



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ
FACULDADE DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIAS E LETRAS DE IGUATU
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

FRANCISCO RAMON PEREIRA DO RÊGO

**ASPECTOS HISTÓRICOS, CONCEITUAIS E TECNOLÓGICOS DA MECÂNICA
QUÂNTICA E O SEU ENSINO NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO
CEARÁ**

**IGUATU-CEARÁ
2018**

FRANCISCO RAMON PEREIRA DO RÊGO

ASPECTOS HISTÓRICOS, CONCEITUAIS E TECNOLÓGICOS DA MECÂNICA
QUÂNTICA E O SEU ENSINO NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO
CEARÁ

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física da Faculdade de Educação, Ciências e Letras de Iguatu da Universidade Estadual do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de licenciado em Física.

Orientador: Prof. Dr. Celio Rodrigues Muniz.

Co-orientador: Prof. Ms. Cristiano Balbino da Silva

IGUATU-CEARÁ

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Universidade Estadual do Ceará

Sistema de Bibliotecas

Rego, Francisco Ramon Pereira.

Aspectos históricos, conceituais e tecnológicos da mecânica quântica e o seu ensino nos cursos de licenciatura em física no Ceará [recurso eletrônico] / Francisco Ramon Pereira Rego. - 2018.

1 CD-ROM: il.; 4 * pol.

CD-ROM contendo o arquivo no formato PDF do trabalho acadêmico com 53 folhas, acondicionado em caixa de DVD Slim (19 x 14 cm x 7 mm).

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Estadual do Ceará, Faculdade de Educação, Ciências e Letras de Iguatu, Graduação em Física, Iguatú, 2018.

Orientação: Prof. Dr. Celio Rodrigues Muniz.

Coorientação: Prof. Me. Cristiano Balbino da Silva.

1. Mecânica Quântica. 2. Ensino de Física. 3. Espectroscopia. 4. DFT. I. Título.

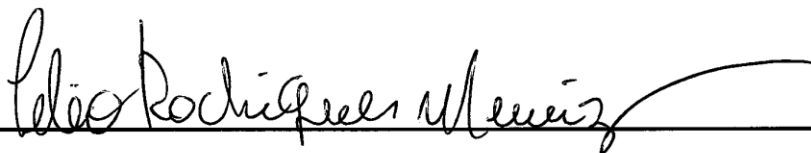
FRANCISCO RAMON PEREIRA DO RÊGO

ASPECTOS HISTÓRICOS, CONCEITUAIS E TECNOLÓGICOS DA MECÂNICA
QUÂNTICA E O SEU ENSINO NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO
CEARÁ

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Curso de Graduação em
Física da Faculdade de Educação,
Ciências e Letras de Iguatu da
Universidade Estadual do Ceará, como
requisito parcial à obtenção do grau de
licenciado em Física.

Aprovada em: 27 de novembro de 2018

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Celio Rodrigues Muniz (Orientador)

Faculdade de Educação, Ciências e Letras de Iguatu – FECLI

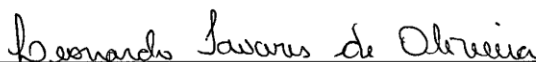
Universidade Estadual do Ceará – UECE



Profa. Dra. Rocicler Oliveira Holanda

Faculdade de Educação, Ciências e Letras do Sertão Central – FECLESC

Universidade Estadual do Ceará – UECE



Prof. Ms. Leonardo Tavares de Oliveira

Faculdade de Educação, Ciências e Letras de Iguatu – FECLI

Universidade Estadual do Ceará – UECE

A todos que acreditam no poder transformador da educação; que a vejam como principal ferramenta de resgate de uma sociedade necessitada.

AGRADECIMENTOS

Ao orientador professor Dr. Celio Muniz, pela determinação, boa vontade, cobrança e grande ajuda na conclusão deste trabalho.

Ao professor coordenador professor Ms. Leonardo Tavares, por sempre está à disposição e demonstrar preocupação em relação as dificuldades enfrentadas por mim.

Ao professor co – orientador Ms. Cristiano Balbino, por ter me ajudado nas correções, produção de imagens entre muitas outras coisas.

À professora Dra. Rocicler Holanda, por me fazer acreditar que tudo é possível quando se tem dedicação e também por seus importantes ensinamentos.

Ao professor Ms. José Carlos, grande amigo que sempre acreditou e me incentivou.

Ao meus estimados colegas e amigos de sala Iuri Leandro, Regilânia Oliveira e Antonio Neto que também sempre estiveram a disposição apoiando e ajudando.

À professora Dra. Lázara Castrillo, que durante toda essa trajetória também contribuiu muito para minha formação.

À minha querida e amada Mãe Ducilene (Duci), que sempre acreditou e esteve manifestando palavras de carinho e confiança, mesmo estando longe.

Ao meu Pai professor Cláudio Pinto, que me serviu de exemplo e dentro do possível me ajudou para que eu alcançasse o resultado positivo.

Às minhas queridas e amadas Tias Luiza Rêgo e Maria Socorro (Socorrinha), por sempre me lembrarem da importância de minha formação, assim me conduzindo para a direção correta.

À minha amada e querida Cleidiane Araújo, que sempre escutou meus desabafos e me apoiou em momentos difíceis, por incontáveis vezes.

Ao meu primo, Alessandro Pinto e sua esposa Sara do Vale, por serem grandes amigos e por sempre estarem a disposição e de portas abertas para me receber.

Ao meu irmão, José Pinto (Zeca Pinto), que vivenciou e testemunhou diversas dificuldades enfrentadas, e a todo momento manteve a confiança em mim.

Enfim, agradecer a todos os meus amigos (as) pessoais, colegas de profissão e do curso de física que de alguma maneira contribuíram para a concretização deste momento tão importante em formação e vida pessoal.

“A vantagem de ter péssima memória é divertir-se muitas vezes com as mesmas coisas boas como se fosse a primeira vez.”

(Friedrich Nietzsche)

RESUMO

O ensino da disciplina de Mecânica Quântica nos cursos superiores de Licenciatura em Física, no estado do Ceará, apresenta-se precário na maioria dos casos, ocasionando sérios problemas como a má formação do professor de física, que passa a exercer sua profissão na educação básica e deixa de abordar importantes temas contemporâneos relacionados ao desenvolvimento tecnológico, omitindo o caráter revolucionário que a Física Moderna e Contemporânea possui. Neste trabalho, apresentamos aspectos históricos e conceituais de forma contextualizada dentro do desenvolvimento tecnológico em que a Mecânica Quântica está inserida, de forma a enfatizar a importância de suas diversas aplicações como, por exemplo, a utilização das técnicas de espectroscopia e de modelos computacionais que utilizam a Teoria do Funcional de Densidade (DFT), que estão em grande crescimento na ciência atual e que possuem como pilar principal os princípios da Mecânica Quântica, contribuindo para a evolução de diversos setores da sociedade contemporânea, inclusive na área médica e tecnológica. Para isso se fez necessário, em um primeiro momento, uma análise do desenvolvimento histórico da Mecânica Quântica. Após essa discussão, foram feitas buscas pelas grades curriculares das principais instituições de ensino superior do Ceará e, em seguida, a aplicação de um questionário para professores pesquisadores acerca da importância do conhecimento de conceitos relacionados à Mecânica Quântica em geral e à Teoria do Funcional de Densidade em particular.

Palavras-chave: Mecânica Quântica. Ensino de Física. Espectroscopia. DFT

ABSTRACT

The teaching of the discipline of Quantum Mechanics in the undergraduate courses in Physics in the state of Ceará is precarious in most cases, causing serious problems such as the poor formation of the Physics Professor, who starts to practice his profession in basic education and fails to address important contemporary issues related to technological development, omitting the revolutionary character that the development of Modern and Contemporary Physics has. In this work, we present historical and conceptual aspects in a contextualized way within the technological development, in which quantum mechanics is inserted, in order to emphasize the importance of its various applications, such as the use of spectroscopy techniques and Functional Theory (DFT), which are in great growth in the current science and that have as main pillar the principles of Quantum Mechanics, contributing to the evolution of diverse sectors of the current society, including in the medical area. For this, an analysis of the development of Quantum Mechanics was firstly necessary. After this discussion, searches were made of the curricular grade of the main institutions of higher education in Ceará and then the application of a questionnaire to researcher professors about the importance of knowledge of concepts related to Quantum Mechanics in general and to Functional Theory of Density in particular.

Keywords: Quantum Mechanics. Teaching of physics. Spectroscopy. DFT.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Sólido molecular	23	23
Figura 2 –	Sólido iônico	23	23
Figura 3 –	Sólido metálico	24	24
Figura 4 –	Sólido covalente	24	24
Figura 5 –	Graus de liberdade de uma molécula	25	25
Figura 6 –	Rotações dos 3N graus de liberdade (a) duas para linear e (b) três para não - linear	26	26
Figura 7 –	Características do espectro eletromagnético	28	28
Figura 8 –	Estrutura molecular da molécula: a) D-Leucina e b) L- Leucina	30	31
Figura 9 –	Comparação entre os espectro RAMAN calculados do aminoácido D- Leucina e L - Leucina.....	31	31
Figura 10 –	Comparação entre os espectro infravermelho calculados do aminoácido D- Leucina e L – Leucina.....	31	31
Figura 11 –	Percentual em relação aos conceitos escolhidos	43	44

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
2.1	HISTÓRICO DA TEORIA QUÂNTICA	15
2.2	CONCEITOS E APLICAÇÕES DA TEORIA QUÂNTICA	21
2.2.1	Estrutura da Matéria	22
2.2.2	Vibrações em moléculas	24
2.2.3	Espectroscopia Vibracional	27
2.2.3.1	Espectro Infravermelho	
2.2.3.2	Espalhamento de radiação por moléculas: Espectroscopia Raman	
2.2.3.3	Comparação entre os espectro Raman calculados e espectro de absorção infravermelho calculados para os aminoácidos D e L-Leucina	
3	METODOLOGIA, RESULTADOS E DISCUSSÃO	34
3.1	ANÁLISE E DISCUSSÃO ACERCA DA DISCIPLINA DE MECÂNICA QUÂNTICA (MQ) NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO CEARÁ	35
3.2	ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO APLICADO PARA PROFESSORES E PESQUISADORES QUE ATUAM NAS INSTITUIÇÕES DE ENSINO DE NÍVEL SUPERIOR.	37
3.3	ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO APLICADO PARA PROFESSORES E PESQUISADORES QUE ATUAM NAS INSTITUIÇÕES DE ENSINO DE NÍVEL SUPERIOR	
4	CONCLUSÕES	43
	REFERÊNCIAS	45
	APÊNDICE	47
	APÊNDICE A – FORMULÁRIO DE PERGUNTAS	48
	ANEXOS	50
	ANEXO A - GRADE CURRICULAR UECE – FECLI, FLUXO 2002.2	51
	ANEXO B - GRADE CURRICULAR UECE – FECLI, FLUXO 2008.1	52
	ANEXO C - GRADE CURRICULAR UECE – FECLI, FLUXO 2012.1	53

1 INTRODUÇÃO

A Física Moderna e Contemporânea (FMC) envolve todo o desenvolvimento tecnológico recente. As descobertas que foram feitas ao longo dos séculos XX e XXI impactaram demasiadamente todos os segmentos da sociedade, assim como a própria física, alterando-a profundamente e evidentemente modificando a forma de se olhar a natureza, servindo como um novo marco no que se refere ao desenvolvimento tecnológico e social, visto que, uma sociedade se desenvolve juntamente com aquilo que ela produz, material e culturalmente.

Quando se trata do ensino de FMC na educação básica, é notório a ausência de conteúdo dessa natureza na grade curricular, principalmente nas escolas públicas, o que podemos entender como reflexo da formação dos professores (embora o ensino de FMC não seja prioridade na maioria das escolas que buscam preparar os jovens para ter sucesso nos processos seletivos), acabando por omitir importantes descobertas realizadas, como, por exemplo, as do século XX.

Para o Ensino Médio meramente propedêutico atual, disciplinas científicas, como a Física, têm omitido os desenvolvimentos realizados durante o século XX e tratam de maneira enciclopédica e excessivamente dedutiva os conteúdos tradicionais. Para uma educação com o sentido que se deseja imprimir, só uma permanente revisão do que será tratado nas disciplinas garantirá atualização com o avanço do conhecimento científico e, em parte, com sua incorporação tecnológica. (BRASIL, 1999, p.209).

Percebemos na afirmação de Brasil (1999) que se faz necessário uma boa formação, principalmente no que se refere aos conhecimentos que motivaram as revoluções tecnológicas.

Nos PCN's + Ensino Médio podemos encontrar direcionamentos em relação ao ensino de FMC, quando deixa claro a interdisciplinaridade, uma vez que atualmente a FMC está intimamente relacionada com outras disciplinas, vejamos:

Os objetivos do Ensino Médio em cada área do conhecimento devem envolver, de forma combinada, o desenvolvimento de conhecimentos práticos, contextualizados, que respondam às necessidades da vida contemporânea, e o desenvolvimento de conhecimentos mais amplos e abstratos, que correspondam a uma cultura geral e a uma visão de mundo. (BRASIL, 1998, p. 06).

É evidente que, no atual contexto, as necessidades do mundo contemporâneo devem ter conexão com a ciência e tecnologia, as quais envolvem e influenciam toda a cultura do educando e profissionais da educação; inclusive competências do ensino de ciência e tecnologia constam nos PCN's:

Acompanhar o desenvolvimento tecnológico contemporâneo, por exemplo, tomando contato com os avanços das novas tecnologias na medicina, através de tomografias ou diferentes formas de diagnóstico; na agricultura, através das novas formas de conservação de alimentos com o uso das radiações; ou ainda, na área de comunicações, com os microcomputadores, CDs, DVDs, telefonia celular, TV a cabo. (BRASIL, 1999, p. 15).

A FMC representa fortemente o grande avanço da Ciência e Tecnologia referente aos últimos anos, evidentemente marcada pelas Teorias dos Quanta de Max Planck, juntamente com o surgimento das Teorias da Relatividade Restrita e Geral elaboradas por Albert Einstein no início do século XX. Não podemos deixar de lado os estudos realizados por Erwin Schrödinger e Werner Heisenberg, que contribuíram também com o crescimento da FMC. O conhecimento relativo a essa área inovadora fomenta e incentiva diversas linhas de pesquisa científica que impactam a sociedade de forma extraordinária, em todos os seus segmentos.

Evidenciada tal importância desse assunto, deve ser prioridade que nas Instituições de Ensino de Nível Superior (IES) o ensino de FMC seja realizado de maneira séria e comprometida, e é inadmissível a forma como é tratada as disciplinas a ela relacionadas. Observou-se que:

No ano passado, a revista Science dedicou boa parte de um volume ao tema Grandes Desafios do Ensino de Ciências [12] . Nas primeiras páginas deste material, Carl Wieman, Prêmio Nobel de Física, em 2001, diz com destaque, referindo-se ao ensino superior:

A transformação é possível se a universidade realmente quiser.

1. A maneira como a maioria das universidades de pesquisa ensina ciência na graduação é pior do que ineficaz. É não científica. ([12], p. 292)
2. Há toda uma indústria dedicada a medir quão importante é minha pesquisa, com fatores de impacto dos meus artigos e por aí vai. No entanto, nem sequer coletam dados sobre como estou ensinando. Isso não recebe atenção. ([12], p. 293)
3. Há muitos professores que acham totalmente apropriado dedicar mais tempo melhorando seu ensino, mas não é isso que se espera deles. ([12], ibid.). (MOREIRA, 2017, p. 10).

Apesar de a citação fazer referência às universidades estrangeiras, ela facilmente se estende às universidades de nosso país. Tomando como exemplo, as IES cearenses que possuem o curso de Licenciatura em Física deixam a desejar no

que se refere à oferta da disciplina de Mecânica Quântica, seja como optativa, seja como obrigatória.

O presente trabalho busca abordar a necessidade e importância do ensino de FMC, especificamente de Mecânica Quântica, nas instituições de nível superior, no intuito de mostrar que o desenvolvimento da ciência e tecnologia tem grande impacto na sociedade e que, se trabalhado com qualidade, principalmente nos cursos de ensino superior, os professores formados por estas instituições que atuarão na educação básica de ensino poderão incentivar estudantes na busca do conhecimento científico, uma vez que o ensino de física nas escolas de nível médio é precipuamente voltado para as teorias clássicas, fazendo com que o público deste sistema não tenha contato com temas referentes à física moderna.

Discutiremos também, de forma a ilustrar a importância da Mecânica Quântica na sociedade tecnológica atual em que vivemos, uma ferramenta teórico-computacional denominada Teoria do Funcional de Densidade (do inglês, Density Functional Theory - DFT), que é uma forma de descrever realisticamente um sistema físico com muitos elétrons, constituindo um dispositivo teórico e computacional com papel fundamental na condução de investigações experimentais acerca das propriedades da matéria em escala microscópica, e que foi eleito como um tema motivador para este trabalho, visto que essa teoria é norteada por conceitos fundamentais da mecânica quântica que, com suas sofisticadas formulações matemáticas e conceituais, causou grandes revoluções na Física Moderna.

Em seguida, fazemos um breve histórico do surgimento da MQ, abordando os principais acontecimentos que serviram de marco inicial para o seu surgimento, discutindo alguns aspectos conceituais da mesma, em especial no que se refere ao desenvolvimento da Teoria Quântica da matéria e da radiação, enfatizando algumas tecnologias empregadas em seu estudo.

Na realização deste trabalho, inicialmente foi feita uma pesquisa bibliográfica em relação aos aspectos históricos e conceituais da Mecânica Quântica, ao seu ensino nas IES e sobre a DFT, que é uma aplicação daquela disciplina, envolvendo o estudo da matéria no estado sólido. Em relação ainda à DFT, foi formulado um questionário direcionado a professores e pesquisadores cearenses que atuam no ensino superior na linha de pesquisa do estudo da matéria condensada, com perguntas relacionadas à sua importância e de conceitos fundamentais que sustentam tal teoria.

Após percorrer o contexto histórico e discutir os aspectos importantes da MQ, no capítulo três apresentaremos a metodologia utilizada na produção deste trabalho e também discussões relacionadas aos resultados encontrados, bem como reflexões acerca do tema pesquisado.

Enfim, na conclusão, será feita a análise das repostas do questionário enviado para os professores pesquisadores, objetivando detectar a confirmação ou não da importância e necessidade de se ter disciplinas de MQ na grade curricular dos cursos de ensino superior, sem deixar o caráter crítico, seja dos resultados ou da metodologia empregada pelo próprio autor, visto que como pesquisador não está isento de uma autocrítica.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, discutiremos alguns aspectos históricos e conceituais da FMC, especificamente no que se refere ao desenvolvimento da Teoria Quântica da matéria e da radiação, enfatizando algumas tecnologias empregadas em seu estudo, como a espectroscopia e a DFT.

2.1 HISTÓRICO DA TEORIA QUÂNTICA

A Mecânica Quântica teve de fato o seu início com Max Planck em 1900, quando este obteve sucesso na explicação do fenômeno de espectro do corpo negro, utilizando uma hipótese que não agradava nem mesmo a si próprio. Na verdade, isto foi devido à incapacidade de explicar de maneira clássica as experiências focadas na radiação desse tipo de sistema. (OSTERMANN, 1999)

Quando falamos em corpo negro, usualmente imaginamos objetos de cor preta, que absorvem quase toda a radiação incidente sobre ele, o que não é tão diferente da definição correta. Logo, definimos um corpo negro como sendo um objeto que absorve toda a radiação incidente sobre ele e que não reflete a radiação que recebeu. Baseado nessa definição, podemos imaginar um corpo negro de maneira diferente: um pequeno orifício feito em um objeto oco pode ser considerado aproximadamente como sendo um corpo negro, pois a radiação que adentrar através da cavidade, mesmo refletindo-se sucessivamente nas paredes do interior do corpo, terá pequena chance de passar de volta para o ambiente externo. É importante lembrar que esse corpo emite radiação térmica que depende tão somente da temperatura em que se encontra. Conforme a temperatura aumenta, o corpo passa a emitir luz na faixa do visível, seguindo a sequência de luz vermelha, amarela, azul e até mesmo branca (a temperaturas altíssimas). Essas radiações são emitidas através do orifício do objeto oco, após este ser submetido a temperaturas elevadas. Em suma, a cada temperatura temos um tipo de radiação diferente, a qual resulta de misturas bem definidas de radiações de diversos comprimentos de onda – o espectro de emissão do corpo negro – cada uma delas contribuindo proporcionalmente com certa quantidade de energia à energia total emitida pela cavidade, sendo possível ser medida experimentalmente. (BRENNAN, 2003)

Os cálculos utilizados através da física clássica mostram total desacordo com os dados encontrados, a partir das experiências realizadas. Planck só percebeu isso após sucessivas buscas infrutíferas, restando assim render-se a uma explicação *ad hoc*, que aparentemente seria impossível fisicamente. Assim, a quantização da energia começa a tomar o seu lugar na Física, conflitando com o caráter contínuo de energia até então defendido e tido como verdade. (NUSSENZVEIG, 2014)

Mesmo contra a vontade dos físicos da época, essa ideia passou a ser aceita de maneira provisória; acreditava-se, que essa quantização somente ocorreria nos osciladores eletrônicos atômicos, responsáveis em última instância pela absorção e emissão da radiação eletromagnética, a qual, entretanto, deveria obedecer à teoria do eletromagnetismo de James Clerk Maxwell. (CHIBENI, 2010)

Albert Einstein, no ano de 1905, propôs uma explicação (através do seu segundo artigo publicado nesse ano considerado milagroso) de um fenômeno descoberto por Heinrich Rudolf Hertz em 1887, conhecido depois como efeito fotoelétrico. Tal artigo expunha ideias que, de acordo com as teorias da física clássica, eram ainda mais radicais e inadmissíveis que as de Planck, pois nele afirma que esse modelo de quantização devia ser considerado, não apenas para oscilações eletrônicas, mas sim aplicado à energia eletromagnética livre. Tal efeito “consiste no favorecimento da emissão de raios catódicos (elétrons) propiciado pela incidência de luz sobre o cátodo” (CHIBENI, 2010, p.3).

Em seu trabalho publicado, Einstein afirmou que a energia de fato era quantizada e foi ainda além, mostrando que apenas o seu modelo explicava perfeitamente o fenômeno observado, através da colisão de diminutos fragmentos de energia radiante, denominado por ele como *quanta*, com os elétrons de um metal. Com seu modelo realizou previsões como a independência da energia do elétron emitido com a intensidade luminosa incidente; a frequência de corte; a de que elétrons deveriam ser ejetados instantaneamente após a incidência de radiação eletromagnética acima de determinada frequência. Essas previsões posteriormente foram comprovadas por um experimentalista de nome Robert Millikan, americano que realizou diversos experimentos de forma minuciosa no ano de 1914. Essa comprovação rendeu a Albert Einstein o Prêmio Nobel de Física em 1921. A Millikan o prêmio foi entregue em 1923 por ter determinado a razão entre a massa e a carga do elétron. (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2003)

Paralelamente, o cientista americano Arthur Compton detectou em 1923 um fenômeno que leva o seu nome: o *efeito Compton*. Este constitui-se na presença de um comprimento de onda maior da radiação espalhada que surge logo após a interação entre, por exemplo, um feixe de raios X e uma placa de grafite, deixando perplexa ainda mais a comunidade científica, que já havia estudado os raios X, considerados uma forma de onda eletromagnética por apresentar propriedades como difração e interferência. Essa radiação de comprimento maior, resultante do espalhamento, também só poderia ser explicada com o advento da quantização. Assim, visto que os raios X podem ser considerados um fluxo de partículas, pode-se inferir que, ao atingirem a placa e chocarem-se com os elétrons que pertencem à mesma, ocorre uma transferência de parte da energia e do *momentum* aos elétrons, com aquelas partículas sendo, portanto, refletidas com menor energia em relação à que possuem antes da colisão. Compton, como fizeram Einstein e Planck antes dele, usou a equação $E = hf$, (h é a constante de Planck e f é a frequência), que relaciona energia e frequência a essas partículas, e através deste raciocínio se torna possível calcular exatamente a energia perdida pelos raios X, evidenciando definitivamente o caráter corpuscular das ondas eletromagnéticas, denominadas pouco depois de *fótons*. Como consequência desse trabalho realizado por Compton, ele foi laureado com o Nobel no ano de 1927. (CHIBENI, 2010)

Ao longo da história da física diversos debates foram realizados, inclusive acerca da natureza da luz; com as descobertas realizadas, que foram até o momento apresentadas, a comunidade científica retorna ao debate travado no passado, pois questionamentos foram levantados a respeito de se as radiações eram constituídas por ondas ou por partículas. Optar por qualquer uma dessas representações na época seria recusar tudo aquilo que já havia sido descoberto, como por exemplo, a teoria do eletromagnetismo de Maxwell.

Ao analisar o movimento dos elétrons acelerados em torno do núcleo de um átomo, verifica-se que quando cargas são aceleradas, devido à emissão de radiação eletromagnética os níveis de energia diminuiriam, ocasionando assim na redução do raio de sua órbita. Fazendo os cálculos desta perda de energia nota-se que os elétrons colapsariam no núcleo em um intervalo de tempo muito pequeno. Outro fenômeno incomum aparece quando se estuda a luz emitida ou absorvida pelo átomo. Os resultados sugeriam ao dinamarquês Niels Bohr em 1913 que o elétron não poderia estar em qualquer órbita em torno do núcleo. Para solucionar o problema era

necessário assumir também que existiria uma órbita de raio mínimo, uma órbita fundamental em que o elétron só poderia mudar para uma órbita mais alta, evitando assim o colapso com o núcleo atômico. Como para cada órbita existe uma energia associada, Bohr verificou que as energias da luz emitida nas mudanças de órbitas seriam descontínuas, ou seja, quantizadas. Dessa forma o modelo apresentado estaria de acordo com a proposta feita em 1900 por Max Planck, quando sugeriu que um corpo negro emitiria quantidades discretas de energia. (GROOTE, 2001).

Mesmo que as duas concepções fossem totalmente inconciliáveis, a comunidade científica se viu obrigada a aceitar a quantização da matéria e da radiação, aquela constituída de átomos, e esta, de fótons. E isto permitiu grandes avanços como, por exemplo, na explicação do movimento Browniano (feita por Einstein, o que permitiu estimar com bastante acerto o tamanho real dos átomos) e o sucesso do modelo do átomo de Bohr, permitindo explicar a distribuição das linhas espectrais do hidrogênio. Mediante essas grandes contribuições e outras mais, não restou praticamente espaço para interrogações, ou seja, a matéria e a radiação são descontínuas.

Embora bem explicado, o átomo de Bohr foi aperfeiçoado ao máximo pela teoria quântica, a partir de algumas dúvidas que surgiram para o jovem francês Louis De Broglie, pois via com estranheza o fato de a quantização de energia ser aplicada às órbitas dos elétrons. Outro questionamento relacionava-se ao motivo pelo qual os elétrons poderiam orbitar apenas a distâncias bem definidas em torno do núcleo.

Intrigado com tais dúvidas, De Broglie resolve produzir sua tese de doutorado baseado nelas, e em busca de respostas levanta a hipótese de que partículas tais como elétron e o próton teriam uma onda “piloto” associada a elas. Como consequência de seu raciocínio, afirmou que os compostos da matéria poderiam comportar-se eventualmente como partícula ou onda, onde a energia dessa onda deveria também obedecer a equação que Einstein utilizou para calcular a energia de um fóton ($E = hf$). A sua ideia foi inclusive recebida por este cientista com grande entusiasmo, mesmo sem nenhuma evidência experimental direta. Após a apresentação de sua Tese de Doutorado, recebeu o título de Doutor no ano de 1924, e foi mais um dos grandes físicos a ganhar um Prêmio Nobel, após cinco anos. (CHIBENI, 2010)

A verificação da ideia de De Broglie poderia ser feita projetando-se um feixe de elétrons em um cristal e, como previsto por ele, seriam observados os efeitos de

interferência e difração, exatamente como no caso dos raios X. Curiosamente, esse experimento já havia sido realizado por Clinton Davisson e Charles Kunsman, mas a interpretação dada foi diferente. Em seguida, Davisson prontamente voltou a repetir o experimento que realizara antes, porém dessa vez com a assistência de Lester Germer, ao passo que na Inglaterra, em Cambridge, a dupla formada por George Thomson (filho de J.J Thomson, ganhador do Nobel em 1906 por ter provado que o elétron era uma partícula) e seu assistente Alexander Reid conduziram um experimento semelhante. Como esperado, ambas as duplas conseguiram detectar de forma precisa a interferência e a difração do elétron, ou seja, garantindo que o elétron possui propriedade ondulatória. Davisson e G. Thomson dividiram o Nobel em 1937. Assim, após a incorporação da ideia de De Broglie na teoria quântica completa, desenvolvida no ano de 1925 até 1926 por Heisenberg e Schrödinger, ela passou a ser levada a sério pela comunidade científica. (CHIBENI, 2010)

No ano de 1925, o cientista austríaco Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger apresentou a equação que possui o seu nome, a qual governa a evolução no tempo e no espaço de uma função de onda associada a uma partícula, assim marcando o início da Mecânica Quântica Moderna. Schrödinger acabou sendo laureado com o Nobel de 1933, juntamente com Paul Adrien Dirac, pela descoberta de novas formas produtivas de teoria atômica. (CHIBENI, 2010). O resultado reproduziu e explicou os resultados de Bohr para as energias do átomo de hidrogênio, como também as propriedades dos átomos em geral de maneira muito precisa, permitindo a abertura para uma nova descrição matemática de sólidos, líquidos, semicondutores, e assim em diante. (GROOT, 2001).

Na formulação de Schrödinger era impossível determinar a localização de uma partícula, já que esta se comportava como uma onda, a qual se distribui continuamente numa região extensa do espaço. Porém isso já havia sido percebido por W. Heisenberg, que usando uma formulação diferente determinou o princípio da incerteza. (GROOT, 2001). Tudo isso levou a interpretações que foram além do entendimento macroscópico do mundo. Mas o que era exatamente essa função de onda e o que ela fazia? A resposta foi fornecida por Max Born, utilizando a Interpretação Probabilística. Em 1926, ele postulou que o módulo quadrado da função de onda fornece a probabilidade de se encontrar uma partícula na vizinhança de um ponto P de coordenadas (x,y,z) , em um dado instante t, ou seja, a densidade de probabilidade. (GRIFFITHS, 2011).

A interpretação estatística apresenta um tipo de **indeterminação** dentro da mecânica quântica, pois mesmo que você saiba tudo o que a teoria tem a dizer sobre a partícula (isto é, sobre sua função de onda), você não pode prever com exatidão o resultado de um experimento simples para medir sua posição. Tudo que a mecânica quântica tem a fornecer é informação *estatística* sobre os resultados *possíveis*. (GRIFFITHS, 2011, p.6).

Porém a equação, apesar de ser uma grande descoberta e aparentemente simples, se mostrou complicada na resolução da maioria dos casos, apresentando soluções exatas apenas quando aplicada a partículas livres, ao oscilador harmônico simples e a átomos hidrogenóides, por exemplo. (MARQUES; BOTTI, 2006).

A partir dessa dificuldade, a busca por soluções possíveis inicia-se com a pesquisa de Walter Konh já nos anos 60 do século passado, que apresentou um artigo juntamente com Pierre Hohenberg, no qual visavam reformular a mecânica quântica, na perspectiva de usar o conceito de densidade eletrônica que se baseia, por sua vez, na função de onda. Esse foi o ponto de partida para a inovadora Teoria do Funcional de Densidade, que contribuiria para a determinação da estrutura eletrônica e de outras propriedades de átomos e moléculas. Atualmente, vários softwares e química computacional, como, por exemplo, o pacote GAUSSIAN, tem auxiliado no entendimento das propriedades da matéria, possibilidade de prever com certa precisão, propriedades vibracionais e estruturais de uma molécula, essa nova ferramenta tem grande aceitação e aplicabilidade na Física da Matéria Condensada e na química quântica. (MARQUES; BOTTI, 2006).

Como dito antes, a Equação de Schrödinger era restrita a bem poucos casos. Ao se aplicar a equação ao átomo de Hélio, com apenas um elétron a mais do que os átomos hidrogenóides, a solução da mesma tornava-se impossível de ser encontrada analiticamente. Isso se deve à adição de mais termos à equação, incluindo-se o referente à interação entre os dois elétrons. Para se ter uma ideia de quão dramática e inviável se torna sua manipulação para átomos mais complexos, o átomo de Nitrogênio, que possui 7 (sete) elétrons, considerando neste caso a resolução numérica e a armazenagem das informações em DVD's, por exemplo, seriam necessárias $1,6 \times 10^8$ toneladas desses discos. (MARQUES; BOTTI, 2006).

Konh e seu aluno Pierre sugeriram então apresentar o formalismo da densidade eletrônica como uma alternativa. Os funcionais de densidade foram definidos como grandezas físicas que podiam ser medidas, sabendo-se, também que se podia observar a energia total do sistema estudado. Foi então demonstrado que as

propriedades do estado fundamental de um sistema de muitos elétrons são determinadas unicamente por uma densidade eletrônica que depende apenas de três coordenadas espaciais, uma vez que a densidade de probabilidade, dependente do módulo quadrado da função de onda relacionada ao sistema, não depende do tempo para problemas estacionários.

Assim, a Teoria dos Funcionais de Densidade pode ser entendida de acordo com Marques e Botti (2006), como uma nova ferramenta bastante eficaz, simples e precisa, a qual nos permite investigar os fenômenos de natureza atômica e molecular, e de certa forma deve ser entendida como uma reformulação da mecânica quântica. Determinados sistemas são extremamente complexos e, assim, se fazem necessários novos métodos de investigação que permitam entender as propriedades dos átomos que estão envolvidos nestes processos. Ademais, a associação de métodos computacionais ao DFT possibilita a busca do entendimento de maneira mais clara e direta de determinados fenômenos do mundo microscópico. Após diversos estudos a respeito do DFT, em 1998, Walter Kohn e John Pople foram contemplados com o prêmio Nobel de Química, após evidenciarem a importância dos trabalhos que envolvem o uso da DFT.

2.2 CONCEITOS E APLICAÇÕES DA TEORIA QUÂNTICA

Evidentemente que a Física da Matéria Condensada é o ramo que mais possui contato com o desenvolvimento e inovações tecnológicas, como por exemplo a descoberta do transistor, investigações das propriedades óticas da matéria, o estudo das propriedades térmicas e magnéticas da matéria e a aplicação de raios – X na elucidação das estruturas dos materiais. Além disso possui forte interação com outras áreas: Mineralogia, Microeletrônica, Química, Biologia e etc. (FIGUEIREDO, 1985).

O espectro da radiação eletromagnética é resultado da oscilação de um campo magnético perpendicularmente ao campo elétrico, que também tem comportamento idêntico e combinados dessa forma possuem uma dada frequência. Essas ondas podem ser visíveis ou não, e isso dependerá de sua frequência, que pode ou não se encontrar na faixa do espectro eletromagnético correspondente à luz. A radiação eletromagnética interage facilmente com a matéria, permitindo uma análise detalhada desta no momento da verificação do espectro. (BASSI, 2001). Dessa forma, utilizando-se técnicas como a espectroscopia no infravermelho e a espectroscopia

Raman, pode-se obter informações importantes sobre a estrutura atômico-molecular do sistema investigado, possibilitando identificar propriedades vibracionais a partir do uso também da Teoria do Funcional de Densidade (DFT), que é, como já vimos, um método que envolve cálculos de primeiros princípios, que foram desenvolvidos a partir de fundamentos importantes da mecânica quântica. O DFT colhe informações de acordo com a análise da densidade eletrônica das moléculas, tratando das propriedades vibracionais nas moléculas e distribuição de energia potencial (PED).

2.2.1 Estrutura da Matéria

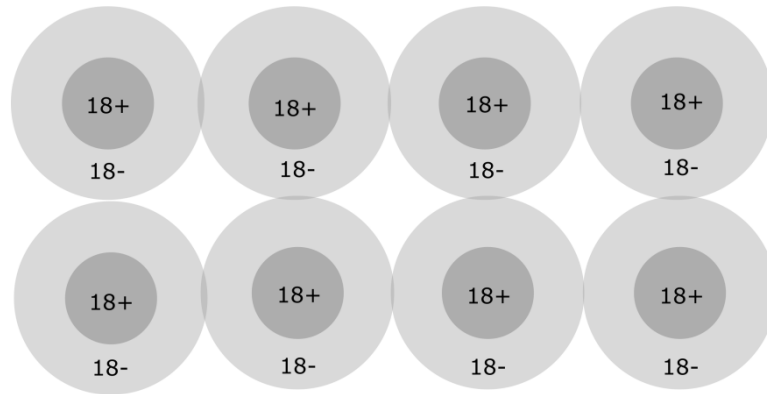
Toda a matéria é constituída por átomos, que se organizam das mais diversas formas, assim formando inúmeras substâncias, seja na fase sólida, líquida ou gasosa. A união de dois ou mais átomos formam uma molécula, e essa junção é possível devido à ligação entre tais partículas e, a depender da forma que as mantém unidas, definimos os diversos tipos. Trataremos especificamente do estado sólido, que compreende uma das áreas da Física Contemporânea que causa grande impacto na sociedade; evidentemente que isso não é por acaso, afinal é o ramo que mais reúne pesquisadores em todo mundo e não poderia ser diferente no Brasil. (FIGUEIREDO. 1985)

O sólido pode ser definido como uma rede cristalina de átomos ou moléculas, que se organizam de forma bastante regular, ou seja, possuindo uma geometria que chamamos de cristalina. Os sólidos cristalinos podem ser classificados de acordo com o tipo de ligações presentes entre os átomos.

Tipos de sólidos cristalinos

- Sólidos moleculares: constituídos por moléculas estáveis que mantêm sua individualidade, compostos por dipolos elétricos, ou seja, sempre atrativos; porém ao analisar a energia de ligação entre elas nota-se que é de baixa intensidade. (BRUM, 2013)

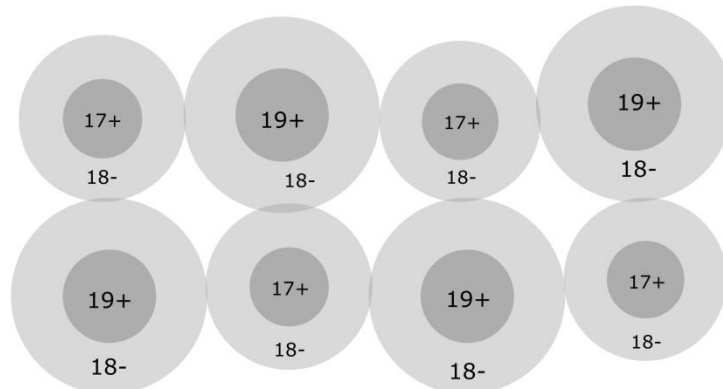
Figura 1 - Sólido molecular



Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape

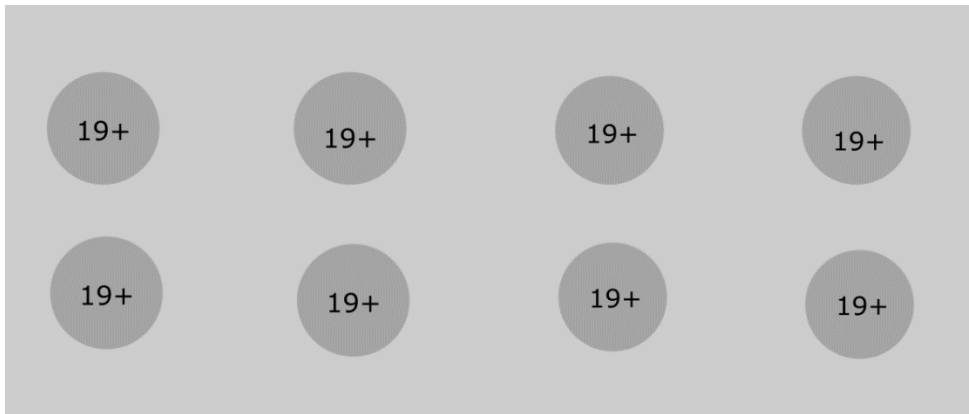
- Sólidos iônicos: constituídos por íons positivos e negativos de maneira alternada. Nesse tipo de sólido, as forças eletrostáticas são bastante intensas.

Figura 2 - Sólido iônico



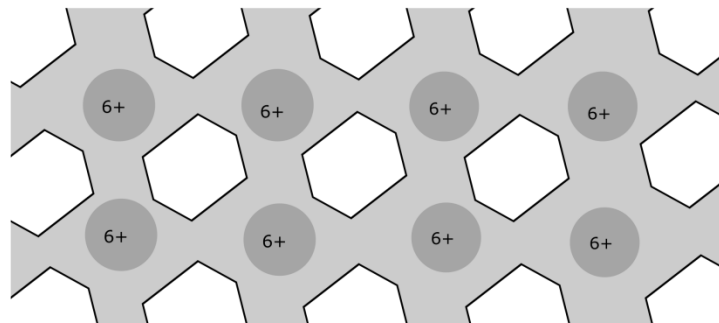
Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape

- Sólidos metálicos: neste sólido são poucos os elétrons encontrados na camada mais externa do metal, pois os átomos mais próximos da superfície do material possuem um déficit de cargas negativas. Essa estrutura é ligada a partir da formação de um “gás de cargas negativas” que atraem os íons.

Figura 3 - Sólido metálico

Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape

- Sólidos covalentes: são ligados por elétrons de valência, trocando essas cargas de maneira similar ao que ocorre em ligações covalentes em moléculas. Os materiais formados possuem uma ductibilidade maior, mas se caracterizam por serem péssimos condutores elétricos e de calor.

Figura 4 - Sólido covalente

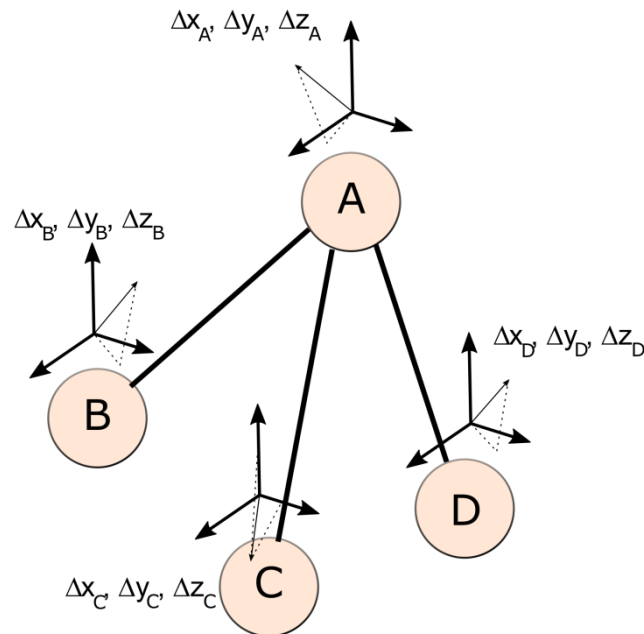
Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape

2.2.2 Vibrações em moléculas

As moléculas que são formadas por uma série de átomos nunca estão em repouso, visto que os átomos que as compõem encontram-se em frenético movimento devido à temperatura do sistema, e a esses movimentos chamamos de vibrações. Em qualquer molécula, mesmo nos sólidos, os átomos sofrem oscilações continuamente e, para descrevê-las, é preciso $3N$ coordenadas espaciais (x , y , z), com N sendo o número de átomos da molécula, ou seja, $3N$ graus de liberdade.

Um átomo que não está combinado com outro fica livre para mover-se nas dimensões espaciais, ou seja, em $3N$ graus de liberdade. Todavia, ainda que estes átomos sejam combinados, o sistema continuará a possuir os $3N$ graus de liberdade, porém cada um apresentará individualmente os graus de translação do centro de massa e graus de liberdade associados à rotação da molécula.

Figura 5 - Graus de liberdade de uma molécula

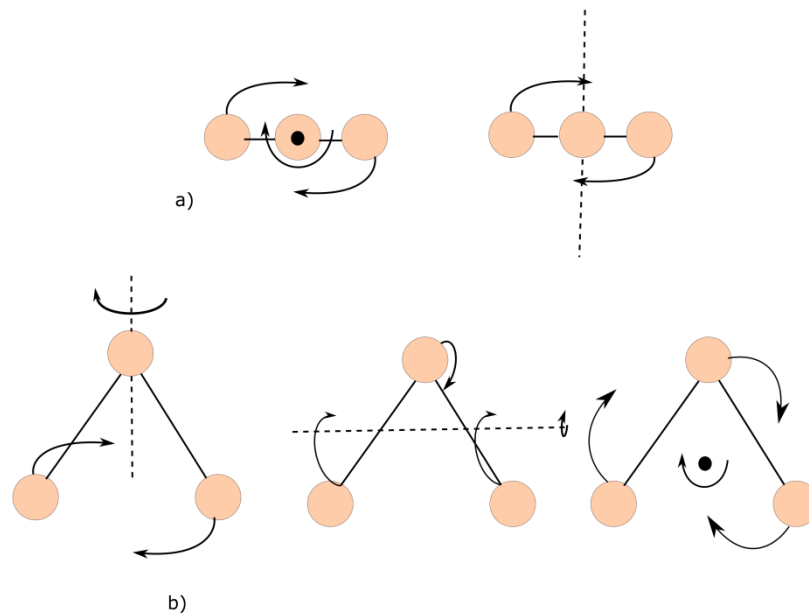


Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape.

Como mostra a figura 5, cada átomo pode variar sua posição em relação a cada coordenada, e essa mudança no eixo x, y e z, será definida como Δx , Δy e Δz , que deixa evidente que a molécula possui de fato os $3N$ graus de liberdade.

Cada átomo tem a liberdade de movimentar-se arbitrariamente, inclusive sendo possível isso ocorrer no mesmo instante, tendo como resultado um movimento de rotação em torno do eixo molecular. Isso se dá devido à mudança de coordenada dos átomos. Como mostra a figura a seguir:

Figura 6 - Rotações dos 3N graus de liberdade (a) duas para linear e (b) três para não - linear



Fonte: elaborado pelo autor utilizando o software Inkscape

Nas moléculas lineares a rotação em torno do eixo internuclear, deixa o sistema inalterado, devido a simetria, assim, são três os graus de liberdade de translação e apenas dois graus de liberdade de rotação, totalizando então, $3N - 5$ graus de liberdade vibracional. Para a molécula não-linear, além dos três graus de liberdade da translação, o número de graus de liberdade associados a rotação equivale à três em torno de três eixos perpendiculares, isso, implica que $3N - 6$ graus de liberdade vibracional. Nesses números apresentados, são ausentes os movimentos de translação e rotação da molécula por completo. Estes graus de liberdade são associados aos diferentes modos normais de vibração de uma molécula.

Um modo normal de vibração é aquele em que os núcleos realizam uma oscilação que deve ser harmônica simples em torno de sua posição de equilíbrio, de tal maneira que o centro de gravidade permaneça inalterado e, ao fim, todos os núcleos se movam em fase e frequência iguais. Podemos ainda dizer que os modos normais de vibração podem ser descritos por uma série de coordenadas e com possibilidade de serem combinações de seus comprimentos juntamente com suas ligações químicas e também dos ângulos entre essas ligações.

2.2.3 Espectroscopia Vibracional

Através da espectroscopia vibracional investigam-se as frequências das vibrações dos átomos das moléculas, objetivando obter informações sobre a geometria molecular, a partir do número dos modos vibracionais ativos, através dos espectros Raman (espalhamento Raman) e infravermelhos (IR). Segundo Paulo Ribeiro, “Designa-se por “espectroscopia vibracional” a técnica que mede a interação da radiação eletromagnética com os movimentos de vibração de um sistema molecular.” (CLARO, 2018, p. 9,)

Quanto às frequências, elas podem ser pouco ou muito intensas, sendo possível detectá-las, respectivamente da região de micro-ondas à luz visível do espectro eletromagnético. As técnicas utilizadas para estudar as vibrações moleculares são a de espalhamento Raman e a de absorção (IR) e em extensão muito menor, a espectroscopia do espalhamento de nêutrons. Independente da técnica utilizada, a finalidade é a mesma na aplicação de todas elas, que é a de determinar a “identidade” da molécula, uma característica única da substância, como se fosse uma espécie de “assinatura” espectral, que cada substância emite ao interagir com a luz.

É de suma importância o estudo relacionado a essas radiações, visto que, no momento atual, está diretamente relacionada com a área do estudo da matéria condensada, que é uma das linhas de pesquisa que mais crescem no momento, tendo grande impacto em diversos segmentos da sociedade. BASSI afirma:

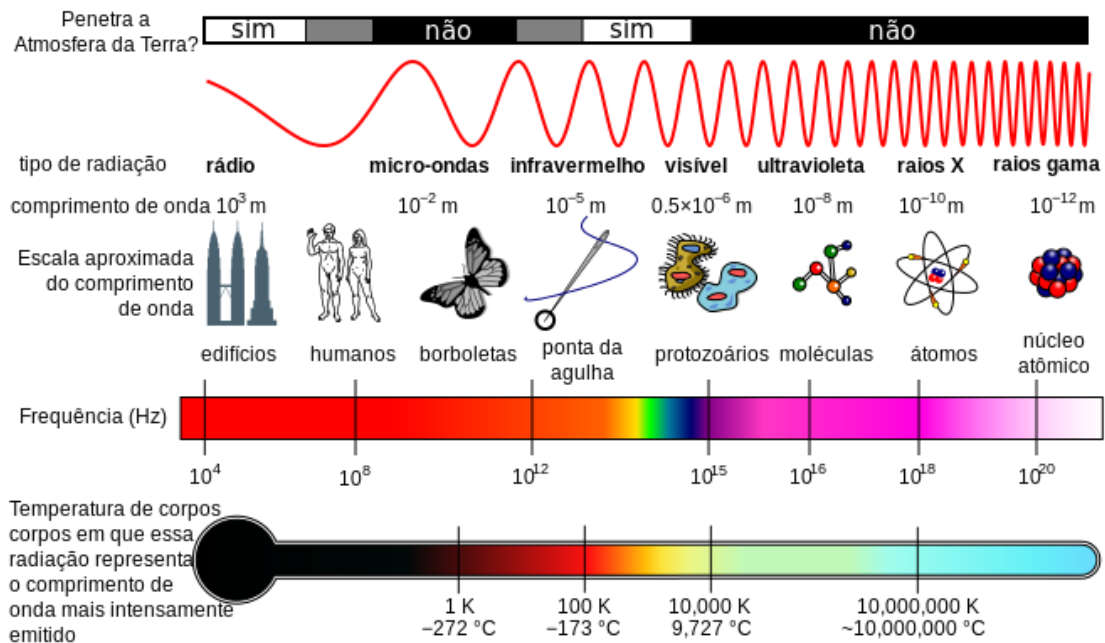
Os efeitos resultantes da interação de radiações eletromagnéticas com a matéria proporcionam evidências do comportamento microscópico. Estas observações levam-nos a sugerir modelos que permitam compreender ou prever as propriedades do material estudado. Usualmente estes modelos estão associados com princípios e conceitos associados a mecânica quântica. Neste tópico, serão apresentados os conceitos elementares necessários para a compreensão dos efeitos espectroscópicos associados com o fenômeno de absorção e emissão de luz (BASSI, 2001, p.1)

2.2.3.1 Espectro Infravermelho

A espectroscopia de absorção no infravermelho (IR) envolve a interação ressonante entre fótons na região do infravermelho (IR) e os estados vibracionais das moléculas. A radiação infravermelha encontra-se na região do espectro

eletromagnético que está entre o espectro visível e o das microondas. Na figura 7 ilustramos algumas características do espectro eletromagnético:

Figura 7 - Características do espectro eletromagnético



Fonte: https://pt.wikipedia.org/wiki/Espectro_eletromagn%C3%A9tico

O método ou técnica de espectroscopia de infravermelho (do inglês, infra red - IR) é realizado com um instrumento chamado espectrômetro infravermelho (ou espectrofotômetro) para produzir um espectro infravermelho. Um espectro de IR pode ser visualizado em um gráfico de absorvância de luz infravermelha (ou transmitância) no eixo vertical vs. frequência ou número de onda (em unidades por centímetro) no eixo horizontal. Unidades de comprimento de onda IR são geralmente dadas em micrômetros (milionésimo de metro, 10^{-6} m), símbolo μm , as quais estão relacionados a números de onda de maneira recíproca.

2.2.3.2 Espalhamento de radiação por moléculas: Espectroscopia Raman

Ao contrário da espectroscopia do infravermelho, que absorve a radiação infravermelha, no caso da espectroscopia Raman o que ocorre é um espalhamento, quando é incidida uma fonte de luz monocromática sobre a amostra. A radiação espalhada pode ser elástica ou inelástica. Nas palavras de Faria, Trata-se de uma

técnica que usa uma fonte monocromática de luz a qual, ao atingir um objeto, é espalhada por ele, gerando luz de mesma energia ou de energia diferente da incidente. (FARIA, 2011, p.01).

Porém, o que interessa é o espalhamento inelástico, que através da diferença de energia produzida será possível identificar as propriedades, tanto químicas como físicas da amostra.

Na prática, um feixe de radiação laser (monocromática, portanto) de baixa potência é usado para iluminar pequenas áreas do objeto de interesse e ao incidir sobre a área definida, é espalhado em todas as direções, sendo que uma pequena parcela dessa radiação é espalhada inelasticamente, isto é, com frequência (ou comprimento de onda) diferente da incidente ($E = h\nu$ ou $E = h.c.\lambda^{-1}$). Esse fenômeno foi observado experimentalmente em 1928 por Chandrasekhara Venkata Raman, na Índia e, por esse motivo, foi chamado de efeito Raman. (FARIA, 2011, p. 01)

Ainda de acordo com FARIA (2011), é importante ressaltar que, ao analisar a diferença de energia entre a luz incidente e a espalhada inelasticamente, constata-se que é equivalente à energia de vibração dos átomos da amostra, permitindo determinar a frequência de vibração e logo a maneira como eles estão ligados.

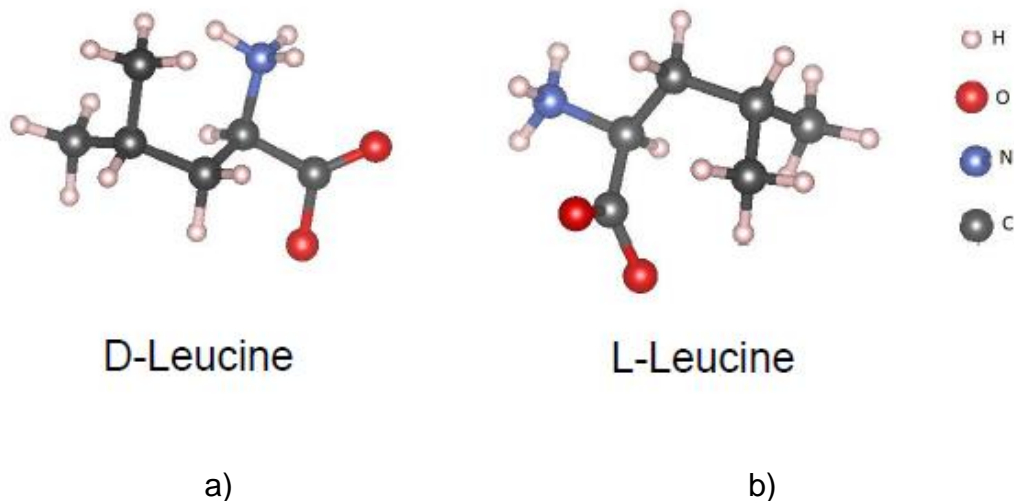
2.2.3.3 Comparação entre os espectro Raman calculados e espectro de absorção infravermelho calculados para os aminoácidos D e L-Leucina.

Embora estejam relacionadas a princípios físicos diferentes, as técnicas que permitem identificar o espectro Raman e o Infravermelho (IR), os dados obtidos, fornecem informações complementares, muitas vezes é possível observar modos ativos no Raman que não são ativos no infravermelho e vice-versa. Podemos utilizar como exemplo o aminoácido Leucina, $C_6H_{13}NO_2$, que é um dos nove aminoácidos essenciais para os seres humanos (fornecidos pelos alimentos). Essa molécula é importante para a síntese de proteínas e é responsável por muitas funções metabólicas, contribuindo para a regulação dos níveis de açúcar no sangue, para o crescimento e reparação de tecido muscular e ósseo, para a produção de hormônio do crescimento e para a cicatrização de feridas. Também previne a quebra de proteínas musculares após trauma ou estresse severo e pode ser benéfico para indivíduos com fenilcetonúria (doença genética rara caracterizada pela presença de uma mutação responsável por alterar a função de uma enzima no organismo

responsável pela conversão do aminoácido fenilalanina em tirosina, o que leva ao acúmulo de fenilalanina no sangue e que em grandes concentrações é tóxico para o organismo, podendo causar deficiência intelectual e convulsões, por exemplo). Ela está disponível em muitos alimentos e existem em todas as espécies vivas, variando desde bactérias a seres humanos; além disso a deficiência é rara. É um aminoácido de cadeia ramificada essencial importante para a formação de hemoglobina. (WU, 2013).

Esse aminoácido possui a seguinte estrutura molecular, respectivamente em suas formas levógira e dextrógira, L-Leucina e D-Leucina:

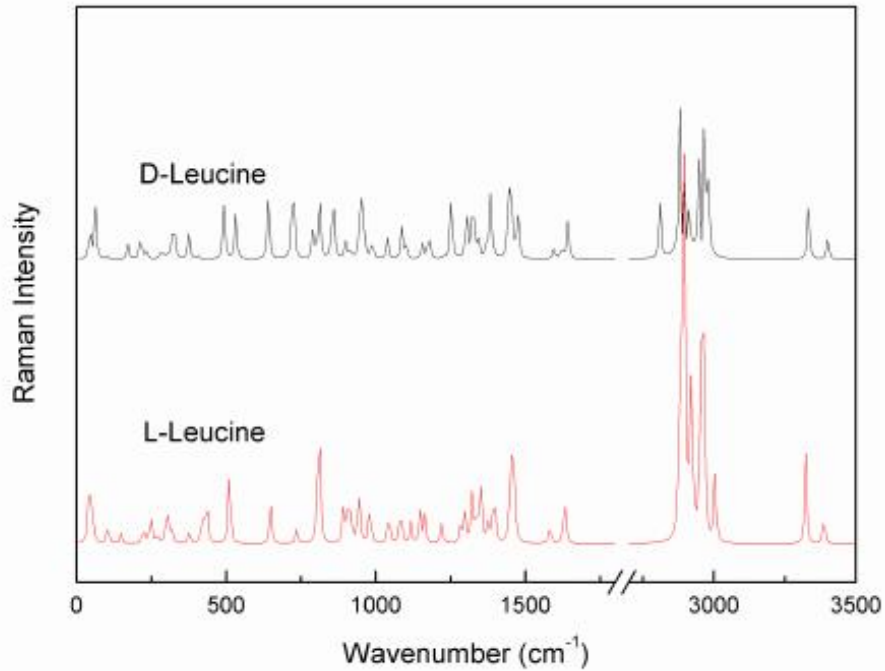
Figura 8 - Estrutura molecular da molécula: a) D-Leucina e b) L-Leucina



Fonte: elaborada pelo autor utilizando o software VESTA.

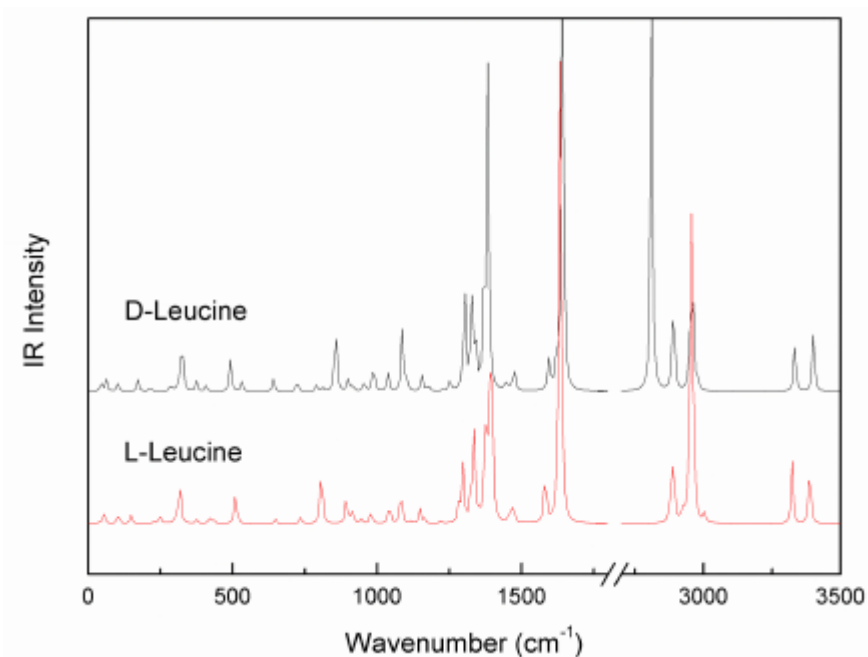
O pacote computacional Gaussian09, nos permite simular técnicas espectroscópicas como Raman e infravermelho, possibilitando a investigação de estruturas moleculares em lugares remotos, mesmo sem um aparato experimental de um laboratório, utilizando até mesmo um notebook. Os cálculos de primeiros princípios por meio da Teoria do Funcional de Densidade (DFT) em uma molécula isolada, tanto para estrutura molecular do aminoácido L-Leucina e D-Leucina, fornece os seguintes espectros Raman e infravermelho, ilustrados nas Figuras 9 e 10, respectivamente para os aminoácidos D – Leucina e L - Leucina:

Figura 9 - Comparação entre os espectro RAMAN calculados do aminoácido D- Leucina e L - Leucina



Fonte: elaborado pelo autor

Figura 10 - Comparação entre os espectro infravermelho calculados do aminoácido D- Leucina e L - Leucina.



Fonte: elaborado pelo autor

O gráfico relaciona a intensidade (eixo vertical), com o número de onda (eixo horizontal em cm^{-1}). Podemos perceber a semelhança nos dois casos, isto é, para cada molécula em formas diferentes, as técnicas apresentam um certo grau de compatibilidade. É importante ressaltar que esses espectros gerados constituem a “identidade” de cada amostra, e cada pico no espectro está associado a uma vibração natural do material (modo normal de vibração) característica daquela substância, não sendo possível encontrar espectro igual para outras amostras.

Os aminoácidos D e L-Leucina possuem 21 átomos, portanto, apresentam um total de 57 modos normais de vibração para uma molécula (3N-6). No Quadro 1, apresentamos uma comparação de alguns modos vibracionais associados a molécula Leucina que estão presentes tanto na forma D como na forma L.

Quadro 1 - Comparação de alguns modos normais de vibração dos aminoácidos D – Leucina e L – Leucina com PED(%)

D-Leucine		L-Leucine	
$\omega_{\text{calc}} (\text{cm}^{-1})$	Assignment	$\omega_{\text{calc}} (\text{cm}^{-1})$	Assignment
3102	$\nu_{\text{as}}[\text{CH}_2](65) + \nu_{\text{as}}[\text{CH}_3](11)$	3102	$\nu_{\text{as}}[\text{CH}_3](94)$
3024	$\nu_{\text{s}}[\text{CH}_3](82)$	3024	$\nu_{\text{s}}[\text{CH}_3](77)$
1508	$\delta[\text{CH}_3](57)$	1507	$\delta[\text{CH}_3](55)$
1406	$\text{wagg}[\text{CH}_3](77)$	1406	$\gamma[\text{HCCO}](20) + \text{wagg}[\text{CH}_2](11)$
1355	$\gamma[\text{HCCO}](40) + \delta[\text{HCC}](13) + \gamma_{\text{out}}[\text{CCCH}](12)$	1354	$\gamma[\text{HCCO}](40) + \delta[\text{HCC}](13) + \gamma_{\text{out}}[\text{CCCH}](12)$
1255	$\delta[\text{HCC}](45)$	1249	$\text{wagg}[\text{CH}_2](25) + \delta[\text{HCC}](18)$
1113	$\gamma[\text{HNCC}](32) + \delta[\text{HCC}](17)$	1108	$\gamma[\text{HCCC}](15) + \nu[\text{CC}](22)$
969	$\nu[\text{CC}](35) + \gamma[\text{HCCC}](27)$	969	$\nu[\text{CC}](21) + \nu[\text{NC}](17)$
938	$\gamma[\text{HCCC}](25)$	938	$\gamma[\text{HCCC}](27)$
384	$\delta[\text{CCC}](60)$	385	$\delta[\text{CCC}](54)$

Fonte: elaborada pelo autor

Os resultados dos cálculos de DFT e a descrição dos modos normais pela distribuição de energia potencial (PED) mostraram boa concordância com os obtidos na literatura para ambas as estruturas moleculares em estudo. A atribuição de 3N-6 modos normais de vibração mostrou um bom acordo, em comparação com os estudos realizados em outros aminoácidos, onde podemos notar que os modos referentes a grupos característicos, como CH, CH₂, CH₃, NH₃⁺ e CO₂⁻, bem como vibrações do tipo deformações e torções, são observadas nas regiões esperadas. Quando comparamos a forma L e D do aminoácido, observamos pequenas diferenças nas

atribuições de seus modos normais de vibração através da distribuição de energia potencial, mostrando a eficiência do modelo em diferenciar até mesmo moléculas isômeros (moléculas que diferem apenas no arranjo espacial).

3 METODOLOGIA, RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentamos a metodologia usada para a realização do trabalho e os resultados que podemos obter a partir da realização de questionário enviado para professores pesquisadores que atuam nas instituições de ensino superior. Por fim, faremos uma discussão a respeito desses resultados.

3.1 ANÁLISE E DISCUSSÃO ACERCA DA DISCIPLINA DE MECÂNICA QUÂNTICA (MQ) NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO CEARÁ.

Este trabalho possui em partes o modelo de pesquisa quantitativa que estabelece hipóteses de maneira a exigir, na maioria dos casos, a relação entre causa e efeito, apoiando o entendimento do fenômeno estudado em dados estatísticos, comprovações e testes, e que valoriza a evidência, a verificação, o controle, o quantitativo e a neutralidade científica (GRESSLER, 2004). Utilizou-se, assim, da pesquisa quantitativa, que possui o objetivo de compreender os fenômenos sociais por meio da coleta de dados numéricos, que mostrarão preferências, comportamentos e outras ações dos indivíduos que pertencem a determinado grupo ou sociedade, usando como por exemplo tabelas e representações numéricas por meio de gráficos. (MOREIRA, 2003). Foi utilizado um questionário semiestruturado de forma que se relacionam perguntas subjetivas e objetivas, possuindo como justificativa a possibilidade de contar com um maior quantitativo possível de entrevistados (GIL apud ANDRADE, 2010). O público alvo foram professores pesquisadores que atuam no ensino superior na área de física da matéria condensada nas IES cearenses e que fazem uso da DFT que, como vimos anteriormente, é fortemente apoiada na Mecânica Quântica.

No desenvolvimento dessa pesquisa temos também o caráter qualitativo, que os autores von Kardorff e Steinke (2000) entendem como possuir as bases teóricas a fim de abordar uma determinada realidade, a qual passa a ser vista como construção e atribuição social de significados, com ênfase no caráter processual e na reflexão, compreendendo as condições objetivas de vida como sendo relevantes por meio de significados subjetivos, de modo que o entendimento de determinados aspectos do processo de construção das realidades sociais seja o ponto de partida da pesquisa. Esses mesmos autores decifram e dividem tais bases teóricas em 12

características da pesquisa qualitativa. Por outro lado, no que se refere à pesquisa qualitativa, Mayring (2002) nos mostra 13 alicerces. Reunindo estes dois conjuntos, têm-se cinco grupos distintos de atributos da pesquisa qualitativa, que são eles: características gerais; coleta de dados; objeto de estudo; interpretação dos resultados; generalização.

Dessa maneira, entende-se que a pesquisa qualitativa é representada por informações imensuráveis, visto que é impossível separar integralmente a realidade e o indivíduo. Quando se trata do sujeito, devemos considerar a informação subjetiva que é inerente às peculiaridades do indivíduo. Sendo assim, é evidente a impossibilidade de quantificar tais informações. Essas características podem ser percebidas em boa parte do questionário. Logo, de acordo com as respostas, tem-se uma conclusão baseada na reflexão e interpretação das afirmações dos professores pesquisadores, que evidentemente respaldam seus discursos baseados em suas experiências profissional e educacional.

O questionário que se encontra em apêndice é dividido em duas partes: a primeira tem como objetivo identificar a IES em que está atuando, seja como professor ou pesquisador. Na sequência, a maior parte do questionário é formulada com perguntas subjetivas, sobre conceitos básicos, aplicações e importância da MQ e da DFT, sendo apenas uma delas de caráter objetivo.

3.2 ANÁLISE E DISCUSSÃO ACERCA DA DISCIPLINA DE MECÂNICA QUÂNTICA (MQ) NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM FÍSICA NO CEARÁ.

Diante da relevância de se abordar conteúdos de MQ em nossas escolas e universidades, neste caso de forma mais elaborada nos seus cursos de Física, foi feito inicialmente o levantamento e a verificação da oferta dessa disciplina nas grades curriculares dos cursos de Licenciatura em Física de algumas das principais IES do Ceará, como a Universidade Federal do Ceará¹, localizada em Fortaleza, a Universidade Estadual do Ceará (UECE), Campus do Itaperi (Fortaleza), a Universidade Regional do Cariri (URCA²), em Juazeiro do Norte, o

¹ https://si3.ufc.br/sigaa/public/curso/curriculo.jsf?lc=pt_BR&id=657429

² <http://prograd.urca.br/portal/index.php/matrizes-curriculares/file/33-matriz-curricular-fisica>

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE³), em Fortaleza, a Faculdade de Educação, Ciências e Letras de Iguatu (UECE-FECLI) e a Universidade do Vale do Acaraú (UVA⁴), em Sobral. Foram excluídos dessa questão os cursos de bacharelado, pois os dois cursos que existem no Ceará, ofertados na UECE e UFC, contemplam disciplinas obrigatórias de MQ. Já nos cursos de Licenciatura, após o levantamento, foi constatada a pouca importância dada às disciplinas específicas de MQ, conforme a tabela a seguir:

Quadro 2 - Quadro comparativo sobre a oferta da disciplina de MQ nas IES do Ceará

Instituição	Ano do Fluxo	Obrigatória	Optativa	Não apresenta
UECE-ITAPERI	2008		X	
UVA –SOBRAL	2009		X	
UECE – FECLI	2012	X		
URCA-JUA	2012	X		
IFCE-FORT	2011		X	
UFC – FORT	2008			X

Fonte: elaborada pelo autor

Ao considerar o histórico do curso de Licenciatura em Física da UECE-FECLI, nunca houve a oferta da disciplina de Mecânica Quântica I (MQI) desde a implementação do curso de Licenciatura de Física em 2002.2, que sequer figurava entre as disciplinas optativas, sendo colocada na grade curricular a partir do fluxo de 2008.1 de forma optativa. Assim, a disciplina foi ofertada (em caráter optativo) em apenas duas oportunidades, sendo uma delas no semestre 2018.1. Todavia no novo fluxo (2012.1) já é garantida a oferta da disciplina alusiva aos conteúdos de MQ em caráter obrigatório, conforme grades curriculares em anexo, o que se deu como resultado do desmembramento da disciplina de Física Moderna nas de Introdução a Mecânica Quântica e Teoria da Relatividade Restrita, ainda com disciplinas de MQI e MQII figurando nas optativas. Notadamente, o curso de Licenciatura em Física da FECLI apresentou evolução, dando um passo fundamental na implementação definitiva das disciplinas que envolvem o ensino de FMC.

³ <https://ifce.edu.br/fortaleza/cursos/superiores/licenciatura/fisica/pdf/matriz-curricular-lic-em-fisica.pdf/view>

⁴ <https://www.cee.ce.gov.br/wp-content/uploads/sites/49/2011/05/PAR0490.2009.pdf>

Os bacharelados possuem a garantia da obrigatoriedade das disciplinas de MQ, porque em tese são cursos que formam futuros pesquisadores na área; mas não se justifica o fato de cursos de licenciatura terem a ausência da disciplina de MQ em suas grades curriculares. É preocupante diante do que o Quadro 2 nos apresenta, visto que apenas duas das IES pesquisadas tratam a disciplina de MQ como obrigatória; ainda um ponto a ser destacado é a ausência desta disciplina entre as optativas. A realidade que foi apontada aqui não é exclusividade do Estado do Ceará, e assim tomamos o exemplo do Mestrado Nacional Profissional de Ensino de Física (MNPEF, 2014⁵), voltado para professores da rede básica de ensino e que em sua grade curricular contempla a disciplina obrigatória de MQ, tendo como um dos objetivos reduzir essa deficiência nos cursos de formação de professores de Física, que seguramente ocorre em escala nacional.

3.3 ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO APLICADO PARA PROFESSORES E PESQUISADORES QUE ATUAM NAS INSTITUIÇÕES DE ENSINO DE NÍVEL SUPERIOR.

Esse questionário, com quatro perguntas (três subjetivas), foi pensado para se recolher impressões de professores pesquisadores na área de FMC, especificamente que trabalham na teoria quântica da matéria e especialmente com DFT. Após a sua elaboração, utilizando o recurso de criação de formulários do google (google forms⁶) por ser bem mais prático e eficiente, foi enviado para seis profissionais da educação que atuam nas Universidades como pesquisadores, ocupando a posição de professor-pesquisador ou aluno de doutorado, tendo como linha de pesquisa a espectroscopia vibracional, que é uma das áreas da física da matéria condensada, e em especial utilizando a DFT. Do total dos questionários enviados, houve o retorno de cinco dos entrevistados, os quais preencheram adequadamente o formulário eletrônico direcionado aos seus endereços de e-mail.

A seguir, as perguntas enviadas aos entrevistados:

⁵ http://www1.fisica.org.br/mnpef/sites/default/files/GradeCurricular_MNPEF_Junho-2017.pdf

⁶ A plataforma do google tem vinculado a se diversos recursos para seus usuários, assim como google fotos, google drive, google maps o google forms, também é um recurso gratuito ao usuário e está diretamente vinculado ao endereço eletrônico (e-mail) do usuário e para acessá-lo basta pesquisar pelo nome google forms ou pelo link de direcionamento da página e dá início a criação de seu formulário online

1) Como você definiria, com suas palavras, a Teoria do Funcional de Densidade?

2) Você conhece as aplicações da DFT? Se sim, pode mencionar algumas delas?

3) Quais dos conceitos abaixo você assinalaria que são importantes para essa Teoria?

Espectro e linhas espectrais

Fótons

Fônons

Função de Onda e nuvem eletrônica

Bandas de Gap de energia em sólidos

Emaranhamento

Computação Quântica

Outros

4) Em sua opinião, a formulação da Mecânica Quântica contribuiu para a construção do mundo contemporâneo? Em que sentido?

Logo adiante verificaremos as respostas de cada um; antes disso, é importante ressaltar o local de atuação profissional. Quatro lecionam em instituição de nível superior e um na rede pública de ensino estadual do Ceará, são elas URCA, UECE, UFERSA e UFC, dois são alunos de doutorado da UFC. É interessante salientar que o professor que atua na UFERSA faz parte do curso de Pós-Graduação da UFC, notemos que todos são Professores e Pesquisadores. Com o objetivo de manter a identidade de cada um, serão definidos como Pesquisador A, B, C, D e E. Agora podemos apresentar as respostas das respectivas perguntas 1, 2, 3 e 4, seguindo a ordem dos professores A, B, C, D e E:

“A DFT é uma teoria baseada em funcionais de densidade. A ideia dos funcionais de densidade é empregar uma densidade eletrônica em vez da função de onda para resolver a equação de Schrödinger para um dado sistema molecular.” (PROFESSOR A).

O método DFT permite que as diversas propriedades de um material que dependam da energia total do sistema ou de diferenças de energia (por exemplo: parâmetros de rede, energia de formação, frequências vibracionais, etc) possam ser determinadas com extrema precisão. (PROFESSOR A).

“Função de onda e nuvem eletrônica.” (PROFESSOR A).

“Sim. No sentido que possibilita obter uma compreensão melhor dos dados experimentais da estrutura eletrônica de um dado material investigado.”
(PROFESSOR A)

“Teoria que usa um funcional, para descrever densidade dos elétrons, com o objetivo de entender a física dos sólidos. Mas para isso devemos resolver os problemas de muitos corpos.” (PROFESSOR B)

“Na física dos sólidos, serve para resolver o sistema de muitos corpos, por exemplo, cálculos de energia de ionização e análise da teoria de bandas.”
(PROFESSOR B)

“Função de onda e nuvem eletrônica” (PROFESSOR B)

A teoria quântica não mudou apenas as ideias dos cientistas sobre o comportamento da matéria mudou a própria ideia de matéria. Sabemos que dentro do átomo, nada estaria definido, tudo seria probabilidade.

As verdadeiras revoluções científicas são aquelas que além de ampliar os conhecimentos existentes, se fazem também acompanhar de uma mudança nas ideias básicas sobre a realidade. Um exemplo célebre foi a revolução do polonês Nicolau Copérnico, no século XVI, que derrubou o conceito segundo o qual a Terra estava imóvel no centro do Universo, afirmando em vez disso que nosso planeta gira em torno do Sol. Depois, o inglês Isaac Newton suplantou o conceito de espaço absoluto e dois séculos mais tarde o alemão Albert Einstein aposentou também a ideia do tempo absoluto. Embora importantes, nenhuma dessas grandes revoluções na ciência pode rivalizar com o impacto da revolução quântica. A partir dela, os físicos foram forçados a abandonar não apenas os conceitos do homem sobre a realidade – mas a própria realidade. Não admira que a Física Quântica tenha adquirido a reputação de algo bizarro ou místico. Tanto que o dinamarquês Niels Bohr, um dos criadores da nova ciência, chegou a afirmar certa vez que só não se escandalizou com a Física Quântica quem não a entendeu.

O ponto de partida para chegar às ideias quânticas é o átomo, já conhecido dos filósofos gregos, na Antiguidade. Eles acreditavam que toda matéria era constituída por minúsculos fragmentos indestrutíveis. Ora, o domínio da Física Quântica é formado justamente pelos fragmentos desses fragmentos. Desde 1909, de fato, o inglês Ernest Rutherford estabeleceu que os átomos, aparentemente indivisíveis, são compostos por um núcleo ao redor do qual giram outras partículas, os elétrons. Segundo esse modelo, o núcleo podia ser comparado ao Sol, enquanto os elétrons seriam os planetas orbitando a sua volta. E importante salientar a ideia de que os elétrons seguiam trajetórias bem definidas, de tal modo que a qualquer momento seria possível determinar a sua posição e a sua velocidade.

O problema é que, ao contrário dos planetas, os elétrons não seguem um trajeto claro e inequívoco quando se movem. Seus caminhos caprichosos só seriam revelados anos depois do modelo atômico proposto por Rutherford. O primeiro sinal de que a visão “planetária” não funcionava surgiu em 1911, quando Bohr escreveu uma nova fórmula sobre a emissão de energia pelos átomos. Para surpresa geral, a fórmula mostrava que havia lugares proibidos para o átomo – regiões inteiras, em torno do núcleo atômico, onde os elétrons não podiam girar. Podiam saltar de uma órbita mais distante a outra mais próxima, mas não podiam ocupar diversas órbitas intermediárias. E, nesse

caso, emitiam um pacote inteiro de energia – nunca menos de certa quantidade bem definida, desde então chamada quantum de energia. Era estranho, já que os planetas podiam girar a qualquer distância do Sol e mudar de órbita alterando o seu nível energético em qualquer quantidade, sem limite. Apesar disso, a fórmula de Bohr explicava com precisão os fatos conhecidos sobre a emissão de luz pelos átomos, de modo que a nova Física do quantum acabou se impondo com firmeza. Dez anos mais tarde, o enigma das órbitas proibidas foi resolvido de uma maneira que afastou ainda mais do átomo a ideia de um sistema solar em miniatura. Desde a década de 20, com efeito, as órbitas dos elétrons passaram a ser vistas como algo semelhante às ondas sonoras que compõem as notas de um instrumento musical; portanto, uma imagem muito distante dos corpos planetários girando em torno do Sol por meio da interação gravitacional.

O primeiro passo na direção das ondas eletrônicas surgiu em experiências nas quais um feixe de elétrons atravessava um cristal e se espalhava mais ou menos como a luz ao formar um arco-íris. O físico francês Louis de Broglie mostrou que o comprimento dessas inesperadas ondas podia ser relacionado com a velocidade dos elétrons. Segundo De Broglie, elétrons em alta velocidade se comportam como ondas curtas e elétrons em baixa velocidade, como ondas longas. Assim, tornou-se possível transformar uma característica dos movimentos mecânicos – a velocidade – em um traço típico dos fenômenos ondulatórios, o comprimento de onda.

Essa foi a deixa que o alemão Erwin Schrodinger aproveitou para criar a imagem musical do átomo mostrando que ela desvelava o enigma das órbitas proibidas. Basta ver que, ao vibrar, uma corda de violão produz uma nota fundamental, como o mi por exemplo, e diversas outras notas geralmente inaudíveis, que enriquecem o som mais forte. (PROFESSOR B).

A teoria do funcional de densidade é um método revolucionário que permite tratar de problemas de muitos corpos. Utilizando um funcional de densidade eletrônica e conceitos de mecânica quântica é possível obter propriedades como estruturas de bandas, energia, modos normais de vibração, entre outros, com uma boa aproximação dos resultados experimentais. Problemas que seriam intratáveis analiticamente têm sido estudados utilizando DFT. (PROFESSOR C).

“Tenho utilizado DFT para estudar as propriedades estruturais, vibracionais e ópticas de substâncias orgânicas, muitas delas com potencial para a fabricação de novos medicamentos.” (PROFESSOR C)

“Fônons, fótons, função de onda, espectros e linhas espectrais, bandas e gap de energia em sólidos entre outros são conceitos embutidos na DFT.” (PROFESSOR C)

Vários avanços têm ocorrido após a formulação da mecânica quântica, por exemplo, já existem dispositivos com dimensões nanométricas. A nanotecnologia permite a manipulação de moléculas e átomos, o que pode trazer contribuições revolucionárias. Além disso, o desenvolvimento da mecânica quântica possibilitou avanços em diversas áreas, como: medicina, física de partículas, astronomia, dentre outras. (PROFESSOR C)

Uma aproximação bastante eficaz (e que vem se tornando cada vez mais eficiente) para calcular propriedades quânticas de sistemas multi-eletrônicos (átomos e moléculas) fazendo uso da densidade de energia. Nesta aproximação se consegue resolver um problema quântico de 1N, na densidade de energia, ao invés de 3N na função de onda que mesmo se

conseguíssemos resolver seria impraticável e inviável pelo tamanho da solução, já que N é o número de elétrons do sistema. (PROFESSOR D).
 Predizer como se dá a ligação entre agentes biológicos e fármacos. Dar rotas mecânicas para construção de novos materiais mais leves, resistentes como no uso de nanotubos em concreto armado. Desvendar espectros empíricos de compostos biológicos e químicos. Dar rotas eficientes de aplicações químicas sem perder tempo e dinheiro em métodos tradicionais que demandam, por vezes, até de sorte. (PROFESSOR D).

“Bandas e gap de energia em sólidos”. (PROFESSOR D)

Sim. É graças a descoberta do átomo e a toda sua base empírico/teórica que temos a capacidade de já usar materiais diversos com todas suas possibilidades tecnológicas que vão desde ao uso de baterias pequenas e eficientes em tecnologias de vestimentas (wear gears) como smartch watch, até laser para aplicações de biotecnologia, e designer de fármacos. (PROFESSOR D)

Uma abordagem da mecânica quântica usada para estudar a estrutura eletrônica (principalmente do estado fundamental) de sistemas de muitos elétrons, em particular, átomos, moléculas e sólidos. (PROFESSOR E).

Sim. A DFT é aplicada em campos como Física Molecular e do Estado Sólido; em Ciências dos Materiais; em Química; em Bioquímica; em Geologia e em Astrofísica. (PROFESSOR E)

“Função de onda e nuvem eletrônica.” (PROFESSOR E)

Do meu ponto de vista não usaria a palavra construção, mas entendimento (precisão no entendimento dos "fenômenos" da matéria) e grande colaboração no avanço científico. De fato, boa parte do universo é formado de matéria, e só com o advento da mecânica quântica tornou-se possível a descrição (com mais precisão) do comportamento desta matéria em todos os seus detalhes, e em especialmente dos acontecimentos em uma escala atômica. (PROFESSOR E).

Analisando as respostas dos professores pesquisadores, nota-se na primeira pergunta que há concordância no entendimento de que o DFT é uma abordagem da MQ, que leva em consideração a densidade eletrônica do sistema e é aplicado a problemas de muitos corpos. Em resposta a segunda pergunta, é predominante as aplicações na medicina, compreensão das substâncias orgânicas e em geral o desenvolvimento da Ciência e Tecnologia (CT). Dos conceitos apresentados, na pergunta três, a maioria julgou função de onda e densidade eletrônica como os mais importantes. Em relação à quarta pergunta todos concordaram no entendimento de que a formulação da MQ foi fundamental no desenvolvimento tecnológico e no entendimento da matéria em seu nível mais básico.

Percebemos, com essas respostas, algumas inclusive muito longas, que os professores pesquisadores que responderam ao questionário concordam entre si que

a MQ, como já havíamos discutido anteriormente, é crucial para o entendimento da natureza em seu nível mais fundamental, contribuindo de maneira decisiva para a transformação do mundo em que vivemos por meio da tecnologia que ela proporciona.

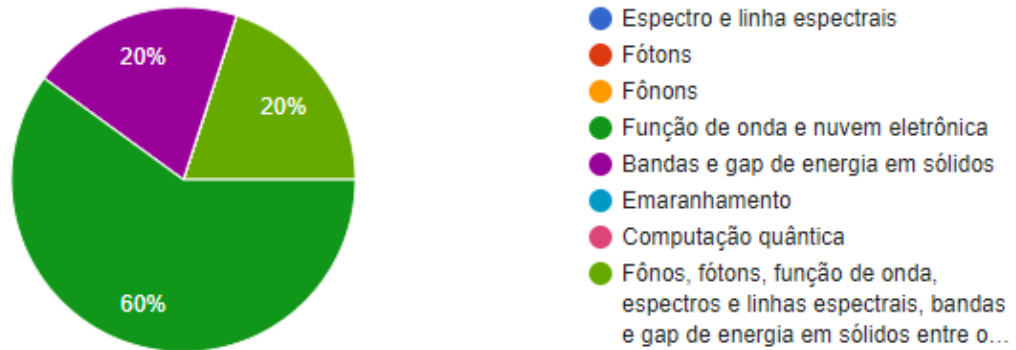
4 CONCLUSÃO

Esta monografia permitiu corroborar com a hipótese inicial em que postulamos a defasagem no ensino de MQ nas IES, em especial nos cursos de Licenciatura em Física do estado do Ceará. Isto deixou evidente a situação de certo descaso em relação a esses cursos, revelando também, de acordo com o questionário enviado a professores pesquisadores atuando no estado, a grande importância do ensino de MQ. O trabalho adentrou também no âmbito da pesquisa, seja por necessidade de conhecermos a fundo as propriedades da matéria, ou o desenvolvimento de novas tecnologias que possam ser aplicadas como, por exemplo, na área da medicina, de modo a dar mais suporte à justificativa de se abordar tal tema na educação básica e no ensino superior.

Não é de se surpreender o fato de professores da educação básica apresentarem dificuldades em abordar em sala de aula temas atuais e relevantes da Física como, por exemplo, o estudo das propriedades da matéria reveladas a partir da espectroscopia, o qual envolve técnicas da DFT. Ao analisarmos as grades curriculares dos cursos de graduação em Licenciatura em Física, no estado do Ceará, verifica-se de forma objetiva a desvalorização na preparação do graduando em relação à disciplina de MQ.

Todos os professores pesquisadores entrevistados foram unânimes em destacar a importância do conhecimento de MQ e suas aplicações, não deixando nenhuma dúvida a respeito do quanto ela revolucionou radicalmente não só a física como toda a ciência em geral, assim como a sociedade que a produziu. Quando indagados acerca dos principais conceitos que norteiam essa área, percebemos no gráfico apresentado na figura 11 que a maioria dos entrevistados concordam que, dentre os conceitos, os mais importantes são os de função de onda e de nuvem eletrônica.

Figura 11 - Percentual em relação aos conceitos escolhidos



Fonte: elaborado pelo autor

Podemos concluir que, através do estudo de espectroscopia com uso da DFT, é possível abordar a relevância do ensino da FMC, pois está intimamente interligado com a MQ que, como foi abordado no trabalho, apresenta-se como uma das principais bases da FMC, ao mesmo tempo contextualizando e evidenciando sua grande aplicabilidade. Porém, essa conclusão foi atingida muito mais por interpretação, pois devemos admitir a ausência de questões direcionadas para se saber a necessidade do ensino de MQ, do ponto de vista dos entrevistados.

Por fim, de acordo com tudo o que foi apresentado, não resta dúvidas quanto à necessidade do ensino de FMC, em geral, e da MQ, em particular, no ensino superior, de maneira que a ausência de disciplinas que fazem parte dessa área acarreta prejuízo na educação básica, e contribui para que metas elencadas pelos dispositivos legais não sejam cumpridas, fazendo-se necessária uma reflexão crítica em relação à importância dada pelos cursos de Licenciatura em Física, das IES do estado do Ceará.

REFERÊNCIAS

- ANDRADE, L. B. P. D. **Educação infantil: discurso, legislação e práticas institucionais**. São Paulo: UNESP, 2010.
- BASSI, Adalberto Bono Maurizi Sacchi. **Conceitos Fundamentais em Espectroscopia**. [S.l.]: Chemkeys, 2001.
- BRASIL. Ministério da Educação. **Educação Média tecnológica**. Brasília: MEC, 1998.
- BRENNAN, R. **Gigantes da Física: Uma História da Física Moderna Através de Oito Biografias**. São Paulo: Zahar, 2003.
- CHIBENI, S. A Interpretação da Mecânica Quântica. In: _____. **Física Moderna: Mito e Ciência**. [S.l.:s.n.], 2001. Disponível em < <http://www.comciencia.br/dossies-1-72/reportagens/fisica/fisica04.htm>>. Acesso em: 18 nov. 2018.
- CHIBENI, S. S. **O surgimento da física quântica**. 2010. Disponível em: <<http://www.unicamp.br/~chibeni/textosdidaticos/fisquantica.pdf>> Acesso: 10 de outubro 2018.
- FARIA, D. L . A. **Entenda o que é espectroscopia raman**. São Paulo: USP, 2011.
- FIGUEIREDO, W. **Física da matéria condensada**. Florianópolis, SC: UFSC, 1985. Disponível em: < <file:///C:/Users/Ramon/Downloads/Dialnet-FisicaDaMateriaCondensada-5165935.pdf>> Acesso: 01 dez. 2018.
- GRESSLER, L. A. **Introdução à pesquisa: projetos e relatórios**. 2 . ed. São Paulo: Loyola, 2004.
- GRIFFITHS, D.J. **Mecânica Quântica**. 2.ed. [S.l.]: Pearson, 2011.
- GROOT, J. A Teoria Quântica depois de Planck. In: _____. **Física Moderna: Mito e Ciência**. [S.l.:s.n.], 2001. Disponível em: < <http://www.comciencia.br/dossies-1-72/reportagens/fisica/fisica07.htm>>. Acesso em: 01 dez. 2018.
- HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. **Fundamentos de Física: Óptica e Física Moderna**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.
- JAMRÓZ, M. H. **Vibrational Energy Distribution Analysis VEDA 4**. [S.l.:s.n.], 2010.
- KERLINGER, F.N. **Metodologia da pesquisa em ciências sociais**. Tradução de H.M. Rotundo. Brasília: INEP, 1980.
- MARQUES, M. A. L; BOTTI, S. O que é e para que serve a teoria dos funcionais de densidade?. **Gazeta de Física**, Lisboa, v. 29, n, 4, 2006. Disponível em: < http://nautilus.fis.uc.pt/gazeta/revistas/29_4/vol29_4_Art02.pdf> Acesso em: 20 out. 2018.

MAYRING, P. H. **Einführung in die qualitative Sozialforschung**. 5. ed. Weinheim: Beltz, 2002.

MOREIRA, M. A. Grandes desafios para o ensino de física na educação contemporânea. **Revista do Professor**, Brasília, v. 1, n.1, 2017. Disponível em: <<http://periodicos.unb.br/index.php/rpf/article/viewFile/25190/18899>> . Acesso em: 20 set. 2018.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica: Relatividade e Física Quântica**. 2 . ed. São Paulo: Blucher, 2014.

OSTERMANN, F. **Tópicos de Física Contemporânea em Escolas de Nível Médio e na Formação de Professores de Física**. 1999. 433f. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1999.

STEINKE, I. Gütekriterien qualitativer Forschung. In: FLICK, U. E.; VON KARDORFF, I. STEINKE (Orgs.). **Qualitative Forschung: Ein Handbuch**. Reinbek: Rowohlt, 2000. p. 319-331.

WU, G. **Amino acids: biochemistry and Nutrition**. [S.l.]: CRC Press, 2013.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Formulário de perguntas

Questionário referente ao TCC.

Olá, prezado(a) professor(a)!

Meu nome é Francisco Ramon Pereira do Rêgo.
Sou discente da Universidade Estadual do Ceará (UECE), Campus Iguatu, Faculdade de Ciências e Letras de Iguatu (FECL).
Graduando do último semestre do curso de Licenciatura Plena em Física.
Estou enviando esse questionário que auxiliará na confecção do meu TCC.

Gostaria de solicitar a contribuição do Senhor(a).

***Obrigatório**

1. Nome:

2. Instituição à qual pertence: *

Perguntas.

3. 1) Como você definiria, com suas palavras, a Teoria do Funcional de Densidade? *

4. 2) Você conhece as aplicações da DFT? Se sim, pode mencionar algumas delas?

5. 3) Quais dos conceitos abaixo você assinalaria que são importantes para essa Teoria? *

Marcar apenas uma oval.

- Espectro e linha espectrais
- Fótons
- Fônons
- Função de onda e nuvem eletrônica
- Bandas e gap de energia em sólidos
- Emaranhamento
- Computação quântica
- Outro: _____

6. 4) Em sua opinião, a formulação da Mecânica Quântica contribuiu para a construção do mundo contemporâneo? Em que sentido? *

ANEXOS

ANEXO A - Grade curricular UECE – FECLI, fluxo 2002.2

Semestr	Código	Disciplina	Cred	Pré-Requisito
null	IG371	FISICO-QUIMICA	4	
01	IG303	FISICA BASICA I	4	
01	IG306	QUIMICA GERAL I	4	
01	IG308	FUNDAMENTOS DE MATEMATICA	4	
01	IG310	BIOLOGIA GERAL I	4	
01	IG365	PSICOLOGIA EVOLUTIVA	4	
02	IG304	FISICA BASICA II	4	IG303
02	IG307	QUIMICA GERAL II	4	IG306
02	IG309	MATEMATICA I	4	IG308
02	IG311	ECOLOGIA	4	IG310
02	IG367	GEOMETRIA ANALITICA PLANA	4	
03	IG274	DIDATICA GERAL	4	
03	IG276	ESTATISTICA DESCRITIVA	4	
03	IG305	FISICA BASICA III	4	IG304
03	IG313	CALCULO I	4	
03	IG366	PSICOLOGIA DA APRENDIZAGEM	4	IG365
04	IG256	ELETRICIDADE E MAGNETISMO I	4	IG305
04	IG281	ALGEBRA LINEAR	4	IG309 / IG367
04	IG314	CALCULO II	4	IG313
04	IG319	METODOLOGIA DO ENSINO EM CIENCIAS/FISICA	4	IG274
04	IG327	GEOMETRIA ANALITICA VETORIAL	4	
05	IG180	METODOLOGIA DO TRAB. CIENTIFICO	4	
05	IG257	ELETRICIDADE E MAGNETISMO II	4	IG256
05	IG315	CALCULO III	4	IG314
05	IG320	MECANICA TEORICA I	4	IG305
05	IG364	ONDAS	4	IG305
06	IG316	EQUACOES DIFERENCIAIS ORDINARIAS	4	IG315
06	IG321	MECANICA TEORICA II	4	IG320
06	IG323	PRATICA DO ENSINO EM CIENCIAS	4	
06	IG358	ELETRICIDADE E MAGNETISMO III	4	IG257
06	IG363	OPTICA	4	IG256
07	IG261	TERMODINAMICA	4	IG305
07	IG317	PRATICA DO ENSINO EM FISICA I	4	
07	IG322	MECANICA TEORICA III	4	IG321
07	IG324	FISICA MODERNA	4	IG358
07	IG325	ORG. TRAB. NA ESCOLA DE 1. E 2. GRAUS	4	
08	IG318	PRATICA DE ENSINO EM FISICA II	4	IG317
08	IG326	INFORMATICA APLICADA A EDUCACAO	4	
08	IG328	MONOGRAFIA	4	
08	IG368	PRODUCAO TEXTUAL	4	
99	IG357	HISTORIA DAS CIENCIAS	4	
99	IG361	FISICO FENOMENOLOGICO	4	
99	IG369	HISTORIA DA FISICA	4	
99	IG370	FISICA CONTEMPORANEA	4	
99	IG372	FILOSOFIA DAS CIENCIAS	4	
99	IG373	INGLES INSTRUMENTAL	4	

Fonte: <http://www.uece.br/fecli/index.php/nossos-cursos>

ANEXO B - Grade Curricular UECE – FECLI, Fluxo 2008.1



Grade do Curso

226 - FISICA



Semestr	Código	Disciplina	Cred	Pré-Requisito
01	IG308	QUIMICA GERAL I	4	
01	IG308	FUNDAMENTOS DE MATEMATICA	4	
01	IG310	BIOLOGIA GERAL I	4	
01	IG504	PSICOLOGIA DO DESENVOLVIMENTO	4	
01	IG572	INTRODUCAO A FISICA	4	
02	IG254	CALCULO DIFERENCIAL INTEGRAL I	6	IG557
02	IG282	MECANICA BASICA I	6	IG572
02	IG574	GEOMETRIA ANALITICA	4	
02	IG575	PSICOLOGIA DA APRENDIZAGEM	4	IG504
03	IG245	CALCULO DIFERENCIAL INTEGRAL II	6	IG254
03	IG274	DIDATICA GERAL	4	
03	IG573	MECANICA BASICA II	6	IG254 / IG721
03	IG577	PRAT. COMO COMPONENTE CURRI. - FISICA	4	IG572
04	IG250	CALCULO DIFERENCIAL INTEGRAL III	6	IG245
04	IG613	TERMODINAMICA BASICA	4	IG245 / IG573
04	IG614	PCC DE MECANICA	4	IG573
04	IG615	ELETROMAGNETISMO BASICO I	6	IG245 / IG573
04	IG640	ESTRUT. E FUNC. DO ENS. FUND. E MEDIO	4	IG274
05	IG618	ELETROMAGNETISMO BASICO II	4	IG584 / IG615
05	IG635	LABORATORIO DE MEC. E TERMODINAMICA	4	IG573
05	IG636	PRAT. COMO COMP. CURRIC. TERMODINAMICA	4	IG613
05	IG639	MECANICA CLASSICA I	4	IG245 / IG573
05	IG646	ESTAGIO DE ENSINO DE CIENCIAS	6	IG308 / IG308 / IG310 / IG572
06	IG647	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA I	6	IG614 / IG640
06	IG648	OPTICA	4	IG616
06	IG649	PRAT. COMP. CURRI. DE ELETROMAGNETISMO	4	IG616
07	IG650	FISICA MODERNA	6	IG250 / IG648
07	IG651	LAB. DE ELETROMAGNETISMO E OPTICA	4	IG616
07	IG652	PRAT. COMP. CURRIC. DE OPTICA	4	IG648
07	IG653	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA II	6	IG647 / IG649
08	IG654	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA III	6	IG653
08	IG680	FUND. HIST. FILOS. SOCIO DA CIENCIA	4	IG650
08	IG681	PRAT. COMP. CURRI. DE FISICA MODERNA	4	IG650
08	IG682	MONOGRAFIA (FISICA)	4	IG577 / IG647
99	IG326	INFORMATICA APLICADA A EDUCACAO	4	
99	IG529	PROD. ESCRITA EM LING. PORTUGUESA	4	
99	IG576	FUNDAMENTOS DE PROGRAMACAO	4	
99	IG611	FISICA COMPUTACIONAL	4	IG576
99	IG637	BIOFISICA	4	IG573
99	IG680	MECANICA CLASSICA II	4	IG639
99	IG662	ELETROMAGNETISMO I	6	IG615 / IG648
99	IG663	ELETROMAGNETISMO II	6	IG662
99	IG664	MECANICA QUANTICA I	4	IG650
99	IG665	MECANICA QUANTICA II	6	IG664
99	IG666	FISICA ESTATISTICA	4	IG613
99	IG667	METODOS MATEMATICOS I	6	IG250
99	IG668	INTRODUCAO AS VARIAVEIS COMPLEXAS	4	IG245
99	IG673	ALGEBRA LINEAR	4	
99	IG683	TEORIA DA RELATIVIDADE RESTRITA	4	IG648 / IG680
99	IG684	ATIVIDADES ACADEMICAS CIENT. E CULTURAIS	12	
99	IG705	EQUACOES DIFERENCIAS APLIC. A FISICA	4	

Fonte: <http://www.uece.br/fecli/index.php/nossos-cursos>

ANEXO C - Grade curricular UECE – FECLI, fluxo 2012.1

		Grade do Curso				
		226 - FISICA				
Semestr	Código	Disciplina	Cred	Pré-Requisito		
01	IG306	QUIMICA GERAL I	4			
01	IG529	PROD. ESCRITA EM LING. PORTUGUESA	4			
01	IG557	MATEMATICA ELEMENTAR I	4			
01	IG713	PSICOLOGIA DA EDUCACAO	4			
01	IG720	PCC - INTRODUCAO A FISICA	4			
02	IG254	CALCULO DIFERENCIAL INTEGRAL I	6	IG557		
02	IG274	DIDATICA GERAL	4			
02	IG327	GEOMETRIA ANALITICA VETORIAL	4			
02	IG721	MECANICA BASICA I	6	IG557 / IG720		
03	IG245	CALCULO DIFERENCIAL INTEGRAL II	6	IG254		
03	IG573	MECANICA BASICA II	6	IG254 / IG721		
03	IG840	ESTRUT. E FUNC. DO ENS. FUND. E MEDIO	4	IG274		
03	IG730	PCC INFORMATI. APLIC. AO ENS. DE FISICA	4	IG721		
04	IG373	INGLES INSTRUMENTAL	4			
04	IG564	CALCULO III	4	IG245		
04	IG614	PCC DE MECANICA	4	IG573		
04	IG615	ELETROMAGNETISMO BASICO I	6	IG245 / IG573		
04	IG639	MECANICA CLASSICA I	4	IG245 / IG573		
05	IG613	TERMODINAMICA BASICA	4	IG245 / IG573		
05	IG616	ELETROMAGNETISMO BASICO II	4	IG564 / IG615		
05	IG635	LABORATORIO DE MEC. E TERMODINAMICA	4	IG573		
05	IG660	MECANICA CLASSICA II	4	IG639		
05	IG733	ESTAGIO SUPERV. NO ENS. FUNDAMENTAL	6	IG557 / IG640 / IG720		
06	IG647	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA I	6	IG614 / IG640		
06	IG648	OPTICA	4	IG616		
06	IG651	LAB. DE ELETROMAGNETISMO E OPTICA	4	IG616		
06	IG734	PCC DE TERMODINAMICA E ELETROMAGNETISMO	4	IG613 / IG616		
06	IG735	FISICA MATEMATICA	4	IG564		
07	IG683	TEORIA DA RELATIVIDADE RESTRITA	4	IG648 / IG660		
07	IG736	PCC DE OPTICA E FISICA MODERNA	4	IG648		
07	IG737	FUND.HIST.FILOS.SOCIO. DA CIENCIA	4	IG648		
07	IG738	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA II	6	IG647 / IG734		
08	IG527	LINGUA BRASILEIRA DE SINAIS	4			
08	IG739	ESTAGIO DE ENSINO DE FISICA III	6	IG738		
08	IG740	INTRODUCAO A MECANICA QUANTICA	4	IG614 / IG683		
08	IG741	MONOGRAFIA (FISICA)	4	IG736 / IG738		
99	IG310	BIOLOGIA GERAL I	4			
99	IG611	FISICA COMPUTACIONAL	4	IG576		
99	IG637	BIOFISICA	4	IG573		
99	IG662	ELETROMAGNETISMO I	6	IG615 / IG648		
99	IG663	ELETROMAGNETISMO II	6	IG662		
99	IG668	INTRODUCAO AS VARIAVEIS COMPLEXAS	4	IG245		
99	IG673	ALGEBRA LINEAR	4			
99	IG684	ATIVIDADES ACADEMICAS CIENT. E CULTURAI	12			
99	IG705	EQUACOES DIFERENCIAS APLIC. A FISICA	4			
99	MI001	MOBILIDADE INTERNACIONAL I	2			
99	MI002	MOBILIDADE INTERNACIONAL II	4			
99	MI003	MOBILIDADE INTERNACIONAL III	4			
99	MI004	MOBILIDADE INTERNACIONAL IV	6			
99	MN001	MOBILIDADE NACIONAL I	2			
99	MN002	MOBILIDADE NACIONAL II	4			
99	MN003	MOBILIDADE NACIONAL III	4			
99	MN004	MOBILIDADE NACIONAL IV	6			

Fonte: <http://www.uece.br/fecli/index.php/nossos-cursos>