



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE  
FÍSICA LICENCIATURA

CARLOS HENRIQUE JERONIMO DE OLIVEIRA

**UMA FORMA SIMPLES DE ENSINO DA ENERGIA DE CORRELAÇÃO:  
Uma proposta de transposição didática de um problema “quebra-cabeça”  
segundo a filosofia de Thomas Kuhn**

Caruaru  
2020

CARLOS HENRIQUE JERONIMO DE OLIVEIRA

**UMA FORMA SIMPLES DE ENSINO DA ENERGIA DE CORRELAÇÃO:**  
**Uma proposta de transposição didática de um problema “quebra-cabeça”**  
**segundo a filosofia de Thomas Kuhn**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Física  
Licenciatura da Universidade Federal de  
Pernambuco, como requisito parcial para  
a obtenção do título de Licenciado em  
Física.

**Área de concentração:** Núcleo de  
Formação Docente.

**Orientador:** Profº. Dr. Augusto César de Lima Moreira.

**Coorientador:** Profº. Dr. Gustavo Camelo Neto.

Caruaru  
2020

Bibliotecária – Simone Xavier - CRB/4 - 1242

O48f Oliveira, Carlos Henrique Jeronimo de.  
Uma forma simples de ensino da energia de correlação: uma proposta de transposição didática de um problema “quebra-cabeça” segundo a filosofia de Thomas Kuhn. / Carlos Henrique Jeronimo de Oliveira. - 2020.  
63 f. il.: 30 cm.

Orientador: Augusto César de Lima Moreira.  
Coorientador: Gustavo Camelo Neto.  
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Licenciatura em Física, 2020  
Inclui Referências.

1. Energia. 2. Quebra-cabeças. 3. Física – Estudo e ensino. 4. I. Moreira, Augusto César de Lima (Orientador). II. Camelo Neto, Gustavo (Coorientador). III. Título.

CDD 371.12 (23. ed.) UFPE (CAA 2020-003)

CARLOS HENRIQUE JERONIMO DE OLIVEIRA

**UMA FORMA SIMPLES DE ENSINO DA ENERGIA DE CORRELAÇÃO:  
Uma proposta de transposição didática de um problema “quebra-cabeça”  
segundo a filosofia de Thomas Kuhn**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Física  
Licenciatura da Universidade Federal de  
Pernambuco, como requisito parcial para  
a obtenção do título de Licenciado em  
Física.

Aprovada em: 31/01/2020

**BANCA EXAMINADORA**

---

Profº. Dr. Gustavo Camelo Neto (Coorientador)  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Profº. Dr. Jehan Fonsêca do Nascimento (Examinador Interno)  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Profº. Dr. João Eduardo Fernandes Ramos (Examinador Interno)  
Universidade Federal de Pernambuco

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus, de Quem tudo de bom a mais se segue: Agradeço-o por ter nos presenteado com Seu filho Jesus, pela força e energia me dada para ingressar e concluir esta graduação, pelas boas e verdadeiras pessoas que colocou em meu caminho durante essa jornada e que me motivam para empreendimentos melhores. Agradeço-o pela minha família, por meus amigos e pela vida.

## RESUMO

A presente monografia consiste na proposta de um modelo teórico para o estudo da energia de correlação, definida como sendo a diferença entre a energia exata (não relativista) e a energia obtida via método de Hartree-Fock, de um sistema modelo contendo dois elétrons interagentes confinados em um poço quadrado infinito unidimensional (caso conhecido como partículas na caixa) com um potencial de interação elétron-elétron tipo delta de Dirac. Obter a solução para esse modelo constitui uma atividade de ciência normal, a saber, a resolução de um quebra-cabeça, segundo a perspectiva de Thomas Kuhn. Nota-se que devido ao modelo ideal adotado, sua solução é consideravelmente simples quando comparada aos modelos reais, fato utilizado para o estabelecimento de uma transposição didática, de acordo com Yves Chevallard, dirigida ao ensino superior com o intuito de trabalhar os assuntos de energia de correlação e elétrons interagentes em turmas que ainda não tiveram contato com ferramentas matemáticas mais avançadas.

Palavras-chave: Energia de correlação, Thomas Kuhn, Quebra-cabeça, Yves Chevallard, Transposição didática.

## **ABSTRACT**

The present monograph deals with the proposal of a theoretical model for the study of correlation energy, defined as the difference between the exact (non-relativistic) energy and the energy obtained via the Hartree-Fock method, of a model system containing two interacting electrons confined in a one-dimensional infinite square well (case known as particles in the box) with a Dirac Delta like electron-electron interaction potential. Get the solution for this model constitutes a normal science activity, precisely solving a puzzle, from the perspective of theorist Thomas Kuhn. It is noted that due to the ideal model adopted, its solution is considerably simple, compared to real models, a fact used for the establishment of a didactic transposition, according to Yves Chevallard, aimed at higher education in order to work on the subjects of correlation energy and interacting electrons in classes that have not yet come into contact with more advanced mathematical tools.

Keywords: Correlation energy, Thomas Kuhn, Puzzle, Yves Chevallard, Didactic transposition.

## SUMÁRIO

|            |                                                                                          |           |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b>   | <b>INTRODUÇÃO.....</b>                                                                   | <b>8</b>  |
| <b>2</b>   | <b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>                                                        | <b>10</b> |
| <b>2.1</b> | <b>A ciência segundo Thomas Kuhn.....</b>                                                | <b>10</b> |
| 2.1.1      | <i>A natureza da ciência normal.....</i>                                                 | <i>13</i> |
| 2.1.2      | <i>A ciência normal e a resolução de quebra-cabeças.....</i>                             | <i>16</i> |
| <b>2.2</b> | <b>Transposição didática.....</b>                                                        | <b>19</b> |
| 2.2.1      | <i>A transposição didática segundo Chevallard.....</i>                                   | <i>19</i> |
| 2.2.2      | <i>A anatomia da transposição didática de Chevallard.....</i>                            | <i>21</i> |
| <b>2.3</b> | <b>Energia de correlação.....</b>                                                        | <b>26</b> |
| 2.3.1      | <i>A Equação de Schroedinger .....</i>                                                   | <i>26</i> |
| 2.3.2      | <i>Apresentação do método de Hartree-Fock.....</i>                                       | <i>28</i> |
| 2.3.3      | <i>Consequências das aproximações para a solução HF e Energia de Correlação.....</i>     | <i>32</i> |
| 2.3.4      | <i>Função delta de Dirac.....</i>                                                        | <i>34</i> |
| <b>3</b>   | <b>METODOLOGIA.....</b>                                                                  | <b>37</b> |
| <b>4</b>   | <b>RESULTADOS E DISCUSSÕES.....</b>                                                      | <b>39</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Desacoplando o sistema.....</b>                                                       | <b>39</b> |
| <b>4.2</b> | <b>Solução da equação de Schroedinger para o poço quadrado infinito..</b>                | <b>41</b> |
| <b>4.3</b> | <b>Solução da equação de Schroedinger para um potencial barreira delta de Dirac.....</b> | <b>44</b> |
| <b>5</b>   | <b>CONSIDERAÇÕES FINAIS.....</b>                                                         | <b>50</b> |
|            | <b>REFERÊNCIAS.....</b>                                                                  | <b>52</b> |
|            | <b>APÊNDICE A: DETALHAMENTO DOS CÁLCULOS.....</b>                                        | <b>54</b> |

## 1. INTRODUÇÃO

Nossa tarefa nesta monografia é apresentar a *solução exata* da expressão para a energia de correlação, fruto da solução de um problema *quebra-cabeça* segundo a perspectiva de Thomas Kuhn, de um sistema-modelo de dois elétrons interagentes. Tal empreendimento mostrará, como veremos mais tarde, que a configuração adotada por nós para a interação entre esses elétrons possibilita uma compreensão de características importantes de sistemas análogos e faz isso de forma consideravelmente simples e sem perder poder de generalização.

Frequentemente a análise destes sistemas é complicada e por vezes até mesmo abandonada em turmas de ensino superior que ainda não possuem determinadas ferramentas matemáticas:

[...] métodos para se tratar do problema de muitos corpos interagentes, como a aproximação de Hartree-Fock(HF), a teoria do funcional da densidade (DFT do inglês Density Functional Theory), dentre outros, ficam relegados a cursos direcionados para pesquisadores na área como os de química quântica ou física atômica e molecular. Mesmo assim, em tais cursos, a intenção de se tratar “sistemas reais” como átomos multi-elétrônicos e moléculas, traz consigo a necessidade de lidar com funções especiais e, conseqüentemente, operações matemáticas demasiadamente complexas para estudantes que ainda não cursaram disciplinas envolvendo métodos avançados de resolução de equações diferenciais [...]. Tal fato torna-se um obstáculo para a aprendizagem desses métodos na medida em que acabam desviando o foco dos conceitos subjacentes aos mesmos em detrimento de operações matemáticas envolvendo funções especiais (MOREIRA; SILVA, 2016, pg.03).

Dado o que foi exposto, nota-se que a solução para energia de correlação do nosso sistema-modelo proposto apresenta-se como uma possível *transposição didática* que irá permitir o tratamento de tópicos de elétrons interagentes para turmas do ensino superior que ainda não tiveram contato com equações diferenciais consideradas complexas e funções especiais, uma vez que leva em conta a falta de maturidade dos estudantes com este formalismo matemático avançado, evitando-o. Simultaneamente, busca-se tornar os termos conceituais acessíveis às linguagens dos alunos, exercendo assim o papel de transformar o *saber sábio* em *saber ensinado*, e por fim permitindo que tal conteúdo seja trabalhado em cursos iniciais de Física Quântica e similares.

É importante destacar que a energia de correlação aparece em diversos métodos de abordagem que trabalham com sistemas atômicos e moleculares, e daí

segue a importância de seu estudo. Ao mais, cabe aqui apontar que para determinação da energia de correlação é necessário especificar a *energia aproximada* do sistema, obtida via método Hartree-Fock, e a *energia exata*, advinda da solução da equação de Schroedinger. Propomos neste trabalho, como já foi dito, apenas a solução denominada como exata, uma vez que a *solução aproximada* pode ser encontrada, para o mesmo sistema que adotamos, em um trabalho já publicado em forma de artigo (veja MOREIRA; SILVA, 2016). Deixamos como perspectiva futura a comparação dos resultados obtidos via os dois diferentes métodos.

Exposto isso, devemos agora nos familiarizar com as características e terminologias do trabalho de Thomas Kuhn e da transposição didática desenvolvida por Yves Chevallard.

Em seguida trabalhamos a importância da energia de correlação nas pesquisas científicas e obtemos a solução exata de sua expressão.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Thomas Kuhn foi um físico e filósofo norte americano que se tornou uma das figuras mais influentes e debatidas na história e filosofia da ciência do século XX e cujos trabalhos são ainda amplamente analisados e empregados em estudos atuais das referidas áreas. É frequentemente apresentado, juntamente com Stephen Toulmin, Imre Lakatos, Paul Feyerabend, entre outros, como responsável pela reconstrução da racionalidade científica, onde atribuiu um importante caráter epistemológico referente ao papel da história no estudo e na compreensão da atividade científica, bem como pela produção de uma nova imagem do que seria a ciência (MENDONÇA, 2012, pg. 536).

Em sua principal obra, a saber o livro *A Estrutura das Revoluções Científicas*, frequentemente denotada apenas por *Estrutura*, Kuhn se afasta dos positivistas lógicos e estabelece que

[...] a experiência e a lógica não são os únicos critérios para a escolha entre teorias e, portanto, entre “verdades científicas”: conforme Kuhn, as interpretações e valores das comunidades envolvidas são parte essencial dessa seleção (MUTLAQ, 2015, pg. 9).

Faremos uso deste pensamento de Thomas Kuhn, bem como de suas outras contribuições presentes na *Estrutura*, para elucidar as características de um problema do tipo *quebra-cabeça*, o qual constitui importante papel neste trabalho, o que nos leva também a discutir os conceitos de *Ciência Normal* e *Paradigmas* segundo o autor.

### 2.1 A ciência segundo Thomas Kuhn

Thomas Kuhn inicia *A Estrutura das Revoluções Científicas* apresentando dois conceitos fundamentais, bem como uma variedade de exemplos destes, que nos preparam para compreender sua visão da atividade científica, são eles: *ciência normal* e *paradigmas*.

Segundo o autor:

[...] “ciência normal” significa a pesquisa firmemente baseada em uma ou mais realizações científicas passadas. Essas realizações são reconhecidas durante algum tempo por alguma comunidade científica específica como proporcionando os fundamentos para sua prática posterior (KUHN, 1998, pg. 29).

Kuhn observou que os trabalhos científicos que norteavam os métodos legítimos de um determinado campo de pesquisa geralmente apresentavam duas características essenciais (KUHN, 1998):

1. Suas realizações eram sem precedentes e capazes de atrair um grupo duradouro de colaboradores, afastando-os de outras formas de atividades de pesquisa que não fossem as suas;
2. Simultaneamente, tais realizações permitiam que uma ampla espécie de problemas abertos fossem resolvidos pelo grupo de cientistas.

Aos trabalhos que compartilhavam essas características Thomas Kuhn deu o nome de *paradigmas*, sobre o qual podemos apontar como exemplos o *Almagesto* de Ptolomeu, a física de Aristóteles, os *Principia* e a *Óptica* de Newton, a *Eletricidade* de Franklin, a *Química* de Lavoisier, a *Geologia* de Lyell e o *Eletromagnetismo* de Maxwell (KUHN, 1998). Para outros exemplos detalhados de paradigmas na Física, veja o capítulo *A rota para a ciência normal* em *Estrutura das Revoluções Científicas* (KUHN, 1998).

Com os trabalhos mencionados acima constituindo paradigmas, podemos exemplificar trabalhos de *ciência normal* como aqueles que estudam os movimentos dos corpos através das leis de Newton, os que estudam os fenômenos eletromagnéticos através das leis de Maxwell e os que fundamentam suas pesquisas de química com os estudos de Lavoisier (KUHN, 1998).

O estudo dos paradigmas, tal qual definido anteriormente, é o que prepara um estudante para fazer parte de uma dada comunidade científica onde atuará posteriormente com o papel de pesquisador (KUHN, 1998). Uma vez dentro de tal comunidade, tal indivíduo estará em contato direto com outros que aprenderam as bases de seus campos de estudo através dos mesmos modelos concretos e, portanto, acerca dos pontos fundamentais, sua prática raramente entrará em conflito com os demais (KUHN, 1998):

Homens cuja pesquisa está baseada em paradigmas compartilhados estão comprometidos com as mesmas regras e padrões para a prática científica. Esse comprometimento e o consenso aparente que produz são pré-requisitos para a ciência normal, isto é, para a gênese e a continuação de uma tradição de pesquisa determinada. (KUHN, 1998, pg 30).

Naturalmente, nesta visão de ciência é questionável o que acontece quando se tem a ausência de um paradigma ou a ausência de possíveis candidatos à paradigmas. Kuhn aponta que neste caso todos fatos que possuem potencial para promover o desenvolvimento de um campo científico são igualmente relevantes, e que, por consequência, quando não há uma orientação de como se proceder, as coletas de fatos, o que inclui obtenção de dados e observações de fenômenos naturais, se aproxima de uma atividade do tipo laboral, tais como Medicina, Metalurgia, e na maioria das vezes trabalhos relacionados com outras tecnologias, já que tais ofícios representam uma fonte de possíveis fatos relevantes que não poderiam ser descobertos ao acaso (KUHN, 1998, pg 35), entretanto, como aponta Kuhn:

Apenas muito ocasionalmente, como no caso da Estática, Dinâmica e Óptica Geométrica antigas, fatos coletados com tão pouca orientação por parte de teorias preestabelecidas falam com suficiente clareza para permitir o surgimento de um primeiro paradigma (KUHN, 1998, pg 36-37).

Frequentemente, o que se tem é que diferentes cientistas confrontados com os mesmos fenômenos, mas em geral não com os mesmos problemas particulares, os descrevem de forma completamente distintas, e as divergências vão aos poucos se esvaindo, até que, aparentemente, se extinguem de vez (KUHN, 1998). O desaparecimento é causado pelo triunfo de uma das escolas pré-paradigmáticas, que enfatiza apenas uma parte do conhecimento do numeroso conjunto de informações que estão disponíveis aos pesquisadores (KUHN, 1998, pg. 37).

Diante disso, uma das coisas mais importantes a se destacar é que mesmo com o sucesso da explicação fornecida pelo argumento, que passou da categoria de teoria para paradigma, o mesmo ainda é incapaz de explicar todos os fenômenos conhecidos pela comunidade científica (KUHN, 1998). Isto nos mostra que para ser aceito como paradigma uma teoria tem que ser melhor, ou seja, mais efetiva que as suas demais concorrentes, mas não necessariamente precisa explicar todos os fatos com os quais pode ser confrontada, e de fato isso não acontece (KUHN, 1998).

Uma das características mais fortes desta visão de ciência descrita por Kuhn refere-se ao momento em que um cientista pode considerar um paradigma como certo. Quando isso ocorre, o cientista não tem mais a necessidade de durante a produção de seu trabalho construir os princípios fundamentais do seu campo de

estudo, justificando cada conceito utilizado, uma vez que se supõe que dentro daquela comunidade todos partilham desses conhecimentos considerados como básicos (KUHN, 1998).

Isto implica duas consequências imediatas: primeiramente, esses conhecimentos básicos serão agora deixados a cargo de manuais e livros destinados ao público leigo, em segundo, os trabalhos mais esotéricos que preocupam o grupo científico passarão agora a aparecer apenas em forma de artigos breves destinados aos pesquisadores colegas de profissão, que certamente compartilham do conhecimento mais profundo sobre o paradigma (KUHN, 1998).

### *2.1.1 A natureza da ciência normal*

Percorrido esse caminho, Thomas Kuhn traz à tona uma interessante indagação: “Se o paradigma representa um trabalho que foi completado de uma vez por todas, que outros problemas deixa para serem resolvidos pelo grupo por ele unificado?” (KUHN, 1998, pg. 43).

Como visto, o paradigma é um modelo, padrão adotado conjuntamente, que orienta o método de pesquisa e de divulgação de resultados de uma comunidade científica. Ele não necessariamente precisa explicar todos fenômenos com os quais é confrontado, contudo, é tomado como sendo uma promessa que levará ao sucesso na investigação de problemas selecionados e incompletos (KUHN, 1998).

Segundo Kuhn:

A ciência normal consiste na atualização dessa promessa, atualização que se obtém ampliando-se o conhecimento daqueles fatos que o paradigma apresenta como particularmente relevantes, aumentando-se a correlação entre esses fatos e as predições do paradigma e articulando-se ainda mais o próprio paradigma (KUHN, 1998, pg. 44).

Depois de estabelecido o paradigma, resta o que Thomas Kuhn denominou como *trabalho de limpeza*, que se traduz como a atividade que os cientistas exercem para melhor compreender e articular esses problemas ainda então “soltos”, isto é, que não foram contemplados com explicações fornecidas pelo paradigma (KUHN, 1998). A maioria dos cientistas ocupa-se com essa atividade de limpeza, que configura-se como um empreendimento, tentativa, de forçar a natureza a se adequar dentro dos limites teóricos propostos pelo paradigma (KUHN, 1998).

Neste cenário, a ciência normal não tem o objetivo de revelar novos fenômenos, embora isso seja possível de acontecer durante o estudo de um problema, mas sim a tarefa de realizar um esforço capaz de articular os fatos ao paradigma vigente (KUHN, 1998). Bem como Kuhn aponta, essa característica da ciência normal pode ser enxergada como um defeito uma vez que restringe drasticamente a visão do cientista, mas, em contrapartida, essa restrição fornece um método poderoso para o desenvolvimento da ciência uma vez que força o cientista a concentrar sua atenção em uma determinada faixa de problemas e investigar a natureza de uma forma tão profunda e detalhada que de outra maneira seria inimaginável (KUHN, 1998, pg. 45).

Além disso, a ciência normal ainda assegura o relaxamento das limitações que amarram as pesquisas, toda vez que o paradigma do qual se originam não funciona mais (KUHN, 1998, pg. 45). Nessa altura, a natureza da pesquisa é modificada, contudo, no período vingente do paradigma, os cientistas terão resolvidos problemas (ciência normal) cujas soluções dificilmente seriam obtidas sem tal comprometimento com os mesmos (KUHN, 1998).

Kuhn estabelece três focos de investigação científica para classificar e ilustrar os problemas de exploração, experiências e observações que constituem a *ciência normal* (KUHN, 1998):

1. *Classe de fatos que o paradigma determina como reveladora da natureza* – Nesta categoria Kuhn destaca os fatos merecedores de uma determinação mais precisa, classificando-os como os fatos mais significativos para uma dada investigação.

Exemplos de determinações significativas incluem:

[...] na Astronomia — a posição e magnitude das estrelas, os períodos dos eclipses das estrelas duplas e dos planetas; na Física — as gravidades e as compressibilidades específicas dos materiais, comprimentos de onda e intensidades espectrais, condutividades elétricas e potenciais de contato; na Química — os pesos de composição e combinação, pontos de ebulição e a acidez das soluções, as fórmulas estruturais e as atividades ópticas (KUHN, 1998, pg. 46).

As tentativas realizadas pelos cientistas em obter uma maior profundidade no conhecimento sobre esses fatos ocupam boa parte de literatura da ciência experimental e da observação (KUHN, 1998).

2. *Classe de fatos que podem ser diretamente comparados com as predições da teoria do paradigma* – Essa segunda classe de fatos, mais restrita que a anterior, rotula o esforço em articular a teoria científica com os fatos encontrados na natureza.

Há também a “outra face” dessa classe, que Thomas Kuhn denomina como “segundo tipo de trabalho experimental”, na qual é o paradigma que determina diretamente o experimento, em vez do experimento implicar o paradigma, isto é, é o próprio paradigma que coloca o problema a ser resolvido:

[...] De fato: a relação entre paradigma qualitativo e lei quantitativa é tão geral e tão estreita que, desde Galileu, essas leis com frequência têm sido corretamente adivinhadas com o auxílio de um paradigma, anos antes que um aparelho possa ser projetado para sua determinação experimental (KUHN, T. S., 1998, pg. 49-50).

Uma outra boa ilustração disso, como destaca Kuhn, reside no fato de que sem os Principia, por exemplo, as medições feitas com a máquina de Atwood não teriam qualquer significado (KUHN, 1998, pg. 47).

3. *Classe das articulações qualitativas dos paradigmas* – Thomas Kuhn aponta essa classe como a *terceira espécie de experiência* que visa a articulação do paradigma aos fatos observados na natureza.

Ela trata, sobretudo, dos casos frequentes onde um paradigma é ambíguo em sua aplicação para fenômenos estreitamente relacionados. Por exemplo:

[...] as aplicações do paradigma da teoria calorífica referiam-se ao aquecimento e resfriamento por meio de misturas e mudança de estado. Mas o calor podia ser liberado ou absorvido de muitas outras maneiras — por exemplo, por combinação química, por fricção e por compressão ou absorção de um gás — e a cada um desses fenômenos a teoria podia ser aplicada de diversas maneiras (KUHN, 1998, pg. 50).

Nesses casos, o autor aponta que experiências são necessárias para permitir uma escolha entre modos alternativos de aplicação do paradigma à nova área de interesse (KUHN, 1998, pg. 50).

### 2.1.2 A ciência normal e a resolução de quebra-cabeças

Foi visto na seção anterior uma característica impressionante dos problemas normais de pesquisa, a saber o fato do reduzido interesse destes em produzir grandes novidades nos campos de estudos, o que naturalmente leva a questionar o porquê do interesse dos cientistas em problemas desse tipo. Bem, ao menos para eles os resultados obtidos pela pesquisa normal são significativos porque corroboram para o aumento do alcance e da precisão com os quais o paradigma pode ser aplicado (KUHN, 1998, pg. 58).

Nestes problemas de pesquisa normal o resultado quase sempre pode ser antecipado, e de forma bastante detalhada, de forma que o problema que resta é sobre como alcançar tal resultado (KUHN, 1998). Resolver um problema de pesquisa normal passa a ser então uma busca de como alcançar o antecipado de uma nova maneira, o que requer, segundo as palavras do próprio autor, a solução de todo tipo de complexos *quebra-cabeças* instrumentais, conceituais e matemáticos (KUHN, 1998, pg. 59). Tal desafio apresentado pelo quebra-cabeça constitui uma importante fonte de motivação para o trabalho do cientista (KUHN, 1998).

Quebra-cabeças designam, em seu sentido mais comum, um conjunto de problemas particulares que servem para testar a engenhosidade na resolução de problemas de diversos tipos, o que está diretamente relacionado com o emprego deste termo nos problemas de ciência normal (KUHN, 1998). Ao mais,

[...] o critério que estabelece a qualidade de um bom quebra-cabeça nada tem a ver com o fato de seu resultado ser intrinsecamente interessante ou importante [...] O valor intrínseco não é critério para um quebra-cabeça. Já a certeza de que este possui uma solução pode ser considerado como tal (KUHN, 1998, pg. 59-60).

Isto é, problemas do tipo quebra-cabeça na pesquisa normal implicam um rápido desenvolvimento da ciência porque os praticantes desta concentram-se em questões que apenas a falta de empenho pode impedir o alcance da solução (KUHN, 1998, pg. 60). Uma vez que este tipo de problema de pesquisa já possui respostas asseguradas, como podemos ver na citação direta acima, a tarefa do cientista passa a ser como alcançar tal solução, e a história mostra que muitos dos grandes espíritos científicos dedicaram sua atenção profissional a esforços desse tipo (KUHN, 1998).

Um bom exemplo de um problema do tipo quebra-cabeça reside na tentativa dos cientistas, durante boa parte do século XVIII, em deduzir o movimento observado da lua a partir das leis de Newton do movimento e da gravitação (KUHN, 1998). Tal tarefa, embora guiada pela certeza de que havia uma solução, apresentou-se como uma atividade bastante complexa, obtendo-se o resultado que adequou o fenômeno observado (movimento da lua) ao paradigma vigente (leis de Newton) apenas em 1750 (KUHN, 1998, pg. 63).

Kuhn enfatiza ainda que

[...] uma comunidade científica, ao adquirir um paradigma, adquire igualmente um critério para a escolha de problemas que, enquanto o paradigma for aceito, poderemos considerar como dotados de uma solução possível. Numa larga medida, esses são os únicos problemas que a comunidade admitirá como científicos ou encorajará seus membros a resolver. Outros problemas, mesmo muitos dos que eram anteriormente aceitos, passam a ser rejeitados como metafísicos ou como sendo parte de outra disciplina (KUHN, 1998, pg. 60).

Sendo assim, o paradigma favorece os problemas do tipo quebra-cabeça, enquanto pode afastar o cientista de outras questões que podem ser consideradas demasiadas problemáticas e sem soluções aparentes (KUHN, 1998). É possível que isto signifique o afastamento da comunidade científica com relação à problemas sociais que não podem ser reduzidos à forma de quebra-cabeças, uma vez que não podem ser enunciados nos termos compatíveis com os dos modelos proporcionados pelo paradigma (KUHN, 1998, pg. 60). Isto não implica, contudo, que tais problemas não possam ser solucionados. Em ocasiões onde o paradigma não é capaz de resolver questões que persistem ao longo de anos, o mesmo é posto em cheque e começa-se a considerar se é o modelo mais adequado para a resolução de problemas ou se deve ser abandonado (KUHN, 1998). É então quando se estabelece uma *crise*. Ao objeto de estudo predominante neste período Thomas Kuhn deu o nome de *anomalia*, e ao tempo em que se criam e competem novos paradigmas a denominação de *ciência extraordinária*. Quando o novo paradigma substituir seu antecessor, possibilitando a solução de problemas que antes não podiam ser respondidos, dando início assim a um novo ciclo de ciência normal, atividade que consiste em solucionar os então novos quebra-cabeças, irá ter-se, por fim, uma *revolução científica* (KUHN, 1998).

Devemos considerar, ainda, que para ser classificado como um quebra-cabeça um dado problema não pode apenas apresentar a segurança de se obter uma solução, deve também obedecer regras que limitam tanto a natureza das soluções aceitáveis como os passos necessários para obtê-las (KUHN, 1998, pg. 61). Neste ponto Kuhn exemplifica que para montar um quebra-cabeça, no sentido usual do termo, não basta simplesmente juntar as peças ao acaso, é necessário encaixá-las em seus lugares certos, é necessário também que o lado da imagem fique para cima (KUHN, 1998). De forma análoga, na ciência também há padrões e regras que governam o método científico. Tais regras proporcionam uma quantidade de informações adicionais a respeito dos compromissos que os cientistas derivam de seus paradigmas (KUHN, 1998, pg. 63), os quais, por vez, fornecem leis e teorias que auxiliam na formulação de quebra-cabeças.

Contudo, Kuhn alerta que embora a ciência normal seja uma atividade altamente determinada, ela não precisa ser inteiramente determinada por regras, justificando por isso o uso do termo *paradigmas compartilhados*, ao invés de *regras*, uma vez que essa última deriva dos paradigmas, que pode dirigir uma pesquisa mesmo sozinho, e tendo em vista que o termo *regras*, apenas, não poderia especificar tudo que as práticas dos especialistas da ciência têm em comum (KUHN, 1998, pg. 66).

Com essa discussão, encerramos esta parte introdutória cujo objetivo é deixar o leitor situado em relação ao que é um problema quebra-cabeça e sua importância para o desenvolvimento da atividade científica, compreensão que é necessária uma vez que tal tipo de problema aparece na discussão central desta monografia sob a forma de um sistema contendo dois elétrons interagentes, isto é, o problema quebra-cabeça que buscamos resolver neste trabalho trata-se de um sistema quântico com dois elétrons interagentes, confinados em um poço quadrado infinito unidimensional, com um potencial de interação expresso pela delta de Dirac.

Tal *quebra-cabeça*, por se tratar de um modelo idealizado, trata de forma razoavelmente simples a questão de elétrons interagentes e possibilita uma fácil compreensão de tal tipo de sistema. Este fato, junto a outros elementos que permitem a transformação de nosso problema de energia de correlação em *saber*

*ensinado*, foi utilizado para a proposta de uma transposição didática segundo a perspectiva de Chevallard, a qual é discutida logo em seguida.

## **2.2 Transposição didática**

### *2.2.1 A transposição didática segundo Chevallard*

A ideia de *transposição didática* foi inicialmente formulada pelo sociólogo Michel Verret, em 1975, porém, em 1980, o matemático Yves Chevallard retoma tal conceito e aplica a conteúdos específicos do ensino de matemática (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005). Nesse contexto, o autor iniciou suas pesquisas sem pensar em formular uma nova teoria, contudo, no desenrolar de seus estudos o tema foi ganhando importância e notoriedade e Chevallard passou a se preocupar cada vez mais sobre como ocorrem as transformações dos saberes, desde a origem destes até sua chegada às salas de aula (JARDIM; CAMARGO; ZIMER, 2015, pg. 13629-13630).

A transposição didática é definida como

[...] um instrumento eficiente para analisar o processo através do qual o saber produzido pelos cientistas (o Saber Sábio) se transforma naquele que está contido nos programas e livros didáticos (o Saber a Ensinar) e, principalmente, naquele que realmente aparece nas salas de aula (o Saber Ensinado) (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, pg. 388).

De acordo com essa teoria, o conhecimento passa por profundas modificações que visam adequar o saber produzido pela comunidade científica aos currículos e conteúdos escolares (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005). Ao fim desse percurso, claro, os conceitos mantêm semelhanças com suas formas originais, entretanto, ao passarem para categoria de *saber ensinado*, adquirem um status próprio dentro do ambiente escolar onde serão alojados e realmente se transformam tendo em vista facilitar a aprendizagem dos estudantes (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005). Tal transformação é inevitável, dado que as intenções e objetivos em ensinar e aprender ciências são bastantes diferentes daquelas associadas ao fazer científico (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005).

O termo “facilitar” usado acima, contudo, não deve ser confundido com meras simplificações retiradas dos resultados de pesquisa dos cientistas, isto é, do *saber sábio*:

“À primeira vista somos levados a interpretar que o saber a ensinar é apenas uma mera “simplificação ou trivialização formal” dos objetos complexos que compõem o repertório do saber sábio” , (ALVES-FILHO, 2000 apud BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, pg. 389).

Tal visão de simplificação é equivocada porque nela está intrínseco o desconhecimento do complexo processo de transformação dos saberes (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005).

Devemos, aqui, evidenciar que a “simplificação” tratada acima precisa ser distinguida daquela que está associada à seleção consciente de modelos simplificados frutos do processo de modelagem científica:

Certamente, a construção de modelos pela Ciência para a apreensão do real visa transformar situações complexas em situações mais simples, afim de poder tratá-las por meio de teorias disponíveis. Com isso, neste processo, abstrações, simplificações e idealizações são implementadas, sem que, no entanto, os limites e possibilidades de tais opções sejam esquecidas, ficando o modelo condicionado às mesmas. Logo, a modelagem científica é imprescindível para a construção da ciência e, também, para seu ensino (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, pg. 389).

A citação acima fundamenta bem nosso objetivo de propor um sistema-modelo de elétrons interagentes, que trata-se de um sistema ideal, uma abstração, para poder facilitar o estudo dos problemas cujos análogos reais são naturalmente mais complexos para serem trabalhados em uma abordagem inicial com os estudantes.

Ao mais, esse uso de simplificações, no sentido estabelecido anteriormente, é frequente em transposições didáticas pois

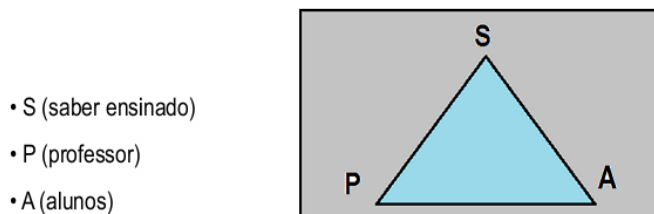
[...] muitas vezes é necessário limitar a profundidade conceitual e as linguagens empregadas em algumas situações. Um dos motivos que justificam essa simplificação é decorrente, entre outras, da disponibilidade de tempo (carga horária), dos objetivos do curso, da maturidade dos estudantes etc. (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, pg. 391).

Com isso exposto, passamos agora a discutir os elementos que caracterizam a transposição didática segundo Chevallard, e mais tarde, em nossas considerações, fazemos a análise de como nosso modelo proposto apresenta tais características.

### 2.2.2 A anatomia da transposição didática de Chevallard

Existem três elementos essenciais e atuantes no processo de transposição didática segundo a visão de Chevallard: *professor*, *estudante* e *saber ensinado*. Dessa forma, o teórico apresenta a triangulação da transposição didática como ilustrado na Figura 1 (JARDIM; CAMARGO; ZIMER, 2015, pg.13632):

**Figura 1** – Elementos da Transposição Didática.



Fonte: (MARQUES).

Esse apontamento de Chevallard sobre os elementos da transposição didática busca romper com a pedagogia tradicional, que enxerga apenas a relação professor-aluno, e enaltece, uma vez adicionado o conhecimento como uma entidade própria do sistema, as relações professor-saber e saber-aluno. Tal esquema é fundamental na análise do autor dado que ele está interessado não apenas nos seres humanos do processo de ensino-aprendizagem, mas também no conhecimento em si e em como ele se transforma desde sua origem na comunidade científica até sua chegada nas salas de aula (CHEVALLARD, 2013, BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005).

Outros elementos presentes na transposição segundo Chevallard incluem (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005):

- **Noosfera**

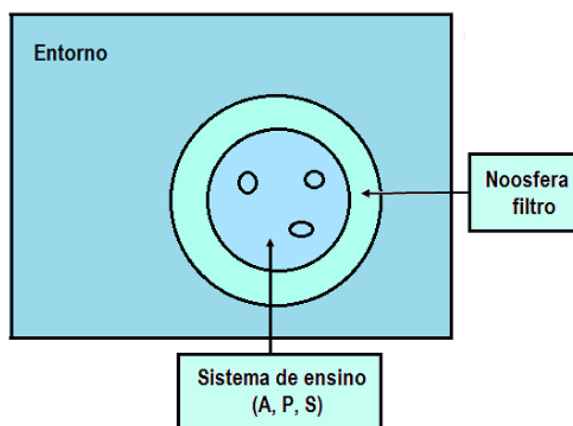
Conforme vimos anteriormente, Chevallard define três esferas de saber: *saber sábio*, *saber a ensinar* e *saber ensinado*. Cada uma dessas esferas tem seus agentes pertencentes a diferentes grupos sociais, os quais possuem interesses distintos, como exemplo, os cientistas focam na realização de pesquisas, os professores nas transposições dos resultados e os alunos na aprendizagem (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005).

Entretanto, ocorre que há também diversos fatores externos ao sistema escolar que regulam como o saber sábio se transforma até chegar à escola. Ao grupo de agentes que determina como ocorre tal transformação dá-se o nome de *noosfera* (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005):

A noosfera é composta, em geral, por cientistas, educadores, professores, políticos, autores de livros didáticos, pais de alunos, entre outros. Cada um destes contribuindo com seus valores, preferências, ideias e objetivos específicos no delineamento dos saberes que chegarão à sala de aula. Cada esfera dos saberes possui seus sub-grupos de atores da noosfera, podendo haver ou não uma sobreposição entre grupos de esferas diferentes (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, pg. 393).

Isto reflete o conhecido fato de cada sistema de ensino ter autonomia para selecionar os conteúdos, previamente debatidos dentro da sociedade e considerados, a priori, como os mais relevantes, que serão transformados e repassados aos estudantes. Sendo assim, fica explícito que é a noosfera que realiza a seleção de saberes presentes no sistema entorno, realizando o papel de filtro (veja a Figura 2), e que conduz o processo de ensino e aprendizagem (JARDIM; CAMARGO; ZIMER, 2015).

**Figura 2** – Esquema da noosfera representando o filtro dos conhecimentos da sociedade para o sistema de ensino.



Fonte: (MARQUES).

É também necessário considerar que uma eventual mudança de paradigma que possa ocorrer na comunidade científica produzirá novos conhecimentos e então possíveis alterações para a transposição didática, já que uma mudança do saber sábio implica também a mudança dos outros dois tipos de saberes (JARDIM; CAMARGO; ZIMER, 2015, pg. 13633).

- **As esferas do saber**

As esferas do saber, como já foi possível notar, estão fortemente relacionadas. Usaremos esta subseção para explorar essa ligação e introduzir importantes terminologias.

O *saber sábio* diz respeito ao saber que é construído dentro da comunidade científica que realiza suas ações baseada em um paradigma. Esse conhecimento produzido é restrito, sendo geralmente compartilhado apenas dentro do grupo sob forma de artigos científicos (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005).

O segundo patamar do saber é o *saber ensinar*, resultado do processo que transforma o saber sábio em saber ensinar, e que recebe a denominação de *Transposição Didática Externa* (SIQUEIRA, PIETROCOLA, 2006):

Ele [o *saber ensinar*] se materializa na produção de livros didáticos, manuais de ensino para formação universitária, programas escolares que tem como alvo os alunos universitários e professores do E.M. Aqui, o conhecimento é reestruturado para uma linguagem mais simples se adequando ao ensino, sendo “desmontado” é reorganizado novamente de uma maneira lógica e atemporal (SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006, pg. 4).

Uma outra característica do *saber ensinar* resume-se ao fato de que ele ganha um status próprio após ser disvinculado do saber sábio:

Os processos de despersonalização, dessincretização e de descontextualização, aos quais o saber é submetido, faz com que ele seja despido de seu contexto epistemológico, histórico e linguagem própria. Com o saber a ensinar, é obtido um saber com uma nova roupagem, uma organização a-histórica, um novo nicho epistemológico e de validade dogmatizada. (PINHO ALVES, 2000 apud SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006, pg. 4).

Por último, o *saber ensinado* refere-se ao saber que de fato chega ao aluno e que configura-se como o melhor para sua aprendizagem. Esse processo de transformação do *saber a ensinar* em *saber ensinado* é chamado de *Transposição Didática Interna*, referente ao espaço em que ocorre, que é no interior da escola (SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006):

Essa é a segunda transposição do saber, que faz uma adaptação do saber ao tempo didático, ou seja, é nessa etapa que há transformação do conhecimento visando o sequenciamento das aulas. Nesse papel de transformação do saber para sala de aula, aparece a figura do professor, que deve adequar o conhecimento trazido nos livros didáticos (*saber a ensinar*) para aquele que efetivamente vai para suas aulas e chegue até os alunos (SIQUEIRA, PIETROCOLA, 2006, pg. 5).

- **A sobrevivência dos saberes**

Nem todos os saberes que fazem parte do domínio do *saber sábio* chegarão à sala de aula devido ao filtro da noosfera, e nem todos *saberes a ensinar* chegam até o fim da transposição porque podem se tornar obsoletos no contexto escolar ou banalizados no contexto sócio-cultural. Sendo assim, Chevallard define uma série de características essenciais que definirão a sobrevivência dos *saberes* para que possam tornarem-se objetos de ensino (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006):

1. O *saber* deve ser **consensual**: O saber que deve chegar até a sala de aula não deve apresentar dúvidas sobre o seu status de verdade dentro do campo das ciências.
2. O saber transposto deve buscar uma **atualização**, que se apresenta de duas formas distintas: a **atualização moral**, que diz respeito a uma espécie de conhecimento que possa ser julgado como importante pela sociedade e essencial para a composição curricular, e a **atualização biológica**, que versa sobre a necessidade do saber transposto estar em acordo a ciência vigente, de modo que os conceitos já superados pela comunidade científica sejam ensinados somente em forma de história.
3. Outra característica exigida para sobrevivência dos saberes é a **operacionalidade**: O saber a ensinar deve ser operacional, no sentido de que possa gerar atividades que possibilitem uma avaliação objetiva do aprendizado. Um saber com esta característica provavelmente pode ser transposto. Em contrapartida, os saberes que não puderem proporcionar tais atividades para serem avaliadas serão descartados porque não se adequam à gestão cotidiana da escola que visa fazer os alunos trabalharem e logo então avaliá-los.
4. O saber candidato à transposição deve permitir que haja uma **criatividade didática**, que refere-se à proposta de atividades de uso estritamente escolar, ou seja, atividades que não possuem similares no saber sábio, tornando-as objetos que têm identidade própria dentro das instituições de ensino.
5. Por último, o *saber a ensinar* deve se adaptar ao sistema didático, passando por testes e adquirindo assim um “selo de qualidade”. À isto dá-se o nome de

**terapêutica**, que reflete a necessidade das transposições obterem bons resultados em suas aplicações em sala de aula, bem como dentro das outras características ressaltadas acima.

- **Regras da transposição didática**

Observando o desenvolvimento da Transposição Didática é possível pontuar algumas regras que caracterizam o processo de transformação do *saber sábio* em *saber ensinar* (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005, SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006):

1. **Regra 1 – Modernizar o saber escolar:** A ciência produz, e de forma bastante rápida, novos conhecimentos sobre aparelhos e dispositivos modernos. Tal produção deve ser igualmente acompanhada pelos livros didáticos e manuais de ensino, com vista a legitimar os programas das disciplinas, garantindo seus lugares nos currículos.
2. **Regra 2 – Atualizar o saber a ensinar:** Durante o processo de revisão de um livro didático é necessário mais que acrescentar novos saberes, é preciso também fazer uma análise e eliminar alguns saberes que, embora corretos, devem ser descartados por estarem já diluídos demais na sociedade, o que banalizaria o papel do professor.
3. **Regra 3 – Articular o saber novo com o antigo:** É instruído que no processo de ensino um saber novo deve ser articulado a um saber considerado velho, entretanto, deve se ter a cautela de que essa articulação não ocorra de maneira radical, tentando refutar ou negar o saber anterior.
4. **Regra 4 - Transformar um saber em exercícios e problemas:** O *saber sábio* operacional é aquele que provavelmente se tornará *saber a ensinar*, isto porque o sistema de ensino valoriza, dá preferência, às atividades que são capazes de criarem ligações com o processo de avaliação.
5. **Regra 5 – Tornar um conceito mais compreensível:** Na transformação do *saber sábio* em *saber ensinar* há uma perda da linguagem original associada ao primeiro, a qual transforma-se em uma linguagem mais próxima das pessoas que não fazem parte da comunidade científica, o que implica que tal

saber se torna mais próximo dos alunos e, conseqüentemente, facilita sua compreensão, resultando em um melhor aprendizado.

Cabe aqui, então, ressaltar que na presente monografia estamos intencionados em lidar com a possível, e já referida, falta de maturidade dos estudantes em relação a um formalismo matemático mais avançado que pode aparecer naturalmente durante o estudo da energia de correlação / elétrons interagentes. Frente a essa possibilidade, surge a proposta de uma transposição didática a partir do nosso problema quebra-cabeça, pois nesse evita-se o uso de tal formalismo, apresentando-se como um modelo cuja compreensão é facilitada devido a utilização de um potencial ideal, a saber a delta de Dirac.

Tal simplificação não ocorrerá para uma ampla variedade de funções potenciais, onde podemos citar como exemplo o potencial de Coulomb, que aumenta os cálculos para o Hamiltoniano de elétrons interagentes (veremos adiante que tal Hamiltoniano não permite solução analítica da equação de Schroedinger para muitos elétrons interagentes).

Com isso, encerrada nossa apresentação da transposição didática de Chevallard, nosso próximo passo consiste em discutir o cenário do qual emerge o conceito de energia de correlação.

## **2.3. Energia de correlação**

### *2.3.1 A Equação de Schroedinger*

A equação de Schroedinger é uma equação que descreve como um determinado estado quântico,  $\Psi$ , de um sistema físico evolui, sendo dada por (SANTOS, 2009):

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

onde  $\Psi$  é a função de onda,  $E$  é a energia associada à esta função e o termo  $H$  é o operador Hamiltoniano do sistema (SANTOS, 2009). O Hamiltoniano para um sistema que possui uma ou mais partículas contém os termos de energia cinética dos elétrons, a atração entre os elétrons e o(s) núcleo(s) do(s) átomo(s), as interações entre os vários elétrons e, no caso de quando houver mais que um

átomo, a repulsão entre os núcleos (SANTOS, 2009). Para o caso de uma molécula poliatômica composta por  $N$  elétrons e  $M$  núcleos, o operador Hamiltoniano da equação (2.1) pode ser escrito como (SANTOS, 2009, BEZERRA, 2009):

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.2)$$

Onde  $R_{AB}$  é a distancia entre os núcleos A e B;  $r_{iA}$  é a distância entre o núcleo A e o elétron i;  $r_{ij}$  é a distância entre os elétrons i e j,  $Z_A$  é o número atômico do átomo A e  $M_A$  é a razão da massa do núcleo A em relação ao elétron i (SANTOS, 2009).

Podemos reescrever a expressão (2.2) como (SANTOS, 2009):

$$H = T_e + T_N + V_{Ne} + V_N + V_e \quad (2.3)$$

Onde  $T_N$  é o operador referente a energia cinética nuclear,  $T_e$  o operador referente a energia cinética eletrônica,  $V_{Ne}$  o operador da atração núcleo-elétron,  $V_e$  o operador da energia potencial repulsiva entre elétrons e  $V_N$  o operador de energia potencial repulsiva entre núcleos (SANTOS, 2009).

Como os núcleos atômicos são bem mais pesados que os elétrons, suas transições são muito mais lentas que as transições eletrônicas (SANTOS, 2009). Assim, como uma boa aproximação, podemos considerar um modelo onde os elétrons estão em movimento em torno dos núcleos cujas posições são assumidas como sendo fixa no espaço. Essa aproximação recebe o nome de *aproximação de Born-Oppenheimer* (SANTOS, 2009). Com tal sutileza, o segundo termo da equação (2.3), a energia cinética do núcleo, pode ser ‘desprezada’, e o quarto termo, a repulsão entre núcleos, pode ser admitida como sendo constante (SANTOS, 2009).

Esta aproximação permite separar a equação de Schroedinger independente do tempo em duas partes: uma relacionada à parte eletrônica e outra relacionada com a parte nuclear (SANTOS, 2009):

A equação nuclear diz respeito aos fenômenos da dinâmica molecular, da interação entre os núcleos que traz a informação de um estado eletrônico particular do sistema molecular e da energia de repulsão núcleo-núcleo. A equação eletrônica descreve os movimentos dos elétrons para uma dada configuração nuclear. Cada uma dessas configurações nuclear gera uma solução da energia no estado eletrônico de interesse (SANTOS, 2009, pg 24).

Usando a aproximação supracitada, podemos reescrever nosso Hamiltoniano como sendo (SANTOS, 2009):

$$H = T_e + T_N + V_{Ne} + V_N + V_e \rightarrow H_{Total} = T_e + V_{Ne} + V_e + V_N , \quad (2.4)$$

ou seja, retiramos o termo que se refere a energia cinética dos núcleos.

De (2.4) temos que (SANTOS, 2009):

$$H_{Total} = H_{ele} + V_N \quad (2.5)$$

Onde  $H_{ele}$  é definido como sendo o Hamiltoniano eletrônico, isto é (SANTOS, 2009):

$$H_{ele} = T_e + V_{Ne} + V_e \quad (2.6)$$

Para um sistema composto por átomos com poucos elétrons é possível obter em algumas situações/modelos o resultado da equação de Schroedinger de forma exata (SANTOS, 2009), analiticamente como, por exemplo, na solução da equação para o átomo de hidrogênio, bastante abordado nos livros-texto de Mecânica Quântica.

Para um sistema com dois elétrons o Hamiltoniano (2.2), no qual utiliza-se o potencial de interação Coulombiano, torna-se consideravelmente extensa a obtenção de uma solução para energia do sistema através do uso da equação de Schroedinger. Entretanto, a solução pode ser aproximada.

Contudo, ocorre ainda que para sistemas compostos por moléculas, contendo portanto mais que dois elétrons interagentes, a equação de Schroedinger não possui solução analítica, sendo então necessário o emprego de métodos aproximativos – chamados de métodos *ab initio* – que permitem a obtenção de soluções aproximadas, porém satisfatórias (SANTOS, 2009). Um desses métodos é o denominado *método de Hartree-Fock*, a ser discutido logo em seguida.

### 2.3.2. Apresentação do método de Hartree-Fock (HF)

Não cabe à proposta deste trabalho abordar os pormenores do método de Hartree-Fock, entretanto, tal detalhamento pode ser facilmente encontrado em livros e artigos, tais como (ALCÁCER, 2007, CUSTODIO, 2015, MOREIRA; SILVA, 2016).

Limitar-nos-emos aqui em abordar a origem deste método, sua importância e o que ele faz, com vista a compreendermos melhor o conceito de energia de correlação, foco do nosso trabalho.

O método de Hartree-Fock trata-se de um método aproximativo para determinação da função de onda e energia no estado fundamental de sistemas quânticos com vários corpos interagentes, sendo assim capaz de resolver, por exemplo, problemas de sistemas compostos por vários átomos e moléculas (SANTOS, 2009).

Este método é a base para teoria orbital molecular, onde cada elétron passa a ser representado por uma simples função, denominada orbital, que não depende explicitamente do movimento instantâneo dos outros elétrons, e é também ponto de partida para os outros métodos *ab initio* (SANTOS, 2009), o que contribui fortemente para o seu estudo.

Sua origem teve início pouco tempo após o desenvolvimento da equação de Schroedinger, quando Douglas Hartree propôs uma maneira de tratar sistemas multieletrônicos usando, para tal tarefa, o emprego do método variacional do Hamiltoniano de muitos elétrons (BASTOS 2015). Para isso ele utilizou uma função “teste” como função global, descrita pelo produto das funções de onda de cada elétron individual, que ficou sendo conhecida como *produto de Hartree* (BASTOS, 2015, SANTOS, 2009):

$$\Psi(r) = \psi(r_1)\psi(r_2)\psi(r_3)\psi(r_4)\dots = \prod_i^N \psi_i(r_i), \quad (2.7)$$

o que lhe permitiu encontrar uma equação similar a equação de Schroedinger, para qual propôs um método de solução autoconsistente (BASTOS, 2015).

Entretanto, a formulação utilizada por Hartree apresentava alguns problemas devido as considerações fundamentais que adotava e não conseguia, por exemplo, prever a ligação química entre átomos (BASTOS, 2015).

Mais tarde, com o desenvolvimento da teoria Quântica, descobriu-se a propriedade antissimétrica da função de onda para férmions, originada do princípio

da exclusão de Pauli, o que não havia sido levado em conta por Hartree em sua formulação (BASTOS, 2015).

Slater e Fock independentemente mostraram tal aspecto do método e então o reformularam, demonstrando que um *determinante de Slater* satisfaz o princípio e que é uma solução adequada para aplicação do método variacional (SANTOS, 2009). Com tais contribuições, Hartree modificou seu método e usou uma aproximação para a interação intereletrônica, admitindo a interação de um elétron não com outros elétrons do sistema, mas sim com um campo médio ( $v^{HF}$ ) resultante da presença destes últimos (SANTOS, 2009).

Com tais contribuições a função de onda global passou a ser representada por um determinante de Slater, demonstrado na equação (2.8) para um sistema com  $N$  elétrons (SANTOS, 2009, BASTOS, 2015):

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_i(r_1) & \chi_j(r_1) & \cdots & \chi_k(r_1) \\ \chi_i(r_2) & \chi_j(r_2) & \cdots & \chi_k(r_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_i(r_N) & \chi_j(r_N) & \cdots & \chi_k(r_N) \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

onde o termo  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  é um fator de normalização e  $\chi_i$  representa um spin orbital. Com isso, o método passou a se chamar de *método de Hartree-Fock (HF)* (SANTOS, 2009, BASTOS, 2015).

Utilizando derivações de (2.8) e o método variacional é possível chegar à equação de autovalor de Hartree-Fock (SANTOS, 2009):

$$f(i)\chi(r_i) = \varepsilon\chi(r_i) \quad (2.9)$$

$$f(i) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + v^{HF}_{(i)} , \quad (2.10)$$

onde  $f(i)$  é o operador de Fock de um elétron efetivo,  $\varepsilon$  a energia do  $i$ -ésimo orbital atômico (ou molecular) e  $v^{HF}_{(i)}$  é o potencial médio experimentado pelo elétron  $i$  por conta da presença dos outros elétrons (SANTOS, 2009). Note a semelhança entre

(2.9) e (2.1), isto é, entre a equação de Hartree-Fock e a equação de Schroedinger independente do tempo.

A utilização do método de Hartree-Fock implica no uso de um método de campo auto-consistente (em inglês, Self Consistence Field - SCF), que gera soluções para a função de onda do sistema a partir de uma função teste, escolhida como estimativa inicial e que é aperfeiçoada até convergir (SANTOS, 2009). Especificamente, o “chute” inicial refere-se à escolha das funções spin orbital, que aplicadas em (2.9) geram um conjunto de valores para  $\varepsilon$ , com os quais é possível calcular novas funções spin orbitais em um processo cíclico que se repete até os resultados alcançados convergirem, isto é, os novos valores para  $\chi(r_i)$  e  $\varepsilon$  não diferirem significativamente dos seus valores obtidos no ciclo anterior, alcançando-se assim a autoconsistência (SANTOS, 2009).

Posteriormente, os trabalhos de Hartree, Fock e Slater sofreram contribuições de Roothan e Hall, que reformularam as equações do método de Hartree-Fock com o intuito de obter soluções numéricas, o que veio a permitir o amplo emprego do método em atividades computacionais (SANTOS, 2009).

Há algumas importantes fontes de erro presentes no método de Hartree-Fock e que merecem uma discussão especial tendo em vista como contribuem para desvios nas soluções fornecidas pelo método. As principais fontes são (ALCÁCER, 2007):

1. **Fato do conjunto base ser incompleto** – o *conjunto base* refere-se a proposta de Roothaan em representar os orbitais de Hartree-Fock como combinação lineares de um conjunto de funções conhecidas. Tal representação desempenha um papel fundamental no método, pois sua escolha está intimamente relacionada com as propriedades físicas e químicas dos sistemas atômicos e moleculares sob estudo.  
Teoricamente, essa base empregada deveria ser infinita, o que é contornado com uso de aproximações, tornando-a incompleta.
2. **Efeitos relativísticos** – O método de Hartree-Fock despreza efeitos relativísticos.
3. **Considera a aproximação de Bohr-Oppenheimer** – o método considera em sua formulação a aproximação de Bohr-Oppenheimer, discutida na

subseção 2.3.1, onde se assume que não há movimento dos núcleos atômicos.

4. **Está contido no método SCF apenas parte da correlação eletrônica** – Em sistemas reais contendo vários elétrons tem-se que cada elétron contribui com um potencial que fornece energia cinética aos outros. No método de Hartree-Fock é assumido, a princípio, que os elétrons não interagem um com os outros, mas sim que cada elétron interage com um campo médio ( $v^{HF}$ ) devido a presença dos demais. De tal forma, o método considera apenas interações médias, enquanto que as interações reais são instantâneas devido ao fato do movimento dos elétrons estarem correlacionados, o que é chamado de *correlação eletrônica*.

Em sua formulação, o método HF considera apenas parte desta correlação, associando tal fenômeno ao denominado *termo de troca eletrônica*, que contém a informação da correlação entre elétrons com spins paralelos (SANTOS, 2009). Cabe aqui ressaltar que o método de Hartree-Fock constitui um paradigma que guia diversos projetos de pesquisas que trabalham com sistemas envolvendo átomos e moléculas e, portanto, é de interesse investigar como os erros gerados em decorrência das aproximações utilizadas em sua formulação afetam os resultados obtidos. Tal investigação é realizada no tópico seguinte.

### 2.3.3 Consequências das aproximações para a solução HF e Energia de Correlação

As consequências advindas do uso de aproximações no desenvolvimento do método de Hartree-Fock podem ser drásticas para algumas soluções fornecidas por tal método, podendo até mesmo haver situações nas quais tal abordagem é inválida, pois o erro produzido pode ser da ordem de grandeza da energia de ligação química entre os átomos do sistema sob análise (ALCÁCER, 2007).

O erro advindo da necessidade de sempre se usar bases incompletas, contornando o fato de que apenas bases infinitas forneceriam resultados exatos, pode ser controlado através de uma escolha adequada, que leve em consideração parâmetros como as dimensões do sistema em seus cálculos e, portanto, trata-se de um erro cuja atenuação já é conhecida e aplicada para diminuir os efeitos indesejáveis na solução HF (ALCÁCER, 2007).

Os erros originados nos efeitos relativísticos e pela aproximação de Bohr-Oppenheimer são de importância ínfima para o resultado final do método, constituindo-se como excelentes modelos, principalmente para átomos leves no que diz respeito aos efeitos relativísticos (ALCÁCER, 2007).

Sendo assim, a fonte de erro mais problemática reside na denominada *energia de correlação* (ALCÁCER, 2007). Como vimos, a função de onda antissimétrica é aproximada por um determinante de Slater, mas ocorre que funções de onda exatas não podem ser representadas por um simples determinante, pois tal aproximação não leva em conta o fato da correlação entre elétrons com spins opostos (SANTOS, 2009), o que faz com que a energia obtida pelo método HF seja diferente do valor da energia obtida de forma exata via solução da equação de Schroedinger (SANTOS, 2009).

Ainda mais, tal como foi discutido anteriormente, ao se considerar interações com valores médios em detrimento das interações instantâneas reais que existem entre os elétrons, o método de Hartree-Fock deixa de levar em conta que tais partículas tendem a movimentarem-se de forma a minimizar em cada instante a repulsão entre elas (ALCÁCER, 2007).

Tais problemas levam à seguinte definição:

Em face das dificuldades em conhecer claramente todas as parcelas da energia devidas a estas contribuições [elétron-elétron], que se designam, de um modo geral, por correlação eletrônica, define-se esta como a diferença entre a energia exata numa aproximação não relativista,  $E_{nrel}$ , e a energia calculada na aproximação de Hartree-Fock não relativista,  $E_{HF}$  (ALCÁCER; 2007, pg 221).

Em forma de expressão matemática (ALCÁCER, 2007):

$$E_{correlação} = E_{nrel} - E_{HF} \quad (2.11)$$

Em síntese, o termo  $E_{nrel}$  representa a energia do sistema obtida via solução da equação de Schroedinger e o termo  $E_{HF}$  a energia obtida para o mesmo sistema, mas agora via o método de Hartree-Fock.

Tal energia de correlação, embora já com vastos resultados de pesquisa, constitui-se em um tema de estudo que ainda se configura como um grande

problema (BASTOS, 2015), e que se estende para outros métodos de abordagem que trabalham com sistemas atômicos e moleculares, para citar algum deles: *teoria do funcional da densidade, interação de configurações e método de Møller-Plesset* (ALCÁCER, 2007, BAIERLE; ROSSO, 2007, BEZERRA, 2009).

Com essa discussão, pretende-se deixar claro a importância que possui o estudo da energia de correlação e o quão complexo pode ser essa tarefa, a depender do sistema sob análise.

#### 2.3.4 Função delta de Dirac

Neste trabalho estaremos interessados no uso de um potencial de interação elétron-elétron que é descrito através da “função” delta de Dirac, o que nos leva à necessidade de discutir algumas das propriedades desta última. Restringiremos-nos a apresentar as propriedades da função que são pertinentes ao interesse de nossa pesquisa. Para maiores detalhes sobre esta pode-se consultar ARFKEN; WEBER, 2007 e GRIFFITHS, 2011.

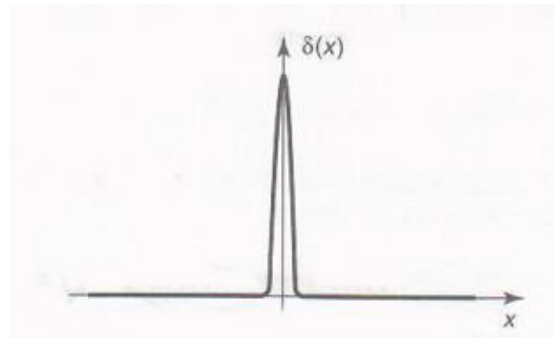
Inicialmente, pense em um limite de uma sequência de funções que na origem,  $x = 0$ , têm uma altura cada vez maior e uma largura, em torno da origem, cada vez menor e ainda que a área debaixo de cada uma dessas funções é igual a 1 (GRIFFITHS, 2011). Fazendo-se isso obtemos um pico infinitamente alto, infinitesimalmente estreito, cuja área é 1 (veja a Figura 3), e que apresenta as seguintes características (GRIFFITHS, 2011):

$$\delta(x) \equiv \begin{cases} 0, & \text{se } x \neq 0 \\ \infty, & \text{se } x = 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (2.13)$$

onde  $\delta(x)$  é a denominada função delta de Dirac.

**Figura 3** – Forma da função delta de Dirac ( Equações (2.12) e (2.13) ).



Fonte: (GRIFFITHS, 2011).

Como pode se notar, a delta de Dirac não é tecnicamente uma função, sequer é definida para  $x = 0$  (veja Eq. 2.12), razão pela qual os matemáticos preferem lhe chamar de *função generalizada* ou *distribuição* (GRIFFITHS, 2011). Contudo, a delta de Dirac tem uma ampla utilização em Física teórica, sendo utilizada para modelagem e representação da(e) (GRIFFITHS, 2011, REAMAT, 2018):

- Densidade de uma carga pontual;
- um circuito elétrico recebendo uma intensa força eletromotriz em um intervalo de tempo pequeno;
- Um sistema massa-mola ao ser perturbado por uma força intensa em um curto intervalo de tempo;
- Uma bola de futebol inicialmente parada e que vem a sofrer um chute, isto é, uma força quase instantânea que altera seu estado de movimento;
- Um raio atingindo um avião.

Continuando, seja  $f(x)$  uma função contínua, então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) f(x) dx \cong f(0) \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) dx = f(0), \quad (2.14)$$

onde os intervalos de integração são modificados, de forma optativa, para uma quantidade infinitesimal  $\varepsilon$ , uma vez que para a  $\delta$  o importante é que o domínio de integração contenha o ponto onde está o pico da função. De forma mais geral, notando-se que  $\delta(x-a)$  seria um pico de área no ponto  $a$  e que multiplicar  $\delta(x-a)$  por uma função ordinária  $f(x)$  é o mesmo que multiplicá-la por  $f(a)$  (GRIFFITHS, 2011),

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \quad (2.15)$$

pois o produto é zero, exceto no ponto  $a$ , temos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) dx = f(a) \quad (2.16)$$

As expressões (2.14) e (2.16) revelam uma das mais importantes propriedades da função delta: a propriedade de “*filtragem*”, que recebe esse nome uma vez que a  $\delta$  se comporta como um filtro para a  $f(x)$  no ponto onde estiver localizado o pico.

Perceba que se fizermos  $a=0$  em (2.16) recaímos no caso expresso pela igualdade (2.14).

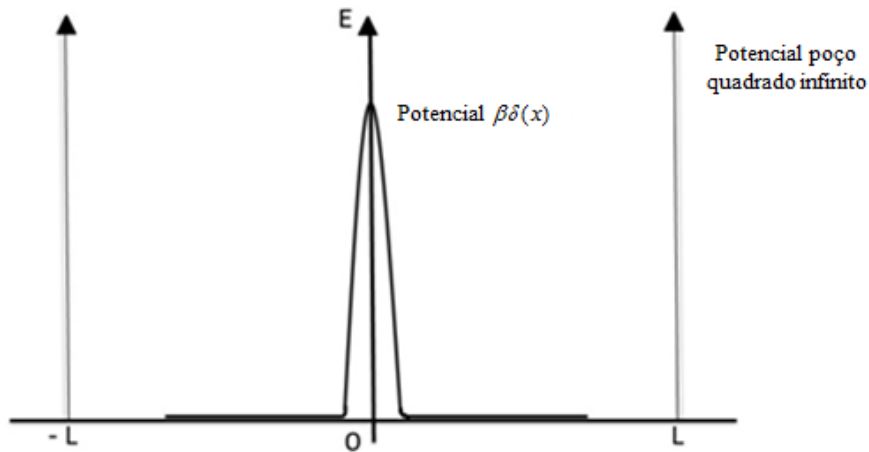
### 3. METODOLOGIA

Foi desenvolvida a solução para energia exata do problema sob análise, isto é, resolveu-se a equação de Schroedinger independente do tempo unidimensional para o caso de um poço quadrado infinito simétrico, que é bastante conhecido, aparecendo na maioria dos livros-textos de Mecânica Quântica para graduação, e para o caso onde além das ‘paredes’ do poço havia também uma função potencial  $V(x)$  do tipo delta de Dirac centrada na origem (veja Figura 4), denotada por:

$$V(x) = \beta\delta(x) \quad (3.1)$$

onde  $\beta$  é uma constante.

**Figura 4** – Esquema de um sistema quântico composto por uma caixa com paredes com potencial infinito contendo em seu centro um potencial do tipo barreira delta de Dirac.



Fonte: O autor.

Para o primeiro caso, equação de Schroedinger independente do tempo para um poço quadrado infinito, temos, reescrevendo a equação (3.1) ( $H\Psi = E\Psi$ ) como:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi = E\Psi \quad (3.2)$$

a expressão:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \Psi = E\Psi \quad (3.3)$$

onde foi feita a seguinte substituição para a expressão do operador Hamiltoniano:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (3.4)$$

Em (3.3) usamos  $V(x) = 0$ , uma vez que nesta situação não há potencial dentro da caixa.

No segundo caso, sistema com potencial tipo delta de Dirac, obtemos:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \delta(x) \right] \Psi = E \Psi \quad (3.5)$$

Em seguida apresentamos o desacoplamento do Hamiltoniano de nosso problema, tarefa *quebra-cabeça* que nos levará a solucionar a equação de Schroedinger para os dois casos acima descritos, e ao final do nosso trabalho indicamos como o tópico de energia de correlação e elétrons interagentes satisfazem as características apontadas por Chevallard para que um saber seja capaz de sofrer transposição.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 4.1 Desacoplando o sistema

O Hamiltoniano para nosso sistema em análise é descrito pela seguinte expressão:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \beta \delta(x_1 - x_2) \quad (4.1)$$

onde  $\hat{p}_1$  e  $x_1$  são o momento e a posição do elétron 1, respectivamente, e  $\hat{p}_2$  e  $x_2$  o momento e a posição do elétron 2.

O último termo de (4.1) implica uma dependência entre as posições dos elétrons, caracterizando um Hamiltoniano acoplado.

Contornamos esta situação com a seguinte definição:

$$\begin{cases} \hat{x}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 + \hat{x}_2) \\ \hat{x}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \end{cases} \quad (4.2)$$

Derivando e multiplicando por  $m$  as sentenças de (4.2):

$$\hat{p}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_1 + \hat{p}_2) \quad (4.3)$$

$$\hat{p}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_1 - \hat{p}_2) \quad (4.4)$$

Elevando (4.3) e (4.4) ao quadrado e somando temos que:

$$\hat{p}_+^2 + \hat{p}_-^2 = \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \quad (4.5)$$

Usando (4.1) e a mudança de variável de nossa definição, podemos reescrever o Hamiltoniano para o nosso sistema como:

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{p}_+^2}{2m} \right) + \left( \frac{\hat{p}_-^2}{2m} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-) \right) \quad (4.6)$$

que está agora desacoplado.

Definindo

$$\hat{H}_+ = \left( \frac{\hat{p}_+^2}{2m} \right) \quad (4.7)$$

e

$$\hat{H}_- = \left( \frac{\hat{p}_-^2}{2m} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-) \right) \quad (4.8)$$

podemos escrever ainda mais claramente a equação (4.6) como sendo:

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_+ + \hat{H}_- \quad (4.9)$$

Onde:

- $\hat{H}_+$  é a energia para o caso idêntico ao da partícula na caixa;
- $\hat{H}_-$  é a energia para a partícula na caixa com a barreira potencial delta de Dirac centrada na origem e;
- $\hat{H}_{tot}$  é a energia total do sistema.

Com o Hamiltoniano desacoplado podemos perceber que o cálculo da energia de todo sistema se resume agora a calcular a energia para o caso de uma partícula livre ( $V(x) = 0$ ) e a energia para o caso de uma partícula sob a ação de um potencial dado pela forma da delta de Dirac ( $\frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-)$ ) e em seguida adicionarmos estes dois resultados (veja 4.9), obtendo assim a energia exata do sistema  $\hat{H}_{tot}$ .

Perceba a importância da troca de variáveis em (4.2): com ela saímos de um Hamiltoniano acoplado, com o qual não sabemos trabalhar, e chegamos a um ponto onde nossa tarefa se reduz a resolver a equação de Schroedinger para uma partícula livre e para uma partícula sob efeito de um potencial delta de Dirac, obtendo assim as funções de onda e as energias para cada caso.

Com as energias de cada um dos sistemas que separamos podemos “montar” a parte da energia exata da expressão (2.11) para energia de correlação:  $E_{\text{correlação}} = E_{\text{nrel}} - E_{\text{HF}}$ , isto é, podemos determinar  $E_{\text{nrel}}$  (aqui  $E_{\text{nrel}}$  é o mesmo que  $\hat{H}_{\text{tot}}$ ). Como dito anteriormente, não é função deste trabalho a determinação da energia aproximada  $E_{\text{HF}}$ , pois tal solução já pode ser encontrada, para o sistema que adotamos, na seguinte referência: (MOREIRA; SILVA, 2016) *Evitando funções especiais no método de Hartree-Fock*.

Sendo assim, passemos agora para solução da equação de Schroedinger para os dois sistemas em questão.

#### 4.2 Solução da equação de Schroedinger para o poço quadrado infinito

Para este desenvolvimento, faremos uso de uma mudança de notação que objetiva nos fornecer um resultado análogo aos que podem ser encontrados em livros textos adotados nos cursos de física quântica. Estaremos, aqui, denotando a largura do poço como “a”, ao invés de “2L”, que usamos até agora.

Na prática, estamos fazendo  $a = 2L$ , mas como a largura do poço é arbitrária, isso não nos causa nenhum problema.

Continuando, partindo de (3.3), onde foi assumida a condição do poço quadrado infinito (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2, \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

obtemos:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) \quad (4.10)$$

Cuja solução é dada por (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad (4.11)$$

desde que a seguinte condição seja satisfeita (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.12)$$

Prosseguindo, aplicamos as condições de contorno, advindas do fato da partícula não poder ser localizada fora do intervalo  $-a/2 < x < +a/2$ , isto é (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\Psi(x) = 0 \quad (4.13) \quad \text{para} \quad x = \pm \frac{a}{2} \quad (4.14)$$

Aplicando as condições de contorno em  $x = +a/2$ :

$$\Psi(x) = A \sin\left(k \frac{a}{2}\right) + B \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (4.15)$$

E em  $x = -a/2$ , temos:

$$\Psi(x) = A \sin\left(-k \frac{a}{2}\right) + B \cos\left(-k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (4.16)$$

Usando as propriedades das funções pares e ímpares e somando (4.15) e (4.16) conseguimos (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$2B \cos(ka/2) = 0 \quad (4.17)$$

Subtraindo-as temos (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$2A \sin(ka/2) = 0 \quad (4.18)$$

Desprezando soluções que admitem  $B=0$ , o que não nos fornece resultados de interesse físico, temos como condição de solução para (4.17) (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$k \frac{a}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$$

É conveniente expressar isto na forma (EISBERG, RESNICK, 1979)

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \text{ com } n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.19)$$

Analogamente para (4.18) (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$k \frac{a}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots \quad (4.20)$$

Isto também pode ser expresso na seguinte forma (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \text{ com } n = 2, 4, 6, \dots \quad (4.21)$$

Temos, portanto (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\psi_n(x) = B_n \cos(k_n x) \text{ onde } k_n = \frac{n\pi}{a}, n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.22)$$

e

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x) \text{ onde } k_n = \frac{n\pi}{a}, n = 2, 4, 6, \dots \quad (4.23)$$

Utilizando ainda a relação (4.12) e as expressões para  $k_n$  em (4.19) e (4.21) para os valores possíveis de  $n$ , obtemos a energia da partícula (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \text{ com } n = 1, 3, 5, \dots \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \text{ com } n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (4.24)$$

Ou, de forma equivalente (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

Que pode ainda ser expresso como:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m(2L)^2}, n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

### 4.3 Solução da equação de Schroedinger para um potencial barreira delta de Dirac

A equação de Schroedinger independente do tempo para esta situação assume a forma expressa em (3.5):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \delta(x) \right] \Psi = E \Psi$$

#### a) Soluções pares

Assumindo soluções do tipo (4.11), temos:

$$\Psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{Para } -L \leq x < 0 \quad (4.25)$$

$$\Psi_2(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad \text{Para } 0 < x \leq L \quad (4.26)$$

As condições de contorno (  $\Psi(\pm L) = 0$  ) para o poço quadrado infinito fornecem:

$$\Psi_1(-L) = -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \quad (4.27)$$

$$\Psi_2(L) = C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0 \quad (4.28)$$

Onde foi usada a propriedade das funções ímpares e pares para retirarmos o sinal de menos de dentro dos argumentos das funções seno e cosseno.

A condição de contorno  $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$ , que garante a continuidade em  $x = 0$ , fornece que:

$$B = D \quad (4.29)$$

Continuando, notamos que não podemos aplicar diretamente a equação de Schroedinger independente do tempo para o caso da função delta de Dirac, pois há uma descontinuidade desta função em  $x = 0$ .

Cientes disto, contornamos tal situação integrando a equação de Schroedinger independente do tempo, (3.5), em um intervalo de  $-\varepsilon$  à  $+\varepsilon$ :

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial^2 x} dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \beta \cdot \delta(x) \cdot \Psi(x) dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E \cdot \Psi(x) dx \quad (4.30)$$

onde  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Reorganizando a equação (4.30) e utilizando a propriedade de filtragem da função delta de Dirac (2.14) obtemos:

$$\Psi'_2(x)|_{\varepsilon} - \Psi'_1(x)|_{-\varepsilon} = \frac{2m\beta}{\hbar^2} \cdot \Psi(0) \quad (4.31)$$

onde  $\Psi'$  é a derivada de  $\Psi$  em relação à  $x$ .

Resolvendo as derivadas e substituindo os resultados em (4.31) vemos que:

$$Ck - Ak = \gamma \cdot \Psi(0) \quad (4.32)$$

Onde

$$\gamma = \frac{2m\beta}{\hbar^2} \quad (4.33)$$

Agrupando as expressões obtidas até então, temos

$$\begin{cases} -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \\ C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0 \\ B = D \\ Ck - Ak = \gamma \cdot \Psi(0) \end{cases} \quad (4.34)$$

Da primeira expressão de (4.34), e com auxílio de (4.29) obtemos que:

$$A = D \cot g(kL) \quad (4.35)$$

Isolando  $C$  na última expressão de (4.34) e usando o resultado de (4.35) encontramos:

$$C = D \cot g(kL) + \frac{\gamma \cdot D}{k} \quad (4.36)$$

Onde  $\Psi(0)$  foi obtido pelo uso de (4.26).

O uso de (4.35) e (4.36) nos permite reescrever (4.25) e (4.26) como:

$$\Psi_1 = D[\cot g(kL) \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx)] \quad (4.37)$$

$$\Psi_2 = D\left[\left(\cot g(kL) + \frac{\gamma}{k}\right) \text{sen}(kx) + \cos(kx)\right] \quad (4.38)$$

Por fim, a segunda expressão de (4.34) com uso da expressão obtida para  $C$  nos fornece

$$\cot g(kL) = \frac{-\gamma}{2k} \quad (4.39)$$

O uso de (4.39) em (4.37) e (4.38) nos dá:

$$\begin{cases} \Psi_1 = D\left[\frac{-\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx)\right] \\ \Psi_2 = D\left[\frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx)\right] \end{cases} \quad (4.40)$$

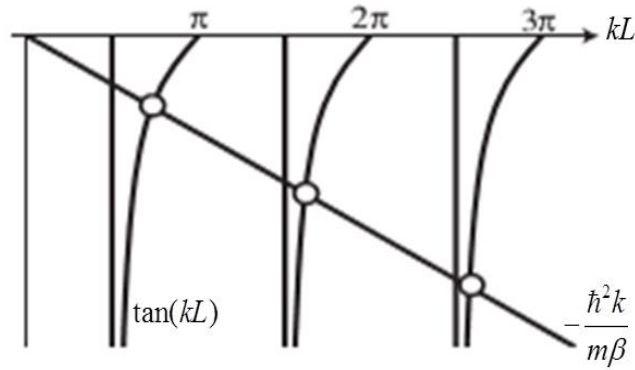
Note que, devido ao intervalo de valores que  $x$  pode assumir, dados em (4.25) e (4.26), as expressões em (4.40), com uso das propriedades de função pares e ímpares, são iguais, e portanto fornecem apenas uma expressão para função de onda:

$$\Psi = D\left[\frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(k|x|) + \cos(kx)\right], \quad \text{para } -L \leq x \leq L \quad (4.41)$$

Como  $\Psi(-x) = \Psi(x)$ , caracterizando uma função par, usamos a denominação *soluções pares* para esta solução.

Uma vez que a energia para o sistema é dada em função de  $k$ , tal energia é fornecida através da análise gráfica da expressão transcendental (4.39).

**Figura 5** – Gráfico para equação (4.39).



Fonte: Adaptado de (GRIFFITHS, 2005).

Da figura extraímos que as energias permitidas são tais que  $kL \approx \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$

e, portanto:

$$E_n \approx \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \approx \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m(2L)^2}, \text{ com } n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.42)$$

### b) Soluções ímpares

Iniciemos nossa investigação a partir das soluções do tipo

$$\Psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{Para } -L \leq x < 0 \quad (4.25)$$

$$\Psi_2(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad \text{Para } 0 < x \leq L \quad (4.26)$$

e do sistema de equações que encontramos no tópico anterior:

$$\begin{cases} -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \\ C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0 \\ B = D \\ Ck - Ak = \gamma \cdot \Psi(0) \end{cases} \quad (4.34)$$

Utilizando a última equação de (4.34) obtemos:

$$k(C - A) = \gamma \cdot \Psi(0) \Rightarrow k(C - A) = \gamma \cdot B = \gamma \cdot D \quad (4.43)$$

Isolando  $B$  e depois  $D$  em (4.43) e substituindo nas duas primeiras igualdades de (4.34), encontramos:

$$-A \operatorname{sen}(kL) + (C - A) \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0 \quad (4.44)$$

$$C \operatorname{sen}(kL) + (C - A) \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0 \quad (4.45)$$

Estas duas últimas equações fornecem:

$$-A \left[ \operatorname{sen}(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \right] = -C \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \quad (4.46)$$

$$C \left[ \operatorname{sen}(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \right] = A \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \quad (4.47)$$

Definindo:

$$\sigma \equiv \operatorname{sen}(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

e

$$\alpha \equiv \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

(4.46) e (4.47) fornecem um sistema do qual extraímos que:

$$A = C \quad (4.48)$$

$$D = 0 \quad (4.49)$$

Substituindo  $D$  em (4.25) e (4.26) e sabendo que  $A = C$ :

$$\Psi_{1(x)} = A \operatorname{sen}(k x) \quad (4.50)$$

$$\Psi_{2(x)} = A \operatorname{sen}(k x) \quad (4.51)$$

Então, notando que (4.50) e (4.51) são iguais, podemos escrever apenas uma função de onda para o sistema:

$$\Psi_{(x)} = A \operatorname{sen}(k x), \text{ para } -L \leq x \leq +L \quad (4.52)$$

Dado o fato que  $\text{sen}(w)$ , onde  $w$  é uma variável qualquer, é uma função ímpar, este resultado recebe a denominação de *soluções ímpares*.

E a energia é da forma:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m(2L)^2} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (4.53)$$

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nossa solução do quebra-cabeça está baseada no paradigma representado pela teoria da Mecânica Quântica, e embora desde o começo tivéssemos uma noção prévia do produto final de nosso empreendimento, propor um sistema cujo Hamiltoniano pudesse ser desacoplado facilmente consiste um desafio considerável, caracterizando o que Thomas Kuhn conceituou com o termo ciência normal.

O resultado obtido via regras do paradigma da Mecânica Quântica está de acordo com o que é encontrado em materiais didáticos relacionados com o tema. É também importante destacar que o uso de um potencial de interação elétron-elétron na forma de uma função delta de Dirac permitiu o tratamento do problema de forma a gerar equações razoavelmente simples e analiticamente solúveis, possibilitando uma compreensão acerca do método de resolução de sistemas com elétrons interagentes sem maiores problemas, o que não é o caso para uma ampla variedade de funções que descrevem a interação elétron-elétron.

No mais, de acordo com o que foi discorrido sobre a anatomia da transposição didática de Chevallard, podemos inferir que nossa proposta de um sistema-modelo de dois elétrons interagentes é válida para ser tratada como uma transposição didática pois, segundo o olhar dessa teoria, nosso modelo partilha das características apontadas como necessárias para um saber sofrer transformação.

A energia de correlação faz parte do corpo teórico da Mecânica Quântica que, embora apresente debates internos entre os pesquisadores sobre sua interpretação, é uma teoria com valor reconhecido dentro da comunidade científica para o estudo do mundo microscópico, e sendo assim, é *consensual*.

Em relação aos outros critérios, identificamos uma *atualização moral* (a energia de correlação e elétrons interagentes aparecem nos estudos teóricos voltados para o projetos de artefatos eletrônicos de nanoescala, e portanto estão na base do progresso tecnológico que é de interesse da sociedade), uma *atualização biológica* (como anteriormente mencionado, a energia de correlação faz parte do escopo da teoria quântica vigente) e uma *operacionalidade* (nosso sistema-modelo permite a criação de atividades computacionais e exercícios sobre os conceitos de energia de correlação e elétrons interagentes, sendo possível para o sistema de

ensino realizar avaliações sobre estes tópicos que aparecem em cursos de Mecânica Quântica e similares).

O ponto referente à *criatividade didática* representa um problema para a transposição de saberes de Quântica no ensino médio, como aponta alguns trabalhos desta área voltados para tal nível de ensino (BROCKINGTON; PIETROCOLA, 2005 e SIQUEIRA; PIETROCOLA, 2006) uma vez que os conteúdos de Física Moderna e Contemporânea, e consequentemente Quântica, nem sempre são contemplados na sala de aula. Contudo, cientes de que em cursos de ensino superior das áreas de exatas já tem-se uma sólida tradição do ensino de Mecânica Quântica, o suficiente para que essa já possua elementos próprios de ensino, frutos de pesquisa voltadas para o seu ensino, assegura-se que nosso sistema-modelo possua a característica da *criatividade didática*, isto é, que é capaz de se tornar um saber exclusivo do ensino, utilizado como abordagem inicial para o aprendizado da energia de correlação.

Por último, dada a efetivação das outras características, assegura-se a *terapêutica*.

## REFERÊNCIAS

- ALCÁCER, L. **Introdução à química computacional**. Rio de Janeiro, IST press, 2007.
- ARFKEN, G.; WEBER, H. **Física matemática – métodos matemáticos para engenharia e física**. 6º ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- BAIERLE, R. J.; ROSSO, E. F. **Métodos de cálculo de estrutura eletrônica de materiais nanoestruturados**. Ciência e Natura, Santa Maria, V. 29, pp. 43-57, 2007.
- BASTOS, C. M. O. **Método de Hartree-Fock**. 2015. Disponível em <<http://www.ifsc.usp.br/~strontium/Teaching/Material2015-2%20SFI5814%20Atomicamolecular/Seminario%20-%20Carlos%20-%20Hartree-Fock.pdf>>. Acesso em 01 de agosto de 2019.
- BEZERRA, I. S. O. **Otimização da Distribuição em Orbitais e Parametrização de Primitivas Gaussianas para o Modelo de Hartree-Fock por Algoritmos Evolucionários**. Dissertação de Mestrado – Pontifícia Universidade Católica (PUC), Rio de Janeiro, 2009.
- BROCKINGTON, G.; PIETROCOLA, M. **Serão as regras da transposição didática aplicáveis aos conceitos de física moderna?**. Investigações em Ensino de Ciências, v.10, pp. 387-404, 2005.
- CHEVALLARD, Y. **Sobre a teoria da transposição didática: algumas considerações introdutórias**. Revista de Educação, Ciências e Matemática, v.3, n.2, pp.1-14, mai/ago, 2013.
- CUSTODIO R. **Uma forma simplificada de deduzir as equações de Hartree e Hartree-Fock**. Química Nova, vol.38, n.7, pp.995-1001, 2015.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física quântica – átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.
- GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

GRIFFITHS, D.J.. **Instructor's Solutions Manual: Introduction to Quantum Mechanics**. Estados Unidos: Pearson education, 2005.

JARDIM, L. M.; CAMARGO, S.; ZIMER, T. T. B.. **Transposição didática no ensino de ciências: diferentes olhares**. EDUCERE XII Congresso Nacional de Educação, Paraná, 2015.

KUHN, T. S.. **A estrutura das revoluções científicas**. São Paulo, Editora Perspectiva, 1998.

MARQUES, N. L. R. **Transposição Didática dos Saberes**. Disponível em <[https://www.nelsonreyes.com.br/Transposi%C3%A7%C3%A3o%20Did%C3%A1tica\\_10%C2%BA\\_Simp.pdf](https://www.nelsonreyes.com.br/Transposi%C3%A7%C3%A3o%20Did%C3%A1tica_10%C2%BA_Simp.pdf)>. Acesso em 10. ago. 2019.

MENDONÇA, A. L. O. **O legado de Thomas Kuhn após cinquenta anos**. Scientiae Studia, v.10, n.3, pp.535-50, 2012.

MOREIRA, A. C. L.; SILVA, J. R.. **Evitando funções especiais no método de Hartree-Fock**. ReBEQ, Vol. 11, n.01. Ed. Átomos, São Paulo, 2016.

MUTLAQ, M. F. P. **Revolução científica e destruição criadora: relação entre a filosofia da ciência de Thomas Kuhn e o pensamento da economia por Joseph Schumpeter**. Dissertação de mestrado – Pontifícia Universidade Católica, Rio Grande do Sul, 2015.

REAMAT. **Transformada de Laplace Um Livro Colaborativo**. 2018. Disponível em <https://www.ufrgs.br/reamat/TransformadasIntegrais/livro-tl/main.html>. Acesso em: 10 ago. 2019.

SANTOS, P. S. **Estudo dos mecanismos de formação das espécies PN e NS no meio interestelar, em cometas e atmosferas planetárias**. Dissertação de mestrado. PUC-Rio. 2009.

SIQUEIRA, M.; PIETROCOLA, M.. **A transposição didática aplicada a teoria contemporânea: a física de partículas elementares no ensino médio**. X Encontro de Pesquisa em Ensino de Física, Paraná, 2006.

## APÊNDICE A: DETALHAMENTO DOS CÁLCULOS

Apresentamos neste apêndice o detalhamento dos cálculos realizados ao longo da monografia.

### ❖ Seção 4.1: Desacoplando o sistema

Partimos de

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \beta \delta(x_1 - x_2) \quad (1)$$

Definindo:

$$\begin{cases} \hat{x}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 + \hat{x}_2) \\ \hat{x}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \end{cases} \quad (2)$$

Da última sentença de (2) obtemos:

$$x_1 - x_2 = \sqrt{2}x_- \quad (3)$$

Usando (3) no último termo de (1) podemos escrever

$$\beta \delta(x_1 - x_2) = \beta \delta(\sqrt{2}x_-) = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-) \quad (4)$$

Derivando e multiplicando por  $m$  as sentenças de (2) obtemos:

$$m\hat{x}_+ = \frac{m}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 + \hat{x}_2) \Rightarrow \hat{p}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_1 + \hat{p}_2) \quad (5)$$

$$m\hat{x}_- = \frac{m}{\sqrt{2}}(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \Rightarrow \hat{p}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_1 - \hat{p}_2) \quad (6)$$

Elevando (5) e (6) ao quadrado e somando temos que:

$$\hat{p}_+^2 + \hat{p}_-^2 = \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \quad (7)$$

Dividindo (7) por  $2m$ :

$$\frac{1}{2m}(\hat{p}_+^2 + \hat{p}_-^2) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) \quad (8)$$

Usando (8) e (4) em (1):

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{p}_+^2}{2m} \right) + \left( \frac{\hat{p}_-^2}{2m} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-) \right) \equiv \hat{H}_+ + \hat{H}_- \quad (9)$$

Onde  $\hat{H}_+ = \frac{\hat{p}_+^2}{2m}$  e  $\hat{H}_- = \frac{\hat{p}_-^2}{2m} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \delta(x_-)$ .

#### ❖ Seção 4.2: Solução da equação de Schroedinger para o poço quadrado infinito

Vamos resolver a equação de Schroedinger para  $\Psi(x)$ , considerando

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2 \\ 0 & , \text{ caso contrário} \end{cases}$$

Equação de Schroedinger independente do tempo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \rightarrow \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2} \Psi(x) \quad (1)$$

Solução por tentativa:

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (2)$$

Testando:

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi(x)}{dx} &= kA \cos(kx) - kB \sin(kx) \\ \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} &= -k^2 A \sin(kx) - k^2 B \cos(kx) = -k^2 [A \sin(kx) + B \cos(kx)] = -k^2 \Psi(x) \end{aligned}$$

Logo, a solução tentativa (2) funciona desde que

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3)$$

- *Condições de contorno:*

Como a partícula não pode ser localizada fora do intervalo  $-a/2 < x < +a/2$ , temos:

$$\Psi(x) = 0, \quad x = \pm a/2 \quad (4)$$

Aplicando as condições de contorno em  $x = +a/2$ :

$$\Psi(x) = A \sin\left(k \frac{a}{2}\right) + B \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (5)$$

Em  $x = -a/2$ , temos:

$$\Psi(x) = A \sin\left(-k \frac{a}{2}\right) + B \cos\left(-k \frac{a}{2}\right) = 0$$

ou

$$-A \sin\left(k \frac{a}{2}\right) + B \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (6)$$

Somando (5) e (6), temos:

$$2B \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (7)$$

Subtraindo-as:

$$2A \sin\left(k \frac{a}{2}\right) = 0 \quad (8)$$

Não há valores de  $k$  para os quais tenhamos  $\cos(ka/2)$  e  $\sin(ka/2)$  simultaneamente nulos, e também não queremos ter ambos  $A$  e  $B$  iguais a zero, pois isso implicaria em uma função de onda nula em todos os pontos (EISBERG, RESNICK, 1979). Nesse caso, podemos satisfazer (7) e (8) escolhendo valores para  $k$  em uma equação e os valores dos coeficientes ( $A$  ou  $B$ ) iguais à zero na outra (EISBERG, RESNICK, 1979), isto é, escolhemos

$$A=0 \text{ e } \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (9)$$

ou

$$B=0 \text{ e } \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad (10)$$

As condições às quais  $k$  deve satisfazer em (9) para que tenhamos o cosseno nulo são:

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$$

É conveniente expressar isto na forma (EISBERG, RESNICK, 1979)

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{com } n = 1, 3, 5, \dots \quad (11)$$

Analogamente, para que tenhamos seno nulo na equação (10),  $k$  deve obedecer a seguinte restrição (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$$

Isto também pode ser expresso na forma (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{com } n = 2, 4, 6, \dots \quad (12)$$

Por fim, temos (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$\psi_n(x) = B_n \cos(k_n x), \quad \text{onde } k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n=1, 3, 5, \dots \quad (13)$$

e

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x), \quad \text{onde } k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n=2, 4, 6, \dots \quad (14)$$

Utilizando a relação  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  e a expressão  $k_n = \frac{n\pi}{a}$  em (13) e (14) para os valores possíveis de  $n$ , obtemos (EISBERG, RESNICK, 1979):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n=1, 2, 3, 4, 5, \dots \quad (15)$$

### ❖ 4.3 Solução da equação de Schroedinger para um potencial barreira delta de Dirac

#### a) Soluções pares

$$\Psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{Para } -L \leq x < 0 \quad (1)$$

$$\Psi_2(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad \text{Para } 0 < x \leq L \quad (2)$$

Aplicando as condições de contorno para o poço quadrado infinito:

$$\Psi_1(-L) = -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \quad (3)$$

$$\Psi_2(L) = C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0 \quad (4)$$

Continuidade em  $x = 0$  ( $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$ ):

$$\begin{aligned} -A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0) &= C \sin(k \cdot 0) + D \cos(k \cdot 0) \\ B &= D \end{aligned} \quad (5)$$

Para descontinuidade da primeira derivada em  $x = 0$  e usando a propriedade de filtragem da delta de Dirac, temos:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial^2 x} dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \beta \cdot \delta(x) \cdot \Psi(x) dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E \cdot \Psi(x) dx \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial^2 x} dx + \beta \cdot \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \cdot \Psi(x) dx = 0 \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[ \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} - \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{-\varepsilon} \right] = -\beta \cdot \Psi(0) \\
 & \left[ \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} - \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \Big|_{-\varepsilon} \right] = \frac{2m\beta}{\hbar^2} \cdot \Psi(0) \\
 & \Psi'_2(x) \Big|_{\varepsilon} - \Psi'_1(x) \Big|_{-\varepsilon} = \frac{2m\beta}{\hbar^2} \cdot \Psi(0) \tag{6}
 \end{aligned}$$

Onde  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Resolvendo as derivadas:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \Psi_2(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = \frac{\partial (C \sin(kx) + D \cos(kx))}{\partial x} \Big|_0 \\
 \bullet & \frac{\partial \Psi_2(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = Ck \cos(k \cdot 0) - Dk \sin(k \cdot 0) \\
 & \frac{\partial \Psi_2(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = Ck
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \Psi_1(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = \frac{\partial (A \sin(kx) + B \cos(kx))}{\partial x} \Big|_0 \\
 \bullet & \frac{\partial \Psi_1(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = Ak \cos(k \cdot 0) - Bk \sin(k \cdot 0) \\
 & \frac{\partial \Psi_1(x)}{\partial x} \Big|_{\varepsilon} = Ak
 \end{aligned}$$

Substituindo os resultados encontrados em (6):

$$Ck - Ak = \gamma \Psi(0) ,$$

onde  $\gamma = \frac{2m\beta}{\hbar^2}$ .

Sumarizando os resultados encontrados:

$$\text{i)} -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0$$

$$\text{ii)} C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0$$

$$\text{iii)} B = D \quad (\text{continuidade em } x = 0)$$

$$\text{iv)} kC - kA = \gamma \Psi(0) \quad (\text{descontinuidade da primeira derivada em } x = 0)$$

Ou

$$\text{i)} -A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0$$

$$\text{ii)} C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0$$

$$\text{iii)} B = D$$

$$\text{iv)} k(C - A) = \gamma \cdot \Psi(0) \Rightarrow k(C - A) = \gamma \cdot B = \gamma \cdot D$$

Onde usamos (1) e (2) para calcular  $\Psi(0)$  e a continuidade em  $x = 0$  ( $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$ ).

Lembrando que temos

$$\Psi_1 = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{Lado esquerdo do poço}$$

$$\Psi_2 = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad \text{Lado direito do poço}$$

Utilizando iii) reescrevemos as expressões acima como:

$$A \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (7)$$

$$C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (8)$$

Utilizando i em (7)

$$-A \sin(kL) + D \cos(kL) = 0 \Rightarrow A \sin(kL) = D \cos(kL) \Rightarrow A = D \cot g(kL)$$

$$C \sin(kx) + D \cos(kx)$$

Utilizando (7) e a expressão encontrada para A:

$$D \cot g(kL) \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (9)$$

$$C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (10)$$

Utilizando iv):

$$C - A = \frac{\gamma \cdot D}{k} \Rightarrow C = \frac{\gamma \cdot D}{k} + A \Rightarrow C = D \cot g(kL) + \frac{\gamma \cdot D}{k}$$

Usando a expressão para C em (10) e colocando D em evidência:

$$\Psi_1 = D [\cot g(kL) \cdot \sin(kx) + \cos(kx)] \quad (11)$$

$$\Psi_2 = D \left[ \cot g(kL) \cdot \text{sen}(kx) + \frac{\gamma}{k} \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \quad (12)$$

Utilizando ii e a expressão encontrada para C :

$$\begin{aligned} \left[ D \cot g(kL) + \frac{\gamma}{k} D \right] \cdot \text{sen}(kL) + D \cos(kL) &= 0 \\ D \frac{\cos(kL)}{\text{sen}(kL)} \cdot \text{sen}(kL) + \frac{\gamma}{k} D \cdot \text{sen}(kL) + D \cos(kL) &= 0 \\ 2D \cos(kL) + \frac{\gamma}{k} D \cdot \text{sen}(kL) &= 0 \\ 2k = -\gamma \text{tg}(kL) \Rightarrow \text{tg}(kL) = \frac{-2k}{\gamma} \Rightarrow \cot g(kL) = \frac{-\gamma}{2k} \end{aligned} \quad (13)$$

Usando o resultado obtido para  $\cot g(kL)$  , (11) e (12):

$$\begin{cases} \Psi_1 = D \left[ \frac{-\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \\ \Psi_2 = D \left[ \frac{-\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \frac{\gamma}{k} \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \\ \Psi_1 = D \left[ \frac{-\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \\ \Psi_2 = D \left[ \frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \end{cases}$$

Note que, devido ao intervalo de valores que x pode assumir, dados em (1) e (2), as expressões acima, com uso das propriedades de função pares e ímpares, são iguais, e portanto fornecem apenas uma expressão para função de onda. Observe:

$$\begin{cases} \Psi_1(-x) = D \left[ \frac{-\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(-k|x|) + \cos(-kx) \right] = D \left[ \frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(k|x|) + \cos(kx) \right] \\ \Psi_2(x) = D \left[ \frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(kx) + \cos(kx) \right] \end{cases}$$

Logo

$$\Psi_1 = \Psi_2$$

$$\Psi = D \left[ \frac{\gamma}{2k} \cdot \text{sen}(k|x|) + \cos(kx) \right], \quad \text{para } -L \leq x \leq L \quad (14)$$

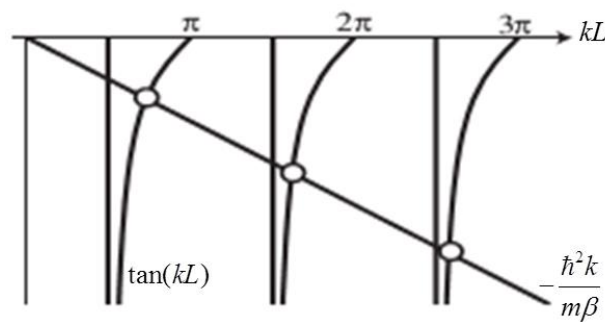
Como  $\Psi(-x) = \Psi(x)$ , caracterizando uma função par, usamos a denominação *soluções pares* para esta solução.

A energia para as soluções pares é dada pela solução da equação transcendental (veja 13):

$$\operatorname{tg}(kL) = \frac{-2k}{\gamma} \quad (15)$$

Graficamente

**Figura 6** – Gráfico para equação (15).



Fonte: Adaptado de (GRIFFITHS, 2005).

Da figura extraímos que as energias permitidas são tais que  $kL \approx \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$  e, portanto:

$$E_n \approx \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \approx \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m(2L)^2}, \text{ com } n=1, 3, 5, \dots \quad (16)$$

### **b) Soluções ímpares**

Utilizaremos novamente o seguinte conjunto de equações:

- i)  $-A \operatorname{sen}(kL) + B \cos(kL) = 0$
- ii)  $C \operatorname{sen}(kL) + D \cos(kL) = 0$
- iii)  $B = D$
- iv)  $k(C - A) = \gamma \cdot \Psi(0) \Rightarrow k(C - A) = \gamma \cdot B = \gamma \cdot D$

E as seguintes expressões para as funções de onda:

$$A \operatorname{sen}(kx) + B \cos(kx) \quad \text{Lado esquerdo do poço}$$

$$C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad \text{Lado direito do poço}$$

Utilizando iii)

$$A \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (1)$$

$$C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (2)$$

Utilizando i) e ii):

$$-A \sin(kL) + D \cos(kL) = 0$$

$$C \sin(kL) + D \cos(kL) = 0$$

Utilizando iv)

$$C - A = \frac{\gamma \cdot D}{k} \Rightarrow D = (C - A) \cdot \frac{k}{\gamma}$$

Temos então:

$$-A \sin(kL) + (C - A) \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0 \quad (3)$$

$$C \sin(kL) + (C - A) \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0 \quad (4)$$

Continuando:

$$-A \sin(kL) + C \frac{k}{\gamma} \cos(kL) - A \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0$$

$$C \sin(kL) + C \frac{k}{\gamma} \cos(kL) - A \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL) = 0$$

Agrupando e isolando:

$$-A \left[ \sin(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \right] = -C \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

$$C \left[ \sin(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL) \right] = A \cdot \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

Definindo:

$$\sigma \equiv \sin(kL) + \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

e

$$\alpha \equiv \frac{k}{\gamma} \cos(kL)$$

Temos:

$$\begin{cases} -A\sigma = -C\alpha \\ C\sigma = A\alpha \end{cases}$$

Deste sistema obtemos que

$$A = C$$

Substituindo este resultado em iv):

$$k(C - A) = \gamma \cdot D$$

$$k \cdot 0 = \gamma \cdot D$$

$$D = 0$$

Substituindo  $D$  em (1) e (2) e sabendo que  $A = C$ :

$$\Psi_1 = A \sin(kx)$$

$$\Psi_2 = A \sin(kx)$$

Logo:

$$\Psi_1 = \Psi_2 = A \sin(kx)$$

E como o seno trata-se de uma função ímpar, denominamos tal resultado como *soluções ímpares*.

Assim, como  $\Psi_2(L) = 0$ , então temos que para qualquer  $A$  não nulo  $A \sin(kL) = 0$  e, portanto,  $k = \frac{n\pi}{L}$ . Segue que:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{4n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2L)^2} = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2L)^2} = \frac{\bar{n}^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2L)^2}, \quad \bar{n} = 2, 4, 6, \dots$$

Onde multiplicamos por 4 (numerador e denominador) apenas para deixar a energia no formato usual dos manuais didáticos.