada a transcrição e seleção das memórias de aula, assim como a categorização em conjunto com as informações obtidas por meio dos questionários e, com isso, realizada a interpretação das informações a fim de validar a proposta (GIL, 2002, p. 133-134).

Os questionários se constituem de perguntas abertas sobre o entendimento geral do aluno sobre MQ e perguntas específicas que abordam conteúdos integrantes do material didático. Esses questionários são similares em alguns quesitos, a fim de identificar e avaliar a apropriação e ampliação do conhecimento por parte dos estudantes. Portanto, quando o primeiro encontro foi realizado, foi aplicado um questionário, com o propósito de identificar os fatores de interesse dos estudantes, possuindo perguntas de caráter individual e, também, com o objetivo de identificar os conhecimentos prévios dos alunos acerca do conteúdo a ser abordado durante a aplicação do produto.

Para fechamento e avaliação final da proposta, no último encontro, foi aplicado um questionário pós-teste, contendo perguntas gerais e específicas, assim como perguntas referentes à aceitação dos estudantes sobre o material e o modo como foi exposto. O questionário também tem como objetivo identificar se os conceitos principais foram compreendidos, avaliando, dessa forma, o caráter didático da proposta. Os questionários se encontram nos itens A e B dos apêndices.

### **5.3 Análise e discussão dos resultados**

Esta seção traz a apresentação e discussão dos resultados obtidos na pesquisa partindo do questionamento central relacionando com os aspectos teóricos e metodológicos do estudo. A seção está organizada de forma que se apresenta inicialmente a análise dos resultados referentes à aplicação do pré e pós-teste seguida da análise dos resultados produzidos, por meio do diário de bordo.

### 5.3.1 Análise do pré-teste e pós-teste

Como maneira de avaliar a viabilidade da proposta de material didático, efetuaremos a análise dos questionários aplicados no primeiro e último encontro. Os questionários se encontram nos apêndices A e B. No primeiro encontro, o questionário aplicado tem dois propósitos diferentes: o primeiro tem como intuito identificar a relação dos alunos com o que seria estudado e o segundo visa identificar os conhecimentos prévios dos mesmos, para que assim fosse possível moldar os encontros a esse propósito. O questionário aplicado, no último encontro, tem similaridades e equivalências com o primeiro, para que se possa analisar a progressão da construção do conhecimento dos alunos no decorrer da aplicação, assim como a relação pessoal dos mesmos com as novas ideias.

Para demonstrar a relação entre o pré e pós-teste e as respostas dadas pelos alunos serão apresentados quadros contendo as questões similares em ambos testes e as devidas respostas de cada aluno. Para a maioria dos quadros, optou-se por agrupar mais de uma questão, devido ao fato de seguirem a mesma linha de raciocínio e conteúdo. As exceções a essas similaridades são as questões 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 e 13 do pós-teste, que possuem conteúdos específicos que só foram abordados durante a aplicação do produto, não sendo possível avaliar previamente o conhecimento dos alunos sobre as mesmas e, por isso, são analisadas individualmente. Os quadros serão seguidos de um comentário aprofundado sobre cada pergunta e resposta. Todos os estudantes responderam tanto ao pré-teste como ao pós-teste. Pretende-se, em um primeiro momento, realizar a análise sobre as questões que contemplam os conhecimentos diretos sobre o conteúdo trabalhado e, após, a análise das questões que focam nas concepções e reações pessoais em relação ao material e o modo como foi trabalhado.

A seguir, apresenta-se o Quadro 3, com as questões à esquerda e as respostas à direita, sendo os termos em parênteses as respostas iguais. Na sequência de cada quadro, são realizadas as devidas discussões.

Quadro 3 - Questão 1 e 2 do pré-teste e 1 e 2 do pós-teste com as respectivas respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
Você já tinha ouvido falar sobre a Equação de Schrodinger?	Sim (6)
O que você entende, qual seu conhecimento sobre a equação de onda?	<p>“Meu conhecimento é extremamente raso” “Ela é mais restrita às ondas eletromagnéticas”</p> <p>“Equação de onda é uma equação que descreve o movimento da onda, no tempo e no espaço”</p> <p>“Apenas um método matemático, sem muito significado”</p> <p>“A equação de onda serve para calcular as ondas macroscópicas”</p> <p>Em branco (1)</p>

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Qual o propósito da Equação de Schrodinger?	<p><i>“Schrödinger buscava com sua teoria se livrar do problema paradoxal que permeava as descobertas da física quântica, a dualidade onda-partícula. Para ele o comportamento ondulatório descrito por Bohr era absurdo, pois a ideia dos saltos quânticos era uma bobagem. Como se buscasse a “nova equação universal do movimento” ele depois de seus estudos propôs a equação que descrevia as ondas de matéria, já que calcula a relação de uma onda associada a um campo, dependendo de um potencial específico.”</i></p> <p><i>“Calcular a função de onda associada a uma partícula.”</i></p> <p><i>“Calcular a função de onda associada <math>\Psi(r,t)</math> a uma partícula movendo-se dentro de um campo de forças de um potencial <math>V(r,t)</math>, ou seja, depender da posição <math>r</math> e do tempo <math>t</math>.”</i></p> <p><i>“Calcular uma função de onda, relacionada a uma partícula que se move em um campo de força.”</i></p> <p><i>“A equação permite calcular a função de onda associada a uma partícula que se move dentro de um campo de forças descrito por um potencial.”</i></p> <p><i>“Descrever a partícula através de uma função de onda.”</i></p>
Qual seu conhecimento sobre a equação de onda depois deste estudo?	<p><i>“Depois das aulas pude visualizá-la melhor e assim ver que sua aplicação é possível, da mesma maneira entender claramente o que ela descreve.”</i></p> <p><i>“Agora percebo que até mesmo corpos com massa possuem uma onda associada a si.”</i></p> <p><i>“Agora, a equação de onda demonstra exatamente para o que foi feita.”</i></p> <p><i>“A equação serve para calcular a função de onda de uma partícula”</i></p> <p><i>“O mesmo.” (2)</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

As duas primeiras questões do pré-teste tinham como objetivo iniciar o mapeamento do conhecimento dos alunos, através da indagação sobre a ES e, de modo mais geral, sobre uma função de onda. Da mesma maneira, as duas primeiras questões do pós-teste tentaram averiguar onde se encontra esse conhecimento, após realizadas as aulas. Podemos observar que, apesar de todos os alunos já terem ouvido falar sobre a ES, isso já é um bom sinal. Suas concepções sobre a equação de onda eram rasas e escassas em sua maioria, sendo que poucos estudantes demonstraram algum conhecimento, porém, de forma clássica. Nesse sentido, perante a análise do pós-teste, podemos observar que não só o conhecimento de alguns licenciandos foi aprimorado, construído em cima do que já sabiam, mas, também, esclarecido para aqueles que não tinham um saber mais aprofundado sobre a ES e a equação de onda no geral, expandindo e relacionando equações e funções como conceitos dependentes.

Esse conteúdo foi trabalhado logo no primeiro encontro, a fim de preparar o cenário para a introdução, cada vez mais exigente, do estudo da MQ. No decorrer de todas as aulas, sempre foi abordado esse conceito, já que levamos a ES até o final das aulas. Isso pode ser visto em algumas respostas onde se explica, detalhadamente, o propósito de uma equação de onda, aplicada a uma partícula, para calcular todos os estados possíveis dela, relacionando tempo e energia potencial. Ficou claro que todos compreenderam o conceito de que uma equação de onda gera uma função de onda que descreve os diferentes estados de um sistema.

Quadro 4 - Questão 3 do pré-teste e 3 do pós-teste com as respectivas respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
Qual seu conhecimento, o que você entende por função de onda?	<p>“O seu significado sempre foi bem claro, acredito por já haver estudado antes”</p> <p>“Não tenho concepções formadas sobre esse assunto” “É quase a mesma coisa que a equação de onda”</p> <p>“O mesmo que equação de onda” Em branco (2)</p>
PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Qual seu conhecimento, o que você entende sobre a função de onda depois deste estudo?	<p>“Mesmo já conhecendo a função de onda, as aulas foram bem úteis para clarearem e aprimorarem o conceito que já existia.”</p> <p>“Só passei a ter contato durante as aulas e dessa forma entender o que é e o que descreve”</p> <p>“Função de onda é uma equação que descreve o movimento da onda, no tempo e no espaço”</p> <p>“Função de onda na mecânica quântica é uma função que descreve o estado quântico de um sistema de uma ou mais partículas”</p> <p>“É uma função que descreve o estado quântico de um sistema e que alio é que estão todas as informações do sistema”</p> <p>Em branco (1)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A partir dessa questão do pré-teste, podemos identificar que, como na questão anterior, o entendimento dos alunos sobre função de onda era raso e, na maioria, interpretado como algo não relacionado à equação de onda ou, até mesmo, igual à equação de onda. Podemos observar que, nas respostas do pós-teste, fica claro que aos alunos conseguiram fazer essa relação e construir o conhecimento de que uma função de onda é o subproduto da resolução da equação de onda.

Alguns alunos até já possuíam o conhecimento sobre a função de onda e tomaram proveito das aulas para aprofundá-lo, enquanto outros tiveram o primeiro contato nos encontros. O primeiro e o segundo quadro são muito importantes, pois vemos que o conceito inicial, sobre entender o que é equação e função de onda, foi internalizado, possibilitando que déssemos continuidade às aplicações da equação de onda em vários cenários que seriam vistos posteriormente.

Quadro 5 - Questão 4 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que acontece quando a função de onda é elevada ao quadrado?	<p>“Conseguimos determinar a probabilidade de encontrar um elétron na região do átomo estudada” “O módulo ao quadrado da função de onda nos dá a amplitude de probabilidade de encontrarmos a partícula numa certa posição”</p> <p>“Representa a probabilidade de encontrar um elétron em certa região dentro do átomo.”</p> <p>“Encontramos a probabilidade de encontrar um elétron (ou partícula) em dada posição”</p> <p>“A probabilidade de achar um elétron em tal lugar.” “Representa a probabilidade de se encontrar um elétron em uma determinada região dentro do átomo.”</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão 4 do pós-teste, sem correspondente no pré-teste, buscou analisar se, a partir do conhecimento estabelecido sobre função de onda, os estudantes conseguiram incorporar o conhecimento básico de números complexos e cálculo integral. O ato calcular o quadrado da função de onda envolve a aplicação dos conhecimentos sobre o conjugado de um número complexo e resolução de integrais definidas. Além disso, é necessário entender conceitos básicos de probabilidade e, também, que a função de onda sozinha não representa algo físico, por isso, se faz necessário o cálculo (PRODUTO EDUCACIONAL, 2023, p. 56).

No quadro acima, fica evidente nas respostas que os licenciandos conseguiram construir esse conhecimento, agrupando os diversos conteúdos. Esse assunto foi abordado em vários encontros, desde o primeiro, pois sempre que havia a resolução de algum problema era preciso realizar o processo de normalização da função de onda, o que emprega o ato de calcular o quadrado dessa função. Portanto, esse conteúdo parece ter sido bem compreendido pelos estudantes, o que pode ser corroborado pelas respostas dadas pelos acadêmicos.

Quadro 6 - Questão 5 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que é o colapso de uma função de onda?	<p><i>“Esse conceito baseia-se no paradoxo da dualidade onda-partícula e, em suma, seria o momento de mudança de "estado" da onda, que passaria a ser umapartícula.”</i></p> <p><i>“É o fenômeno que ocorre quando se realiza a medição/observação de uma função de onda, assim seu estado inicial de muitos auto-estados colapsa em um único auto-estado”</i></p> <p><i>“Colapso da função de onda é o momento exato quando a onda se torna partícula”</i></p> <p><i>“É quando um estado inicial formado pelas superposição de muitos autoestados evolui para um único autoestado específico associado à sua medição.”</i> <i>“Quando alguma medição ocorre em um sistema quântico, sua função de onda entraria em colapso e o sistema convergiria em um único estado definido”</i> <i>“Quando a função de onda entra em colapso, na presença de um observador, o estado inicial formado pela superposição de muitos auto-estados se desdobra em um único auto-estado específico relacionado a essa medição. Isso caracteriza o colapso da função de onda.”</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

O quadro acima apresenta a questão 5 do pós-teste, sem correspondente no pré-teste. Essa questão teve como objetivo identificar se alguns conceitos-chaves da teoria foram internalizados pelos alunos. O colapso da função de onda implica no ato de medição de um sistema quântico, que é o mesmo que o ato de observar. Ao efetuar a observação, o sistema deixa de ser uma nuvem de probabilidade e se torna um ponto mensurável. Por isso, a função de onda colapsa em um único ponto infinitesimal, permitindo que a grandeza física que esteja sendo medida se torne algo real, uma medida fisicamente aceitável. Essa propriedade dos sistemas quânticos gera, também, alguns paradoxos, como o do gato de Schrödinger (MCEVOY; ZARATE, 2012, p. 148).

Perante análise, podemos observar que as respostas se voltam à explicação resumida acima, o que nos leva a inferir sobre um bom entendimento dos licenciandos sobre o que o ato de medição exerce em um sistema quântico.

Quadro 7 - Questão 6 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que significa normalizar uma função de onda e porque é necessário normalizá-la?	<p><i>“Significa que ela fica normalizada para todos os instantes o que possibilita a aplicação.”</i></p> <p><i>“Normalizar uma função de onda, quer dizer que ela deve se aproximar de zero quando <math>x</math> vai a infinito.” “A função de onda deve também ser normalizada para que a probabilidade desta partícula estar em qualquer lugar no eixo <math>x</math> seja 1”</i></p> <p><i>“É o ato de restringir uma função de onda, ou seja, tornar a soma de todas as possibilidades de encontrara partícula igual a 100%. Isso porque inicialmente a função de onda não tem a ela atrelada uma interpretação estatística, precisa-se realizar algumas operações matemáticas para que isso aconteça.” “Normalizar uma função é um termo usado para se referir a ação de reduzir a função. Se faz necessário dentro da Física Quântica, pois uma função, normalmente, tem probabilidades múltiplas dependendo de seu potencial, contudo ao normalizar para um instante se obtém uma função de onda normalizada para qualquer instante.”</i></p> <p><i>Não sei (1)</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão 6, representada no quadro a cima, sem similar no pré-teste, tentava buscar se o processo de normalização foi compreendido pelos alunos. Este é um processo muito importante em todos os problemas envolvendo a ES pois, só através dele, é possível calcular corretamente as probabilidades de um sistema. Segundo o material didático:

Quando calculamos onde podemos encontrar o elétron, queremos saber com a maior precisão possível a sua posição, ou seja, queremos uma probabilidade de 100% de o encontrarmos. [...] A função de onda por si só não nos ajuda em nada, o que dá significado físico a ela é a interpretação estatística (PRODUTO EDUCACIONAL, 2023, p. 59).

Essa etapa exige que o licenciando compreenda o processo de elevar a função de onda ao quadrado, que inclui conhecimento de números complexos e cálculo integral. É possível observar que, através das respostas no quadro acima, o conceito de normalização foi bem compreendido, tendo os estudantes demonstrado um bom conhecimento teórico sobre ele, relacionando o conceito de probabilidade com os vários estados em que um sistema pode se encontrar até que a normalização seja calculada.

Quadro 8 - Questão 7 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que caracteriza uma função degenerada?	<p>“Que tem a mesma energia em vários orbitais.” “Quando os autovalores associados as diferentes autofunções são iguais.”</p> <p>“Função degenerada é quando há pelo menos uma solução básica viável com uma variável básica com valor zero.”</p> <p>Em branco (1)</p> <p>Não sei (2)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

No quadro 7 acima, apresenta-se a questão 7 do pós-teste, sem análoga no pré-teste. Ela faz parte de uma série de questões que buscam analisar se os aspectos particulares das novas nomenclaturas, introduzidas pela teoria, conseguiram ser assimiladas pelos alunos no processo de construção do novo conhecimento. Sendo assim, a caracterização de uma função degenerada é dada “quando obtemos valores para a energia de diferentes funções de onda e seus valores são iguais entre si [...]” (PRODUTO EDUCACIONAL, 2023, p. 72). Ou seja, quando um sistema produz mais de uma solução e essas soluções compartilham a mesma energia, mesmo essas soluções (funções) sendo independentes umas das outras.

Observando os resultados da questão, vemos que este conceito não ficou tão claro, com apenas algumas respostas coerentes. Fica evidente que a introdução de novas nomenclaturas deve ser tomada não só como um passo a mais no aprendizado mas, sim, trabalhada de forma tangente, para aprimorar a interpretação de conteúdos futuros pelos licenciandos. Posteriormente, vamos conferir se os outros casos de formalismos obtiveram êxito na sua abordagem.

Quadro 9 - Questão 8 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que são autoestados, autovalores e autofunções?	<p>“Operadores quânticos.”</p> <p>“São denominações dadas a um estado, valor e função onde se tenha certeza de um determinado dado, assim se propõe uma "autoequação" que determinará esse valor certo que se tem.”</p> <p>“Todo operador tem um conjunto de autoestados e autovalores associados a ele, assim, os autovalores são valores possíveis da grandeza associada ao operador. Autoestados contém as informações sobre as propriedades observáveis. Autofunção é qualquer função diferente de zero encontrada no espaço de função definido levando em consideração as condições de contorno.”</p> <p>“Vem da parte dos operadores. Cada operador tem um conjunto de autoestados associados. Com isso, os autovalores são os valores possíveis da grandeza associada ao operador.”</p> <p>“Autovalores: são os valores possíveis da grandeza associada ao operador, os demais não recordeo.”</p> <p>Em branco (1)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão 8 do pré-teste, sem similar no pré-teste, representada, no quadro acima, continua a investigação de alguns dos formalismos linguísticos que compõe o material didático.

Neste caso, a questão apresenta três nomenclaturas: autoestados; autovalores, e autofunções. Estas nomenclaturas não são específicas da MQ, uma vez que podem ser encontradas em análises estatísticas, no estudo da mecânica dos sólidos, análise de vibrações, matrizes, etc (AUTOVALORES, 2007). As nomenclaturas estão ligadas aos operadores quânticos, representando seus valores e estados absolutos. Em outras palavras, um autoestado, por exemplo, pode ser descrito como um estado para qual temos certeza de que o observável tem um determinado valor.

Sendo assim, podemos concluir que esse formalismo linguístico ficou muito mais internalizado, como mostra o quadro acima, com respostas bem completas. Isso se deve pelo fato deste formalismo ter sido trabalhado repetidas vezes depois de ser apresentado, no 5º encontro, já que nas resoluções dos exercícios e problemas teóricos, os resultados sempre foram discutidos em relação aos autovalores, autoestados e autofunções. Também, é importante notar que, para esse conceito ser aprendido, a ideia de operadores quânticos e como eles funcionam também deve ser entendida com clareza. Veremos se isso ficou evidente no quadro a seguir.

Quadro 10 - Questão 9 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Quais são os principais operadores da mecânica quântica e qual seu papel na função de onda?	<p><i>“Posição, momento linear, momento angular e energia”</i></p> <p><i>“Operadores são a representação quântica para as grandezas clássicas, dentro da mecânica quântica se pode citar os operadores espaciais e temporais, que tem a função primordial de definir o potencial relacionado a função de onda.”</i></p> <p><i>“Operadores são entidades que operam sobre a função matemática de onda podendo alterar seu estado, os principais operadores na MQ são o Laplaciano e o Hamiltoniano”</i></p> <p><i>“Um operador é um ente matemático que estabelece uma relação funcional entre dois espaços vetoriais. A relação funcional que um operador estabelece pode ser chamada transformação linear.”</i></p> <p><i>“Posição, momento linear, momento angular e energia e eles servem para descrever a natureza.”</i></p> <p><i>“Rotação de translação.”</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão 9 do pós-teste, sem equivalente no pré-teste, representa um conceito muito importante: os operadores. Esta questão busca interpretar o que os licenciandos entenderam sobre os operadores e a sua significância nos cálculos de MQ. Os operadores têm um papel fundamental, eles representam quantidades físicas observáveis e, quando aplicados a uma função, retiram informações de grandezas físicas reais, de uma função que, tecnicamente, não tem resultados reais, como foi visto nas primeiras questões.

Dessa maneira, como esperado pelas respostas do quadro 10, a maioria das repostas apresentadas aqui condizem com o conceito de operadores, algumas fugindo totalmente do assunto, como *“Rotação e translação”*, mas, em sua maioria, demonstram-se satisfatórias,

sendo isso essencial para a progressão que o conteúdo levou, pois sem o entendimento do que são operadores e de como operá-los em uma função de onda, não seria possível prosseguir. Fica evidente, aqui, que houve a construção do conhecimento novo em cima das concepções prévias dos alunos, pois o resgate de conceitos e termos clássicos foi efetuado e dado um novo significado e propósito, aplicado em uma nova situação que envolve a extrapolação desse conhecimento.

Quadro 11 - Questão 10 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que é a comutação de operadores e qual sua importância para o desenvolvimento da mecânica quântica?	<p><i>“Se dois observáveis físicos comutam, uma base ortogonal do espaço dos estados pode ser construída com autovalores comuns a ambos.”</i></p> <p><i>“Comutação de operadores é quando o valor medido para um A é resposta para a medida de um operador B, ressaltando assim o fato de que a relação de ambos operadores pode ser utilizada para caracterizar um estado.”</i></p> <p><i>“Dois operadores comutam se a ordem em que eles operam não altera o resultado da função em questão. Essa propriedade é importante pois demonstra que se possuímos duas observáveis em que os operadores não comutam, não se pode medi-las ao mesmo tempo com precisão”</i></p> <p><i>Em branco (1)</i></p> <p><i>Não sei (2)</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

Nesta questão, de número 10 do pós-teste, sem compatível no pré-teste, teve o intuito de analisar se os conceitos fundamentais mas, geralmente, cobrados em um nível de licenciatura, foram internalizados. Mas, como essa questão pode ajudar a chegar a esta conclusão? O processo de comutação, questionado no quadro acima, não se refere somente a um cálculo matemático, ela possui implicações filosóficas também. Quando dois operadores comutam, é possível medir suas duas grandezas com infinita precisão. Se não comutam, uma grandeza é medida com alta precisão enquanto a outra fica cada vez mais incerta (PRODUTO EDUCACIONAL, 2023, p. 86). É dessa relação de comutação que o problema de medição e o princípio da incerteza surgem.

Sendo assim, além de avaliar o conhecimento matemático, esta questão buscou compreender se o aluno já havia fundamentando as implicações teóricas desses conceitos quânticos e, agora, conseguiu fundamentá-los de uma maneira mais prática, na aplicação de ferramentas matemáticas para visualizar essas implicações filosóficas abordadas. Podemos observar, então, que 50% dos alunos conseguiram assimilar essa abordagem sobre comutação, expressando em termos técnicos e informais também, como mostra o quadro 11.

Quadro 12 - Questão 11 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Qual o propósito do formalismo introduzido por Paul Dirac?	<p><i>“Representar o sistema que está sendo calculado de maneira não arbitrária, para que seja possível trabalhar com o sistema e somente depois decidir qual método usar, visto que o método de Heisenberg é baseado em matrizes e álgebra e o de Schrödinger utiliza cálculo diferencial e integral”</i></p> <p><i>“Descrever o comportamento relativístico do Elétron.”</i></p> <p><i>“Dirac foi responsável por conseguir relacionar as teorias de Heisenberg e Schrödinger introduzindo uma equação que consegue descrever com sucesso partículas elementares.”</i></p> <p><i>“Preparar o professor de física para a compreensão conceitual de fenômenos quânticos, como o do experimento de dupla fenda, o experimento de Stern-Gerlach, o conceito de spin.”</i></p> <p><i>“A mecânica quântica é um bom exemplo de novas ideias, que fizeram uma mudança profunda na opinião dos físicos em relação à matemática que governam suas ideias. Devemos começar a criar um formalismo lidando com as relações matemáticas entre os estados de um sistema dinâmico em um instante de tempo, em que as relações surgem da formulação matemática do princípio da superposição. O processo da superposição é um tipo de processo aditivo e implica em estados que podem ser somados de certa maneira para fornecer novos estados. A maioria dessas quantidades são os vetores. Vetores comuns existindo em um espaço de um número finito de dimensões não são suficientes para os sistemas dinâmicos na mecânica quântica. Temos que fazer uma generalização de vetores no espaço de um infinito número de dimensões”</i></p> <p><i>Não sei (1)</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão do pós-teste, de número 11, finaliza o objetivo de analisar a construção do conhecimento dos alunos sobre os formalismos linguísticos e matemáticos da teoria. Esta questão não apresenta similar no pré-teste.

O formalismo de Paul Dirac foi trabalhado no 3º encontro, sendo recebido com bastante interesse pelos estudantes. Foi discutido, logo no primeiro encontro, sobre os diferentes modos que é possível abordar o estudo da MQ, o método de Schrödinger, usando cálculo diferencial e integral; e o método de mecânica matricial, elaborado por Born, Heisenberg e Jordan. Optamos por trabalhar pelo método de Schrödinger, por ser mais alinhado com o conhecimento de cálculo dos licenciandos. Dirac propõe, então, uma maneira de trabalhar com a MQ sem ter que escolher um dos métodos, somente quando se quer extrair alguma informação da função de onda é que se escolhe por qual caminho seguir. Esse formalismo, empregado por meio de símbolos, facilita a compreensão de cálculos mais avançados dentro da teoria (MEHRA; RECHENBERG, 1982).

Nesse sentido, ao analisarmos as respostas dadas no quadro acima, percebemos que uma abordagem, mesmo que breve, sobre os formalismos, apresentada no produto educacional, foi bem aceita e compreendida pela maioria dos alunos. Com isso, percebe-se que uma abordagem introdutória focada em formalismos matemáticos e de linguagem é algo que deve ser pensando e aplicado com mais ênfase no âmbito acadêmico. Isso proporcionara uma compreensão mais aprofundada de todos os termos e conteúdos estudados.

Quadro 13 - Questão 12 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que define a quantização do momento angular?	<p>“Estabelece sub-níveis de energia dentro de um mesmo nível”</p> <p>“Como os números quânticos que representam o momento angular só podem assumir valores inteiros, conclui-se que o momento angular também é quantizado”</p> <p>“Uma simetria entre o comportamento da radiação e do átomo, já que a radiação tem comportamento de onda e partícula”</p> <p>“Segundo Bohr a radiação já havia sido quantizada, devido a constante de Planck, logo existia uma simetria entre o comportamento da radiação e o do átomo, já que a radiação tem comportamento de onda e partícula”</p> <p>“A quantização estabeleceu que os átomos se mantinham estáveis por causa do momento angular do elétron”</p> <p>Não sei (1)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

O quadro 13 apresenta a questão 12 do pós-teste, referente à quantização do momento angular, sem análoga no pré-teste. O objetivo dessa questão foi identificar se os licenciandos conseguiram relacionar o conceito de onda e partícula, o conceito de quantização da energia, com a quantização do momento angular. Essa quantização implica na estabilidade dos átomos, dos elétrons e das camadas eletrônicas. Esse processo apresenta dois números quânticos: azimutal e magnético.

Percebemos que, em certo nível, o conceito de quantização foi compreendido, porém, por ser uma parte bastante trabalhosa, pode não ter ficado muito clara essa explicação, como podemos ver nas respostas apresentadas no quadro acima, que não são tão completas. Isso reflete a dificuldade de trabalhar conceitos mais complexos e que exigem um conhecimento mais avançado de álgebra.

Quadro 14 - Questão 13 do pós-teste com as respostas

PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Com suas palavras, o que é Spin?	<p>“Pode ser entendido como o número quântico que define o momento angular de um núcleo atômico”</p> <p>“As orientações que uma partícula pode ter”</p> <p>“Spin trata das possíveis orientações que uma partícula pode ter”</p> <p>“É uma propriedade intrínseca das partículas subatômicas, que possuem momento angular independente de estarem em movimento ou não, e assim são responsáveis pelas propriedades magnéticas da matéria”</p> <p>“Vetor momento angular intrínseco de uma partícula e às diferentes orientações (quânticas) deste no espaço”</p> <p>“Seria o ‘tipo’ de ‘rotação’ da partícula”</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

A questão 13 do pós-teste tentou verificar como o conceito de Spin, momento angular intrínseco, foi interpretado pelos alunos. Esse é um conceito que é bastante abstrato, pois não há uma analogia clássica que consiga satisfazer qual é realmente a sua representação. Por falta de uma outra nomenclatura, o termo Spin (girar) traz ideias errôneas sobre essa propriedade.

Apesar de, para modos explicativos, ainda serem utilizados exemplos de planetas e sistemas com rotação, nada se compara a essa propriedade das partículas elementares. As partículas não possuem forma concreta são, simplesmente, defletidas por campos magnéticos. Essa “rotação” não muda e só pode assumir duas possíveis orientações. É uma noção visualmente abstrata (TAVEL, 1999).

Nesse sentido, ao observarmos as respostas disponíveis no quadro acima, fica evidente que, apesar de ainda haver alguns equívocos em relação ao momento angular de uma partícula subatômica, em sua maioria, a ideia é internalizada de maneira satisfatória, não apresentando confusões sobre analogias clássicas.

Quadro 15 - Questão 4 do pré-teste e 14 do pós-teste com as respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
O que são e como são representados os orbitais atômicos?	<p><i>“Minha visão ainda é muito apegada a concepção clássica de átomo”</i></p> <p><i>“Orbitais atômicos são regiões do espaço ao redor do núcleo de um átomo, onde é provável que um elétron seja encontrado”</i></p> <p><i>“Não tenho uma ideia clara”</i> <i>“As órbitas são “fixas””</i></p> <p><i>Em branco (2)</i></p>
PÓS-TESTE	RESPOSTAS
O que são e como são representados os orbitais atômicos? Sua concepção mudou?	<p><i>“A visualização feita através do trabalho auxiliou na construção clara de uma imagem dos orbitais atômicos como sendo a representação dos estados da função de onda”</i></p> <p><i>“Mudou um pouco sim, não imaginava tão claramente a nuvem de probabilidade no átomo”</i> <i>“Entendi que os orbitais mostram uma região onde o elétron pode estar (mas não é a posição exata)”</i> <i>“Com os novos estudos ficou claro o que significa a probabilidade da posição do elétron no orbital que se encontra”</i></p> <p><i>Em branco (2)</i></p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

O quadro acima apresenta a questão 4, análoga à questão 14 do pós-teste. O objetivo das duas questões foi o de entender o que os alunos compreendiam sobre os orbitais atômicos e se esse conhecimento se modificou após as aulas.

A partir das respostas dadas pelos acadêmicos, foi possível conferir se o entendimento clássico de um átomo ainda estava presente, mesmo após todo o estudo moderno sobre o átomo. Sabemos que, por motivos didáticos, o modelo atômico é representado de forma similar a um sistema solar, porém isso não condiz com a realidade. O modelo aceito, atualmente, interpreta o átomo como não tendo órbitas, mas pontos de possibilidade, de densidade probabilística, onde o elétron pode se encontrar (PRODUTO EDUCACIONAL, 2023, p. 17-24). Efetuadas inúmeras medições, a forma dos orbitais fica evidente. Esses são os conceitos que as questões buscaram analisar.

Portanto, observado o quadro 15, é evidente a evolução dos licenciandos sobre o átomo. A maioria dos alunos ainda estava presa à ideia clássica de modelo atômico e, após os vários encontros, podemos observar que sua percepção mudou, crescendo o conhecimento sobre os

números quânticos em conjunto ao estudo de probabilidades, que possibilitam compreender a forma cientificamente aceita dos orbitais.

### 5.3.1.1 Análise das questões de percepção da proposta contidas no pré-teste e no pós-teste

Nessa seção, busca-se analisar a recepção, caminho, aprovação e dificuldades trilhadas e enfrentadas pelos alunos expressas em questões aplicadas antes e depois dos encontros. Os quadros 16 a 21, a seguir, retratam a relação entre o pré e pós-teste nesse âmbito.

Quadro 16 - Questão 5 do pré-teste e 15 do pós-teste com as respostas

<b>PRÉ-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Você tem interesse pelo aprendizado da teoria quântica? Por quê?	<p>“Muito. Porque a quântica nos faz acreditar no incrível, no impossível e no incerto para os porquês de tudo. E não somente no Universo externo a nós em expansão, mas também no interior de cada partícula”</p> <p>“Médio. Acho muito interessante o assunto, porém fico um pouco atrás por causa da matemática”</p> <p>“Médio. É um assunto que chama a atenção, porém é abordado de maneira mista não didática em livros”</p> <p>“Médio. Acho interessante o estudo teórico da teoria quântica, mas quando a matemática entra, me desanima”</p> <p>“Médio. Pois existem diversas outras coisas que não sei”</p> <p>“Muito. É legal, uma área relativamente nova e de destaque na pesquisa”</p>
<b>PÓS-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Você acredita que tendo essa parte mais avançada no curso de licenciatura em Física, promove seu interesse para expandir seus conhecimentos com novos e mais avançados conteúdos?	<p>Sim (5)</p> <p>Não (1)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

No quadro acima, apresentam-se as questões 5 do pré-teste e 15 do pós-teste. Elas têm como objetivo identificar o interesse dos alunos sobre a MQ e se este se modificou após a aplicação do produto educacional.

Observamos que, antes das aulas, todos os licenciandos tinham um grau de interesse sobre a teoria e que esse interesse era motivado pelo desejo em aumentar seu conhecimento. Com base nas respostas do pós-teste, podemos identificar que a maioria dos alunos mantiveram o interesse e, como consequência, se sentem confiantes em continuar os estudos em áreas mais avançadas da Física. A experiência adquirida, diante de novos acontecimentos, se deve à falha perante situações novas e a posterior construção desse conhecimento, aprimorando conceitos para que se moldem ao conteúdo novo. Como cada aluno é diferente um do outro. Fica claro

que nem todos seguem o mesmo caminho e têm o mesmo interesse. Porém, aqui, podemos ver que, no caráter individual, o conteúdo conseguiu ser significativa para cada um (KELLY, 1991).

Quadro 17 - Questão 6 e 7 do pré-teste e 16 do pós-teste com as respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
Você possui algum conhecimento sobre a teoria quântica? Quais?	<p>“Sim. Relatividade geral e princípio da incerteza”</p> <p>“Sim. A parte que mais interessa é a Teoria da Incerteza de Heisenberg”</p> <p>“Sim. Que se trata de quantidade, quantificação, estudo das menores partes do Universo”</p> <p>“Sim. O básico, mas mais no básico de Física moderna. Porém, não sei nada aprofundado”</p> <p>“Sim. Sobre as teorias de Schrödinger, entre outros cientistas, modelo padrão e efeito fotoelétrico.</p> <p>Não (1)</p>
Como você caracteriza o nível desse conhecimento?	<p>Médio (2)</p> <p>Baixo (3)</p> <p>Nenhum (1)</p>
PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Você achou interessante aprofundar seu conhecimento nessa parte da mecânica quântica?	<p>Muito (4)</p> <p>Médio (1)</p> <p>Pouco (1)</p>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

As questões 6 e 7 do pré-teste, semelhantes à questão 16 do pós-teste, apresentadas no quadro 17, representam perguntas de caráter individual, que buscam entender se os licenciandos possuem algum conhecimento prévio, como eles caracterizam o nível desse conhecimento e, posteriormente, identificar se conseguiram aprofundá-lo.

Analisando as respostas, quase todos os licenciandos possuíam algum conhecimento sobre a teoria quântica, sendo o nível desse conhecimento entre médio e baixo, o que é esperado, já que ainda não haviam estudado esse conteúdo por completo. Com isso, após as aulas, vemos que, mesmo com pouco conhecimento sobre a teoria, isso não foi fator decisivo no interesse e empenho dos alunos, sendo a maioria deles satisfeita em se aprofundar no conteúdo, agregando ainda mais na construção do seu conhecimento.

Quadro 18 - Questão 8 do pré-teste e 17 e 18 do pós-teste com as respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
Você julga importante um aprendizado mais prático (matemático) da teoria quântica?	<p>Muito (2)</p> <p>Pouco (3)</p> <p>Não (1)</p>
PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Você acha que um estudo teórico sobre as implicações da teoria quântica, relacionando os conceitos matemáticos fundamentais, proporciona um entendimento mais profundo de como a teoria funciona?	<p>Bastante (1)</p> <p>Sim (4)</p> <p>Pouco (1)</p>

<p>O que você achou dessa abordagem mista entre discussões e aplicações matemáticas da teoria quântica?</p>	<p><i>“Foi interessante e reforçada, não houve muita aplicação depois do que foi visto, por falta de tempo, mas creio que se tivesse sido aprofundado e dado continuidade com o estudo, tudo o que foi visto estaria bem fixado na memória, o que, infelizmente, não ocorreu, pois no meu caso, como tenho grande dificuldade com a matemática, percebo que há inúmeras coisas que já não me recordo mais, mas lembro de que no momento da explicação consegui absorver e entender o que estava acontecendo nos cálculos e o que se estava calculando e como estava-se calculando”</i></p> <p><i>“Acho interessante, a matemática é capaz de nos mostrar a aplicação de algo que parece muito distante, contudo, ela pode surtir efeito amedrontador, visto que a matemática por trás do desenvolvimento quântico das questões pode ser complexo e dessa forma gerar confusão na parte teórica também”</i></p> <p><i>“Por vezes, me deixava confusa”</i></p> <p><i>“A abordagem mista entre discussões e aplicações matemáticas é boa”</i></p> <p><i>“Ótima e necessária, acho importante além de mostrar o formalismo matemático, principalmente saber interpretar essas fórmulas e compreender melhor os fenômenos da MQ, ainda mais por ser um tema de difícil compreensão se não for debatido entre professor e alunos”</i></p> <p><i>“Motivadora”</i></p>
---	--

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

No quadro 18, estão as questões 8 do pré-teste e 17 e 18 do pós-teste. Essas questões tentaram reconhecer se a mesclagem entre teoria e aplicação foi efetiva, através do ato de deixar os alunos descobrirem e tentarem resolver os problemas por conta própria, tendo professor como mediador.

Observamos que, num momento anterior aos encontros, as respostas estavam mistas, sobre a ideia de um estudo mais prático da teoria quântica. Porém, após as aulas, fica claro que os alunos concordam que essa abordagem proporciona um aprofundamento melhor da teoria, assim como, despertou mais interesse e motivação para o estudo. Em alguns casos, ainda seria necessário mais tempo para poder desenvolver melhor as habilidades individuais. Porém, isso já serve de exemplo de como uma futura aula pode ser organizada. Em outros casos, é possível identificar que o aluno tinha seu conhecimento prévio bem ancorado, o que possibilitou um entendimento ainda maior do conteúdo, conseguindo transpor e adaptar para o novo conhecimento, assimilando os conceitos teóricos e matemáticos durante as aulas. Por meio da verificação dessa progressão de conceitos ancorada na relação entre o novo conhecimento e aqueles já existentes na estrutura cognitiva dos estudantes, é possível fazer aqui a inferência de que evidenciou-se indícios de aprendizagem significativa (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

Quadro 19 - Questão 9, 10 e 11 do pré-teste e 19, 20 e 21 do pós-teste com as respostas

<b>PRÉ-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Como você caracteriza seu conhecimento sobre números complexos?	<i>Médio (3)</i> <i>Pouco (2)</i> <i>Nenhum (1)</i>
Como você caracteriza seu conhecimento sobre o estudo de probabilidades?	<i>Médio (3)</i> <i>Pouco (2)</i> <i>Nenhum (1)</i>
Como você caracteriza seu conhecimento sobre a compreensão e resolução de Equações Diferenciais Ordinárias?	<i>Médio (4)</i> <i>Pouco (1)</i> <i>Nenhum (1)</i>
<b>PÓS-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Quanto aos problemas matemáticos, vimos que demandam um bom domínio de cálculo diferencial e integral. A partir do seu conhecimento sobre cálculo, a matemática trabalhada no material apresentado se mostrou complexa ou fácil de acompanhar, como na resolução de problemas com diferentes formas de EDOs?	<i>Um pouco complexo, mas nada impossível de compreender (4)</i> <i>Muito complexo, difícil de acompanhar (2)</i>
Você achou que fez diferença ter os exercícios descritos passo a passo no material?	<i>Sim, fez diferença (5)</i> <i>Não mudou nada (1)</i>
Você acha que as relações e resgates que o material traz sobre conceitos matemáticos vistos, às vezes, até no ensino fundamental, sobre probabilidades, números complexos, trigonometria, etc., te ajudaram a construir um raciocínio mais claro sobre o funcionamento e interpretação dos cálculos na mecânica quântica?	<i>Bastante (2)</i> <i>Sim (3)</i> <i>Não (1)</i>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

O quadro acima teve o intuito de evidenciar os conhecimentos matemáticos dos licenciandos, em conteúdos específicos de números complexos, probabilidades e cálculo diferencial e integral. Essa análise se deu por meio da comparação entre as questões 9, 10 e 11 do pré-teste e as questões 19, 20, 21 do pós-teste. Além disso, a partir da análise das respostas dadas a essas questões, buscamos inferir sobre o êxito da aplicação do produto no que tange esses conteúdos.

A partir da análise das respostas do pré-teste contidas no quadro 19, é possível perceber que os alunos possuíam um nível de conhecimento adequado para o que o material didático requisitava, com a maioria tendo um bom entendimento nos três conteúdos indagados. De qualquer maneira, o material apresenta um capítulo dedicado à revisão de operações com números complexos e probabilidades, sendo a parte de cálculo revisitada dentro dos próprios exemplos e na resolução dos problemas visando sanar qualquer dificuldade.

Quadro 20 - Questão 12 e 13 do pré-teste e 22, 23 e 24 do pós-teste com as respostas

PRÉ-TESTE	RESPOSTAS
Você julga importante aprofundar o estudo de conteúdos de caráter mais complexo na licenciatura?	Muito (4) Pouco (2)
Qual o seu interesse em aprender mais sobre a teoria quântica?	Muito (3) Médio (3)
PÓS-TESTE	RESPOSTAS
Você teve grandes dificuldades na compreensão do conteúdo?	Sim, na parte teórica (2) Sim, na parte matemática (2) Um pouco em ambas, mas deu pra compreender (2)
A partir das novas nomenclaturas apresentadas no material como: autofunção, autoestado, autovalor, etc.; você acha que esse material oferece uma explicação fácil de seguir?	Sim (3) Meio a meio, consigo entender, mas é complicado (2) Não (1)

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

Quadro 21 - Questão 12 e 13 do pré-teste e 22, 23 e 24 do pós-teste com as respostas

Dentre todos os conceitos abordados nas aulas, quais foram os mais fáceis e os mais complicados de compreender? Você acha que o material conseguiu explicá-los de forma concisa?	<p>“Quando começamos a ver novas nomenclaturas, isso ficou complicado pra mim, e indo revisando alguns conceitos de cálculo também ajudou a compreender mais tranquilamente”</p> <p>“Fáceis: Comportamento ondulatório. Complicados: Operadores do momento angular, a Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas”</p> <p>“A partir da introdução matemática dentro do produto, tudo se tornou mais complexo pra mim, enquanto a matemática estava próxima da física, abordando equação de onda e função de onda, estava de boa. Ao iniciar uma parte mais matemática, como operadores, autovalores, etc., se torna mais abstrato e longe da realidade, mesmo assim o produto se mostra eficaz ao explicá-lo de modo intuitivo através de uma explicação detalhada menos foçada nos formalismos matemáticos”</p> <p>“Os conceitos que compreendi com mais facilidade foram os apresentados nos primeiros capítulos, a partir do capítulo 5 foram apresentados muitos novos conceitos, mas eles foram explicados de forma compreensiva, o material auxiliou bastante”</p> <p>“MQ é, num geral, complexa para compreender, logo os pontos mais fáceis foram com certeza a teoria das partes básicas da MQ”</p> <p>“Da parte de autovalores pra frente começou a ficar complexo”</p>
--	---

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

Por meio da análise das respostas dadas às questões contidas no quadro 20, buscou-se inferir acerca do interesse e importância dadas pelos acadêmicos acerca do estudo da MQ, assim como quanto as dificuldades enfrentadas em relação ao conteúdo em geral. Também, buscou-se evidenciar elementos relacionados ao entendimento e aceitação do material proposto (produto educacional).

Nesse contexto, observamos por meio das respostas dadas no pré-teste que, além de os alunos terem interesse em aprender mais sobre a MQ, a maioria entende como parte importante do aprendizado o aprofundamento de conteúdos mais complexos na licenciatura, o que facilitou a inserção deste material didático.

Em um segundo momento, podemos ver que eles ficaram bem divididos quanto às dificuldades enfrentadas, seja na parte teórica, matemática, ou em ambas. Além disso, a abordagem de novas nomenclaturas em conjunto com uma aplicação mais complexa do conhecimento sobre matemática, exigiu uma reestruturação dos saberes individuais, pois no que

se pôde perceber, dificulta o aprendizado. Isso demonstra que, em um cenário perfeito, seria ideal trabalhar ainda mais a base matemática e filosófica dos licenciandos, para que, ao se depararem com conteúdos mais exigentes, como o apresentado, tenham mais segurança e domínio, o que pode gerar possibilidade de uma construção mais efetiva do conhecimento. De acordo com Piaget, o processo de construção do conhecimento se dá por meio de um equilíbrio e desequilíbrio, ou seja, as relações primárias sobre os conhecimentos gerais se chocam com o novo ambiente, o novo conteúdo, demandando mais de cada aluno (MOREIRA; OSTERMANN, 1999, p. 13). Podemos, facilmente, estabelecer uma importante relação entre essas ideias e os dados produzidos durante a aplicação do produto educacional aqui apresentado.

É apontado, também, que apesar das dificuldades, o produto educacional conseguiu, para a grande maioria dos licenciandos, sanar as dúvidas e esclarecer questões específicas no decorrer das aulas, na resolução e discussão dos problemas e teorias propostas .

Quadro 22 - Questão 14 do pré-teste e 25 do pós-teste com as respostas

<b>PRÉ-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Dentro da sua percepção, você acha que dominar um conteúdo mais complexo refletirá positivamente na sua autoconfiança, na aprendizagem de outros conteúdos?	<i>Muito (5)</i> <i>Pouco (1)</i>
<b>PÓS-TESTE</b>	<b>RESPOSTAS</b>
Você acredita que tendo essa parte mais avançada no curso de licenciatura promoveu seu interesse para expandir seus conhecimentos, com novos e mais avançados conteúdos?	<i>Sim (5)</i> <i>Não (1)</i>

Fonte: Dados da pesquisa, 2022.

Por fim, apresentam-se os dados referentes às questões 14 do pré-teste e, similar, 25 do pós-teste. A partir destas questões finais, tentamos captar algo mais pessoal de cada aluno, ou seja, se um estudo mais rigoroso, mais avançado do que normalmente se vê em uma licenciatura, reflete positivamente no emocional dos licenciandos, na perspectiva para seu futuro profissional e nas suas ambições acadêmicas.

Analisando as respostas dadas, no quadro 21, fica evidente que, praticamente, todos os alunos acreditam que expandir de maneira específica nesse conteúdo, estudando a fundo, levantando questões complexas, desenvolvendo um raciocínio além da zona de conforto, pode trazer consequências positivas em sua vida. Isso pode ser evidenciado no resultado do pós-teste, onde fica evidente que esse tipo de estudo aprofundado trouxe condições positivas para a maioria dos estudantes. A partir disso, podemos inferir que o ato de estudar um assunto de maneira a colocar o indivíduo como protagonista da construção do seu saber, utilizando um

material que tenta ser um mediador, em conjunto com as interações sociais no âmbito acadêmico, proporcionou um ambiente ideal para a construção do conhecimento (MOREIRA; OSTERMANN, 1999).

### 5.3.2 *Diário de Bordo*

Para aumentar a riqueza e diversidade na produção de dados para a pesquisa foi utilizado o diário de bordo. A ideia é poder trazer mais elementos à discussão, não limitando o estudo somente à análise dos questionários. O diário de bordo se constitui de anotações feitas pelo pesquisador sobre os momentos, atividades e processos realizados durante as aulas, contendo, às vezes, opiniões e expressões dos alunos perante a aplicação do produto.

A análise das anotações do diário de bordo teve como aspecto norteador as relações entre material/estudante/professor, buscando por evidências referentes às potencialidades e fragilidades da proposta, servindo como complemento aos dados produzidos por meio da análise dos questionários. Com base nos aspectos norteadores, será possível identificar se houve interação entre os próprios alunos, entre os alunos e o professor e entre os estudantes e o material. Além disso, as dificuldades e obstáculos encontrados ao longo do processo de aplicação serão investigadas através de relatos retirados do próprio diário de bordo, bem como a aceitação do material didático como parte do processo de construção do conhecimento. Para tal análise, serão selecionados alguns trechos do diário de bordo referentes a cada encontro que possam ser reveladores desses elementos.

No primeiro encontro, apresentamos aos alunos o que seria trabalhado em toda a sequência de aulas seguindo com a aplicação do questionário pré-teste. A seguir, podemos ver um trecho das anotações referentes a essa aula extraídas do diário de bordo:

*Após a interação inicial, foi dado o questionário pré teste. Não houve muitas dúvidas em relação às perguntas e seu conteúdo. Do que transpareceu, todos estavam empolgados para iniciar essa etapa. Em seguida, foi iniciado o conteúdo, tratando sobre a derivação da ES através de suposições e postulados baseados em experimentos. No decorrer dessa primeira parte, os alunos tiveram bastante presença, demonstrando entender o que estava sendo passado, já que estávamos trabalhando, ainda, com bastante Física clássica. O que surpreendeu foi a facilidade da turma de trabalhar os conteúdos de cálculo, compreendendo cada passo dado até chegarmos na ES derivada.*

Podemos ver, inicialmente, que a proposta foi bem aceita por quase todos e que a turma estava ansiosa para iniciar esse estudo. Sendo que, inicialmente, tiveram poucas dúvidas levantadas sobre as questões, muitas das quais eram sobre não saber com certeza a resposta para

algumas das perguntas, sendo uma delas sobre a definição de um orbital atômico, em termos atuais. O engajamento dos alunos se demonstrou muito satisfatório, sempre que um novo passo era calculado estavam aptos a conferir e participar nas deduções. Com isso, foi possível perceber a facilidade de trabalharem os conteúdos de cálculo diferencial e integral, importante no decorrer das aulas seguintes.

Em um segundo momento, após efetuada a derivação da ES, passamos a definir o significado de uma função de onda, restrições e o processo de normalização. Abaixo, segue um trecho da aula, retirado desse momento:

*Para finalizar o encontro, discutimos três aspectos fundamentais para analisar uma função da onda. O processo de apresentar como a função de onda precisa ser normalizada para que ela possa nos dar resultados reais gerou, de início, uma certa dúvida nos alunos. Porém, quando foi demonstrado que essa restrição enormalização eram cálculos de probabilidade e podiam ser calculadas utilizando osexemplos do capítulo matemático do produto, tudo ficou mais claro. Eles compreenderam melhor ainda enquanto discutíamos a parte teórica desses conceitos, que explicavam a análise estatística de Born.*

Aqui, é possível observar que, por enquanto, os alunos conseguiram continuar acompanhando o conteúdo, mesmo com alguns obstáculos. Essa dificuldade foi evidenciada mais na parte da compreensão teórica do que matemática. É interessante apontar que, já de início, a revisão matemática do material se tornou oportuna nessa situação já que, quando estudamos a normalização, era necessário recapitular os conceitos de números complexos e probabilidades o que, inicialmente, se mostrou como dificuldade para o grupo. Porém, fica evidente, também, que uma explicação teórica-histórica sobre os cálculos efetuados foi importante na adequação do conteúdo apresentado. No geral, como sendo o primeiro contato aplicado da turma com esse conteúdo, eles se demonstraram capazes, motivados e, de certo modo, o grau de aceitação foi quase geral.

No segundo encontro, trabalhamos, exclusivamente, com a resolução do problema de uma partícula presa em um poço de potencial tridimensional. Abaixo, se apresenta um trecho do andamento da aula:

*Inicialmente, foi apresentada a proposta de trabalharmos um problema em três dimensões e isso gerou preocupação por parte dos alunos que perguntaram se não seria mais fácil começar por uma dimensão. Foi explicado que o problema era simétrico e, por isso, o que seria feito em uma dimensão serviria para as outras. Isso gerou alívio e atraiu mais a atenção deles.*

Fica claro, analisando o trecho a cima, que os estudantes possuíam um certo bloqueio quando se trata de conteúdos que podem ser mais exigentes. Porém, esse receio foi se diluindo à medida que foram se colocando as proposições referentes ao problema a ser resolvido. Em um segundo momento, iniciamos as deduções matemáticas do problema, com a participação ativa dos alunos. O seguinte trecho retrata esse momento:

*Enquanto resolvíamos a ES para esse problema, os alunos mostraram facilidade ao trabalhar com a matemática que envolvia EDOs e alguns aspectos que não eram lembrados foram respondidos pelo próprio material e a consulta com os próprios colegas. Nesse ponto, os alunos expressaram verbalmente que era muito bom não precisar perder tempo pesquisando como resolvia o cálculo, era só olhar as dicas escritas no material. O que gerou uma interação maior, entre os estudantes e o professor, foi ao final da aula quando discutimos as implicações e realizamos pequenos experimentos mentais sobre como a partícula se comportaria em diferentes cenários. Foi possível identificar em alguns estudantes, que o ato de relembrar conceitos fáceis e aplica-los a esse conteúdo deu um certo grau de conforto e segurança no domínio do conteúdo.*

Esse problema foi utilizado como um meio de fixar as informações dispostas até o momento, desde os primeiros conceitos sobre o surgimento da ES até a aplicação de ferramentas de cálculo já conhecidas. Observando o trecho acima, extraído do diário de bordo, a turma apresentou bastante facilidade na manipulação algébrica nas diferentes situações matemáticas impostas. Sendo assim, o quesito dificuldade aparentou ser mínimo nesse encontro. A respeito da interação, este foi um ponto forte da aula, não só na resolução do problema, mas, também, na discussão teórica sobre ele, principalmente, na parte que encontramos as funções da energia. Essa interação se estendeu ao professor e não ficou focada entre os alunos. Destacamos a importância dessas inferências, pois como se trata de um capítulo do produto pensado com o objetivo de dar base para os próximos conteúdos é fundamental a sua compreensão mais apurada.

No terceiro encontro, o conteúdo se tornou mais específico, sendo que se iniciou apresentando alguns conceitos fundamentais da MQ, os postulados gerais que formam a base de toda a teoria, novas nomenclaturas e simbologias. A seguir, apresenta-se um trecho retirado do diário de bordo:

*A apresentação do primeiro postulado foi bem recebida pois já havíamos visto o conceito de probabilidade e representação física da função de onda[...]. A introdução do segundo postulado foi muito interessante, os alunos demonstraram mais interesse nesse postulado do que nos outros, pois com ele finalmente entenderam como é possível retirar informações, dados físicos, da função de onda. A princípio, os novos conceitos a respeito dos operadores foram bem recebidos, assim como as regras de operação conseguiram contrastar com alguns conhecimentos que eles já tinham de mecânica ondulatória[...]. Conceitos como hermiticidade, linearidade e não*

*linearidade também foram bem recebidos, no qual as analogias com o cálculo diferencial fizeram com que a compreensão fosse melhor absorvida. O terceiro postulado foi um de dois que tivemos mais dificuldades em relacionar as nomenclaturas com o propósito de cada uma delas. Nesse postulado, foi apresentado os conceitos de autoestados, autovalores e autofunções. Porém, realizando alguns exemplos e debatendo os resultados, ficou evidente a relação entre os nomes e suas funções para com a função de onda, de como a ação de operar em uma função de onda gera essas novas propriedades com novas nomenclaturas. O segundo postulado que exigiu mais habilidades de compreensão foi o postulado 4, onde foi introduzida brevemente o significado de superposição, algo que ficou meio solto, infelizmente, da compreensão da turma. Não foi possível trazer esse conceito para termos que eles compreendessem completamente. Outro ponto que tivemos que nos apropriar dos conhecimentos que haviam sido construídos anteriormente, sobre probabilidades e significados físicos da função de onda foi, nesse mesmo postulado, o de como inserir os operadores na função de onda para retirar o significado físico dela. O ponto de dificuldade foi de relacionar o quadrado da função de onda com qual operador quisesse ser usado, além da posição que ele deveria ocupar dentro da equação. A ideia de que a ordem de multiplicação tem que ser mantida é algo contraditório com o que se aprende. Esse foi um ponto que foi identificado um pouco de dificuldade. No quinto postulado, os alunos já estavam acostumados com a equação de Schrödinger, então, foi bem tranquila a apresentação dela como um postulado fundamental.*

Perante análise do trecho acima, podemos evidenciar três aspectos. Em primeiro lugar, a dificuldade maior se demonstra na acomodação dos novos conceitos e métodos matemáticos distintos, como na ordem de como um operador opera em uma função e na assimilação das novas nomenclaturas, como autovalores, autoestados e autofunções. Essa dificuldade é, também, demonstrada na análise dos questionários realizada na seção anterior. Em segundo lugar, perante essas dificuldades, podemos observar que a intervenção do professor e estímulo ao debate, conseguiu amenizar a maioria das dúvidas. Isso demonstra, novamente, a importância da interação no ambiente da sala de aula. Em terceiro lugar, apesar de na maioria dos postulados, questões de revisão matemática e questões linguísticas o produto se demonstrar eficaz como material de apoio, ele ainda parece não ter sido eficiente em relacionar alguns aspectos, como no caso da superposição. Isso salienta que ainda existem melhorias que podem ser feitas no produto e que ele deve ser tratado como um material de apoio, no auxílio dos estudos e na construção de aulas, e não como único material de consulta.

Em um segundo momento da aula, foi apresentado aos alunos o formalismo de Paul Dirac, o processo de comutação entre operadores e, por fim, foram aplicados todos esses conceitos, construindo a ES para estados estacionários. Abaixo, se dispõe um trecho referente a esse momento da aula:

*[...] foi introduzida a notação de Dirac, momento em que os alunos demonstraram interessante no fato de ser possível trabalhar com todos os cálculos sem escolher por qual método resolver a ES. Em seguida, os conceitos de ortogonalidade, ortonormalidade e completude da função de onda foram apresentados. Apesar dos novos nomes, essa parte foi fácil e compreensível na visão deles, sendo que elas foram apresentadas com recursos matemáticos, possibilitando a visualização do que estava sendo dito. A parte que foi dita como mais interessante foi a comutação entre os operadores. Alguns alunos eram mais inclinados na parte teórica filosófica e outros na parte matemática. Essa seção conseguiu atrair o interesse de ambos os grupos por demonstrar matematicamente algumas implicações filosóficas e realistas sobre a teoria quântica que se estendeu em uma conversa bem proveitosa. Por fim, ao trabalharmos com a ES para estados estacionários, relacionamos tudo o que foi visto até então. Os alunos trabalharam em conjunto com o professor, utilizando os postulados para isolar a parte temporal da ES. Foi possível observar o empenho dos estudantes ao conseguir relacionar e aplicar os conceitos aprendidos nesse problema prático.*

Aqui, observamos que o resgate dos conceitos vistos nos outros encontros e, até mesmo, em outros momentos da vida acadêmica dos estudantes, foi relevante na construção desse novo conhecimento. Pode-se destacar essa utilidade na discussão da comutação de operadores. Esse ponto da aula desencadeou um debate, no qual os alunos ponderaram sobre as questões filosóficas do princípio da incerteza e a prova prática vista na não comutação dos operadores da posição e do momento. Essa parte da aula se demonstrou muito produtiva em conjunto com a aplicação do conteúdo no equacionamento da ES para estados estacionários. Foi aproveitado o interesse mútuo das discussões para propor a resolução conjunta da equação, montando a ES a partir da construção do hamiltoniano e isolando a parte temporal utilizando os conhecimentos de isolamento de variáveis em cálculo diferencial. Esse foi um dos encontros que houve mais discussão e interação, tanto entre os alunos quanto entre os mesmos e o professor, assim como em relação ao uso do material.

No quarto encontro, foi trabalhado, exclusivamente, o momento angular e, assim como seus operadores, autovalores dos operadores e o Spin. Nesse encontro, foi realizada uma breve recapitulação sobre análise vetorial e introduzidas novas nomenclaturas e conceitos, sendo alguns desses conceitos difíceis de trabalhar por meio de analogias. Vejamos, abaixo, um trecho da aula, retirado do diário de bordo, que retrata o encontro:

*Foi abordado o porquê da opção de trabalhar o momento angular orbital antes das formas dos orbitais, argumentando que para que haja uma compreensão mais íntima de como se dá a organização dos orbitais atômicos, em suas formas, é importante saber de onde vem as nomenclaturas e simbologias que os definem. Na parte da análise vetorial, quase não ficamos muito tempo, porque praticamente todos já tinham uma boa base desse conteúdo, mas serviu como um lembrete do que iríamos fazer. Nessa análise, foi deixado encaminhado uma maneira de escrita dos componentes vetoriais finais para serem usados como base na análise dos vetores do momento angular. Iniciamos o estudo apresentando uma analogia clássica de momento angular e relacionando com o momento angular quântico. Essa etapa foi*

*bem proveitosa, os alunos já tinham pleno conhecimento sobre o momento angular e essa analogia de transição se desenvolveu com fluidez. Sendo assim, iniciamos o estudo dos operadores e os alunos foram instigados a realizar a transformação do momento angular clássico em momento angular quântico, através das regras de criação de operadores vistos no encontro passado. Com isso, através da discussão do exercício entre eles, conseguiram chegar aos resultados corretos.*

Novamente, a facilidade da turma perante os exercícios matemáticos se demonstrou facilitadora na hora de revisar e introduzir a análise e as analogias do momento angular. No quesito interação, foi possível observar o trabalho em grupo muito bem estruturado na criação dos operadores do momento angular orbital. Eles não demoraram muito para fazer a transformação. A transformação é, relativamente, simples, mas ainda assim tem caráter de aprendizado por estimular a visão de transição entre os dois tipos de Física aplicada. Após essa atividade, verificamos a comutação entre esses operadores. Porém, pelo tempo ser curto, decidimos discutir a comutação através das informações que o material disponha, ao invés de deduzir no quadro. Com isso, ganhamos tempo e, mesmo assim, foi possível compreender o fato de que os operadores não comutam e que só podemos saber com certeza o momento angular total e mais uma componente. Nessa aula, ocorreu uma importante discussão entre aluno e professor sobre o porquê disso, lembrando os conceitos de comutação do encontro passado, sobre o princípio da incerteza e o problema de medição.

Em um segundo momento, finalizamos o encontro com a discussão dos autovalores do momento angular e o Spin. O estudo dos autovalores requisitou mais dos alunos, por possuir ainda mais nomenclaturas e relações matemáticas. Do mesmo modo que anteriormente, foi necessária a simplificação de alguns cálculos demonstrados no material. Podemos ver, no trecho abaixo, como foi a resposta dos alunos perante essa parte do estudo:

*Proseguimos para os autovalores do momento angular. Nessa parte, fomos passo a passo na nomenclatura e nos exemplos das resoluções dos equacionamentos das comutações entre os operadores. Novamente, alguns passos foram pincelados, devido ao tempo e à complexidade. Porém, o caminho seguido foi explanado e agora os alunos possuem uma ideia de onde vem a simbologia, derivada de esféricos harmônicos, e como se deu o surgimento dos números quânticos do momento angular orbital,  $l$  e  $m$ . Nesse processo, o ponto que os alunos expressaram dificuldade foi nos operadores escada e sua função. Isso foi esclarecido quando analisamos, com o auxílio de figuras, o comportamento do elétron nos diferentes estados de uma componente do momento angular. Em seguida, finalizamos o encontro discutindo sobre o momento angular intrínseco, demonstrando que da mesma maneira que fizemos com o momento angular orbital, poderíamos chegar nas mesmas conclusões para o Spin. Essa parte final do encontro foi muito interessante porque, para eles, era a parte mais intrigante, eles possuíam muitas dúvidas a respeito do spin, sendo que é um propriedade complicada de compreender, pois não possui nenhuma analogia clássica, ao contrario do momento angular orbital. Trabalhamos, portanto, brevemente essa parte, demonstrando a quantização da magnitude do espaço e momento angular do Spin, o que gerou uma resposta positiva dos alunos, que agora entendiam o porquê de existirem os famosos spin up e down.*

Podemos notar que, conforme o conteúdo fica mais exigente, as dificuldades se tornam mais específicas e, mesmo com uma grande quantidade de relações algébricas, poucos foram os momentos em que os alunos tiveram dúvidas que dependiam de uma explicação mais detalhada, sendo os exemplos apresentados no material de grande ajuda. Porém, foi observado no conceito específico de operadores escada, uma dificuldade quase geral da turma, na qual a ideia de construir e destruir demorou um pouco para ser compreendida. Foi necessário regredir um pouco nas explicações, lembrar sobre a comutação de operadores e da construção dos operadores do próprio momento angular. Isso gerou bastante debate, alguns alunos lembravam das coisas de maneira diferente e isso instigou uma conversação que, por fim, conseguiu chegar ao ponto do que, realmente, são os operadores escada e o porquê de utilizá-los. Esse encontro se demonstrou desafiador, tanto aos alunos quanto ao professor/pesquisador, principalmente, devido a essas dúvidas pontuais.

Ao término do encontro, destacamos que a discussão do momento angular intrínseco foi muito proveitosa, pois a grande maioria dos alunos possuíam dificuldades em compreender o que realmente é o Spin. Seguindo os mesmos passos do momento angular orbital, foi apresentado o momento angular do Spin e como é o comportamento de uma partícula com Spin. Pode ser que o conceito não tenha sido esclarecido definitivamente, já que essa propriedade é bem abstrata. Porém, os alunos possuem uma visão mais clara do que ele é, como representá-lo e o porquê das restrições impostas a ele.

No quinto encontro, foi aplicado todo o conhecimento adquirido até então na dedução da ES estacionária para um átomo de hidrogênio. Essa última aula demandou bastante concentração e atenção aos detalhes no decorrer da dedução matemática. Iniciamos com a ES que já havíamos deduzido no outro encontro e a transformamos em coordenadas esféricas. Esse processo, por ser trabalhoso e não necessariamente o foco da aula, foi apenas demonstrado, sem ser feita a dedução. Na sequência, foi trabalhado as aplicações e seu significado. O trecho abaixo extraído do diário de bordo traz algumas considerações sobre essa aula.

*Foi apresentada a conversão do laplaciano em coordenadas esféricas. Mas, não a efetuamos, por ser um processo elaborado e trabalhoso. Porém, é necessário o entendimento de como ele é derivado, e isso foi feito através de um exemplo relacionando as coordenadas cartesianas com as esféricas polares. A partir disso, aplicamos novamente, o exercício de separação de variáveis, separando a parte radial da parte angular. Esse processo foi bem trabalhoso para os alunos e, por isso, depois de um tempo para tentarem resolver em grupo, fizemos todos juntos, de uma maneira mais direta, já que eles estão bem familiarizados com essa técnica. Com isso, após separarmos as duas partes, por meio de uma constante, que já antecipando o resultado tem aquela forma peculiar, a qual explicamos o porquê de em muitos cálculos que são vistos em livros didáticos são tomadas essas medidas e como elas facilitam e tornam todo o processo um pouco mais didático. Sendo assim, novamente*

*trabalhamos com a separação de variáveis para resolver a parte angular. Nessa parte, para resolver as equações mostramos que aparecem polinômios de Legendre e funções associadas de Legendre, discutimos que elas aparecem naturalmente do processo de equacionamento da função de onda e que não são super complexos de entender, são polinômios envolvendo senos e cossenos. No entanto, vimos que com a ajuda deles podemos determinar alguns dos primeiros harmônicos esféricos, com o auxílio dos números quânticos  $l$  e  $m$ , os quais foram estudados no encontro anterior e, agora, relembramos, o que fez com que essa parte fosse bem menos complicada, já que os alunos tinham noção de onde estavam vindo essas simbologias.*

Na primeira parte da aula, fica clara a facilidade dos alunos em trabalhar com métodos conhecidos e constantemente lembrados de cálculo. Foi possível observar, também, uma maior confiança na hora de resolver as etapas e atividades propostas e mais engajamento entre os próprios alunos na discussão do conteúdo. A maioria não havia ouvido falar sobre polinômios de Legendre, o que causou certa incerteza na hora da explicação. Porém, ao entenderem que se tratam de funções trigonométricas e que não iríamos desviar o assunto e deduzir eles, o clima da turma melhorou. Compreenderam que esses polinômios surgem do equacionamento e são uma ferramenta necessária para a resolução desse problema. Aqui, é interessante observar que o fato de ter sido feito um estudo do momento angular previamente ajudou os estudantes a não se sentirem perdidos, como alguns expressaram verbalmente durante as aulas. Conseguiram relacionar e aplicar os números quânticos aprendidos nas deduções trabalhadas anteriormente.

Em um segundo momento, foi encontrada a equação que descreve o movimento do elétron no átomo de hidrogênio. O processo para obter essa equação pode ser observado no trecho abaixo retirado do diário de bordo:

*Após resolvemos a parte radial, foi um processo bem mais simples de acompanhar. A partir de todos esses processos, iniciamos a parte final do material, onde aplicamos as duas soluções, angular e radial na equação de Schrödinger. Assim, substituímos as duas soluções na equação e resolvemos ela. Durante esse processo, houve várias dúvidas na parte onde assumimos limites para encontrar a solução de uma equação, a qual não sabíamos se ia dar certo, então foi um processo de bastante discussão entre todos e, também, houve bastante conversa na parte onde introduzimos a fórmula de recursão. Depois disso, conseguimos chegar, substituindo de volta todas as constantes que introduzimos no decorrer da resolução dos cálculos e obtivemos a fórmula de Bohr. Nessa parte, os alunos ficaram bastante surpresos que fomos capazes de chegar nessa fórmula, cujo Bohr a encontrou muito antes de o método de Schrödinger ser apresentado. Sendo assim, reescrevemos a forma geral das funções espaciais e, nesse processo, para integrar a parte radial, vimos o surgimento de outros polinômios e funções, dessa vez de Laguerre. Por fim, com a equação devidamente substituída e normalizada, chegamos ao fim de todo nosso caminho, com uma função de onda completa que determina os estados possíveis de um elétron em um átomo de hidrogênio.*

Esta última etapa, de unir as duas equações, foi desafiadora. Podemos observar, no trecho acima, que as dificuldades surgiram quando começou-se a assumir valores para os limites sem ter uma ideia certa se iria funcionar. Esse momento foi oportuno para lembrar os alunos que, muitas vezes, em conteúdos como esse que exigem bastante manipulação algébrica, é necessário supor valores e ver se esses valores nos dão resultados favoráveis. Esse processo facilita o cálculo, reduzindo a quantidade de deduções necessárias. Uma parte que gerou bastante discussão foi na fórmula de Bohr, a qual os alunos já haviam visto muito antes, em outras ocasiões. O fato de chegarmos em um assunto mais familiar trouxe mais empolgação à turma. O processo de normalização dessa equação foi demonstrado apenas por partes, já que a ideia principal do que é o processo de normalização já estava bem definida e, infelizmente, não tínhamos tanto tempo disponível. Nesse último momento da aula, a interação e discussão com o professor sobre como o material abordava a resolução dos cálculos foi interessante. Houve momentos que foram feitas críticas sobre a escrita e, por isso, foram tomadas notas e, posteriormente, implementadas as sugestões. Todos esses passos e processos que fizemos, no último encontro, foram finalizados no último momento da aula, quando os alunos puderam visualizar toda a matemática em uma simulação das formas dos orbitais. O trecho abaixo relata esse momento:

*Com o auxílio do programa de simulação, plugamos várias autofunções nele e obtivemos lindas imagens representando as formas dos orbitais. Cada um foi convidado a interagir com o software e, em grupo simular vários outros sistemas possíveis para o elétron em diferentes átomos, não somente o hidrogênio. Os alunos ficaram encantados que foi possível chegar nessas conclusões a partir de métodos e processos matemáticos que eles conhecem e dominam. Mostramos, também, para concluir, experimentos reais conduzidos para determinar uma visualização dessas formas e concluímos que tudo o que havíamos feito estava de acordo com o que é observado experimentalmente. Segundo os alunos, esse último encontro foi um dos mais proveitosos, pois aqui aplicamos todo o nosso conhecimento e vimos o resultado de todo nosso estudo.*

Desse trecho, podemos afirmar que para a maioria dos alunos, o ato final de visualizar e interagir com as formas dos orbitais, valeu todo o esforço. Muitos demonstraram ainda mais interesse pela área e em aprofundar o seu estudo, revisando os encontros e resolvendo algumas dúvidas que não foram respondidas ao longo das aulas. Fica evidente a aceitação majoritária dos encontros e do material, assim como das aulas práticas e expositivas realizadas. Isso é reforçado pelos questionários que foram analisados anteriormente.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A presente dissertação apresenta uma proposta para trabalhar MQ com futuros professores de Física, através de um produto educacional, na forma de um texto de apoio, que toma por referência de organização a TTD, na perspectiva de Chevallard, e se fundamenta em uma perspectiva construtivista. Nos embasamos no paradigma construtivista mais, particularmente, da psicologia cognitiva, que foram apresentadas na dissertação como forma de fundamentar o estudo desenvolvido. O intuito dessa dissertação foi apresentar e analisar um produto educacional voltado ao estudo de um ponto específico do currículo acadêmico da licenciatura em Física, no caso o da MQ. A ideia esteve em contribuir para a área do Ensino de Física apresentado um texto de apoio que pode ser utilizado tanto pelo professor ao preparar as suas aulas, tanto pelo aluno como material de estudo.

Observa-se, no cenário atual, que a aprendizagem, nas licenciaturas em Física, muitas vezes, está voltada à mecânica clássica, possuindo uma parte de Física Moderna, a qual, não raras vezes, está apenas no final do curso, não sendo viável o seu aprofundamento. Pensamos que essa “pouca ênfase” na Física Moderna nos cursos de licenciatura pode acarretar no fato de que o professor saia da Universidade sem se sentir confiante para trabalhar esses conteúdos nas suas aulas no Ensino Médio. Portanto, essa dissertação buscou demonstrar, através da aplicação do produto educacional, as possíveis potencialidades e fragilidades em se trabalhar de maneira aprofundada os conceitos inerentes a MQ em um curso de formação inicial de professores de Física, utilizando um texto de apoio.

O produto educacional se apresenta na forma de um texto de apoio contendo sete capítulos organizados de forma que possam fornecer uma compreensão progressiva dos conceitos inerentes a MQ. O material procura estabelecer uma relação de auxílio entre professor e aluno, através de uma linguagem acessível e várias demonstrações e exemplos dos problemas trabalhados. Apesar de o material poder ser usado em qualquer momento em aulas de MQ, ele foi elaborado com o objetivo de compreender o comportamento do elétron ao redor de um núcleo de átomos do tipo hidrogênio.

A aplicação do produto foi elaborada para ter uma carga horária de 20h, dividida em 5 encontros de 4h aula cada. A aplicação ocorreu com um grupo de estudantes do curso de licenciatura em Física da Universidade de Passo Fundo, durante o turno da noite. Previamente aos encontros, os alunos recebiam o material que seria discutido em aula para que pudessem se preparar. Os encontros apresentavam uma mistura de conversa dinâmica entre o professor e os

alunos, exposição de elementos matemáticos no quadro branco e discussões entre os próprios alunos, além do uso de ferramentas digitais como simulações, *Power Point* e projetor de mídia.

Destacamos que, inicialmente, a maioria dos alunos estava muito interessada em estudar o conteúdo, porém sempre com um certo receio em relação à matemática que estaria envolvida. A desconstrução dessa barreira de receio que eles tinham foi feita gradualmente, em momentos que os alunos percebiam a própria capacidade de compreender os conteúdos abordados e resolver os exercícios propostos. Por fim, nos estágios finais da aplicação, se tornou evidente, na grande parte dos alunos, que o material teve algum impacto neles e que, de alguma forma, contribuiu na construção do conhecimento de cada um. Isso fica mais claro quando se observam os questionários.

O progresso dos alunos, durante a aplicação do produto, foi evidente e isso é observado nas respostas obtidas nos questionários e nas interações descritas na análise do diário de bordo. Vemos, na análise dos questionários, que os alunos tinham apenas uma ideia rasa sobre função e equação de onda, seu propósito e como trabalhar com ela. Até mesmo a concepção dos orbitais atômicos não era concisa, com alguns alunos ainda tendo uma visão apegada às ideias clássicas do comportamento eletrônico. Porém, conforme os encontros iam acontecendo, as dúvidas foram sendo respondidas e conhecimentos foram sendo aprimorados. Novos conceitos foram introduzidos e todos pareciam estar acompanhando o andamento das aulas. Houve muitas conversas produtivas, especialmente nos momentos em que as relações calculadas apresentavam conceitos que eles já tinham contato, com ênfase no princípio da incerteza, nos cálculos de comutação. Isso é observado nas descrições retiradas do diário de bordo do terceiro encontro. Houve, também, dificuldades em alguns estágios da aplicação, especialmente em questões matemáticas. Foi necessário realizar aprimoramentos e mudanças no material para que o conteúdo fosse ainda melhor interpretado pelos alunos, sendo as sugestões dadas em aula muito úteis no desenvolvimento.

É possível ver, na segunda parte da análise dos questionários, que o estudo desse material trouxe implicações pessoais e profissionais para a maioria dos alunos, encorajando o progresso acadêmico e gerando mais confiança no trabalho com conteúdos avançados. Muitos se sentiram mais aptos a trabalharem com os conteúdos “normais” do cotidiano de uma sala de aula de escola, após perceberem a sua capacidade no momento em que o estudo do material proposto ocorreu. Isso comprova que o material tem potencial para servir de apoio para outros profissionais da educação.

A partir das informações disponibilizadas, podemos afirmar que a pesquisa foi um sucesso em termos de engajamento dos alunos e de aquisição de conhecimento. A análise dos

resultados do pré e pós-teste mostrou uma melhoria significativa nas habilidades dos alunos em relação aos conceitos de MQ. Além disso, o diário de bordo descreveu que a maioria dos alunos demonstrou interesse pela área e encantamento com as formas dos orbitais visualizadas com o auxílio do software de simulação.

No entanto, também foram descritas algumas dificuldades, como a falta de tempo para uma aprofundada discussão dos conceitos e algumas dúvidas que não foram totalmente respondidas durante as aulas. Isso indica que a pesquisa ainda tem espaço para melhorias e aprimoramentos.

Em geral, podemos dizer que a pesquisa é válida, pois os resultados apontam para a efetividade da metodologia empregada e a satisfação dos alunos com o processo de ensino.

O produto educacional, apresentado nesta dissertação, não é um curso completo de MQ mas, sim, um material de apoio. Não substitui a preparação de aulas, mas as auxilia. Não substitui outros materiais e livros elaborados especificamente para a área, mas encoraja o estudo deles trazendo, em alguns momentos, definições e explicações mais completas. Entendemos que esse texto não resolve a falta de materiais didáticos de ensino nesta área da Física nem sana todas as dificuldades dos alunos, porém se apresenta como uma importante alternativa para o ensino de MQ, encorajando os estudantes de licenciatura em Física a se aventurarem cada vez mais nesta área tão complexa mas, ao mesmo tempo, tão instigante que é a Física Moderna.

## REFERÊNCIAS

- ABREU, Luiz Carlos de; OLIVEIRA, Márcio Alves de; CARVALHO, Tatiana Dias de; MARTINS, Sonia Regina; GALLO, Paulo Rogério; REIS, Alberto Olavo Advíncula. A epistemologia genética de piaget e o construtivismo. *Revista Brasileira do crescimento e desenvolvimento humano*, [S. l.], v. 20, n. 2, p. 361-366, 2010.
- AUTOVALORES e Autovetores. [S. l.], 2007. Disponível em: <[https://www.mspc.eng.br/dir30/eig\\_val-1.php#end](https://www.mspc.eng.br/dir30/eig_val-1.php#end)>. Acesso em: 20 dez. 2022.
- BARROS, Marina Valentim. Uma proposta didática para o ensino de mecânica quântica nas licenciaturas: a notação de Dirac. 2011. 101 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011. Disponível em: <[http://www.biblioteca.pucminas.br/teses/EnCiMat\\_BarrosMV\\_1.pdf](http://www.biblioteca.pucminas.br/teses/EnCiMat_BarrosMV_1.pdf)>. Acesso em: 12 jan. 2022.
- CHEVALLARD, Yves. La Transposición didáctica: del saber sabio al saber enseñado. 3. ed. [S. l.]: Aique, 2000. v. 1. Disponível em: <[https://nelsonreyes.com.br/LIVRO\\_LA%20TRANSPOSICION%20DIDACTICA.pdf](https://nelsonreyes.com.br/LIVRO_LA%20TRANSPOSICION%20DIDACTICA.pdf)>. Acesso em: 27 nov. 2020.
- FERNÁNDEZ, Carlos Rodríguez; SANTOS, André. Plots of quantum probability density functions in the hydrogen atom. *Wolfram Demonstrations Project*, 20 abr. 2012. Disponível em: <<http://demonstrations.wolfram.com/PlotsOfQuantumProbabilityDensityFunctionsInTheHydrogenAtom/>>. Acesso em: 15 set. 2020.
- FRAZÃO, Dilva. Lev Vygotsky: Biografia de Lev Vygotsky. 10 abr. 2017. Disponível em: <[https://www.ebiografia.com/lev\\_vygotsky/](https://www.ebiografia.com/lev_vygotsky/)>. Acesso em: 28 jul. 2022.
- GERHARDT, Tatiana Engel; SILVEIRA, Denise Tolfo. Métodos de pesquisa. Porto Alegre: UFRGS, 2009.
- GIL, Antonio Carlos. Como elaborar projetos de pesquisa. 4. ed. São Paulo: Atlas, 2002.
- GODOY, Arilda Schmidt. Pesquisa Qualitativa: Tipos Fundamentais. *Revista de Administração de Empresas*, São Paulo, v. 35, n. 3, p. 20-29, 1995. Disponível em: <<https://www.scielo.br/j/rae/a/ZX4cTGqrqYfVhr7LvVyDBgdb/?format=pdf&lang=pt>>. Acesso em: 3 nov. 2022.
- GRECA, Ileana Maria; MOREIRA, Marco Antonio. Uma revisão da literatura sobre estudos relativos ao ensino da mecânica introdutória. *Investigações em Ensino de Ciências*, Porto Alegre, v. 6, n. 1, p. 29-56, 2001. Disponível em: <<https://www.if.ufrgs.br/cref/ojs/index.php/ienci/article/viewFile/585/378>>. Acesso em: 16 jan. 2022.
- GRECA, Ileana Maria; SANTOS, Flávia Maria Teixeira dos. Dificuldades da generalização das estratégias de modelação em ciências: o caso da Física e da Química. *Investigações em Ensino de Ciências*, Porto Alegre, v. 10, n. 1, p. 31-46, 2005.

GRIFFITHS, David Jeffrey. Introduction to Quantum Mechanics. [S. l.]: Pearson Education Inc, 2005.

KELLY, George Alexander. The Psychology of Personal Constructs: Volume one: Theory and personality. Oxford: Taylor & Francis Group, 1991.

MAYES, Clifford. Educational Applications of Personal Construct Theory: Part Two. The Researcher, Brigham Young University, p. 1-14, 12 ago. 1999. Disponível em: <<https://www.nrmera.org/wp-content/uploads/2018/05/Educational-Applications-of-Personal-Construct-Theory-Part-Two.pdf>>. Acesso em: 8 set. 2022.

MCEVOY, Joseph Patrick; ZARATE, Oscar. Entendendo Teoria Quântica: um guia ilustrado. São Paulo: Leya, 2012.

MEHRA, Jagdish; RECHENBERG, Helmut. The Formulation of Matrix Mechanics and Its Modifications 1925–1926. New York: Springer New York, 1982.

MENDES, Camila. Jean Piaget. 2011. Disponível em: <<http://www.infomercial.com/biografias/jean-piaget/>>. Acesso em: 1 set. 2022.

MENDOZA, Miguel Angel Gómez. La transposición didáctica: História de um conceito. Revista Latinoamericana de Estudios Educativos, Manizales, Colombia, v. 1, n. 1, p. 83-115, 2005. Disponível em: <<https://www.redalyc.org/pdf/1341/134116845006.pdf>>. Acesso em: 23 dez. 2020.

MICHALAK, Katja. Schema. Encyclopedia Britannica, [s. l.], 3 out. 2019. Disponível em: <<https://www.britannica.com/science/schema-cognitive>>. Acesso em: 29 ago. 2022.

MÓL, Gerson de Souza. Pesquisa Qualitativa em Ensino de Química. Revista Pesquisa Qualitativa, São Paulo, v. 5, n. 9, p. 495-513, dez. 2017. Disponível em: <<https://editora.sepq.org.br/rpq/article/download/140/96>>. Acesso em: 17 ago. 2020.

MONTENEGRO, Roberto Luiz; PESSOA Jr., Osvaldo. Interpretações da Teoria Quântica e as concepções dos estudantes do curso de Física. Investigações em Ensino de Ciências, v. 7, n. 2, p. 107-126, 2002.

MOREIRA, Marco Antonio. O que é afinal aprendizagem significativa?. Currículum, Espanha, 2012. Disponível em: <<http://moreira.if.ufrgs.br/alfinal.pdf>>. Acesso em: 30 ago. 2022.

MOREIRA, Marco Antonio; MASINI, Elcie Aparecida Fortes Salzano. Um modelo para planejar a instrução. In: Aprendizagem Significativa: A Teoria de David Ausubel. São Paulo: Moraes Ltda, 1982. p. 41-52.

MOREIRA, Marco Antonio; OSTERMANN, Fernanda. Textos de apoio ao professor de Física: Teorias Construtivistas. 10. ed. Porto Alegre: Instituto de Física - UFRGS, 1999.

MOTA, Luiza Matos. As controvérsias sobre a interpretação da mecânica quântica e a formação dos licenciados em física: um estudo em duas instituições: UFBA e UFSC. 2000. 180 f. Dissertação (Mestrado em Educação) - Universidade Federal de Santa Catarina,

Florianópolis, 2000. Disponível em:

<<https://repositorio.ufsc.br/xmlui/handle/123456789/79096>>. Acesso em: 10 jan. 2022.

OLIVEIRA, Fabio Ferreira de; VIANNA, Deise Miranda; GERBASSI, Reuber Scofano. Física Moderna no Ensino Médio: o que dizem os professores. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 29, n. 3, p. 447-454, 12 abr. 2007. Disponível em:

<<https://www.scielo.br/j/rbef/a/rh5x6dG35fJrV87r99L5PmK/?lang=pt>>. Acesso em: 14 dez. 2021.

PÁDUA, Gelson Luiz Daldegan de. A epistemologia genética de Jean Piaget. *Revista FACEVV*, n. 2, p. 22-35, 16 jun. 2009.

PIAGET, Jean. *Genetic Epistemology*. [S. l.]: Norton & Company, 1971.

POLIDORO, Lurdes de Fátima; STIGAR, Robson. A Transposição Didática: a passagem do saber científico para o saber escolar. *Ciber Teologia*, ano 6, n. 27, 2010. Disponível em:

<[http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos\\_teses/2010/Ensino\\_religioso/transposicao\\_didatica.pdf](http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos_teses/2010/Ensino_religioso/transposicao_didatica.pdf)>. Acesso em: 15 jan. 2022.

REIS, Alexsandro Luiz dos et al. *A Neurociência e a Educação: como nosso cérebro aprende?*. Ouro Preto, 2016. Disponível em:

<[https://www.repositorio.ufop.br/bitstream/123456789/6744/1/PRODU%C3%87%C3%83OTECNICA\\_Neuroci%C3%A4nciaEduca%C3%A7%C3%A3oCerebro.pdf](https://www.repositorio.ufop.br/bitstream/123456789/6744/1/PRODU%C3%87%C3%83OTECNICA_Neuroci%C3%A4nciaEduca%C3%A7%C3%A3oCerebro.pdf)>. Acesso em: 21 dez. 2021.

ROUSE, Amanda Howley. *Piaget's theory of education*. 2021. Disponível em:

<<https://theeducationhub.org.nz/piagets-theory-of-education/>>. Acesso em: 7 set. 2022.

ROUSE, Amanda Howley. *Vygotsky's philosophy of education*. 2021. Disponível em:

<<https://theeducationhub.org.nz/vygotskys-philosophy-of-education/>>. Acesso em: 8 set. 2022.

SARAVALI, Eliane Giachetto. Dificuldades de aprendizagem no ensino superior: reflexões a partir da perspectiva piagetiana. *Educação Temática Digital*, Campinas, v. 6, p. 99-127, 14 jun. 2005. Disponível em:

<<https://periodicos.sbu.unicamp.br/ojs/index.php/etd/article/view/777>>. Acesso em: 11 fev. 2023.

SILVA, Domiciano Correa Marques da. "Teoria Quântica". *Brasil Escola*. Disponível em:

<<https://brasilecola.uol.com.br/fisica/teoria-quantica.htm>>. Acesso em: 4 ago. 2020.

SINGH, Chandralekha. Student understanding of quantum mechanics. *American Journal of Physics*, v. 69, n. 8, p. 885-895, 2001.

SOUZA, Rafaelle da Silva. *Análise de uma proposta didática para o ensino de mecânica quântica por meio de contextualização histórica na formação de professores de Física*. 2020. 352 f. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) - Universidade Federal da Bahia; Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador, 2020. Disponível em:

<<https://repositorio.ufba.br/handle/ri/32637>>. Acesso em: 14 dez. 2021.

SOUZA, Rafaelle da Silva; GRECA, Ileana Maria; SILVA, Indianara; TEIXEIRA, Elder Sales. Reflexões sobre o Ensino de Mecânica Quântica nos Cursos de Graduação em Física a partir de Revisão Sistemática. *Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências*, v. 20, p. 1363-1391, 2021. Disponível em:

<<https://www.periodicos.ufmg.br/index.php/rbpec/article/view/21686>>. Acesso em: 23 out. 2021.

SOUZA, Rafaelle da Silva; GRECA, Ileana Maria; SILVA, Indianara; TEIXEIRA, Elder Sales. Ensino de Mecânica Quântica na licenciatura em Física por meio da História e Filosofia da Ciência. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, v. 38, n. 2, p. 914-944, mar. 2021.

Disponível em: <<https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/74157>>. Acesso em: 16 dez. 2021.

TAMMOOR, Muhammad. *Quantum Physics Applications*. [S. l.], 8 mar. 2018. Disponível em: <<http://scivenu.com/2018/03/08/quantum-physics-applications/>>. Acesso em: 23 nov. 2021.

TAVEL, Morton. What exactly is the ‘spin’ of subatomic particles such as electrons and protons? Does it have any physical significance, analogous to the spin of a planet?. *Scientific American*, [s. l.], 21 out. 1999. Disponível em:

<<https://www.scientificamerican.com/article/what-exactly-is-the-spin/>>. Acesso em: 22 dez. 2022.

VYGOTSKY, Lev Semyonovich. *A Formação Social da Mente*. 4. ed. São Paulo: Martins Fontes, 1991. Disponível em:

<[https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/3317710/mod\\_resource/content/2/A%20formacao%20social%20da%20mente.pdf](https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/3317710/mod_resource/content/2/A%20formacao%20social%20da%20mente.pdf)>. Acesso em: 26 jul. 2022.

WARRILOW, Stephen. *Personal Construct Psychology*. [S. l.], 2022. Disponível em:

<<https://www.zen-tools.net/personal-construct-psychology.html>>. Acesso em: 14 ago. 2022.

ZABALZA, Miguel Angel. *Diários de aula: contributo para o estudo dos dilemas práticos dos professores*. Porto: Porto Editora, 1994.

ZANELLA, Andréa Vieira. Zona de desenvolvimento proximal: análise teórica de um conceito em algumas situações variadas. *Temas em Psicologia*, Ribeirão Preto, v. 2, n. 2, p. 97-110, ago. 1994. Disponível em:

<[http://pepsic.bvsalud.org/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1413-389X1994000200011&lng=pt&nrm=iso](http://pepsic.bvsalud.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-389X1994000200011&lng=pt&nrm=iso)>. acessos em 02 ago. 2022.

ZHU, Guangtian; SINGH, Chandralekha. Improving students’ understanding of quantum measurement. I. Investigation of difficulties. *Physical Review Physics Education Research*, v. 8, n. 1, p. 2012.

**APÊNDICE A - Questionário pré-teste**

- 1 - Você já tinha ouvido falar sobre a equação de Schrödinger?  
Sim ( ) Não ( )
- 2 - O que você entende por equação de onda?
- 3 - Qual seu conhecimento, o que você entende por função de onda? 4 - O que é e como são representados os orbitais atômicos?
- 5 - Você tem interesse pelo aprendizado da teoria quântica?
- 6 - Você possui algum conhecimento sobre a teoria quântica? Quais?  
Sim ( ) Não ( )
- 7 - Como você caracteriza o nível desse conhecimento?  
Alto ( ) Médio ( ) Baixo ( ) Nenhum ( )
- 8 - Você julga importante um aprendizado mais prático (matemático) da teoria quântica ?  
Muito ( ) Médio ( ) Pouco ( ) Não ( )
- 9 - Como você caracteriza seu conhecimento sobre números complexos?  
Alto ( ) Médio ( ) Baixo ( ) Nenhum ( )
- 10 - Como você caracteriza seu conhecimento sobre o estudo de probabilidades?  
Alto ( ) Médio ( ) Baixo ( ) Nenhum ( )
- 11- Como você caracteriza seu conhecimento sobre a compreensão e resolução de equações diferenciais ordinárias?  
Alto ( ) Médio ( ) Baixo ( ) Nenhum ( )
- 12 - Você julga importante aprofundar o estudo de conteúdos de caráter mais complexo na licenciatura?  
Muito ( ) Médio ( ) Pouco ( )
- 13 - Qual o seu interesse em aprender mais sobre a teoria quântica?  
Muito ( ) Médio ( ) Pouco ( )
- 14 - Dentro da sua percepção, você acha que dominar um conteúdo mais complexo refletirá positivamente na sua autoconfiança, na aprendizagem de outros conteúdos?  
Muito ( ) Médio ( ) Pouco ( )

## APÊNDICE B - Questionário pós-teste

- 1 - Qual o propósito da equação de Schrödinger?
- 2 - Qual seu conhecimento sobre a equação de onda depois deste estudo?
- 3 - Qual seu conhecimento, o que você entende por função de onda depois deste estudo?
- 4 - O que acontece quando a função de onda é elevada ao quadrado?
- 5 - O que é o colapso de uma função de onda?
- 6 - O que significa normalizar uma função de onda e por que é necessário normalizá-la? - O que caracteriza uma função degenerada?
- 8 - O que são autoestados, autovalores e autofunções?
- 9 - Quais são os principais operadores da mecânica quântica e qual o seu papel na função de onda ?
- 10 - O que é a comutação de operadores e qual sua importância para o desenvolvimento da mecânica quântica?
- 11 - Qual o propósito do formalismo introduzido por Paul Dirac? 12 - O que define a quantização do momento angular ?
- 13 - Com suas palavras, o que é Spin?
- 14 - O que é e como são representados os orbitais atômicos? Sua concepção mudou?
- 15 - Você acredita que tendo essa parte mais avançada no curso de licenciatura, promoveu seu interesse para expandir seus conhecimentos com novos e mais avançados conteúdos?  
 Sim ( ) Não ( )
- 16 - Você achou interessante aprofundar seu conhecimento nessa parte da MQ?  
 Muito ( ) Médio ( ) Pouco ( )
- 17 - Você acha que um estudo teórico sobre as implicações da teoria quântica, relacionando os conceitos matemáticos fundamentais, proporciona um entendimento mais profundo de como a teoria funciona?  
 Bastante ( ) Sim ( ) Pouco ( ) Não ( )
- 18 - O que você achou dessa abordagem mista entre discussões e aplicações matemáticas da teoria quântica?
- 19 - Quanto aos problemas matemáticos, vimos que demandam um bom domínio de cálculo diferencial e integral. A partir do seu conhecimento sobre cálculo, a matemática trabalhada no material apresentado se mostrou complexa ou fácil de acompanhar, como na resolução de problemas com diferentes formas de EDOs?  
 Um pouco complexo mas nada impossível de compreender ( ).

Muito complexo, difícil de acompanhar ( ).

20 - Você achou que fez diferença ter os exercícios descritos passo a passo no material?

Sim, fez diferença ( ) Não mudou nada ( )

21 - Você acha que as relações e resgates que o material traz sobre conceitos matemáticos vistos, às vezes, até no ensino fundamental, sobre probabilidades, números complexos, trigonometria, etc., te ajudaram a construir um raciocínio mais claro sobre o funcionamento e interpretação dos cálculos na mecânica quântica?

Bastante ( ) Sim ( ) Pouco ( ) Não ( )

22 - Você teve grandes dificuldades na compreensão do conteúdo?

Sim, na parte teórica ( ) Sim, na parte matemática ( ) Um pouco em ambas, mas deu pra compreender ( ) Todas, não entendi nada ( )

23 - A partir das novas nomenclaturas apresentadas como, autofunção, autoestado, autovalor, etc.. você acha que esse material oferece uma explicação fácil de seguir?

Sim ( ) Meio a meio, consigo entender mas é complicado ( ) Não ( )

24 - Dentre todos os conceitos abordados nas aulas, quais foram os mais fáceis e os mais complicados de compreender? Você acha que o material conseguiu explicá-los de forma concisa?

25 - Você acredita que tendo essa parte mais avançada no curso de licenciatura, promove seu interesse para expandir seus conhecimentos com novos e mais avançados conteúdos?

Sim ( ) Não ( )

## APÊNDICE C - Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

### Termo de Consentimento Livre e Esclarecido – TCLE

Você está sendo convidado a participar da pesquisa “A Equação de Schrödinger e os orbitais atômicos: um estudo introdutório de mecânica quântica para licenciaturas em Física”, de responsabilidade do pesquisador Bernardo Luis Maito Laitharth, orientação do Dr. Carlos Ariel Samudio Perez e coorientação do Dr. Alisson Cristian Giacomelli. Esta pesquisa apresenta como objetivo fornecer subsídios teóricos e metodológicos sobre o estudo da Equação de Schrödinger aos professores de Física em formação inicial, através da aplicação de um texto de apoio. As atividades serão desenvolvidas durante aproximadamente cinco encontros no componente curricular de mecânica quântica no espaço da universidade e envolverá aplicação de questionários e coleta de dados ao longo das aulas.

Esclarecemos que sua participação não é obrigatória e, portanto, poderá desistir a qualquer momento, retirando seu consentimento. Além disso, garantimos que você receberá esclarecimentos sobre qualquer dúvida relacionada à pesquisa e poderá ter acesso aos seus dados em qualquer etapa do estudo. As informações serão transcritas e não envolvem a identificação do nome dos participantes. Tais dados serão utilizados apenas para fins acadêmicos, sendo garantido o sigilo das informações.

Sua participação nesta pesquisa não traz complicações legais, não envolve nenhum tipo de risco físico, material, moral e/ou psicológico. Caso for identificado algum sinal de desconforto psicológico referente à sua participação na pesquisa, pedimos que nos avise. Além disso, lembramos que você não terá qualquer despesa para participar da presente pesquisa e não receberá pagamento pela participação no estudo.

Caso tenham dúvida sobre a pesquisa e seus procedimentos, você pode entrar em contato com o orientador do trabalho Dr. Carlos Ariel Samudio Perez pelo e-mail [samudio@upf.br](mailto:samudio@upf.br) ou no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade de Passo Fundo pelo e-mail [ppgecm@upf.br](mailto:ppgecm@upf.br).

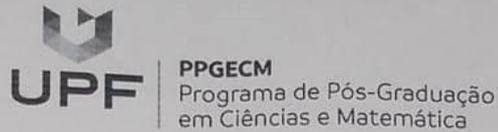
Dessa forma, se concordam em participar da pesquisa, em conformidade com as explicações e orientações registradas neste Termo, pedimos que registre abaixo a sua autorização. Informamos que este Termo, também assinado pelos pesquisadores responsáveis, é emitido em duas vias, das quais uma ficará com você e outra com os pesquisadores.

Passo Fundo, XX de maio de 2022.

Nome do participante: \_\_\_\_\_

Data de nascimento: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_

Pesquisador: \_\_\_\_\_

**APÊNDICE D - Termo de autorização do curso de Física – UPF****CARTA DE AUTORIZAÇÃO DO ESTABELECIMENTO DE ENSINO**

Eu, Bernardo Luis Maito Laitharth, solicito autorização da Universidade de Passo Fundo localizada no município de Passo Fundo, estado do Rio Grande do Sul, para a realização de atividades de pesquisa associadas a dissertação que desenvolvo junto ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade de Passo Fundo, RS. A pesquisa está vinculada a dados produzidos durante a aplicação de atividades didáticas junto a estudantes do Curso de Física Licenciatura, junto a disciplina de Mecânica Quântica. O período de aplicação das atividades será de 24/05/2022 a 14/06/2022 e contará com a visita do professor orientador do estudo.

- Autorizo  
 Não autorizo

Prof. Dr. Alisson C. Giacomielli  
Coordenador do Curso  
de Física

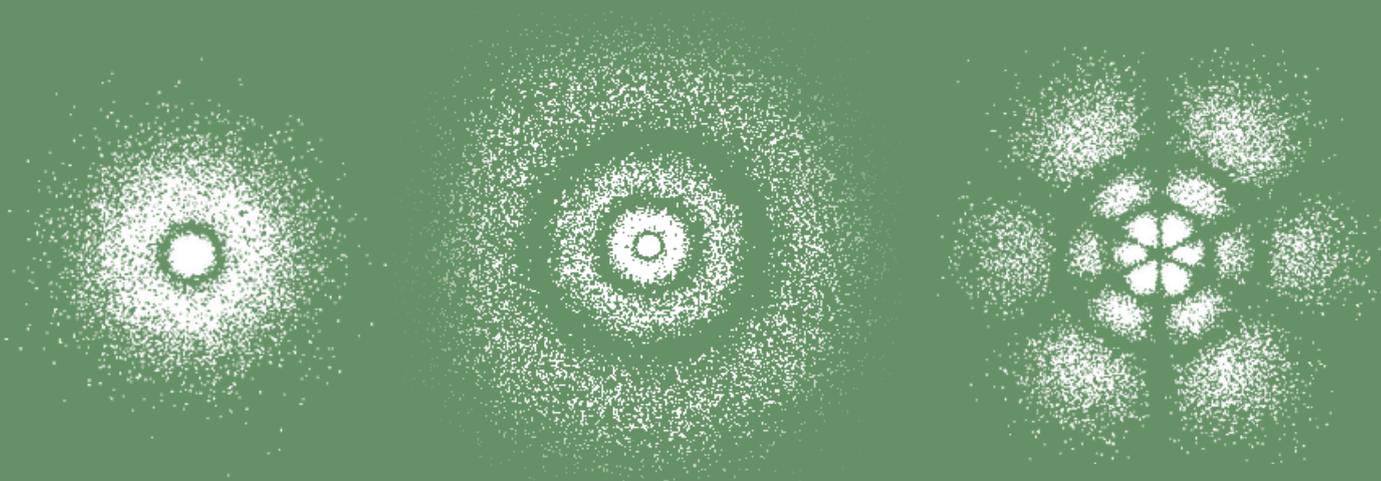
---

Eu, Bernardo Luis Maito Laitharth, me comprometo a cumprir as normativas da Universidade, mantendo conduta ética e responsável e a utilizar os dados produzidos pela pesquisa, exclusivamente para fins acadêmicos e a destruí-los após a conclusão do estudo.

Mestrando  
Bernardo Luis Maito Laitharth

# *Equação de Schrödinger*

UM ESTUDO INTRODUTÓRIO DE  
MECÂNICA QUÂNTICA PARA ÁTOMOS  
HIDROGENÓIDES

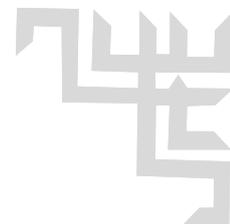


*Bernardo Luís Maito Laitharth  
Carlos Ariel Samudio Pérez  
Alisson Cristian Giacomelli*



**PPGECM**

Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática  
Instituto de Humanidades, Ciências, Educação e Criatividade - IHCEC



CIP – Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

---

L189e Laitharth, Bernardo Luis Maito  
Equações de Schrödinger [recurso eletrônico] : um estudo introdutório de  
mecânica quântica para átomos hidrogenóides / Bernardo Luis Maito Laitharth,  
Carlos A. S. Pérez, Alisson C. Giacomelli. – Passo Fundo: EDIUPF, 2023.  
6 MB ; PDF. – (Produtos Educacionais do PPGECM).

Inclui bibliografia. ISSN  
2595-3672

Modo de acesso gratuito: <http://www.upf.br/ppgecm>. Este material integra  
os estudos desenvolvidos junto ao  
Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PPGECM), na  
Universidade de Passo Fundo (UPF), sob orientação do Prof. Dr. Carlos A. S.  
Pérez e coorientação do Prof. Dr. Alisson C. Giacomelli.

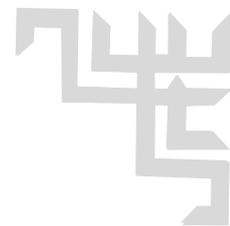
1. Física - Estudo e ensino (Superior). 2. Equação de Schrödinger. 3. Teoria  
quântica. 4. Orbitais atômicos. 5. Prática de ensino. I. Samudío Pérez, Carlos  
Ariel. II. Giacomelli, Alisson Cristian. III. Título. IV. Série.

CDU: 530.145

---

Bibliotecária responsável Juliana Langaro Silveira – CRB 10/2427





# APRESENTAÇÃO

Este produto educacional, desenvolvido junto ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade de Passo Fundo, sob a orientação do Professor Dr. Carlos A. S. Pérez e coorientação do Professor Dr. Alisson C. Giacomelli, é direcionado ao ensino superior, configurando-se como um texto de apoio ao professor de Física, para o planejamento e desenvolvimento de suas aulas e ao estudante, como um auxílio em seus estudos. A dissertação que está associada a esse produto educacional, intitula-se “A Equação de Schrödinger e os Orbitais Atômicos: Um estudo introdutório de mecânica quântica para licenciaturas em Física” e teve como objetivo analisar quais as possíveis contribuições de um texto de apoio sobre as aplicações da equação de Schrödinger no estudo dos orbitais atômicos para a formação inicial de professores de Física. O produto tenta abordar assuntos iniciais de mecânica quântica tendo como foco a compreensão fenomenológica e as aplicações matemáticas da Equação de Schrödinger em um sistema ideal de um átomo do tipo hidrogênio. O texto foi elaborado de forma a proporcionar uma leitura de fácil compreensão com muitos exemplos e acompanhamentos nas resoluções matemáticas, eliminando a necessidade de busca de conceitos em outros materiais.

O produto está organizado em duas partes: a primeira parte apresenta alguns detalhes da teoria educacional utilizada como aporte teórico, tomando por referência de organização a Transposição Didática na perspectiva de Chevallard. Essas discussões teóricas são acompanhadas de reflexões sobre o processo de aprendizagem, particularmente da psicologia cognitiva, a partir de uma análise de teorias construtivistas. Posteriormente uma breve recapitulação histórica sobre o comportamento ondulatório da luz e os modelos atômicos é realizada. Na sequência, uma revisão matemática sobre probabilidades e números complexos é apresentada, com exercícios acompanhados e explicações guiadas, proporcionando a base para compreender os elementos fundamentais da teoria quântica. Essa revisão é seguida por uma explicação sobre a equação de onda e a função de onda, suas restrições e o seu significado físico. Assim encerra-se a primeira parte do texto. Na segunda parte, inicia-se uma introdução dos princípios gerais da mecânica quântica, apresentando os postulados, condições e



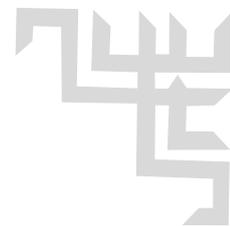
formalidades para a teoria, seguida de um estudo sobre o momento angular e a derivação e resolução da Equação de Schrödinger para um átomo de hidrogênio, assim como a visualização das formas dos orbitais, por meio de simulação e concluindo comparando com experimentos realizados em laboratório.

A aplicação deste produto, se deu em uma universidade do interior do estado do Rio Grande do Sul, em uma turma de Licenciatura em Física, durante o mês de julho de 2022, totalizando cinco encontros de 4 horas/aula cada, no turno da noite. As aulas ocorreram de forma expositiva e prática, em grupo e individual, com auxílio de recursos tecnológicos e textos de apoio.

O modo como este texto foi escrito permite a sua utilização em outras áreas do conhecimento, nas quais um entendimento básico sobre o funcionamento da teoria quântica é necessário. Espera-se que este material estimule o crescimento do saber por meio da abordagem proposta, como um material de auxílio ao professor e estudante de Física. Este material, assim como as atividades nele contidas, foi pensado a fim de seguir uma linha de raciocínio que se alinhe com a transposição didática e o construtivismo, tentando ao máximo implementar esse conteúdo de forma didática e compreensível.

O presente material está disponível para acesso livre no site do PPGECM, na aba “Produtos Educacionais do PPGECM” e no portal EduCapes.

Por fim, o produto educacional, juntamente com a dissertação que o acompanha, foram aprovados no dia 05 de Abril de 2023.



# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>DESENVOLVIMENTO INICIAL DA TEORIA QUÂNTICA .....</b>	<b>6</b>
<b>1.1</b>	<b>O Comportamento ondulatório da luz .....</b>	<b>7</b>
1.1.1	<i>As Propriedades das ondas .....</i>	7
<b>1.2</b>	<b>A Quantização da energia .....</b>	<b>9</b>
1.2.1	<i>A Radiação do corpo negro ... ..</i>	9
1.2.2	<i>O efeito fotoelétrico ... ..</i>	9
<b>1.3</b>	<b>Os modelos atômicos .....</b>	<b>13</b>
1.3.1	<i>J. J. Thomson ... ..</i>	13
1.3.2	<i>Ernest Rutherford ... ..</i>	14
1.3.3	<i>Niels Bohr ... ..</i>	16
1.3.4	<i>Arnold Sommerfeld ... ..</i>	18
<b>1.4</b>	<b>O comportamento ondulatório da matéria .....</b>	<b>20</b>
<b>1.5</b>	<b>O princípio da incerteza .....</b>	<b>23</b>
<b>2</b>	<b>INTRODUÇÃO AO ESTUDO DA MECÂNICA QUÂNTICA .....</b>	<b>26</b>
<b>2.1</b>	<b>Revisão matemática .....</b>	<b>29</b>
2.1.1	<i>Números complexos .....</i>	29
2.1.2	<i>Exemplos de números complexos .....</i>	33
2.1.3	<i>Probabilidade .....</i>	35
2.1.4	<i>Distribuições probabilísticas .....</i>	36
2.1.5	<i>Propriedades das distribuições probabilísticas .....</i>	39
2.1.6	<i>Variância em distribuições probabilísticas .....</i>	42
<b>3</b>	<b>FUNDAMENTOS DA FUNÇÃO DE ONDA .....</b>	<b>46</b>
<b>3.1</b>	<b>Derivação da Equação de Schrödinger, através de métodos clássicos .....</b>	<b>47</b>
<b>3.2</b>	<b>Interpretando a função de onda .....</b>	<b>51</b>
<b>3.3</b>	<b>Restrições e normalização da função de onda .....</b>	<b>54</b>
3.3.1	<i>Exercícios de normalização .....</i>	56





<b>4</b>	<b>O PROBLEMA DA PARTÍCULA EM UMA CAIXA .....</b>	<b>60</b>
<b>5</b>	<b>PRINCÍPIOS GERAIS DA MECÂNICA QUÂNTICA.....</b>	<b>70</b>
<b>5.1</b>	<b>Postulados da mecânica quântica.....</b>	<b>71</b>
<b>5.2</b>	<b>Notação de Dirac.....</b>	<b>77</b>
<b>5.3</b>	<b>Ortogonalidade, ortonormalidade e completude da função de onda.....</b>	<b>78</b>
<b>5.4</b>	<b>Comutação de operadores .....</b>	<b>80</b>
<b>5.5</b>	<b>Equação de Schrödinger para estados estacionários .....</b>	<b>82</b>
<b>6</b>	<b>MOMENTO ANGULAR... .....</b>	<b>86</b>
<b>6.1</b>	<b>Análise vetorial .....</b>	<b>87</b>
<b>6.2</b>	<b>Operadores do momento angular... .....</b>	<b>89</b>
<b>6.3</b>	<b>Autovalores dos operadores do momento angular... .....</b>	<b>94</b>
<b>6.4</b>	<b>Spin... .....</b>	<b>103</b>
<b>7</b>	<b>O MODELO MATEMÁTICO DOS ÁTOMOS.....</b>	<b>107</b>
<b>7.1</b>	<b>A Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas .....</b>	<b>108</b>
<b>7.2</b>	<b>Resolução da parte angular... .....</b>	<b>111</b>
<b>7.3</b>	<b>Resolução da parte radial .....</b>	<b>116</b>
<b>7.4</b>	<b>O Átomo de hidrogênio.....</b>	<b>118</b>
<b>7.5</b>	<b>Simulação dos resultados .....</b>	<b>129</b>
	<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>133</b>
	<b>SOBRE OS AUTORES.....</b>	<b>130</b>



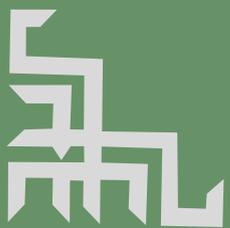
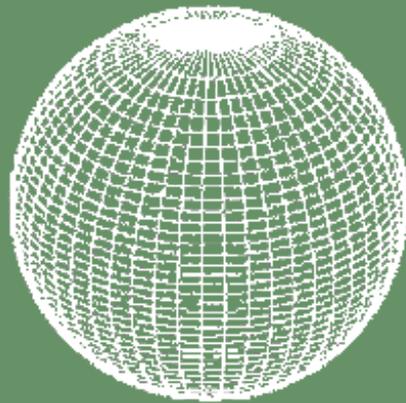


DESENVOLVIMENTO  
INICIAL DA TEORIA  
QUÂNTICA

---

1

---



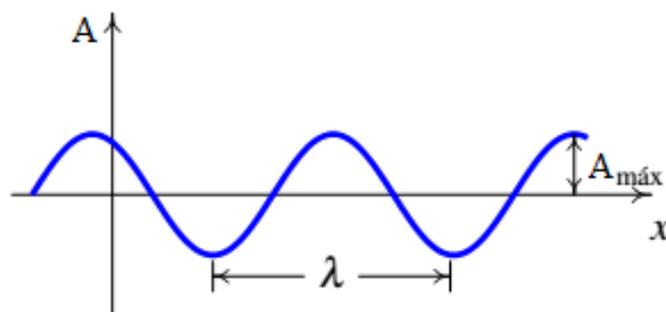
## 1.1 O Comportamento ondulatório da luz

Muitas das descobertas feitas sobre o comportamento atômico são dadas pelo estudo das ondas eletromagnéticas, estando elas dentro ou fora do espectro visível. O seu estudo se dá desde a radiação ultravioleta, que vem do Sol e queima a nossa pele até a sua interação com átomos e partículas subatômicas. Ondas são perturbações que se propagam em um meio ou até mesmo no vácuo e transportam energia através do espaço, porém não transportando matéria. Essas perturbações aparecem, por exemplo, na forma do movimento de um cristal de quartzo em um relógio, um pêndulo, o próprio som de um instrumento, quando jogamos algo em um copo de água, perturbando sua superfície, ou a luz (BROWN et al., 2021).

### 1.1.1 As Propriedades das ondas

As ondas possuem algumas propriedades, tais como: amplitude, comprimento de onda, frequência e velocidade de propagação. Observe a Fig. 1.1, a amplitude  $A$  de uma onda representa o tamanho de sua crista, ou vale, sendo medida a partir da parte central, independente se for crista ou vale. O comprimento de onda  $\lambda$  representa a distância entre duas cristas ou dois vales, equivale a um ciclo completo, ou seja, uma oscilação completa da onda. A frequência  $f$  é dada pelo número de oscilações que passam em um dado ponto em um determinado tempo e a velocidade depende de outros fatores, como o tipo de onda e o meio de propagação (BROWN et al., 2021).

Figura 1.1 - Propriedade de uma onda.



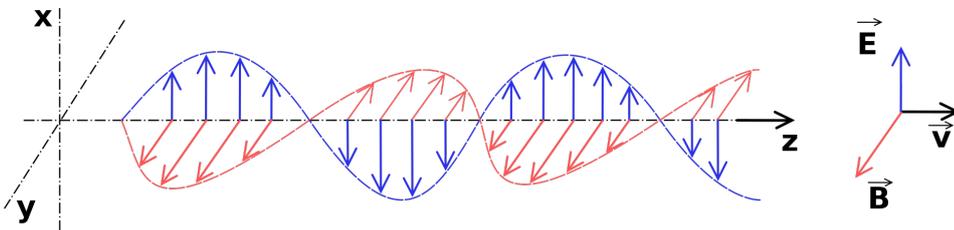
Fonte: [https://pt.wikipedia.org/wiki/Radiação\\_eletromagnética](https://pt.wikipedia.org/wiki/Radia%C3%A7%C3%A3o_eletromagn%C3%A9tica). Acesso em: 12 mar. 2022.

As ondas mecânicas, assim como as ondas eletromagnéticas, possuem velocidade de propagação definida por  $v$ . As ondas mecânicas viajam na velocidade do som, aproximadamente  $340m/s$ , essa velocidade dependente do meio de propagação, sendo diferente na água, no solo, no ar, etc; enquanto as ondas eletromagnéticas viajam com velocidade  $c = 2.997 \times 10^8m/s$  no vácuo, também tendo a sua velocidade afetada pelo meio onde se encontra. A relação entre o comprimento de onda e a frequência é dada por

$$v = \lambda f \quad (1.1)$$

Quando a superfície de um copo de água é perturbada, as ondas que se formam transportam energia através de oscilações na matéria, nesse caso, a água. Analogamente, a transmissão de energia no vácuo se dá pela oscilação periódica de campos elétricos e magnéticos, denominados ondas eletromagnéticas. No vácuo, todos os tipos de radiação eletromagnética, como micro-ondas, raios x, ondas de rádio, etc., se movem com velocidade constante  $c$ . A representação gráfica de uma onda eletromagnética se apresenta na Fig. 1.2.

Figura 1.2 - Onda eletromagnética.



Fonte: [https://pt.wikipedia.org/wiki/Radiação\\_eletromagnética](https://pt.wikipedia.org/wiki/Radiação_eletromagnética). Acesso em: 12 mar. 2022.

Podemos observar, na figura acima, que uma onda eletromagnética é formada por campos elétricos e magnéticos oscilantes e perpendiculares entre si. Todas essas ondas possuem a mesma velocidade no vácuo e diferem somente na sua frequência e comprimento de onda. Quando o comprimento de onda, ou a frequência entra na zona visível do espectro eletromagnético para o olho humano, nós interpretamos esses diferentes valores como cores, do vermelho para o violeta e vice-versa, sendo a luz branca a mistura de todos os comprimentos de onda (BROWN et al., 2021). Na radiação eletromagnética, a energia é diretamente proporcional à frequência

$$E \propto f \quad (1.2)$$

Nesse sentido, a luz visível não é nociva para os seres humanos, porém frequências mais altas, como os raios ultravioletas do Sol, podem causar danos na forma de queimaduras e até mesmo câncer, se em exposição prolongada.

## **1.2 A Quantização da energia**

O início da física quântica se dá a partir da resolução de três problemas: a radiação do corpo negro, que recebeu contribuições de Max Planck; o efeito fotoelétrico apresentado por Albert Einstein; as linhas espectrais e a instabilidade do modelo atômico nuclear, esclarecidas por Niels Bohr. Sendo assim, faremos uma trajetória histórica elucidando os fatos de maior importância, através destes três problemas iniciais, tentando compreender os primeiros passos realizados na formulação da teoria quântica.

### **1.2.1 A radiação do corpo negro**

Do ponto de vista da física clássica, o entendimento do universo era simples. Os movimentos de objetos materiais podiam ser descritos pelas Leis de Newton e as propriedades da energia radiante podiam ser explicadas pelas relações matemáticas chamadas de Equações de Maxwell. Energia e matéria pareciam não possuir relações entre si. No entanto, alguns problemas começaram a surgir e não podiam ser explicados pelas teorias e relações já estudadas (BROWN et al., 2021).

De forma geral, a matéria, quando submetida a temperaturas maiores do que zero absoluto, transforma parte da sua energia interna em radiação eletromagnética. Essa energia pode ser classificada como energia térmica. Da mesma forma, toda a matéria também absorve alguma quantidade de radiação eletromagnética. Porém, se um objeto absorve todas as frequências de toda a energia que nele incide, é chamado do corpo negro. Existe uma relação entre a temperatura que esse objeto se encontra e a cor que ele apresenta como, por exemplo, quando um metal é aquecido o suficiente, começa a não só emitir calor na forma de radiação infravermelha, mas, também, radiação no espectro visível, indo de um tom vermelho até azulado, quando exposto a essas condições térmicas extremas (BLINDER; HOLDER, 2017). Essa energia emitida, em forma de calor, é caracterizada por inúmeros comprimentos de onda

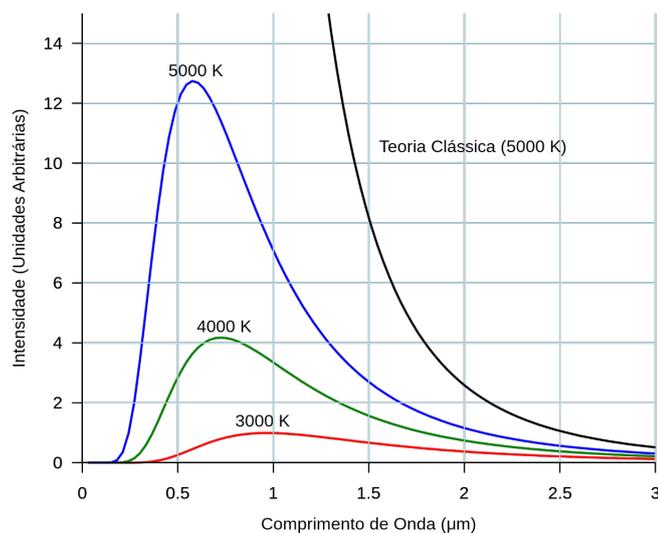
que variam de acordo com a temperatura. A relação entre energia e temperatura é dada pela Lei do deslocamento de Wien, que é uma constante,

$$T\lambda_{max} = 2897,6 \mu m K \quad (1.3)$$

onde a temperatura e o comprimento de onda são inversamente proporcionais, ou seja, um corpo em temperatura ambiente emite comprimentos de onda maiores, enquanto um corpo aquecido emite comprimentos de ondas menores.

Lord Rayleigh e J. H. Jeans desenvolveram uma equação para explicar a radiação do corpo negro em baixas frequências. Uma das grandes implicações propostas era a de que sempre que a frequência aumentava, pequenas quantidades infinitesimais de energia eram continuamente adicionadas no sistema. Classicamente, se assumia que a energia emitida por oscilações atômicas poderiam assumir qualquer valor contínuo. Essa equação, chamada de Lei de Rayleigh-Jeans, previa uma divergência da frequência quando estivesse próxima da região ultravioleta, porém os experimentos mostraram resultados um pouco diferentes. A curva demonstrada no experimento tinha uma forma de sino, o que não condizia com as ideias teóricas propostas. Essa discrepância ficou conhecida como catástrofe ultravioleta, conforme mostra a Fig. 1.3 (BLINDER; HOLDER, 2017).

Figura 1.3 - Gráfico representando a catástrofe ultravioleta.



Fonte: [https://pt.wikipedia.org/wiki/Corpo\\_negro](https://pt.wikipedia.org/wiki/Corpo_negro). Acesso em: 5 mar. 2022.

Em 1900, Max Planck derivou corretamente a equação da radiação do corpo negro, introduzindo uma ideia tanto quanto ousada, na qual ao invés da energia ser absorvida ou

emitida de forma contínua, como era explicada pelas equações de Maxwell, introduziu a ideia de que essa energia seria composta por pacotes discretos, quantidades finitas de energia, as quais deu o nome de quantum, no plural, quanta. Essa ideia de quantização da energia é, por muitos, considerada o início da física quântica. Planck postulou que a energia de um quantum é dada pela multiplicação entre a frequência e a constante de Planck,

$$E = hf \quad (1.4)$$

onde  $h$  é uma constante de Planck, de valor  $h = 6,626.10^{-34} J \cdot seg$  (BLINDER; HOLDER, 2017).

De acordo com a Eq. (1.4), em temperaturas baixas, somente energia de baixa frequência seria emitida. Quando a temperatura do corpo sobe, a probabilidade de altas frequências serem emitidas também aumenta. Então, em qualquer temperatura, é muito mais provável que o corpo perca energia emitindo vários quanta de baixa energia do que somente um único quantum de energia muito alta. Nesse sentido, foi possível resolver o problema da catástrofe ultravioleta (BROWN et al., 2021).

### 1.2.2 O Efeito fotoelétrico

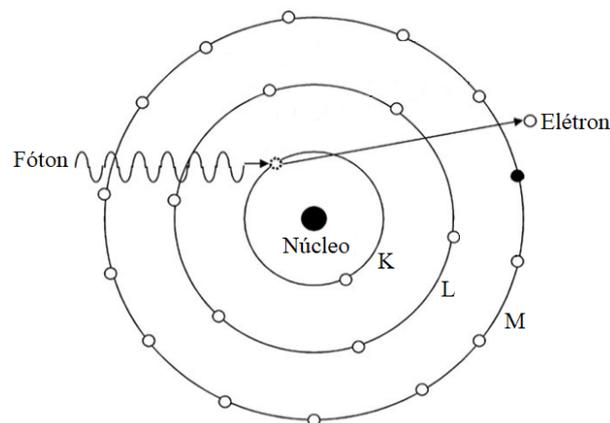
A proposta de Planck foi utilizada, alguns anos depois, por Albert Einstein, na tentativa de explicar o efeito fotoelétrico, fenômeno em que certos metais, quando expostos à luz, ejetam elétrons de sua superfície. Estudando esse fenômeno, aplicando as fórmulas e concepções da física disponível na época, teorizava-se que essa emissão de elétrons e sua energia cinética dependeriam somente da intensidade da luz aplicada e não da frequência. Porém, quando essa teoria era levada à prática, os resultados não estavam de acordo com o proposto, pois foi descoberto que os metais tinham um limite mínimo de frequência para a ejeção de elétrons. Dentro desse limite, observou-se que a quantidade de elétrons emitidos era proporcional à frequência. Isso significa que a própria luz é capaz de produzir eletricidade (BROWN et al., 2021).

O ponto mais importante do efeito fotoelétrico foi que Einstein teve a brilhante ideia de que da mesma forma que Planck descreveu que a energia radiante é emitida em pacotes quantizados, os quanta, a energia radiante da luz também deveria ser absorvida pelo metal em pacotes particulares, implicando a existência de momento da luz, que não possui massa. Ele

propôs que a energia emitida não apresentava uma distribuição contínua, mas, sim, pacotes localizados de energia, posteriormente, nomeados fótons (BROWN et al., 2021). Uma importante contribuição na explicação do efeito fotoelétrico, feita anteriormente, por Philipp Lenard (1898), foi enquanto ele realizava um experimento com raios catódicos e descobriu que a energia dos elétrons ejetados do cátodo dependiam somente do comprimento de onda e não da intensidade da luz que incidia sobre o metal. Essa é a propriedade que define efeito fotoelétrico (BRITANNICA, 2021).

Einstein explicou, também, que cada metal possui um valor particular de atração eletrostática, na qual um elétron só será ejetado caso esse valor seja ultrapassado, conforme a Fig. 1.4. Sendo assim, a energia mínima para que um único elétron salte de uma superfície é chamada de função trabalho  $\phi$ , onde o valor dessa energia depende do tipo de material (BROWN et al., 2021).

Figura 1.4 - Efeito Fotoelétrico.



Fonte: [https://www.researchgate.net/figure/Diagram-illustrating-the-photoelectric-effect\\_fig1\\_282408058](https://www.researchgate.net/figure/Diagram-illustrating-the-photoelectric-effect_fig1_282408058).  
Acesso em: 12 mar. 2022.

Caso um fóton com energia menor do que  $\phi$  incida no metal, não será o suficiente para ejetar o elétron. Porém, se o fóton conter energia maior que  $\phi$ , isso será o suficiente para superar as forças que mantêm o elétron acoplado ao metal, e a energia que sobra será transformada na energia cinética do elétron. A energia cinética máxima  $K_{\text{máx}}$  para um elétron emitido é representada na Eq. 1.5

$$K_{\text{máx}} = hf - \phi \quad (1.5)$$

onde  $h$  é a constante de Planck;  $f$  é a frequência dos fótons incidentes e  $\phi$  é a função trabalho do material onde os fótons estão incidindo. Quando um feixe de luz com energia acima do limite incide sobre o metal, o valor de elétrons emitidos é proporcional à intensidade da luz, porém a energia cinética só depende da frequência (BROWN et al., 2021).

### 1.3 Os modelos atômicos

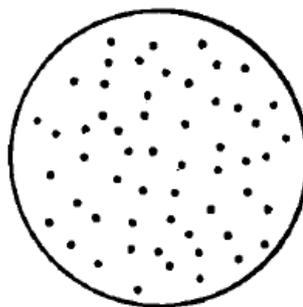
#### 1.3.1 J. J. Thomson

Um dos grandes problemas da física, no final do século XIX e início do século XX, era a estrutura e composição do átomo não ser compreendida. Em 1897, J. J. Thomson apresentou à Royal Institution of Great Britain experimentos demonstrando a existência de corpúsculos, que, segundo ele, eram corpos negativamente eletrificados, possuindo uma massa muito menor comparada à de um átomo de hidrogênio. Posteriormente, esses corpúsculos foram nomeados elétrons (THOMSON, 1905, p 1.). A primeira aparição desses corpúsculos se deu em um experimento realizado com tubos de raios catódicos. J. J. Thomson buscava entender se o fenômeno observado se tratava de ondas ou de partículas. Esse experimento consiste em um filamento e uma placa de elemento fosforescente, dentro de um tubo lacrado, produzindo vácuo em seu interior. Quando uma corrente de alta tensão passa pelo filamento, emite radiação que faz a placa fosforescer. Essa radiação observada é denominada de raios catódicos, pelo fato de ter origem no ânodo. Thomson observou que, quando um campo elétrico era aproximado do tubo, a radiação era desviada, concluindo, assim, que era composta de partículas e não ondas (GAZZINELLI, 2013, p. 46). Thomson (1905, p 1.) apresentou uma propriedade muito interessante sobre esses elétrons, na qual não importava a fonte de onde eram observados, eles aparentavam ser sempre iguais. Com isso, e pelo fato de apresentarem uma massa tão minúscula, Thomson concluiu que os elétrons deveriam fazer parte do átomo. Portanto, como essas partículas são negativamente carregadas, elas devem se repelir, sendo assim, para que haja um equilíbrio atômico deveria haver algo a mais que compõe o átomo. “ [...] Se um átomo é um conjunto desses corpúsculos, deve haver em adição a esses corpúsculos algo que os mantém juntos [...]. Eu suponho que [...] esses

corpúsculos são mantidos juntos pela atração da eletricidade positiva.” (THOMSON, 1905, p 1. Tradução livre).

De acordo com as informações apresentadas, Thomson (1905, p 1.) propôs um novo modelo atômico, Fig. 1.5, concluindo que o átomo se apresenta como uma esfera uniformemente preenchida com eletricidade positiva e que os elétrons estariam imersos nessa esfera. Esse modelo ficou conhecido como pudim de passas. Essa descoberta mudou o pensamento de que o átomo era indivisível, pensamento este que vinha desde a Grécia antiga, já que, agora, os elétrons podiam ser observados fora do átomo.

Figura 1.5 - Modelo atômico de J. J. Thomson.



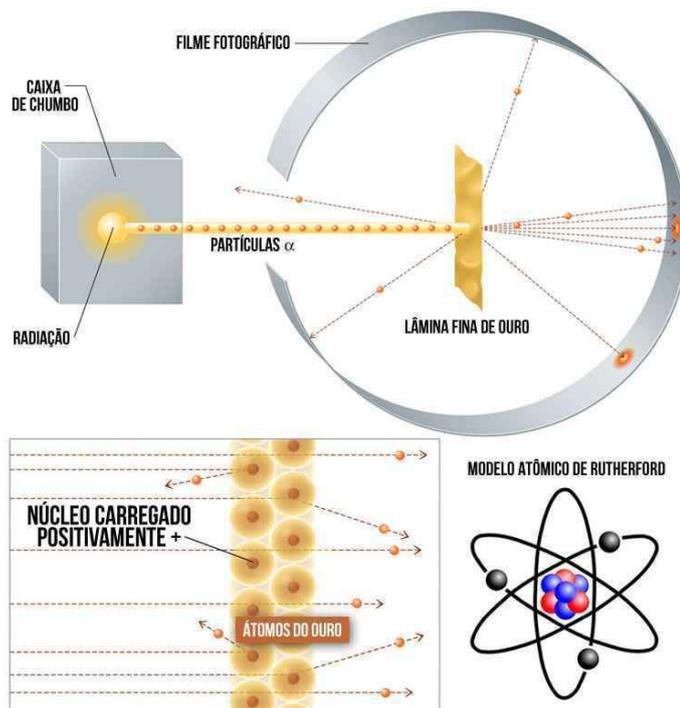
Fonte: Eisberg; Resnick, p. 103, 1979.

Alguns anos depois, o físico Hantaro Nagaoka propôs uma releitura do modelo atômico, onde os elétrons estariam orbitando um ponto central denso e positivo, como o planeta Saturno, e da mesma forma que os seus anéis estão ligados pela gravidade colossal do corpo, os elétrons estariam em equilíbrio com o núcleo pela ação de uma força elétrica. Essa proposta foi, posteriormente, analisada por Ernest Rutherford que, também, propôs um novo modelo atômico (GAZZINELLI, 2013, p. 47).

### 1.3.2 Ernest Rutherford

Em 1911, Rutherford conseguiu explicar, com seu novo modelo, o experimento de bombardeamento da folha de ouro, Fig. 1.6, onde a maioria das partículas alfa incidentes atravessava completamente a folha, enquanto outras apresentavam ângulos de deflexão de  $90^\circ$  até  $180^\circ$ .

Figura 1.6 - Experimento do bombardeamento da placa de ouro e o modelo de Rutherford.



Fonte: <https://www.em.com.br/app/noticia/especiais/educacao/enem/2015/09/25/noticia-especial-enem,691867/o-experimento-de-rutherford.shtml>. Acesso em: 12 mar. 2022.

As implicações desse experimento resultaram na hipótese de que a maior parte constituinte do átomo era espaço vazio, contendo quase toda sua massa no seu centro, ao qual denominou de núcleo atômico, e os elétrons orbitando ao seu redor, diferentemente do que Thomson havia proposto com seu pudim de passas (MAIA, 2009).

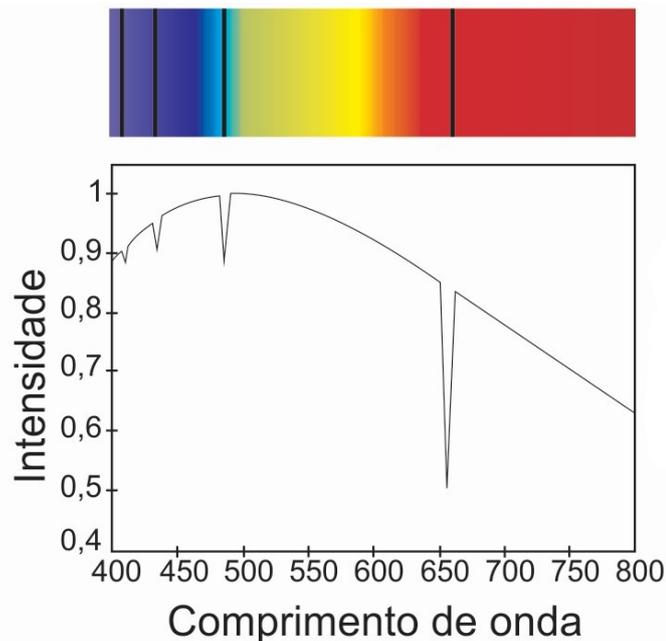
Apesar de conseguir explicar alguns fenômenos físicos e experimentais, o modelo de Rutherford não se mantinha estável quando se analisava o comportamento do elétron no átomo. Em outras palavras, a proposta de que os elétrons orbitavam o átomo não satisfaz as teorias do eletromagnetismo clássico. Quando uma carga é acelerada, ela emite radiação. Portanto, se o elétron orbita o átomo com uma certa velocidade, não o fará por muito tempo, tendendo ao colapso, emitindo energia até colidir com o núcleo (POLKINGHORNE, 2011).

Muitos acreditavam que as novas ideias propostas pela teoria quântica iriam durar. Com muitos componentes abstratos e ainda sem muita explicação, ela era complexa e nada intuitiva.

### 1.3.3 Niels Bohr

Um dos estudos que eram de certo interesse, naquela época, tratava sobre as linhas espectrais dos elementos químicos. Joseph von Fraunhofer, que escapou de ser queimado vivo quando o prédio em que estava desabou, recebeu uma quantia em dinheiro do Rei pelo "milagre" de ter sobrevivido. Usou esses recursos para seu estudo próprio, o que levou, em 1814, à invenção de um novo espectroscópio. Em seu estudo, ele observou que todos os elementos, quando levados a altas temperaturas, em sua forma gasosa, emitiam luz visível, da mesma maneira que um metal emite ao ser aquecido (POLKINGHORNE, 2011). Quando essa luz é analisada e decomposta dentro do espectroscópio, são reveladas as cores que a compõe, conforme exemplificado na Fig. 1.7.

Figura 1.7 - Espectro de emissão do hidrogênio.



Fonte: [http://www.if.ufrgs.br/fis02001/aulas/aula\\_espec.htm](http://www.if.ufrgs.br/fis02001/aulas/aula_espec.htm).  
Acesso em: 13 mar. 2022.

Como observado na Fig. 1.7, o espectro de emissão do hidrogênio é formado por um conjunto de linhas. A natureza dessas linhas espectrais ainda não eram entendidas completamente e foram devidamente explicadas por Niels Bohr, em sua nova proposta de modelo atômico, sobre o qual Maia (2009) diz que:

Para criar um modelo para o átomo e a sua estabilidade, Bohr postula quatro regras, a saber:

- 1- O elétron se move ao redor do núcleo numa órbita circular atraído por uma força de Coulomb, obedecendo às leis da mecânica clássica.
- 2- Em vez da infinidade das órbitas permitidas pela mecânica clássica, os elétrons podem se mover somente em órbitas cujo momento angular é um múltiplo inteiro da constante de Planck dividido por  $2\pi$ .
- 3- Embora constantemente acelerado, o elétron que se move nessas órbitas não emitirá qualquer tipo de radiação, mantendo sua energia constante.
- 4- Um elétron irá emitir/absorver radiação quando muda de uma órbita inicial com energia  $E_i$  para outra com energia  $E_f$  e a energia emitida/absorvida será a diferença dessas energias dividida pela constante de Planck.

Nesse sentido, baseando-se nos conceitos de quantização, Bohr estipulou a quantização da energia dos elétrons em seus orbitais, ou seja, existem órbitas estáveis possíveis para os elétrons no átomo, corrigindo, assim, o problema do modelo de Rutherford.

Aplicando essas quatro regras postuladas por Bohr, é possível estabelecer uma equação para obter os valores de energia para as linhas das séries do átomo de hidrogênio,

$$\omega = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^3} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (1.6)$$

onde  $\omega$  representa a energia do fóton emitido pelo elétron ao se mover de uma órbita para outra;  $1/(4\pi\epsilon_0)$  é a constante de Coulomb;  $\mu$  é a massa reduzida do sistema;  $Z$  é o número atômico;  $e$  é a carga do elétron;  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida; e  $n$  é um número inteiro positivo correspondente à uma órbita eletrônica. Com essa equação, podemos encontrar os valores para as séries do hidrogênio (MAIA, 2009).

Dependendo dos valores de  $n$ , temos séries diferentes. Para  $n_f = 1$  temos a série de Lyman, para  $n_f = 2$  a série de Balmer, para  $n_f = 3$  a série de Paschen, para  $n_f = 4$  temos a série de Brackett e para  $n_f = 5$  temos a série de Pfund. A Fig. 1.8 ilustra estas séries que correspondem aos saltos dos elétrons entre as órbitas. Além disso, Bohr mostrou, usando a física clássica, a energia do elétron em uma órbita específica, como sendo

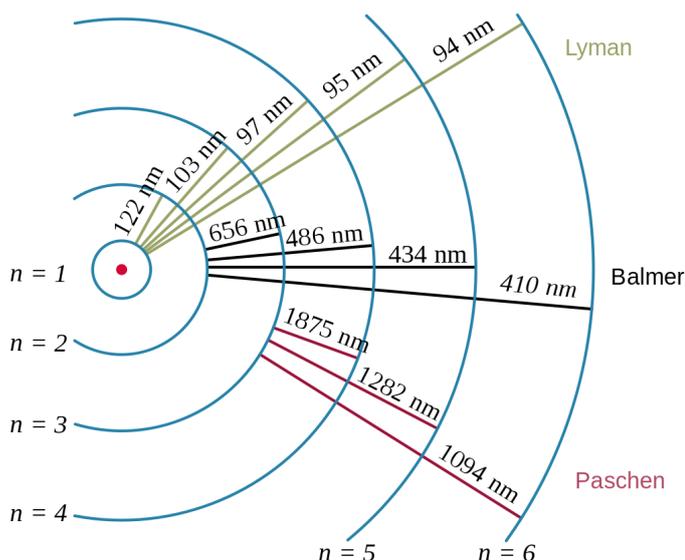
$$E_n = \frac{-\mathfrak{R}hc}{n^2} \quad (1.7)$$

onde  $\mathfrak{R}$  é a constante de Rydberg,  $h$  é a constante de Planck,  $c$  é a velocidade da luz e  $n$  é um número inteiro positivo correspondente à uma órbita eletrônica (MAIA, 2009).

Esse modelo proposto por Bohr conseguiu apresentar concordância com os dados obtidos experimentalmente, sendo capaz de demonstrar com sucesso que os elétrons orbitam o núcleo, diferentemente de como foi proposto pelo modelo de Thomson, assim como, também,

demonstrou que existem níveis energéticos específicos que os elétrons podem ocupar, ou seja, os níveis eletrônicos são quantizados, tornando o átomo estável e conseguindo explicar as emissões espectrais de átomos do tipo hidrogênio, como por exemplo  $He^+$ ,  $Li^{2+}$  e  $Be^{3+}$  (NIAZ ; CARDELLINI, 2011, p. 240).

Figura 1.8 - Séries espectrais do átomo hidrogênio.



Fonte: [https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen\\_spectral\\_series](https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_spectral_series). Acesso em: 13 mar. 2022.

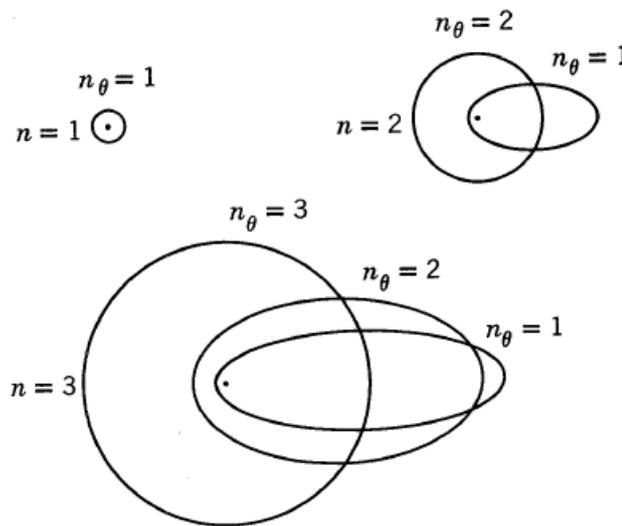
Bohr determinou os intervalos de energia correspondentes aos saltos dos elétrons entre os orbitais específicos, através da análise da energia emitida pelos fótons. Além disso, mostrou que a transição de um nível energético, para um outro, é dada de forma instantânea, sendo a energia perdida pelo elétron, ao ir para um nível menos energético, igual à energia do fóton emitido. Porém, o modelo de Bohr não conseguia explicar com sucesso as linhas espectrais de átomos com mais de um elétron. De maneira a expandir a capacidade demonstrativa do modelo, Arnold Sommerfeld hipotetizou a existência de órbitas elípticas (GAZZINELLI, 2013, p. 58).

### 1.3.4 Arnold Sommerfeld

Levando em consideração que o átomo é divisível e possui partículas constituintes, com proporções muito pequenas, podemos assumir que essas partículas se movam a velocidades relativísticas. Bohr limitou sua discussão ao caso não relativístico, assumindo que

a velocidade do elétron seria muito pequena quando comparada com a da luz (JAMMER, 1989). No entanto, Sommerfeld acreditava que as análises de Bohr para o átomo de hidrogênio estavam, somente, parcialmente corretas, baseado no fato de que era somente uma condição quântica, a quantização do momento angular. Outra importante adição foi a de que as órbitas não deveriam, necessariamente, estar em um único plano, podendo ser orientadas em direções definidas no espaço. Contrário à visão de Bohr, os elétrons moviam-se, agora, em elipses Keplerianas e, durante suas órbitas, eles atravessavam regiões internas de outras órbitas eletrônicas, causando, assim, um acoplamento orbital dos elétrons. Esse novo modelo atômico, Bohr-Sommerfeld, adotava um plano “bidimensional” para a existência dos elétrons. Sommerfeld mostrou, tratando o problema de maneira relativística, que como no caso de todo movimento periódico sob influência de uma força central, o elétron com uma massa de repouso  $m$  descreve uma elipse com um movimento de precessão do periélio lento e um de seus focos no núcleo, como ilustrado na Fig. 1.9 (NIAZ ; CARDELLINI, 2011, p. 241).

Figura 1.9 - Modelo atômico de Sommerfeld.



Fonte: Eisberg; Resnick, p. 132, 1979.

Com essa nova abordagem, de que as órbitas eletrônicas eram elípticas, o modelo atômico de Bohr-Sommerfeld foi amplamente aceito pela comunidade científica como uma alternativa ao modelo de Bohr. Porém, como com qualquer teoria, esse modelo também tem suas falhas e limitações. Segundo Dickerson et al.:

Arnold Sommerfeld (1868-1951) propôs um modo engenhoso para salvar a teoria de Bohr. [...]ele explicou as diferenças na estabilidade dos níveis com o mesmo número

quântico principal,  $n$ , em termos da habilidade das orbitas altamente elípticas conseguirem trazer o elétron próximo ao núcleo[...]. O esquema de Sommerfeld nos levou não muito além dos metais alcalinos. Novamente apresenta-se um impasse, e uma nova visão seria necessária (2020, p. 269-271, tradução livre).

Nesse sentido, nota-se a necessidade de um avanço mais detalhado e que consiga generalizar os conceitos e hipóteses em um único método ou modelo, para que possa haver uma base mais fundamentada dessa chamada teoria quântica antiga.

#### 1.4 O comportamento ondulatório da matéria

Nos anos que se seguiram, o modelo de Bohr-Sommerfeld conseguiu, com êxito, ser aplicado a várias teorias atômicas, conseguindo expandir o alcance do modelo de Bohr, aplicando a átomos mais complexos. No entanto, esse modelo não conseguia ser representado de uma maneira elegante e suas aplicações falhavam em certos aspectos. Era necessária uma mudança de paradigma.

Quando Einstein propôs a ideia de que a luz era composta por fótons, assumiu que essas partículas não possuíam massa. Porém, quando ele publicou seu brilhante artigo sobre a Teoria da Relatividade Especial, relacionou massa com energia como

$$E = hf = h \frac{c}{\lambda} = mc^2 \quad (1.8)$$

Essa teoria implica que, como o fóton possui comprimento de onda  $\lambda$  e frequência  $f$ , ele deve possuir massa de repouso

$$m = \frac{h}{\lambda c} \quad (1.9)$$

Com isso, ficou evidente que a luz possuía propriedade dualista, podendo se comportar como onda e partícula (BROWN et al., 2021). Essa nova teoria da radiação instigou um jovem duque francês a ter um pensamento simples, porém revolucionário sobre a natureza da matéria. Louis Victor Pierre Raymond, duque de Broglie, era estudante de história e tinha como objetivo seguir na carreira diplomática, no entanto veio a primeira guerra mundial, o que o levou a ir trabalhar nas estações de radio-telegrafia. Sempre foi muito interessado pela física e as suas novas descobertas. Tinha um irmão, Maurice de Broglie, que,

em seus anos servindo na marinha francesa, despertou o interesse pela física e, um tempo depois, largou a mesma para trabalhar com raios x. Louis de Broglie foi trabalhar no laboratório de seu irmão, já que tinha algum conhecimento sobre ondas eletromagnéticas, oriundo de seu tempo no exército (GAZZINELLI, 2013, p. 55).

Ao contrário de seu irmão, que era um ótimo experimentalista, Louis tinha mais facilidade com a teoria, chegando a escrever alguns de seus primeiros artigos sobre o efeito fotoelétrico descrito por Einstein. Em sua tese de doutorado, de Broglie teve a brilhante ideia de generalizar a dualidade da luz, para a matéria. Ele propôs que, da mesma maneira que as ondas eletromagnéticas podem apresentar comportamento corpuscular, a matéria poderia, analogamente, apresentar comportamento ondulatório. Desse modo, além das propriedades de massa  $m$  e momento  $p$ , que caracterizam o elétron como partícula, teria, também, comprimento de onda  $\lambda$ , frequência  $f$  e amplitude  $A$ , que definem sua natureza ondulatória (GAZZINELLI, 2013, p. 56).

De Broglie fez essa associação por meio de uma fórmula bem simples, associando a Eq. (1.9), na qual

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.10)$$

Essa propriedade ondulatória da matéria não foi detectada antes pelo fato do comprimento de onda associado à matéria ser extremamente pequeno, sendo, às vezes, menor do que um núcleo atômico ( $10^{-14}m$ ), o que é inimaginável (BROWN et al., 2021). Seu trabalho repercutiu muito bem no meio acadêmico, fazendo com que vários cientistas o aceitassem e previssem que seria possível comprovar, experimentalmente, a teoria proposta.

De Broglie fez, também, investigações sobre o modelo atômico de Bohr para o hidrogênio e o fato de somente permitir níveis específicos de energia para os elétrons. Ele estipulou que os elétrons poderiam se comportar como ondas estacionárias, ou seja, uma onda que não viaja no espaço. Um exemplo de onda estacionária pode ser observado quando uma corda de violão ou violino é tocada, vibrando entre os dois pontos de fixação da corda (BROWN et al., 2021). Sendo o comprimento da corda  $L$ , então o estado vibratório de menor energia tem comprimento de onda tal que

$$L = \frac{\lambda}{2} \quad (1.11)$$

$$\lambda = 2L \quad (1.12)$$

Quando, por exemplo, essa corda é tocada com mais força, ou seja, uma vibração mais energética, o seu comprimento de onda é

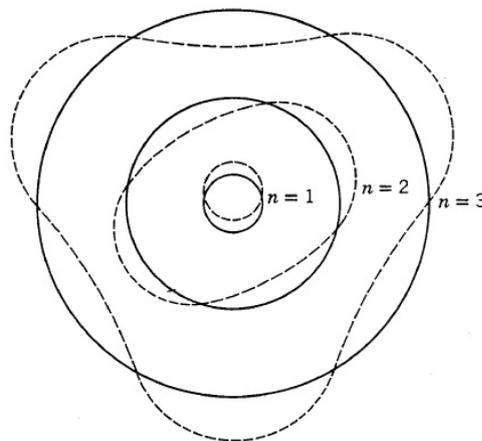
$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad (1.13)$$

onde  $n$  é um número inteiro. Sendo assim, as ressonâncias advindas da vibração das cordas são quantizadas (BROWN et al., 2021). Porém, não necessariamente essas ondas estacionárias estão presas a uma dimensão, podemos aplicar isso a um tambor, por exemplo, onde o comprimento de onda se dá como:

$$\lambda = \frac{2\pi r}{n} \quad (1.14)$$

De Broglie estipulou que os elétrons se comportariam como ondas estacionárias circulares no átomo. Essa onda estacionária, Fig. 1.10, poderia existir somente se a circunferência do círculo fosse um número inteiro múltiplo do comprimento de onda, de modo que as ondas que se propagam estivessem todas em fase, aumentando a amplitude e causando interferência construtiva. Também, se o contrário ocorresse, as ondas propagadas estariam fora de fase, diminuindo a amplitude e causando interferência destrutiva. As ondas não ressonantes irão interferir com elas mesmas. Essa ideia de de Broglie explicou as órbitas e níveis energéticos permitidos de Bohr de uma maneira elegante (BROWN et al., 2021).

Figura 1.10 - Ondas estacionárias circulares.



Fonte: Eisberg; Resnick, p. 130, 1979.

Algumas das ideias de de Broglie continuaram a ser usadas na mecânica quântica (MQ) moderna, como o conceito de onda associada ao elétron e o número de nós que aumenta conforme o nível energético aumenta. Infelizmente, o seu modelo e o de Bohr contem um ponto em comum que agora sabemos estar incorreto: no modelo aceito, atualmente, o elétron não está sempre a mesma distância do núcleo, quando em uma dada órbita (BROWN et al., 2021). Por suas contribuições sobre a natureza ondulatória da matéria, Louis de Broglie recebeu, em 1929, o prêmio Nobel em física.

### 1.5 O princípio da incerteza

Uma onda viaja no espaço livremente, sem pontos fixos, sendo difícil identificar com precisão a sua posição. De maneira análoga, seria difícil descrever a posição de uma partícula que apresenta comportamento ondulatório. Quando a luz passa por uma fenda muito pequena, um padrão de difração aparece. Portanto, segundo a ideia de de Broglie, deve ocorrer a difração do elétron quando passar por uma fenda com tamanho na magnitude do comprimento de onda do elétron. Esse fenômeno foi descrito, matematicamente, pelo físico alemão, Werner Heisenberg, em 1927.

Heisenberg trabalhava com medições espectrais para entender melhor os detalhes atômicos. A importância da espectroscopia se tornou válida ao ponto em que era possível fazer medições precisas, capazes de grande refinamento. Heisenberg estava interessado em uma aplicação mais ampla da espectroscopia, seguindo os estudos feitos com o átomo de hidrogênio. Durante um retiro para se recuperar de uma febre forte, Heisenberg fez sua grande descoberta. Seus cálculos eram muito complexos mas a base deles eram entidades matemáticas chamadas de matrizes. Essa descoberta teve um grande impacto na física, sendo que as propriedades matriciais são ligadas a quantidades que podem ser medidas simultaneamente na MQ. Logo, essa descoberta ficou conhecida como mecânica matricial.

A matemática, por trás das matrizes, ainda era exótica para os físicos do início do século XX, quando a maioria dos trabalhos matemáticos eram associados aos movimentos das ondas, que envolviam equações diferenciais parciais (POLKINGHORN, 2011).

Uma das suas mais importantes contribuições foi explicar, matematicamente, a impossibilidade de conseguir medir duas grandezas simultaneamente, o que era considerado

como um problema de medição. O princípio da incerteza de Heisenberg afirma que há uma incerteza inerente no ato de medir uma variável de uma partícula. Esse princípio é, geralmente, aplicado quando se pretende medir a posição  $x$  e o momento  $p$  de uma partícula, a implicação está no fato de quanto maior a precisão na medida da posição, maior a incerteza no valor do momento da partícula, e vice-versa. A mesma ideia pode ser aplicada à energia  $E$  e tempo  $t$ , ou seja, não é possível medir com precisão a energia em um tempo definido, se temos o valor exato da energia a incerteza no tempo será infinita (BROWN et al., 2021). Essa ideia, nada intuitiva, pode ser descrita, matematicamente, da seguinte forma, para posição e momento

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.15)$$

onde  $\Delta$  se refere à incerteza na variável em questão, e  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida.

Para melhor compreender o significado e implicação dessa incrível relação matemática, podemos imaginar o que realmente está envolvido no processo de medição de uma partícula. O ato de observar um objeto qualquer no dia a dia, por exemplo, se dá pela reflexão da luz, vinda de uma fonte, na superfície do objeto em direção aos nossos olhos. No meio microscópico, o processo se dá da mesma forma, porém com algumas implicações muito interessantes. Quando se trabalha com partículas com massas muito pequenas, fenômenos anormais começam a ocorrer. Como vimos anteriormente, Einstein postulou que mesmo um fóton não possuindo massa ele possui momento, fazendo com que quando a partícula com que estamos trabalhando tenha uma massa muito pequena, esse momento do fóton seja transferido à partícula na forma de energia cinética. Nesse sentido, ao tentarmos medir sua posição, o ato de observar a partícula influenciou no seu momento, e o contrário também ocorre, se observarmos seu momento, a sua posição se tornará incerta (BROWN et al., 2021).

Por isso, essa abordagem é bastante contra intuitiva. Na física clássica, Newton diz que a imprecisão nas medidas é referente ao equipamento utilizado, sendo possível sempre aprimorá-lo. Já, na física quântica, não importa o quão refinado seja o método e o equipamento, o princípio da incerteza é um estado fundamental da teoria quântica. O princípio da incerteza de Heisenberg foi um dos fatores que acarretaram para o refutamento do modelo atômico de Bohr, pois o modelo afirmava que era possível saber em que órbita o elétron se encontrava e qual a sua energia. De acordo com a teoria atômica atual, os elétrons não

orbitam o núcleo de uma maneira harmoniosa como os planetas orbitam o Sol. Só podemos realizar aproximações de onde o elétron pode se encontrar dentro da nuvem de probabilidade eletrônica. Esse modelo da nuvem de elétrons foi desenvolvido por vários cientistas, mas, principalmente, por Erwin Schrödinger (GAZZINELLI, 2013, p. 88).

No próximo capítulo vamos entrar mais a fundo na teoria quântica através de uma breve revisão matemática sobre números complexos e probabilidades.

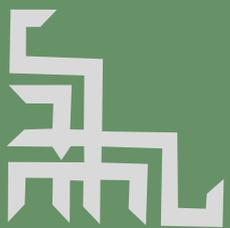
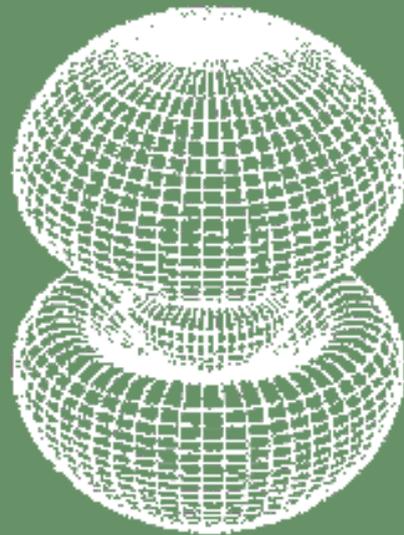


INTRODUÇÃO AO  
ESTUDO DA MECÂNICA  
QUÂNTICA

---

2

---



A teoria quântica é essencialmente matemática, contendo modelos físicos que nos ajudam a compreender melhor a sua natureza. Os modelos científicos são usados em todos os campos de ensino como uma forma de explicar e prever o comportamento de objetos reais. A importância desses modelos, não só no caso da teoria quântica, é que eles promovem um entendimento parcial do conteúdo apresentado, exigindo pouco ou nada de conhecimento matemático (ROGERS, 2012). Esse aspecto educacional é pertinente para que o saber seja melhor e mais difundido, diminuindo o analfabetismo científico social. Porém, se quisermos realmente entender a teoria, não podemos deixar de lado uma boa noção da matemática envolvida. Não se consegue apreciar, verdadeiramente, o conteúdo a menos que conheçamos a matemática da teoria quântica. Não conseguimos, também, apreciar a beleza da estrutura lógica presente nela, sem ter um bom conhecimento da sua matemática.

Para que se possa ter uma boa compreensão do material que será apresentado, é importante ressaltar o que é esperado que o estudante já saiba como, por exemplo: conhecimentos básicos de trigonometria, números complexos e geometria analítica, integração e diferenciação, equações diferenciais ordinárias e diferenciações parciais. Com esse conhecimento, o aluno será capaz de entender completamente todo o conteúdo abordado aqui, só dependendo dele próprio estar preparado para refletir profundamente sobre as ideias não muito familiares introduzidas pela teoria (GEORGE, 1972).

A física utilizada para descrever estados macroscópicos não consegue interpretar os conceitos apresentados pela teoria quântica, ou seja, não podemos derivar as equações dos movimentos de partículas subatômicas a partir das equações de Newton, por exemplo. É necessária a formulação de novos postulados que, a princípio, podem parecer arbitrários. Porém, servem de base para o equacionamento de novas fórmulas matemáticas, capazes de fundamentar os experimentos oriundos da teoria.

Existem vários métodos para a formulação da MQ, que chegam à mesma conclusão: Erwin Schrödinger, um físico de Viena, utilizou métodos da mecânica ondulatória para formular a teoria. Ele propôs que uma partícula pode ser descrita por sua função de onda, que é uma função da posição.; Werner Heisenberg usou o método das matrizes; Paul Dirac, um físico Inglês, usou um método completamente simbólico para a sua formulação, os bra-kets. Todos esses três métodos chegaram aos mesmos resultados (GEORGE, 1972).

Como mencionado anteriormente, a MQ, em si, é quase que puramente matemática, por isso, é muito importante criar uma base sólida nos fundamentos matemáticos que a envolvem. Nesse sentido, para o nosso propósito, iremos fazer uma breve revisão sobre números complexos e os fundamentos de probabilidade, para que possamos melhor interpretar a teoria quântica.

Antes de prosseguirmos, é pertinente apontar alguns conceitos chave que, por hora, podem gerar mais dúvidas, mas são importantes pelo fato de adicionarem conhecimentos para que possamos dar sentido ao conteúdo, no decorrer do nosso estudo. Veremos que:

A função de onda  $\Psi(x, y, z, t)$  é uma função complexa que, naturalmente, é trabalhada em três dimensões. Uma função de onda, segundo Schrödinger, descreve as propriedades de uma partícula. O valor da função em cada posição é um número complexo, e o quadrado do valor absoluto dessa função representa a densidade de probabilidade  $|\Psi|^2$  da partícula ser encontrada se a sua posição for calculada.

Os operadores atuam em  $\Psi$  e conectam  $\Psi$  a quantidades observáveis, utilizando um acento circunflexo para sua representação como, por exemplo, um operador qualquer  $\hat{Q}$ . Operadores representam quantidades físicas observáveis, como energia cinética, momento angular, etc., aplicando elas na função de onda.

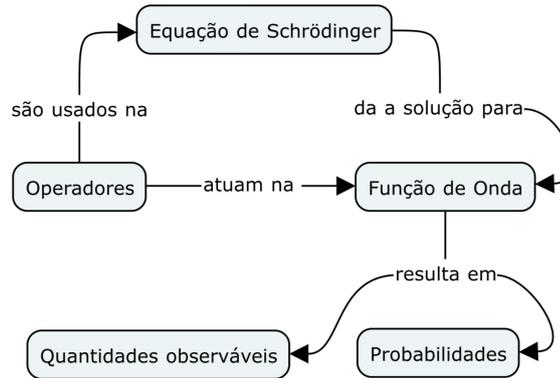
A equação de Schrödinger, na sua forma aplicável a sistemas que dependem tanto da energia quanto do tempo, é dada como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi = (\hat{K}E + \hat{U}) \Psi \quad (2.1)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi \quad (2.2)$$

onde  $\hat{H}$  é o operador hamiltoniano que representa a energia total do sistema;  $\hat{K}E$  representa a energia cinética do sistema;  $\hat{U}$  representa a energia potencial do sistema. A Fig. 2.1 mostra a relação entre os conceitos chave e no que eles resultam.

Figura 2.1- Mapa conceitual dos pontos principais da equação de Schrödinger.



Fonte: Autor, 2021.

Observamos na figura a cima, que os operadores atuam na função de onda e são usados na equação de Schrödinger. Esta, por sua vez, da a solução para a função de onda, que resulta em probabilidades e quantidades observáveis.

## 2.1 Revisão matemática

### 2.1.1 Números complexos

É importante reservarmos esse espaço para uma revisão e discussão dos números complexos, pois as equações fundamentais que são a base da MQ possuem, em sua formulação, elementos complexos. Nesse sentido, apresentamos, primeiramente, suas características e propriedades.

A definição básica de um número complexo se dá na forma

$$Z = x + iy \quad (2.3)$$

onde  $Z$  representa um número complexo, composto por uma parte real  $x$  e parte imaginária  $iy$ , onde  $i$  se apresenta como

$$i = \sqrt{-1} \quad \text{ou} \quad i^2 = -1 \quad (2.4)$$

As duas variáveis  $x$  e  $y$  são reais, sendo a ação de  $i$  que a torna imaginária. O valor de  $Z$  será totalmente real se  $y = 0$  e totalmente imaginária se  $x = 0$  (CARLSON, 2013).

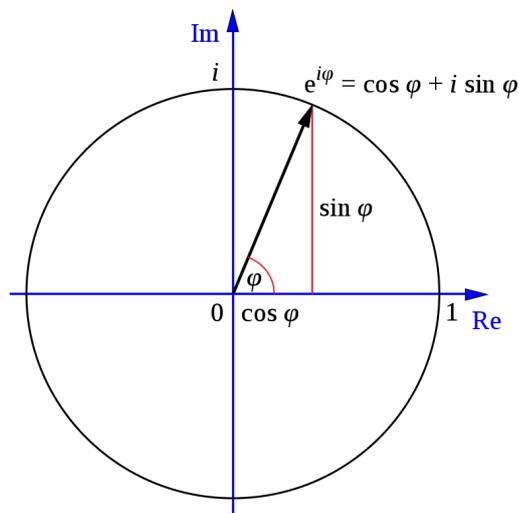
Um dos fatores que fazem os números complexos serem usados bastante na física é o de que a sua interpretação geométrica representa direções, em duas dimensões e várias de suas

operações tem significado geométrico direto. Isso é muito útil para criar modelos de fenômenos periódicos, especialmente os que apresentam diferenças de fase (KARAM, 2020). Uma fórmula bastante utilizada, quando se trabalha com números complexos é a de Euler, que descreve a relação entre funções trigonométricas e funções exponenciais complexas,

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi \quad (2.5)$$

A interpretação geométrica da fórmula de Euler é dada na Fig. 2.2.

Figura 2.2 - Representação trigonométrica da fórmula de Euler, com  $|Z| = 1$ .



Fonte: [https://en.wikipedia.org/wiki/Euler%27s\\_formula](https://en.wikipedia.org/wiki/Euler%27s_formula). Acesso em: 8 mar. 2022.

Os números complexos se apresentam, também, na forma polar como

$$|Z| = x + iy = \sqrt{x^2 + y^2}(\cos \varphi + i \sin \varphi) \quad (2.6)$$

onde  $x + iy$  estão na forma retangular e  $\varphi = \arctan(y/x)$  (CARLSON, 2013).

Sabendo essas propriedades, podemos expressar algumas operações básicas dos números complexos.

Adição (subtração)

$$(a + ib) + (c + id) = (a + c) + i(b + d) \quad (2.7)$$

Multiplicação (distribuição)

$$(a + ib)(c + id) = (ac - bd) + i(ad + bc) \quad (2.8)$$

Divisão (racionalização)

$$\frac{a + ib}{c + id} = \frac{a + ib}{c + id} \frac{c - id}{c - id} = \frac{(ac + bd) + i(bc - ad)}{c^2 + d^2} \quad (2.9)$$

É sempre importante lembrar do valor de  $i^2 = -1$  que aparece, muitas vezes, nos cálculos, pois sua natureza negativa altera constantemente o sinal das operações.

Podemos, ainda, definir o conjugado complexo de um número complexo, sendo representado por um asterisco ao seu lado,

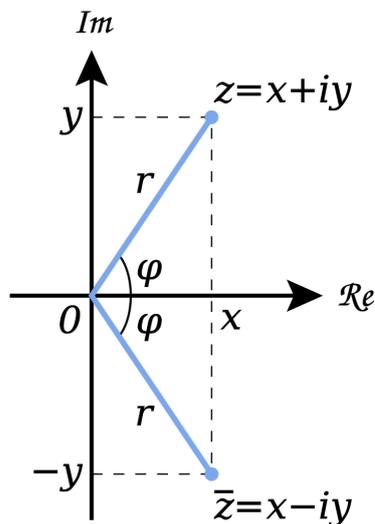
$$Z^* = (x + iy)^* = x - iy \quad (2.10)$$

e a sua magnitude ao quadrado sendo o produto do número com o seu conjugado complexo, ou a soma dos quadrados das partes reais e imaginárias (CARLSON, 2013).

$$|Z|^2 = ZZ^* = \text{Re}(Z)^2 + \text{Im}(Z)^2 \quad (2.11)$$

A relação entre a forma retangular e polar dos números complexos, assim como seu conjugado complexo, pode ser expressada de maneira trigonométrica, conforme a Fig. 2.3.

Figura 2.3 - Representação trigonométrica dos números complexos.

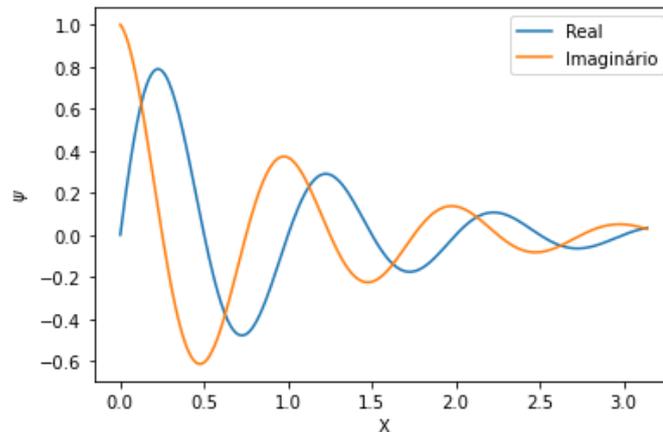


Fonte: [https://en.wikipedia.org/wiki/Complex\\_number](https://en.wikipedia.org/wiki/Complex_number). Acesso em: 8 mar. 2022.

Outro ponto importante para abordarmos são as funções complexas no âmbito da MQ. A teoria das funções complexas pode ser bastante difícil de compreender, porém na mecânica

quântica, elas se apresentam de forma mais amigável. Iremos, geralmente, trabalhar somente com a função de onda com uma variável  $\Psi(x)$ , onde  $\Psi(x)$  é uma função complexa e  $(x)$  é a parte real. Uma maneira de visualizarmos isso se apresenta na Fig. 2.4.

Figura 2.4 - Representação de uma função complexa.



Fonte: Autor, 2022.

Resumindo, tenha em mente que os números complexos possuem duas partes, uma real e uma imaginária. Podem ser representados em um plano cartesiano por  $x$  e  $y$  e, nesse mesmo plano cartesiano, na forma polar, com a distância do polo chamada de coordenada radial e um ângulo chamado de coordenada angular (CARLSON, 2013).

A MQ faz o uso dos números complexos de uma maneira mais fundamental do que normalmente é tratada na matemática, em que pôde-se tratar uma quantidade física como sendo real e complexa, mas somente dar importância, significado físico à parte real. Os números complexos são excelentes ferramentas para tornar os cálculos mais fáceis de se trabalhar, porém nenhum sentido físico está acoplado às variáveis complexas. O uso mais fundamental nos números complexos pela MQ está no fato de utilizar quantidades complexas, por exemplo funções de onda de um tipo especial, que não podem ser separadas em partes puramente reais ou imaginárias. Além disso, essas quantidades não possuem significados físicos acoplados a elas, mas a outras operações que irão produzir valores reais como, por exemplo, o quadrado da função de onda que veremos a seguir (KARAM, 2020). Veremos, também, no capítulo de interpretação da  $\Psi$ , uma maneira muito interessante de demonstrar a importância dos números complexos na base fundamental da teoria quântica.

Como os números complexos têm papel fundamental no aprendizado da MQ, apesar de que não iremos entrar muito a fundo no seu desenvolvimento com a equação de

Schrödinger, proponho uma série de exemplos para que essa parte da revisão seja bem fixada, e que no futuro seja algo que possa ser revisitado.

### 2.1.2 Exemplos de números complexos

1. Se  $w = 3 + 4i$  e  $z = -1 + 2i$ , encontre:

a)  $w + z$

$$(3 + 4i) + (-1 + 2i) = 2 + 6i$$

b)  $wz$

$$(3 + 4i)(-1 + 2i) = (-3 - 8) + i(6 - 4) = -11 + 2i$$

c)  $w/z$

$$\frac{(3 + 4i)}{(-1 + 2i)} \frac{(-1 - 2i)}{(-1 - 2i)} = \frac{(-3 + 8) + (-6 - 4i)}{(1 + 4) + (-2i + 2i)} = \frac{5 - 10i}{5} = 1 - 2i$$

d)  $|w|$

$$\sqrt{3^2 + 4^2} = 5$$

2. Simplifique a expressão (separar a parte real e imaginária):

$$\frac{(x + iy)(ic) + d}{f + ig}$$

Resolução:

$$xic + yci^2 = xic - yc + d = \frac{(d - yc) + xic}{f + ig}$$

$$= \frac{(d - yc) + xic}{f + ig} \frac{f - ig^*}{f - ig^*}$$

$$\frac{\text{Real} \leftarrow [(f(d - yc) + xcg)] + [i(g(d - yc) + xcf)] \rightarrow \text{Img}}{[f^2 + g^2] \rightarrow \text{Real}}$$

3. Resolva a equação para  $x$ :

$$\frac{(x + iy)(ic) + d}{f + ig} = 0$$

Resolução:

$$xic + yci^2 = xic - yc + d = \frac{(d - yc) + xic}{f + ig} = 0$$

$$\frac{(d - yc) + xic}{f + ig} = 0 + 0i$$

A expressão  $+i0$  é posta pois a resposta também contém partes reais e imaginárias. Sendo assim, para que a equação satisfaça essa igualdade, tanto a parte real quanto a imaginária devem ser 0,

$$(d - yc) = 0 \quad xic = 0$$

a não ser que  $c = 0$ , então,

$$x = 0$$

4. Encontre as raízes cúbicas de 1:

$$Z^3 = 1 \rightarrow (x + iy) = 1$$

Resolução:

$$x^3 + 3x^2(iy) + 3x(iy)^2 + (iy)^3 = 1$$

$$(x^3 - 3xy^2) + i(3x^2y - y^3) = 1 + 0i$$

$$\text{Real} \rightarrow x^3 - 3xy^2 = 1 \tag{2.12}$$

$$\text{Img} \rightarrow 3x^2y - y^3 = 0$$

$$y(3x^2 - y^2) = 0 \tag{2.13}$$

Para que a Eq. (2.13) seja verdadeira, ou  $y = 0$  ou,  $3x^2 - y^2 = 0$ , então, nos facilita utilizar  $y = 0$ . Substituindo temos,

$$x^3 - 3x(0^2) = 1$$

$$x^3 = 1 \rightarrow x = 1$$

Ou seja, nosso primeiro valor de  $Z$  é:

$$Z = 1$$

Utilizando a Eq. (2.13), podemos resolver os parênteses

$$3x^2 = y^2 \quad (2.14)$$

Substituindo  $y^2$  na Eq. (2.12) fica,

$$\begin{aligned} x^3 - 3x(3x^2) &= 1 \\ -8x^3 &= 1 \\ x &= -\frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Substituindo a Eq. (2.15) na Eq. (2.14), resulta em

$$\begin{aligned} 3 \left( -\frac{1}{2} \right)^2 &= y^2 \\ y &= \pm \sqrt{\frac{3}{4}}i \end{aligned}$$

Obtemos, então, as raízes cúbicas de  $Z$  com valor:

$$Z = 1, \quad Z = -\frac{1}{2}, \quad Z = \pm \sqrt{\frac{3}{4}}i$$

### 2.1.3 Probabilidade

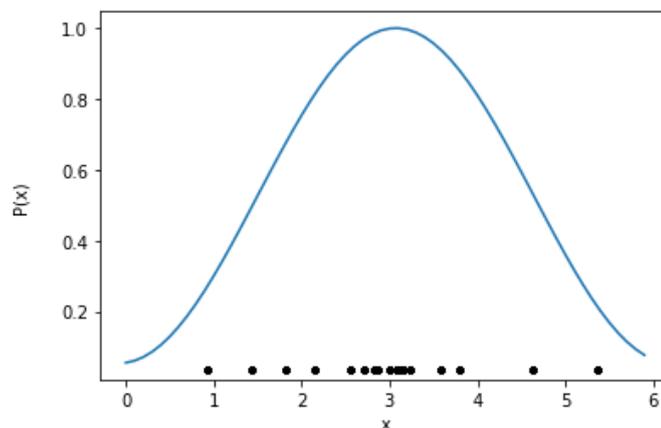
A probabilidade é muito importante em várias áreas da física. Quando realizamos um processo de medição, é impossível obter um valor exato, um número infinitamente preciso, isso porque qualquer instrumento tem uma resolução finita. Isso não diz respeito somente à mecânica quântica, pois até uma régua tem imprecisões. Porém, classicamente, essa incerteza na medida não afeta drasticamente o resultado. Já, quando se trata de medidas que exigem um grande grau de precisão, é muito mais confiável designar uma gama de valores do que um valor exato, ou seja, podemos ter muito mais certeza sobre a medição se definirmos um pequeno intervalo de valores do que escolher exatamente um valor (CARLSON, 2013).

A física clássica e a MQ diferem no sentido de que quando trabalhamos com objetos quânticos os resultados, geralmente, são probabilísticos. Antes de discutirmos as características probabilísticas da teoria, vamos voltar um pouco e discutir sobre probabilidade

no geral, para que se entenda a essência que envolve essa parte da matemática e, também, apresentar algumas notações importantes.

Tenhamos como exemplo um experimento onde uma bolinha é largada do topo de uma pequena rampa, sem velocidade inicial, e queremos medir a sua posição quando cai no chão. Se as condições fossem todas as vezes idênticas, a bolinha deverá cair exatamente no mesmo lugar. Porém, sabemos que podem haver imprecisões, tanto ao soltar a bolinha, quanto na altura exata em que ela foi solta. Essas imprecisões fazem com que ela não caia sempre no mesmo lugar, ou seja, as posições onde ela cai representam uma distribuição, que podemos chamar de distribuição probabilística  $P(x)$ , segundo a Fig. 2.5,

Figura 2.5 - Distribuição probabilística do lançamento de uma bolinha e suas posições.



Fonte: Autor, 2022.

onde a amplitude da curva representa a maior probabilidade de encontrarmos a bolinha após o lançamento (CARLSON, 2013). Veremos, mais a diante, a relação entre  $\Psi(x)$  e o conceito de probabilidade. Nesse sentido, sugerimos alguns exemplos e exercícios para relembrar/introduzir alguns conceitos de probabilidade.

#### 2.1.4 Distribuições probabilísticas

Podemos definir dois tipos de probabilidade como: probabilidade discreta e probabilidade contínua. A distribuição discreta descreve quantidades aleatórias (dados de interesse) que podem assumir valores particulares sendo os valores são finitos.

1- Digamos que temos em posse alguns valores de um determinado evento:

*Dados:* 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 5.

Podemos organizar, no quadro 2.1, esses dados de uma forma que relacione os seus valores com a probabilidade de ocorrerem:

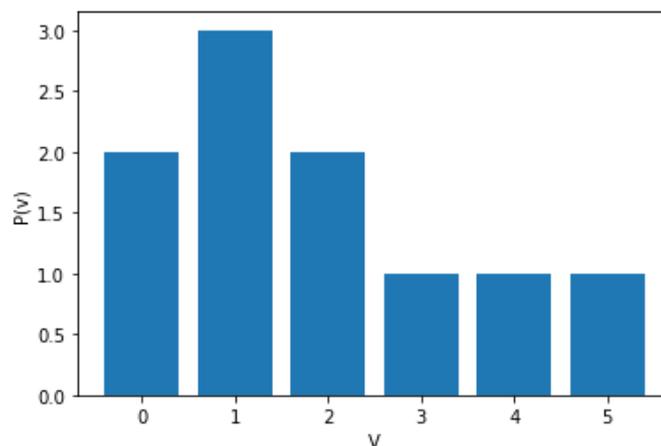
Quadro 2.1- Relação entre valor e probabilidade.

<b>Valores</b>	0	1	2	3	4	5
<b>Probabilidade</b>	2/10	3/10	2/10	1/10	1/10	1/10

Fonte: Autor, 2021.

Colocando esses valores em um gráfico, temos uma visão melhor de como essa distribuição se dá. Observe a Fig. 2.6, onde  $P(v)$  representa a probabilidade e  $V$  os valores:

Figura 2.6 - Distribuição de probabilidade dos dados.



Fonte: Autor, 2022.

Se temos somente um determinado conjunto de valores como, por exemplo, os números inteiros do evento, estamos lidando com uma distribuição probabilística discreta, onde a soma das probabilidades é igual a 1, como mostra a tabela onde, se somarmos as probabilidades, temos  $10/10 = 1$  (CARLSON, 2013).

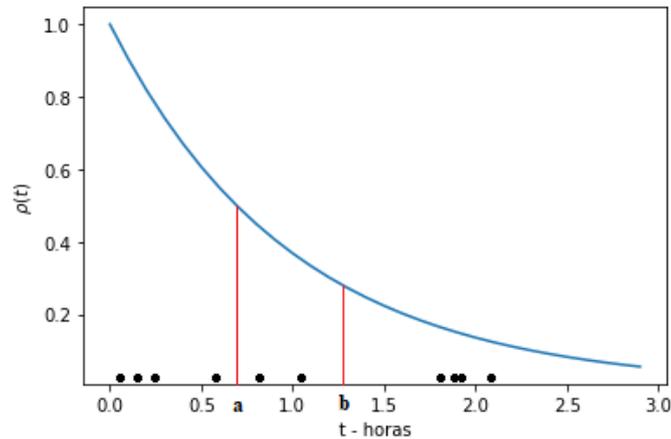
O outro tipo é a distribuição contínua, que representa quantidades aleatórias contínuas que podem tomar um número infinito de valores. Por exemplo:

2- Foram coletados dados de pessoas que ficaram aguardando um tempo em uma chamada quando ligaram para um serviço técnico, em horas:

*Dados:* 0.072, 0.117, 0.232, 0.549, 0.799, 1.099, 1.740, 1.836, 1.888, 2.161

Podemos representar essa distribuição conforme a Fig. 2.7,

Figura 2.7 - Gráfico da distribuição de probabilidade contínua dos dados informados.



Fonte: Autor, 2022.

onde  $\rho(t)$  é denominado densidade de probabilidade. Essa distribuição é chamada de contínua pois os valores de  $t$ , que representam as horas, são contínuos, podendo se estender, hipoteticamente, para o infinito (CARLSON, 2013). O que distingue essa distribuição de uma distribuição discreta é que, se quisermos medir  $\rho(t)$  na posição 1, por exemplo, teremos que  $\rho(1) = 0$ , ou seja, a probabilidade de termos exatamente o valor em 1 é zero. Podemos pensar da seguinte maneira: se perguntarmos para uma pessoa aleatória, na rua, se a sua idade é 18 anos, 3 meses, 4 dias, 5 horas, 3 minutos..., a probabilidade de termos uma resposta exata é zero. Estamos sendo muito específicos. Por isso, devemos assumir uma gama maior de valores para que tenhamos uma probabilidade maior de obter um resultado não nulo. Dessa forma, se definirmos dois pontos  $(a, b)$  podemos calcular a probabilidade de encontrar um valor de  $t$  dentro desse intervalo, por meio da Eq. (2.16).

$$P(a < t \leq b) = \int_a^b \rho(t) dt \quad (2.16)$$

Assim como na distribuição discreta, a distribuição contínua precisa que a soma de suas probabilidades resultem em 1. Porém, nesse caso não há uma simples soma a ser feita por isso, ela se dá na forma de uma integral,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(t) dt = 1 \quad (2.17)$$

Se possuímos uma gama contínua de resultados, temos de usar a probabilidade contínua e integrar os valores para obter suas propriedades (CARLSON, 2013).

### 2.1.5 Propriedades das distribuições probabilísticas

Após entendido o conceito de probabilidade, podemos introduzir algumas propriedades, tanto das distribuições discretas, quanto das distribuições contínuas.

Para distribuições probabilísticas discretas temos a primeira propriedade, que diz respeito à mediana. Observe os dados abaixo:

*Dados discretos:* 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 5.

*Dados contínuos:*  $\rho(x) = e^{-x}$

A mediana nos indica um valor que se encontra no meio da amostra de dados, ou seja, como temos dez unidades, a mediana se encontra no meio desse valor. Segundo os dados, a mediana se encontra entre 1 e 2. Geralmente, em uma distribuição discreta, quando não se tem um valor exato do número de dados para a mediana, é comum colocar um número que fique entre as duas metades, sendo nosso valor 1,5, ou seja, para a metade dos dados à esquerda este número é maior enquanto que para a metade à direita é menor (CARLSON, 2013).

Já, em uma distribuição contínua, a mediana pode ser expressa de modo que a probabilidade resulte em uma metade, por exemplo, se integrarmos de menos infinito, que é o menor limite que pôde-se ter, até o valor da mediana teríamos 0,5, esse valor representa a metade mencionada. Observe a Eq. (2.18)

$$\int_{-\infty}^{\text{mediana}} \rho(x) dx = 0,5 \quad (2.18)$$

Então, utilizando os dados, temos que

$$\int_0^m e^{-x} dx = -e^{-x} \Big|_0^m = 0,5$$

simplificando,

$$1 - e^{-m} = 0.5$$

e resolvendo para  $m$ , temos

$$m = \ln 2$$

O limite foi colocado em 0 seguindo a condição de que é 0 se  $x < 0$ , também o valor de  $\rho(x)$  é definido como 0 se  $x < 0$  e  $e^{-x}$  se  $x > 0$  (CARLSON, 2013).

A segunda propriedade é a média. Ela representa a soma das unidades de valor, tendo sobre si os valores multiplicados pela probabilidade de obtermos tal valor. Para distribuições discretas podemos descrever, matematicamente, como

$$\mu = \sum_i x_i P(x = x_i) \quad (2.19)$$

Utilizando essa fórmula nos dados discretos, podemos encontrar a média da seguinte maneira  
*Dados discretos:* 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 5.

*Dados contínuos:*  $\rho(x) = e^{-x}$

$$\mu = 0 \cdot \frac{2}{10} + 1 \cdot \frac{3}{10} + 2 \cdot \frac{2}{10} + 3 \cdot \frac{1}{10} + 4 \cdot \frac{1}{10} + 5 \cdot \frac{1}{10}$$

$$\mu = 1,9$$

Essa representação é a mesma que conhecemos em estatística como a soma de todos os valores divididos pela quantidade total de valores. O fato da média se apresentar dessa maneira é porque um valor vezes a sua probabilidade é algo que aparece repetidamente no decorrer de estudos de estatística e de MQ (CARLSON, 2013).

Já, nas distribuições contínuas, a média se dá não por uma soma, mas por uma integral de todos os valores possíveis,

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx \quad (2.20)$$

Utilizando os dados contínuos podemos resolver a equação para encontrar a média:

$$\mu = \int_0^{+\infty} x e^{-x} dx$$

Ao se deparar com uma equação desse tipo, o que vem primeiro a cabeça sobre como resolvê-la é integração por partes. Então

$$-x e^{-x} \Big|_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} e^{-x} dx$$

simplificando,

$$\mu = 1$$

Muitas vezes, a média pode ser chamada de *valor esperado*, ou *expectância*, ocorrendo com bastante frequência na MQ. É muito útil quando temos de aplicar a expectância a funções, por exemplo, de uma função qualquer  $f(x)$ .

Podemos representar o valor esperado da função  $f$  com o símbolo “ $\langle f \rangle$ ”. A forma como o valor esperado de uma função se apresenta para distribuições discretas é quase igual à média,

$$\langle f \rangle = \sum_i f(x_i) P(x = x_i) \quad (2.21)$$

Digamos que nossa função seja  $f(x) = x^2$ . Para os dados discretos podemos resolver da seguinte forma:

$$\langle f \rangle = 0^2 \cdot \frac{2}{10} + 1^2 \frac{3}{10} + 2^2 \frac{2}{10} + 3^2 \frac{1}{10} + 4^2 \frac{1}{10} + 5^2 \frac{1}{10}$$

$$\langle f \rangle = 6,1$$

A expectância pode aparecer como  $\langle x^2 \rangle$  ao invés de utilizar a descrição da função, é a mesma coisa (CARLSON, 2013).

Para o caso da distribuição contínua, a expectância é a integral entre todos os valores, do produto entre a função e a densidade de probabilidade, ou seja,

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \rho(x) dx \quad (2.22)$$

Aplicando essa fórmula à  $f(x) = x^2$ , ficamos,

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_0^{+\infty} x^2 e^{-x} dx \\ &= -x^2 e^{-x} \Big|_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} 2x e^{-x} dx \end{aligned}$$

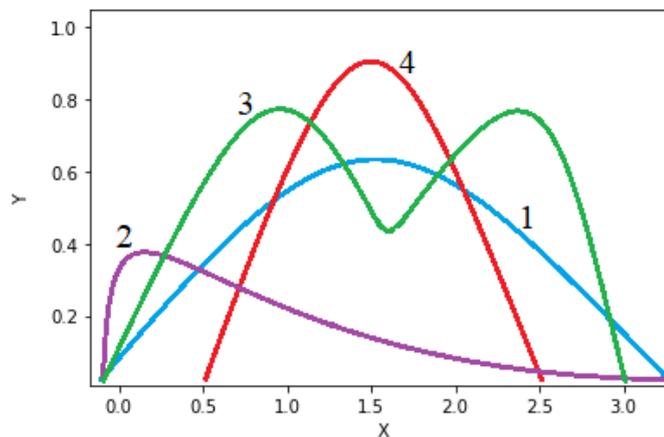
$$= \int_0^{+\infty} x e^{-x} dx$$

$$\langle x^2 \rangle = 2$$

### 2.1.6 Variância em distribuições probabilísticas

Nesta seção, serão apresentadas as formas que uma distribuição pode assumir e a sua relação com o ato de encontrar o resultado. Podemos representar as formas de uma distribuição probabilística conforme a Fig. 2.8

Figura 2.8 - Representação das formas que a distribuição probabilística pode apresentar.

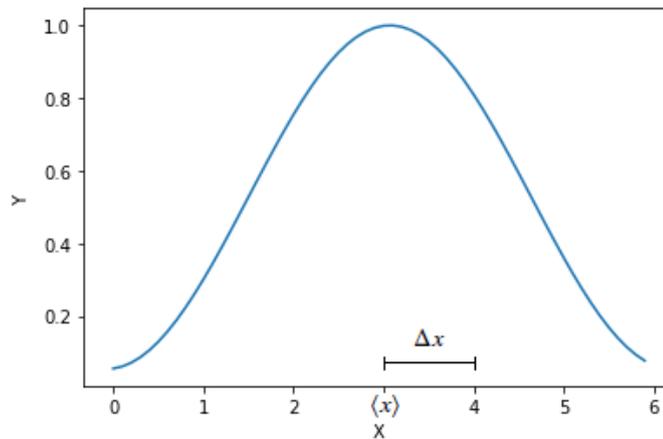


Fonte: Autor, 2022.

As diferentes curvas representam diferentes formas da distribuição. Podemos nomeá-las da seguinte maneira: 1- Curva larga; 2- Curva assimétrica; 3- Curva bimodal; 4- Curva estreita. O fator importante que temos que levar em conta é que a certeza, ou incerteza, da posição do nosso resultado, está relacionada com as formas das curvas. Vamos supor que as curvas 1 e 4 representem a probabilidade de encontrarmos um elétron em um átomo. A incerteza na posição do elétron é muito maior na curva 1 do que na curva 4, ou seja, quanto mais larga a curva, mais incerteza temos e quanto mais estreita a curva, mais certeza temos do nosso resultado (CARLSON, 2013).

Em estatística, o fator que determina a largura de uma curva é chamado de variância, ou seja, a variância é um modo de medir a largura de uma curva. Observe a Fig. 2.9

Figura 2.9 - Distribuição probabilística.



Fonte: Autor, 2022.

A figura acima representa uma distribuição qualquer, tendo o valor esperado representado por  $\langle x \rangle$ . Supondo que o valor se encontra à direita do valor esperado e quisermos encontrar o desvio desse ponto da nossa média,  $\Delta x$  nos dirá a largura dessa curva (CARLSON, 2013). Podemos encontrar o valor do desvio médio se elevarmos a sua expectância ao quadrado, assim obtendo, o que em estatística é chamado de, variância.

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \sigma^2 \quad (2.23)$$

Para demonstrar como é calculado o desvio da média ao quadrado, observe os dados discretos abaixo:

a) *Dados:* 1, 2, 3

b) *Dados:* 0, 2, 4

Os dados do item “a” estão muito mais próximos do que os do item “b”, como pode ser observado. Para efetuar o cálculo da variância temos de calcular a expectância (média) dos itens:

a)

$$\langle x \rangle = 2$$

Resolução:

$$\Delta x = -1, 0, 1$$

$$\Delta x^2 = 1, 0, 1$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \frac{2}{3}$$

b)

$$\langle x \rangle = 2$$

Resolução:

$$\Delta x = -2, 0, 2$$

$$\Delta x^2 = 4, 0, 4$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \frac{8}{3}$$

Essa é uma maneira de interpretar a variância, porém, não é o modo mais prático, nem mais fácil, de calculá-la. Um método mais simples é calcular a expectância de um valor ao quadrado subtraindo a expectância ao quadrado do mesmo valor, ou seja, pode ser calculada como  $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  (CARLSON, 2013).

Podemos ver, com facilidade, como podemos chegar nessa fórmula realizando algumas operações algébricas como, por exemplo, no caso de termos uma distribuição contínua. A expectância se dá na forma,

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x^2 \rho(x) dx \quad (2.24)$$

sendo  $\Delta x = x - \langle x \rangle$ , podemos substituir  $\Delta x^2$ ,

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 \rho(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2) \rho(x) dx \end{aligned}$$

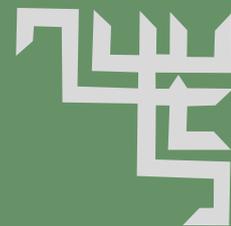
dividindo a integral em três partes, ficamos com

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x) dx - \int_{-\infty}^{\infty} 2x\langle x \rangle \rho(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \langle x \rangle^2 \rho(x) dx$$

resolvendo-se as integrais, temos que

$$\langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Sendo assim, com os conceitos trazidos nessa breve revisão de probabilidades, o aluno estará equipado com fundamentos matemáticos básicos para seguir adiante e compreender melhor a natureza da MQ (CARLSON, 2013). Antes de entrarmos na parte probabilística da teoria, é interessante expor as ideias de Schrödinger de uma maneira clássica, construindo a partir de ideias já conhecidas pelo estudante, como veremos a seguir.

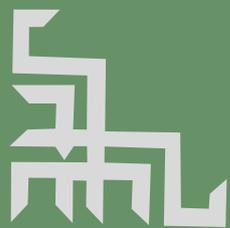
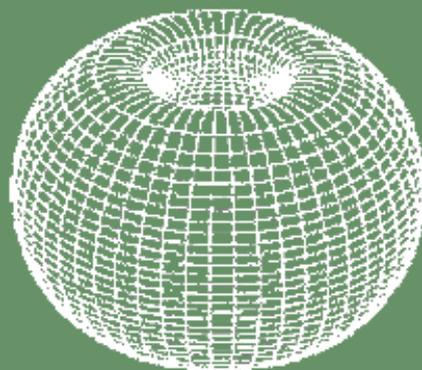


# FUNDAMENTOS DA FUNÇÃO DE ONDA

---

# 3

---



No início do capítulo anterior, foram apresentados, brevemente, os principais métodos para compreender a teoria quântica. Sendo assim, optamos por utilizar o método de Schrödinger que, mesmo perdendo em alguns aspectos para os outros métodos, é mais do que o suficiente para introduzir a MQ e apreciar toda sua estrutura matemática, sendo o método mais fácil de se compreender porque permite fazer analogias com conceitos familiares, como as vibrações de uma corda, por exemplo (GEORGE, 1972). Dessa forma, vamos “derivar” a ES a partir de postulados que foram baseados em resultados experimentais.

Essa “derivação” deve ser interpretada com cautela, pois simplifica bastante a teoria e assume muitos pré conceitos, ou seja, é um argumento totalmente heurístico sobre a ES. A ES é um postulado por si só e não pode ser derivada sem falhas (PISANTY, 2015). Isso será melhor demonstrado no capítulo 5. Só se pode oferecer alguma justificativa para sua forma, que é o que estamos tentando fazer.

### 3.1 Derivação da Equação de Schrödinger, através de métodos clássicos

Da mesma maneira que quando aplicamos a segunda Lei de Newton em um sistema obtemos a sua posição em qualquer tempo proposto, dadas as condições iniciais apropriadas, como  $\Psi(x,0)$ , a ES dependente do tempo nos dá  $\Psi(x,t)$  para todo o tempo futuro (GRIFFITHS, 2005).

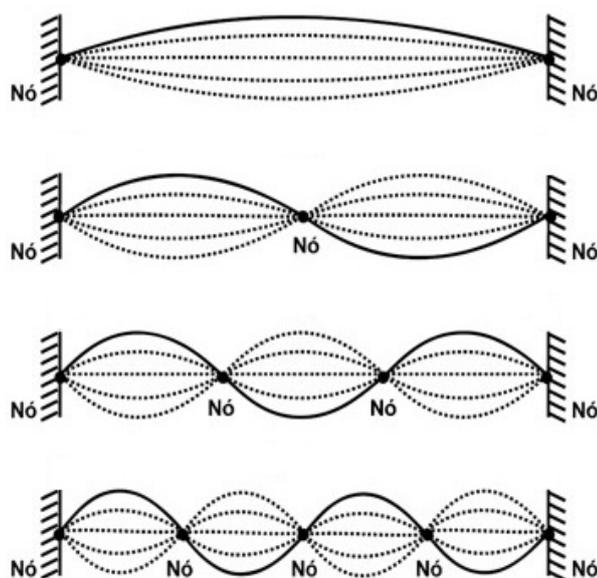
Ao longo deste material, iremos trabalhar com uma forma mais simples da ES, representando um sistema estacionário, sua forma mais geral em três dimensões e, também, será demonstrado a sua forma dependente do tempo, conforme a Eq. (2.2). É importante ressaltar, novamente que, mesmo falando historicamente sobre a derivação da ES, mostrando as contribuições anteriores que levaram Schrödinger a formular a equação, matematicamente falando, não há como derivá-la sem levar em conta experimentos e postulados da MQ, ela é, simplesmente, fundamental na teoria. Segundo Richard P. Feynman:

De onde tiramos isso? Não é possível derivá-la de nada que conhecemos. Saiu de dentro da mente de Schrödinger[...] Quando Schrödinger a escreveu pela primeira vez, ele derivou com base em alguns argumentos heurísticos e algumas idéias intuitivas brilhantes. Alguns dos argumentos que ele usou eram até falsos, mas isso não importa; a única coisa importante é que a equação final nos dá a correta descrição da natureza (1964, tradução livre).

Dessa maneira, podemos derivar a equação usando postulados que são comprovados experimentalmente, como a natureza ondulatória das partículas. Portanto, vamos utilizar um exemplo clássico de ondas estacionárias, para ficar mais fácil de compreender a relação da mecânica ondulatória com a MQ.

Se uma corda que tem suas duas extremidades presas é movida, como em um violão, por exemplo, ela irá oscilar, porém não vai assumir todas as formas de ondas possíveis, pelo fato de ter suas extremidades presas. Por esse motivo, esse sistema de uma corda presa, é chamado de onda estacionária. Podemos observar, na Fig. 3.1, que, dependendo da energia que damos a esse sistema, tocando a corda mais forte ou mais fraco, ela apresenta padrões que se repetem periodicamente, e apresenta pontos onde se mantém estacionária.

Figura 3.1 - Estados energéticos de uma onda estacionária.



Fonte: <https://proenem.com.br/enem/fisica/ondas-estacionarias/>. Acesso em: 15 mar. 2022.

Esses pontos são chamados de nós, sendo os tipos de ondas caracterizadas pelo número de nós que contém. É o mesmo princípio que de Broglie utilizou para explicar o modelo de Bohr (GEORGE, 1972).

Sendo assim, podemos descrever essa onda matematicamente, buscando como uma abordagem fundamental uma função que descreva seu movimento. Sabemos que as magnitudes dos comprimentos de onda  $\lambda$  permitidas para esse sistema são dadas pela Eq. (1.15).

$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

onde  $L$  é o comprimento da corda e  $n$  é um valor inteiro não nulo. Schrödinger utilizou a ocorrência natural dos nós, na teoria ondulatória clássica, para fundamentar o desenvolvimento da MQ em métodos ondulatórios, causando a própria matemática a mostrá-los naturalmente (GEORGE, 1972).

Prosseguindo com o pensamento ondulatório clássico, para que possamos compreender o movimento de uma onda, devemos tentar encontrar uma função matemática que descreva esse movimento. O movimento pode ser descrito por uma função  $\Psi$  que nos dá o deslocamento de todas as partes da onda. Podemos representar  $\Psi$  da seguinte forma,

$$\Psi = A \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi \nu t \quad (3.1)$$

onde  $A$  é igual a amplitude máxima da onda;  $x$  é a distância da origem;  $\nu$  é a frequência das vibrações;  $\lambda$  é, como sabemos, o comprimento de onda. Em um tempo específico  $t$  a função irá assumir a forma

$$\Psi_m = A_m \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \quad (3.2)$$

onde  $\Psi_m$  nos dá, agora, o deslocamento instantâneo das várias partes da onda, como se fosse uma foto, capturando um exato momento da configuração da onda (GEORGE, 1972).

Como o nosso objetivo é aplicar os conceitos ondulatórios às ideias da MQ, podemos obter uma equação com esse propósito. A função apresentada na Eq. (3.1) é uma solução de uma equação que pode ser obtida diferenciando duas vezes a Eq. (3.1) com respeito a  $x$ , ou seja,

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} A \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi \nu t \quad (3.3)$$

substituindo a Eq. (3.1) na Eq. (3.3), podemos simplificar bastante a expressão, ficando

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi = 0 \quad (3.4)$$

Como em nosso estudo trabalharemos somente com sistemas independentes do tempo, podemos assumir que  $\Psi$ , na Eq. (3.4) é, também, independente do tempo, ou seja, podemos reescrever a equação de forma ordinária, substituindo a diferenciação parcial, ficando,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi = 0 \quad (3.5)$$

Essa última equação foi obtida através da nossa análise clássica do movimento ondulatório e é a que vamos aplicar à MQ (GEORGE, 1972).

Recordamos que partículas de matéria possuem propriedades análogas às das ondas. De Broglie nos mostrou essa relação com sua brilhante relação  $\lambda = h/p$ . Substituindo essa relação na Eq. (3.5), obtemos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2 p^2}{h^2}\Psi = 0 \quad (3.6)$$

Aqui podemos definir um caminho melhor para seguir, indo de encontro ao intuito do material, ou seja, sendo um dos nossos objetivos determinar o comportamento de partículas elementares (elétrons) em átomos hidrogenoides, é mais interessante trabalharmos com energias totais do que somente o momento. Por isso, vamos considerar que a energia total  $E$  é a soma da energia cinética  $T$  do sistema e da energia potencial  $U$  do sistema. Nesse sentido, se considerarmos uma partícula com massa  $m$ , temos a equação

$$E = T + U = \frac{mv^2}{2} + U = \frac{p^2}{2m} + U \quad (3.7)$$

Na equação acima, adicionamos o  $p$  para substituir  $mv^2$ , porém como somente a velocidade está ao quadrado, devemos elevar o momento ao quadrado e dividir pela massa  $m$  para preservar a linearidade da equação. Isolando o momento, chegaremos à seguinte equação,

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$p^2 = 2m(E - U) \quad (3.8)$$

substituindo a Eq. (3.8) na Eq. (3.6), obtemos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\Psi = 0 \quad (3.9)$$

Como o valor  $h/2\pi$  aparece tantas vezes em nossos cálculos, podemos escrevê-lo como  $\hbar$ , chamado de constante de Planck reduzida. Sendo assim, a Eq. (3.9) fica

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \quad (3.10)$$

Essa equação é mais conhecida como a ES para um sistema estacionário, onde a energia não depende do tempo. A forma como chegamos à essa equação é válida pois utilizamos somente postulados com base em evidências experimentais (GEORGE, 1972).

### 3.2 Interpretando a função de onda ( $\Psi$ )

Quando Schrödinger propôs sua equação, ainda não estava bem definido o que  $\Psi$  realmente significava. Para uma onda,  $\Psi$  representa a sua forma, ou seja, representa sua amplitude em todas as posições. Para melhor entender, podemos chamar  $\Psi$  de *função de onda*, obviamente por descrever um sistema de mecânica ondulatória. Porém, não podemos esquecer que ela está sendo aplicada a uma partícula com características de onda.

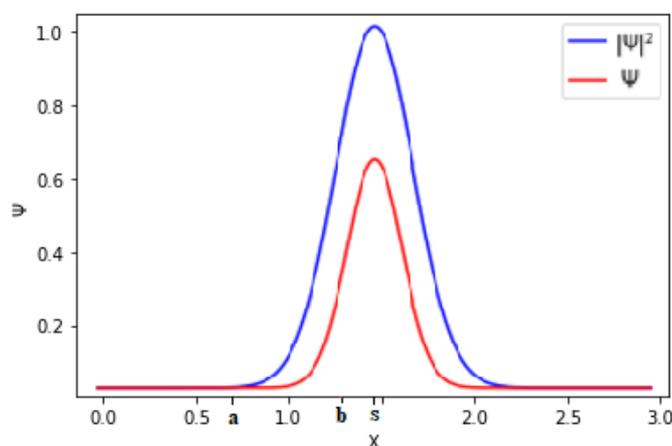
O que, então, poderia significar essa função de onda foi a grande questão entre alguns físicos na época. Schrödinger queria descrever todas as partículas como superposição de ondas, porém isso não estava correto, muitas de suas colocações não faziam sentido. Ele estava confuso, ora descrevendo  $\Psi$  como sendo a posição da partícula, ora como sendo a densidade da carga eletrônica (POLKINGHORNE, 2011, p. 140-144). Essa questão era intrigante pelo fato de que na física clássica, uma partícula, geralmente, representa algo pontual e uma onda como algo disperso no espaço. Porém, agora, tinha-se algo com essas duas propriedades, o que levantava questionamentos. Felizmente, um outro grande físico, Max Born, discordava de Schrödinger. Born propôs o que é, atualmente, aceito como a melhor interpretação física da Função de onda  $\Psi$ . Para ele  $\Psi$  está relacionada à probabilidade de achar tais partículas no espaço (GEORGE, 1972). Como o nosso estudo tem como meta a descrição atômica, podemos chamar essas partículas de elétrons.

Entretanto, o próprio  $\Psi$  não pode representar a probabilidade, pois isso restringiria a nossa função a ser real, positiva ou zero. Quando se resolve a equação de onda, ela pode assumir tanto valores positivos como negativos. Mas, para que ela interprete sistemas reais, como o átomo, todos os valores devem ser positivos e reais. Uma característica muito

importante é a de  $\Psi$  ser uma função complexa, ou seja, ela possui tanto valores reais, quanto imaginários. A definição correta de  $\Psi$  ainda não é certa, não sabemos o que ela, realmente representa. Só sabemos que ela nos dá valores matemáticos que representam um sistema; não é uma grandeza física (GRIFFITHS, 2005).

Nesse sentido, Max Born propôs que a probabilidade  $P(x)$  fosse dada pelo valor absoluto do quadrado da função de onda  $|\Psi(x, t)|^2$ . Podemos compreender melhor observando a figura.

Figura 3.2 - Gráfico da função de onda.



Fonte: Autor, 2022.

A Fig. 3.2 representa uma função de onda qualquer, em função de  $x$ . Essa função não muda com o tempo, já que estamos trabalhando com sistemas estacionários. Como dito anteriormente, somente  $\Psi$  não pode representar uma probabilidade, porque nossa função possui valores negativos e não existem probabilidades negativas. Por isso, se o valor absoluto de  $\Psi$  for elevado ao quadrado, podemos encontrar  $P(x)$  em um intervalo de  $x$ . Podemos observar, também, que a probabilidade será zero nos pontos onde a curva intersecta o eixo  $x$  e varia conforme a amplitude da função de onda se apresenta. Quanto maiores os valores de  $|\Psi|^2$ , maior será a probabilidade de encontrarmos o elétron naquela região. Temos de lembrar, também, que somente uma medição desse evento não confirma os resultados, ou seja, é necessário analisar inúmeros valores de  $|\Psi|^2$  em inúmeros instantes, para que se possa ter uma maior certeza das probabilidades obtidas (CARLSON, 2013).

Podemos definir ainda melhor como encontrar  $P(x)$ , escolhendo um intervalo arbitrário  $x(a, b)$ , assim, basta calcularmos a área entre os pontos embaixo da curva  $|\Psi|^2$  na Fig. 3.2, da seguinte maneira:

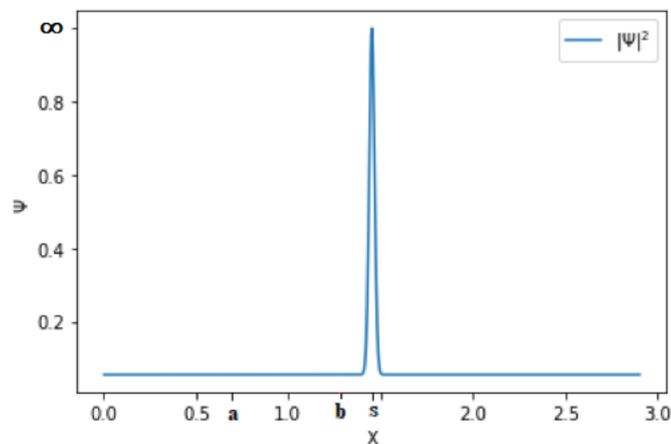
$$P(x) = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.11)$$

Supondo que a Fig. 3.2 represente uma função de onda de um elétron, a resolução da Eq. (3.11) nos dá a probabilidade de encontrar o elétron entre  $(a, b)$  em um dado instante de tempo  $(t)$ . Se aplicarmos a toda função de onda, fica claro que é muito mais provável encontrarmos o elétron entre  $(a, b)$  do que em qualquer outro ponto. De maneira mais precisa, podemos determinar que a probabilidade é dada pelo produto da função de onda e o seu conjugado complexo,  $\Psi^* \Psi$ , permitindo que  $\Psi$  seja uma função complexa (GEORGE, 1972).

Essa interpretação estatística causa uma indeterminação dos valores na MQ. Mesmo que você saiba todas as propriedades do sistema, obtendo  $|\Psi|^2$ , sempre haverá incerteza no seu resultado. Tudo o que a teoria quântica oferece é uma interpretação estatística dos possíveis resultados. É essa indeterminação que assombra físicos e filósofos, que sempre se questionam se isso é parte da natureza ou simplesmente um erro na teoria.

Continuando com o exemplo do elétron, digamos que foram feitas medições e o encontramos, com uma alta probabilidade, em um ponto  $S$ , Fig. 3.3.

Figura 3.3 - Colapso da Função de onda devido à medição.



Fonte: Autor, 2022.

Se os valores são sempre estatísticos, onde se encontrava o elétron antes da nossa medição? Esteve ele sempre ali, ou se materializou perante nossa observação? Existem algumas implicações filosóficas que fazem questionamentos parecidos e se apresentam de três maneiras:

A posição realista nos diz que o elétron esteve sempre em  $S$  e que foi a teoria que falhou em nos dizer, precisamente, de antemão. Isso implica em uma teoria incompleta e que  $|\Psi|^2$  não consegue descrever a partícula sozinha, gerando a necessidade de uma variável, que não sabemos, para prover uma descrição completa da partícula (GRIFFITHS, 2005).

A posição ortodoxa afirma que o elétron nunca esteve em lugar algum e que o ato da medição fez com que se manifesta-se no ponto  $S$ . Como e por que a partícula resolveu aparecer nesse ponto é algo que não se tem resposta. Essa visão, de que o ato de observar o evento acaba influenciando em seu resultado, é mais conhecida como a interpretação de Copenhague sendo, atualmente, amplamente aceita entre os físicos (GRIFFITHS, 2005).

A posição agnóstica, simplesmente, se recusa a responder, pelo simples fato de que não há sentido em fazer suposições sobre o estado da partícula antes da sua medição. É incoerente se preocupar com algo que, por sua natureza, não pode ser testado (GRIFFITHS, 2005).

É evidente que, mesmo havendo várias interpretações, os resultados obtidos são legítimos. Se, após encontrarmos  $|\Psi|^2$  para um elétron, realizarmos o mesmo experimento logo em seguida para o mesmo elétron, deveríamos ter o mesmo resultado, comprovando a primeira observação. E isso é realmente observado. Por mais que quando encontramos a posição do elétron e a sua função de onda colapse em um único ponto de probabilidade absoluta, logo ela irá se espalhar novamente de acordo com a ES. Então, a próxima medição deve ser feita rapidamente. Tudo isso nos mostra que existem dois processos físicos ocorrendo: um em que a função de onda evolui de acordo com a ES, e outro em que, devido à medição,  $|\Psi|^2$  colapsa abruptamente (GRIFFITHS, 2005).

### 3.3 Restrições e normalização da função de onda

Anteriormente, falamos sobre o que  $\Psi$  significa e agora devemos impor algumas restrições, já que representa uma função matemática, mas descreve um sistema físico, portanto, precisa ser uma função fisicamente aceitável (GEORGE, 1972). Para que a integração seja possível,  $\Psi$  precisa ter algumas propriedades. Se temos um sistema de, por exemplo, um elétron, nossa função de onda está associada com a sua posição. Sabemos que a probabilidade de encontrarmos o elétron, em uma dimensão, é dada por  $\Psi^* \Psi dx$ , sendo

assim,  $\Psi$  precisa, necessariamente, ser finita em todos os lugares, ter valor e ser uma função quadrada integrável, ou seja, uma função real ou complexa, que possa ser medida e que a integral do seu valor absoluto ao quadrado seja finita. Assim como  $\Psi$  deve tender a 0 enquanto  $x$  tende a  $\pm\infty$  (CARLSON, 2013).

Quando calculamos onde podemos encontrar o elétron, queremos saber com a maior precisão possível a sua posição, ou seja, queremos uma probabilidade de 100% de o encontrarmos. Para isso, calculamos a área embaixo de toda a curva da função  $|\Psi|^2$  e não somente entre  $(a, b)$ , como visto na Fig. 3.2. Portanto, podemos dizer que a probabilidade de encontrar a sua posição é 1. Temos que encontrá-lo em algum lugar. A área total embaixo da curva deve ser igual a 1. Podemos descrever essa ideia, matematicamente, da seguinte maneira:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (3.12)$$

Dentro dessas condições, podemos dizer que a função de onda está *normalizada*. Normalizar uma função de onda pode ser descrito como o ato de multiplicar a função por um valor para que a função se iguale a 1, tornando a soma de todas as probabilidades igual a 100%. Se essa condição for atendida, é possível converter qualquer função em algo que é normalizado, simplesmente, multiplicando ou dividindo por uma constante. É importante notar que nem todas as funções podem ser normalizadas, por exemplo funções onde  $\Psi = 0$  e, também, se temos uma função com uma curva que possui área infinita, não é possível normalizá-la, já que quaisquer constantes que multipliquem infinidades não serão iguais a 1 (GEORGE, 1972).

Mas, por que é necessário realizar a normalização da função de onda? Não deveríamos obter a função correta ao analisarmos o sistema? A função de onda, por si só, não nos ajuda em nada, o que dá significado físico a ela é a interpretação estatística de Born. A função de onda é determinada pela equação de onda. Por isso, algo precisa ser feito para que exista uma ligação entre ela e a interpretação estatística. Felizmente, podemos resolver isso multiplicando a função de onda por uma constante, a constante de normalização. Multiplicar ou dividir a ES por uma constante não afeta o seu resultado. Vamos observar novamente a Eq. (2.2):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi$$

Se substituirmos  $\Psi$  por  $A\Psi$ , a equação inteira pode ser dividida por  $A$ , então nada realmente acontece. Nesse sentido, se  $\Psi$  é solução da ES,  $A\Psi$  também é; somente se  $A$  for uma constante que não dependa do tempo ou espaço. Com essa constante, é possível ligar a equação de onda às regras de Born, de modo que agora são compatíveis. O processo para encontrar essa constante é denominado *normalização* (CARLSON, 2013). Para checar se nossa função precisa ser normalizada, devemos efetuar a integral, apresentada na Eq. (3.12) e observar se o resultado obtido é ou não condizente com as restrições, ou seja, se é, ou não, igual a 1. Podemos entender melhor esse processo com alguns exercícios.

### 3.3.1 Exercícios de normalização

1- Verifique se  $\Psi(x) = \text{sen}(2\pi x)$  está normalizada entre 0 e 1; se não, encontre  $A$ :

Resolução:

Substituído na relação de normalização obtemos:

Como a função é real, o conjugado complexo continua com o mesmo sinal

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx &= \int_0^1 [\text{sen}(2\pi x)] [\text{sen}(2\pi x)] dx \\ &= \int_0^1 \text{sen}^2(2\pi x) dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{sen}^2 u du \\ &= \frac{1}{2\pi}(\pi) = \frac{1}{2} \neq 1 \end{aligned}$$

Isso significa que nossa função não está normalizada e, por isso, precisamos multiplicá-la por uma constante, ou seja,  $\Psi(x) = A \text{sen}(2\pi x)$ . Para encontrarmos  $A$  utilizamos, novamente, a relação de normalização e substituímos nossa nova função, ficando:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_0^1 [A \text{sen}(2\pi x)] [A \text{sen}(2\pi x)] dx$$

$$= A^2 \int_0^1 \text{sen}^2(2\pi x) dx$$

então,

$$= \frac{A^2}{2} = 1$$

logo,

$$A^2 = 2 \rightarrow A = \sqrt{2}$$

Por fim, obtemos a função de onda  $\Psi(x) = \sqrt{2} \text{sen}(2\pi x)$  normalizada e pronta para ser calculada.

2- Normalize  $\Psi(x) = x(L - x)$  entre 0 e  $L$ , ou seja, encontre  $A$ :

Resolução:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx &= \int_0^L [Ax(L-x)][Ax(L-x)] dx \\ &= A^2 \int_0^L x^2(L-x)^2 dx \\ &= A^2 \int_0^L x^4 - 2Lx^3 + L^2x^2 dx \\ &= A^2 \left[ \frac{x^5}{5} - \frac{2Lx^4}{4} + \frac{L^2x^3}{3} \right]_0^L \\ &= \frac{A^2L^5}{30} = 1 \rightarrow \left[ A = \sqrt{\frac{30}{L^5}} \right] \end{aligned}$$

3- Normalize a seguinte função de onda:

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| > 1 \\ Ae^{ix}(1-x^2) & \text{por outro lado} \end{cases}$$

Resolução:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-1}^1 [Ae^{-ix}(1-x^2)][Ae^{ix}(1-x^2)] dx$$

$$\begin{aligned}
&= A^2 \int_{-1}^1 (1 - 2x^2 + x^4) dx \\
&= A^2 \left[ x - \frac{2}{3}x^3 + \frac{x^5}{5} \right]_{-1}^1 \\
&= A^2 \frac{16}{15} = 1 \quad \rightarrow \quad \left[ A = \sqrt{\frac{16}{15}} \right]
\end{aligned}$$

4- Em um tempo  $t = 0$  uma partícula é representada pela função de onda abaixo:

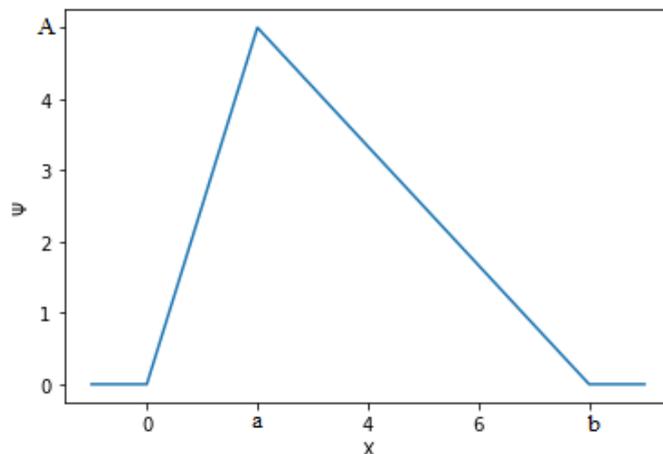
$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A \frac{x}{a} & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ A \frac{(b-x)}{(b-a)} & \text{se } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{por outro lado} \end{cases}$$

a) Normalize  $\Psi$ .

Resolução:

$$\begin{aligned}
&= \int_0^a \left( A \frac{x}{a} \right) \left( A \frac{x}{a} \right) dx + \int_a^b \left( A \frac{(b-x)}{(b-a)} \right) \left( A \frac{(b-x)}{(b-a)} \right) dx \\
&= \frac{A^2}{a^2} \int_0^a x^2 dx + \frac{A^2}{(b-a)^2} \int_a^b (b-x)^2 dx \\
&= A^2 \left\{ \frac{1}{a^2} \left( \frac{x^3}{3} \right) \Big|_0^a + \frac{1}{(b-a)^2} \left( -\frac{(b-x)^3}{3} \right) \Big|_a^b \right\} \\
&= A^2 \left[ \frac{a}{3} + \frac{b-a}{3} \right] \\
&= A^2 \frac{b}{3} = 1 \quad \rightarrow \quad \left[ A = \sqrt{\frac{3}{b}} \right]
\end{aligned}$$

b) Observe o gráfico abaixo. Qual a probabilidade da partícula ser encontrada à esquerda de  $a$ ? Confira seus resultados nos casos de limite  $b = a$  e  $b = 2a$ .

Figura 3.4 - Gráfico representando  $\Psi(x,0)$  como função de  $x$ .

Fonte: Autor, 2022.

Resolução:

$$P = \int_0^a |\Psi|^2 dx$$

$$P = \int_0^a \left( A \frac{x}{a} \right) \left( A \frac{x}{a} \right) dx$$

$$= \frac{A^2}{a^2} \int_0^a x^2 dx$$

$$= A^2 \frac{a}{3} = 1 \quad \rightarrow \quad \left[ P = \frac{a}{b} \right]$$

$$\begin{cases} P = 1 & \text{se } b = a \\ P = \frac{1}{2} & \text{se } b = 2a \end{cases}$$

Isso conclui as idéias introdutórias sobre o que se caracteriza uma função de onda. Podemos, agora, dar início às demonstrações práticas do uso da função de onda aplicando-a a um problema clássico de uma partícula presa em uma caixa tridimensional, em conjunto com a ES que derivamos, no início capítulo.

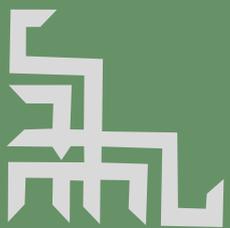
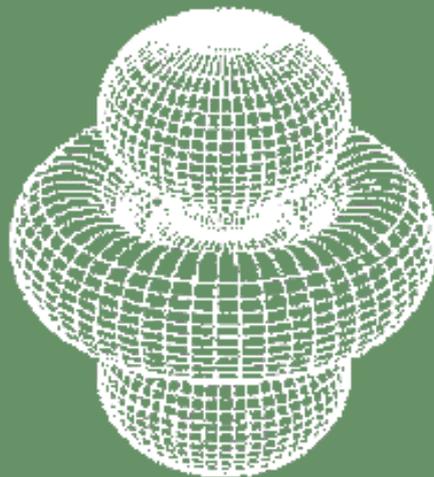


# O PROBLEMA DE UMA PARTÍCULA EM UMA CAIXA

---

# 4

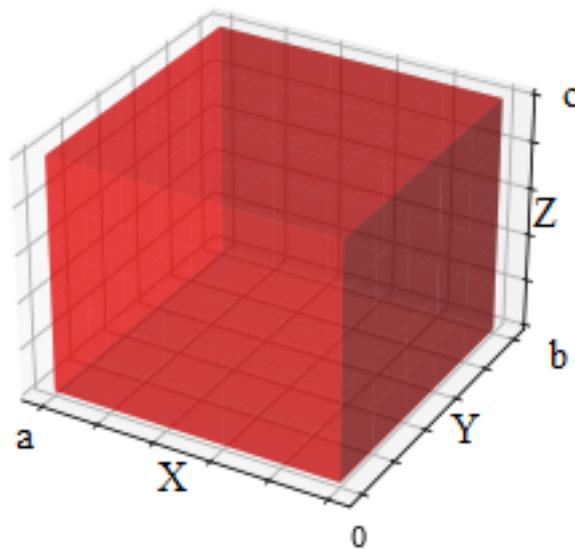
---



Infelizmente, não existem muitos problemas reais de MQ que podem ser resolvidos no papel. A maioria deles requer métodos e processos matemáticos longos e complicados. Felizmente, existem alguns poucos modelos ideais que demonstram com elegância a matemática e os resultados obtidos quando aplicamos as regras da teoria quântica.

Nesta seção, iremos montar e resolver a ES para o problema de uma partícula confinada a uma caixa tridimensional e do seu resultado encontrar a equação de quantização da energia, que irá aparecer, naturalmente, conforme realizarmos as operações algébricas. Iremos observar o que acontece no caso de uma partícula ser livre e, também, o que acontece quando a massa dessa partícula começa a entrar no reino macroscópico. Este problema pode ser transcrito em termos de prática real, onde se assemelha, por exemplo, a uma molécula de gás confinada a um espaço. Temos, em um plano retangular tridimensional, um cubo de lados iguais  $a$ ,  $b$  e  $c$  e, portanto, volume  $abc$ , conforme observado na Fig. 4.1. A partícula que estamos interessados tem massa  $m$ . A energia potencial dentro da caixa é zero e em todo seu entorno é infinita (GEORGE, 1972).

Figura 4.1 - Plano retangular demonstrando um cubo em três dimensões.



Fonte: Autor, 2022.

A ES para o sistema é a mesma que derivamos no capítulo 3. Porém, como estamos trabalhando com mais dimensões, devemos ajustá-la, ficando

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \quad (4.1)$$

Vamos, primeiramente, encontrar  $\Psi$  para a região fora da caixa onde  $U = \infty$ . Substituindo  $U$ , temos

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \infty)\Psi = 0 \quad (4.2)$$

Considerando que infinito é muito maior do que  $E$ , podemos rearranjar a equação

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \infty \Psi \quad (4.3)$$

Dessa maneira,  $\Psi = 0$ , porque não existe nenhuma função finita, com um valor mensurável, que satisfaça a Eq. (4.3). Ou seja, se calculássemos  $|\Psi|^2$ , a probabilidade seria zero, o que tornaria impossível encontrar a partícula fora da região determinada pela caixa. Nesse sentido, como fora da caixa a função é zero, nas bordas da caixa, essa função deve tender a zero para que as duas funções, dentro e fora da caixa, sejam fisicamente aceitáveis, se unindo uniformemente (GEORGE, 1972).

Vamos, agora, considerar a região delimitada pela caixa. A ES que descreve essa região pode ser descrita como

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - 0)\Psi = 0 \quad (4.4)$$

Essa equação representa uma *equação diferencial parcial*, que pode ser resolvida pelo método da *separação de variáveis*. Poderíamos pular as partes onde é necessário resolver esse tipo de equação dando somente a sua forma final. Porém, perderíamos um perfeito momento para relembrar e relacionar conceitos, que são aprendidos em aulas de cálculo, com esse exemplo físico e prático. Por isso, optamos por apresentar o processo completo de resolução e simplificação das equações.

Para separar as variáveis em equações independentes, podemos considerar que a solução para a Eq. (4.4) se dê na forma

$$\Psi = X_{(x)} Y_{(y)} Z_{(z)} \quad (4.5)$$

onde  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  são funções únicas de suas respectivas dimensões. Sendo assim, podemos fazer a substituição da Eq. (4.5) na Eq. (4.4), derivando  $\Psi$  em relação às suas respectivas funções, obtendo

$$Y_{(y)} Z_{(z)} \frac{d^2 X}{dx^2} + X_{(x)} Z_{(z)} \frac{d^2 Y}{dy^2} + X_{(x)} Y_{(y)} \frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} X_{(x)} Y_{(y)} Z_{(z)} = 0 \quad (4.6)$$

Note que agora podemos escrever como derivadas ordinárias. Nesse sentido, podemos simplificar a Eq. (4.6) simplesmente dividindo-a por

$$X_{(x)} Y_{(y)} Z_{(z)} \frac{2m}{\hbar^2} \quad (4.7)$$

Isso irá eliminar as constantes, fazendo com que seja possível separar as variáveis.

Vamos observar o passo a passo de como manipular, efetivamente, essas equações. Efetuando a simplificação, obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} + E = 0 \quad (4.8)$$

Isso é uma identidade, ou seja, é real para todos os valores de  $x$ ,  $y$  e  $z$ , por isso, podemos separar cada variável em equações próprias. Para satisfazer essa separação, devemos separar a energia total  $E$  para cada dimensão, ou seja,

$$E_{tot} = E_x + E_y + E_z \quad (4.9)$$

Nesse sentido, realizando as seguintes manipulações algébricas, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + E_x = 0 &\rightarrow \frac{d^2 X}{dx^2} = -E_x \frac{2m}{\hbar^2} X \rightarrow \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2} X = 0 \\ \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2} X &= 0 \end{aligned} \quad (4.10a)$$

para  $x$ ;

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + E_y = 0 &\rightarrow \frac{d^2 Y}{dy^2} = -E_y \frac{2m}{\hbar^2} Y \rightarrow \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{2mE_y}{\hbar^2} Y = 0 \\ \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{2mE_y}{\hbar^2} Y &= 0 \end{aligned} \quad (4.10b)$$

para  $y$ ; e

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} + E_z = 0 \rightarrow \frac{d^2 Z}{dz^2} = -E_z \frac{2m}{\hbar^2} Z \rightarrow \frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{2m E_z}{\hbar^2} Z = 0$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{2m E_z}{\hbar^2} Z = 0 \quad (4.10c)$$

para  $z$ .

Conseguimos separar as variáveis com sucesso. Essas equações estão, agora, na forma de *equações diferenciais ordinárias (EDOs) lineares homogêneas de segunda ordem*. Vamos resolver somente a Eq. (4.10a) já que, devido à simetria do problema, os valores para as outras equações serão similares. Você já deve estar familiarizado com equações desse tipo. A solução geral para essa classe de EDOs se dá na forma

$$\Phi_{(x)} = e^{\alpha x} (A \sin(\beta x) + B \cos(\beta x)) \quad (4.11)$$

Uma maneira muito fácil de resolver essa EDO é substituir a diferencial por uma constante qualquer, de mesma ordem que a equação, tornando-a uma equação de segundo grau. Nossa equação é

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{2m E_x}{\hbar^2} X = 0 \quad (4.10a)$$

Substituindo  $\frac{d^2 X}{dx^2}$  por  $\lambda^2$  temos

$$\lambda^2 + \frac{2m E_x}{\hbar^2} = 0$$

$$\lambda = \sqrt{-\frac{2m E_x}{\hbar^2}}$$

Para essa EDO, quando as raízes forem negativas, ou seja,  $\Delta < 0$ ,  $\lambda = \alpha \pm \beta i$ , onde  $\beta = \pm \sqrt{2m E_x / \hbar^2}$ , então  $\lambda$  será:

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{2m E_x}{\hbar^2}} i \quad (4.12)$$

Substituindo esse resultado na Eq. (4.11) e resolvendo, obtemos a função

$$X_{(x)} = A \operatorname{sen} \left( \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} x \right) + B \cos \left( \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} x \right) \quad (4.13)$$

Para continuarmos, precisamos analisar as *condições de contorno* do sistema. As condições de contorno nada mais são do que restrições, ou realmente condições, para que a partícula exista dentro do espaço da caixa (GEORGE, 1972). Como discutimos anteriormente, a função de onda para a partícula deve se aproximar à zero nas bordas da caixa, sendo assim, para cada dimensão, as condições de contorno são:

$$\begin{cases} X_{(x)} = 0 & \text{quando } x = 0 \text{ e } x = a \\ Y_{(y)} = 0 & \text{quando } y = 0 \text{ e } y = b \\ Z_{(z)} = 0 & \text{quando } z = 0 \text{ e } z = c \end{cases}$$

Em posse dessas condições, vamos aplicá-las à Eq. (4.13) para encontrar o valor das constantes. Para  $x = 0$  temos

$$X_{(0)} = A \operatorname{sen}(\beta 0) + B \cos(\beta 0) = 0$$

$$B = 0 \quad (4.14)$$

Para  $x = a$  temos

$$X_{(a)} = A \operatorname{sen}(\beta a) + B \cos(\beta a) = 0$$

conhecemos o valor de  $B$ , então

$$A \operatorname{sen}(\beta a) = 0 \quad (4.15)$$

Devemos tomar cuidado nesse ponto, pois se considerarmos que  $A$  é zero e já tendo o valor de  $B$  que também é zero, ao substituirmos esses valores na Eq. (4.13), a nossa função será zero e portanto, não temos mais nada com o que trabalhar, não existe uma função de onda. Por isso, se  $A \neq 0$ , então  $\beta a$  deve ser igual à um valor que, calculado seu seno, seja zero. Portanto  $\beta a = n\pi$ .

Logo, já sabemos o valor de  $\beta$ , então

$$\sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} a = n_x \pi \quad \rightarrow \quad \left( \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} \right)^2 = \left( \frac{n_x \pi}{a} \right)^2$$

Eliminando a raiz e isolando  $E_x$  temos,

$$\frac{2mE_x}{\hbar^2} = \frac{n_x^2\pi^2}{a^2}$$

$$E_x = \frac{n_x^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (4.16)$$

onde  $n_x$  é um número inteiro, ou seja,  $\pm 1, \pm 2, \pm 3\dots$ , porém diferente de zero. Podemos observar aqui a beleza na manipulação da ES para esse problema. A Eq. (4.16) nos mostra que a energia é quantizada. Essa quantização da energia existe porque condicionamos a existência da partícula para dentro da caixa, através das condições de contorno. Embora estejamos trabalhando em somente uma dimensão, a equação para o estado energético da partícula aparece naturalmente enquanto resolvemos a equação principal. Esse  $n_x$  é o mesmo  $n$  abordado no capítulo 3, que representa os *nós* observados na Fig. 3.1, que posteriormente foi utilizado por de Broglie para representar os níveis de energia para o modelo de Bohr. Os valores  $n_x, n_y$  e  $n_z$  são chamados de *números quânticos*. A Eq. (4.16) representa a parte quântica da MQ! (GEORGE, 1972).

Continuando, substituindo a Eq. (4.16) na Eq. (4.13) e fazendo as devidas simplificações, lembrando que  $B = 0$ , temos

$$X_{(x)} = A \operatorname{sen} \left( \sqrt{\frac{2mn_x^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2\hbar^2}} \right) + 0$$

$$X_{(x)} = A \operatorname{sen} \left( \frac{n_x\pi x}{a} \right) \quad (4.17)$$

Se quisermos encontrar a partícula em algum lugar dentro da caixa,  $X$  não pode ser zero em todos os lugares, por isso  $n_x$  não pode ser zero, como foi afirmado anteriormente. Isso implica que o menor nível de energia permitido não é 0. O menor nível de energia pode ser dado substituindo  $n_x = 1$  na Eq. (4.17), fazendo isso temos

$$E_x = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (4.18)$$

Essa é outra importante relação, chamada de *estado fundamental de energia*, que surge dos resultados quando se resolve a ES para uma partícula em uma caixa.

Vamos continuar nossos cálculos, tentando encontrar  $A$ . Se analisarmos a Eq. (4.17), veremos que ela representa a função de onda para  $x$ , porém ainda não está normalizada. Para normalizarmos essa função, devemos lembrar a condição de normalização expressa pela Eq. (3.12). Fazendo a substituição e pondo os limites da caixa, temos

$$\int_0^a A^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) dx = 1 \quad (4.19)$$

Integrando para  $x$  e fazendo a substituição de  $k = \frac{n_x \pi x}{a}$ , para facilitar a conta, obtemos

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^a \operatorname{sen}^2(kx) dx = 1 &\quad \rightarrow \quad A^2 \left[ \int_0^a 1 - \frac{\cos(2kx)}{2} dx \right] = 1 \\ A^2 \left[ \int_0^a \frac{1}{2} dx - \frac{1}{2} \int_0^a \frac{\cos(u)}{2k} du \right] &\quad \rightarrow \quad A^2 \left[ \frac{1}{2}x - \frac{1}{4k} \operatorname{sen}(2kx) \right]_0^a \\ \frac{A^2}{2} \left[ a - \frac{1}{2k} \operatorname{sen}(2ka) \right] &\quad \rightarrow \quad \frac{A^2}{2} a = 1 \end{aligned}$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (4.20)$$

Encontramos a nossa constante de normalização  $A$ . Substituindo a Eq. (4.20) na Eq. (4.17) obtemos a equação de onda propriamente normalizada para o eixo  $x$  da nossa caixa. Se seguirmos todos esses passos para as outras dimensões vamos obter:

$$X_{(x)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \quad (4.21a)$$

$$Y_{(y)} = \sqrt{\frac{2}{b}} \operatorname{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad (4.21b)$$

$$Z_{(z)} = \sqrt{\frac{2}{c}} \operatorname{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right) \quad (4.21c)$$

Agora, basta substituir essas equações na Eq. (4.5) para obtermos a equação de onda completa. Fazendo isso temos

$$\Psi = \sqrt{\frac{8}{abc}} \left[ \text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right) \right] \quad (4.22)$$

Essa equação representa o comportamento da partícula em qualquer lugar dentro da caixa. Não podemos esquecer que decomparamos a energia em três eixos, sendo assim, agrupando a energia de todas as dimensões, encontramos, então, a equação que representa a energia total da partícula, em qualquer lugar dentro da caixa (GEORGE, 1972).

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x}{a^2} + \frac{n_y}{b^2} + \frac{n_z}{c^2} \right) \quad (4.23)$$

Encerramos, assim, a resolução do problema para uma partícula presa em uma caixa tridimensional. Um aspecto importante que pode ser observado nesse problema é que  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  podem possuir quaisquer valores inteiros. Se as dimensões da caixa são iguais, como um cubo, então, as energias que obtemos quando  $n_x = 1$ ,  $n_y = 1$  e  $n_z = 2$ , são as mesmas que se  $n_x = 2$ ,  $n_y = 1$  e  $n_z = 1$ , ou qualquer outra colocação e isso pode ser observado se substituirmos esses valores na Eq. (4.23). Quando obtemos valores para a energia de diferentes funções de onda e seus valores são iguais entre si, chamamos essas funções de *degeneradas*. No nosso exemplo, essa degeneração é tripla, pois temos três funções que correspondem a mesma energia (GEORGE, 1972). Vamos, agora, elaborar dois cenários nos quais, no primeiro, a partícula está livre, ou seja, permitimos que as dimensões da caixa sejam infinitas e, no segundo cenário, examinamos as consequências dessa partícula deixar o reino quântico e entrar no mundo macroscópico, ou seja, permitir que sua massa aumente significativamente.

No primeiro caso vamos considerar que os lados  $a$ ,  $b$  e  $c$  têm medidas infinitas, e por isso a partícula se encontra livre nesse espaço. Vamos observar a Eq. (4.22). Se os lados da caixa tendem ao infinito, então o volume da caixa,  $abc$ , também tende ao infinito. Se o volume é infinito, então, a função de onda  $\Psi$  é zero. Portanto, se tentarmos encontrar a partícula em um ponto finito nesse espaço infinito, a probabilidade  $|\Psi|^2$  será zero. Esse resultado é fisicamente aceitável, visto que, conforme o espaço em que a partícula pode se encontrar aumenta, a chance de encontrarmos ela diminui, ela pode estar em muitos lugares (GEORGE, 1972). Agora, se observarmos a Eq. (4.23), conforme  $a$ ,  $b$  e  $c$  tendem ao infinito os níveis de energia ficam cada vez menores, mais próximos uns dos outros, chegando a um

ponto onde eles se fundem em um só contínuo. Nesse sentido, a energia da partícula deixa de ser quantizada, não estando mais sujeita à influência das condições de contorno de um espaço finito.

No segundo caso, vamos observar o que acontece quando lidamos com partículas que possuem massas muito grandes, como a de uma maçã ou um planeta. Novamente, olhamos para a Eq. (4.23). Se o  $m$  for muito grande, as diferenças entre os níveis de energia se tornam muito pequenas, formando um contínuo. Se a massa é infinita, a energia não é mais quantizada, por isso, para objetos macroscópicos, os efeitos da MQ são irrelevantes (GEORGE, 1972).

Por fim, podemos concluir o estudo desse problema tendo alguns conceitos muito interessantes, como o fato da quantização da energia, números quânticos e estados fundamentais de energia aparecerem naturalmente da matemática da MQ. Mesmo que esse problema seja considerado simples, em termos do que realmente é possível calcular com a teoria, não podemos esquecer que não é pelo fato de ser simples que não é trabalhoso. Existem vários conceitos novos que requerem a atenção do aluno, assim como o processo de relembrar conteúdos estudados, às vezes, anos atrás, que tornam o problema mais complexo. Como um exercício de fixação o aluno pode tentar encontrar a energia e a função de onda para somente uma dimensão. Desse modo, é mais fácil abordar esse problema e, mesmo assim, a ideia central é estabelecida.

Nesse sentido, podemos seguir para o próximo tópico, onde iremos discutir grande parte dos conteúdos que compõe esse material como, por exemplo, os postulados fundamentais da MQ, formalismos, algumas propriedades da função de onda e o processo de comutação de operadores. Esses tópicos nos darão as ferramentas necessárias para que possamos entender a harmonia dos orbitais e como a ES consegue interpretá-los.

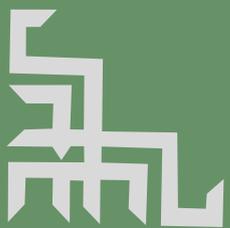
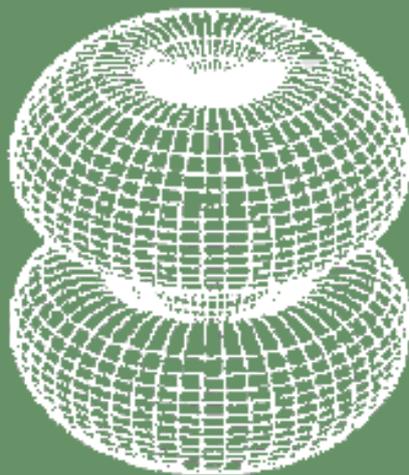


# PRINCÍPIOS GERAIS DA MECÂNICA QUÂNTICA

---

# 5

---



No capítulo 3, vimos como derivar a ES da mecânica ondulatória e as relações de de Broglie, assim como demonstramos que para um sistema simples, como o da partícula em uma caixa, no capítulo 4, a ES pode ser resolvida com exatidão. Nesse sentido, vamos, agora, retornar nossa atenção para a teoria geral da MQ. Nesse caso, vamos entender como é possível encontrar a ES de postulados que, à primeira vista parecem arbitrários, mas que se provam verdadeiros pelos resultados positivos que apresentam experimentalmente ao se analisar sistemas de cunho físico. O modo como esses postulados estão organizados aparecem de várias maneiras dependendo do intuito do autor. Mas, todos levam ao mesmo entendimento, sendo os conceitos que não forem abordados dentro deles, tratados como consequências desses postulados.

### 5.1 Postulados da Mecânica Quântica

Para a apresentação dos postulados vamos considerar um sistema de partículas que, classicamente, podem ser descritas em um tempo  $t$  se tivermos valores de suas coordenadas  $q_k$  e momento  $p_k$ . De acordo com George (1972), Griffiths (2005) e Jaffe (1996), os postulados podem ser apresentados da seguinte maneira:

**1º Postulado** - Podemos descrever completamente o estado de um sistema quântico pela função de onda  $\Psi(q, t)$ . Esta função de onda representa o sistema em todas as dimensões espaciais mais a dimensão temporal. Como já vimos, esta função de onda pode ser descrita em termos físicos como  $\Psi^* \Psi dq$ , representando a probabilidade de encontrar o valor de  $q_1$  entre  $q_1$  e  $q_1 + dq_1$ ,  $q_2$  entre  $q_2$  e  $dq_2$ , etc., em um tempo específico  $t$ . Para que esses valores representem quantidades reais,  $\Psi(q, t)$  deve ser, necessariamente, finita em todos os lugares, ter valor mensurável e ser uma função quadrada integrável. Sendo a sua probabilidade resultante igual a 1.

**2º Postulado** - Todas as quantidades físicas que podem ser medidas de modo clássico, como energia, momento, posição, etc., são denominadas quantidades físicas observáveis, *observáveis* para simplificar. Todas as observáveis possuem um operador linear e Hermitiano a elas associado. Operadores, como o próprio nome impõe, são entidades que operam sobre uma função matemática alterando, ou não, o seu estado. Todas as observáveis de um sistema podem ser representadas por um operador matemático. Os operadores são representados por

uma letra maiúscula e sobre eles é colocado um acento circunflexo. Como, por exemplo, um operador qualquer  $\hat{Q}$ .

Para representar um operador correspondente a uma observável escrevemos, primeiramente, a representação clássica observável em termos de  $q_k$  e  $p_k$ , deixando intacta as coordenadas espaciais e substituindo o momento  $p_k$  por  $\hat{p}_k = (\hbar/i)(\partial/\partial q_k)$ . Um operador muito importante e, constantemente, utilizado na teoria é o operador Laplaciano, que é representado por  $\nabla^2$ . Esse operador é, também, observado em eletromagnetismo nas equações de Maxwell. Ele representa a segunda derivada de uma função em relação às coordenadas espaciais. O Laplaciano em coordenadas cartesianas é,

$$\nabla^2 = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (5.1)$$

Falamos sobre os operadores serem lineares e Hermitianos, explicaremos essa última propriedade mais a diante. Um operador linear qualquer tem as seguintes propriedades

$$\hat{Q}(f_1 + f_2) = \hat{Q}f_1 + \hat{Q}f_2$$

$$\hat{Q}kf = k\hat{Q}f$$

onde  $\hat{Q}$  é um operador,  $f$  é uma função e  $k$  uma constante.

Um exemplo de operador linear pode ser observado no diferencial,

$$\frac{d}{dx}[f(x) + g(x)] = \frac{d}{dx}f(x) + \frac{d}{dx}g(x)$$

Porém, nem todos os operadores são lineares, como por exemplo a raiz quadrada,

$$\sqrt{f_1 + f_2} \neq \sqrt{f_1} + \sqrt{f_2}$$

Antes de prosseguir para o próximo postulado, vamos olhar um exemplo de como criar um operador e os principais operadores da MQ. Um operador importante, usado com frequência e que já é bem conhecido para nós, é o operador Hamiltoniano. Em mecânica clássica, a energia total de um sistema é dada por uma função de Hamilton  $H$ ,

$$H = T + U$$

onde  $T$  é a energia cinética total e  $U$  representa a energia potencial total do sistema. Se

tentarmos representar uma única partícula de massa  $m$  em termos de momento linear e coordenadas espaciais, temos

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z, t)$$

para construirmos o operador quântico, basta substituímos o momento e deixarmos as coordenadas, conforme dito no início do postulado, ou seja,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right] + U(x, y, z, t)$$

simplificando,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{dx^2} + \frac{\partial^2}{dy^2} + \frac{\partial^2}{dz^2} \right) + U(x, y, z, t) \quad (5.2)$$

se substituímos as derivadas das coordenadas pelo operador Laplaciano, ficamos com

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \quad (5.3)$$

Esse é o operador Hamiltoniano, responsável por representar a energia total do sistema. Abaixo, podemos observar os principais operadores utilizados na teoria quântica:

Energia total:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \quad (5.3)$$

Energia potencial:

$$\hat{U} = U(x, y, z) \quad (5.4)$$

Energia cinética:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (5.5)$$

Posição:

$$\hat{R} = \hat{X}_{\vec{i}} + \hat{Y}_{\vec{j}} + \hat{Z}_{\vec{k}} \quad (5.6)$$

Momento linear:

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla \quad (5.7)$$

Momento angular:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (5.8a)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (5.8b)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (5.8c)$$

**3º Postulado** - Quando se realiza a medição de um observável associado a um operador, o único resultado possível a ser obtido é um dos autovalores do operador correspondente. Em outras palavras, quando calculamos os valores  $a_\gamma$  de um observável que tem a ele associado um operador  $\hat{Q}$ , os resultados obtidos devem satisfazer a equação

$$\hat{Q}\Psi_\gamma = a_\gamma\Psi_\gamma \quad (5.9)$$

onde  $\Psi_\gamma$  é a função de onda para o estado em que medimos  $a_\gamma$ .

Como podemos observar, a Eq. (5.9) nos mostra que, quando um operador  $\hat{Q}$  age em uma função  $\Psi_\gamma$ , resulta na própria função multiplicada por uma constante  $a_\gamma$ . É dito que  $\Psi_\gamma$  são *autofunções* do operador  $\hat{Q}$  e que os valores  $a_\gamma$  são *autovalores* correspondentes ao operador. Já, os estados em que o sistema se encontra, que são representados pelas autofunções, são denominados *autoestados*.

Este postulado nos diz, então, que ao calcularmos uma observável  $a$ , só iremos obter um valor preciso se, e somente se, o sistema em que estamos efetuando a medição é um autoestado do operador que corresponde à observável  $a$ . A autofunção pode ser descrita como uma função apropriada, pois satisfaz uma equação em conjunto com certas condições de contorno.

Assim como quantidades físicas observáveis devem possuir expectância em termos de valores reais, os operadores que representam essas observáveis precisam nos dar autovalores reais. Os operadores que utilizamos em MQ pertencem a uma classe de operadores chamada de Hermitianos, onde os operadores que são seu próprio conjugado hermitiano são chamados

de *Operadores Hermitianos*. Um operador é dito hermitiano se satisfaz a relação entre às funções  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ :

$$\int \Psi_1^* \hat{Q} \Psi_2 dq = \int \Psi_2 \hat{Q}^* \Psi_1^* dq \quad (5.10)$$

**4º Postulado** - Em primeiro lugar, se duas autofunções representadas por  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  correspondem aos autovalores  $a_1$  e  $a_2$ , então a função  $\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$ , sendo  $c_1$  e  $c_2$  constantes, representa um estado do sistema para o qual, a probabilidade de observar  $a_1$  e  $a_2$  é  $c_1^* c_1$  e  $c_2^* c_2$  respectivamente. Vimos, no capítulo 4, que para encontrarmos a função de onda para um sistema, é necessária a resolução de uma equação diferencial linear, ou seja, a autofunção para o sistema. Como propriedade da álgebra linear, sabemos que se  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  são soluções de uma equação diferencial linear, por isso podemos obter outros resultados se fizermos combinações lineares com essas funções. Essa propriedade é conhecida como o *princípio da superposição*.

Nesse sentido, apesar de  $\Psi$  representar um estado do sistema, não necessariamente significa que esse estado é um autoestado. Se aplicarmos um operador na equação da função, temos

$$\hat{Q}\Psi = \hat{Q}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) \quad (5.11)$$

porém sabemos que

$$\hat{Q}\Psi_1 = a_1\Psi_1 \quad \text{e} \quad \hat{Q}\Psi_2 = a_2\Psi_2$$

então,

$$\hat{Q}\Psi = c_1 a_1 \Psi_1 + c_2 a_2 \Psi_2 \quad (5.12)$$

Portanto, isso mostra que nem sempre  $\Psi$  é uma autofunção de  $\hat{Q}$ , ou seja, não podemos, de forma geral, escrever

$$\hat{Q}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = a(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) \quad (5.13)$$

Se  $a_1 = a_2$ , podemos, sim, escrever uma equação na forma igual a Eq. (5.13). Nesse caso, se autovalores que correspondem a diferentes autofunções são iguais, chamamos essas funções de degeneradas (GEORGE, 1972). Sendo assim, podemos, então, concluir que a combinação linear de autofunções degeneradas de um operador  $\hat{Q}$  são, também, autofunções desse operador  $\hat{Q}$ .

Em segundo lugar, se um sistema está em um estado descrito por uma função de onda normalizada, então, podemos encontrar o *valor médio da observável*, em outras palavras, o *valor esperado*. Para calcular o valor esperado de qualquer grandeza  $Q$ , deve-se substituir o momento,  $p$ , por  $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ , na equação de normalização e inserir o operador resultante entre o conjugado complexo da função de onda e a função de onda:

$$\langle \hat{Q}q, p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{Q} \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \Psi dq \quad (5.14a)$$

A expressão que define o valor médio de uma observável é muito importante, pois é uma ferramenta de transposição da linguagem da MQ para um sistema fisicamente real (GEORGE, 1972). Podemos representar, seguindo o exemplo acima, o valor esperado da posição, da energia cinética e do momento, respectivamente, como:

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (5.14b)$$

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx \quad (5.14c)$$

$$\langle P \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx \quad (5.14d)$$

As equações acima nos mostram um resultado que obteríamos se realizássemos a média de um grande número de medições de uma observável (GRIFFITHS, 2005).

**5º Postulado** - A normalização de um estado não é afetada pela evolução do tempo, sendo a evolução temporal descrita por uma função  $\Psi(q, t)$  que deve satisfazer a equação

$$\hat{H}\Psi(q, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t) \quad (5.15)$$

Essa equação é chamada de *Equação de Schrödinger Dependente do Tempo*. Essa equação nos permite prever qualquer estado do sistema. Posteriormente, vamos analisar como extrair a ES independente do tempo deste e outros postulados. A própria ES é um postulado fundamental da teoria.

Encerramos, aqui, a descrição dos postulados que são a base da MQ, lembrando que esses postulados são tidos como verdadeiros, dadas as respostas positivas encontradas em

experimentos, que corroboram para sua veracidade. Vamos agora, analisar importantes consequências que surgem ao interpretarmos esses postulados fundamentais.

A teoria quântica pode ser descrita quase que como uma analogia à álgebra linear. Já vimos o início dessa álgebra quando falamos sobre números complexos. Nesse sentido, vamos entender os conceitos decorrentes dos postulados, que tem muita semelhança com a álgebra linear.

## 5.2 Notação de Dirac

Nos primórdios do desenvolvimento da teoria quântica, haviam dois grandes métodos matemáticos: a mecânica matricial de Heisenberg e a mecânica ondulatória de Schrödinger. Porém, mesmo que as duas abordagens sejam, formalmente, equivalentes, cada uma tem suas peculiaridades em certas aplicações. O método de Heisenberg é baseado em matrizes e álgebra vetorial, enquanto o de Schrödinger se utiliza de cálculo diferencial e integral. Nesse sentido, surge Paul Dirac, que criou um formalismo poderoso para representar o sistema que está sendo calculado de maneira não arbitrária, ou seja, utilizando a chamada notação de Dirac, ou notação bra-ket " $\langle | \rangle$ ". Assim, é possível manipular e trabalhar com o sistema e somente depois decidir que método utilizar para resolvê-lo. Em álgebra linear, a notação bra-ket é utilizada de forma análoga à indicação de um vetor  $\vec{a}$  por exemplo. Dessa maneira, a notação é utilizada para diferenciar elementos vetoriais de escalares (GEORGE, 1972).

Na notação de Dirac, o que sabemos é posto em um ket  $| \rangle$ . Então, por exemplo,  $| x \rangle$  representa a posição  $x$  da partícula no sistema. De modo análogo,  $| \Psi \rangle$  representa um sistema no estado  $\Psi$  e é, então, denominado vetor de estado. A notação bra  $\langle |$  representa o estado final, o que será mostrado em relação ao ket  $| \rangle$ . Por exemplo, comumente escrevemos  $\Psi(x)$  para representar uma função de onda, nessa nova notação, a função toma a forma  $\langle x | \Psi \rangle$ , ou seja, representa o valor da função  $\Psi$  em um determinado valor de  $x$ . A condição de normalização também pode ser expressa por meio de bra-kets. Bra corresponde, também, ao conjugado complexo da função de onda,  $\Psi^*(x) = \langle \Psi | x \rangle$  (GEORGE, 1972). Desse modo, a condição de normalização fica

$$\int \Psi^*(x) \Psi(x) = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

Repare que é possível abreviar bastante com essa notação, não sendo necessária a utilização dos sinais de integral nem a dependência em  $x$ , nesse caso. Quando aplicamos os operadores em funções, temos, nessa nova formatação:

$$\int \Psi_1^* \hat{Q} \Psi_2 dx = \langle \Psi_1 | \hat{Q} | \Psi_2 \rangle$$

Podemos, também, representar a Eq. (5.10) que nos diz a condição de hermiticidade, como sendo

$$\int \Psi_2 \hat{Q}^* \Psi_1^* dq = \langle \Psi_2 | \hat{Q} | \Psi_1 \rangle^* = \langle \Psi_1 | \hat{Q} | \Psi_2 \rangle$$

O que vimos até aqui é o suficiente para entendermos como traduzir a notação que é, normalmente, utilizada em textos da teoria e para prosseguirmos nesse estudo (GEORGE, 1972).

### 5.3 Ortogonalidade, ortonormalidade e completude da função de onda

Vamos analisar algumas propriedades importantes intrínsecas de operadores e funções de onda. A primeira delas é a *ortogonalidade*. Duas funções de onda,  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ , são ditas ortogonais se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dq = 0 \quad (5.16)$$

As autofunções de um operador Hermitiano são ortogonais se possuem autovalores diferentes. Podemos interpretar isso fisicamente. Se duas funções de onda são ortogonais, significa que quando fizermos uma medição, para achar o valor esperado da posição por exemplo, a partícula deve estar em uma delas, ou seja, se um estado é encontrado, a partícula está totalmente nesse estado e não no outro. Autoestados ortogonais de uma observável correspondem a diferentes resultados possíveis de uma medição dessa observável (GEORGE, 1972).

Segundo Fitzpatrick (2021), podemos provar que duas autofunções,  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ , são ortogonais através da seguinte forma:

Substituindo as autofunções na Eq. (5.9) do terceiro postulado, temos

$$\hat{Q}\Psi_1 = a_1\Psi_1 \quad (5.17)$$

$$\hat{Q}\Psi_2 = a_2\Psi_2 \quad (5.18)$$

Calculando o conjugado complexo da Eq. (5.17) e lembrando que os autovalores de operadores Hermitianos são sempre reais, ou seja,  $a_1 \neq a_2$ ,

$$\hat{Q}^*\Psi_1^* = a_1\Psi_1^* \quad (5.19)$$

Multiplicando a Eq. (5.19) por  $\Psi_2$  e a Eq. (5.18) por  $\Psi_1^*$ , temos

$$\Psi_2\hat{Q}^*\Psi_1^* = \Psi_2 a_1\Psi_1^* \quad (5.20)$$

$$\Psi_1^*\hat{Q}\Psi_2 = \Psi_1^* a_2\Psi_2 \quad (5.21)$$

Agora, integrando as duas equações sobre todo o espaço e subtraindo uma da outra,

$$\int \Psi_2\hat{Q}^*\Psi_1^* d\tau - \int \Psi_1^*\hat{Q}\Psi_2 d\tau = (a_1 - a_2) \int \Psi_2\Psi_1^* d\tau \quad (5.22)$$

O lado esquerdo da equação é zero, pois  $\hat{Q}$  é um operador Hermitiano, nos dando

$$(a_1 - a_2) \int \Psi_2\Psi_1^* d\tau = 0 \quad (5.23)$$

Se  $a_1 \neq a_2$ , então, a integral deve ser zero. Isso prova que autofunções não degeneradas do mesmo operador são ortogonais.

Quando normalizamos as funções de onda que são ortogonais, dizemos que elas são *ortonormais*. Essa propriedade pode ser expressa pelo símbolo matemático delta de Kronecker, onde

$$\int \Psi_i^* \Psi_j dq = \delta_{ij} \quad (5.24)$$

O símbolo  $\delta_{ij}$  aparece, naturalmente, em várias áreas da física e matemática, como um meio de expressar, de modo compacto, a sua definição abaixo,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j, \\ 1 & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (5.25)$$

Se um conjunto de funções existe, são ortogonais entre si e normalizadas, chamamos esse conjunto de ortonormal. Além disso, se não há nenhuma outra função com as mesmas

condições de contorno e que seja ortogonal a uma das funções do conjunto, chamamos esse conjunto de *conjunto ortonormal completo*. Isso significa que nenhuma das funções contém componentes das outras, além de não ser possível encontrar mais nenhuma função ortogonal no sistema analisado (GEORGE, 1972).

#### 5.4 Comutação de operadores

Dizemos que dois operadores comutam se a ordem em que eles operam não modifica o resultado. Por exemplo, considerando dois operadores  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$ , se a ordem em que eles operam na função  $\Psi$  não faz diferença, ou seja, se  $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$ , os operadores *comutam* (GEORGE, 1972).

Para entendermos melhor o significado de comutação, vamos observar um exemplo de dois operadores que comutam, sendo eles os operadores da energia cinética e do momento que, por motivos de simplicidade, serão expressos em uma dimensão. Se a ordem de operação não interfere no resultado, então

$$\hat{T}_x \hat{P}_x - \hat{P}_x \hat{T}_x = 0$$

ou de forma abreviada

$$\left[ \hat{T}_x, \hat{P}_x \right] = 0 \quad (5.26)$$

onde os colchetes representam a comutação. Para provarmos a propriedade desses operadores, vamos substituir seus valores conforme visto no exemplo após o postulado 2. Nesse sentido,

$$\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.27)$$

Então, para comutarem, os operadores obedecem a regra

$$\hat{T}_x(\hat{P}_x(\Psi)) = \hat{P}_x(\hat{T}_x(\Psi)) \quad (5.28)$$

substituindo e resolvendo a parte esquerda da equação,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\Psi) \right) \Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (-i\hbar) \left( \frac{\partial^3}{\partial x^3} (\Psi) \right)$$

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\Psi) \right) \\ & \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\Psi) \right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Podemos ver que eles, realmente, comutam, pois a Eq. (5.29) é igual a parte direita da Eq. (5.28), ou seja, igual a  $\hat{P}_x(\hat{T}_x(\Psi))$  (GRIFFITHS, 2005).

Porém, existem operadores que não comutam como, por exemplo, os operadores do momento e da posição

$$[\hat{P}_x, \hat{X}] \neq 0 \quad (5.30)$$

Prova:

$$\begin{aligned} \hat{P}_x(\hat{X}(\Psi)) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x(\Psi)) \Rightarrow -i\hbar \left( x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi \frac{\partial x}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \left( x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi \right) \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} \hat{X}(\hat{P}_x(\Psi)) &= x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\Psi) \right) \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{aligned} \quad (5.32)$$

Podemos observar que, se invertermos a ordem desses operadores, o resultado é afetado. Esses operadores não comutam. Quando temos dois ou mais operadores em sequência, *devemos operar da direita para a esquerda*, como observado nos exemplos acima. Essa ordem é muito importante (GRIFFITHS, 2005).

Essa propriedade de comutação é de extrema importância e consequência no estudo da MQ. Operadores que comutam possuem o mesmo conjunto de autofunções. Por exemplo, se

$$[\hat{T}_x, \hat{P}_x] = 0 \quad (5.26)$$

então,

$$\text{Mesmo conjunto de } \Psi_n \text{ para todos os } n \begin{cases} (\hat{T}_x)\Psi_n = E_n\Psi_n \\ \hat{P}\Psi_n = p_n\Psi_n \end{cases} \quad (5.33)$$

ou seja, se encontrarmos as autofunções para o operador da energia cinética, essas autofunções serão as mesmas para o operador do momento, sendo o contrário também válido.

Uma outra consequência muito importante que surge da comutação de operadores é a de que se temos duas observáveis das quais os operadores não comutam, não podemos medi-las simultaneamente com precisão infinita. Podemos observar essa consequência no Princípio da Incerteza, onde o operador da incerteza na posição não comuta com o operador da incerteza no momento,

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.34)$$

Obtemos a prova desse princípio no exemplo anterior. Isso demonstra que é impossível saber com total precisão os valores das observáveis ligadas aos operadores no princípio da incerteza.

### 5.5 Equação de Schrödinger para estados estacionários

Agora que estabelecemos os postulados e suas principais consequências, podemos apresentar um último ponto, o surgimento da *Equação de Schrödinger Independente do Tempo*. Essa é a equação mais importante no nosso estudo, pois com ela iremos descrever o comportamento do elétron no átomo de hidrogênio.

Vamos olhar para os postulados 2, 3 e 5. O postulado 3 nos diz que, ao calcularmos os autovalores  $a_\gamma$  de uma observável que possui um operador  $\hat{Q}$  associado, devem satisfazer a relação

$$\hat{Q}\Psi_\gamma = a_\gamma\Psi_\gamma \quad (5.9)$$

Temos interesse em calcular a energia total do sistema  $\Psi$ , representada por  $E$ , então, o operador associado à observável é o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$ , ou seja, podemos substituí-lo na Eq. (5.9), ficando

$$\hat{H}\Psi(q, t) = E\Psi(q, t) \quad (5.35)$$

onde  $q$  representa as coordenadas espaciais e  $t$  a coordenada temporal (GEORGE, 1972).

O postulado 5 nos diz que a evolução temporal de um sistema é descrita pelo operador Hamiltoniano

$$\hat{H}\Psi(q, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t) \quad (5.15)$$

Para que as Eq. (5.35) e Eq. (5.15) sejam consistentes, precisamos isolar a variável espacial da temporal, já que nosso objetivo é encontrar uma equação que descreva um sistema em estado estacionário. Para isso, vamos utilizar, mais uma vez, nossa ferramenta matemática de separação de variáveis em uma EDO, da mesma maneira que aplicamos no capítulo 4 com o problema da partícula em uma caixa. Sendo assim, escrevemos

$$\Psi(q, t) = \psi_{(x)} \phi_{(t)} \quad (5.36)$$

O postulado 2 nos mostra a forma do operador Hamiltoniano. Então, podemos substituir seu valor na Eq. (5.15)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(q, t) + U\Psi(q, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t) \quad (5.37)$$

podemos substituir a Eq. (5.36) na Eq. (5.37)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{(x)} \phi_{(t)} + U\psi_{(x)} \phi_{(t)} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(x)} \phi_{(t)} \quad (5.38)$$

Agora, devemos dividir pelo valor que multiplicamos, ou seja, dividimos por  $\Psi(q, t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_{(x)}} \frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + U = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\phi_{(t)}} \frac{d\phi_{(t)}}{dt} \quad (5.39)$$

Perceba que deixamos de usar derivadas parciais e utilizamos as normais, pois agora as variáveis estão isoladas. A Eq. (5.39) só é verdadeira se os dois lados forem constantes. Caso contrário, seria possível modificar  $t$  no lado direito sem modificar o lado esquerdo da equação. Sendo assim, podemos separar os dois lados da Eq. (5.39) igualando-a a uma constante, que chamaremos de  $E$ . Então, para o lado esquerdo temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + U = E\psi_{(x)} \quad (5.40)$$

ou

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (5.41)$$

A Eq. (5.41) é a *Equação de Schrödinger para Estados Estacionários*, onde a função de onda é independente do tempo (GEORGE, 1972).

Vamos, agora, trabalhar no lado direito da Eq. (5.39). Igualando à constante, temos

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\phi_{(t)}}{dt} = E\phi_{(t)} \quad (5.42)$$

Esta equação é uma EDO de primeira ordem e para resolvê-la precisamos deixá-la na forma proposta pelo teorema fundamental do cálculo, onde

$$\frac{d}{dx} + P(x) \cdot y = Q(x)$$

fazendo os devidos ajustes, substituímos

$$\frac{d\phi_{(t)}}{dt} + \frac{iE\phi_{(t)}}{\hbar} = 0 \quad (5.43)$$

A solução geral para uma EDO de primeira ordem é dada por

$$Y = Ce^{-\int P(x) dx} + e^{-\int P(x) dx} \times \int e^{\int P(x) dx} Q(x) dx$$

substituindo a Eq. (5.43) na equação acima, temos

$$\phi_{(t)} = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (5.44)$$

a constante  $C$  pode ser incorporada pois só estamos interessados no produto entre  $\psi_{(x)}$  e  $\phi_{(t)}$ . A Eq. (5.44) representa a parte temporal da função de onda (GEORGE, 1972).

Um estado é dito estacionário se for representado pela união da Eq. (5.36) e Eq. (5.44),

$$\Psi(q, t) = \psi_{(x)} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (5.45)$$

e, portanto, a densidade de probabilidade é independente do tempo, conforme demonstrado abaixo

$$|\Psi(q, t)|^2 = \Psi_{(x)}^* e^{\frac{iEt}{\hbar}} \Psi_{(x)} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = |\Psi(q)|^2 \quad (5.46)$$

onde os exponenciais são conjugados complexos um do outro, igualando a 1 (GEORGE, 1972).

Até o presente momento, nós já encontramos a ES no capítulo 3, a partir da equação de onda, observações comprovadas por experimentos e assumindo vários parâmetros que, agora, esclarecemos nos postulados. Nesse capítulo, vimos os postulados que deram origem à teoria quântica e vimos que a ES é um postulado fundamental, que forma a base da teoria. Os postulados gerais e as relações de comutação entre os operadores, vistos aqui, nos permitem construir um modelo quântico da natureza.

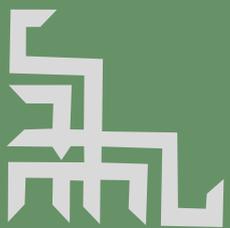
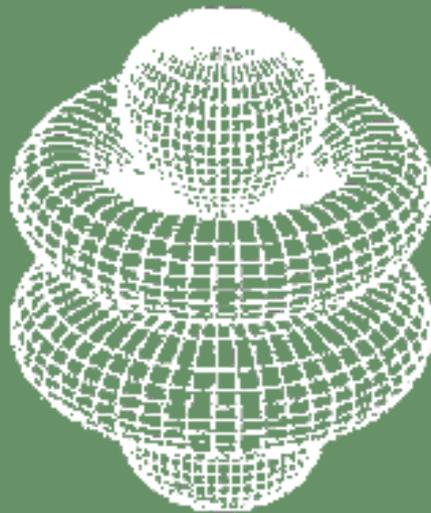


# MOMENTO ANGULAR

---

# 6

---



O momento angular, como estudado em física clássica, é uma grandeza que se mantém constante, ou seja, é conservada enquanto o sistema evolui, até que alguma força externa aja no sistema. Ele desempenha um papel muito importante, tanto na mecânica clássica, no estudo dos movimentos planetários por exemplo, quanto na MQ, como na descrição de um elétron orbitando um núcleo, o spin e os momentos magnéticos de partículas fundamentais. O momento angular é algo que pode ser medido em um sistema e portanto é uma observável, por isso, segundo os postulados gerais, possui um operador associado. O momento angular se apresenta em duas partes, o momento angular orbital e o momento angular spin, onde um é específico sobre a análise do momento em referência a um ponto de rotação e o outro se refere à análise do momento tendo seu centro de massa como referência, respectivamente (GEORGE, 1972). Porém, antes de prosseguirmos, para entrarmos nesse assunto com mais compreensão, acreditamos ser importante reservar este espaço para discutir e relembrar um pouco sobre análise vetorial, mais especificamente produto de vetores. Essa ferramenta matemática será a base para obtermos a expressão que representa o operador do momento angular.

### 6.1 Análise vetorial

Para o produto vetorial entre dois vetores  $\vec{A}$  e  $\vec{B}$ , escrevemos o vetor  $\vec{C}$  como

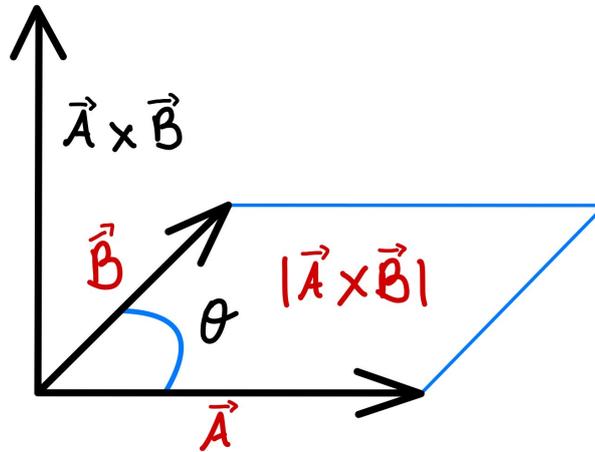
$$\vec{C} = \vec{A} \times \vec{B}$$

e sua magnitude é dada por

$$|\vec{C}| = |\vec{A} \times \vec{B}| = |\vec{A}| |\vec{B}| \sin \theta$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\vec{A}$  e  $\vec{B}$ , sendo  $\vec{C}$  perpendicular ao plano que contém  $\vec{A}$  e  $\vec{B}$ . A figura abaixo nos mostra essa definição (GEORGE, 1972).

Figura 6.1- Diagrama representando o produto de vetores.



(Fonte: Autor, 2021).

Sendo o produto vetorial dos vetores um vetor por si próprio, deve possuir componentes para a sua magnitude e direção ao longo do sistema de coordenadas. As expressões gerais para essas componentes podem ser descritas como

$$\vec{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}$$

$$\vec{B} = B_x \vec{i} + B_y \vec{j} + B_z \vec{k}$$

onde  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$  e  $\vec{k}$  são vetores mutuamente perpendiculares e paralelos ao eixo de coordenadas.  $A_x A_y A_z$  e  $B_x B_y B_z$  são os componentes de  $\vec{A}$  e  $\vec{B}$ , paralelos ao eixo. Com os componentes definidos podemos expressar nosso vetor como

$$\begin{aligned} \vec{A} \times \vec{B} &= (A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k}) \times (B_x \vec{i} + B_y \vec{j} + B_z \vec{k}) \\ &= A_x B_x \vec{i} \times \vec{i} + A_x B_y \vec{i} \times \vec{j} + A_x B_z \vec{i} \times \vec{k} \\ &\quad + A_y B_x \vec{j} \times \vec{i} + A_y B_y \vec{j} \times \vec{j} + A_y B_z \vec{j} \times \vec{k} \\ &\quad + A_z B_x \vec{k} \times \vec{i} + A_z B_y \vec{k} \times \vec{j} + A_z B_z \vec{k} \times \vec{k} \\ &= (A_y B_z - A_z B_y) \vec{i} + (A_z B_x - A_x B_z) \vec{j} + (A_x B_y - A_y B_x) \vec{k} \end{aligned}$$

onde  $\vec{i} \times \vec{i} = \vec{j} \times \vec{j} = \vec{k} \times \vec{k} = 0$ , pois  $\sin \theta = 0$  (GEORGE, 1972). Portanto, podemos escrever os componentes do vetor final como

$$C_x = A_y B_z - A_z B_y$$

$$C_y = A_z B_x - A_x B_z$$

$$C_z = A_x B_y - A_y B_x$$

Com isso encerramos essa breve revisão do produto de vetores, podendo, agora, dar início à construção dos operadores do momento angular.

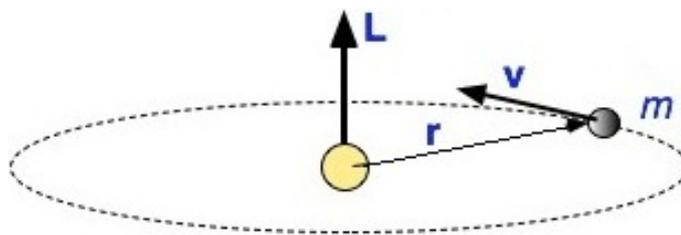
## 6.2 Operadores do momento angular

Nos postulados vimos que para chegarmos até um operador, precisamos, primeiramente, analisar o equivalente clássico de nossa observável. Na mecânica clássica, o momento angular é um vetor que possui direção e magnitude. Para um melhor entendimento, vamos começar com um exemplo clássico de momento angular orbital. Se considerarmos que um planeta de massa  $m$  se move ao redor de um ponto fixo, uma estrela, como representado na Fig. 6.2, o momento angular  $\vec{L}$  se dá na forma

$$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$$

onde  $\vec{r}$  é um vetor, cuja magnitude representa a distância da massa  $m$  até o ponto fixo, o Sol.  $\vec{v}$  é um vetor que representa a velocidade linear da massa  $m$  do planeta (DAS, 2018).

Figura 6.2- Representação da magnitude e direção do momento angular orbital.



Fonte: <https://qph.cf2.quoracdn.net/main-qimg-7bb7c40b0b959de1dcf73944dfb566c6>. Acesso em: 23 abril 2022.

Podemos reformular a equação, já que  $m\vec{v}$  representa o momento linear  $\vec{p}$ , ou seja,

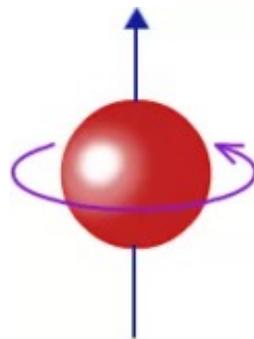
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

É importante observar que a direção do momento é perpendicular ao plano de translação do planeta ao redor do Sol. O fator relevante que podemos extrair dessa discussão é

que o momento angular é uma grandeza vetorial e, por isso, têm duas componentes, a magnitude e a direção, usadas para as componentes do tipo  $x$ ,  $y$  e  $z$  do vetor. Porém, o nosso sistema não restringe essas duas componentes, ou seja, elas podem apresentar qualquer valor. A distância pode variar em qualquer quantidade, assim como, a velocidade do planeta pode variar. Em outras palavras, a magnitude e a direção do momento angular orbital podem assumir valores contínuos, os valores não são quantizados. Sistemas clássicos não são quantizados, não possuem valores discretos, podendo assumir quaisquer valores (DAS, 2018).

Agora, vamos observar somente o planeta e seu movimento de rotação, na Fig. 6.3. Nesse caso, as mesmas propriedades podem ser observadas, magnitude e direção. Da mesma maneira, os valores que as componentes podem apresentar são infinitos, não possuindo restrições de direção, velocidade angular e, conseqüentemente, momento. Nesse sentido, o momento angular do spin não é quantizado classicamente.

Figura 6.3- Representação clássica da rotação, spin, de um planeta.

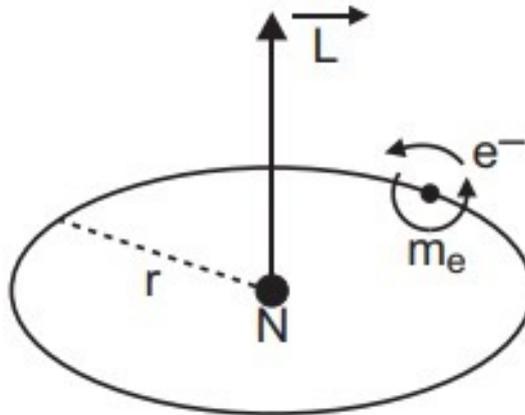


Fonte: <https://qph.fs.quoracdn.net/main-qimg-eaa42b780b8d2bc7ff5abff82b2c222a>. Acesso em: 23 abril 2022.

Levando em consideração essa análise introdutória, vamos aplicar isso a um sistema quântico, como o de um elétron se movendo ao redor de um núcleo. Vamos observar que o elétron possui muitas restrições, tanto na magnitude e direção do momento angular orbital, quanto na magnitude e direção do momento angular intrínseco.

Em outras palavras, o sistema e suas partes são quantizados. Um elétron que se move ao redor de um núcleo, Fig. 6.4, possui momento angular  $\vec{L}$ ,

Figura 6.4- Representação de um elétron ao redor de um núcleo.



Fonte: [https://www.sarthaks.com/?qa=blog&qa\\_blobid=5421638272210364891](https://www.sarthaks.com/?qa=blog&qa_blobid=5421638272210364891).  
Acesso em: 23 abril 2022.

e sua magnitude é restrita pela equação abaixo

$$|L| = \sqrt{L^2} = \hbar[l(l+1)]^{\frac{1}{2}}$$

onde  $l$  pode assumir os valores  $0, 1, 2, \dots, (n-1)$  e esses valores representam os orbitais atômicos  $s, p, d, \dots$ , respectivamente. Pelos valores definidos de  $l$  e pela equação acima, a magnitude do momento angular orbital apresenta valores discretos, quantias exatas que obedecem à restrição. Se substituirmos os valores de  $l$ , temos que o momento angular orbital é respectivamente,  $0, \sqrt{2}\hbar, \sqrt{6}\hbar, \dots$  (DAS, 2018).

Mas e quanto à direção do momento? Teremos a resposta após analisarmos essas implicações. Vamos deixar claro que essa representação clássica do elétron, na figura acima, é só para meios explicativos. Sabemos que o elétron se apresenta em uma nuvem de probabilidade em torno do núcleo. Nesse capítulo, vamos aprender as ferramentas para dar forma à essa nuvem probabilística. Nesse sentido, vamos entender como surgem essas restrições.

Vamos aplicar os elementos de análise vetorial no momento angular. Se considerarmos  $\vec{r}$  como  $x, y$  e  $z$ , podemos escrever:

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (6.1a)$$

$$L_y = zp_x - xp_z \quad (6.1b)$$

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (6.1c)$$

Essas expressões representam o momento angular clássico nos três eixos espaciais. Utilizando as regras para a criação de operadores, do postulado 2, obtemos, instantaneamente, os operadores do momento angular (GEORGE, 1972),

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (5.8a)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (5.8b)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (5.8c)$$

O próximo passo é verificar se os operadores comutam, ou não, e, com isso, definir se podemos saber com precisão os valores de todas as componentes associadas. Para isso, aplicamos a regra da comutação nos operadores  $\hat{L}_x$  e  $\hat{L}_y$ , utilizando a Eq. (5.8c)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x \\ &= -\hbar^2 \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + \hbar^2 \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \hbar^2 \left( -yz \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - y \frac{\partial}{\partial x} + yx \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} - zx \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right. \\ &\quad \left. + zy \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + xz \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \hbar^2 \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned} \quad (6.2)$$

Da mesma maneira, se aplicarmos as regras da comutação aos outros operadores, teremos resultados simétricos. Podemos expressar a comutação dos operadores da seguinte maneira

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \quad (6.3a)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x \quad (6.3b)$$

$$\left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \right] = \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y \quad (6.3c)$$

Podemos ver, claramente que os operadores não comutam. Isso significa que não podemos saber mais do que uma componente do momento angular com precisão. Podemos saber uma componente e a média do valor das outras. Apesar de os operadores não comutarem, o operador do momento angular total ao quadrado comuta com os outros (GEORGE, 1972). O quadrado do momento angular total é dado pelo seu próprio produto escalar  $\vec{L} \cdot \vec{L}$ , na forma

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (6.4)$$

Para provar a comutação, vamos verificar se o quadrado do momento angular total comuta com a componente  $\hat{L}_z$ , sendo que qualquer componente pode ser escolhida. Para que comutem,

$$\left[ \hat{L}^2, \hat{L}_z \right] = 0 \quad (6.5)$$

$$\left[ \hat{L}^2, \hat{L}_z \right] = \left[ \hat{L}_x^2, \hat{L}_z \right] + \left[ \hat{L}_y^2, \hat{L}_z \right] + \left[ \hat{L}_z^2, \hat{L}_z \right] \quad (6.6)$$

O ultimo termo pode ser eliminado, pois  $\hat{L}_z^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_z^2 = \hat{L}_z^3 - \hat{L}_z^3 = 0$ . Nesse sentido, vamos expandir os outros comutadores para que possamos entender como o cálculo é feito. Reescrevendo a Eq. (6.6) temos,

$$\left[ \hat{L}^2, \hat{L}_z \right] = \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 \quad (6.7)$$

Podemos simplificar a equação acima adicionando e subtraindo os termos. Para os dois primeiros termos temos,

$$\begin{aligned} \left[ \hat{L}^2, \hat{L}_z \right] &= \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x \\ &= \hat{L}_x (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x \end{aligned}$$

a expressão em parênteses se refere à Eq. (6.3c), onde aqui, se apresenta inversa, ou seja, podemos escrevê-la negativa, ficando

$$= -i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x$$

Continuando com os dois últimos termos,

$$= -i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y + (\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{L}_x$$

a expressão em parênteses também se refere à Eq. (6.3c), ficando,

$$\begin{aligned} &= -i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x \\ &= -i\hbar(\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x) \end{aligned} \quad (6.8)$$

O mesmo processo pode ser feito para os dois últimos termos da Eq. (6.7)

$$\hat{L}_y^2\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y^2 = i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_y) \quad (6.9)$$

se adicionarmos as Eq. (6.8) e Eq. (6.9), temos

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0 \quad (6.10a)$$

Por simetria, podemos obter o valor para as outras componentes,

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0 \quad (6.10b)$$

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = 0 \quad (6.10c)$$

Portanto, o momento angular total  $\hat{L}^2$  e as componentes  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$  comutam. Isso significa que é possível medir  $\hat{L}^2$  com precisão e, conseqüentemente, a magnitude do momento angular total, mais uma componente. Essas regras de comutação não nos permitem saber  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$  simultaneamente, tal qual explicado no capítulo 5 (GEORGE, 1972).

Agora que analisamos a forma dos operadores do momento angular, podemos nos preocupar em encontrar os seus autoestados. Desses autoestados vamos, principalmente, nos focar nos autovalores dos operadores do momento angular. As suas autofunções serão exploradas posteriormente na aplicação da ES para o átomo de hidrogênio.

### 6.3 Autovalores dos operadores do momento angular

Apesar de o processo, a seguir, conter vários detalhes que demandam atenção, vamos encontrar resultados muito interessantes e essenciais para o desenvolvimento da MQ. Será possível demonstrar que dois dos números quânticos mais básicos surgem da estrutura lógica

da teoria. Para obtermos os autovalores, vamos utilizar as relações de comutação dos operadores, que obtivemos anteriormente para, assim, determinar os autovalores como consequências dessas relações.

Seguindo o caminho proposto por Freeman (2018) e George (1972), vamos utilizar os mesmos símbolos utilizados em harmônicos esféricos para demonstrar as autofunções. Por enquanto, vamos aceitar essa escolha. Porém, mais tarde, veremos o porque dela, quando examinarmos sistemas com simetria esférica, onde serão muito úteis. Nesse sentido, vamos observar o postulado 3. Ele nos diz que quando calculamos uma observável, o resultado deve ser um autovalor do operador correspondente e que satisfaça a equação

$$\hat{Q}\Psi_\gamma = a_\gamma\Psi_\gamma \quad (5.9)$$

Lembramos, também, que operadores que comutam possuem as mesmas autofunções correspondentes, então podemos concluir que

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = k_l Y_{l,m} \quad (6.11)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m} = k_m Y_{l,m} \quad (6.12)$$

onde  $k_l$  e  $k_m$  são os autovalores dos operadores do momento angular e são constantes. Novamente, por motivos de convenção, vamos trabalhar com o operador na componente  $\hat{L}_z$ , sendo que qualquer outra componente pode ser escolhida sem que isso afete os cálculos (GEORGE, 1972).

Observamos, então, que as nossas autofunções  $Y_{l,m}$  já são conhecidas, muito antes da teoria quântica, como harmônicos esféricos. A utilização dessa nomenclatura para nossas autofunções irá nos ajudar a compreender melhor o conceito de momento angular e, posteriormente, a sua aplicação orbital.

Retornando ao raciocínio, operando a Eq. (6.12) em ambos os lados com  $\hat{L}_z$

$$\hat{L}_z \hat{L}_z Y_{l,m} = k_m \hat{L}_z Y_{l,m}$$

$$\hat{L}_z^2 Y_{l,m} = k_m k_m Y_{l,m} = k_m^2 Y_{l,m} \quad (6.13)$$

A componente  $\hat{L}_z^2$  se da pela Eq. (6.4)

$$\hat{L}_z^2 = \hat{L}^2 - (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$$

então,

$$\begin{aligned}\hat{L}_z^2 Y_{l,m} &= \left[ \hat{L}^2 - (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) \right] Y_{l,m} \\ \hat{L}_z^2 Y_{l,m} &= k_l Y_{l,m} - (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) Y_{l,m}\end{aligned}\quad (6.14)$$

Substituindo na Eq. (6.13), temos

$$k_l Y_{l,m} - (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) Y_{l,m} = k_m^2 Y_{l,m} \quad (6.15)$$

então,

$$(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) Y_{l,m} = (k_l - k_m^2) Y_{l,m} \quad (6.16)$$

A expressão  $(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$  é um operador que atua na autofunção  $Y_{l,m}$ , tendo a ele associado uma observável  $(L_x^2 + L_y^2)$ , porém essa observável não pode ser negativa. Portanto, segundo a Eq. (6.16) o autovalor é  $(k_l - k_m^2)$ , então, para ser positivo,

$$k_l \geq k_m^2 \quad (6.17)$$

Esse resultado tem consequências que observaremos mais adiante (GEORGE,1972).

Para continuarmos, será necessário introduzir o conceito de um novo tipo de operador, chamado de operador escada, ou também, operador de criação e aniquilação, definido como

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (6.18)$$

O operador escada se apresenta em pares, sendo  $\hat{L}_-$  para “descer a escada, ou aniquilar” e  $\hat{L}_+$  para “subir a escada, ou criar”. Esses operadores não são Hermitianos e, por isso, não representam nenhuma quantidade física observável. Porém, eles são utilizados para determinar níveis de energia quantizados de Hamiltonianos, através do método de fatorização, desenvolvido por Schrödinger em 1940. A ideia é criar uma série de Hamiltonianos auxiliares e usar somente álgebra para resolver os autovalores da energia. Essencialmente, qualquer problema padrão em MQ pode se utilizar desse método para a sua resolução, nesse caso o usaremos para encontrar os autoestados do momento angular (FREEMAN, 2018).

Podemos mostrar, então, a comutação do operador escada com o momento angular e suas componentes,

$$\begin{aligned}
& \left[ \hat{L}^2, \hat{L}_\pm \right] = \left[ \hat{L}_y^2, \hat{L}_x \right] \pm i \left[ \hat{L}_x^2, \hat{L}_y \right] + \left[ \hat{L}_z^2, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \right] \\
& = \pm i \left( \hat{L}_x \left[ \hat{L}_x, \hat{L}_y \right] + \left[ \hat{L}_x, \hat{L}_y \right] \hat{L}_x \right) + \hat{L}_y \left[ \hat{L}_y, \hat{L}_x \right] + \left[ \hat{L}_y, \hat{L}_x \right] \hat{L}_y \\
& \quad + \hat{L}_z \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \right] + \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \right] + \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \pm \hat{L}_y \right] \hat{L}_z \\
& = \hbar \left( \mp \hat{L}_x \hat{L}_z \mp \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hat{L}_y \hat{L}_z - i\hat{L}_z \hat{L}_y + i\hat{L}_z \hat{L}_y \right. \\
& \quad \left. \pm \hat{L}_z \hat{L}_x + i\hat{L}_y \hat{L}_z \pm \hat{L}_x \hat{L}_z \right) \\
& = 0
\end{aligned} \tag{6.19}$$

ou seja, o operador escada comuta com o operador do momento angular total. Vamos aplicar o mesmo raciocínio para a componente  $\hat{L}_z$  do momento angular

$$\begin{aligned}
& \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_\pm \right] = \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \right] \\
& = \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_x \right] \pm i \left[ \hat{L}_z, \hat{L}_y \right] \\
& = \pm \hbar \hat{L}_\pm
\end{aligned} \tag{6.20}$$

O operador escada não comuta com a componente  $\hat{L}_z$  e, por simetria, não comuta com as componentes  $\hat{L}_x$  e  $\hat{L}_y$  (FREEMAN, 2018).

Vamos considerar a relação entre o operador de criação  $\hat{L}_+$  e o operador da componente  $\hat{L}_z$ . A expressão se dá na forma

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hat{L}_z\hat{L}_x + i\hat{L}_z\hat{L}_y \tag{6.21}$$

podemos substituir os valores do lado direito da Eq. (6.21) com as relações das Eq. (6.3)

$$\hat{L}_z\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_x\hat{L}_z$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_y = -i\hbar\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_z$$

substituindo na Eq. (6.21),

$$\begin{aligned}
& i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_x + i(-i\hbar\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_z) \\
& = i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_x - i^2\hbar\hat{L}_x + i\hat{L}_y\hat{L}_z \\
& = i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_x + i\hat{L}_y\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_x
\end{aligned}$$

$$= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_z + \hbar) \quad (6.22)$$

Conseqüentemente, podemos obter, da mesma maneira, os valores com o operador de aniquilação  $\hat{L}_-$  (FREEMAN, 2018), ficando

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_z - \hbar) \quad (6.23)$$

Com essas novas equações, podemos prosseguir com as autofunções do momento angular.

Vamos operar com as autofunções  $Y_{l,m}$  nas novas equações. Fazendo isso podemos escrever

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y_{l,m} = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_z + \hbar)Y_{l,m} \quad (6.24)$$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)Y_{l,m} = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_z - \hbar)Y_{l,m} \quad (6.25)$$

Usando a relação que criamos com a Eq. (6.12) podemos reescrever as equações acima

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y_{l,m} = (k_m + \hbar)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y_{l,m} \quad (6.26)$$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)Y_{l,m} = (k_m - \hbar)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)Y_{l,m} \quad (6.27)$$

As Eq. (6.26) e Eq. (6.27) são autofunções do operador  $\hat{L}_z$ . Em outras palavras,  $(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y_{l,m}$  e  $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)Y_{l,m}$  são as funções e  $(k_m + \hbar)$  e  $(k_m - \hbar)$  são os respectivos autovalores. No entanto, vimos, anteriormente, que as componentes do momento angular  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$ , comutam com o momento angular total  $\hat{L}^2$ , por isso essas autofunções que encontramos devem corresponder ao autovalor  $k_l$  de  $\hat{L}^2$ . Portanto, podemos concluir que para o autovalor  $k_l$  do operador  $\hat{L}^2$  existem dois autovalores possíveis de  $\hat{L}_z$ , que são  $(k_m + \hbar)$  e  $(k_m - \hbar)$ . Porém, eles não representam todos os autovalores possíveis de  $\hat{L}_z$  que correspondem ao autovalor de  $k_l$  de  $\hat{L}^2$  (GEORGE, 1972). Se considerarmos  $(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^2$  e  $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)^2$ , podemos mostrar, pelo mesmo raciocínio anterior que

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^2Y_{l,m} = (k_m + 2\hbar)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^2Y_{l,m} \quad (6.28)$$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)^2Y_{l,m} = (k_m - 2\hbar)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)^2Y_{l,m} \quad (6.29)$$

e, conseqüentemente, se tivermos operadores elevados à potencia três, quatro, etc,

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^3 Y_{l,m} = (k_m + 3\hbar)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^3 Y_{l,m} \quad (6.30)$$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)^3 Y_{l,m} = (k_m - 3\hbar)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)^3 Y_{l,m} \quad (6.31)$$

A partir dessa discussão entre operadores e autofunções, podemos concluir que para cada autovalor  $k_l$  de  $\hat{L}^2$ , existem uma série de autovalores de  $\hat{L}_z$ , essa série sendo

$$\dots, k_m - 2\hbar, k_m - \hbar, k_m, k_m + \hbar, k_m + 2\hbar, \dots \quad (6.32)$$

Como a Eq. (6.17) nos diz que  $k_l \geq k_m^2$ , então, essa série deve ser finita em ambos os lados (GEORGE, 1972). Com o auxílio dos operadores escada (criação, aniquilação), toda vez que operamos na autofunção  $Y_{l,m}$  com  $(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)$ , aumentamos ou diminuimos o autovalor por  $\hbar$ . A partir disso, podemos determinar a relação entre  $k_l$  e  $k_m$ .

Como os autovalores podem assumir valores diferentes, vamos denominar os menores autovalores da Eq. (6.32) como  $k'_m$  e os maiores valores como  $k''_m$  e, portanto, as autofunções correspondentes serão  $Y'_{l,m}$  e  $Y''_{l,m}$ , respectivamente. Nesse sentido, podemos escrever

$$\hat{L}^2 Y'_{l,m} = k'_m Y'_{l,m} \quad (6.33)$$

$$\hat{L}^2 Y''_{l,m} = k''_m Y''_{l,m} \quad (6.34)$$

Como dito,  $k''_m$  é o maior autovalor e, portanto,

$$(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y''_{l,m} = 0 \quad (6.35)$$

Também,  $k'_m$  é o menor autovalor e, portanto,

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)Y'_{l,m} = 0 \quad (6.36)$$

Trabalhando, primeiramente, com a Eq. (6.35), vamos operar nela com  $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$ , ficando

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)Y''_{l,m} = 0 \quad (6.37)$$

$$(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hat{L}_y\hat{L}_x)Y''_{l,m} = 0 \quad (6.38)$$

Podemos escrever a equação acima substituindo os dois primeiros termos por  $\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$ , segundo a Eq. (6.4), e os dois últimos por  $\hbar\hat{L}_z$ , segundo a Eq. (6.3a), ficando

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) Y''_{l,m} = 0 \quad (6.39)$$

Sabemos que  $\hat{L}^2$  e  $\hat{L}_z$  comutam, então podemos reescrever a Eq. (6.39) com as Eq. (6.34) e Eq. (6.11), ficando

$$(k_l - k_m''^2 - \hbar k_m'') Y''_{l,m} = 0 \quad (6.40)$$

Como  $Y''_{l,m}$  não pode ser zero, podemos trabalhar com os termos entre parênteses, resolvendo

$$k_l = k_m''^2 + \hbar k_m'' \quad (6.41)$$

Agora, aplicando os mesmos passos na Eq. (6.36), operando com  $(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)$ , temos, de maneira similar,

$$k_l = k_m'^2 - \hbar k_m' \quad (6.42)$$

Lembrando que  $k_m'' > k_m'$ , podemos ver que a Eq. (6.41) e Eq. (6.42) só são consistentes se  $k_m'' = -k_m'$  (GEORGE, 1972). Também, a Eq. (6.32) nos mostra que  $k_m''$  é maior que  $k_m'$  pelo fator de um número inteiro múltiplo de  $\hbar$ . Portanto, podemos escrever

$$k_m'' = k_m' + n\hbar \quad (6.43)$$

Substituindo pela condição de consistência

$$-k_m' = k_m' + n\hbar$$

$$-k_m' = \frac{n}{2}\hbar \quad (6.44)$$

Podemos observar que agora o valor de  $k_m'$  depende somente de  $n/2$ , que podemos dar o nome de  $l$ . Portanto, escrevemos a Eq. (6.44) como

$$-k_m' = l\hbar \quad (6.45)$$

sendo que  $l$  pode ter valores inteiros ou fracionários. Vamos substituir a Eq. (6.45) na Eq. (6.42)

$$k_l = l(l+1)\hbar^2 \quad (6.46)$$

Portanto,  $k_m$  pode ter uma série de valores que dependam somente de  $k_l$ . Sendo  $k_m''$  o maior termo da série, que é igual ao negativo do menor termo  $k_m'$ , podemos escrever uma nova série a partir da Eq. (6.45)

$$l\hbar, (l-1)\hbar, (l-2)\hbar, \dots, -(l-2)\hbar, -(l-1)\hbar, -l\hbar \quad (6.47)$$

Possuímos a expressão que representa  $k_l$  e para  $k_m$  podemos expressar sua forma geral como

$$k_m = m\hbar \quad (6.48)$$

onde  $m$  possui valores de  $(2l+1)$  sendo  $-l \leq m \leq +l$ . Se  $l$  for inteiro,  $m$  será inteiro também, assim como se  $l$  for fracionário,  $m$  também será fracionário (GEORGE, 1972). Voltando para as Eq. (6.11) e Eq. (6.12), que definem as autofunções e autovalores dos operados do momento angular, e substituindo-as pelas expressões que representam  $k_l$  e  $k_m$ , temos

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m} \quad (6.49)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m} + m\hbar Y_{l,m} \quad (6.50)$$

Terminamos, por aqui, essa parte matemática do momento angular. Vamos, agora, examinar os resultados que obtivemos.

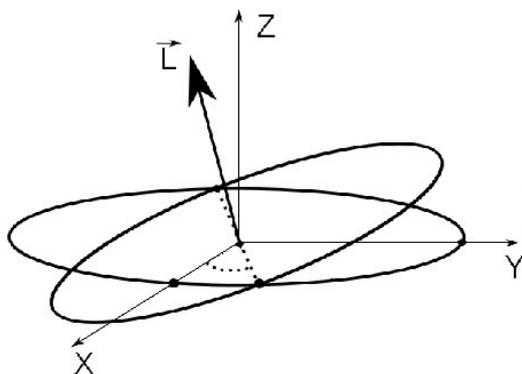
Vimos que  $\hat{L}^2$  tem valor de  $\hbar^2[l(l+1)]$ , então podemos escrever a magnitude do momento angular orbital, que é a parte que estamos interessados, como

$$|\vec{L}| = \sqrt{L^2} = \hbar[l(l+1)]^{\frac{1}{2}} \quad (6.51)$$

Como o momento angular é um vetor, as regras de comutação, que vimos anteriormente, nos mostram que só podemos saber o valor da magnitude e de uma componente no momento angular, já que  $\hat{L}^2$  comuta com  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$  (GEORGE, 1972). A partir disso, vamos olhar para o exemplo do elétron orbitando um núcleo e responder a pergunta do início do capítulo. Vimos que o momento angular orbital é quantizado e a equação que impõe essa restrição, Eq. (6.51). Porém, não analisamos se a direção do momento angular orbital é restrita ou não. A resposta é não!. Até mesmo a direção espacial em que o momento se encontra é restrita. Isso significa que os únicos valores de um eixo que podemos observar são dados por  $m\hbar$  e o valor máximo que  $m$  pode ter é dado por  $l$ , ou seja, o valor total de uma componente em qualquer direção é dado por  $l\hbar$ , ou seja,  $\hat{L}_z = l\hbar$ . Esse valor representa um valor menor do que o momento angular total. Essa restrição é chamada, também, de quantização espacial (DAS, 2018).

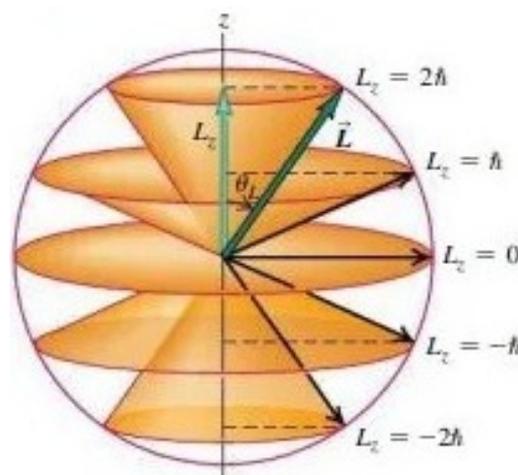
Para visualizar a quantização espacial, vamos considerar dois planos de inclinação para a posição, Fig 6.5, em referência ao eixo Z. A Fig. 6.6 representa, esquematicamente, um exemplo dessa quantização espacial com os valores permitidos.

Figura 6.5- Diagrama da quantização espacial do momento angular orbital.



Fonte: <https://www.researchgate.net/profile/Christoph-Lhotka/publication/262953083/figure/fig1/AS:340585694154769@1458213365368/Angular-momentum-vector-L-with-the-help-of-the-precession-angle-h-and-of-the-obliquity-I.png>. Acesso em: 23 abril 2022.

Figura 6.6- Representação da restrição da direção do momento angular orbital e o movimento de precessão.



Fonte: <https://holooly.com/wp-content/uploads/2021/11/3-64.jpg>. Acesso em: 23 abril 2022.

Para o orbital  $p$ :  $\hat{L}_z = -\hbar, 0, \hbar$ ;  $l = 1$ ; e  $m = -1, 0, 1$ . Essa figura é melhor interpretada se imaginarmos o movimento do elétron em três dimensões. Quando a direção é dada por  $\hat{L}_z = \hbar$ , o elétron pode estar em qualquer posição dentro do caminho da elipse que o momento está apontado, contanto que sua direção não mude. Uma maneira análoga seria o movimento de precessão de um giroscópio, por exemplo, que faz um movimento circular ao redor de um eixo imaginário. Esse fenômeno é chamado de precessão da órbita do elétron. O elétron está se movendo em uma órbita tal que seu momento angular apresenta precessão em torno do eixo Z, de tal maneira que a componente  $\hat{L}_z$  é igual a  $\hbar$ . Existem três possíveis valores dentro do orbital  $p$  para a direção do momento angular. Não somente a magnitude do momento angular orbital é quantizada, mas, também, a direção em que a componente aponta (DAS, 2018).

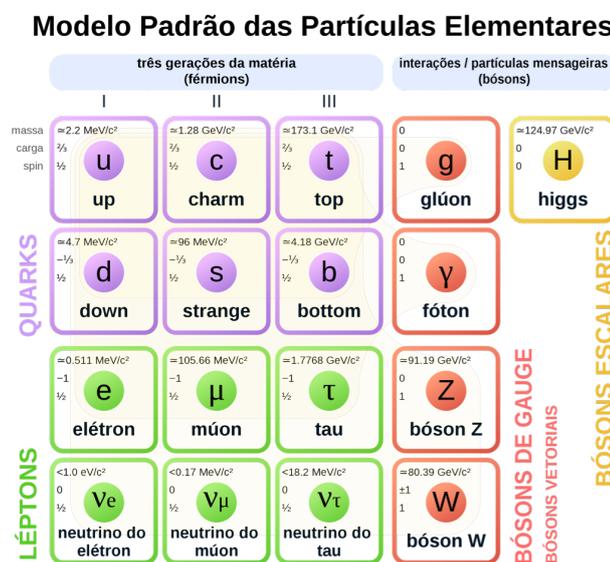
Nesse capítulo, vimos que, quando consideramos o momento angular orbital, aparecem dois números,  $l$  e  $m$ , comumente chamados de números quânticos do momento angular orbital. Esses dois números, quando é estudada a velha teoria de Bohr, são chamados de azimutal e magnético, respectivamente. O que vimos aqui é a evolução deles quando

consideramos o momento angular orbital. Vamos, então, explorar outro número quântico que aparece quando consideramos o momento angular intrínseco de uma partícula.

## 6.4 Spin

Algumas partículas possuem momento angular intrínseco que pode ser identificado pelo terceiro valor em cada partícula, conforme a Fig. 6.7.

Figura 6.7- Modelo padrão das partículas elementares.



Fonte: [https://pt.wikipedia.org/wiki/Modelo\\_Padrão#/media/](https://pt.wikipedia.org/wiki/Modelo_Padrão#/media/)

Ficheiro:Standard\_Model\_of\_Elementary\_Particles-pt-br.svg, 2021. Acesso em: 15 nov 2021.

Podemos ver que o spin tem valor inteiro ou meio e que a maioria das partículas elementares possuem essa propriedade. A palavra que designa tal propriedade, “spin”, pode causar confusão, já que seu significado literal é “girar”, mesmo que as partículas, em si, não estejam girando. Essa nomenclatura é o mais próximo de uma analogia com o nosso entendimento do momento angular, como visto no início do capítulo, com a descrição clássica no fenômeno. Porém, não representa a verdadeira natureza desse fenômeno, na escala quântica

Seguindo as regras de criação de operadores, precisamos encontrar uma forma clássica que represente o spin para, assim, encontrarmos um operador que o represente. Porém, não existe nada classicamente análogo ao spin, ou seja, é um fenômeno essencialmente quântico.

Nesse sentido, devemos encontrar outro método para trabalharmos com o spin. Vamos utilizar um método desenvolvido por Wolfgang Pauli. Para isso, precisamos fazer algumas suposições arbitrárias, que são justificáveis pelo sucesso que elas apresentam ao tentar explicar observações experimentais (GEORGE, 1972).

Vamos, de início, supor que o spin pode ser trabalhado da mesma maneira que o momento angular orbital. Para isso, vamos definir operadores para o spin que são análogos aos operadores  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$ . A esses operadores damos o símbolo  $\hat{S}$  e assumimos que eles obedecem às mesmas regras de comutação do momento angular orbital. Então, podemos escrever, com base nos cálculos anteriores, a não comutação das componentes,

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_z \quad (6.52a)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \hat{S}_y \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}_y = i\hbar \hat{S}_x \quad (6.52b)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \hat{S}_z \hat{S}_x - \hat{S}_x \hat{S}_z = i\hbar \hat{S}_y \quad (6.52c)$$

e a comutação de  $\hat{S}^2$  com as componentes

$$[\hat{S}_x, \hat{S}^2] = \hat{S}_x \hat{S}^2 - \hat{S}^2 \hat{S}_x = 0 \quad (6.53a)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}^2] = \hat{S}_y \hat{S}^2 - \hat{S}^2 \hat{S}_y = 0 \quad (6.53b)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}^2] = \hat{S}_z \hat{S}^2 - \hat{S}^2 \hat{S}_z = 0 \quad (6.53c)$$

Nós vimos que os operadores do momento angular orbital podem apresentar vários autoestados associados. Porém, o experimento de Stern-Gerlach prova o contrário, o momento angular apresenta vários estados mas o spin se comporta de forma diferente. Esse experimento consiste na deflexão de um feixe de átomos de prata, neutros, através dos polos de um imã não homogêneo, mostrando que o operador do spin para um único elétron pode possuir somente dois autoestados associados. Nesse sentido, vamos assumir que para um único elétron, existam somente duas autofunções, denominadas  $\hat{S}^2$  e  $\hat{S}_z$  (GEORGE, 1972).

Anteriormente, observamos dois números quânticos,  $l$  e  $m$ , e como eles estão ligados aos seus valores entre si. Os operadores do spin obedecem as mesmas regras de comutação que os operadores do momento angular orbital e, com isso, podemos obter seus autovalores,

para o qual se atribuímos a  $l$  outro nome,  $s$ ; para  $m$ :  $m_s$ ; e para seguirem com consistência os resultados experimentais, farão os números quânticos,  $s$  e  $m_s$ , assumirem valores de  $1/2$  e  $\pm 1/2$ , respectivamente. Os valores de  $m_s$  nos dão dois autoestados do spin para um único elétron.

Voltando à analogia com o momento angular orbital, com o auxílio das Eq. (6.49) e Eq. (6.50) e das afirmações acima, podemos escrever

$$\hat{S}^2\alpha = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2\alpha = \frac{3}{4}\hbar^2\alpha \quad (6.54)$$

$$\hat{S}^2\beta = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2\beta = \frac{3}{4}\hbar^2\beta \quad (6.55)$$

$$\hat{S}_z\alpha = \frac{1}{2}\hbar\alpha \quad (6.56)$$

$$\hat{S}_z\beta = -\frac{1}{2}\hbar\beta \quad (6.57)$$

sendo as autofunções  $\alpha$  e  $\beta$ , definidas por convenção (GEORGE, 1972). O número quântico do spin  $m_s$  descreve o momento angular do elétron, que também é quantizado. O elétron que se move ao redor de um núcleo tem momento angular intrínscado (spin) e momento angular orbital. Nesse sentido, como o momento angular é um vetor, o número quântico do spin  $s$  possui magnitude e direção. A expressão que representa a quantização do momento angular do spin é dada por

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad (6.58)$$

onde  $s = 1/2$ . Como  $s$  apresenta um único valor, a quantização da magnitude do momento angular do spin é dada por  $|S| = \sqrt{3/2} \hbar$ , independente de o elétron estar ligado a um átomo, ou estar livre. De maneira análoga, a direção do spin também é quantizada, Fig. 6.8, porém, só possui dois graus de liberdade.

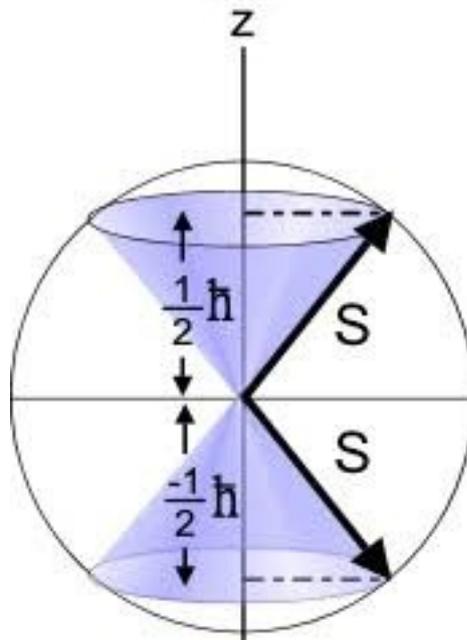
A expressão abaixo quantiza a direção do momento angular do spin,

$$\hat{S}_z = m_s\hbar \quad (6.59)$$

onde  $m_s$  possui valores de  $\pm s$ . Dessa forma, podemos esquematizar as duas direções possíveis

em que o elétron pode se encontrar, em relação a um eixo  $Z$ , podendo esse eixo ser um campo magnético, por exemplo (DAS, 2018).

Figura 6.8- Representação das duas posições do spin do elétron e sua precessão



Fonte: <https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcRpi2xUelqD-VgSAPIyND7BuA6bp7jDiMAwXg&usqp=CAU>. Acesso em: 23 abril 2022.

Essas duas propriedades, quantização da magnitude e do espaço do momento angular do spin, são propriedades intrínsecas do elétron, assim como de outras partículas elementares com spin  $1/2$ , como nêutrons e prótons.

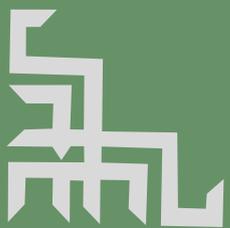
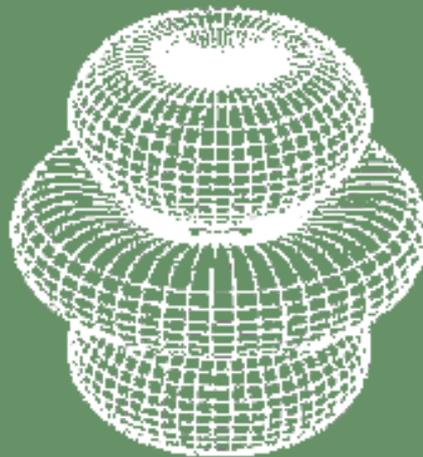


O MODELO  
MATEMÁTICO DOS  
ÁTOMOS

---

7

---



Este é o capítulo final deste material. Nele vamos aplicar todo o conhecimento que trabalhamos até aqui, na solução da ES em três dimensões para átomos do tipo hidrogênio, encontrando assim, as funções que determinam os estados energéticos de um elétron ao redor de um núcleo, assim como os seus níveis de energia. A partir da solução da ES para o átomo de hidrogênio, podemos aproximar a solução de todos os estados quânticos de elétrons de qualquer outro átomo. Essa equação nos permite prever, aproximadamente, o comportamento dos elétrons em todos os elementos da tabela periódica.

Antes de começarmos, vamos especificar os passos que serão seguidos para a resolução da ES:

1° - Resolver a ES dependente do tempo em três dimensões,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi \quad (5.15)$$

2° - Resolver a parte temporal da ES, tornando-a independente do tempo;

3° - Efetuar a conversão da ES de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas polares;

4° - Utilizar o método matemático de separação de variáveis para separar a parte radial da parte angular da ES, obtendo duas equações;

5° - Para resolver a equação angular vamos utilizar os polinômios de Legendre;

6° - Para resolver a equação radial vamos utilizar os polinômios de Laguerre;

7° - A partir de todos os passos, vamos juntar todas as soluções, resolvendo a ES independente do tempo obtendo, assim, as funções de onda para o átomo de hidrogênio.

Com esses passos, será possível observar as formas dos orbitais para diferentes configurações eletrônicas de um elétron em um átomo.

### 7.1 - A Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas

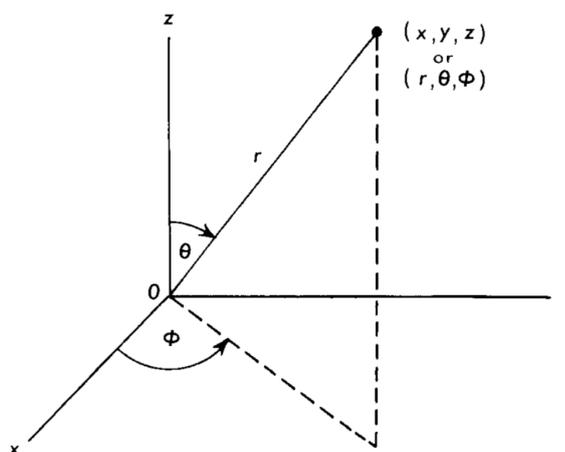
Observando os passos detalhados, podemos eliminar o 1° e 2° passo, já que foram trabalhados e resolvidos no capítulo 5, quando estudamos a ES para estados estacionários, onde resolvemos a parte temporal.

Sendo assim, podemos escrever a ES independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad (5.40)$$

Ainda não podemos resolvê-la porque ainda não temos o valor da energia potencial  $U$ . A função da energia potencial é uma função de uma distância, nesse caso, no sistema cartesiano,  $U(x, y, z)$ . Agora, se mudarmos do sistema de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas polares o nosso trabalho se tornará mais fácil, no que se refere à resolução da ES, isso porque ao invés de termos três variáveis,  $U(x, y, z)$ , podemos trabalhar somente com uma, um vetor  $U(\vec{r})$ . A relação entre coordenadas cartesianas e coordenadas esféricas polares pode ser observada na Fig. 7.1 (GEORGE, 1972).

Figura 7.1 - Relação entre coordenadas cartesianas e coordenadas esféricas.



Fonte: George, 1972, p. 76.

As relações matemáticas que descrevem a imagem acima se apresentam na forma

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen} \theta \cos \phi \\ y &= r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (7.1)$$

Para efetuarmos essa troca de sistemas de coordenadas, precisamos modificar o Laplaciano da ES, transformá-lo em Laplaciano esférico.

Sendo assim, o Laplaciano em coordenadas esféricas polares é

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \operatorname{sen} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \quad (7.2)$$

Com isso, transformamos o Laplaciano. Agora podemos reescrever a ES em coordenadas esféricas polares, ficando

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] +$$

$$+ U \psi = E \psi \quad (7.3)$$

Essa equação depende, agora, somente de  $r$ ,  $\theta$  e  $\phi$  (GRIFFITHS, 2005).

Podemos resolver essa nova equação através do método de separação de variáveis, o mesmo método que vimos em outros capítulos. Para fazer isso, a nossa solução se apresenta na forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad (7.4)$$

Substituindo a Eq. 7.3 na Eq. 7.4, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right] +$$

$$+ U R Y = E R Y \quad (7.5)$$

Note que agora podemos escrever como derivadas ordinárias a parte radial. Sendo assim, podemos simplificar a Eq. 7.5 dividindo por

$$R(r) Y(\theta, \phi) - \frac{\hbar^2}{2m r^2} \quad (7.6)$$

Essa simplificação nos permitirá separar as variáveis. Expandindo a Eq. 7.5, para melhor observarmos essa simplificação, efetuamos a divisão, obtendo

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m r^2} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \frac{1}{R} \frac{1}{Y} \right) + \left( \left( -\frac{\hbar^2}{2m r^2 \sin \theta} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \frac{1}{Y} R \frac{1}{R} \right) \right) +$$

$$+ \left( \left( -\frac{\hbar^2}{2m r^2 \sin^2 \theta} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \frac{1}{Y} R \frac{1}{R} \right) \right) + \left( -\frac{2m r^2}{\hbar^2} U(r) R \frac{1}{R} \frac{1}{Y} \frac{1}{Y} \right) = E R \frac{1}{R} \frac{1}{Y} \frac{1}{Y}$$

cancelando os termos iguais, ficamos com o resultado

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \frac{1}{R} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \frac{1}{Y} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \frac{1}{Y} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} U(r) = E \quad (7.7)$$

Podemos melhorar a apresentação dessa equação, rearranjando os termos, ficando

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [U(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} \right\} = 0 \quad (7.8)$$

Com isso separamos as duas variáveis. O primeiro colchete é em relação a  $r$  e o segundo colchete em relação aos ângulos  $\theta$  e  $\phi$  (GRIFFITHS, 2005). Com essa separação, será mais fácil resolver essa equação. Vamos ver como, a seguir:

Os dois termos da Eq. 7.8 igualam a zero, por isso podemos igualar eles a uma constante, na qual sua soma resulte em zero. Por exemplo, se o primeiro colchete for igual à  $x$ , então, o segundo colchete deve ser igual à  $-x$ , ou quaisquer outros valores, desde que no fim o resultado seja zero. Sendo assim, podemos escrever a Eq. 7.8 como duas equações independentes igualadas a uma constante, da seguinte forma

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [U(r) - E] = l(l + 1) \quad (7.9)$$

$$+ \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} \right\} = -l(l + 1) \quad (7.10)$$

É importante notar que a derivação da ES para esse caso estudado antecipa soluções e resultados e, por isso, incorpora fatores de simplificação, como no caso da constante a cima. Isso é feito para simplificar o processo algébrico e o entendimento desse problema.  $l$  é um número quântico que aparece na solução como valores de  $l(l + 1)$ , como já vimos no capítulo anterior, por isso foi introduzido antecipadamente, simplificando os cálculos e o raciocínio. Poderíamos resolver tudo sem nenhuma simplificação e chegaríamos aos mesmos resultados, porém, seria muito trabalhoso, fugindo do sentido deste trabalho, ao se aprofundar demais nas questões puramente matemáticas (GRIFFITHS, 2005).

## 7.2 - Resolução da parte angular

Conseguimos separar as duas variáveis, possibilitando, agora, a resolução individual de cada equação. A Eq. 7.9 não pode ser resolvida ainda, porque não sabemos o valor da

energia potencial  $U(r)$ . Portanto, no momento, vamos focar na Eq. 7.10 e resolvê-la, assim encontrando  $Y(\theta, \phi)$ . Dessa forma, podemos observar que existem duas variáveis,  $\theta$  e  $\phi$ , e para resolvê-las vamos utilizar, novamente, o método de separação das variáveis. Para facilitar a separação, vamos multiplicar a Eq. 7.10 pelo termo  $Y \text{sen}^2 \theta$ , simplificando alguns fatores,

$$\text{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \text{sen} \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) \text{sen}^2 \theta Y \quad (7.11)$$

Da mesma maneira que aplicamos a separação de variáveis nos outros problemas, vamos primeiramente assumir uma solução que separa as variáveis, da seguinte forma

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad (7.12)$$

substituindo na Eq. 7.11, temos

$$\text{sen} \theta \frac{d}{d\theta} \left( \text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \Phi(\phi) \right) + \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \Theta(\theta) = -l(l+1) \text{sen}^2 \theta \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

dividindo por  $\Theta(\theta) \Phi(\phi)$ , para eliminar os termos, ficamos com

$$\text{sen} \theta \frac{d}{d\theta} \left( \text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \frac{1}{\Theta} \Phi(\phi) \frac{1}{\Phi} \right) + \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \frac{1}{\Phi} \Theta(\theta) \frac{1}{\Theta} = -l(l+1) \text{sen}^2 \theta \Theta(\theta) \frac{1}{\Theta} \Phi(\phi) \frac{1}{\Phi}$$

simplificando os termos, podemos rearranjar a equação a cima de tal forma

$$\left\{ \frac{1}{\Theta} \left[ \text{sen} \theta \frac{d}{d\theta} \left( \text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \text{sen}^2 \theta \right\} + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0 \quad (7.13)$$

Agora, o primeiro termo está somente em função de  $\theta$  e o segundo termo somente em função de  $\phi$ . Conseguimos separar as variáveis com sucesso. Nesse sentido, igual fizemos anteriormente, se a soma das duas partes se iguala a zero, podemos igualar as duas variáveis a uma constante. Essa constante de separação se apresenta na seguinte forma

$$\frac{1}{\Theta} \left[ \text{sen} \theta \frac{d}{d\theta} \left( \text{sen} \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \text{sen}^2 \theta = m^2 \quad (7.14)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \quad (7.15)$$

Novamente, em antecipação ao resultado, chamamos a constante de  $m$ , a qual, no

decorrer deste capítulo, iremos descobrir como sendo um número inteiro correspondente à um número quântico (GRIFFITHS, 2005).

Com isso, agora podemos resolver as Eq. 7.14 e Eq. 7.15 separadamente. A equação dependente de  $\phi$  é a mais simples de resolver. Podemos recordar que trabalhamos com um tipo parecido de equação no capítulo 5, na resolução da parte temporal da ES. Multiplicando os dois lados da Eq. 7.15 por  $\Phi$  ficamos com

$$\Phi \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi$$

simplificando e resolvendo,

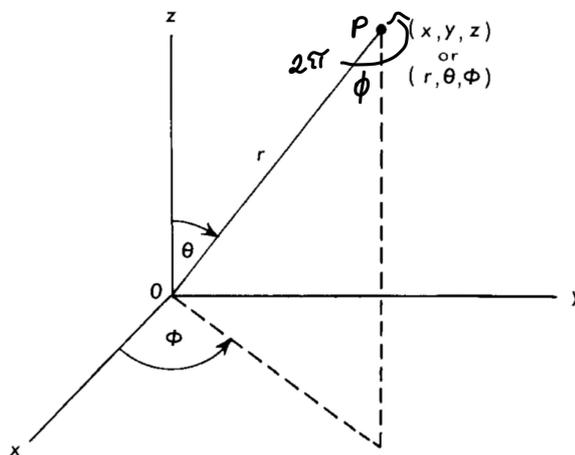
$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2 \quad (7.16)$$

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi} \quad (7.17)$$

A solução para essa equação foi obtida como foi visto no capítulo 5, incorporando a constante  $C$  (GRIFFITHS, 2005).

Vamos relembrar, que no início deste capítulo, vimos como as coordenadas esféricas se comportam em relação às coordenadas cartesianas, através da Fig. 7.1. Se efetuarmos a rotação do ponto  $P$  no valor de  $2\pi$  em relação a  $\phi$ , vamos chegar ao mesmo lugar onde o ponto estava anteriormente, ou seja, sabemos que, em trigonometria, uma volta completa no círculo trigonométrico é  $2\pi = 360$  graus.

Figura 7.2 - Representação da rotação do ponto  $P$  pelo fator  $2\pi$ .



Fonte: George, 1972, p. 76.

Dessa forma, podemos assumir uma nova representação de  $\Phi(\phi)$ , como sendo

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$$

ou ainda, substituindo essa relação na Eq. 7.17, temos

$$e^{im[\phi+2\pi]} = e^{im\phi} \quad (7.18)$$

ou

$$e^{2\pi im} = 1 \quad (7.19)$$

Nesse sentido  $m$  deve ser um número inteiro, ou seja,

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4... \quad (7.20)$$

Aqui encerramos a resolução da equação dependente do ângulo  $\phi$  (GRIFFITHS, 2005).

Agora, vamos voltar nossa atenção para a equação dependente de  $\theta$ . A equação abaixo, Eq. 7.21,

$$\text{sen}\theta \frac{d}{d\theta} \left( \text{sen}\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1) \text{sen}^2\theta - m^2]\Theta = 0 \quad (7.21)$$

é bastante complicada. Optamos por não resolver aqui porque, sendo uma equação trabalhosa, iria demandar muito tempo e desviar o foco do nosso raciocínio. Nesse sentido, a solução da Eq. 7.21 se dá na forma

$$\Theta(\theta) = A P_l^m(\cos\theta) \quad (7.22)$$

na qual  $A$  é uma constante e  $P_l^m$  é chamado de *função de Legendre associada*. Essa função é definida pela equação abaixo

$$P_l^m(\cos\theta) = (-1)^m (\text{sen}\theta)^m \left( \frac{d}{d(\cos\theta)} \right)^m P_l(\cos\theta) \quad (7.23)$$

onde  $P_l(\cos\theta)$  é o  $l$ -ésimo elemento dos *polinômios de Legendre*, sendo definido pela *fórmula de Rodrigues*:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (7.24)$$

Para que a fórmula acima faça sentido,  $l$  deve ser um número inteiro positivo, ou seja,

pela Eq. 7.23, podemos concluir que para quaisquer valores de  $l$ , existem  $(2l + 1)$  valores possíveis de  $m$ , como demonstrado abaixo (GRIFFITHS, 2005):

$$m \geq l \quad (7.25)$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l \quad (7.26)$$

As equações, funções e polinômios de Legendre são muito importantes, por isso, é útil entender o que significam. Os polinômios de Legendre e os associados de Legendre são utilizados na determinação das funções potenciais da geometria esfericamente simétrica em matemática. Na física de reatores nucleares, possuem uma grande importância para as soluções de equações de transporte de nêutrons e na definição das funções de espalhamento adequadas de nêutrons, entre muitas outras aplicações. Por fim, as aplicações mais importantes para nós são na determinação das funções de onda dos elétrons nas órbitas de um átomo (GEORGE, 1972). Alguns dos primeiros polinômios de Legendre e funções associadas de Legendre se apresentam na Tabela 7.1:

Quadro 7.1 - Alguns dos primeiros polinômios de Legendre (a); Algumas das funções associadas de Legendre

$P_0 = 1$
$P_1 = x$
$P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$P_3 = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
$P_4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$

(a)

$P_0^0 = 1$	$P_2^0 = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$
$P_1^1 = \sin \theta$	$P_3^3 = 15 \sin \theta (1 - \cos^2 \theta)$
$P_1^0 = \cos \theta$	$P_3^2 = 15 \sin^2 \theta \cos \theta$
$P_2^2 = 3 \sin^2 \theta$	$P_3^1 = \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
$P_2^1 = 3 \sin \theta \cos \theta$	$P_3^0 = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$

(b)

Fonte: Griffiths, 2005, p. 137,138.

Solucionamos a equação dependente de  $\theta$ . Agora podemos direcionar nossa atenção à parte que se refere ao volume em coordenadas esféricas. O volume, nesse sistema de coordenadas, é dado por

$$d^3r = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \quad (7.27)$$

utilizando a condição de normalização  $\int |\Psi|^2 d^3r = 1$ , temos

$$\int |\Psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

Por questões de praticidade  $R$  e  $Y$  são normalizados separadamente, resultando em

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{e} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (7.28)$$

Com isso, podemos concluir com as funções de onda normalizadas da parte angular, chamadas, também, de harmônicos esféricos, Eq. 7.29. Alguns exemplos destes harmônicos podem ser observados na Tabela 7.3.

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (7.29)$$

onde  $\epsilon = (-1)^m$ , para  $m \geq 0$  e  $\epsilon = 1$  para  $m \leq 0$  (GRIFFITHS, 2005).

Quadro 7.2 - Alguns dos primeiros harmônicos esféricos.

$Y_0^0 = \sqrt{\left(\frac{1}{4\pi}\right)}$	$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\left(\frac{15}{32\pi}\right)} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_1^0 = \sqrt{\left(\frac{3}{4\pi}\right)} \cos \theta$	$Y_3^0 = \sqrt{\left(\frac{7}{16\pi}\right)} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\left(\frac{3}{8\pi}\right)} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp \sqrt{\left(\frac{21}{64\pi}\right)} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \sqrt{\left(\frac{5}{16\pi}\right)} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = \sqrt{\left(\frac{105}{32\pi}\right)} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$

Fonte: Griffiths, 2005, p. 139.

Lembrando, que, como vimos no capítulo 6 sobre o momento angular orbital, os valores  $l$  e  $m$  são chamados número quântico azimutal e número quântico magnético, respectivamente.

Assim, encerramos a resolução da parte angular da ES. Vamos, na próxima seção, analisar a parte radial da ES.

### 7.3 - Resolução da parte radial

A parte radial da função de onda  $R(r)$  é dada pela equação abaixo

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [U(r) - E]R = l(l+1)R \quad (7.30)$$

Para termos uma visão mais clara sobre o que estamos lidando, podemos introduzir uma nova variável de simplificação,

$$u(r) = rR(r) \quad (7.31)$$

Isso significa que se estamos resolvendo em função de  $R$ , temos

$$R = \frac{u}{r}$$

derivando duas vezes, temos

$$\frac{dR}{dr} = \frac{\left[ r \left( \frac{du}{dr} \right) - u \right]}{r^2}$$

para a primeira derivada, e

$$\left( \frac{d}{dr} \right) \left[ r^2 \left( \frac{dR}{dr} \right) \right] = r \frac{d^2u}{dr^2}$$

para a segunda derivada. Derivamos duas vezes em relação à  $R$  porque temos duas derivadas no início da Eq. 7.30. Feito isso, podemos reescrever a Eq. 7.30 com novos termos, ficando

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[ U + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad (7.32)$$

Essa equação é chamada de equação radial. A nova variável apresentada não tem nada a ver com a energia potencial é, por convenção, usado  $u(r)$ . Não podemos mais resolver essa equação sem antes sabermos a função da energia potencial e, portanto, precisamos aplicá-la a um sistema para encontrarmos o seu valor (GRIFFITHS, 2005).

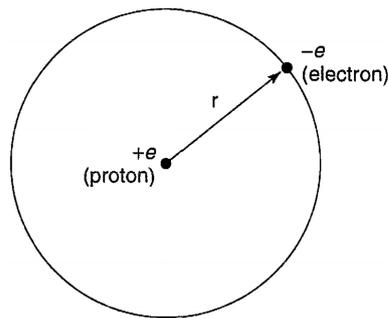
Até aqui, transformamos a ES dependente do tempo em independente do tempo e mudamos nosso sistema de coordenadas, facilitando o processo de separação da parte angular e radial da ES esférica. Agora, temos em nossa posse essas duas equações e com elas podemos investigar um sistema idealizado de um átomo do tipo hidrogênio e descobrir a função de onda que representa os estados possíveis do elétron. Na próxima seção veremos como fazer isso.

## 7.4 - O Átomo de Hidrogênio

Esta seção é o ponto final deste material. Aqui vamos aplicar os conhecimentos obtidos, em um problema ideal que serve de modelo físico para a realidade, o modelo atômico de átomos do tipo hidrogênio, ou seja,  $He^+$ ,  $Li^{2+}$ , etc., assim como para o próprio hidrogênio, que é o sistema que vamos calcular agora.

O átomo de hidrogênio consiste em um núcleo massivo de carga  $e$  e de um elétron, muito menos massivo, de carga  $-e$ , que orbita o núcleo, onde essas duas partículas estão ligadas pela atração mútua de cargas opostas (GEORGE, 1972). A figura abaixo ilustra esse sistema.

Figura 7.3 - Representação do átomo de hidrogênio.



Fonte: Griffiths, 2005, p. 145.

Podemos observar, na figura acima, que o próton e o elétron estão separados por uma distância  $r$ , com o núcleo na origem. Dessa maneira, podemos trabalhar com um sistema esférico, facilitando nossos cálculos. Primeiramente, precisamos definir o valor da energia potencial do sistema. A energia potencial é resultante da atração entre o núcleo e o elétron. A partir da Lei de Coulomb, a energia potencial se apresenta na seguinte forma

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (7.33)$$

Portanto a ES estacionária para esse sistema será

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi = 0 \quad (7.34)$$

Como vamos trabalhar com essa equação, em coordenadas esféricas polares, podemos substituir o Laplaciano, como vimos no início desse capítulo. Fazendo a substituição temos,

$$\left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi = 0 \quad (7.35)$$

A Eq. 7.35 é a ES estacionária em coordenadas esféricas polares para o átomo de hidrogênio (GEORGE, 1972).

A partir de agora, para resolver essa equação precisamos aplicar uma série de métodos matemáticos para isolar a parte radial e a parte angular. Já fizemos isso anteriormente, só precisamos substituir nossos resultados. Substituindo o potencial na equação radial, Eq. 7.32, temos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad (7.36)$$

O nosso objetivo aqui é resolver para  $u(r)$ , para, assim, determinar os níveis de energia permitidos  $E$  (GRIFFITHS, 1972). Novamente, para facilitar os cálculos, vamos introduzir uma nova variável  $k$ .

$$k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (7.37)$$

Dividindo a Eq. 7.36 por  $k$ , temos

$$\frac{1}{k^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[ 1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 k} \frac{1}{(kr)} + \frac{l(l+1)}{(kr)^2} \right] u \quad (7.38)$$

Esse processo de simplificação é trabalhoso e requer bastante tempo para ser realizado. Aqui vamos apontar as equações chave e, a partir delas, continuar a resolução do problema, porém você é encorajado a resolvê-las e testar suas habilidades. Prosseguindo, podemos simplificar ainda mais a Eq. 7.38 introduzindo duas novas variáveis

$$\rho = kr \quad \rho_0 = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 k} \quad (7.39)$$

Com isso, podemos reescrever a Eq. 7.38 de uma maneira mais limpa, utilizamos as variáveis a cima, ficando,

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[ 1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u \quad (7.40)$$

Agora, com uma equação mais simplificada, podemos resolvê-la.

Vamos assumir um limite para a Eq. 7.40. Enquanto  $\rho$  se aproxima de infinito, ou seja,  $\rho \rightarrow \infty$ , a parte contida nos colchetes irá se aproximar de zero. Podemos, então, considerar uma equação mais simples, mas somente dentro desse novo limite, ficando, aproximadamente

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = u \quad (7.41)$$

A Eq. 7.41 não nos é estranha, sendo uma equação diferencial ordinária de segunda ordem. A solução geral desse tipo de equação é

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \quad (7.42)$$

Porém, nosso limite imposto diz que  $e^{\rho}$  vai ao infinito, enquanto  $\rho$  tender ao infinito. Portanto,  $B = 0$ . Sendo assim, ficamos com

$$u(\rho) \approx Ae^{-\rho} \quad (7.43)$$

para  $\rho$  muito grandes. É evidente que estamos utilizando atalhos na resolução da Eq. 7.40. Apenas assumimos um limite na interpretação. Mas, isso não apresenta problema algum, veremos que assumindo esses valores, nossos cálculos ficarão mais evidentes (GRIFFITHS, 2005).

Continuando, vamos, agora, analisar outro limite, quando  $\rho$  tende a zero,  $\rho \rightarrow 0$ . Quando isso acontece, o termo  $\rho^2$  na Eq. 7.40 se torna muito grande, dominando os outros termos. Portanto, podemos escrever, aproximadamente, que

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u \quad (7.44)$$

sendo a solução para essa equação apresentada abaixo,

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l} \quad (7.45)$$

Novamente, não trabalharemos essa solução aqui, pois já vimos isso em inúmeros exemplos, porém encorajamos que tente resolver e checar os resultados.

Analisando o novo limite imposto,  $\rho \rightarrow 0$ , o termo  $\rho^{-l}$  tende ao infinito e, portanto podemos dizer que  $D = 0$ . Sendo assim, a solução fica

$$u(\rho) \approx C\rho^{l+1} \quad (7.46)$$

para valores menores de  $\rho$ . Até aqui, ainda não encontramos o resultado para a função  $u(\rho)$ , porém possuímos o seu valor entre os limites zero e infinito. A partir disso, podemos tentar encontrar uma função que existe entre esses dois limites e, que resolvendo ela, possamos determinar o valor de  $u(\rho)$  (GRIFFITHS, 2005).

Podemos assumir uma solução para essa função desconhecida, juntando os resultados dos dois limites impostos e introduzindo uma nova função  $\nu(\rho)$ , na esperança de que essa função seja mais simples que  $u(\rho)$ . A solução para essa função se apresenta da seguinte forma

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \nu(\rho) \quad (7.47)$$

onde o termo  $\rho^{l+1}$  representa a solução para o menor limite,  $e^{-\rho}$  representa a solução para o maior limite e  $\nu(\rho)$  representa a nova função. Agora, vamos calcular duas vezes a derivada da Eq. 7.47. Fazendo isso, resulta em

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho} \left[ (l+1+\rho)\nu + \rho \frac{d\nu}{d\rho} \right] \quad (7.48)$$

diferenciando mais uma vez, temos

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[ -2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] \nu + 2(l+1-\rho) \frac{d\nu}{d\rho} + \rho \frac{d^2\nu}{d\rho^2} \right\} \quad (7.49)$$

Diferenciamos duas vezes porque a equação que estamos tentando resolver, Eq. 7.40, possui a segunda derivada de  $u(\rho)$ . Utilizando as equações a cima, podemos substituí-las na Eq. 7.40, gerando uma nova equação radial, em termos de  $\nu(\rho)$ . Sendo assim, temos

$$\rho \frac{d^2\nu}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{d\nu}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]\nu = 0 \quad (7.50)$$

Nosso trabalho, agora, é resolver a equação a cima em termos de  $\nu(\rho)$  (GRIFFITHS, 2005). Como feito em alguns passos anteriormente, vamos assumir que a solução da Eq. 7.50 se dá por meio de uma série somatória de potências, da seguinte maneira

$$\nu(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad (7.51)$$

onde  $\nu(\rho)$  é a nossa função,  $j$  é um índice fictício e  $c$  uma constante qualquer. Vamos tentar resolver através desse método. Porém, se isso não funcionar teremos que tentar de outra maneira até nossos resultados fecharem. Para checar se essa solução pode ser correta, devemos derivá-la duas vezes e, com o resultado, substituir na Eq. 7.50. Se substituindo as duas derivadas encontradas na Eq. 7.50 resultar em zero, sabemos que a solução está correta. Dessa maneira, podemos averiguar se nossa suposição está correta.

Diferenciando a Eq. 7.51 uma vez, temos

$$\frac{d\nu}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^{j-1}$$

Na Eq. 7.52, renomeamos o índice fictício  $j$  para  $j + 1$ . A soma deveria começar em  $j = -1$  porém esse novo índice termina com esse termo, portanto começamos em zero

$$= \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)c_j + 1\rho^j \quad (7.52)$$

diferenciando uma segunda vez, obtemos

$$\frac{d^2\nu}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_j + l\rho^{j-1} \quad (7.53)$$

Substituindo as duas derivadas na Eq. 7.50, temos

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_j + 1\rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)c_j + 1\rho^j \\ & - 2 \sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j = 0 \end{aligned} \quad (7.54)$$

Unindo os termos com expoentes iguais, chegamos a uma nova equação,

$$j(j+1)c_j + 1 + 2(l+1)(j+1)c_j + 1 - 2jc_j + [\rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0$$

ou, isolando o termo  $c_j + 1$ , ficando com

$$c_j + 1 = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} c_j \quad (7.55)$$

A equação obtida é muito importante, chamamos de *fórmula de recorrência* (GRIFFITHS, 2005).

Agora, vamos analisar o que acontece com a fórmula de recorrência, quando determinamos um limite para um  $j$  grande. Nesse limite a fórmula fica,

$$c_{j+1} \approx \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{j+1} c_j \quad (7.56)$$

Portanto, se esse resultado for exato, podemos escrever

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0 \quad (7.57)$$

Então, temos agora que, para grandes valores de  $j$  a função  $\nu(\rho)$  fica

$$\nu(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho}$$

Esse resultado foi obtido utilizando uma fórmula bastante vista na matéria de cálculo, onde

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Sendo assim, a função que estamos tentando descobrir,  $u(\rho)$ , fica

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^\rho \quad (7.58)$$

Porém, essa equação não nos ajuda muito, pois se temos grandes valores de  $j$ , que é a mesma coisa que  $\rho$ , a função  $u(\rho)$  tende ao infinito e não temos nenhum resultado. Isso nos diz que deve existir um  $j_{\text{máximo}}$  na qual a função iguala-se a zero. Deve haver uma constante que multiplicada por um  $j_{\text{máx}}$  resulte em zero. Podemos expressar isso da seguinte forma

$$c(j_{\text{máx}} + 1) = 0 \quad (7.59)$$

Sendo assim, isso nos diz que, a partir da Eq. 7.55, podemos escrever

$$2(j_{\text{máx}} + l + 1) - \rho_0 = 0 \quad (7.60)$$

onde podemos definir o termo entre parênteses como uma nova variável, que vamos chamar de

$$n = j_{\text{máx}} + l + 1 \quad (7.61)$$

Essa nova variável nada mais é do que o número quântico principal,  $n$ , que se lembrarmos é

visto em matérias de química e descrito como o número quântico responsável por indicar os níveis de energia em um átomo (GRIFFITHS, 2005).

Continuando, podemos rearranjar a Eq. 7.60, já que introduzimos uma nova variável. Ficamos com

$$2n - \rho_0 = 0 \quad \rightarrow \quad \rho_0 = 2n \quad (7.62)$$

Recordamos que definimos os termos  $\rho_0$ ,  $\rho$  e  $k$  anteriormente, os quais determinam a energia  $E$ . Com as Eq. 7.37 e Eq. 7.39, podemos escrever

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m e^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2} \quad (7.63)$$

já que temos o valor de  $\rho_0$ , podemos reescrever, de uma maneira muito familiar, a Eq. 7.63, de tal forma que,

$$E_n = -\left[ \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad (7.64)$$

onde  $n$  pode assumir valores inteiros,  $n = 1, 2, 3, \dots$

A Eq. 7.64 nos dá os estados energéticos permitidos do elétron no átomo de hidrogênio, mais conhecida como a *fórmula de Bohr* (GRIFFITHS, 2005).

O estado fundamental de energia, o estado de menor energia possível, ou seja, considerando  $n = 1$ , é dado pela Eq. 7.65. Substituindo os valores de todas as constantes temos

$$E_1 = -\left[ \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] = -13,6 \text{ eV} \quad (7.65)$$

Combinando as Eq. 7.39 e Eq. 7.62 encontramos o valor de  $k$ , como sendo

$$k = \left( \frac{m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{a_0 n} \quad (7.66)$$

onde  $a_0$  é o *raio de Bohr*, que tem seu valor expresso como

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (7.67)$$

Podemos retirar, também, da Eq. 7.39 o termo  $\rho$ , como sendo

$$\rho = \frac{r}{a_0 n} \quad (7.68)$$

Sendo assim, podemos escrever agora a forma geral das funções espaciais para o átomo de hidrogênio como

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (7.69)$$

na qual elas são demarcadas por três números quânticos,  $n$  que determina as camadas eletrônicas,  $l$  que determina o momento angular orbital e  $m$  que determina a orientação espacial do orbital. Portanto, podemos determinar  $R_{nl}$  a partir das Eq. 7.31 e Eq. 7.47, ficando

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} \nu(\rho) \quad (7.70)$$

onde  $\nu(\rho)$  é um polônio, que já definimos os seu grau na Eq. 7.61. Rearranjando essa equação temos o grau do polinômio como  $j_{\text{máx}} = n - l - 1$  em função de  $\rho$ . Esse polinômio tem seus coeficientes determinados pela fórmula de recorrência, agora com os valores de  $\rho$  (GRIFFITHS, 2005), ficando

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (7.71)$$

Esse polinômio,  $\nu(\rho)$ , é uma função muito conhecida entre matemáticos. Eles são dados pela seguinte equação

$$\nu(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (7.72)$$

onde  $L$  é definido como um *polinômio associado de Laguerre*, descrito por

$$L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \left( \frac{d}{dx} \right)^p L_q(x) \quad (7.73)$$

e o termo  $L_q(x)$  é definido como um  $q$ -ésimo termo do *polinômio de Laguerre*, descrito por

$$L_q(x) = e^x \left( \frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q) \quad (7.74)$$

Podemos observar alguns dos primeiros polinômios de Laguerre e os polinômios associados de Laguerre na Tabela 7.4. Eles nos dão soluções para  $\nu(\rho)$  (GRIFFITHS, 2005).

Quadro 7.3 - Alguns dos primeiros polinômios de Laguerre (a) e polinômios associados de Laguerre (b).

$$\begin{aligned}
 L_0 &= 1 \\
 L_1 &= -x + 1 \\
 L_2 &= x^2 - 4x + 2 \\
 L_3 &= -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \\
 L_4 &= x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24
 \end{aligned}$$

(a)

$$\begin{aligned}
 L_0^0 &= 1 & L_0^2 &= 2 \\
 L_1^0 &= -x + 1 & L_1^2 &= -6x + 18 \\
 L_2^0 &= x^2 - 4x + 2 & L_2^2 &= 12x^2 - 96x + 144 \\
 L_0^1 &= 1 & L_0^3 &= 6 \\
 L_1^1 &= -2x + 4 & L_1^3 &= -24x + 96
 \end{aligned}$$

(b)

Fonte: Griffiths, 2005, p. 153.

Voltando nossa atenção à Eq. 7.65, fica evidente que a energia de ionização, a quantidade de energia necessária para tirar o elétron de sua órbita é de 13,6 eV. Sabemos que o menor nível de energia é determinado pelo número quântico principal  $n = 1$ , sendo assim, através da Eq. 7.61, se  $n = 1$ , o valor de  $l$  deve ser  $l = 0$  e, portanto, pela Eq. 7.31 o valor de  $m$  deve ser  $m = 0$ . Com essas condições, podemos escrever a Eq. 7.69 como

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_{0,0}(\theta, \phi) \quad (7.75)$$

Resolvendo a função a cima, temos que o termo  $j = 0$ , pois  $l = 0$  para que  $n = 1$ . Com  $j = 0$  a fórmula de recorrência corta, resultando em  $c_1 = 0$ , portanto  $\nu(\rho)$  é uma constante,  $c_0$ , que vamos descobrir seu valor após a normalização. Portanto, podemos escrever  $R$  como

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (7.76)$$

Realizando a normalização, temos

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|c_0|^2}{a_0} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a_0}{4} = 1$$

$$|c_0| = \frac{2}{\sqrt{a_0}} \quad (7.77)$$

sendo essa a nossa constante de normalização para  $R_{10}(r)$ . Para  $Y_{0,0}(\theta, \phi)$ , se substituirmos os valores de  $l = 0$  e  $m = 0$  na Eq. 7.29, vamos obter

$$Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (7.78)$$

Dessa maneira, podemos escrever o primeiro estado quântico, o primeiro autoestado do átomo de hidrogênio, descrito pela autofunção abaixo

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (7.79)$$

Por fim, podemos escrever a função de onda completa e normalizada que determina todos os estados possíveis de um elétron em um átomo de hidrogênio a partir da Eq. 7.69, ficando

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \left[ L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \right] Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (7.80)$$

Essa é a função de onda do átomo de hidrogênio e a partir dela podemos estimar toda a tabela periódica dos elementos, com, é claro, uma boa quantia de manipulações algébricas (GRIFFITHS, 2005). Algumas das primeiras autofunções podem ser observadas na Tabela abaixo

Quadro 7.4 - Algumas autofunções dos átomos hidrogenoides.

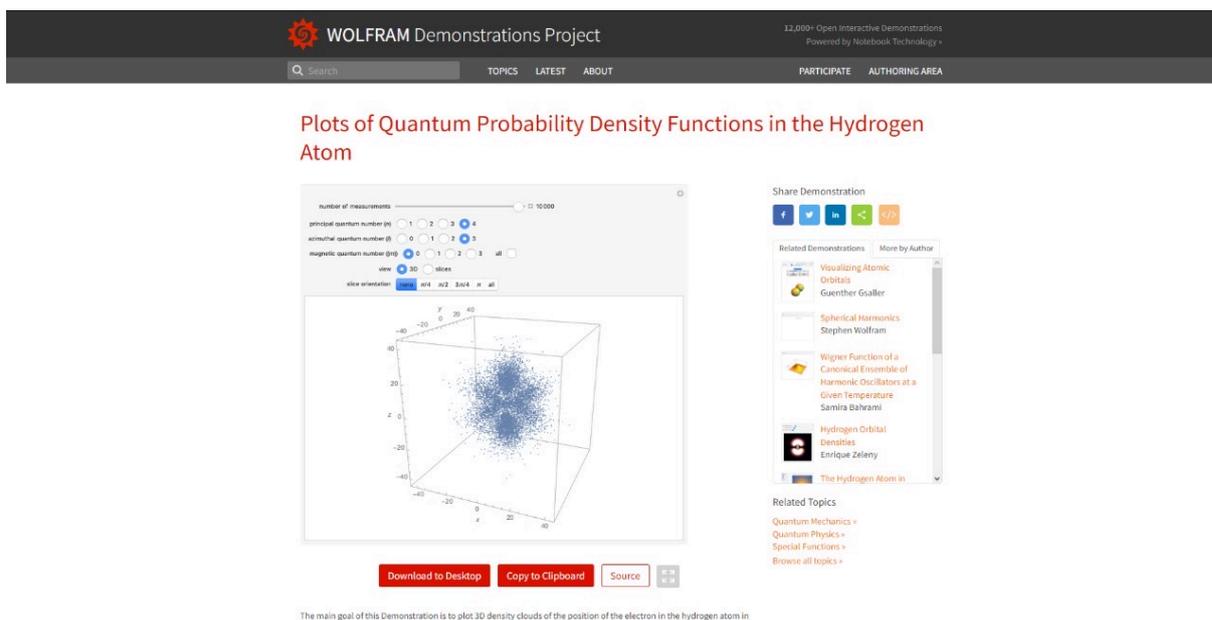
Números Quânticos			Autofunções
$n$	$l$	$m$	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta$
2	1	$\pm 1$	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \cos \theta$
3	1	$\pm 1$	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} (3\cos^2 \theta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	$\pm 2$	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Fonte: Eisberg; Resnick, 1985, p. 312.

## 7.5 Simulação dos resultados

Nós podemos visualizar essas funções através de uma simulação criada por Carlos Fernández e André Santos (2012), denominada *Plots of Quantum Probability Density Functions in the Hydrogen Atom*. Podemos observar a página inicial do website, Fig. 7.4, onde podemos encontrar a simulação.

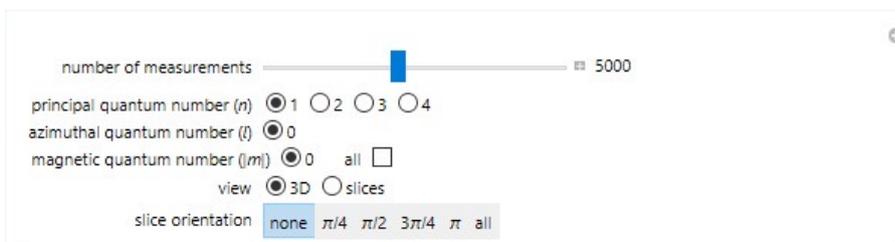
Figura 7.4 - Página inicial do website da simulação.



Fonte: <https://demonstrations.wolfram.com/PlotsOfQuantumProbabilityDensityFunctionsInTheHydrogenAtom/>. Acesso em: 18 abr. 2022.

Nessa simulação interativa, basta indicarmos os números  $n$ ,  $l$  e  $m$  e a quantidade de medições a serem aferidas. Podemos observar os controles da simulação na Fig. 7.5.

Figura 7.5 - Controles da simulação.

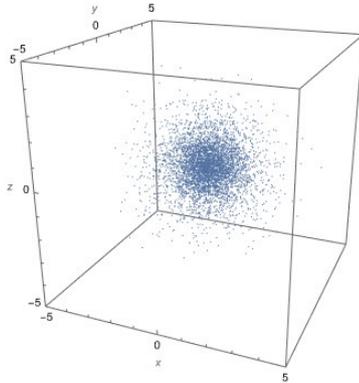


Fonte: Simulador, 2022.

Essa simulação calcula a densidade de probabilidade de encontrar o elétron dentro da região ao redor do núcleo atômico, resolvendo o quadrado das funções de onda para o

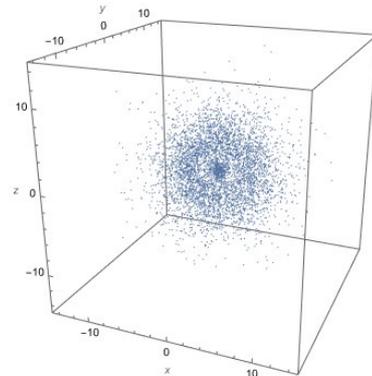
hidrogênio  $|\psi_{nlm}|^2$ . Abaixo, podemos observar os gráficos de densidade de probabilidade para seis configurações das funções de onda e seus respectivos orbitais.

Figura 7.6 - Simulação do orbital 1s.  $\psi_{100}$



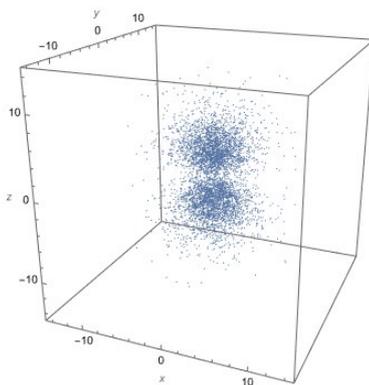
Fonte: Dados da simulação, 2022.

Figura 7.7 - Simulação do orbital 2s.  $\psi_{200}$



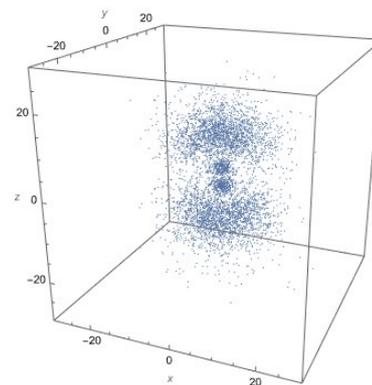
Fonte: Dados da simulação, 2022.

Figura 7.8 - Simulação do orbital 2p.  $\psi_{210}$



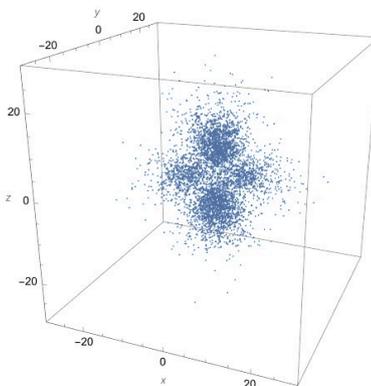
Fonte: Dados da simulação, 2022.

Figura 7.9 - Simulação do orbital 3p.  $\psi_{310}$



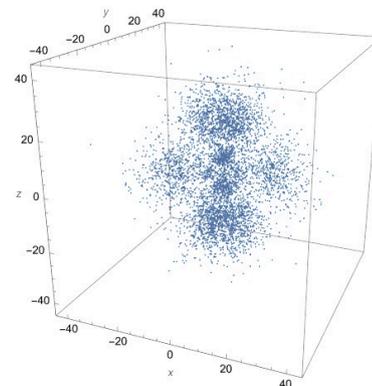
Fonte: Dados da simulação, 2022.

Figura 7.10 - Simulação do orbital 3d.  $\psi_{320}$



Fonte: Dados da simulação, 2022.

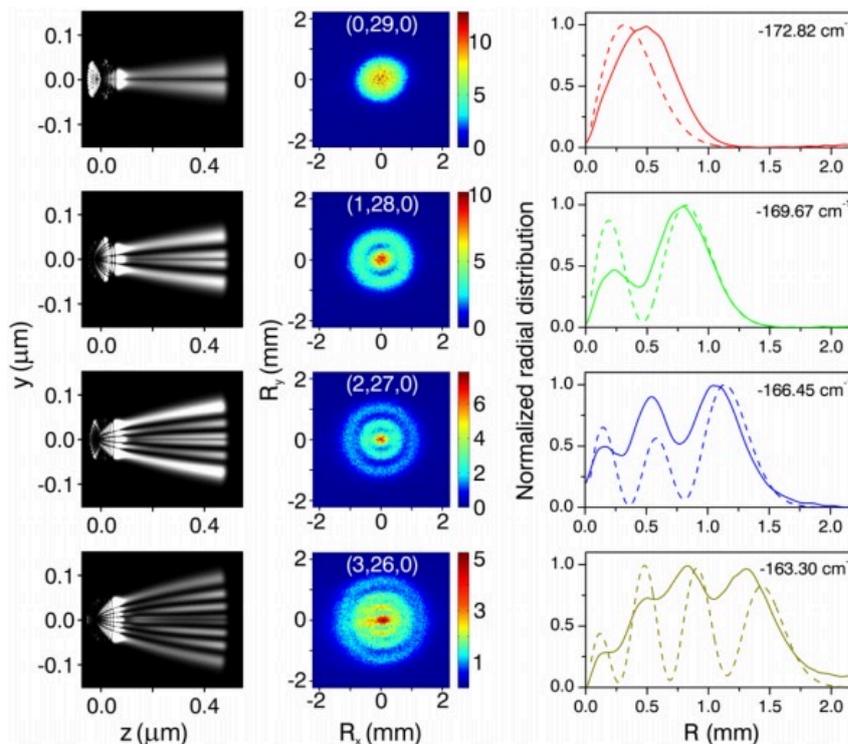
Figura 7.11 - Simulação do orbital 4d.  $\psi_{420}$



Fonte: Dados da simulação, 2022.

Para se ter uma ideia de quão próximo da realidade essas simulações estão, apresentamos imagens, Fig. 7.12, obtidas através de um experimento realizado utilizando lentes eletrostáticas que aumentam as ondas dos elétrons sem perturbar a coerência quântica.

Figura 7.12 - Resultados do experimento citado.



Fonte: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.110.213001>. Acesso em: 10 abr. 2022.

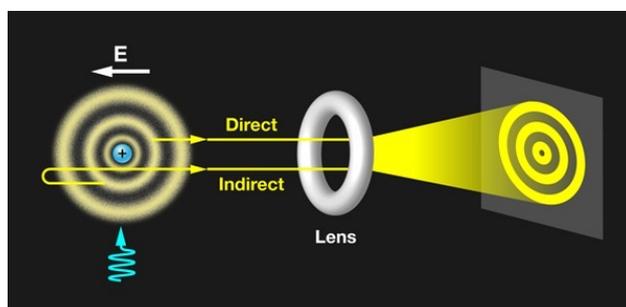
Esse experimento, chamado de microscópio de fotoionização, mapeia diretamente a estrutura nodal dos orbitais eletrônicos de um átomo de hidrogênio posto em um campo elétrico (SMEENK, 2013).

A fotoionização microscópica é uma técnica de imagem que permite visualizar diretamente as estruturas atômicas em materiais sólidos. Essa técnica utiliza radiação de raios X altamente energética para ionizar átomos em uma amostra, produzindo elétrons que são coletados por um detector. Esses elétrons carregam informações sobre a distribuição espacial dos átomos na amostra, o que permite reconstruir uma imagem de alta resolução da estrutura atômica. Para obter uma imagem de fotoionização microscópica, é necessário usar um microscópio eletrônico de transmissão (TEM) modificado. Nesse microscópio, um pulso curto de raios X é focado em uma área pequena da amostra, ionizando átomos nessa região. Em seguida, os elétrons emitidos pelos átomos são coletados por um detector posicionado atrás da

amostra. A partir dos padrões de difração desses elétrons, é possível reconstruir uma imagem da estrutura atômica da amostra. A fotoionização microscópica tem sido utilizada para visualizar uma ampla variedade de materiais, incluindo cristais, superfícies e nanoestruturas. Com essa técnica, é possível obter imagens de alta resolução com resolução espacial de até alguns picômetros. Essa resolução permite estudar detalhadamente a estrutura e a composição química de materiais, fornecendo informações valiosas para a pesquisa em áreas como a ciência dos materiais, física e química (STODOLNA et.al, 2013).

A semelhança entre as simulações e os resultados experimentais são incríveis. Porém, embora as simulações computacionais sejam úteis para prever a forma dos orbitais atômicos, a comparação entre as simulações e as imagens reais obtidas por meio da fotoionização microscópica mostra que nem sempre os resultados das simulações correspondem com precisão à realidade. Portanto, a combinação de técnicas experimentais e simulações teóricas é fundamental para avançar nossa compreensão sobre a estrutura e dinâmica dos átomos e moléculas. Um diagrama de como o experimento funciona pode ser observado na Fig. 7.13.

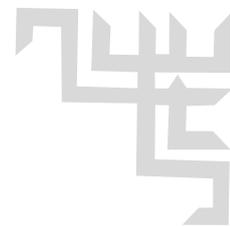
Figura 7.13 - Diagrama do experimento do microscópio fotoionizante.



Fonte: <https://physics.aps.org/articles/v6/58>. Acesso em: 10 abr. 2022.

Isso demonstra que, todo o trabalho desenvolvido aqui tem fundamentos práticos e teóricos e é plausível, já que consegue se aproximar a experimentos realizados em laboratório.

Terminamos, assim, esse capítulo que contempla uma das aplicações da ES para um sistema quântico estacionário em três dimensões. Com tudo o que vimos nesse material, foi possível desvendar as formas dos orbitais, assim como compreender mais sobre os números quânticos e as regras que regem esse universo completamente diferente da realidade macroscópica, cheio de restrições, abstrações e harmonias matemáticas.



# REFERÊNCIAS

BLINDER, Seymour; HOLDER, Cameron. Atoms and Photons- Origin of the Quantum Theory. University of Michigan: [s. n.], 2017. Disponível em: <https://chem.libretexts.org/@go/page/20780>. Acesso em: 15 abr. 2021.

BRITANNICA, T. Editors of Encyclopaedia. Philipp Lenard. [S. l.]: Encyclopedia Britannica, 3 jun. 2021. Disponível em: <https://www.britannica.com/biography/Philipp-Lenard>. Acesso em: 7 fev. 2022.

BROWN et al. Quantized Energy and Photons. [S. l.], 2021. Disponível em: <https://chem.libretexts.org/@go/page/21729>. Acesso em: 14 abr. 2021.

BROWN et al. The Wave Nature of Light. [S. l.], 2021. Disponível em: <https://chem.libretexts.org/@go/page/21728>. Acesso em: 29 abr. 2021.

CARLSON, Brant. A review of complex numbers. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: [https://youtu.be/drOuonosz\\_4](https://youtu.be/drOuonosz_4). Acesso em: 3 ago. 2020.

CARLSON, Brant. Complex numbers examples. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: <https://youtu.be/C8Km9-CYnWs>. Acesso em: 4 ago. 2020.

CARLSON, Brant. Normalization of the wavefunction. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: <https://youtu.be/Dt0JyXMjbNs>. Acesso em: 13 ago. 2020.

CARLSON, Brant. Probability distributions and their properties. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: <https://youtu.be/83tVBc-LuT4>. Acesso em: 7 ago. 2020.

CARLSON, Brant. Probability in quantum mechanics. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: <https://youtu.be/wWZyLGEqgio>. Acesso em: 6 ago. 2020.

CARLSON, Brant. Variance of probability distributions. Carthage College: PHY4200, 14 maio 2013. Disponível em: <https://youtu.be/vvV6rigmXw4>. Acesso em: 10 ago. 2020.

CHEVALLARD, Yves. La Transposición didáctica: del saber sabio al saber enseñado. 3. ed. [S. l.]: Aique, 2000. 100 p. v. 1. Disponível em: [https://nelsonreyes.com.br/LIVRO\\_LA%20TRANSPOSICION%20DIDACTICA.pdf](https://nelsonreyes.com.br/LIVRO_LA%20TRANSPOSICION%20DIDACTICA.pdf). Acesso em: 27 nov. 2020.





DAS, Dibyajyoti. What is Quantization of Angular Momentum?: Magnitude & Space Quantization (of subatomic particles). [S. l.], 5 dez. 2018. Disponível em: <https://youtu.be/QHYJ4VpqAvs>. Acesso em: 9 ago. 2021.

DICKERSON, Richard E. et al. Chemical Principles. 3. ed. Menlo Park, CA: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 1979. ISBN 0805323988. Disponível em: <https://resolver.caltech.edu/CaltechBOOK:1979.001>. Acesso em: 12 ago. 2020.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. 1. ed. [S. l.]: GEN LTC, 1979.

FEYNMAN, Richard P. The Feynman Lectures on Physics. USA: California Institute of Technology, 1965. 327 p. v. 3.

FERNÁNDEZ, Carlos Rodríguez; SANTOS, André. Plots of Quantum Probability Density Functions in the Hydrogen Atom. Wolfram Demonstrations Project, 20 abr. 2012. Disponível em: <http://demonstrations.wolfram.com/PlotsOfQuantumProbabilityDensityFunctionsInTheHydrogenAtom/>. Acesso em: 15 set. 2020.

FITZPATRICK, Richard. Eigenfunctions of Operators are Orthogonal. [S. l.], 2021. Disponível em: <https://chem.libretexts.org/@go/page/13410>. Acesso em: 6 jul. 2021.

FREEMAN, David L. Notes on Angular Momentum Eigenvalues and Eigenfunctions. [S. l.], 2018. Disponível em: <https://www.chm.uri.edu/dfreeman/chm532/updown.pdf>. Acesso em: 14 jul. 2021.

GAZZINELLI, Ramayana. O átomo de Bohr e Rutherford. In: QUEM tem medo da Física Quântica: A visão quântica do mundo físico. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2013. cap. 5, p. 46-48, 55-58.

GEORGE, David V. Principles of Quantum Chemistry. [S. l.]: Pergamon Press Inc, 1972. 271 p.

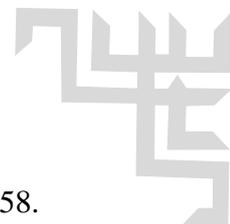
GRIFFITHS, David J. Introduction to Quantum Mechanics. [S. l.]: Pearson Education Inc, 2005. 484 p. ISBN 0131911759.

JAFFE, R. L. Supplementary notes on Dirac notation, quantum states, etc. [S. l.], 1996. Disponível em: <http://web.mit.edu/8.05/handouts/jaffe1.pdf>. Acesso em: 22 jun. 2021.

JAMMER, Max. The History of Modern Physics 1800-1950: The Conceptual Development of Quantum Mechanics. 2. ed. Estados Unidos da America: Tomash Publishers, 1989. 457 p. v. 12. ISBN 0-88318-617-9.

KARAM, Ricardo. Why are complex numbers needed in quantum mechanics? Some answers for the introductory level. American Journal of Physics, USA, v. 88, p. 39-45, jan. 2020. DOI





10.1119/10.0000258. Disponível em: <https://aapt.scitation.org/doi/10.1119/10.0000258>. Acesso em: 19 abr. 2021.

MAIA, Nelson B. O caminho para a Física Quântica. 1. ed. rev. São Paulo: Livraria da Física, 2009. ISBN 978-85-7861-043-2.

MCEVOY, J. P; ZARATE, Oscar. Entendendo Teoria Quântica: Um guia ilustrado. São Paulo: Leya, 2012. ISBN 978-85-630066-98-5.

NIAZ, Mansoor; CARDELLINI, Liberato. What can the Bohr-Sommerfeld model show students of chemistry in the 21st century?. *Journal of Chemical Education*, [S. l.], v. 88, n. 2, p. 240 - 243, fev. 2011. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ed100481e>. Acesso em: 19 ago. 2020

POLIDORO, Lurdes de Fátima; STIGAR, Robson. A Transposição Didática: a passagem do saber científico para o saber escolar. *Ciber teologia*, [S. l.], ano VI, n. 27, 2010. Disponível em: [http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos\\_teses/2010/Ensino\\_religioso/transposicao\\_didatica.pdf](http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos_teses/2010/Ensino_religioso/transposicao_didatica.pdf). Acesso em: 15 jan. 2022.

POLKINGHORNE, John. Teoria Quântica. 1. ed. rev. Porto Alegre: L&PM, 2011. v. 985. ISBN 978-85-254-2525-6.

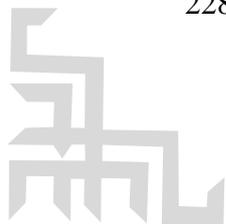
ROGERS, Kara. Scientific modeling. [S. l.]: Encyclopedia Britannica, 21 maio 2012. Disponível em: <https://www.britannica.com/science/scientific-modeling>. Acesso em: 20 abr. 2022.

SMEENK, Christopher. A New Look At The Hydrogen Wave Function. 6. ed. [S. l.]: Physics Magazine, 20 maio 2013. Disponível em: <https://physics.aps.org/articles/v6/58>. Acesso em: 8 jun. 2022.

STODOLNA, A. S.; ROUZÉE, A.; COHEN, S.; ROBICHEAUX, F.; GIJSBERTSEN, A.; JUNGSMANN, J. H.; BORDAS, C.; VRAKKING, M. J. J. Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States. *Physical Review Letters*, [s. l.], v. 110, 24 maio 2013. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.213001>. Disponível em: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.110.213001>. Acesso em: 10 abr. 2022.

THOMSON, J. J. The Structure of the Atom. Royal Institution: Weekly Evening Meeting, 1905. 15 p. Disponível em: [http://www.ub.edu/hcub/hfq/sites/default/files/Thomson\\_model%286%29.pdf](http://www.ub.edu/hcub/hfq/sites/default/files/Thomson_model%286%29.pdf). Acesso em: 5 fev. 2022.

VAN HUELE, Jean-Francois; STENSON, Jared. Stern-Gerlach experiments: past, present, and future. [S. l.], 2004. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/228379498\\_Stern-Gerlach\\_experiments\\_past\\_present\\_and\\_future](https://www.researchgate.net/publication/228379498_Stern-Gerlach_experiments_past_present_and_future). Acesso em: 22 set. 2021.





# SOBRE OS AUTORES

**Bernardo L. M. Laitharth**

Graduação em Física-L, mestrando do Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática na Universidade de Passo Fundo e professor da rede pública.

**Carlos A. S. Pérez**

Graduação em Física-L, Mestre em Física, Doutor em Física e Professor da Universidade de Passo Fundo.

**Alisson C. Giacomelli**

Graduação em Física-L, Mestre em Ensino de Ciências e Matemática, Doutor em Educação e Professor da Universidade de Passo Fundo.

