



Physicae Organum

Nota editorial

A presente edição teve sua composição final realizada posteriormente à sua publicação original, com o objetivo de padronização editorial e atribuição de identificadores digitais (DOIs) aos artigos. Esse processo não alterou o conteúdo dos trabalhos originalmente publicados.

A equipe editorial agradece à Biblioteca Central da Universidade de Brasília (BCE/UnB) pelo apoio na configuração e no registro dos DOIs da revista, especialmente à bibliotecária Luísa Chaves Café.

— Leonardo Luiz e Castro, responsável pela composição final, 2026

Editorial Note

This issue had its final composition prepared after its original publication, with the aim of editorial standardization and the assignment of digital object identifiers (DOIs) to the articles. This process did not alter the content of the originally published works.

The editorial team thanks the Central Library of the University of Brasília (BCE/UnB), especially librarian Luísa Chaves Café, for their support in configuring and registering the journal's DOIs.

— Leonardo Luiz e Castro, responsible for the final composition, 2026

Apresentação

Nessa terceira edição, a revista *Physicae Organum*, apresenta entrevista com a Professora Doutora Heloísa Bordello, professora associada na Universidade de Copenhagen, falando sobre sua experiência como pesquisadora, um resumo breve sobre a última semana da Física - UnB e diversos artigos.

Novamente damos as boas vindas aos leitores, esperando contar com artigos seus, suas leituras, críticas e comentários.

Att. Lilah Fialho de Lima Simões

Editora: *Physicae Organum*

Sumário

1	Medidas e análise de espectroscopia de fotoelétrons em amostras aquosas	I
2	Radiação Cósmica de Fundo em Micro-ondas	II
3	Um estudo do circuito elétrico atmosférico global	III
4	TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE	IV
5	Pesquisa intercultural sobre as ambições das mulheres universitárias em relação a estudo de ciências e carreiras	V
6	FORMAÇÃO DE PROFESSORES E O USO DE NOVAS TECNOLOGIAS NA SALA DE AULA	VI
7	Entrevista com a Doutora Heloísa Bordallo pesquisadora do Instituto Niels Bohr Copenhagen	VII
8	X Semana da Física - UnB	VIII
9	Expediente Physicae Organum	IX

Medidas e análise de espectroscopia de fotoelétrons em amostras aquosas

DINIZ, GABRIEL S. (INPE) * DA SILVA, ÁDERSON. M. (UNB)

MEDINA, ALINE (UFBA)

GILARDONI, CARMEM (UNB)

MARINHO, RICARDO DOS R.T. (UFBA)

NAVES DE BRITO, ARNALDO (UNICAMP)

MOCELLIN, ALEXANDRA (UNB)

Universidade de Brasília

Resumo

Espectroscopia eletrônica é o estudo da absorção de radiação eletromagnética por matéria. Através do entendimento desse processo é possível descrever propriedades da matéria como, tamanho, forma, arranjo molecular, estrutura eletrônica, entre outras. Utilizamos essa técnica em amostras líquidas, com um equipamento modificado que possibilitou essa análise. Durante o projeto, analisamos soluções de tiosulfato de sódio em concentração de 1.5 M por espectroscopia de fotoelétrons. Foram analisados espectros medidos em 2012 no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS em Campinas-SP, na faixa espectral de 190-690 eV. Os espectros foram obtidos pelo espectrômetro de elétrons VG Scienta 4000 e foram manipulados computacionalmente através do programa IGOR Pro, versão 4.09. A análise computacional consistiu em uma preparação dos espectros medidos. Posteriormente foram analisadas, de forma análoga, medidas feitas em abril de 2013 com diferentes polarizações da luz incidente. Os espectros medidos tinham quatro picos; dois picos representando os elétrons do enxofre ligado somente ao outro enxofre e os outros dois representando elétrons do enxofre ligado aos três oxigênios. Como esperado, a energia cinética dos elétrons saídos do enxofre ligado aos oxigênios é menor, revelando uma maior energia de ligação, porque o oxigênio é mais eletronegativo que o enxofre. O experimento mostra o sucesso das modificações feitas no equipamento para analisar amostras aquosas abrindo precedentes para futuras análises estruturais. Apesar de serem vários os detalhes essenciais para permitir que a amostra líquida fosse analisada foi possível manter condições de medida quase ininterruptas durante todo o tempo de luz no laboratório.

Palavras-chave: Espectroscopia, elétrons, líquida.

*gdiniz93@gmail.com

I. INTRODUÇÃO

Espectroscopia eletrônica é uma técnica que permite obter informações acerca da estrutura do material através da análise da energia de emissão de seus elétrons. A equação (1), a equação do efeito fotoelétrico, demonstra o funcionamento de ejeção de elétrons seja da camada de valência ou do caroço (camadas mais internas) e é nesse princípio que se baseia a técnica PES (do inglês PhotoElectron Spectroscopy). Nesse método a energia cinética do elétron ejetado é igual à diferença entre a energia do fóton incidente e a energia de ligação do elétron:

$$E_{cin} = h\nu - E_{lig} \quad (1)$$

Essa emissão é realizada por consequência de uma excitação do átomo ou molécula através da incidência de radiação. A emissão é a forma de relaxação do átomo para este voltar para seu estado inicial, não-excitado. Dentre as várias formas de relaxação que podem ocorrer estão aquelas que envolvem a ejeção de um ou mais elétrons ou a emissão de fótons.

A fotoionização consiste na retirada direta de um elétron da camada de valência ou do caroço pelo fóton incidente. A fotoionização indireta consiste na emissão de elétrons Auger. Essa emissão por sua vez é base da técnica AES (Auger Electron Spectroscopy). No processo de emissão Auger o elétron emitido é resultado de transições de energia secundárias através de decaimentos do elétron excitado para vacâncias livres, o que acarreta na liberação de energia do átomo, que pode ser na forma de fótons ou transferindo essa energia para outro elétron que será liberado com a energia de ligação, esse sendo o elétron Auger.

Neste trabalho foi feita a análise de dados da amostra aquosa de tiosulfato de sódio em concentração de 1.5 M obtidos no experimento realizado no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron -LNLS nos anos de 2012 e 2013. Realizou-se a análise dos

dados através de softwares computacionais com o objetivo de refinar os dados e os espectros para as conclusões finais do trabalho.

II. EXPERIMENTO

A radiação síncrotron é emitida quando partículas carregadas, movendo-se com velocidade relativística, são submetidas à aceleração centrípeta [4]. A produção de luz síncrotron é devido a um sistema composto de:

- 1 Uma fonte de elétrons
- 2 Um sistema primário de aceleração do feixe de elétrons
- 3 Um anel de armazenamento
- 4 Uma saída do sistema que guie a radiação para o experimento

O anel de armazenamento é um acelerador que mantém os elétrons em velocidade relativística, apesar da órbita fechada, utilizando vários ímãs. A corrente de elétrons no anel de armazenamento tem uma vida útil de algumas horas e depois de um período precisa ser recarregada. No anel de armazenamento, em seus segmentos retos, estão localizados conjuntos de ímãs que forçam os elétrons em sua trajetória. Esses ímãs podem ser do tipo dipolo ou um conjunto deles sendo eles os “unduladores” e os “wigglers”, [4,6]. As duas espécies se diferem na magnitude dos campos magnéticos regidos pelo parâmetro k :

$$k = \frac{\alpha}{\frac{1}{\gamma}} \approx 0.934B_0\lambda_0 \quad (2)$$

Sendo α , o ângulo de máxima deflexão; $1/\gamma$ o ângulo de abertura natural; B_0 a amplitude do campo magnético; λ_0 o comprimento periódico do conjunto de ímãs, em centímetros. O parâmetro k muito maior que 1 define os “wigglers” que

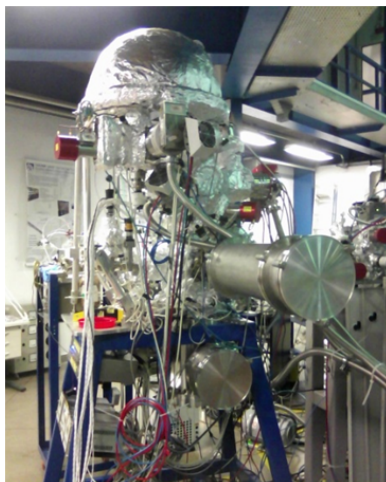


Figura 1: *Espectrômetro de elétrons acoplado a câmara experimental e à fonte de luz síncrotron.*

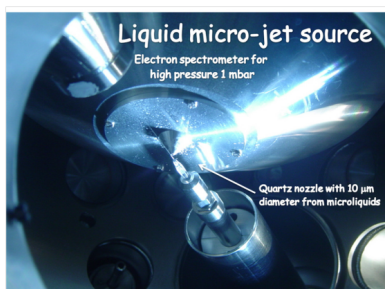


Figura 2: *Interior do aparato, onde podemos ver a entrada do espectrômetro cônica na parte de cima e o jato líquido.*

contribuem separadamente como a soma de suas intensidades. Se k for menor ou igual a 1, definem-se os “undulators” e esses somam coerentemente. A Figura 1 mostra a câmara experimental com o espectrômetro de elétrons que utilizamos nas medidas.

A câmara experimental é composta pelo analisador de elétrons, pela entrada da fonte de luz síncrotron, pela entrada da amostra e pelas armadilhas de nitrogênio líquido e as bombas de vácuo. Como a amostra é líquida a única forma de se manter a câmara experimental em vácuo é utilizar a técnica microjato para colocar a amostra dentro da câmara. O microjato também é importante para a visualização do espectro de líquidos com boa

resolução, pois ao ser bombardeado para dentro do equipamento, se não se utilizasse o microjato, um vapor seria formado ao seu redor devido ao vácuo, impossibilitando a análise devido a possíveis ionizações do vapor e às colisões entre os elétrons da amostra e o seu vapor. Na parte central do aparato está a câmara de interação, onde a luz síncrotron encontra o microjato, como mostra a Figura 2. O microjato após interagir com a luz é armazenado na forma de gelo na armadilha de nitrogênio líquido para manter o vácuo necessário na câmara de medidas.

Para funcionamento das bombas de vácuo, utilizou-se quatro reservatórios de Nitrogênio líquido no resfriamento dos instrumentos, Figura 3.



Figura 3: Reservatórios de nitrogênio líquido.

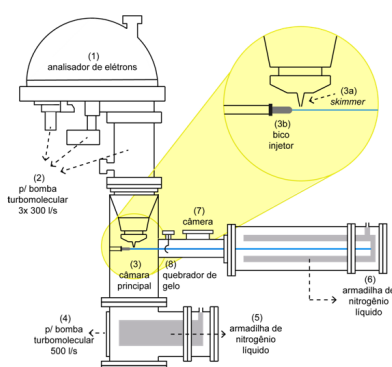


Figura 4: Aparato experimental para a espectroscopia de elétrons em líquidos: (1) analisador de elétrons Scienta R4000, (2,4) sistema de bombeamento com bombas turbo, (3) câmara principal de medidas, (3a) skimmer que auxilia no bombeamento diferencial, (3b) bico injetor de quartzo, (5) armadilha de nitrogênio líquido que funciona como uma bomba criogênica, (6) armadilha de nitrogênio líquido que funciona como bomba criogênica e armazena o líquido congelado após as medidas, (7) câmara de monitoramento do perfil de gelo, (8) quebrador de gelo. Retirado da Ref. [7].

Depois de passar pela câmara de interação, os elétrons ejetados da amostra são atraídos para o analisador através de campos eletrostáticos. Somente os elétrons com a energia cinética dentro do intervalo escolhido para as medidas são medidos. Os elétrons que passam através do hemisfério geram vários elétrons secundários em um multiplicador e finalmente são registrados como um sinal luminoso numa câmara CCD. Para melhor

visualização segue um esquema do analisador de elétrons na Figura 4.

A preparação da amostra foi feita no laboratório químico dentro do LNLS. Primeiramente, a amostra precisa ser pesada ou medida, para obter-se a concentração correta e depois misturada com água milli-Q. Um processo de filtragem da amostra é necessário para se evitar o entupimento do microjato que tem apenas 15 μm . Posteriormente,

passa-se amostra por um aparelho de ultrassom para a retirada das bolhas de ar que prejudicam o funcionamento da bomba HPLC que bombeia o líquido para dentro da câmara experimental através do microjato. Antes de passar a amostra pelo espectrômetro, o mesmo foi calibrado usando uma solução de água+NaCl numa concentração fisiológica.

III. TRATAMENTO DE DADOS

O espectrômetro Scienta registra os espectros em arquivos que são lidos e trabalhados com o software IGOR PRO 4.09, [5]. Os dados iniciais são espectros da intensidade de elétrons pela sua energia cinética, como na Figura 5.

Posteriormente, todos os gráficos obtidos são ajustados para a mesma energia em uma mesma escala, utilizando a função scale-spectrum, para só então somar os espectros obtendo como resultado um gráfico mais suave, com melhor estatística de contagens, como o da Figura 6.

Após a soma seguiu-se a análise dos espectros com a retirada do background e com a análise final.

IV. ANÁLISE DE DADOS

A análise de espectros de fotoelétrons em amostras gasosas foi recentemente publicada, Ref. [2], e mostram um padrão oscilatório, no gráfico da razão entre as intensidades registradas das moléculas estudadas em função da energia do fóton. Essas oscilações são interpretadas como uma modulação ‘tipo’-EXAFS da seção de choque de fotoionização que é dominada pelo retro espalhamento dos elétrons pelos átomos vizinhos. O objetivo desse trabalho é verificar se esse mesmo fenômeno se aplica a amostras em solução. A molécula esco-

lhida foi o $S_2O_3^{-2}$ que surge da dissociação do tiosulfato de sódio ($Na_2S_2O_3$) em água ($2Na^+$ e $S_2O_3^{-2}$), conforme pode ser observado na Figura 7. Para isso, gravamos diversos espectros de fotoelétrons, como o da figura 4.19, na borda S2p na região de 190 a 670 eV. Construímos um gráfico da razão da área dos picos (SO_3/SS) versus a energia dos fótons, onde a área de um dado pico é a soma das componentes S2p1/2 e S2p3/2 referentes a um enxofre.

Na figura 6 apresentamos o espectro de fotoelétrons da borda S2p da solução aquosa de tiosulfato de sódio com energia de fótons de 195 eV. Os dois picos S2p foram ajustados com a convolução de uma Gaussiana e uma Lorentziana, onde o tempo de vida do estado é fixado aos valores da fase gasosa encontrados na literatura (S2p – 70 meV) [88]. A largura da Gaussiana estava livre para variar, no entanto, cada pico de um dado duplete foi forçado a apresentar o mesmo valor de largura. Também fixou-se a distância entre os dubletos e a distância entre as componentes S2p1/2 e S2p3/2 de cada duplete. Ainda na figura 6, observa-se que os dois dubletos que surgem no espectro são referentes aos dois enxofres do grupo S- SO_3 presentes na solução aquosa. O duplete com energia de ligação mais alta está associado ao enxofre ligado aos oxigênios que têm maior eletronegatividade. Por sua vez, o enxofre isolado, ligado ao outro enxofre, possui a energia de ligação mais baixa. Este último pode fazer ligações de hidrogênio, o que pode aumentar a largura do pico comparado ao do SO_3 devido a um número variado de coordenações possíveis da molécula.

Observou-se as oscilações e que elas tendem a se estabilizar em torno da razão igual a 1, e as amplitudes das oscilações diminuem assintoticamente com o aumento da energia dos fótons incidentes. Isso significa que a seção de choque de fotoionização não é constante, mas depende da energia do fóton incidente. Modelos teóricos estão sendo

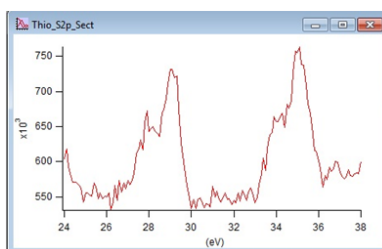


Figura 5: Espectro obtido dos dados brutos.

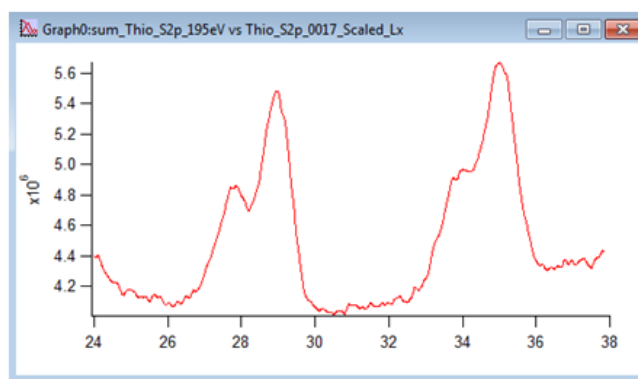


Figura 6: Espectro obtido dos dados brutos.

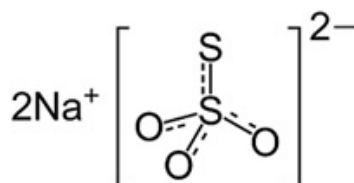


Figura 7: Molécula de Tiosulfato de Sódio.

desenvolvidos para melhor interpretar os resultados obtidos.

V. CONCLUSÃO

O trabalho com amostras aquosas é complexo. Porém, com os avanços tecnológicos mostramos que é possível o estudo de amostras líquidas

usando-se espectroscopia de fotoelétrons. A espectroscopia de fotoelétrons em amostras aquosas abre precedente para o entendimento da relação soluto e solvente. A observação do mesmo fenômeno em amostras gasosas e aquosas permite pensar em uma causa semelhante, oferecendo uma nova forma de abordar os problemas acerca das anomalias presentes no comportamento da água.

REFERÊNCIAS

- [1] Dass, C. “Fundamentals of contemporary mass spectrometry”.
- [2] J. Söderström, N. Mårtensson, O. Travnikova, M. Patanen, C. Miron, L. J. Sæthre, K. J. Børve, J.J. Rehr, J. J. Kas, F. D. Vila, T. D. Thomas, and S. Svensson. Phys. Rev. Lett.108:193005, 2012.
- [3] Laboratório Nacional de Luz Síncroton. Disponível em: <http://lnls.cnpem.br/>.
- [4] Ottosson, N. “Aqueous Solution as seen through an electron spectrometer”.
- [5] VGScienta.Disponível em: <http://www.vgscienta.com/productlist.aspx?MID=22>.
- [6] Weber, R. “Experimental method and equipment on electron spectroscopy applied at liquids”.
- [7] da Silva, A. M. “ESPECTROSCOPIA ELETRÔNICA DE VÁCUO EM SOLUÇÕES AQUOSAS”, Tese de Doutorado, 2014, Universidade de Brasília, Instituto de Física.

Radiação Cósmica de Fundo em Micro-ondas

GABRIELA ANTUNES MARQUES*

Universidade de Brasília

Resumo

A detecção da radiação cósmica de fundo foi um dos marcos da era da Cosmologia de precisão. A partir de medidas de suas propriedades, pode-se extrair informações sobre as características do Universo ainda jovem e, em conjunto com outros dados, estabelecer o cenário cosmológico atual, conhecido como Λ CDM. Este artigo é destinado a discorrer sobre as principais propriedades cosmológicas desta observável além de expor algumas questões ainda em aberto.

Palavras-chave: Cosmologia- Radiação Cósmica de Fundo- Anisotropias Secundárias

I. RADIAÇÃO CÓSMICA DE FUNDO EM MICRO-ONDAS

Entre 1930 a 1950, diversas teorias foram propostas a fim de descrever a evolução termodinâmica do Universo ([1], [2], [3], por exemplo). Entre elas, Alpher e Herman em 1948, propuseram que o Universo primordial deveria estar permeado por uma radiação que esteve em equilíbrio térmico com a matéria [4]. Em meados da década de 50, George Gamow e colaboradores, incluindo Alpher e Herman, formularam uma série de estimativas da *temperatura de fundo* (termo utilizado pelos autores para se referir à temperatura desta radiação) que variavam de 3 a 50 Kelvin [5]. Na década de 40, medidas de moléculas

de cianogênio do meio interestelar relataram evidências de um equilíbrio em uma radiação térmica em torno de $2,3 \text{ K}^1$. No entanto, somente em 1965, Arnold Penzias e Robert Wilson, utilizando uma antena destinada a testes com satélites de telecomunicações do laboratório *Bell Telephone Laboratories*, detectaram um excesso de sinal de origem desconhecida em todas as direções do céu [8]. Na mesma época, Dicke em colaboração com Peebles, Roll e Wilkinson, tentavam construir um experimento que realizasse uma medida da radiação proveniente do Universo primordial e assim, eles forneceram a interpretação cosmológica correta do sinal encontrado por Penzias e Wilson [9]. Para uma discussão detalhada sobre a história da detecção da RCF,

*Aluna de doutorado do Observatório Nacional. Fez graduação em Física na UnB. Atualmente trabalha com foco em efeito de lentes gravitacionais fracas na RCF, propriedades fundamentais da RCF e correlação com dados de estrutura em grande escala. Email: gabrielamarques@on.br

¹Trabalhos por exemplo do [6] e [7]

veja [11].

Desde a primeira detecção desta radiação, denominada então como radiação cósmica de fundo (RCF), diversos instrumentos foram projetados com a finalidade de extrair suas características. Uma delas, foi o espectro térmico estimado por Roll e Wilkinson, cujo ajuste é próximo a uma curva de um corpo negro [10]. Este resultado, também confirmado por outros experimentos, mostra que temperatura média da RCF é igual a $2,72548 \text{ K} \pm 0,00057 \text{ K}$ [12, 13] e pode ser visualizado na figura 1. Esta propriedade é um dos pilares do modelo cosmológico padrão pois favorece o cenário em que o Universo, quando jovem, era quente e denso de modo a permitir que radiação e matéria estivessem em equilíbrio térmico no plasma primordial.

Ao passo que o Universo sofre expansão adiabática e em uma temperatura de $\sim 3000\text{K}$, os fótons da RCF se desacoplaram da matéria e se propagaram livremente. A região em que ocorre a última interação entre matéria e radiação, antes do desacoplamento, é denominada como **última superfície de espalhamento** (USE). Desde então, a frequência destes fótons primordiais é alterada (hoje possui máximo de intensidade localizado na faixa de micro-ondas) e a temperatura do corpo negro diminui.

Após a detecção da RCF, diversas questões foram levantadas como por exemplo, a necessidade de medir pequenas flutuações de temperatura presentes na radiação. Esta detecção seria um indício da existência de perturbações primordiais originadas (possivelmente) na era inflacionária, que por sua vez são fundamentais para entender o mecanismo de formação de estruturas. Em 1967, variações na temperatura correspondente ao dipolo cinemático foram confirmadas com uma amplitude de

$\Delta T/T \sim 10^{-3}$ pelo experimento projetado por Partridge e Wilkinson [33] e mais tarde, flutuações da ordem de $\Delta T/T \sim 10^{-5}$ pelo experimento *Diferencial Microwave Radiometer*, a bordo do satélite COBE [14]. As pequenas flutuações de temperatura na RCF, denominadas anisotropias primárias por terem origem antes da USE, correspondem a pequenas variações na densidade e na velocidade do plasma primordial, de forma que pode-se conhecer diversas propriedades cosmológicas, a partir da análise destes dados (ver por exemplo, [15]).

II. INFORMAÇÕES COSMOLÓGICAS A PARTIR DAS ANISOTROPIAS PRIMÁRIAS

Uma vez que as flutuações de temperatura $\frac{\Delta T}{T}$ são definidas na esfera celeste, elas podem ser representadas em termos da expansão dos harmônicos esféricos:

$$\frac{\Delta T}{T}(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (1)$$

onde os a_{lm} são os coeficientes da expansão e $Y_{lm}(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos. O momento m descreve a orientação angular das flutuações, enquanto que o multipolo l está associado a escala angular. O monopolo, $l = 0$, corresponde ao valor médio da temperatura da RCF ($T = 2,725 \text{ K}$), enquanto que o termo de dipolo ($l = 1$), trata-se efeito do Doppler devido ao nosso movimento em relação ao referencial da RCF, isto é, uma propriedade cinemática [17]. Este efeito possui amplitude igual a $3,335 \pm 0,008 \text{ mK}$ [20].

Assumindo isotropia estatística, as propriedades das flutuações de temperatura, podem ser descritas no espaço harmônico pelo espectro de potência C_l onde,

$$\langle a_{lm}^* a_{l'm'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} C_l, \quad (2)$$

em que os termos em colchetes angulados representam uma média angular calculada para todo o céu e δ é a Função Delta de Dirac.

Estimamos o espectro de potência C_l utilizando então:

$$C_l = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |a_{lm}|^2. \quad (3)$$

A curva que relaciona o espectro de potência C_l com os valores dos momentos de multipolo l , possui picos ligados a quantidades fundamentais sobre a evolução do Universo, conhecidos como parâmetros cosmológicos. Desta forma, pode-se confrontar a predição teórica com a detecção em diferentes escalas angulares do céu e assim, restringir tais parâmetros e o modelo cosmológico que melhor descreve tal cenário [23]. Os dados do espectro de potência recentemente obtidos pelo satélite Planck, juntamente com a curva de melhor ajuste está representado na figura 2.

De acordo com o modelo de melhor ajuste, em grandes escalas angulares, isto é, $l \lesssim 50$, o comportamento dos C_l é dominado pelas variações do potencial gravitacional primordial devido à flutuações na densidade, conhecido como efeito Sachs-Wolfe (SW). A origem das flutuações de temperatura em pequenas escalas angulares ($l \gtrsim 50$) deve-se a interação fóton-bárion no plasma primordial, denominada de **oscilações acústicas**, onde os picos representados no espectro de potência estão associados aos modos harmônicos desta oscilação. O primeiro pico, por exemplo, em ~ 1 , representa o harmônico fundamental e pode ser utilizado para aferir a curvatura do Universo (para uma revisão detalhada ver: [26] e [18]).

A figura 3 mostra a combinação de curvas de contorno de confiança em uma variedade de modelos de energia escura a partir

de parâmetros cosmológicos estimados por diferentes observáveis, incluindo por medidas da RCF do satélite Planck. Dentre os cenários expostos, o modelo Λ CDM (do inglês, *Λ Cold Dark Matter*), que considera a existência da componente de energia escura Λ e matéria escura fria, é o que apresenta melhor concordância com os dados observacionais, motivo pelo qual o mesmo é chamado também de modelo padrão. Maiores detalhes sobre modelos com a componente de energia escura e as motivações observacionais em [51], [19].

I. Não-Gaussianidades das Anisotropias Primárias da RCF

As observações das flutuações da RCF refletem perturbações de densidade geradas ainda na época de inflação cosmológica. Tal período, pode ser descrito quando a densidade de energia do Universo é dominada por uma densidade de energia de vácuo associada com o potencial de um campo escalar, chamado o campo inflatón. Como as perturbações cosmológicas primordiais possuem baixa amplitude, seu mecanismo de geração e evolução durante a inflação tem sido estudado dentro da teoria de perturbação linear. Nesta abordagem, as perturbações de densidades primordiais são Gaussianas, em outras palavras, as suas componentes de Fourier não estão correlacionados e tem fases aleatórias. Espera-se então neste cenário, que as flutuações de temperatura da RCF tenham distribuição aproximadamente gaussiana [28].

Testes envolvendo estimadores capazes de detectar sinais não-gaussianos na RCF são importantes por diversos motivos. Um deles é verificar se o espectro de potência contém todas as informações estatísticas para caracterizar este campo ou se há também in-

formação em correlações de ordens superiores. Além disto, através de medidas de não-gaussianidades (NG), pode-se detectar contaminantes residuais, efeitos secundários, erros sistemáticos instrumentais ou causados pelo processamento dos dados e desta forma, remover tais efeitos [27]. É possível ainda, através da busca por sinais NG na distribuição das flutuações de temperatura da RCF, restringir alguns cenários propostos para explicar o mecanismo de geração de perturbações cosmológicas.

A idéia básica do modelo de inflação foi inicialmente proposta na década de 80, a fim de solucionar alguns problemas do modelo do *Big Bang*, tais como a planaridade, o problema do horizonte e dos monopólos ². De acordo com o modelo de concordância cosmológica atual, as anisotropias primárias da RCF são causadas devido à inhomogeneidades primordiais do Universo. Tais perturbações, geradas no período de inflação, se tornaram as sementes para formação das estruturas observadas atualmente [34]. Os dados recentes do satélite Planck concordam que estas anisotropias primárias têm uma distribuição aproximadamente gaussiana [35]. No entanto, há diferentes cenários propostos que gerariam diferentes tipos e níveis de NG, inclusive em limites instrumentais ainda não alcançáveis [36, 37, 38]. Evidências da existência de NG são, então, uma forma de testar e restringir tais classes de modelos.

Vários métodos de análise estatística foram empregados, a fim de detectar NG primordiais na distribuição da RCF (por exemplo, [39, 40, 41, 42, 43]). Entre eles, estão as correlações de alta ordem no espaço dos harmônicos, denominados como biespectro

(correlação de três pontos) ou ainda o trispectro (correlação de quatro pontos).

O biespectro \mathcal{B}_Φ é definido em termos das perturbações no potencial gravitacional primordial $\Phi(\mathbf{x})$. Considerando o regime linear, o potencial pode ser escrito como a combinação de um termo gaussiano ϕ_L mais uma contribuição não-gaussiana ϕ_{NL} , tal que

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi_L(\mathbf{x}) + \phi_{NL}(\mathbf{x}) = \phi_L(\mathbf{x}) + f_{NL}[\phi_L^2(\mathbf{x}) + \langle \phi_L^2(\mathbf{x}) \rangle], \quad (4)$$

onde f_{NL} é um parâmetro adimensional e representa a amplitude da contribuição NG. Para o caso das flutuações gaussianas, o f_{NL} esperado seria igual a 0. As flutuações de temperatura da RCF estão diretamente relacionadas a este potencial, de forma que a correlação de três-pontos destas flutuações podem ser expressas em termos de Φ [35], onde

$$\langle \Phi(\mathbf{k}_1)\Phi(\mathbf{k}_2)\Phi(\mathbf{k}_3) \rangle = (2\pi)^3 \mathcal{B}_\Phi(k_1, k_2, k_3) \delta^{(3)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3), \quad (5)$$

em que $\Phi_{\mathbf{k}}$ é a transformada de Fourier do potencial.

O biespectro \mathcal{B}_Φ pode ser escrito como

$$\mathcal{B}_\Phi(k_1, k_2, k_3) = f_{NL} F(k_1, k_2, k_3), \quad (6)$$

onde a função $F(k_1, k_2, k_3)$ é denominada *forma do biespectro*. Os parâmetros f_{NL} podem ser restringidos a partir de observações da RCF e calculados teoricamente para diferentes modelos do universo primordial.

A partir da definição delta de Dirac da equação (5), se tem a condição para os vetores de onda no espaço de Fourier

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0. \quad (7)$$

²Para maiores detalhes ver [29, 32, 30, 31])

Há então, diferentes configurações triangulares para os vetores de onda. Consequentemente, cada uma delas está relacionada a um tipo específico de NG e por sua vez, a distintos mecanismos físicos do Universo primordial. Há três tipos de configurações consideradas com maior recorrência na literatura, sendo elas, local (f_{NL}^{LOCAL}), ortogonal (f_{NL}^{ORTO}) e equilátero (f_{NL}^{EQUIL}) (maiores detalhes podem ser encontrados em [44]). Resultados recentes encontrados pelo satélite Planck restringem os valores a: $f_{NL}^{LOCAL} = 0,8 \pm 5,0$, $f_{NL}^{ORTO} = -26 \pm 21$ e $f_{NL}^{EQUIL} = -4 \pm 43$, onde as incertezas indicam 1σ de confiança [35].

Estes valores ainda admitem uma grande classe de modelos. Portanto, é necessário restringir NG primordiais de maneira cada vez mais precisa e utilizando outros estimadores, pois tratam-se de sinais de amplitude extremamente pequena. Além disto, outros mecanismos secundários podem interferir em tal detecção, ocultando as pequenas NG primordiais.

II. Anisotropias da Polarização

Perturbações primordiais resultam não apenas em variações na temperatura, mas geram também polarização em pequenas frações no campo da RCF [45]. Através de sua determinação, é possível extrair informações cosmológicas adicionais como por exemplo, melhorar as estimativas dos parâmetros cosmológicos e restringir alguns modelos inflacionários. Isto é possível porque o modo e intensidade de polarização está diretamente ligado ao tipo de perturbação que a originou [46].

Características da radiação polarizada podem ser descritas pelos parâmetros de Stokes, ou podem ser decompostas nas componen-

tes E (irrotacional) e B (divergente nulo). A principal vantagem da utilização das componentes E e B está na possibilidade de expandi-los em harmônicos esféricos e, desta forma, fazer análises da polarização através dos seus espectros de potência e correlações cruzadas [18]. Assim, o modo EE, ou seja, a correlação desta componente, resulta em seu espectro de potência C_l^{EE} de forma

$$\langle E_{lm}^* E_{l'm'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} C_l^{EE}, \quad (8)$$

e de maneira análoga para o modo de polarização BB, o espectro de potência C_l^{BB} satisfaz

$$\langle B_{lm}^* B_{l'm'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} C_l^{BB}. \quad (9)$$

A primeira detecção do modo EE foi realizada em uma pequena região do céu pelo experimento DASI (do inglês, *Degree Angular Scale Interferometer*) [48]. No entanto, ainda não há medidas do modo BB devido a processos primordiais. A existência do modo EE, corrobora com perturbações escalares ou tensoriais no fluido primordial, uma vez que ambos tipos gerariam tal assinatura. A detecção do modo BB indicaria perturbações do tipo tensorial e seria uma medida indireta de ondas gravitacionais primordiais [18]. Há ainda, outras classes de modelos inflacionários que produziram tais modos.

Além da amplitude do modo BB ser muito menor que a do modo EE, há outros mecanismos físicos que dificultam sua possível detecção, pois também produzem este tipo de polarização. Um destes, pode ser associado a *foregrounds* (contaminações da Galáxia), assim como também ao efeito de lentes gravitacionais fracas (LGF). Em 2014, medidas de polarização da RCF através do experimento BICEP2 (do inglês, *Background Imaging of Cosmic Extragalactic Polarization*) revelaram

a possibilidade da detecção do modo BB de polarização primordial [47]. No entanto, foi verificado posteriormente que tal sinal foi produzido pela contaminação de poeira cósmica corroborando então, com a necessidade de um domínio completo dos *foregrounds* para fazer Cosmologia observacional de precisão [49].

A figura 4 mostra o espectro de potência para cada modo de polarização da RCF, comparado com o espectro produzido devido ao LGF e ao da temperatura da RCF. Nota-se que, principalmente em grandes multipolos ($l > 200$), o sinal gerado por LGF interfere na possibilidade de detecção do modo BB da polarização da RCF.

III. ANISOTROPIAS SECUNDÁRIAS

Durante a propagação dos fótons ocorrem diversos mecanismos físicos que também geram flutuações de temperatura nos mapas da RCF devido à estruturas (galáxias, estrelas, poeira, etc) que estão ao longo do caminho. Tais flutuações são decorrentes de processos de interações não-primordiais, isto é, originadas após a USE e por isto são denominadas de **anisotropias secundárias**. Um destes processos acontece quando os fótons atravessam o interior de aglomerados de galáxias e sofrem espalhamento Compton inverso por elétrons energéticos do meio. Tal efeito foi descrito primeiramente por Sunyaev e Zel'dovich [21], motivo pelo qual é denominado como efeito Sunyaev-Zel'dovich (efeito SZ). Uma das principais propriedades deste efeito é gerar distorções no espectro térmico da RCF. Quando os aglomerados possuem movimento em relação aos fótons, a distorção espectral da RCF gera uma assinatura adicional causada por este efeito cinético (efeito Doppler), denomi-

nado efeito SZ cinemático, enquanto que as distorções causadas apenas pela interação entre os fótons e elétrons do meio, produzem o efeito SZ térmico.

Causado predominantemente por estruturas em grande escala, o efeito Sachs-Wolfe integrado (SWI) é uma anisotropia secundária gerada pela interação entre os fótons da RCF com campos gravitacionais que variam com o tempo ao longo da trajetória. O efeito SWI está diretamente ligado ao crescimento de estruturas onde a energia escura é predominante [51]. O espectro de potência da RCF é sensível a este efeito principalmente para pequenos valores de l , porém, o espectro de corpo negro não é alterado [22]. A principal forma de detecção de SWI é através de correlações cruzadas com traçadores de matéria.

Os fótons da RCF, provenientes da USE, sofrem deflexões devido a variações do potencial gravitacional ao longo da trajetória, isto é, o chamado efeito de lentes gravitacionais fracas (LGF). Uma das principais consequências de LGF nos mapas da RCF, é a distorção do padrão espacial das anisotropias primárias de temperatura e polarização e por consequência mudança no espectro de potência e introduzir sinais não-gaussianos. Tal efeito está correlacionado com o efeito SWI uma vez que ambos possuem origem gravitacional, no entanto, com mecanismos físicos (e escalas angulares) distintos. Apesar de alterar as propriedades da RCF, o efeito de LGF está diretamente ligado à distribuição de matéria do Universo, podendo então, ser utilizado como ferramenta para estudo de informações cosmológicas [52].

Além das anisotropias secundárias, há outros mecanismos de emissão nas mesmas frequências da RCF provenientes da nossa Galáxia ou do meio extragaláctico, que tam-

bém contaminam o sinal das anisotropias primárias. O estudo destas emissões galácticas, denominadas *foregrounds*, são essenciais para separar o sinal da RCF, além de carregarem consigo importantes informações do meio interestelar, donde se originam.

IV. CONCLUSÃO

Observações da RCF fornecem informações fundamentais sobre a história do Universo, uma vez que é originada quando ele era 10^5 vezes mais jovem e cerca de 10^9 vezes mais denso. Através do seu espectro e propriedades das anisotropias de temperaturas e polarização, torna-se possível validar diferentes classes de modelos cosmológicos. Apesar do modelo padrão (Λ CDM) melhor se ajustar aos dados observacionais, ainda há uma série de questões em aberto que podem ser solucionadas com detecções cada vez mais sensíveis da RCF, como por exemplo:

- Entender melhor a natureza do setor escuro, uma vez que através dos dados da RCF, em combinação com outras observáveis (Supernovas, oscilações acústicas

bariônicas, por exemplo), é possível restringir e obter maiores informações sobre os ingredientes que compõem o Universo.

- O período inflacionário ainda permanece um paradigma, de forma que a detecção do modo BB de polarização da RCF, poderia validar e romper a degenerescência de diferentes classes de modelos inflacionários. Além disto, testes com estimadores de NG com dados cada vez mais precisos, contribuem para caracterizar as perturbações primordiais.
- Há ainda, limitações astrofísicas e observacionais para obtenção do mapa da RCF, como a contaminação da nossa Galáxia e anisotropias secundárias. Torna-se necessário então, um estudo mais aprofundado de tais contaminantes para que se possa subtraí-las do sinal da RCFM sem corromper suas informações cosmológicas. Além disso, como tratam-se de sinais provenientes ao longo da linha de visada, é possível ainda extrair informações cosmológicas a partir do estudos destas componentes.

REFERÊNCIAS

- [1] Tolman, C., *Effect of inhomogeneity on cosmological models*, Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America, 20, 3, 169, 1934
- [2] Gamow, G., *Expanding universe and the origin of elements*, Physical Review, 70, 7-8, 572, 1946
- [3] Dicke, R. H., *The measurement of thermal radiation at microwave frequencies*, Review of Scientific Instruments, 17, 7, 268–275, 1946
- [4] Alpher, A. and Herman, R., *Evolution of the Universe*, Nature, 162, 774–775, 1948
- [5] Gamow, G., *The physics of the expanding universe*, Vistas in Astronomy, 2, 1726–1732, 1956
- [6] McKellar, A., *Evidence for the molecular origin of some hitherto unidentified interstellar lines*, Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 187–192, 1940
- [7] Adams, W. S., *Some Results with the COUDÉ Spectrograph of the Mount Wilson Observatory*, The Astrophysical Journal, 93, 11, 1941
- [8] Penzias, A. A, Wilson, R. W., *A Measurement of Excess Antenna Temperature at 4080 Mc/s.*, The Astrophysical Journal, 142, 419–421, 1965
- [9] Dicke, H., Peebles, P. J., Roll, P. G, Wilkinson, D., *Cosmic Black-Body Radiation*, The Astrophysical Journal, 142, 414–419, 1965
- [10] Roll, P., Wilkinson, D., *Cosmic background radiation at 3.2 cm-support for cosmic black-body radiation*, Physical Review Letters, 16, 10, 405, 1966
- [11] Peebles, P.J., Page, L., Partridge, R., *Book Review: Finding the Big Bang*, Journal for the History of Astronomy, 41, 137–138, 2010
- [12] Fixsen, D., *The temperature of the cosmic microwave background*, The Astrophysical Journal, 707, 2, 916, 2009
- [13] Mather, J. *et al.*, *Measurement of the cosmic microwave background spectrum by the COBE FIRAS instrument*, The Astrophysical Journal, 420, 439–444, 1994
- [14] Smoot, G., *et al*, *Structure in the COBE differential microwave radiometer first-year maps*, The Astrophysical Journal, 396, L1–L5, 1992
- [15] Sugiyama, N., *Cosmic background anisotropies in CDM cosmology*, arXiv preprint astro-ph/9412025, 1994
- [16] Smoot, G., *Recurso Online*, <http://cosmos.lbl.gov/cobehome.html#firas>, 2007, Acessado em: 2015-06-20

- [17] Ryden, B., *Introduction to cosmology*, 1, 191-199, 2003
- [18] Hu, W., Dodelson, S., *Cosmic microwave background anisotropies*, arXiv preprint astro-ph/0110414, 2001
- [19] Yoo, J., Watanabe, Y., *Theoretical models of dark energy*, International Journal of Modern Physics D, 21, 12, 1230002, 2012
- [20] Scott, D., Smoot, G., *Cosmic microwave background mini-review*, arXiv preprint arXiv:1005.0555, 2010
- [21] Zeldovich, Y., Sunyaev, R., *The interaction of matter and radiation in a hot-model universe*, Astrophysics and Space Science, 4, 3, 301–316, 1969
- [22] Ade, P., et al., *Planck 2013 results. XIX. The integrated Sachs-Wolfe effect*, Astronomy & Astrophysics, 571, A19, 2014
- [23] Kosowsky, A., *The cosmic microwave background*, arXiv preprint astro-ph/0102402, 2001
- [24] Ade, P., et al., *Planck 2013 results. XVI. Cosmological parameters*, Astronomy & Astrophysics, 571, A16, 2014
- [25] Aubourg, É., et al., *Cosmological implications of baryon acoustic oscillation (BAO) measurements*, arXiv preprint arXiv:1411.1074, 2014
- [26] Liddle, A., *An introduction to modern cosmology*, 2015, 75-83, John Wiley & Sons
- [27] Vielva, P., Martínez-G., *Detection of non-gaussianity in the Wilkinson microwave anisotropy probe first-year data using spherical wavelets*, The Astrophysical Journal, 609, 1, 22, 2004
- [28] Bartolo, N., et al., *Non-Gaussianity from inflation: theory and observations*, Physics Reports, 402, 3, 103–266, 2004
- [29] Guth, A., *Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems*, Physical Review D, 23, 2, 347, 1981
- [30] Linde, A., *A new inflationary universe scenario: A possible solution of the horizon, flatness, homogeneity, isotropy and primordial monopole problems*, Physics Letters B, 108, 6, 389–393, 1982
- [31] Sato, K., *First-order phase transition of a vacuum and the expansion of the Universe*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 195, 3, 467–479, 1981
- [32] Matthias B., Schneider, P., *Weak gravitational lensing*, Physics Reports, 340, 4–5, 291 - 472, 2001

- [33] Wilkinson, D., Partridge, R., *Large scale density inhomogeneities in the universe*, Nature Publishing Group, 1967
- [34] Modest, H., *et al.*, *Scale-dependent non-Gaussianities in the CMB data identified with Minkowski functionals and scaling indices*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 428, 1, 551–562, 2013
- [35] Ade, P., *et al.*, *Planck 2013 results. XXIV. Constraints on primordial non-Gaussianity*, Astronomy & Astrophysics, 571, A24, 2014
- [36] Verde, L., *et al.*, *Large-scale structure, the cosmic microwave background and primordial non-Gaussianity*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 313, 1, 141–147, 2000
- [37] Bernardeau, F., Uzan, J., *Inflationary models inducing non-Gaussian metric fluctuations*, Physical Review D, 67, 12, 121301, 2003
- [38] Chen, X., *et al.*, *Large non-Gaussianities in single-field inflation*, Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, 2007, 06, 023, 2007
- [39] Bernui, A., *et al.*, *Deviation from Gaussianity in the cosmic microwave background temperature fluctuations*, EPL (Europhysics Letters), 78, 1, 19001, 2007
- [40] Chiang, L., *et al.*, *Non-gaussianity of the derived maps from the first-year wilkinson microwave anisotropy probe data*, The Astrophysical Journal Letters, 590, 2, L65, 2003
- [41] McEwen, J., *et al.*, *A high-significance detection of non-Gaussianity in the WMAP 5-yr data using directional spherical wavelets*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 388, 2, 659–662, 2008
- [42] Yadav, A., Komatsu, E., Wandelt, B., *Fast estimator of primordial non-Gaussianity from temperature and polarization anisotropies in the cosmic microwave background*, The Astrophysical Journal, 664, 2, 680, 2007
- [43] Dalal, N., *et al.*, *Imprints of primordial non-Gaussianities on large-scale structure: Scale-dependent bias and abundance of virialized objects*, Physical Review D, 77, 12, 123514, 2008
- [44] Bartolo, N., Matarrese, S., Riotto, A., *Non-Gaussianity and the cosmic microwave background anisotropies*, Advances in Astronomy, 2010,
- [45] Cabella, P., Kamionkowski, M., *Theory of cosmic microwave background polarization*, arXiv preprint astro-ph/0403392, 2004
- [46] Kosowsky, A., *Cosmic microwave background polarization*, arXiv preprint astro-ph/9501045, 1995

- [47] Ade, P., *et al.*, *Detection of B-mode polarization at degree angular scales by BICEP2*, Physical Review Letters, 112, 24, 2014
- [48] Kovac, J., *et al.*, *Detection of polarization in the cosmic microwave background using DASI*, Nature, 420, 6917, 772–787, 2002
- [49] Ade, P. *et al.*, *Joint analysis of BICEP2/Keck Array and Planck data*, Physical review letters, 114, 10, 101301, 2015
- [50] Yuki D. T., *Recursos Online: Caltech Observational Cosmology*, http://bicep.caltech.edu/public/bicep_pubs.htm, 2002, Acessado em: 10-06-2015
- [51] Crittenden, R., Turok, N., *Looking for a cosmological constant with the Rees-Sciama effect*, Physical Review Letters, 76, 4, 575, 1996
- [52] Lewis, A., Challinor, A., *Weak gravitational lensing of the CMB*, Physics Reports, 429, 1, 1–65, 2006

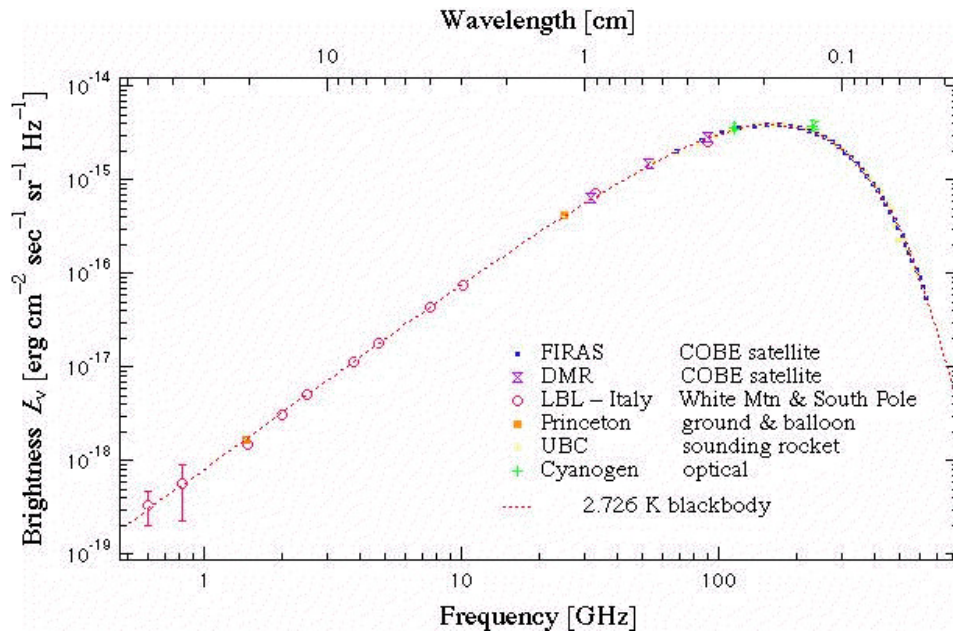


Figura 1: Medidas da intensidade da RCF detectado por vários experimentos. A curva tracejada indica o ajuste do espectro de corpo negro com temperatura igual a 2,726 K. Fonte: Imagem retirada de recursos online especificado em [16].

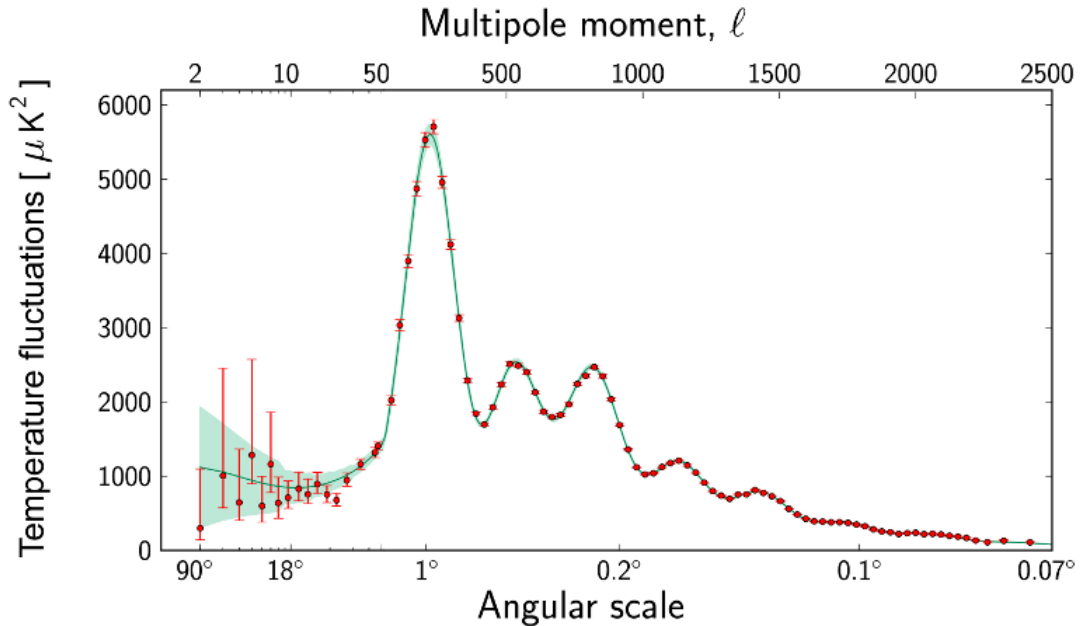


Figura 2: Medidas do espectro de potência da temperatura da RCF realizada pelo satélite Planck (dados do primeiro release). Os pontos em vermelho representam os medidas da RCF enquanto que a curva contínua (verde) representa o melhor ajuste dos dados. Fonte: [24]

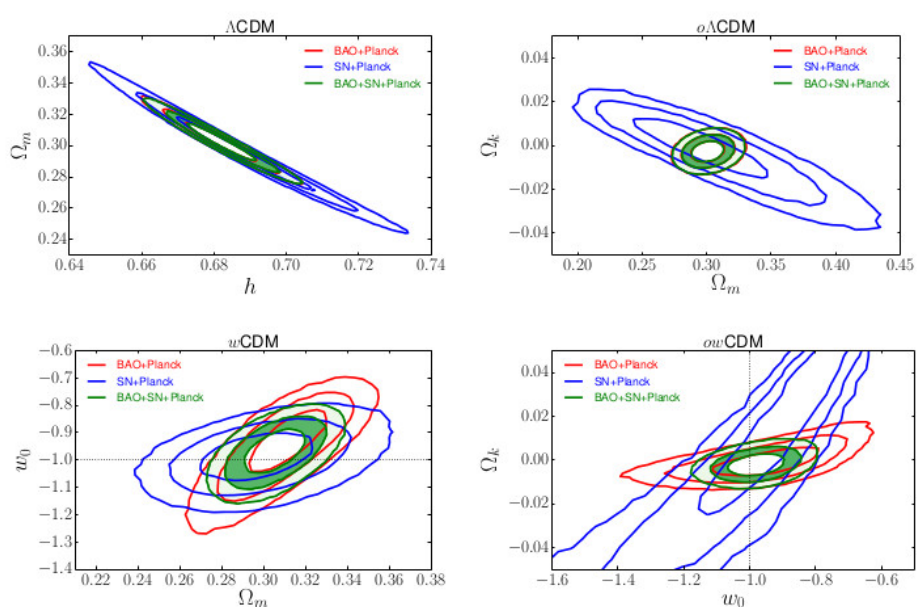


Figura 3: Combinação de contornos de confiança de parâmetros cosmológicos em uma variedade de modelos de energia escura: Λ CDM (superior esquerda), ω CDM (inferior esquerda), $o\Lambda$ CDM (superior direita), ou CDM (inferior direita). As curvas mostram 68%, 95 % e 99.7 % de confiança para a combinação dos dados indicados na legenda: SN (Supernovas), BAO (do inglês, Baryon acoustic oscillations), e Planck (se refere aos parâmetros extraídos a partir das observações da RCF pelo satélite Planck). Fonte: [25]

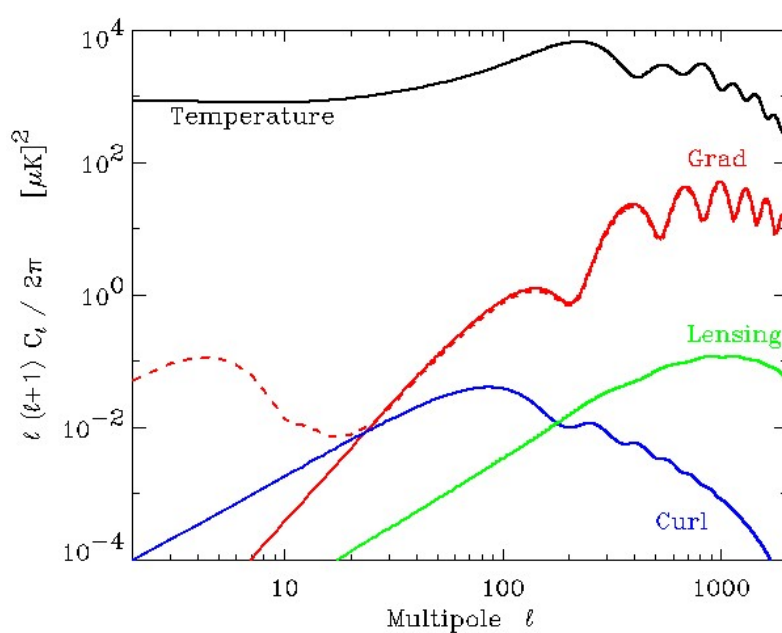


Figura 4: Espectros de potência: das anisotropias de temperatura da RCF (preto), do modo EE de polarização (em vermelho), do modo BB de polarização (em azul) devido a ondas gravitacionais com uma razão tensor/escalar $r=0,28$ e o modo BB ocasionado pelo efeito de LGF (verde). Todos espectros são de acordo com modelo padrão. A curva tracejada indica o efeito da reionização no modo EE. Fonte: Imagem retirada de recursos online especificado em [50].

Um estudo do circuito elétrico atmosférico global

GABRIELA NUNES TURQUETTI* IVAN SOARES FERREIRA†

Universidade de Brasília

Resumo

O Circuito Elétrico Global é um modelo eletrodinâmico que tenta relacionar os mecanismos de geração de corrente na baixa atmosfera, na ionosfera e na magnetosfera. Com este modelo é possível explicar, por exemplo, os eventos atmosféricos transientes que ocorrem entre o topo da nuvem e a ionosfera logo depois de uma descarga elétrica causada pelos raios durante uma tempestade. O modelo de circuito proposto é baseado em um circuito RC, alimentado por fontes DC e AC, onde os elementos que representam as áreas de clima equilibrado são dados por uma resistência de clima equilibrado R_{CE} e uma capacitância de clima equilibrado C_{CE} e os elementos que representam áreas de tempestades são calculados para estas condições, e dados por um conjunto de fontes, resistências e capacitores. Os resultados para este modelo foram similares aos encontrados na literatura. Por isso, foi também implementada uma extrapolação deste circuito, com o propósito de incluir os efeitos da magnetosfera e da conexão entre o Sol e a Terra. Isto foi feito usando-se um circuito RLC. Uma análise preliminar nos mostra que, como a indutância é extremamente baixa, não há alteração das correntes na baixa atmosfera.

Palavras-chave: Circuito Elétrico Global; Sistema Sol-Terra; Eletrodinâmica Atmosférica.

*Universidade de Brasília - Instituto de Geociências (IGD), E-mail: gabriela.turquetti@hotmail.com

†Universidade de Brasília - Instituto de Física (IFD), Laboratório de Cosmologia e Astrofísica (LaCOSA).

INTRODUÇÃO

A história do desenvolvimento do conceito de circuito elétrico foram propulsionadas pela invenção da bateria, com ela tornou-se possível o desenvolvimento dos primeiros circuitos elétricos. Sua primeira aplicação ampla para o uso prático foi à iluminação elétrica, e a partir de então, o uso da eletricidade se expandiu para o que é visto hoje em dia. O Circuito Elétrico Global (CEG), por sua vez é um modelo terrestre que relaciona o campo elétrico observado com a geração de corrente na baixa atmosfera, ionosfera e magnetosfera (Lakhina, 1993; Bering III, 1995; Bering III et al., 1998; Rycroft et al., 2000; Singh et al., 2005). Essa relação associa principalmente ao sistema solo-ionosfera um enorme capacitor esférico que é carregado devido a tempestades. Neste contexto, correntes com milhões de amperes acabam por ser fomentadas através da coluna resistiva da atmosfera entre as placas do capacitor (Roble and Tzur, 1986). Associado a esse modelo, é possível mencionar os eventos atmosféricos transientes que são fluxos de plasmas que ocorrem de diversas formas como por exemplo, sprites, jatos, streamers, elves e halos. As diferentes formas se devem a diferentes combinações de fatores físicos como a pressão, temperatura e concentração de carga, mas todos ocorrem apenas porque há um acoplamento conforme descrito pelo CEG.

O estudo mais aprofundado do Circuito Elétrico Global vem crescendo nos últimos anos. Segundo Rycroft et al. (2000), os maiores avanços realizados nessa área são dados principalmente no estudo de tempestades e raios, relacionadas com o CEG. Neste trabalho realizaremos um estudo detalhado do Circuito Elétrico Global, e utilizaremos o modelo mais bem aceito para cada fenômeno para tentar entender o quanto tais modelos se adequam aos dados observacionais presentes na literatura.

O modelo mais utilizado pela literatura foi pro-

posto por Rycroft et al., (2007), e é aqui em partes testado. Porém, numa segunda parte do presente trabalho, foi acoplado a ele um circuito RLC, que é utilizado para modelar a magnetosfera como parte do CEG a fim de entender como ocorre o acoplamento elétrico e magnético entre a Terra e o Sol. Na magnetosfera é possível observar que corrente de Wilson é predominante na região, onde pelas linhas de campo geomagnético, ela se espalha pela Terra (Allaby et al., 1999). No circuito RLC, o resistor se refere à ionosfera e as correntes que a atravessam, o capacitor é a camada dupla (it double layer que se forma nas regiões das linhas de campo magnético, sendo responsável por acelerar as partículas que provocam auroras. E por fim, o indutor são os tubos de plasma existentes ao longo das linhas de campo magnético.

Assim, este trabalho se insere no contexto de uma área de pesquisa que tem como principal objetivo entender se há conexão entre a atividade solar e o clima terrestre. Historicamente, desde trabalhos de William Herschel, Henrich Schwabe e Rudolph Wolf são encontradas algumas fracas correlações, sempre bastante criticadas (veja revisão em Haigh e Cargill, 2015). Mais recentemente, foi observada uma correlação mais interessante entre o número de tempestades elétricas na Terra e a atividade solar (Schellart et. al., 2015). Este resultado, bem mais robusto que os anteriores, mostra que a possível conexão deve ser modelada por um sistema eletrodinâmico, o que começamos a fazer aqui.

I. UM MODELO PARA O CIRCUITO ELÉTRICO GLOBAL

I. Circuito e seus componentes

Para descrever o circuito elétrico global, o modelo de circuito utilizado é o proposto por Rycroft et al. (2007), sendo composto por uma fonte de corrente e por elementos passivos associados. Neste

tipo de circuito, assume-se que as correntes de condução acima das tempestades possuam um papel importante em manter a diferença de potencial entre a crosta terrestre e a ionosfera em aproximadamente 300 kV, produzindo então, um campo elétrico em áreas distais com clima equilibrado (*fair weather*) sem tempestades, assim os elementos passivos juntamente com as correntes de condução podem gerar um bom modelo para representar o CEG.

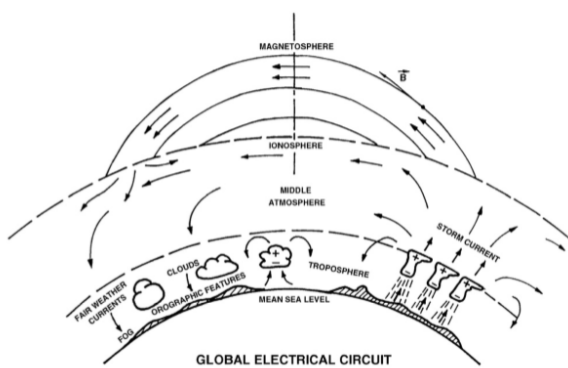


Figura 1: Esquema Geral do CEG. FONTE: Utilizado em diversas fontes, inclusive em Siingh, et al. (2007).

Na Figura 1 é possível observar um diagrama com os diversos processos eletrodinâmicos que ocorrem no CEG, esses processos irão possuir comportamentos distintos que variam de acordo com as propriedades do meio, que são uma função principalmente da altura. Para descrever a Figura 1, assume-se que a atmosfera pode ser dividida em três partes (baixa atmosfera, média atmosfera e alta atmosfera). Para a baixa atmosfera, sabemos que ela é composta principalmente por oxigênio e nitrogênio possuindo aproximadamente uma altitude de 12 a 15 km desde o nível do mar. Acima desta altitude chamamos de atmosfera média. Para o CEG, a baixa atmosfera possui um comportamento importantíssimo, pois nela se dá o mecanismo responsável por manter praticamente constante a di-

ferença de potencial entre a crosta e a ionosfera. Lembrando que esta diferença existe mesmo com o clima equilibrado, bem como uma corrente perene. Já a alta atmosfera, que ocorre perto dos 100 km de altitude, possui uma ionização significativa, causada pelas emissões solares. A ionosfera é composta principalmente por plasma e assim como a baixa atmosfera, ela possui um papel importante para o CEG, pois ela assim como a crosta exerce um papel de capacitor, isto é, um grande depósito de cargas elétricas. Por fim, a magnetosfera pode ser considerada como a região que está acima da atmosfera. É uma região que possui partículas carregadas que sofrem fortes influências do campo magnético e do vento solar. Segundo Allaby et al., (1999), essas partículas carregadas são encontradas na magnetosfera a uma altitude de aproximadamente 3000-16000 km. Vale lembrar que a magnetosfera é responsável por proteger a Terra de ventos solares, radiação solar e raios cósmicos.

Para estudar os efeitos de descargas geradas em tempestades, considera-se um evento de tempestade isolado no circuito e a partir deste evento, modela-se a produção de diferentes descargas elétricas. Assim, a partir deste modelo, é possível a partir de uma associação em paralelo de resistores e capacitores determinar seus respectivos valores para diversas altitudes entre a crosta terrestre e a ionosfera durante uma tempestade. Falaremos de cada um destes elementos a seguir.

I.1 Capacitância

Atualmente os capacitores possuem diversas aplicações, desde o uso para disparar flashes de câmeras fotográficas até a aplicação em televisões, onde eles são utilizados em larga escala. O capacitor é um dispositivo de circuito elétrico que tem como função armazenar cargas elétricas e consequentemente energia eletrostática.

Na parte do CEG que se refere ao clima equi-

librado, o modelo de capacitor que mais se aproxima ao sistema crosta terrestre e ionosfera é o modelo de capacitores de esferas concêntricas, onde a crosta e a ionosfera possuirão polaridades opostas, utilizando-se a convenção que as cargas positivas encontram-se na crosta terrestre e as cargas negativas na ionosfera. Para calcularmos a capacitância aproximada desse modelo, primeiramente calculamos a diferença de potencial de esferas concêntricas e então aplicando-se a equação de capacitância, obtemos:

$$C = 4\pi\epsilon_0 \frac{R_1 R_2}{R_1 - R_2}, \quad (1)$$

em que ϵ_0 é a permissividade elétrica do meio, R_1 é o raio da Terra somado aos 80 km até a ionosfera (ou seja, um total de 6451 km) e R_2 é o raio da Terra (aproximadamente 6371 km).

Já para a parte transiente do CEG, isto é, aquela que dá conta das tempestades, é construído um circuito RC um pouco mais sofisticado, onde é usado um conjunto de sete capacitores em série. Na verdade, se olharmos com mais atenção, cada conjunto RC em paralelo está em série com os outros elementos.

A capacitância de cada um destes capacitores é calculada por:

$$C_{T_i} = \frac{\epsilon_0 A_T}{z_i - z_{i-1}}, \quad (2)$$

em que ϵ_0 é a permissividade elétrica na atmosfera, A_T é a área de um raio individual, aproximadamente 314 km^2 (Rycroft et al., 2007), z_i é a altitude a ser estudada na coluna vertical entre 0,35 a 80 km. Assim, encontramos que a capacitância em cada elemento do conjunto de sete capacitores possuirá o valor de aproximadamente $57,1 \mu\text{F}$.

I.2 Fontes de tensão como um modelo para a Nuvem

As nuvens formam-se a partir da condensação do vapor de água existente em ar úmido na atmosfera. Quando as nuvens ficam muito carregadas de granizo e de carga elétrica, elas geram tempestades. Elas têm sua base entre 2 ou 3 km e o topo em até 20 km de altitude, possuindo um diâmetro entre 10km a 20km podem ter 10 ou mesmo 20 km de diâmetro. A eletricidade estática presente tem diversas origens, uma delas é a radiação solar direta. Outra é a simples fricção, ou seja, energia mecânica, onde ela é causada pelos ventos, as partículas começam a se chocar e os átomos de água começam a ganhar e perder elétrons, criando então, duas forças elétricas opostas. O raio é então, causado por uma descarga elétrica entre duas nuvens ou entre uma nuvem e o solo. Quando a diferença de cargas é muito grande, uma carga elétrica, geralmente negativa (condutor), fraca e invisível, deixa a nuvem e direciona-se para baixo. Devido à intensidade do campo elétrico formado, as cargas positivas do solo mais próximas do raio condutor, saltam até encontrá-lo, fechando assim o circuito elétrico entre a nuvem e o solo. Em outro tipo de raio, chamado de positivo, a posição das cargas é invertida, ocorrendo uma descarga negativa do solo e outra positiva da nuvem. Nos raios positivos, a descarga se origina da parte alta da nuvem, enquanto nos negativos sua origem é no lado inferior.

Um raio começa com pequenas descargas dentro da nuvem. Estas descargas liberam os elétrons que começarão seu caminho de descida em direção ao solo em busca de uma conexão com a terra. Quando essa descarga, encontra-se a algumas dezenas de metros do solo, parte em direção a ela uma outra descarga com cargas opostas. Forma-se então o que é conhecido como o canal do raio, um caminho ionizado e altamente condutor. Por ele passa um gigantesco fluxo de cargas elétricas. É

neste momento que o raio acontece com a máxima potência, liberando grande quantidade de luz.

Há muitas décadas, se compreendeu que o ambiente em que ocorre o CEG é permanentemente eletrificado em função das tempestades. Tornando-as então, a principal fonte de campo elétrico na Terra. Sabe-se que as tempestades promovem uma grande movimentação de cargas na atmosfera. Essa movimentação se dá devido aos raios entre a nuvem e o solo e entre solo e nuvem, nuvem – nuvem, e nuvem ionosfera. Alguns dados sobre raios e tempestades são informados na tabela 1.

No circuito do modelo, fontes de corrente são usadas para emular o comportamento das nuvens nas tempestades.

Corrente de um raio	30 KA
Voltagem de um raio	100×10^6 1×10^9 V
Energia elétrica que um raio consome	300 KWh
Campo elétrico do meio	$2,5 \times 10^6$ V/m
Diferença de potencial para ocorrência de um raio	$1,25 \times 10^9$ V

Tabela 1: Características físicas típicas de um raio.

I.3 Resistência e Correntes

A resistência elétrica é a capacidade que um corpo possui de se opor à passagem de corrente elétrica, ela pode ser aproximada pela densidade de corrente $J = \sigma E$, que possui uma relação com a Primeira Lei de Ohm ($V = RI$). No CEG, a atmosfera possui um comportamento que pode ser aproximado ao comportamento de uma resistência elétrica, possuindo então uma resistência aproximada de 300Ω . Porém para se entender a fenomenologia observada, precisa-se de fato usar valores calculados para cada intervalo de altitude da atmosfera, pois como pode ser visto na Figura 2, o valor da resistividade ou do seu inverso, condutividade, varia bastante com a altura. Isto também justifica porque no modelo utilizar 7 conjuntos RC, e não apenas um.

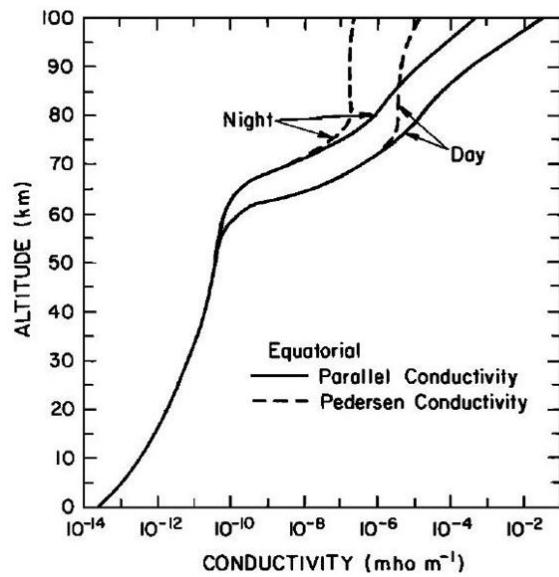


Figura 2: Perfil de Condutividade. FONTE: Tzur and Roble, 1985.

Assim, as resistências podem ser calculadas a partir da seguinte equação:

$$R_{T_i} = \frac{1}{A_T} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{\sigma(z)}, \quad (3)$$

em que, A_T é a área de um raio individual, aproximadamente 314 km^2 , z_i é a altitude a ser estudada na coluna vertical entre 0,35 a 80 km, ou seja, os mesmos valores adotados no cálculo da capacitância.

Segundo Roble, (1991) a corrente vertical para cima da crosta terrestre para a nuvem carregada é, na verdade, um somatório de correntes. Desta forma, diversos componentes de densidade de corrente contribuem para a densidade de corrente total, propostas por Bennett., (2007), que é determinada por:

$$J_S = J_C + J_D + J_T + J_P + J_M + J_W \quad (4)$$

Tais correntes podem ser descritas em função da densidade de corrente onde elas representam um dos parâmetros fundamentais presentes no CEG.

- Correntes de Turbulência (J_T): também chamadas de correntes convectivas, são aquelas que ocorrem devido ao movimento térmico do gás na atmosfera, elas são formadas por ventos de alta e baixa velocidade. Sendo então, caracterizadas por serem correntes “naturais” de convecção, onde elas são causadas devido à diferença de pressão e temperatura nas áreas tropicais e polares da Terra.
- Correntes de Descarga (J_C): é caracterizada por ser uma corrente que é gerada na emissão do raio, podendo então, chegar a uma magnitude de aproximadamente 30 KA.
- Correntes de Precipitação (J_P): são correntes carregadas pelas gotas de chuva.
- Correntes de Maxwell (J_M): também chamada de corrente de deslocamento, ocorre quando temos variação temporal do campo elétrico e do campo magnético.
- Correntes de Wilson (J_W): ocorre durante uma tempestade, percorrendo a tempestade até a ionosfera, ela caracterizada por se espalhar pela ionosfera/magnetosfera pelas linhas do campo geomagnético, onde tais correntes percorrem o caminho do hemisfério oposto ao que tais foram formadas. São as correntes tangenciais ao campo magnético presente na magnetosfera.

I.4 Indutância

Indutância (H) é um parâmetro dos circuitos lineares que relaciona a diferença de potencial induzida por um campo magnético variável à corrente responsável por este campo. Em um circuito, o indutor é caracterizado por ser um dispositivo elétrico passivo que armazena energia na forma de campo magnético. Assim, observando as características físicas de um indutor, é possível observar que ele

é um bom modelo representativo de parte da magnetosfera, e assim teremos que compor um circuito RLC para modelá-la. A indutância é calculada por:

$$L = \frac{B^2}{\mu_0 i^2}, \quad (5)$$

em que B é o campo magnético, μ é a constante magnética para a permissividade no vácuo e i é a corrente elétrica. Desta forma, o cálculo da indutância o caso da magnetosfera terrestre resultou em um valor de $1,2732 \times 10^{-8}$ H.

II. Simulações e Resultados

II.1 Circuito

O modelo discutido até aqui foi implementado computacionalmente utilizando-se pacotes computacionais do tipo PSpice, específicos para análise numérica de circuitos eletrônicos. Neste caso específico, o usuário somente precisa incluir componentes no circuito e indicar os pontos onde quer obter as leituras de tensão e corrente. O código resolve o sistema, buscando o equilíbrio da malha. O circuito resultante desta implementação é mostrado na figura 3.

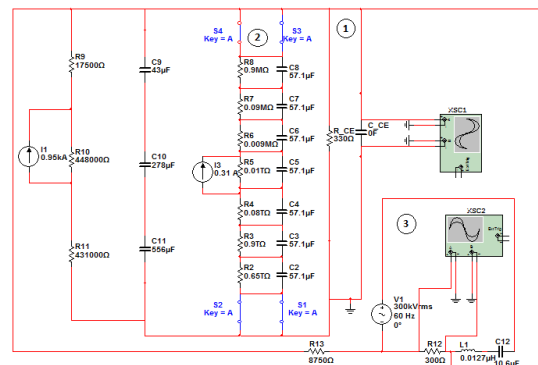


Figura 3: Circuito elaborado para realização de simulações.

As áreas de clima equilibrado são dadas por uma resistência de clima equilibrado RCE e uma

capacitância de clima equilibrado CCE, presentes na região representada com o número 1 na Figura 3. Já os elementos que representam áreas de tempestades são utilizados baseando-se nos efeitos de descarga de um raio individual, modelando-se a produção de diferentes descargas elétricas, utilizando as resistências RTi e as capacitâncias CTi. No circuito elas estão dispostas em uma coluna (região representada como número 2 na Figura 3), representando a estrutura vertical das resistências e capacitâncias em paralelo, onde a disposição dos elementos representa da altitude de 0,375 km até o topo da ionosfera (aproximadamente 80 km). Em cada uma dessas altitudes, as resistências e capacitâncias presentes na coluna vertical possuem valores que dependem das propriedades físicas do meio em que elas se encontram, tendo em vista o exposto na figura 2.

Sondando ponto a ponto no circuito as correntes e as diferenças de potencial, pode-se conferir que todos os valores batem com os esperados e descritos na literatura. Isto confirma que é um bom modelo para a baixa atmosfera. O comportamento transiente, no entanto, depende fortemente do modelo de fonte utilizado. Uma nova etapa deste trabalho irá se concentrar justamente neste aspecto.

Para o circuito RLC (representado pelo número 3 na Figura 3), foi possível observar que o comportamento do circuito é influenciado pela alteração do valor da indutância, como é mostrado na Figura 4. Onde foi possível observar através de diversas simulações que a amplitude das ondas senoidais eram diretamente proporcionais com o valor da indutância. A onda senoidal azul escura representa o valor da indutância encontrado anteriormente, um valor de aproximadamente $1,27 \times 10^{-8}$ H. Quando o circuito é acoplado ao circuito da baixa atmosfera, é possível observar que este último não influencia o comportamento da onda senoidal do circuito RLC como pode ser observado na Figura 5.

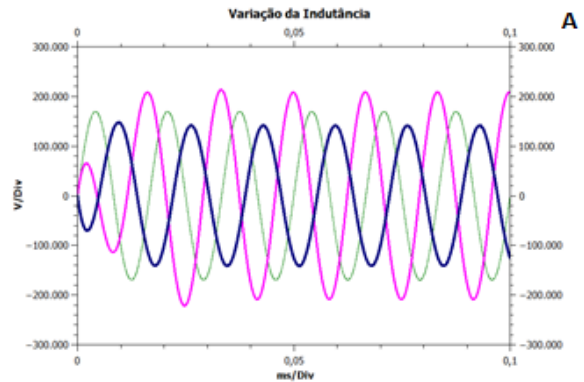


Figura 4: Resultado das simulações realizadas para o circuito RLC variando a indutância.

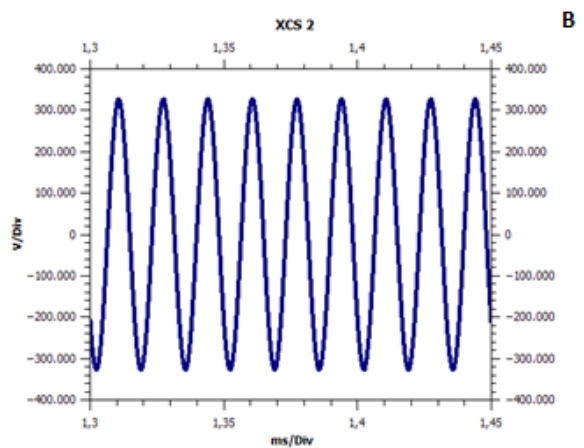


Figura 5: Resultado das simulações realizadas para o circuito RLC.

Foi observado que a indutância possui um papel muito importante e determinante para o comportamento da onda que se observa ao acoplar osciloscópios aos componentes do circuito RLC quando possui altos valores. Entretanto, quando se aplica ao circuito a indutância previamente calculada a partir dos valores para campo magnético e corrente medidos para a magnetosfera terrestre, é possível enfim, observar que o valor da indutância no circuito pode ser considerado desprezível.

II. CONCLUSÃO

A implementação bem sucedida deste modelo computacional para a o CEG nos permitiu ter um alicerce para futuras investigações. O comportamento DC do circuito é exatamente o esperado, enquanto que o comportamento transiente prescinde de um maior desenvolvimento das fontes, isto é, das "nuvens" inseridas no código. O acoplamento com a magnetosfera, por sua vez, mostrou-se ineficaz. Novos trabalhos serão feitos de modo a entender melhor qual é a configuração mais efetiva, que certamente é mais complexa que um circuito RLC como implementado aqui neste primeiro trabalho.

Ainda nessa área de pesquisa, estamos interessados em modelar com maior detalhes as próprias descargas, tanto aquelas entre a nuvem e o solo, quanto as entre a nuvem e a ionosfera. Este modelo, no entanto, não pode ser resumido a um circuito, apesar de estar acoplado a ele. Os trabalhos que estão sendo feitos neste sentido empregam simulações monte-carlo para o processo da formação de corrente e colunas de plasma sob a ação de um campo elétrico transiente. Este último calculado com base no presente trabalho. Neste cenário, a conexão entre o Sol e a Terra se dá principalmente por intermédio das partículas de altas energias emitidas pelo Sol.

Enfim, esta é uma que foi muito desenvolvida nos últimos 50 anos, principalmente em termos de coleta de dados, mas que ainda não encontrou modelos que expliquem bem os fenômenos observados e que permitam afirmar se realmente há uma relação entre a atividade solar e variações globais no clima terrestre.

REFERÊNCIAS

- [1] Bennett, Alec., 2007. Measurement of Atmospheric Electricity During Different Meteorological Conditions.
- [2] Bering III, E.A., 1995. The global circuit: Global thermometer, weather by product or climate modulator? *Ver. Geophys.* 845-862.
- [3] Bering III, E.A., Few, A.A., Benbrook, J.R., 1998. The global electric circuit. *Phys. Today* 24-30.
- [4] Haigh, J. D., Cargill, P., *The sun's influence on climate: Princeton primers in climate*, Princeton University Press, Princeton, 2015.
- [5] Lakhina, G.S, 1993. Electrodynamic coupling between diferente regions of the atmosphere. *Curr. Sci.* 64, 600-666.
- [6] Roble, R.G., Tzur, I., 1986. The global atmospheric electrical circuit. *Study in Geophysics – The Earth's Electrical Environment*. National Academy Press, Washington, D.C., pp. 206-231.
- [7] Rycroft, M.J., Israelsson, S., Prince, C., 2000. The global atmospheric electric circuit, solar activity and climate change. *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* 62, 1563-1576.
- [8] Rycroft, M.J., Odzimek, A., Arnold, N.F., Füllekrug, M., Kulak, A., Neubert, T., 2007. New model simulation of the global atmospheric electric circuit driven by thunderstorms and electrified shower clouds: The roles of lightning and sprites. *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* 69, 2485-2509.
- [9] Schellart, P. et al., 2015, *Phys. Rev. Lett.*, in the press.
- [10] Siingh, Devendraa, Singh, R.P., Kamra, A.K., Gupta, P. N., Singh, R., Gopalakrisman, V., Singh, A.K., 2005. Review of eletromagnetic coupling between the Earth's atmosphere and the space environment. *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* 67, 637-658.

TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE Uma Possível Solução para o Problema de Muitos Elétrons da Mecânica Quântica

A.C.PEDROZA*

Universidade de Brasília

Resumo

O presente trabalho tem o propósito de servir de introdução à Teoria do Funcional da Densidade (DFT), apresentando-a como uma alternativa para descrever de forma realística um sistema com muitos elétrons. Os teoremas básicos são provados. As abordagens Livre de Orbitais e de Kohn-Sham são discutidas. Alguns resultados obtidos com as aproximações mais usadas para a DFT dão uma idéia da qualidade dessas aproximações.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade. DFT. LDA. PBE. B3LYP.

Abstract

This work aims to provide an introduction to the Density Functional Theory (DFT), presenting it as an alternative to realistically describe a system with many electrons. The basic theorems are proved and the Free Orbital and Kohn-Sham approaches are discussed. Some results given by the most usual approximations to DFT illustrate the quality of these approximations.

I. INTRODUÇÃO

A Mecânica Quântica não relativística pode ser apresentada por seis postulados básicos[1], entre os quais destacamos:

1- O Estado Físico de um sistema de N elétrons sujeitos a um potencial externo é descrito por uma Função de Onda $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, t)$.

2- A evolução temporal desse sistema é dada pela Equação de Schrödinger dependente do

tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (1)$$

Obs.: Num caso geral, $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$, onde \mathbf{r} e σ correspondem, respectivamente, à coordenada espacial e à de spin. No entanto, a partir deste ponto, vamos nos restringir apenas às coordenadas espaciais.

Se o potencial externo aos elétrons não depende

*Instituto de Física e Centro Internacional de Física da Matéria Condensada

do tempo, então, a parte temporal da Função de Onda pode ser facilmente obtida, restando, consequentemente, a parte envolvendo a posição, a qual satisfaz a Equação de Schrödinger Independente do Tempo:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2)$$

com a hamiltoniana \hat{H} sendo dada por:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N w(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (3)$$

onde, o primeiro termo representa o operador Energia Cinética, o segundo o operador (Energia) Potencial externo aos elétrons e o último termo o operador (Energia) de repulsão entre os elétrons. Por exemplo, no caso de um átomo com N elétrons, teríamos:

$$w(\mathbf{r}_i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{|\mathbf{r}_i|} \quad (4)$$

$$v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (5)$$

Usando as energias em unidades de Hartree (1 Ha \simeq 27,210 eV) e as distâncias em múltiplos do Raio de Bohr, a_0 ($a_0 \simeq 0,529 \text{ \AA}$). A hamiltoniana torna-se, então,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N w(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (6)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (2) por ψ^* e integrando em todas as variáveis obtemos,

$$E[\psi] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1, d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \quad (7)$$

¹Funcional é uma correspondência, no sentido matemático, entre uma função e um número. Uma integral $F[f(x)] = \int_a^b f(x) dx$ é um exemplo de funcional: a cada função $f(x)$ associamos o número que resulta do cálculo da integral.

ou seja, a Energia pode ser obtida como o valor esperado da hamiltoniana e é um funcional¹ da Função de Onda $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)$.

Ora, a Função de Onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)$ solução da equação (2) será uma função de 3N variáveis. Quando $N > 1$, essa equação não possui solução analítica e sim soluções numéricas, as quais podem tornarem-se bastante complexas.

Por exemplo, no caso do átomo de Ne :

há 10 elétrons;

há 30 coordenadas (apenas a parte espacial);

há 10^{30} dados para uma malha de 10 pontos;

há a necessidade de 10^{30} bytes para armazenar os dados;

10^{12} bytes é a capacidade típica de um HD externo;

há a necessidade de 10^{18} HDs para armazenar esses dados; o que resultaria

numa massa de 10^{17} Kg (considerando 100g cada Hd);

para se ter uma ideia do que isso representa,

10^{24} Kg é a massa da Terra

Assim, o problema de N elétrons pode tornar-se inviável, se tratado à "força bruta". Felizmente, para obter os valores esperados das grandezas físicas conhecidas não há a necessidade de obter todas as informações contidas na Função de Onda.

Isso foi mostrado por P.Hohenberg e W.Kohn[2] ao construírem as bases da Teoria do Funcional da Densidade (DFT).

II. FUNDAMENTOS DA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)

Na DFT a grandeza fundamental é a Densidade Eletrônica.

Na Mecânica Quântica, o produto $\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ é interpretado como sendo a Densidade de Probabi-

lidade de encontrar um elétron cujo estado físico, num certo instante, é descrito pela Função de Onda $\psi(\mathbf{r})$.

Portanto, é razoável definir a Densidade Eletrônica como sendo essa densidade vezes a carga do elétron, ou seja, $\rho(\mathbf{r}) = e\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$, onde e é o módulo da carga do elétron. Num sistema conveniente de unidades atômicas, podemos escrever $\rho(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$.

Se, por outro lado, um sistema microscópico possui N elétrons, então, a Densidade Eletrônica é definida como sendo:

$$\rho(\mathbf{r}) = N \int \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_2, d\mathbf{r}_3, \dots, d\mathbf{r}_N \quad (8)$$

ou seja, a integral representa a Densidade de Probabilidade de encontrar um elétron (qualquer um, pois eles são indistinguíveis) na posição \mathbf{r} independente da posição dos outros ($N-1$) elétrons. O fator N , por sua vez, é introduzido de forma que a integral $\int \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$ seja igual ao número total de elétrons, N .

Em todos sistemas com N elétrons, a interação entre eles é a repulsão coulombiana. Por exemplo, num sistema com quatro elétrons, como o átomo neutro do Berílio ou o íon positivo do Boro, a interação entre esses elétrons é sempre a mesma. O que os tornam, então, diferentes? A resposta está nos respectivos potenciais externos a esses elétrons, ou seja, nos potenciais atrativos $w(\mathbf{r})$ que os respectivos núcleos exercem num caso e no outro.

Assim, em cada caso, $w(\mathbf{r})$ determina a hamiltoniana do sistema, a qual permite obter a correspondente Função de Onda e daí obter a Densidade Eletrônica de cada sistema. Do ponto de vista matemático, temos a seguinte aplicação:

$$A : w(\mathbf{r}) \Rightarrow \rho(\mathbf{r}) \quad (9)$$

A DFT mostra que esta aplicação é inversível, isto é:

$$A^{-1} : \rho(\mathbf{r}) \Rightarrow w(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Em consequência, $\rho(\mathbf{r})$ determina \hat{H} . Isso resulta no seguinte teorema[2]

TEOREMA I: A Função de Onda do Estado Fundamental ψ , assim, todas as propriedades deste estado são funcionais da Densidade Eletrônica, $\rho(\mathbf{r})$, e univocamente determinada por essa Densidade.

Demonstração: (caso não degenerado)

-Suponhamos, por hipótese, que existam dois potenciais externos $w_1(\mathbf{r})$ e $w_2(\mathbf{r})$, com $w_1(\mathbf{r}) - w_2(\mathbf{r}) \neq cte$. Pela Equação de Schrödinger, $w_1(\mathbf{r})$ determina ψ_1 e E_1 ; e $w_2(\mathbf{r})$ determina ψ_2 e E_2 , mas ambos determinam a mesma densidade $\rho(\mathbf{r})$.

A energia total é dada pelo valor esperado da hamiltoniana,

$$E_w[\rho] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{W} + \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle \quad (11)$$

onde, \hat{W} , \hat{T} e \hat{V} são, respectivamente, o operador Potencial Externo, Energia Cinética e Repulsão entre os elétrons.

Podemos mostrar que o valor esperado do potencial externo aos elétrons, por ser local, é dado por:

$$\int w(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r \quad (12)$$

Em geral,

$$E_w[\rho] = \langle \psi | \hat{H}_w | \psi \rangle = \int w(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \langle \psi | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle \quad (13)$$

No caso particular de E_1 , será dada por

$$E_1 = \langle \psi_1 | \hat{H}_{w_1} | \psi_1 \rangle = \int w_1(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \langle \psi_1 | \hat{T} + \hat{V} | \psi_1 \rangle \quad (14)$$

e de E_2 , será dada por

$$E_2 = \langle \psi_2 | \hat{H}_{w_2} | \psi_2 \rangle = \int w_2(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \langle \psi_2 | \hat{T} + \hat{V} | \psi_2 \rangle \quad (15)$$

E_1 é Energia do Estado Fundamental, ou seja, ela é o menor valor esperado de \hat{H}_{w_1} , logo,

$$E_1 << \psi_2 | \hat{H}_{w_1} | \psi_2 > \quad (16)$$

onde,

$$\begin{aligned} < \psi_2 | \hat{H}_{w_1} | \psi_2 > = \int w_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + \\ < \psi_2 | \hat{T} + \hat{V} | \psi_2 > \end{aligned} \quad (17)$$

logo,

$$E_1 < \int w_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + < \psi_2 | \hat{T} + \hat{V} | \psi_2 > \quad (18)$$

O primeiro termo do lado direito da equação acima, $\int w_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r$, pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \int w_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r = \\ \int [w_1(\mathbf{r}) - w_2(\mathbf{r}) + w_2(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3 r \end{aligned} \quad (19)$$

daí resulta que

$$\begin{aligned} E_1 < \int [w_1(\mathbf{r}) - w_2(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3 r + \\ \int w_2(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + < \psi_2 | \hat{T} + \hat{V} | \psi_2 > \end{aligned} \quad (20)$$

a soma dos dois últimos termos corresponde a E_2 ; portanto,

$$\begin{aligned} E_1 < \int [w_1(\mathbf{r}) - w_2(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3 r + \\ \int w_2(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + E_2 \end{aligned} \quad (21)$$

Agora, se é E_2 a Energia do Estado Fundamental, então, por um procedimento análogo ao que acabamos de fazer, obteríamos

$$\begin{aligned} E_2 < \int [w_2(\mathbf{r}) - w_1(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3 r + \\ \int w_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + E_1 \end{aligned} \quad (22)$$

Adicionando as duas equações acima, chegamos ao absurdo matemático

$$E_1 + E_2 < E_1 + E_2 \quad (23)$$

Portanto, assumir que existam dois potenciais externos aos elétrons, diferindo por mais do que uma constante, gerando a mesma densidade eletrônica do Estado Fundamental leva a uma contradição matemática. Assim, dada a Densidade Eletrônica do Estado Fundamental, então, o potencial externo aos elétrons está determinado. Ou seja, ele é um funcional da densidade. Por sua vez, se o potencial externo está determinado, então, a hamiltoniana também estará determinada. Ou seja, ela também será um funcional da densidade. Ora, conhecida a hamiltoniana, a Função de Onda pode ser obtida e com ela o valor esperado de qualquer grandeza física do sistema descrito pela hamiltoniana. Consequentemente, eles são também funcionais da densidade.

Em particular, a Energia de qualquer estado eletrônico - mesmo os excitados- do sistema descrito por essa hamiltoniana, são determinados pela densidade eletrônica do Estado Fundamental, ou seja, ela é um funcional dessa da densidade eletrônica, uma função de apenas três variáveis e independente do número de elétrons de um sistema!

P.Hohenberg e W. Kohn [2] também mostraram o

TEOREMA II: O Funcional de Energia, $E[\rho]$ para o Estado Fundamental, para um dado potencial externo $w(\mathbf{r})$, é estacionário com respeito às variações da Densidade Eletrônica ρ e atinge o seu mínimo quando ρ for a densidade eletrônica do Estado Fundamental.

A prova é decorrente de dois fatos: primeiro de a densidade eletrônica determinar o potencial externo e, consequentemente, a função de onda; segundo, de o valor esperado da hamiltoniana ser o menor possível quando calculado com relação à

função de onda que descreve o estado fundamental. Assim, dado um potencial externo aos elétrons $w(\mathbf{r})$, suponhamos que a afirmação do teorema fosse falsa, isto é, que existisse uma outra densidade ρ' diferente de ρ por mais que uma constante e que produzisse $E_w[\rho'] < E_w[\rho]$. Pelo Teorema I, ρ' determina uma função de onda ψ' , enquanto ρ , a densidade do estado fundamental, determinaria a função de onda ψ que descreve o estado fundamental. A desigualdade anterior é equivalente à $\langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle < \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$. No entanto, como ψ é função de onda que descreve o estado fundamental o valor esperado que ela produz deve ser o menor possível, logo, a desigualdade acima entre os valores esperados não pode ocorrer. Em consequência, a hipótese inicial de se ter $E[\rho'] < E[\rho]$ está incorreta e, portanto, $E[\rho]$ atinge o seu mínimo quando ρ for a densidade eletrônica do Estado Fundamental.

A consequência desse teorema é que a Energia do Estado Fundamental de um sistema com N elétrons pode ser obtida variando-se $\rho(\mathbf{r})$ até que o mínimo de $E[\rho]$ seja encontrado. A densidade ρ_0 que produz esse mínimo é a Densidade Eletrônica do Estado Fundamental e o correspondente $E[\rho_0]$ é a Energia do Estado Fundamental. Como estamos tratando com um sistema de N elétrons, os ρ que participam desse processo variacional devem obedecer ao vínculo $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = N$.

Assim, $E_w[\rho]$ satisfaz um Princípio Variacional:

$$\frac{\delta(E_w[\rho] - \lambda \int \rho(\mathbf{r}) d^3r)}{\delta\rho} = 0 \quad (24)$$

onde, o símbolo δ indica que se trata de uma derivada funcional²; e λ é um multiplicador de Lagrange.

Nessa abordagem para se obter a Energia e a Densidade Eletrônica do Estado Fundamental, dois problemas surgem:

(i) os teoremas I e II são teoremas de existên-

cia, ou seja, eles garantem que existe o funcional $E_w[\rho]$ e que a Energia pode ser obtida num processo variacional, mas eles não indicam como obter a expressão para este funcional $E_w[\rho]$; e

(ii) não é verdadeiro que toda função $\rho(\mathbf{r})$, obedecendo ao vínculo $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = N$, seja densidade do Estado Fundamental de algum sistema com N elétrons sujeitos a um potencial externo local $w(\mathbf{r})$.

O segundo problema é chamado de problema da w -representatividade e pode ser contornado apresentando a DFT com outra abordagem [3].

Já o primeiro problema é bem mais complicado e, como veremos, só pode ser resolvido de forma aproximada. Da equação (12) temos que

$$E_w[\rho] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \int w(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle \quad (25)$$

como ψ é um funcional de $\rho(\mathbf{r})$, então, o segundo e o terceiro termos do lado direito da equação acima também são funcionais de $\rho(\mathbf{r})$, ou seja,

$$F[\rho] = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle \quad (26)$$

onde $F[\rho]$ é um funcional universal, no sentido de que sua expressão independe do potencial externo $w(\mathbf{r})$. O grande problema é que esse funcional universal não é conhecido. Ainda assim, formalmente, podemos escrever o funcional para a Energia como,

$$E_w[\rho] = \int w(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + F[\rho] \quad (27)$$

de tal forma que calculando a derivada funcional indicada na equação (24) obteremos,

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho} + w(\mathbf{r}) - \lambda = 0 \quad (28)$$

Ora, de um ponto de vista clássico, se a densidade eletrônica num ponto \mathbf{r} vale $\rho(\mathbf{r})$ e em outro

²A derivada funcional de $F[\varphi(x)]$ com relação à φ é definida como $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(y)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\varphi(x) + \epsilon\delta(x-y)] - F[\varphi(x)]}{\epsilon}$.

ponto \mathbf{r}' vale $\rho(\mathbf{r}')$, então, a energia de interação entre essas densidades é dada por

$$V[\rho] = \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')d^3r \quad (29)$$

Assim, é razoável, escrever o funcional $F[\rho]$ como $F[\rho] = T[\rho] + V[\rho]$, com $V[\rho]$ sendo dado pela expressão acima. Dessa maneira, o funcional desconhecido passa ser o termo cinético, $T[\rho]$, o qual incorpora tanto a contribuição da Energia Cinética como as diferenças que se obtém ao passar da interação coulombiana clássica para o regime quântico. Em consequência dessa forma para $F[\rho]$, a equação oriunda do Princípio Variacional torna-se,

$$\frac{\delta T[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta V[\rho]}{\delta \rho} + w(\mathbf{r}) - \lambda = 0 \quad (30)$$

Por sua vez, a derivada funcional de $V[\rho]$ é dada por³,

$$\frac{\delta V[\rho]}{\delta \rho} = \int \rho(\mathbf{r}')v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r = V_H(\mathbf{r}) \quad (31)$$

Este potencial, $V_H(\mathbf{r})$, é chamado, por razões históricas, de Potencial de Hartree.

A equação (30) torna-se, então,

$$\frac{\delta T[\rho]}{\delta \rho} + V_H(\mathbf{r}) + w(\mathbf{r}) - \lambda = 0 \quad (32)$$

Resumindo, o problema passa a ser encontrar o funcional $T[\rho]$ correspondente à Energia Cinética. Isto é **uma questão fundamental para a DFT**; mas não trivial!

Nas publicações, essa linha de pesquisa que procura encontrar uma boa aproximação para $T[\rho]$ é chamada de Teoria do Funcional da Densidade Livre de Orbitais; OF-DFT é o acrônimo em inglês. Vejamos alguns exemplos disso.

III. APROXIMAÇÕES PARA $T[\rho]$

a- Aproximação de Thomas-Fermi

Esta aproximação foi proposta concomitantemente por Thomas e por E.Fermi[4] muito antes do trabalho de W.Kohn e P. Hohenberg. Ela foi construída para um tratar um “gás homogêneo de elétrons não interagentes”, isto é, um sistema-modelo de elétrons sem a repulsão coulombiana entre eles e com uma densidade constante em qualquer ponto. Nessa aproximação, o termo $T[\rho]$ é dado por

$$T_{TF}[\rho] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int \rho(\mathbf{r})^{5/3} d^3r \quad (33)$$

Essa aproximação é de fácil implementação, mas apresenta vários inconvenientes

- i) é correta apenas no limite $Z \rightarrow \infty$;
- ii) não prevê estrutura de camadas para os átomos;
- iii) os átomos não se ligam para formar moléculas ou sólidos;
- iv) a densidade de carga no núcleo seria infinita;
- v) a densidade eletrônica decai com r^{-6} , em lugar de decair exponencialmente.
- vi) resultados numéricos de energias eletrônicas de átomos e moléculas são decepcionantes.

b- Aproximação de von-Weizsäcker

Como a aproximação de TF não produzia bons resultados, von Weizsäcker [5] propôs tratar o caráter não homogêneo das densidades eletrônicas incluindo um termo contendo o respectivo gradiente dessas densidades. Assim, além de $T_{TF}[\rho]$, deveria aparecer um termo dado por

$$T_{vW}[\rho] = \frac{1}{8} \int \frac{|\nabla \rho(\mathbf{r})|^2}{\rho(\mathbf{r})} d^3r \quad (34)$$

A adição do funcional T_{vW} ao termo de Thomas-Fermi produz um funcional correto para sistemas com um ou dois elétrons. Além disso, com o seu

³Se $F[\varphi] = \int g[\varphi]\varphi(x)dx$, então, $\frac{\delta F[\varphi]}{\delta \varphi(y)} = \frac{\partial g[\varphi]}{\partial \varphi(y)}\varphi(y) + g[\varphi(y)]$

uso, os cálculos preveem a estabilidade de íons negativos e de moléculas; a densidade eletrônica decai exponencialmente para longas distâncias e tende a valores finitos próximo dos núcleos atômicos. No entanto, ela também não prevê a estrutura de camadas para os átomos com mais de dois elétrons.

Várias outras aproximações para $T[\rho]$ foram feitas[6][7], mas com sucesso apenas razoável. A principal razão desse insucesso, é o fato de a contribuição da Energia Cinética ser, em geral, da mesma ordem de grandeza da Energia Total. Consequentemente, erros cometidos no termo cinético podem acarretar erros consideráveis na energia total e na densidade eletrônica obtida do processo de minimização. Além disso, mesmo nos casos onde elas obtêm sucesso, os resultados obtidos ficam aquém da precisão obtida com a formulação desenvolvida por W. Kohn e L. Sham [8] para a DFT.

No entanto, pelo fato de ser um procedimento extremamente simplificador dos cálculos e, assim, potencialmente, aplicável a sistemas com milhares de elétrons, essa abordagem continua ativa.

Portanto, caro leitor, se você quer um problema desafiador, mas bem definido, a proposição de um funcional para o termo cinético é convidativa.

IV. EQUAÇÕES DE KOHN-SHAM

A formulação elaborada por W.Kohn e L.Sham para a DFT provocou, ao longo do tempo, uma revolução nos estudos de estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos. Eles partiram de uma outra proposta para o funcional $F[\rho]$, qual seja,

$$F[\rho] = \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(r')d^3rd^3r' + T_0[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (35)$$

onde, $T_0[\rho]$ é o funcional da Energia Cinética de um sistema-modelo de **elétrons sem interação**⁴,

⁴neste caso, o sistema não seria homogêneo tal como na construção de $T[\rho]$ segundo Thomas-Fermi.

mas com a mesma densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$.

Já o funcional $E_{xc}[\rho]$, chamado de funcional da Energia de Troca-e-Correlação, incorpora tanto a diferença entre o real funcional para a Energia Cinética e o funcional para a Energia Cinética de um sistema de elétrons não interagentes, como a diferença entre o real funcional para a Energia de repulsiva de interação entre os elétrons e o seu equivalente clássico dado pelo Potencial de Hartree.

Assim,

$$E_w[\rho] = T_0[\rho] + \int w(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(r')d^3rd^3r' + E_{xc}[\rho(\mathbf{r})] \quad (36)$$

Usando o Princípio Variacional,

$$\frac{\delta T_0}{\delta \rho(\mathbf{r})} + w(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) - \lambda = 0 \quad (37)$$

onde, $V_H(\mathbf{r})$ é dado pela equação (31) e

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (38)$$

Ora, os segundo, terceiro e quarto termos da equação (37) são potenciais locais, isto é, só dependem de \mathbf{r} . Assim podemos definir,

$$w_{efe}(\mathbf{r}) = V_H(\mathbf{r}) + w(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) \quad (39)$$

então, a equação (35) torna-se

$$\frac{\delta T_0}{\delta \rho(\mathbf{r})} + w_{efe}(\mathbf{r}) - \lambda = 0 \quad (40)$$

Esta última equação é idêntica à equação que obteríamos se tivéssemos um sistema constituído de N elétrons **não interagentes** submetidos a um potencial externo $w_{efe}(\mathbf{r})$ produzindo uma densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$. No entanto, se não há interação entre esses elétrons, então, o estado físico de cada deles é descrito por uma função $\phi_i(\mathbf{r})$ que é

solução da equação de Schrödinger, em unidades atômicas,

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + w_{efe}(\mathbf{r})\right)\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}) \quad (41)$$

com $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

As grandezas $\varepsilon_i = \lambda_i$, multiplicadores de Lagrange, são interpretadas como as respectivas energias de cada elétron; e a densidade eletrônica é dada por

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (42)$$

Ora, se as equações são idênticas, as soluções são idênticas. Assim,

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_H(\mathbf{r}) + w(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r})\right)\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}) \quad (43)$$

As equações (42) e (43) são chamadas de Equações de Kohn-Sham.

Observemos que para obtermos as funções $\varphi_i(\mathbf{r})$, soluções dessas equações, precisamos conhecer os potenciais $V_H(\mathbf{r})$ e $v_{xc}(\mathbf{r})$, os quais dependem da densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$. Ora essa densidade é dada pela equação (42), a qual depende dos $\varphi_i(\mathbf{r})$ que estamos procurando obter! A solução para esse impasse é alcançada de forma auto-consistente, ou seja, parte-se de funções $\varphi_i(\mathbf{r})$ iniciais (por exemplo, funções de onda para o átomo de hidrogênio ou obtida de outros cálculos de estrutura eletrônica), constrói-se, via equação (42), uma densidade inicial $\rho_0(\mathbf{r})$ e com ela obtém-se os potenciais $V_H(\mathbf{r})$ e $v_{xc}(\mathbf{r})$. Resolve-se a equação (43) e obtém-se as novas funções $\varphi_i(\mathbf{r})$. Se elas forem iguais às iniciais, o problema está resolvido; caso contrário, usam-se essas últimas funções de uma partícula para recomençar o processo, o qual continua até que a função $\varphi_i(\mathbf{r})$ de “entrada” seja igual à função $\varphi_i(\mathbf{r})$ de “saída”.

Resumindo, na abordagem de Kohn-Sham em lugar de encontrarmos uma função de $3N$ variáveis,

temos que encontrar N funções de três variáveis. Isso, de certa forma, reduz a proposta da DFT a um patamar mais modesto do que poderia ser obtido com a abordagem OF-DFT. A vantagem, no entanto, reside no fato de as soluções das equações de Kohn-Sham poderem ser obtidas por procedimentos extremamente similares aos realizados em cálculos eletrônicos que visam obter uma função de onda de $3N$ variáveis; procedimentos esses que praticamente começaram com o advento da Mecânica Quântica e já atingiram um alto grau de sofisticação. A desvantagem advém de tornar os cálculos de estrutura eletrônica limitados aos sistemas finitos com, no máximo, algumas dezenas de elétrons. Contudo, em sistemas estendidos como os sólidos cristalinos, os cálculos são possíveis e extremamente satisfatórios, graças às propriedades de simetria que esses sistemas possuem.

V. APROXIMAÇÃO DA DENSIDADE LOCAL (LDA)

Como vimos na equação (36), a parte desconhecida do funcional para a energia total ficou restrita ao termo de Troca-e-Correlação, isto é, $E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]$. A primeira sugestão de aproximação para esse funcional foi feita por W.Kohn e L. Sham [8]. Eles partiram da ideia de que em cada ponto \mathbf{r} a densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$ corresponderia à densidade eletrônica de um gás homogêneo de elétrons interagentes, isto é, um sistema-modelo de elétrons interagindo com repulsão coulombiana, mas com uma densidade constante em qualquer ponto. Como um sistema formado apenas por elétrons, que se repelem, não é estável, a esses elétrons é adicionado um “background” de cargas positivas - consideradas inertes - que anula essa repulsão.

Assim, um sistema real, geralmente não homogêneo, é visto como composto, localmente, por uma soma de sistemas homogêneos. A vantagem

é que para o sistema homogêneo, a Energia de Troca-e-Correlação por elétron, identificada como $\epsilon_{xc}^h(\rho(\mathbf{r}))$, pode ser obtida. Consequentemente, a Energia de Troca-e-Correlação, $E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]$ é, então, obtida, nessa aproximação, como a “soma”

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}^h(\rho(\mathbf{r})) d^3r \quad (44)$$

Daí, tomando a derivada funcional com relação a ρ , equação (38), obteremos o Potencial de troca-e-Correlação $v_{xc}(\mathbf{r})$:

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}}{\delta \rho} = \epsilon_{xc}^h(\rho(\mathbf{r})) + \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon_{xc}^h}{\partial \rho} \quad (45)$$

A energia por elétron ϵ_{xc}^h pode ser separada em dois termos: um que chamamos de Troca e outro de Correlação, isto é, $\epsilon_{xc}^h = \epsilon_x^h + \epsilon_c^h$.

O termo ϵ_x^h pode ser calculado analiticamente e é dado por [9]

$$\epsilon_x^h(\mathbf{r}) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3\rho}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (46)$$

Já o termo ϵ_c^h não pode ser obtido analiticamente. Várias aproximações foram feitas para obtê-lo, sendo a melhor delas a obtida por Ceperley e Adler[10] usando cálculos de Monte Carlo Quântico. Eles obtiveram a Energia de Correlação por elétron para um conjunto de densidades ou, equivalentemente, de valores de r_s , onde

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (47)$$

A Tabela 1 mostra a Energia de Correlação por elétron obtida Ceperley e Adler para um gás homogêneo de elétrons interagentes em função de r_s . Os dados referem-se a um gás de elétrons no qual não há polarização de spins: caso paramagnético .

Tabela 1: Energia de Correlação por elétron (Ryd/elétron) em

função de r_s (em unidade atômica)

r_s	Energia de Correlação
2.0	0.0902
5.0	0.0563
10.0	0.0372
20.0	0.0230
50.0	0.0114
100.0	0.0064

No entanto, nos cálculos de estruturas eletrônicas é necessário obter ϵ_c^h para quaisquer valores de r_s . Para evitar sucessivos procedimentos de interpolação numérica, vários autores propuseram diferentes funções de r_s capazes de reproduzir com muita precisão os valores obtidos por Ceperley e Adler.

Por exemplo: 1- Perdew-Wang[11]

$$\epsilon_c^h(r_s) = \alpha_1(1 + \alpha_2 r_s) \ln \left[1 + \frac{1}{\alpha_1(\beta_1 r_s^{1/2} + \beta_2 r_s + \beta_3 r_s^{3/2} + \beta_4 r_s^2)} \right] \quad (48)$$

com, $\alpha_1 = 0,062182$; $\alpha_2 = 0.21370$;
 $\beta_1 = 7.5957$; $\beta_2 = 3.5876$; $\beta_3 = 1.6382$;
 $\beta_4 = 0.49294$; para $\epsilon_c^h(r_s)$ e r_s em unidades atômicas.

2- Grupo de Lund[12]

$$\epsilon_c^h(r_s) = \alpha_1 f(\alpha_2 r_s) + \beta_1 f(\beta_2 r_s) \quad (49)$$

onde,

$$f(z) = (1 + z^3) \ln \left(1 + \frac{1}{z} \right) + \frac{z}{2} - z^2 - \frac{1}{3} \quad (50)$$

com $\alpha_1 = -0.006716$; $\alpha_2 = 2.5219$;
 $\beta_1 = -0.007805$ e $\beta_2 = 25.0900$; para $\epsilon_c^h(r_s)$ e r_s em unidades atômicas.

3- Vosko-Wilk-Nusair[13]

$$\begin{aligned} \epsilon_c^h(r_s) = A \left\{ \ln \frac{x^2}{X(x)} + \frac{2b}{Q} \tan^{-1} \frac{Q}{2x+b} - \right. \\ \left. \frac{bx_0}{X(x_0)} \left[\ln \frac{(x-x_0)^2}{X(x)} + \frac{2(b+2x_0)}{Q} \right. \right. \\ \left. \left. \tan^{-1} \frac{Q}{2x+b} \right] \right\} \quad (51) \end{aligned}$$

com $A = 0.0621814$; $x = r_s^{1/2}$; $X(x) = x^2 + bx + c$; $Q = (4c - b^2)^{1/2}$; $x_0 = -0,10498$; $b = 3,72744$; $c = 12,93352$; para r_s e $\epsilon_c^h(r_s)$ em unidades atômicas.

Assim, várias funções podem ser usadas. Portanto, sugira, você leitor, uma função de r_s capaz de reproduzir os dados da tabela 1.

Da maneira como a LDA foi construída, ela deveria produzir bons resultados apenas nos casos onde a densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$ fosse praticamente constante. No entanto, surpreendentemente ela é razoavelmente acurada mesmo para sistemas onde isso não ocorre. Por exemplo, para as energias de ligação de moléculas, os erros dos valores obtidos quando comparados com os valores experimentais é, em geral, da ordem de 1 eV; os das distâncias de equilíbrio são da ordem de 0,1 Å; já os das frequências de vibração são piores estando entre em torno de 10 e 20% dos valores experimentais. Além disso, com a LDA o limite de dissociação de várias moléculas são obtidos de forma incorreta; e, sistematicamente, os íons negativos são instáveis.

Com propósito de obter resultados mais precisos do que os obtidos usando a LDA, outras aproximações foram propostas, as quais procuram incluir, além da dependência com a densidade eletrônica, a dependência com o seu gradiente, como forma de tratar a não homogeneidade dos vários sistemas eletrônicos. Elas são chamadas de Aproximações não Locais.

VI. APROXIMAÇÕES NÃO LOCAIS PARA E_{xc}

De forma bastante abreviada, vamos apresentar dois exemplos.

I- Aproximação do Gradiente Generalizado (GGA)

Nessa aproximação $E_{xc}[\rho]$

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int \epsilon_{xc}^h(\rho, |\nabla\rho|) \rho(\mathbf{r}) d^3r \quad (52)$$

Essa aproximação, na verdade, constitui-se numa classe de aproximações uma vez que a densidade de energia $\epsilon_{xc}^h(\rho, |\nabla\rho|)$ não é univocamente definida e várias alternativas existem na literatura científica. Inicialmente, elas distinguem-se entre si por serem de primeiros princípios- também chamadas de **ab-initio**- ou **híbridas** - também ditas semi empíricas.

As ab-initio são obtidas usando apenas condições exatas ou assintóticas oriundas de um formalismo rigoroso dentro do arcabouço teórico da Mecânica Quântica. Um exemplo de ab-initio é a aproximação PBE obtida por Perdew, Burke e Ernzerhof[14].

No caso da PBE, o funcional $E_{xc}[\rho]$ é dividido no termo de Troca, com:

$$E_x^{PBE}[\rho] = \int \epsilon_x^h(\rho) F_x^{PBE}(\rho, |\nabla\rho|) \rho(\mathbf{r}) d^3r \quad (53)$$

com, $\epsilon_x^h(\rho)$ dado pela equação (46) e

$$F_x^{PBE}(\rho, |\nabla\rho|) = 1 + \kappa - \frac{\kappa}{1 + \frac{\mu s^2}{\kappa}} \quad (54)$$

onde $\kappa = 0.804$; $\mu = 0,219503$ e $s = \frac{|\nabla\rho|}{2\rho(3\pi^2\rho)^{1/3}}$

E no termo de Correlação, com

$$E_c^{PBE}[\rho] = \int \epsilon_c^{PBE}(\rho, |\nabla\rho|) \rho(\mathbf{r}) d^3r \quad (55)$$

onde,

$$\epsilon_c^{PBE}(\rho, |\nabla\rho|) = \epsilon_c^h(\rho) + H(\rho, |\nabla\rho|) \quad (56)$$

com, $\epsilon_c^h(\rho)$ sendo a Densidade de Energia de Correlação para um gás homogêneo de elétrons interagentes e $H(\rho, |\nabla\rho|)$ dado por:

$$H[\rho, \tau] = 0,031091 \ln\{1 + 2,146119456\tau^2 \left[\frac{1 + A\tau^2}{1 + A\tau^2 + A^2\tau^4} \right]\} \quad (57)$$

onde, $\tau = \frac{|\nabla\rho|}{2\kappa_s\rho}$, com $\kappa_s = \left[\frac{4}{\pi}(3\pi^2\rho)^{1/3}\right]$; $A = 2,146119456[e^{-\epsilon_c^{LDA}[\rho]/0,031091} - 1]^{-1}$

Os resultados obtidos com a aproximação PBE mostram que para moléculas ela melhora as energias de ligação, bem como as de atomização, quando comparados com os resultados usando a LDA. Ela também descreve melhor os parâmetros de rede e as propriedades magnéticas de vários metais. No entanto, ela não apresenta uma melhoria sistemática para as propriedades geométricas das moléculas.

Por sua vez, as híbridas, combinam resultados exatos com parâmetros ajustados de forma a reproduzir valores experimentais já conhecidos. Elas funcionam bem para sistemas similares aqueles para os quais os parâmetros foram ajustados, mas costumam falhar de forma grosseira em outros casos. Como exemplo de híbrida, podemos citar a mais usada, a qual é abreviada como B3LYP [15],[16],[17]. Esta aproximação depende de três parâmetros empíricos e é dada por

$$E_{xc}^{B3LYP}[\rho] = (1 - a)E_x^{LDA}[\rho] + aE_x^{exato}[\rho] + bE_x^{B88}[\rho] + cE_c^{LYP}[\rho] + (1 - c)E_c^{LDA}[\rho] \quad (58)$$

com $a = 0,20, b = 0,72$ e $c = 0,81$. Já E_x^{LDA} refere-se à Energia de Troca na LDA; $E_x^{exato}[\rho]$ corresponde à Energia de Troca exata obtida por Becke[16]; $E_x^{B88}[\rho]$ à Energia de Troca com limite assintótico correto tal como obtida por Becke[15]; $E_c^{LYP}[\rho]$ à Energia de Correlação obtida por Lee, Yang e Parr[17] e $E_c^{LDA}[\rho]$ é a Energia de Correlação na LDA.

II- Aproximação meta-Gradiente Generalizado (Meta-GGA)

Nessa aproximação $E_{xc}[\rho]$

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int \epsilon_{xc}^h(\rho, |\nabla\rho|, \nabla^2\rho, \nabla^2\phi_{KS})\rho(\mathbf{r})d^3r \quad (59)$$

de forma que o funcional depende dos próprios orbitais de Kohn-Sham e o método não é auto-consistente. Há diferentes maneiras de definir a densidade de energia, $\epsilon_{xc}^h(\rho, |\nabla\rho|, \nabla^2\rho, \nabla^2\phi_{KS})$. Com essa aproximação, melhores resultados são alcançados para vários sistemas, mas, por outro lado, para outros sistemas os resultados são piores quando comparados com os da aproximação PBE[18] e [19].

VII. RESULTADOS

Nas Tabelas 2 e 3 mostramos exemplos de cálculos de Energia de Atomização para algumas moléculas e do Parâmetro de Rede para vários sólidos nas aproximações LDA e PBE [20]. Como podemos observar, nesses casos específicos, os resultados obtidos com a PBE estão mais próximos dos valores experimentais do que aqueles obtidos com a LDA.

Tabela 2: Parâmetros de rede a_0 (in Å).

Entre parêntesis estão as estruturas cristalinas

	usadas.		
Solido	LDA	PBE	Expt.
Ag (fcc)	4.007	4.028	4.062
Au (fcc)	4.047	4.054	4.062
Al (fcc)	3.983	4.000	4.019
C (diamante)	3.536	3.547	3.544
Si (diamante)	5.407	5.417	5.415
Ge (diamante)	5.625	5.644	5.639
GaAs (blenda de zinco)	5.607	5.630	5.637
InP (blenda de zinco)	5.825	5.846	5.856
InAs (blenda de zinco)	6.027	6.051	6.044

Tabela 3: Energia de Atomização
(in kcal/mol)

	LDA	PBE	Expt.
SiH ₄	346.6	313.0	322.4
SiO	223.0	195.6	192.1
S ₂	134.2	114.7	101.7
C ₃ H ₄	800.3	720.0	704.8
C ₂ H ₂ O ₂	752.0	663.3	633.4
C ₄ H ₈	1304.7	1168.5	1149.0

VIII. CONCLUSÃO

Nestas notas as provas dos teoremas básicos da Teoria do funcional da densidade foram feitas para sistemas obedecendo certas restrições, as quais poderiam ser abandonadas se outro formalismo fosse adotado. O objetivo dessa opção foi o de tornar o tratamento formal o mais simples possível e, assim, focar nos pontos centrais da DFT.

Como vimos, os teoremas I e II mostram que existe uma relação bijetiva entre as densidades eletrônicas do Estado Fundamental e os respectivos potenciais locais externos aos elétrons. Com isso, a OF-DFT cria, em princípio, a possibilidade de se obter cálculos realísticos da estrutura eletrônica de sistemas com muitos elétrons construindo uma boa aproximação para o funcional $T[\rho]$.

Já na abordagem construída por Kohn e Sham, um sistema real, isto é, com elétrons interagentes, é transformado num sistema de elétrons não intera-

gentes, à mesma densidade, sujeitos a um potencial efetivo local externo aos elétrons. Daí resulta a possibilidade de obter a Energia e a Densidade Eletrônica do Estado Fundamental resolvendo as Equações de Kohn-Sham para funções de uma partícula. Algumas das aproximações mais comumente usadas para obter as soluções dessas equações foram listadas. Dessas soluções, as propriedades físicas para os sistemas eletrônicos, no Estado Fundamental, podem ser calculadas. Como ilustração desses cálculos, incluímos os resultados para seis moléculas e nove sólidos.

Os artigos que lançaram as bases da DFT acabam de completarem 50 anos. Ainda assim, ela é uma teoria ainda em pleno desenvolvimento metodológico e com uma gama enorme de aplicações. No plano metodológico, destacamos sua extensão para tratar sistemas degenerados, estados excitados, efeitos relativísticos, de temperatura e de interação com o campo magnético[21],[22],[23],[25]. Além disso, vale ressaltar que já foram provados teoremas equivalentes ao caso estacionário para incluir a dependência no tempo e, assim, permitir o estudo de propriedades dinâmicas, como nos fenômenos de transporte quântico[24].

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. Mais detalhes e aprofundamento dos tópicos tratados nestas notas podem ser encontrados na bibliografia citada no texto.

REFERÊNCIAS

- [1] Cohen-Tannoudji,C., Diu,B. e Lalöe,F., *Quantum Mechanics*, (John Wiley and Sons, 1977)
- [2] P.Hohenberg and W.Kohn, *Phys. Rev.***136**, 864 (1964).
- [3] M.Levy, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)*, **76**, 6062 (1979)
- [4] Thomas,L.H., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **23**, 542, (1927) e Fermi, E. , *Rend. Accad. Lincei*, **6**, 602, (1927)
- [5] von Weizsäcker, C.F. , *Z.Phys.*, **96**, 431 (1935)
- [6] Gazquez,J.L. and Robles,J., *J.Chem. Phys.* , **76**, 1476 (1992)
- [7] Wang,Y.A., Govind,N. and Carter,E.A.,*Phys. Rev. B*, **58**, 13465(1998); **60**,17162(E),(1999)
- [8] W.Kohn and L.Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965)
- [9] Dirac.P.A.M, *Math. Proc. of the Camb. Phil. Soc.*, **26**,376(1930)
- [10] D.M. Ceperley and B.J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980)
- [11] Perdew, J.P. and Wang,Y., *Phys. Rev. B*, **45**,13244 (1992)
- [12] Almbladh,C-O, Ekenberg,U., Pedroza,A.C., *Phys. Scr.*, **28**, 389, (1983)
- [13] Vosko, S.H., Wilk, L. e Nusair, M., *Can. J. Phys.*, **58**, 1200 (1980)
- [14] Perdew, J.P; Burke,K. e Ernzerhof,M., *Phys. Rev. Lett.* **77**,3865 (1996). Erratum:ibid. **78**,1396 (1997)
- [15] Becke,A.D., *Phys. Rev. A*,**38**,3098 (1988)
- [16] Becke,A.D., *The Journal of Chem. Phys.*,**98**,5648 (1993)
- [17] Lee,C., Yang,W. and Parr,R.G., *Phys. Rev B*, **37**,785 (1988)
- [18] Perdew,J.P., Kurt,S., Zupan,A. e Blaha,P. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2544 (1993)
- [19] Tao,J., Perdew,J.P., Staroverov, V.N. e Scuseria,G.E. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 146401 (2003)
- [20] Haas,P., Tran,F., Blaha,P, Pedroza,L.S., da Silva,A.J.R.,Odashima,M.M. e Capelle,K.,*Phys. Rev. B* **81**,125136 (2010)
- [21] Kohn,W. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [22] R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford University Press, Oxford, 1989).

- [23] Dreizler,R.M e Gross,E.K.U *Density Functional Theory* (Springer, Berlin, 1990).
- [24] Ullrich,C.A,*Time-dependent Density Functional Theory: Concepts and Applications* (Oxford University Press, 2012)
- [25] Kohanoff,J.,*Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules* (Cambridge University Press, 2006)

Pesquisa intercultural sobre as ambições das mulheres universitárias em relação a estudo de ciências e carreiras

KATHLEEN FOOTE* REVA GARG†

“Se formos inovar e educar o resto do mundo, precisamos abrir portas para todos. Precisamos de todas as mãos na tarefa, e isso significa retirar os obstáculos para mulheres e meninas quando elas navegam em carreiras em ciência, tecnologia, engenharia e matemática1.”, Primeira Dama Michelle Obama, September 26, 2011

Resumo

Em praticamente todo o mundo, mulheres ainda constituem uma minoria entre portadores de diplomas e trabalhadores na física. Embora uma quantidade significativa de pesquisa tenha sido feita para investigar e corrigir a sub-representação das mulheres na ciência, o problema está longe de ser resolvido. Como esse é ainda um problema global, esse estudo comparativo de culturas utiliza respostas a pesquisa qualitativa completada por aproximadamente um cento de estudantes universitárias, nas áreas de ciências exatas, tanto brasileiras quanto indianas e americanas, para identificar os fatores que influenciaram sua escolha de área, bem como seus planos para uma futura carreira. Tanto as diferenças quanto as influências comuns entre as culturas tem implicações praticas em técnicas para ajudar a atrair e manter as mulheres nas ciências através do mundo.

Palavras-chave: pesquisa qualitativa; estudo cross-cultural; carreira feminina

ANTECEDENTES E MOTIVAÇÃO

Vários estudos internacionais foram conduzidos nos últimos anos sobre a subrepresentação das mulheres nas ciências, tecnologia, engenharia e matemática (STEM)2-7. Mas recentes estudos tendem em focalizar as tendências de emprego na área subsequentemente8,9. Uma reportagem10 interessante

afirma que essa subrepresentação não decorre de menor habilidade das mulheres nessas areas, mas do fato de que elas escolhem seguir outras oportunidades. Esse estudo investiga as percepções de estudantes de graduação acerca da ciência durante um momento de decisão no qual muitas delas formalizam e confirmam a direção que tomarão em suas trajetórias profissionais.

*Physics Education Research Group, North Carolina State University, Raleigh, NC, USA.

†Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

A natureza comparada, entre culturas, de nosso estudo acrescenta ao entendimento dessa questão global através da comparação de populações com diferentes padrões de retenção e estereótipos culturais. Nos Estados Unidos e no Brasil, muitas mulheres são afastadas das ciências logo na escola fundamental e os números continuam a decrescer a cada nível educacional¹¹, o assim denominado efeito de “cano com vazamento” (em inglês, “leaky pipeline”). Em contraste, o “efeito de teto de vidro” (em inglês, “glass ceiling effect”) caracteriza os padrões de retenção na Índia¹², onde o percentual de mulheres se mantém relativamente alto durante a graduação, e então a representação na força de trabalho cai dramaticamente. Embora as mulheres tenham adquirido 37% de todos os graus de doutorado outorgados por instituições indianas, elas detêm menos do que 15% das posições no corpo docente na área de ciências. O estereótipo social – “meninas não são boas em matemática e ciência” que se mantém nos países ocidentais é cada vez menos comum na Índia, onde as mulheres tem superado sua contraparte masculina nesses conteúdos em exames nacionais pela última década.

A análise qualitativa ajuda a encontrar os padrões subjacentes nas respostas das estudantes á pesquisa que indaga quais experiências iniciaram, encorajaram e desencorajaram o interesse nos campos científicos. Analisar perguntas abertas permite as estudantes identificar suas experiências de vida mais influentes sem restringi-las com opções pré-selecionadas de múltipla escolha, acrescentando profundidade e detalhamento que os esforços de pesquisa em larga escala perdem. Os resultados desse estudo são particularmente importantes para professores e membros da família, que podem encorajar mulheres jovens a levar em consideração essas profissões. Um aumento no número de mulheres graduando-se em ciência, tecnologia e matemática criará um repertório maior e mais variado de profissionais para suprir vagas de trabalho e promover

a vitalidade econômica de seus respectivos países.

1.1 PROJETO DE PESQUISA

1.1.1 Coleta de dados

Esse estudo pesquisou mulheres de uma prestigiada universidade feminina na Índia (30 respondentes), uma universidade feminina, batista e liberal da área de artes nos Estados Unidos (28 respondentes) e uma universidade brasileira mista de alta qualidade no Brasil (28 respondentes), entre 2011 e 2013. A maior parte das estudantes indianas pesquisada estava se graduando nas áreas de Física (68%) e química (25%). Como a Baptist Liberal Arts College não oferece o curso de física, aproximadamente 75% das estudantes pesquisadas nessa população estavam estudando biologia, química ou uma combinação das duas, com intercorrência de outras graduações. Todas as estudantes pesquisadas no Brasil estavam cursando Física. As variações entre os tipos de instituição e formação acadêmica contribuem para as diferenças entre as populações pesquisadas que se estendem além das diferenças culturais, mas muitos dos resultados são distribuídos entre essas três populações de estudantes. Os dados consistem de respostas a cinco perguntas de respostas curtas, listadas abaixo. A pesquisa foi completamente voluntária, de modos que as estudantes responderam honestamente às questões, provendo um retrato válido de suas opções.

1.1.2 Questões da pesquisa qualitativa:

1. O que a fez escolher seu curso de graduação?
2. O seu curso atual foi sua primeira opção? Por que ou por que não?
3. Algum professor ou outro exemplo inspirou você a tentar uma carreira na área de ciências? Como?

4. Se você já se decidiu sobre pós-graduação ou planos de longo termo na carreira, quais são eles?

5. Em que idade, ou estágio de sua vida escolar você fez essa escolha de carreira? Por que?

1.1.3 Redução de dados

Para a análise das respostas à pesquisa, as respostas foram transcritas e organizadas em uma planilha eletrônica. Elas foram separadas em fragmentos que contem uma ideia principal a ser codificada exclusivamente em cada domínio. Os códigos foram desenvolvidos iterativamente, com base tanto na literatura quanto nos dados coletados. Códigos específicos foram organizados sob três domínios independentes: identidade científica, experiências passadas, e expectativas de resultados, que descrevem as influências passadas, presentes e futuras (respectivamente) das estudantes. Afirmativas que mencionam explicitamente um impacto positivo ou negativo foram codificadas como “encorajadoras” ou “desencorajadoras”, respectivamente. O domínio de “identidade científica” nesse estudo foi influenciado pelo estudo sob o aporte de gênero de Hazari¹³ sobre a possibilidade de escolher a física como carreira com base em experiências do ensino médio. Afirmativas que discutem a percepção atual das estudantes sobre seus interesses, performance e competência em ciência e seu reconhecimento enquanto uma “pessoa que prefere ciências” foram codificadas sob o domínio de “identidade científica”. Experiências passadas são colocadas no domínio da “influência externa”, por exemplo, afirmações sobre conselhos recebidos no passado, cursos ou atividades extracurriculares influentes (como um trabalho ou uma experiência de pesquisa). O domínio das “expectativas de resultados” inclui planos para o futuro em carreiras/graduações, objetivos financeiros, desejo por prestígio ou objetivos externos (como carreira flexível, oportunidades de viagens, profissão de contato como público, etc). Para estabe-

lecer a confiabilidade dos inter-avaliadores, um pesquisador independente foi treinado nas definições de códigos. Depois da codificação preliminar e discussão de discordâncias, as definições de códigos foram refinadas e o processo foi repetido com uma quantidade maior de dados. A confiabilidade nas pontuações revelou-se acima dos valores de referência, sugerindo que pesquisadores independentes podem aplicar as definições de códigos consistentemente e que as concordâncias provavelmente não decorrem de coincidência.

1.2 RESULTADOS

1.2.1 O que estudantes de graduação levam em consideração quando escolhem um curso e/ou carreira?

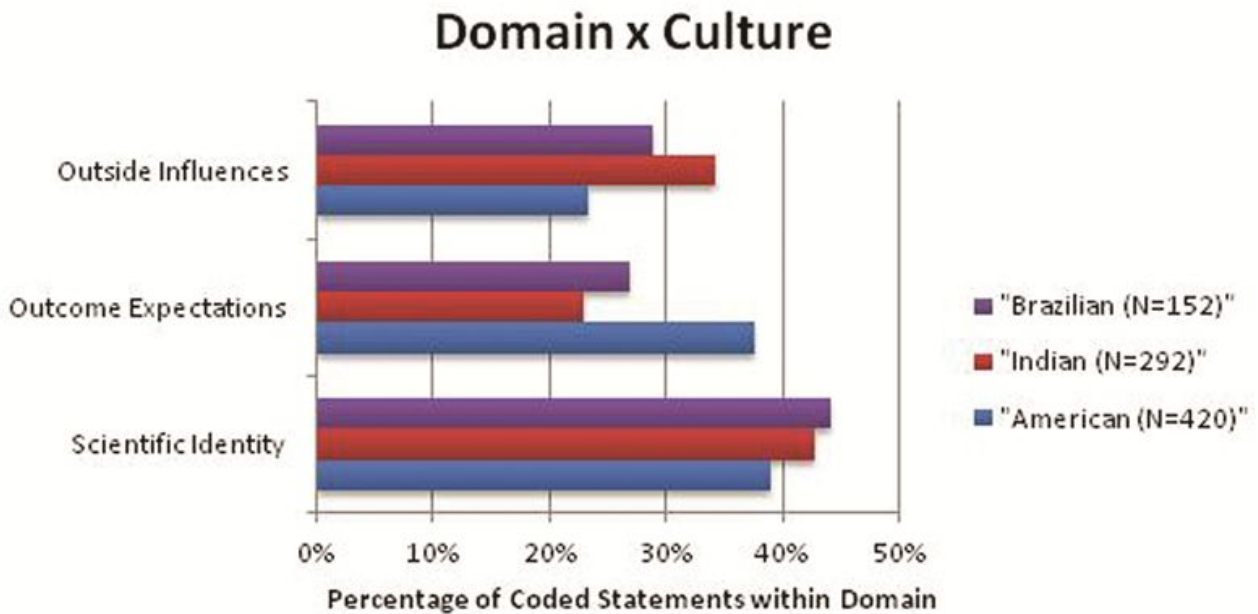


Figura 1: Porcentagem de segmentos que caem sob cada código de influencia, por cultura. N denota o numero do total de declarações codificadas para cada população.

A figura 1 apresenta a porcentagem de declarações sob cada domínio, por cultura. Assumindo que a frequência de declarações é correlata a quanto cada domínio influenciou as estudantes pesquisadas, podemos fazer inferências sobre os códigos e domínios que influenciaram mais cada população. As três populações mencionam influencias de todos os três domínios e as respostas revelam alguns temas comuns, através das culturas. No entanto, existem algumas diferenças notáveis, especialmente dentro do domínio "resultado expectativa". O interesse por ciências foi o primeiro motivador para estudantes nas tres culturas. Uma americana ex-

plica por que se interessa por biologia: "Eu gosto que tudo (ao menos no básico) segue regras que podem ser explicadas. Eu gosto de testar as coisas (experimentação). Eu gostaria de trabalhar em um campo que estivesse sempre mudando/avançando". Uma estudante indiana descreve um sentimento similar, "Eu adoro física pois ajuda a entender o que está acontecendo na natureza a nossa volta, tanto física quanto matematicamente". A curiosidade sobre o mundo natural deu inicio ao interesse para muitas estudantes, inclusive uma brasileira que decidiu estudar física "quando eu tinha 9 anos e olhei para as estrelas". No domínio de "in-

fluencias externas” estudantes de todas as populações mencionaram professores do ensino médio e membros da família como influentes, enquanto varias estudantes afirmam ser primariamente auto-motivadas. Uma estudante indiana refletiu sobre seus modelos e escreveu: “em alguma medida, foi minha mãe, mas eu mesma estava tão interessada em meus primeiros anos que ninguém precisaria me influenciar”. Ao contrario dos professores, que foram mencionados de forma quase exclusivamente positiva, os conselhos da família por vezes desanimaram algumas estudantes, pois “a família desaprovava o curso”. Varias estudantes indianas e uma brasileira (mas nenhuma americana) mencionaram figuras históricas das ciências como inspiração. Por exemplo, “Marie Curie me inspirou, pois ela foi uma pesquisadora em uma época em que a pesquisa científica era dominada pelos homens”, e “Albert Einstein. Ele era um grande físico e eu admiro o trabalho dele. Seu trabalho, descobertas e pesquisas me inspiraram a tentar atingir esse nível.” Afirmativas no domínio de “expectativas exteriores” variaram perceptivelmente entre culturas. Muitas americanas escolhem sua graduação com um tipo específico de estilo de vida em mente, decidindo por uma carreira prática e interessante. Uma estudante americana trocou de graduações até encontrar um campo que a agradasse e no qual pudesse imaginar um futuro: “Eu adoro quebra-cabeças e ver como as coisas se encaixam, como elas funcionam. Biologia, e então Química, acabaram sendo exatamente o que eu apreciava... [Em] cursos prévios... eu gostava do curso, mas não me via fazendo nada com eles a longo termo”.

Afirmativas similares de estudantes americanas discutem a escolha de um curso que “eu achava que iria me prepara melhor para o tipo de coisas que eu quero fazer mais tarde na vida”.

Estudantes indianas e brasileiras expressam objetivos de carreira mais genéricos e abstratos, frequentemente listando formação em educação para

um futuro na academia. Por exemplo: “Eu planejo fazer Mestrado em Ciências e depois doutorado em física. Eu pretendo mesmo continuar minha vida na física”, e uma estudante afirma ter feito sua escolha de carreira “depois do 12o. todos dizem que um emprego de docência é melhor para meninas, por isso eu escolhi a academia e por causa do meu interesse em ciências, e decidi também... fazer pesquisa, ademais”. Estudantes brasileiras tendem a mencionarem objetivos de carreira similarmente genéricos, provavelmente porque tem menos familiaridade com as opções de carreira disponíveis para formados nas áreas de ciências. Uma estudante brasileira admite desejar trabalhar fora da academia, entretanto, pensa que isso seria muito difícil. Ela afirma: “Eu gostaria de trabalhar na indústria, mas isso não é encorajado na minha universidade.”.

1.2.2 Quais fatores encorajam as mulheres na graduação a perseguir estudos e/ou carreira nas ciências? Existem diferenças nos fatores encorajadores em diferentes culturas?

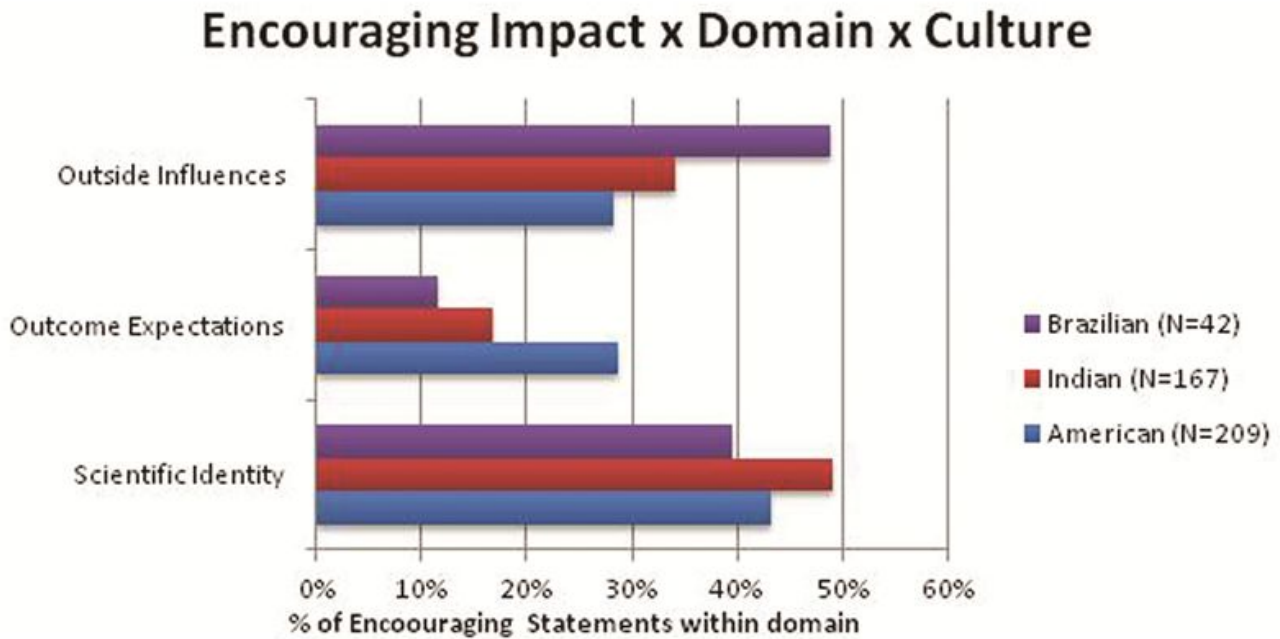


Figura 2: Porcentagem de declarações codificadas que tiveram um impacto encorajador através de cada domínio, por cultura. N denota o numero do total de declarações codificadas para cada população.

A Figura 2 apresenta a porcentagem de declarações codificadas que tiveram um impacto encorajador sob cada um dos domínios, para cada população de estudantes. As estudantes indianas mencionam experiências extracurriculares encorajadoras (frequentemente pesquisa) quase duas vezes mais que as americanas. Uma estudante indiana escreve: “Eu fui realmente muito afetada durante o meu projeto... Teorias podem ser aprendidas em qualquer tempo e lugar, mas o que é realmente importante é como cada um pode aplicar seu cérebro de forma prática... então isso me ajudou a resolver minhas dúvidas sobre alguns conceitos básicos...”. Outra estudante indiana ecoa a importância do domínio

dos conteúdos promovido pela pesquisa como fator de aumento em sua apreciação pelo processo científico: “Esses projetos e miniprojetos de alguma forma tornam o aprendizado muito mais fácil e promove uma maneira criativa de lidar com ele.” Como a instituição pesquisada aqui tem uma exigência de pesquisa (o que é atípico no cenário indiano), essas experiências são provavelmente pouco comuns para outras estudantes na Índia. No entanto, projetos de pesquisa permitiram a essas estudantes aprofundar a percepção de conceitos e adquirir um gosto pela experimentação, portanto, expandir oportunidades similares pode ajudar outras estudantes a aproveitarem benefícios vários. Tais

experiências passadas de pesquisa frequentemente inspiram as estudantes indianas a ultrapassarem as expectativas. Uma estudante indiana discute sua esperança de desenvolver uma carreira prestigiosa em pesquisa, pois “a vastidão das aplicações, praticidade, poder e importância da química hoje em dia me fez escolher esse curso que... vai me dar uma base sólida para a pesquisa, mais adiante”. Uma estudante indiana expõe como decidiu prosseguir estudando matemática para poder fazer um doutorado “em algum campo experimental no qual eu posso ter opções melhores na física e prover meu próprio laboratório com equipamento novo”. Nenhuma afirmação semelhante foi encontrada nas respostas de estudantes brasileiras ou americanas recolhidas nessa pesquisa. Isso não surpreende, visto como as estudantes americanas têm possibilidades limitadas de pesquisa em sua pequena universidade liberal de artes. A falta de experiências positivas de pesquisa nas estudantes brasileiras é um pouco mais surpreendente, posto que as alunas estudam em uma universidade com um programa de pós-graduação na área. As estudantes brasileiras apresentam uma percentagem mais alta no domínio de expectativas exteriores, frequentemente sob um código de orientação (aconselhamento), descrevendo experiências em que professores, pais ou amigos os encorajaram a prosseguir estudando ciência. Por exemplo, uma estudante brasileira disse que seu pai e professores do ensino médio “me inspiraram a estudar física pois eu tirava as melhores notas.” Talvez a ênfase latino-americana na família e na comunidade contribuam para a frequência maior dessas afirmações.

1.2.3 Quais experiências desencorajadoras levam as mulheres a desistir de seus planos iniciais de curso/carreira? Existem diferenças nas influencias desencorajadoras nas três diferentes populações?

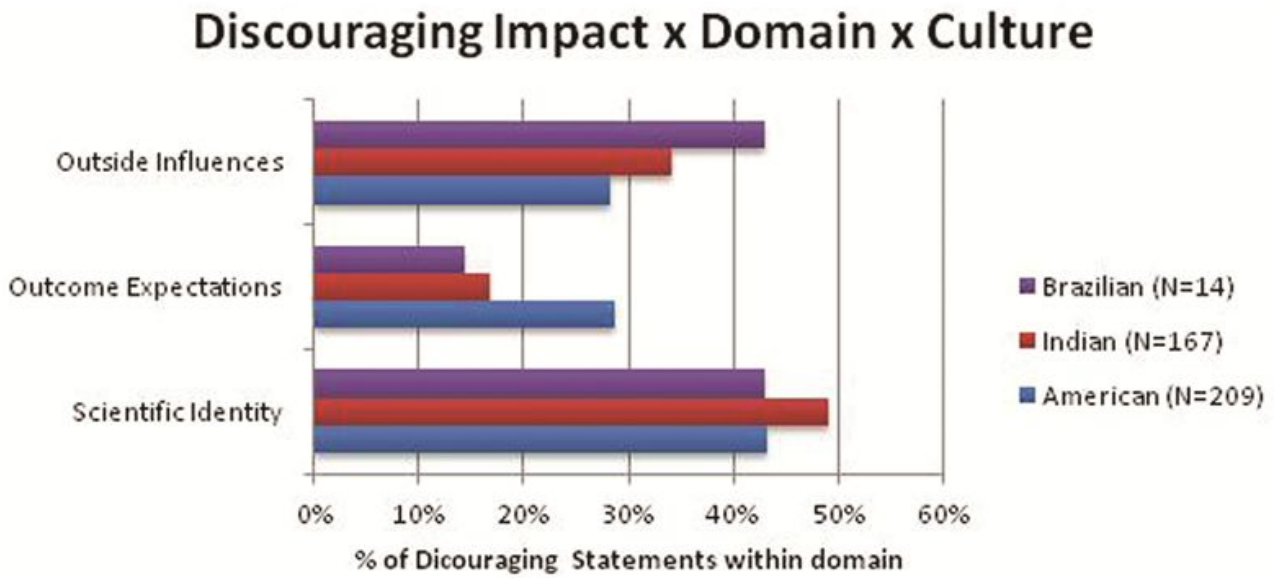


Figura 3: Porcentagem de statements coded que tiveram impacto desencorajador que caem sob cada domínio, por cultura. N denota o numero do total de declarações codificadas para cada população.

A figura 3 apresenta a porcentagem de declarações codificadas que tiveram um impacto desencorajador sob cada um dos domínios, para cada população de estudantes.

Existem diferenças significativas e interessantes nas causas da mudança de escolha das estudantes, em que as estudantes indianas frequentemente foram desencorajadas por notas baixas em exames, enquanto estudantes americanas se distanciam de assuntos desinteressantes ou prospectos de emprego pouco atraentes.

A porcentagem relativamente grande de experiências negativas na Índia sob o código de performance não é surpreendente, levando-se em conta os exames nacionais no país cujas linhas de corte

inflexíveis limitam quais universidades e cursos uma estudante pode pretender. É interessante que a performance e o interesse tendem a ser intimamente ligados para estudantes indianas. Uma delas afirmou que o curso de administração “era minha primeira escolha, eu não fui selecionada em nenhum vestibular e também perceber que se eu falhar nos trabalhos práticos que precisam ser conduzidos durante o curso eu perco o interesse”. De forma semelhante, as notas baixas nas provas de engenharia fizeram outra estudante indiana “repensar minha decisão anterior de fazer carreira como astrônoma”. Essa aparente conexão entre performance e interesse coloca algumas dúvidas sobre se o interesse por ciências declarado pelas estudantes indianas

realmente decorre de um prazer intrínseco ligado ao assunto, ou se foi provocado pelas boas notas. Esse constitui um tópico interessante para investigação através de entrevistas mais aprofundadas que possam explorá-lo mais extensamente para distinguir entre um interesse autêntico e outro, instilado externamente.

Algumas das estudantes que mudaram seus planos iniciais de carreira por causa de resultados de exames encontraram satisfação mas outras parecem ainda mais inclinadas a prosseguir em carreiras não ligadas à ciência apesar de estudarem ciências na universidade. Por exemplo, uma estudante indiana que estudava física por que não conseguiu entrar no curso de (business) expressa sua desilusão com a falta de criatividade em ciências, e afirma seu desejo de trabalhar em uma área não científica: “Eu quero tentar um mestrado ou emprego como diretor de estágio (probationary officer) em um banco [sense] Eu percebi que na Índia, as ciências duras (core sciences) estão limitadas a estudar nos livros e não conduzem a inovações. Até os experimentos conduzidos em laboratórios são reduzidos”. Ela menciona a falta de liberdade acadêmica na Índia, onde as “famílias não permitem de fato que você saia da sua área restrita para pesquisar e colegas não dão liberdade suficiente para realizar experimentos”.

Em contraste com as estudantes indianas e suas limitadas opções de performance, muitas estudantes americanas escolhem um assunto divertido ao invés de outro em que sejam naturalmente excelentes. Uma estudante lembra como escolheu biologia embora “essa não fosse minha primeira escolha. Minha primeira escolha foi a matemática e eu descobri que gosto muito mais de biologia. Eu sou melhor em matemática mas me divirto mais com ciências.” Outra estudante escolheu psiquiatria por razões semelhantes: “Eu sou boa em ciências mas isso é mais um hobby... eu gosto mais de psiquiatria”. Estudantes americanas tem mais liberdade

para selecionar sua formação com base em seus próprios interesses, o que frequentemente resulta em escolher “o caminho que vá me fazer mais feliz”. Além do desinteresse pelo assunto em si, algumas estudantes americanas acham os empregos na área de ciências pouco atraentes: “outras oportunidades de carreira me parecem mais interessantes”. Outros elementos dissuasores incluem certa falta de exposição: “eu nem sequer sei que tipos de carreira em física existem”, a percepção de que carreiras em ciências limitam a interação com as pessoas: “Eu adoro trabalhar junto às pessoas (não em um laboratório)”, e aspectos do ambiente de trabalho: “é uma área difícil para conseguir emprego, apenas os melhores são bem sucedidos, e é um meio dominado pelos homens”.

Muitas estudantes indianas e brasileiras preveem que seu gênero poderá impactar negativamente sua aceitação no campo: “eu sinto que a sociedade científica é dominada pelos homens e as mulheres sempre estiveram confinadas ao lar”, e temem que “um emprego em uma boa companhia ou em uma multinacional não é seguro ou conveniente para mulheres devido à jornada de trabalho extensa”. O tratamento áspero dispensado por um professor dissuadiu uma estudante brasileira a prosseguir estudando na área. “Eu parei de fazer a disciplina por esse fator. Eu estava tendo dificuldade em física e, ao invés de me ajudar em minhas dificuldades, um professor disse que eu deveria aprender sobre maquiagem, e não sobre física”. Nenhuma outra estudante brasileira mencionou incidentes específicos, como esse, mas uma delas reconhece que se sente “eu não diria discriminada, mas subestimada. Porque eu sou o que eles consideram uma mulher bonita, ninguém espera que eu seja inteligente”. Outra estudante brasileira, que leciona física, sobre de semelhante falta de reconhecimento: “Com frequência, muitas pessoas duvidam que eu saiba física... quando eu digo, ‘Eu sou a professora’, eles me olham na dúvida,

não acreditando que eu sei física”. Aparentemente, ainda há muitas barreiras culturais a vencer antes que as estudantes brasileiras e indianas possam se sentir confortáveis na força de trabalho científica.

2. Discussão

Ao pesquisar estudantes de graduação em três países diferentes, essa pesquisa identificou com sucesso pontos comuns importantes e iluminou diferenças na maneira como as mulheres escolhem e planejam suas carreiras. Embora diferenças entre as populações não possam ser atribuídas exclusivamente à cultura, os temas comuns entre elas tem implicações práticas imediatas para um grande número de mulheres posto que as respondentes representam uma gama de níveis de habilidade e origens socioculturais. Estudantes de todas as culturas valorizam os conselhos de orientadores (especialmente professores e família) e o interesse por ciências. Muitas estudantes mencionam a pesquisa como uma influência particularmente positiva (quando tiveram essa oportunidade), que as ajudou a decidir se iriam procurar seguir carreira na academia.

Muitas das estudantes indianas discutem experiências de pesquisa, enquanto as americanas frequentemente têm mais motivações orientadas para resultados. As estudantes brasileiras comumente mencionam “influências externas”, especialmente com um orientador. Quanto a experiências desencorajadoras, a performance em exames nacionais afetou as decisões de muitas estudantes indianas, pois a admissão em uma área de formação requer ultrapassar as médias de pontuação. Em contraste, a habilidade natural em um assunto é menos importante para estudantes americanas, pois muitas escolhem a área de formação baseadas em seu interesse, ao invés de sua aptidão natural.

Assegurar que as mulheres tenham acesso a uma grande variedade de possibilidades de carreiras científicas (além da academia) pode encorajar as estudantes de todos os países a se entusiasmar com o futuro nas ciências. Muitas estudantes ame-

ricanas mencionam motivação para objetivos específicos de carreira, enquanto muitas brasileiras e indianas listaram aspirações profissionais muito genéricas. Isso pode indicar uma falta de visibilidade das opções fora da academia, especialmente porque muitas das universitárias em países em desenvolvimento serão mais educadas que seus pais. Estudar um assunto sem focar nas implicações para a carreira pode contribuir para que as mulheres indianas abandonem as ciências (ao invés de trabalhar) após completarem seus estudos, um assunto que merece mais investigação. Mostrar as estudantes como é trabalhar nesses campos pode ajudar estudantes a encontrar empregos onde se sintam interessadas e sejam bem sucedidas.

Estabelecer contato entre estudantes do ensino médio ou da graduação a mulheres cientistas pode abordar simultaneamente muitas das sugestões desse estudo. Cientistas mulheres podem providenciar orientação, acalmar as preocupações sobre o trabalho em um ambiente dominado pelos homens e dar exemplos tangíveis de trabalho em carreiras em ciências fora da academia. Esperamos que as sugestões desse estudo possam abordar esses assuntos em estágios iniciais de tomada de decisão pelas meninas, assim aumentando a representação de mulheres estudando e trabalhando nas áreas técnicas.

I. AGRADECIMENTOS

A coleta de dados para esse projeto foi financiada pelas bolsas (travel grants) da American Physical Society, co-patrocinada pela Indo-U.S. Science and Technology Forum e a Sociedade Brasileira de Física. Agradecemos à universidade, que facilitou a administração desses recursos, e principalmente às estudantes que participaram e compartilharam suas experiências.

Agradecemos, em especial, à Professora Cintia Schwantes, Instituto de Letras, Departamento de

Teoria Literária e Literaturas, UnB, por traduzir o texto.

REFERÊNCIAS

- [1] whitehouse, *Women in STEM*. [On-line]
[http : // www.whitehouse.gov/administration/eop/ostp/women](http://www.whitehouse.gov/administration/eop/ostp/women)
- [2] D. Beede, T. Julian, D. Langdon, G. McKittrick, B. Khan and M. Doms, *Economics and Statistics Administration 4*. U.S. Department of Commerce, 2011.
- [3] Sparks to Science, *Math and Tech Careers Differ among Sexes*. [On-line]
[http : // www.scientificamerican.com/article/sa-survey-what-scientists-say/](http://www.scientificamerican.com/article/sa-survey-what-scientists-say/)
- [4] M. John, *Scientific American* 308, 5, 2013.
- [5] Heather R. Huhman, *Forbes Woman* 6, 20, 2012.
- [6] Craig M. McGill and Donna L. Woudenberg, *The National Academic Advising Association (NACADA)*. [On-line]
[http : // www.nacada.ksu.edu/Resources/Clearinghouse/View-Articles/Gender-issues-in-STEM-majors.aspx](http://www.nacada.ksu.edu/Resources/Clearinghouse/View-Articles/Gender-issues-in-STEM-majors.aspx)
- [7] *The National Coalition for Women and Girls in Education (NCWGE)*. [On-line]
[http : // www.ncwge.org/TitleIX40/STEM.pdf](http://www.ncwge.org/TitleIX40/STEM.pdf)
- [8] S. Huyer, *Women in Global Science & Technology*, Elsevier Foundation, 2012. [On-line]
[http : // wisat.org/data/documents/GEKS_Synthesis-Nov2012.pdf](http://wisat.org/data/documents/GEKS_Synthesis-Nov2012.pdf)
- [9] R. Ivie and C.L. Phys, *Today* 65, 47, 2012.
- [10] M.T. Wang, J.S. Eccles and S. Kenny, *Psychological Science* 24, 770, 2013.
- [11] D.A. Agrello and R. Garg, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 31, 1305, 2009.
- [12] U.B. Sinha and D. Sinha, *Current Science* 100, 837, 2011.
- [13] Z. Hazari, G. Sonnert, P. Sadler and M. Shanahan, *Journal of Research in Science Teaching* 47, 78, 2010.

Formação de Professores e o uso de Novas Tecnologias na Sala de Aula: O Trabalho do Grupo de Educadores Google de Brasília

SAMARA BRITO*

CARLA ARENA†

CLARISSA BEZERRA‡

Resumo

A tarefa de ensinar no século XXI é instigante e desafiadora. O amplo acesso à informação está ao alcance de muitos, e um grande número dos jovens que populam nossas salas de aula possuem esse alcance. Por isso, o educador do novo século reconhece que não basta ter acesso a informação, é preciso saber o que fazer com ela. Um professor certamente percebe a importância do seu trabalho na formação de milhares de jovens, mas será que ele reconhece a sua importância para os seus pares? Professores têm adotado novas estratégias na sala de aula e percebem diariamente a diferença que fazem no processo de ensino/aprendizagem. Será que eles reconhecem a importância e o possível impacto da troca de experiências e do aprendizado coletivo para a constante inovação de sua prática pedagógica? Será que eles reconhecem o quanto essas conexões são inspiradoras? Foi com esse pensamento que o Grupo de educadores Google Brasília (GEG - Brasília) foi fundado, para fomentar uma inteligência docente coletiva e desenvolver novas capacidades em sala de aula por meio de exemplos práticos, ajudando colegas a realizarem transformações positivas na sala de aula. Neste artigo apresentamos o resultado de um ano de trabalho do GEG Brasília, esperando que incentive mais professores a co-construir e colaborar para proporcionar melhoras significativas às experiências de aprendizagem de seus alunos.

Palavras-chave: Educação; Novas tecnologias; Tecnologia Educacional; Métodos ativos; Estratégias de Ensino; Capacitação docente; Colaboração; Inovação.

*Mestranda no Ensino de Física - MNPEF, Pós-graduada em Matemática e Licenciada em Física pela UnB. Professora de Física da SEEDF e Colégio Marista de Brasília. Líder do GEG Brasília. Google Certified Innovator.

†Pós-Graduada em Inovações em Tecnologia Educacional pela Universidade Anhembi Morumbi. Bacharel em Relações Internacionais pela UnB. Coordenadora do Departamento de Inovação e Tecnologias da Casa Thomas Jefferson. Líder do GEG Brasília e Google Certified Innovator.

‡Bacharel em Antropologia pela UnB com licenciatura em Letras Inglês pela Universidade Católica. Professora e Supervisora de Curso na Casa Thomas Jefferson. Líder do GEG Brasília.

Abstract

Teaching in the twenty-first century is an exciting and challenging task. The ample access to information is within the reach of many, and a great number of the young people who populate our classrooms have that reach. Therefore, the educator of the new century recognizes that it is not enough to have access to information, we must know what to do with it. Teachers certainly realize the importance of their work in the education of thousands of young people, but does he recognize its importance to their peers? Teachers have been adopting new strategies in the classroom and realize the difference they make every day in the teaching/learning process. Do they recognize the importance and the potential impact of the exchange of experiences and collective learning on the constant innovation of their pedagogical practice? Do they recognize how inspiring these connections are? That is what drove the foundation of the Google Educators Group - Brasilia (GEG - Brasilia), to foster pedagogical collective intelligence and develop new skills in the classroom by means of practical examples, helping colleagues carry out positive transformations in the classroom. This article presents the results of a year's work of the GEG Brasilia, hoping that it encourages more teachers to co-construct and collaborate to achieve significant improvements to their students' learning experiences.

Keywords: Education; New technologies; Educational Technology; Active methods; Teaching strategies; Teacher training; Collaboration; Innovation.

INTRODUÇÃO

O ethos do 'eterno aprendiz'. Essa é a necessidade dos novos tempos. Um professor, um educador ou qualquer outro agente da educação deve sempre estar atento ao seu aprendizado e às estruturas de pensamento que levam o estudante a buscar seu desenvolvimento continuado. Dentro deste contexto, a disponibilidade do conhecimento por meio das plataformas digitais permite inúmeras oportunidades de desenvolvimento profissional, novas conexões com profissionais da sua área de atuação e a apropriação do educador de novas estratégias didáticas [1]. Seja por questões sociais ou de mercado, há uma demanda crescente pela formação de profissionais que tenham conhecimentos sólidos sobre conteúdos específicos e possuam habilidades e competências associadas ao trabalho colaborativo, discussão de ideias e metacognição.

Nesse contexto, a tecnologia pode ser catalisadora de novas experiências de aprendizagem e desenvolvimento profissional. Com o uso de interfaces tecnológicas cada vez mais amigáveis para o usuário, os docentes, independente de seu nível de domínio das ferramentas, podem traçar novos caminhos para a sua história profissional e para o aprendizado dos seus estudantes. Por exemplo, métodos ativos de ensino aumentam consideravelmente a performance dos estudantes nas áreas de ciências da natureza e matemática [2]. Para comprovar este fato, foram analisados mais de 225 artigos científicos sobre o tema e a conclusão dos autores é de que 33,8% dos estudantes falham nos exames realizados após aulas tradicionais e, que 21,8% dos estudantes vão falhar caso seja utilizado um método ativo de ensino. Neste estudo, não há referência ao uso de novas tecnologias, mas trata-se de um estudo enfático sobre a necessidade de se aumentar o uso dos métodos centrados no estudante, tendo em vista o custo emocional, cognitivo e até financeiro que as reprovações podem levar.

"Os dados sugerem que os professores de Ciências, Tecnologia, Engenharia e Matemática (STEM) podem começar a questionar o uso continuado de aulas no formato tradicional de palestras na prática cotidiana, especialmente à luz dos recentes trabalhos, indicando que a aprendizagem ativa confere maiores benefícios para os estudantes STEM oriundos de meios desfavorecidos e para estudantes do sexo feminino em áreas dominadas pelos homens. Embora aulas tradicionais tenham dominado o ensino de graduação para mais de um milênio e continua a ter fortes defensores, a evidência atual sugere que uma abordagem construtivista "pergunte, não diga" pode levar a fortes aumentos no desempenho acadêmico dos estudantes."

Tradução das Autoras - Freeman, S., Eddy, S. L., McDonough, M., Smith, M. K., Okoroafor, N., Jordt, H., & Wenderoth, M. P. Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics.

Mesmo para os jovens da geração Z, nativos digitais [3], ainda há a necessidade de capacitação e apropriação do uso de novas tecnologias e novas estratégias para o ensino-aprendizagem. A tecnologia é uma ferramenta de inovação pedagógica que permite a diferenciação de instrução, proporcionando ao aluno uma experiência de aprendizagem personalizada que estimula a inteligência coletiva e colaborativa. É exatamente com o intuito de propiciar um ambiente de capacitação docente e aprendizado continuado, descontraído e convidativo, com um forte elemento experiencial e de descoberta que atua o Grupo de Educadores Google de Brasília (GEG - Brasília). Neste artigo, vamos apresentar as atividades desenvolvidas pelo grupo em seu pri-

meiro ano.

I. GRUPO DE EDUCADORES GOOGLE DE BRASÍLIA (2014 - 2015)

I. O que são GEGs?

Os GEGs (Grupos de Educadores Google) [4] são comunidades de educadores que aprendem, compartilham e inspiram uns aos outros para atender às necessidades dos alunos por meio de soluções tecnológicas, dentro e fora da sala de aula. Para a empresa Google, a melhor forma de inspirar e empoderar educadores é por meio do exemplo dos próprios professores. É facilmente perceptível o descontentamento dos docentes em relação à baixa eficiência, em termos de aprendizagem, ao se usar métodos tradicionais de ensino, que funcionam apenas para transmissão de informações [5]. Na sala de aula atual, se as atividades propostas pelos educadores podem ser facilmente resolvidas por meio de uma simples checagem em ferramentas digitais de busca, há que se repensar o tipo de atividade que está sendo desenvolvida. Sendo assim, uma comunidade GEG tem como premissa a horizontalização do conhecimento, onde não existem participantes que sabem mais do que os outros. A ideia é desenvolver a inteligência coletiva e colaborativa, utilizar e desenvolver novas ideias, remixar ou adaptar estratégias adotadas por outros professores e principalmente reaprender, sempre, de forma que os docentes sintam, na prática, que o uso de ferramentas de tecnologia para facilitar métodos ativos de ensino podem impactar positivamente o processo de ensino-aprendizagem.

II. O GEG - Brasília

Em Brasília, o GEG foi inaugurado no dia 13 de Dezembro de 2014. Era uma tarde chuvosa de sábado, ao apagar das luzes do ano letivo. A ideia era fazer um encontro para aproximadamente quinze professores, mas o número de inscrições surpreendeu os líderes do recém-criado grupo. Cinquenta educadores estavam interessados em saber do que se tratava o encontro, destes, trinta e seis compareceram ao evento, demonstrando, assim um interesse latente da comunidade local de educadores em buscar novos modelos de qualificação profissional centrados no uso de novas e emergentes tecnologias, bem como no aprendizado social, baseado na troca de experiências de profissionais da educação advindos de várias instituições de Brasília. Desde o primeiro evento, a proposta pedagógica de formação docente era exatamente a inclusão digital dos educadores, tornando-os digitalmente letrados, assim como a formação de uma comunidade local.

Os eventos do GEG podem ter formatos, assuntos, estilos e durações diferentes. Podem ser palestras formais, focados em networking, presenciais ou totalmente on-line por meio do Google+ ou via transmissão de Webconferência ao vivo por meio do HangOuts on Air que ficam gravadas no canal do Youtube da Comunidade GEG Brasília para acesso irrestrito e assíncrono do público. Em geral, os líderes decidem o formato do evento. Os líderes são incentivados a organizar eventos que sejam mais adequados para eles e de acordo com as necessidade e interesses dos participantes do grupo [4].



Figura 1: *Professores que participaram do 1º Encontro do GEG Brasília (Fonte: Arquivo pessoal das autoras)*



Figura 2: *Professores que participaram do 2º Encontro do GEG Brasília (Fonte: Arquivo pessoal das autoras)*



Figura 3: Professores que participaram do 3º Encontro do GEG Brasília (Fonte: Arquivo pessoal das autoras)

Em Brasília, o grupo conta com cinco líderes: Carla Arena, professora de inglês; Samara Brito, professora de Física; Clarissa Bezerra, professora de Inglês; Daniela Trovão, professora de Química e Julianna Cauchick, gestora de Tecnologia Educacional. São educadoras voluntárias e envolvidas em projetos de tecnologia educacional e uso de metodologias ativas na aprendizagem em suas respectivas instituições educacionais.

A multidisciplinaridade do grupo de líderes reflete o potencial das ferramentas tecnológicas nos mais variados contextos educacionais. Mesmo atuando em áreas completamente distintas, as educadoras encontram denominadores comuns em suas estratégias de ensino, o que demonstra aos professores participantes dos encontros do GEG Brasília, de forma prática e objetiva, como eles podem adap-

tar as atividades vivenciadas nos encontros em seus próprios ambientes educacionais, ou seja, proporciona uma visão ampliada da aplicação da tecnologia como estratégia de ensino que pode ser, por vezes, mais importante do que o conteúdo em si.

Os eventos do GEG seguem a visão do Google sobre ambientes de trabalho dinâmicos. Portanto, não há pausas durante os eventos, todos estão livres para degustar os lanches oferecidos sem pedir licença para levantar-se. Ficam, desde o início do evento convidados a sentar-se onde desejarem, à mesa, no sofá ou até no chão. A intenção é que os participantes sintam-se à vontade em um ambiente informal de aprendizado para trabalharem e trocarem ideias sobre o que desejarem durante o encontro. Em Brasília, no período de um ano, de dezembro de 2014 a dezembro de 2015, foram

realizados 8 encontros. No infográfico da figura 4 estão apresentados o número de participantes e o

tema de cada evento.

Encontros GEG - Brasília

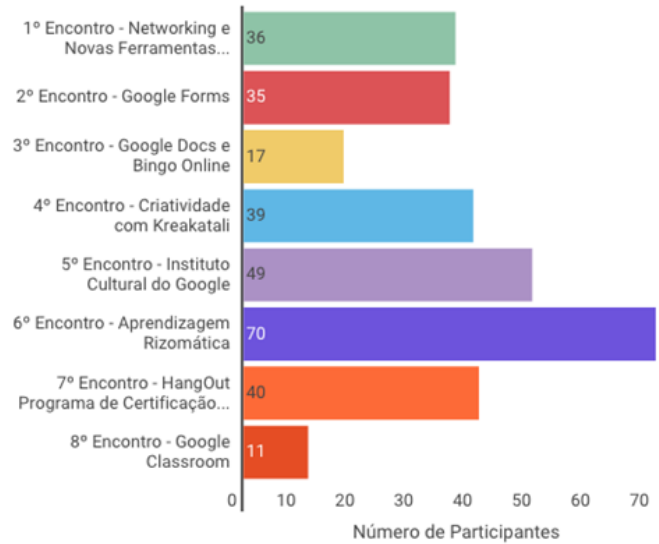


Figura 4: Estatística de Participação no GEG - Brasília (Fonte: Autoras)

Os participantes do evento são professores das mais diversas áreas e níveis de ensino, desde a educação infantil à pós-graduação, pertencendo a instituições públicas e privadas. Também comparecem aos eventos coordenadores de curso, diretores, psicólogos e outros profissionais entusiastas da educação. Dos oito encontros realizados, sete foram presenciais, e um online, o 7º Encontro, transmitido ao vivo utilizando o aplicativo HangOut on Air¹. O encontro com maior número de participantes, o 6º Encontro, foi realizado na FNAC - Parkshopping para tratar, justamente, sobre espaços diferenciados de aprendizagem e processos rizomáticos [5] aplicados à experiência de aprendizagem.

¹O vídeo do 7º Encontro está disponível no link: <https://www.youtube.com/watch?v=bsUpqykYoUQ>



Figura 5: Professores que participaram do 6º Encontro do GEG Brasília (Fonte: Arquivo pessoal das autoras)

Por se tratar de um evento gratuito, em geral, nem todos os participantes inscritos comparecem ao evento. No entanto, os eventos do GEG Brasília têm uma alta taxa de comparecimento, com cerca de 81% dos inscritos presentes nos encontros. Todos os participantes recebem, ao final do evento, um certificado de participação e de capacitação que pode ser acrescentado ao seu currículo.

Apesar de inicialmente a proposta do grupo ser de encontros informais presenciais com os participantes, o GEG Brasília acabou amplificando sua atuação com os educadores que têm participação ativa nos encontros por meio da criação de um grupo no aplicativo WhatsApp, o que torna a comu-

nicação mais fluida, estabelecendo uma conexão contínua do grupo. Cada vez mais, os laços da comunidade de educadores do GEG Brasília se estreitam por meio da utilização de ferramentas digitais que permitem a formação de um ecossistema para o aprendizado social, não apenas com treinamentos presenciais, mas também com todo um sistema de suporte para o corpo docente com a utilização de múltiplas plataformas, web e móvel, para atingi-los de várias formas com um modelo experiencial que pode, inclusive, ser replicado em seus contextos educacionais com os alunos.

III. GEG - Brasília e o Corpo de Bombeiros Militar do DF

Além dos encontros presenciais e virtuais abertos à comunidade local de educadores, o GEG também atua junto às instituições públicas que tenham interesse em capacitar seus educadores, como foi o caso do Corpo de Bombeiros Militar do DF - CBMDF. O público convidado era formado por coordenadores, pedagogos e alguns instrutores dos cursos de capacitação e formação do CBMDF. O treinamento e a troca de experiências com os professores aconteceu em 1 (um) encontro presencial (14 h às 18 h) totalizando 4 h de treinamento.

O programa do curso foi estruturado para colaborar com as instituições de ensino, promovendo soluções administrativas e acadêmicas na implementação de mudanças, com o foco na capacitação do corpo docente para a transformação da sala de aula, por meio das ferramentas Google que permitem a colaboração e a co-construção de conhecimento entre alunos e professores, pois de acordo com Henriques [6]:

"A popularização da Internet e das novas tecnologias de comunicação tem causado impactos profundos sobre diferentes aspectos da nossa vida diária. Seus impactos sobre o ensino, porém, são especialmente relevantes, já que, em um mundo no qual as informações estão na palma da mão de qualquer estudante, os professores se veem desafiados na sua função de detentores do conhecimento. Por outro lado, o desenvolvimento acelerado das ciências cognitivas, do estudo da mente e do cérebro, e dos processos envolvidos no pensamento e na aprendizagem ganhou impulso revolucionário com as novas tecnologias de imagem e de

processamento de dados. O avanço da teoria cognitiva levou, nos últimos anos, a proposta de aplicar esse conhecimento à educação, tanto no desenho de currículos como na forma de ensinar. Combinando pesquisas em psicologia, cognição, educação e neurociências, vem surgindo uma nova teoria do "ensinar" que preconiza uma prática muito diferente da que foi utilizada nos últimos séculos, baseada na exposição da teoria e na resolução de problemas."

Henriques, V. B., Prado, C. P. C., & Vieira, A. P.

Editorial convidado: aprendizagem ativa.

Revista Brasileira de Ensino de Física

Neste contexto, é imprescindível a capacitação de professores para essas novas demandas da sala de aula que tenha como premissa a utilização de ferramentas digitais para que os educadores avancem em suas práticas pedagógicas e se adequem ao contexto educacional moderno em que cada grande parte dos estudantes dispõem de grande capacidade computacional na palma de suas mãos. Durante o programa GEG - CBMDF, importantes objetivos foram alcançados. Podemos destacar a identificação e mobilização de grandes talentos entre os professores, que se tornaram multiplicadores em seus ambientes educacionais. Além disso, o desenvolvimento da proficiência destes educadores na utilização de ferramentas digitais permitiu que eles encontrassem novas soluções para seus desafios profissionais diários de forma autônoma, adequada e eficiente.

Outro ponto importante a se destacar é a construção de uma comunidade educacional de aprendizado contínuo e colaborativo. Os educadores que fizeram todo o projeto tiveram a oportunidade de

compartilhar experiências com educadores voluntários da rede privada de ensino do DF, que utilizam ferramentas tecnológicas na sala de aula, para que todos mantenham-se atualizados e em constante aperfeiçoamento. Por fim, vale ressaltar a divulgação e expansão no uso das ferramentas Google e outras plataformas gratuitas para a colaboração e conexão entre alunos, professores e escola. Neste projeto, foi realizado uma sondagem para saber o grau de letramento digital e as expectativas dos participantes. Os dados coletados estão apresentados a seguir.

II. QUESTIONÁRIO DE SONDAÇÃO

O questionário foi elaborado coletivamente pelas líderes do GEG Brasília utilizando a ferramenta Google Forms e foi aplicado na semana anterior ao início do curso. Tratou-se de um questionário identificado, ou seja, o professor precisava preencher o seu nome e adicionar o seu e-mail. O link para o questionário foi enviado aos participantes do projeto por e-mail via coordenação do CBMDF e onze professores o responderam prontamente.

O questionário aplicado era constituído por 28 questões, porém, por uma limitação de espaço, neste artigo, vamos discutir apenas algumas das questões aplicadas².

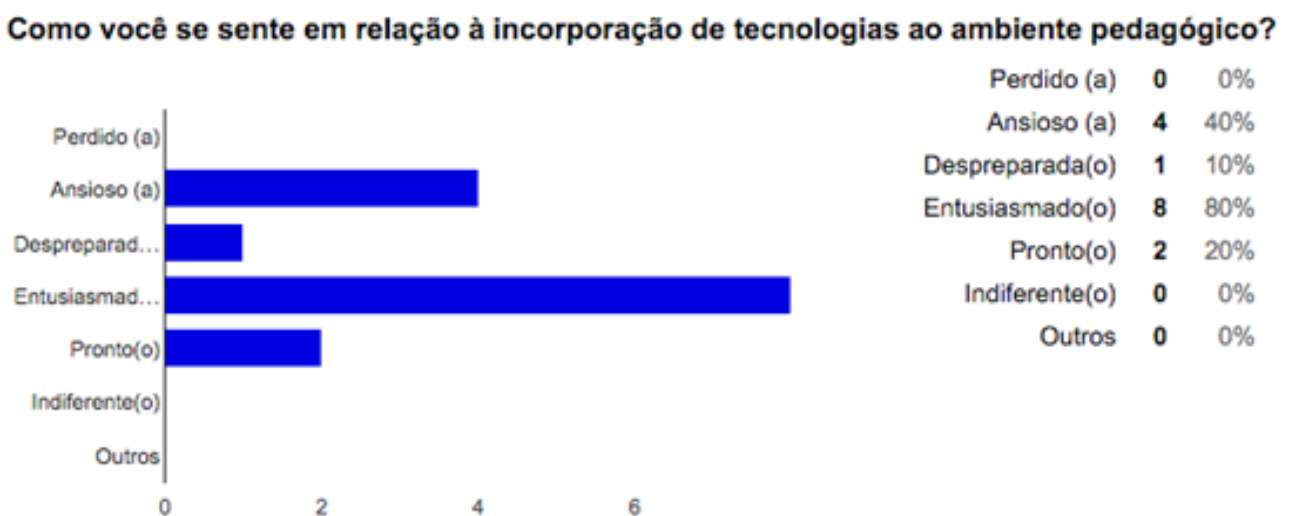


Figura 6: Expectativa dos professores (Fonte: Autoras)

²O questionário está disponível no link: <http://bit.ly/gegcbmdf>

Para responder esta questão o professor poderia marcar, livremente, mais de uma opção de resposta. Ao analisar o sumário de respostas apresentado no gráfico da figura 6 podemos perceber como em geral, 80% dos professores, sentem-se entusiasmados ao mergulhar no mundo tecnológico e suas possibilidades. Entretanto, é fácil, também, verificar como a ansiedade pelo ambiente desconhecido, 40% dos professores se declararam ansiosos, está presente entre as mais votadas expectativas.

Você já participou de algum treinamento de Tecnologia Educacional ou de Letramento Digital?

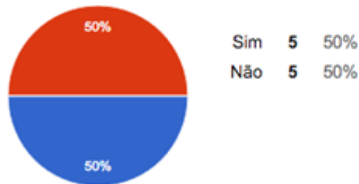


Figura 7: Grau de letramento digital (Fonte: Autoras)

Neste caso foi possível perceber que metade dos professores já tinham tido algum contato com ferramentas tecnológicas para sala de aula. No entanto, após responder as perguntas seguintes, podemos perceber que, mesmo recebendo capacitação, menos da metade do educadores conhecia novas estratégias para sala de aula facilitadas pela tecnologia.

Você possui conta Gmail?



Figura 8: Conta de E-mail (Fonte: Autoras)

Faço uso de e-mail para comunicação com meus colegas de trabalho.

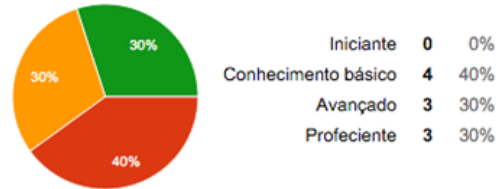


Figura 9: Uso do E-mail como forma de comunicação entre os pares (Fonte: Autoras)

Nos gráficos das figuras 8 e 9 fica evidente que todos os professores, nativos digitais ou não, possuíam conta de e-mail gratuita. Apesar disso, cerca de 40% deles ainda não se consideravam proficientes ao utilizar esta forma de comunicação com seus pares.

Faço uso do Google Apps for Education na gestão acadêmica.

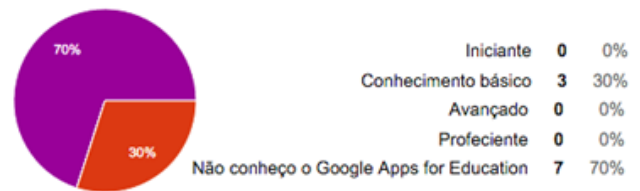


Figura 10: Medida de conhecimento sobre as ferramentas do Google (Fonte: Autoras)

Faço uso do Google apps for education para atividades com meus estudantes.



Figura 11: Medida de conhecimento sobre as ferramentas do Google (Fonte: Autoras)

Apesar de já terem participado de cursos de letramento digital e tecnologias educacionais, nos

Gráficos das figuras 10 e 11, 70% dos educadores, afirmaram não conhecer o pacote de aplicativos para educação disponibilizados gratuitamente pelo Google. Consideramos este resultado extremamente elevado, tendo em vista a facilidade de se encontrar estes recursos numa pesquisa simples em qualquer ferramenta de busca e de ser amplamente divulgado nas redes sociais.

O resultado nos mostra que, apesar de possuírem algum conhecimento em tecnologias educacionais, os educadores, em geral, têm dificuldade de criar uma rede de colaboração que os ajudaria a ter acesso aos mais novos aplicativos educacionais. Este é um dos gaps de formação que pretende ser alterado pelos encontros do GEG, pois durante os eventos os professores são estimulados a compartilhar ideias nas redes sociais e seguirem os colegas.

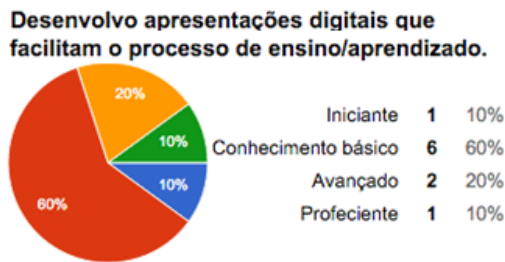


Figura 12: *Apresentações Digitais* (Fonte: Autoras)

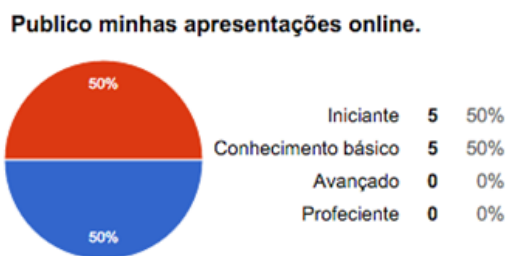


Figura 13: *Publicação de apresentações digitais* (Fonte: Autoras)

Compartilho minhas apresentações com meus estudantes.

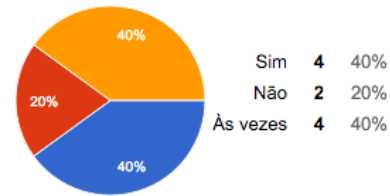


Figura 14: *Compartilhamento das apresentações digitais* (Fonte: Autoras)

No gráfico da figura 12, é possível perceber que em geral os professores, sentem-se à vontade, mesmo que não proficientes, 60% dos educadores, para elaborar apresentações digitais para os seus estudantes. Todavia, no gráfico da figura 13, 100% deles, afirmam ter conhecimento em nível iniciante e básico para publicar suas apresentações na rede. E no gráfico da figura 14 podemos perceber que 20% dos professores afirmam não compartilhar estas apresentações com seus estudantes enquanto outros 40% afirmam, às vezes compartilhar suas apresentações com os estudantes.

Se consideramos a máxima de que o conhecimento pertence à humanidade, este valor é extremamente elevado para professores que já participaram de cursos de capacitação em tecnologias educacionais e que pretendem empoderar e maximizar o aprendizado dos seus estudantes. Mais uma vez este é um dos gaps de formação que pretende ser alterado pelos encontros do GEG, pois durante os eventos os professores são estimulados a compartilhar todo o trabalho desenvolvido. Para demonstrar para os professores a ideia de aprendizado em rede, colaboração e a ideia de compartilhamento, todos os recursos utilizados durante os encontros estão disponíveis no site: bit.ly/sitegegbrasil. Ao final do encontro os professores são estimulados a divulgarem o endereço, a compartilhar as estratégias didáticas e ferramentas utilizadas para os seus pares em suas instituições de origem.

Tenho pegada digital

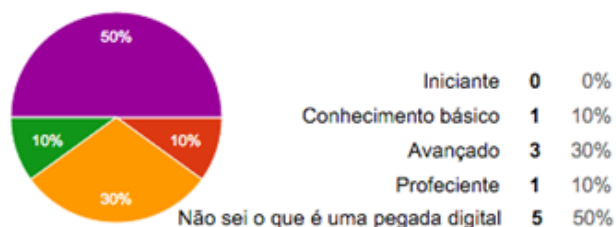


Figura 15: Pegada Digital (Fonte: Autoras)

Mais uma vez, apesar de possuírem e-mail e já terem participado de cursos de capacitação em tecnologias, metade dos professores afirma não saber o que é pegada digital, ou seja, todo o rastro digital que deixamos ao participarmos da rede com nossas conexões, contribuições, e recursos digitais. A pegada digital também pode ser conhecida como sombra digital. Ao acessar o mundo digital, deixamos uma trilha das interações realizadas; incluindo o uso de TV, telefonia móvel, Internet e World Wide Web, web móvel e outros dispositivos e sensores interconectados. Pegadas digitais fornecem dados sobre o que temos realizado na rede; e são valiosas em ajudar na segmentação comportamental, personalização, marketing direcionado, reputação digital e outros serviços de mídia social ou gráficas social [7].

Professores podem construir suas pegadas digitais como uma forma de otimizar seu trabalho e ser reconhecido como colaborador do processo de disseminação do conhecimento e divulgação científica. A pegada digital é um conceito básico que educadores letrados digitalmente devem entender até mesmo para orientarem seus alunos sobre o que é apropriado ou não publicar, comentar e postar na Web.

Conheço novas metodologias de ensino além das tradicionais.

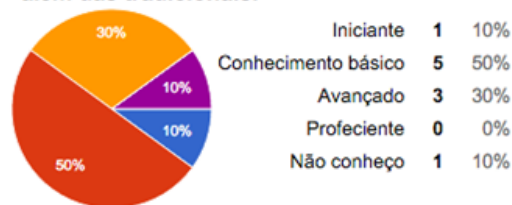


Figura 16: Metodologias de Ensino (Fonte: Autoras)

Faço uso de novas metodologias de ensino além das tradicionais.



Figura 17: Metodologias de Ensino (Fonte: Autoras)

Os dados dos gráficos das figuras 16 e 17 demonstram que os professores não conhecem metodologias diferentes das tradicionais e portanto, não fazem uso dessas novas estratégias na sala de aula. Essa é mais uma área que o GEG Brasília procura preencher durante os seus encontros ao adotar metodologias diferenciadas, durante o evento. Em geral, sem falar diretamente sobre isso, acreditamos que os professores percebam as suas vantagens.

Neste curso, especificadamente, uma das professoras ao final da capacitação ressaltou que havia marcado como resposta: Prefiro dar aulas tradicionais, mas que a partir do que experienciou durante o evento tinha mudado completamente de ideia.

I. Feedback

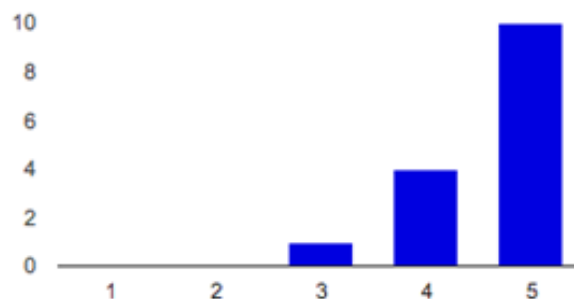
Enfim, para atender às demandas do CBMDF, o GEG Brasília atuou em diversas frentes e de forma híbrida. Dentre elas, destacamos:

- desenvolvimento de cidadania digital por meio da pegada digital;
- utilização adequada do sistema de busca do Google e do Google Acadêmico;
- utilização adequada do Gmail destacando suas principais potencialidades;
- utilização adequada do Google Calendar para a gestão de tempo;
- utilização da computação em nuvem - Google Drive;
- utilização do Google Docs na construção de uma sequência didática colaborativa;

No encontro presencial com duração de quatro horas, o público alcançado foi de 12 (doze) educadores que corresponde a cerca de 3 000 estudantes que passaram a ser beneficiados com o uso de novas estratégias e ferramentas na sala de aula.

Após a realização do curso, os professores foram estimulados a responder um pequeno formulário para receberem o certificado e darem feedback do curso, conforme os dados apresentados abaixo:

Classifique o encontro de hoje.



Não gostei, as informações do curso não foram relevantes para o meu contexto educacional.:	1	0	0%
	2	0	0%
	3	1	6.7%
	4	4	26.7%
Gostei, as informações do curso foram muito relevantes para o meu contexto educacional.:	5	10	66.7%

Figura 18: Avaliação do Curso (Fonte: Autoras)

Você participaria de um outro encontro do GEG?

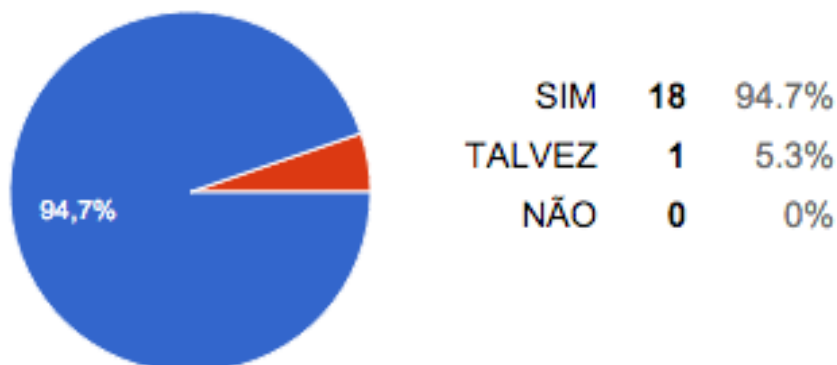


Figura 19: Interesse em participar do GEG (Fonte: Autoras)

Podemos perceber que 93,4% dos participantes concordaram que as informações trabalhadas durante o curso foram muito relevantes para o seus contextos educacionais e ainda que 94,7% concordaram em participar dos eventos promovidos pelo GEG - Brasília, mostrando a eficiência da horizontalidade do processo com a troca de experiências entre educadores tendo grande impacto na percepção docente de que as novas metodologias de ensino associadas às ferramentas digitais podem provocar grandes mudanças na sala de aula³.

³Durante a capacitação foi ressaltado ainda que o CBMDF pode candidatar-se a uma conta para uso do Google Apps for Education - GAFE. O GAFE - Google Apps for Education - é uma plataforma digital gratuita para escolas, com espaço virtual ilimitado, em que o aluno encontrará seu material de estudo, além de ferramentas de interação com professores e colegas. Mais de 45 milhões de alunos utilizam as ferramentas do Google. O Google for Education é utilizado nas mais prestigiadas escolas e faculdades dos Estados Unidos e Europa. Chega ao Brasil com o objetivo de revolucionar o ensino com auxílio da tecnologia. A solução contempla aplicativos de produtividade do Google Apps, conteúdo educacional do Google Play e dispositivos Chromebook e Tablets para alunos e professores que poderão otimizar tempo, fazer gestão acadêmica e potencializar o aprendizado em atividades colaborativas. Instituições de ensino básico, públicas e privadas, têm direito ao uso gratuito do GAFE. Instituições de curso superior públicas também fazem direito ao uso da plataforma que somente é cobrada para instituições de ensino superior privadas. Para obter mais informações sobre o GAFE acesse: <https://www.google.com/edu/products/productivity-tools/>

III. CONCLUSÃO

O Grupo de Educadores Google de Brasília propõe um novo formato de capacitação docente cujo sucesso demonstra a latência por modelos de desenvolvimento profissional emergentes que vão além dos formatos tradicionais e hierarquizados de treinamento.

As demandas atuais de personalização do ensino por meio de metodologias ativas, comprovadamente mais eficientes, e o potencial que as ferramentas tecnológicas têm em promover e facilitar este processo não podem continuar caminhando separadamente. É urgente a capacitação dos professores que já estão atuando na sala de aula e é extremamente importante a inclusão dessa formação nos cursos de licenciatura. As salas de aulas já sofreram algumas transformações tecnológicas com a inclusão de datashow, tablets, computadores, smartphones etc, mas as metodologias de ensino adotadas com estas ferramentas não acompanharam a velocidade dessas mudanças e estão aquém do seu potencial de transformação na educação [8].

Para que os educadores sejam qualificados, de fato, para atender às demandas de uma nova forma de aprender e ensinar, para fazer uso das ferramentas digitais que favorecem a co-construção do conhecimento e para promover a participação ativa e colaborativa de alunos e professores nas atividades pedagógicas é preciso construir um ecossistema de desenvolvimento profissional híbrido e multiplataforma. Este sistema deve proporcionar o letramento digital do corpo docente, o aprendizado social e colaborativo, e o entendimento da importância do ethos do "eterno aprendiz" para que os professores mantenham-se ativos e relevantes no processo pedagógico. As possibilidades proporcionadas pela tecnologia são muitas e evoluem com muita velocidade. É preciso construir e fortalecer uma rede de troca e suporte entre educadores-aprendizes para que possamos consolidar a in-

vação pedagógica potencializada pela aplicação da tecnologia para fins educacionais.

AGRADECIMENTOS

Para que o GEG exista e para que os encontros aconteçam contamos com a participação de diversos colegas, anônimos aos olhos da sociedade, mas brilhantes em suas salas de aula. Aproveitamos este espaço para homenageá-los e agradecer as suas valiosas contribuições para a disseminação de conhecimentos entre os educadores de Brasília.

Além disso, contamos com a ajuda e patrocínio de outros tantos anônimos da nossa cidade, diretores de escola, empresários, laboratoristas, cozinheiros, orientadores educacionais, fotógrafos que, independente da sua área de atuação, colaboram para que os encontros ocorram, seja ao ceder um espaço para nos reunirmos, seja patrocinando nossos deliciosos lanches e guloseimas, seja comparecendo e ajudando na organização dos encontros.

Por fim, agradecemos, sinceramente, a contribuição das colegas Daniela Trovão e Julianna Cauchick na parceria para que os trabalhos do GEG Brasília fossem realizados durante o ano e pela valerosa revisão deste artigo.

REFERÊNCIAS

- [1] Araujo, I. S., & Mazur, E. Instrução pelos colegas e ensino sob medida: uma proposta para o engajamento dos alunos no processo de ensino-aprendizagem de Física. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 2013. [On-line]
https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/2175-7941.2013v30n2p362
- [2] Freeman, S., Eddy, S. L., McDonough, M., Smith, M. K., Okoroafor, N., Jordt, H., & Wenderoth, M. P. Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 111(23), 8410–5 (2014). [On-line]
http://doi.org/10.1073/pnas.1319030111
- [3] Hietbrink, E. Intro Generation Z. In TEDxYouth@Curaçao, 2012.
- [4] Google. O que são GEGs? (2015) [On-line]
https://www.google.com/intl/pt-BR/landing/geg/about/
- [5] Oliveira, V., Veit, E. A., & Araujo, I. S. Relato de experiência com os métodos Ensino sob Medida (Just-in-Time Teaching) e Instrução pelos Colegas (Peer Instruction) para o Ensino de Tópicos de Eletromagnetismo no nível médio. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 2015. [On-line]
https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/2175-7941.2015v32n1p180
- [6] Henriques, V. B., Prado, C. P. C., & Vieira, A. P. Editorial convidado: aprendizagem ativa. Revista Brasileira de Ensino de Física, 36(4), 01–02 (2014). [On-line]
http://doi.org/10.1590/S1806-11172014000400001
- [7] Eke, H. N. Creating a digital footprint as a means of optimizing the personal branding of librarians in the digital society. Webology. (2012). [On-line]
http://www.webology.org/2012/v9n2/a100.html
- [8] Mazur, E. El modelo antiguo de profesor no funciona; el alumno explica mejor. (2012) [On-line]
http://nanotice.blogspot.com.br/2012/02/el-modelo-antigo-de-profesor-no.html

Entrevista com a Doutora Heloísa Bordallo, pesquisadora do Instituto Niels Bohr, Copenhagen

LILAH FIALHO DE LIMA SIMÕES*

Universidade de Brasília

Resumo

A pesquisadora Doutora Heloísa Bordallo se graduou em Física pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, em 1988, defendeu mestrado em 1991 pela mesma Universidade e defendeu a tese de doutorado em 1995 na Universidade de Montpellier II, França. Ela trabalhou no Los Alamos National Laboratory e Argonne National Laboratory, ambos no EUA, no Helmholtz-Zentrum Berlin, na Alemanha e no Instituto Laue-Langevin, na França. Atualmente é Professora Associada na Universidade de Copenhagen, no Instituto Niels Bohr, participando de um grupo que desenvolve pesquisa focada em espalhamento inelástico de nêutrons.

Sua pesquisa tem por tema conhecer os efeitos das mudanças estruturais nas propriedades físicas de um material, indo da água confinada em cimento até a mudança das propriedades de drogas usadas no tratamento de câncer de mama.

1- Physicae Organum:

Como e quando surgiu seu interesse pela Física. De onde veio essa vontade de investigar o comportamento do Universo?

Heloísa:

Eu estudei em um colégio aonde as turmas de segundo grau eram muito pequenas. Para você ter uma ideia, no terceiro ano éramos 15 alunos, nossos professores eram super legais, mas o nosso professor de física era maravilhoso! Era como um

de nós, um amigo. Ele respirava física e fazia a gente pensar que a matéria era a mais fácil de todas. Eu sempre gostei de matemática e também gosto muito de história. E também dançava ballet clássico. Outra paixão. Aí pensei... Bem, para combinar isso tudo, só tenho uma opção: fazer bacharelado em física e depois um doutorado no exterior. Tenho um primo que estava fazendo isso. Assim era só seguir os passos dele. Na época de me inscrever no vestibular ainda fiquei em dúvida se devia escolher física ou geologia. Escolhi física e não me arrependo. Pensei que poderia continuar a dança... Mas não deu.

*Estudante de pós graduação da UnB

2- Physicae Organum:

Como foi sua trajetória na Física (graduação, mestrado, doutorado) até esse seu ponto como pesquisadora? Levando em conta que você é uma das poucas mulheres nesse meio de pesquisa, isso fez alguma diferença no caminho?

Heloísa:

Estudei Física no Fundão. O primeiro ano foi um choque. Saí do meu ninho e entrei no mundo. Éramos 100 alunos!!! E, para completar, teve uma greve de 9 meses em todas as federais. Pensei em deixar a física e ir fazer engenharia em uma universidade menor. Meus pais conversaram comigo na época e perguntaram se eu já ia desistir... Eles tinham razão. Se eu tinha um sonho eu deveria segui-lo, se não, não ia ser feliz. Graças a eles eu segui em frente. Me graduei com 6 meses de atraso em relação a alguns amigos... Bem, dos 100, graduamos 5.

Neste meio tempo eu também criei novas perspectivas para mim. Decidi que gostaria de ir trabalhar em Los Alamos, nos Estados Unidos, e que faria meu doutorado ou na França (fiz 7 anos de francês ai no Brasil, sou graduada em literatura francesa pela Aliança Francesa) ou na Alemanha. Também decidi que gostaria de fazer biofísica, na época uma parte nova da física e ainda engatinhando no Rio. Comecei meu mestrado na PUC do Rio, mas depois de 6 meses decidi que não era o que eu queria e voltei para o Fundão, onde terminei meu mestrado. Com o apoio de vários professores, de amigos e dos meus pais, apliquei para uma bolsa no exterior junto à CAPES/CNPq e também postulei um doutorado no Instituto de Física de São Carlos. Recebi a bolsa para ir estudar no exterior e também fui aceita em São Carlos.

Aí veio o dilema de novo. O que fazer? Tinha sido aceita para ir estudar na Universidade de Mont-

pellier, no sul da França, na Universidade Técnica de Berlim e em São Carlos. Minha mãe decidiu: "Quero conhecer a França!". Assim lá fui eu. Ela nunca veio me visitar... mas eu tive uma época maravilhosa na minha vida.

Terminei a tese de doutorado em espalhamento Raman, e recebi a oferta para ir fazer um pós-doutorado em Los Alamos, no grupo de espalhamento de nêutrons! Bem... Quase caí para trás, pois este era meu sonho! Também foi, de certa forma, um choque... Realizar quase todos os meus sonhos antes do 30 não foi fácil. Me senti meio sem direção... Mas lá fui eu novamente.

Em Los Alamos conheci meu marido, também físico, e aprendi enormemente enquanto vivi nos EUA. Depois de Los Alamos trabalhei em Argonne, outro laboratório nacional. Passei cinco anos nos EUA, e aí comecei a me sentir meio sufocada. Aprendi muito, mas sentia minha vida vazia. Nos mudamos então para Berlim, onde trabalhamos por dez anos.

Em Berlim, depois do Rio minha cidade preferida, também trabalhei no grupo de espalhamento de nêutrons e foi onde finalmente comecei a fazer biofísica. Demorou, mas novamente atingi outra meta. Em 2011, nos mudamos para Copenhague. Eu agora sou Professora Associada na Universidade de Copenhague no grupo de raios-X e nêutrons e o Dimitri, meu esposo, trabalha em Lund, na Suécia, no projeto da fonte europeia de espalhamento de nêutrons (ESS).

Tenho um grupo de 8 estudantes e pós-docs e mais uma técnica. Também estou envolvida no projeto de um dos instrumentos para a ESS. Sinto que minha carreira deu um pulo enorme em 2011. Às vezes penso: "Gente, ser responsável por estes alunos todos é loucura. E se não der certo o nosso projeto? O que eu faço?". Mas ao mesmo tempo a pesquisa é incerta e por isso é que ela é interessante. Mas tenho um grupo muito bom e produtivo, nosso lema é sempre: *NO result is ALSO a result!*.

Bem, quanto a ser mulher na pesquisa... Sim, existe um preconceito... Mas eu sou super desligada. Assim, se alguém me trata diferente por que sou mulher, acho que não noto. Também acredito que preconceito é como ação e reação. Por isso, na maioria das vezes, simplesmente ignoro qualquer comentário e, se algo é óbvio, abro o jogo, pois quem cala consente, não é?

3- Physicae Organum:

Trabalhar fora do país é um sonho de muitos estudantes de Física. Qual você diria que é a diferença entre trabalhar fora e trabalhar aqui, no Brasil?

Heloísa:

Acho que a facilidade na compra de material de pesquisa e preço dos instrumentos. As leis de importação no Brasil são muito complicadas e os impostos altíssimos. Outro ponto é a distância, que pode ser um obstáculo. A Europa é muito pequena. Por exemplo, voar entre Copenhague e Londres leva menos tempo do que ir do Rio até Brasília... Também acho importante estabelecer colaborações entre pesquisadores. Infelizmente no Brasil ainda engatinhamos nesta direção. De toda forma, mesmo se um estudante muda de laboratórios no próprio país, a experiência já pode ser enriquecedora. A gente sempre aprende quando os horizontes se alargam.

4- Physicae Organum:

Quais são suas maiores dificuldades na sua área de pesquisa?

Heloísa:

A pesquisa com nêutrons é de certa forma muito conservadora. Assim, tentar experimentos novos pode ser difícil. As experiências, para serem realizadas, têm que passar por um processo de seleção *proposal submission* e nem sempre os avaliadores acreditam no que propomos. Outro obstáculo é análise de dados: precisamos de programas melhores.

5- Physicae Organum:

Que dica você diria para os estudantes de Física que querem seguir carreira de pesquisador? Como se manter sempre entre os melhores da sua área internacionalmente?

Heloísa:

Tenho a honra de dividir a sala com o Jens Als Nilsen, o gênio do magnetismo, e aprendi com ele uma das frases mais interessantes na ciência: 'Em pesquisa fazemos experimentos. Não realizamos medidas'. Assim, para sermos pesquisadores, temos que lembrar que nem todo dia viveremos num mar de rosas. Nem tudo é fácil e nem todo mundo acredita que somos gênios. Perseverança, portanto, é muito importante, assim como um espírito curioso. Se manter no topo não é tão difícil. O mais difícil é chegar lá! Para alcançar nossos objetivos precisamos acreditar no que fazemos, precisamos traçar metas e adaptar os caminhos. De toda forma o mais importante é ter sempre em mente que nossos colegas, alunos e todos os que nos rodeiam são importantes na jornada. Assim: *Never burn a bridge!*

X Semana da Física

BÁRBARA C. C. PEREIRA*

Universidade de Brasília

Em outubro do ano de 2015 foi realizada entre os dias 27 a 29 a X Semana de Física da Universidade de Brasília dentro da programação da Semana de Extensão da UnB. Diferente das edições anteriores, esta foi organizada pelo professor Paulo Roberto Menezes Lima Junior que no início de 2015 passou a compor o quadro de docentes do Instituto de Física.

A semana foi iniciada com uma mesa de ronda em comemoração aos 50 anos de fundação do Instituto de Física da UnB e os 100 anos da teoria da relatividade. A mesa foi presidida pelo Diretor do IF Felipe Beaklini e contou com a presença dos Professores José David M. Vianna, Paulo César de Moraes e Marcos Maia.

Em seguida o evento contou com a conferência do Doutor Olival Freire Junior (UFBA) que apresentou um histórico sobre as mudanças na pesquisa em fundamentos da mecânica quântica, entre os anos de 1950 a 1990. Ainda no primeiro dia de evento o professor Rafael Peretti Pezzi (UFRGS), falou sobre as novas possibilidades de uso e reuso do conhecimento.

No período noturno, a atenção esteve voltada para o curso de licenciatura onde a professora Cibele Celestino (USP) falou como inovar no ensino de física e as dificuldades para conseguir fazer algo diferente dentro de sala de aula.

A noite contou também com um minicurso ministrado por Ana Bárbara da Silva Nascimento e Olavo Leopoldino da Silva Filho (IF UNB) que abordaram as dificuldades de aprendizagem e desenvolvimento, através de uma perspectiva histórica e filosófica, apresentando soluções para superação dentro de sala de aula.

A retomada dos trabalhos do segundo dia de evento se iniciou com minicursos os quais tiveram dois dias de duração, e que chamaram a atenção tanto dos estudantes de graduação quanto os de pós-graduação. Em um dos minicursos o professor André Koch Torres Assis apresentou uma introdução sobre a mecânica relacional, que trata de uma nova abordagem da física. No outro minicurso o professor Olavo Leopoldino falou sobre as diferentes interpretações da mecânica quântica.

Um das convidadas mais esperadas foi a professora Thaísa Storchi Bergmann (UFRGS) que ganhou o prêmio L'Oreal/UNESCO For Women in Science de 2015. Ela apresentou um pouco da sua pesquisa com uma abordagem sobre Buracos Negros Supermassivos e seu papel na evolução do Universo.

Ainda no segundo dia pela tarde, o evento contou com a oficina de experimentos 'Mulheres na Física', ministrada pela professora Adriana Ibaldo e suas estudantes de iniciação científica e uma sessão de apresentação de pôsteres. Por fim houve uma conversa com a professora Graciella Watanabe que falou

*Estudante de Graduação Instituto de Física

um pouco sobre a divulgação científica na contemporaneidade: A experiência do Large Hadron Collider (LHC).

O evento foi encerrado no terceiro dia com uma discussão sobre a discriminação dentro do curso de física, a qual foi levantada pela professora Katemari Rosa (UFCG) em sua apresentação: O ensino de física numa perspectiva antirracista.



Expediente Physicae Organum – Revista de Estudantes de Física da UnB
Volume2. Número 1

**Publicação Semestral do Corpo Discente
do Departamento de Física da UnB
Brasília, Março de 2016.**

Universidade de Brasília
Reitor: Ivan Marques de Toledo Camargo
Vice-Reitora: Sônia Nair Bão

Diretoria do Instituto de Física
José Felipe Beaklini Filho
José Francisco da Rocha Neto

Conselho Editorial
Dr. Olavo Leopoldino da Silva Filho

Comissão Editorial

Lilah Fialho
Lo Rhuama Florscuk
Bárbara Cavalcante
Daniela Motta
Patrícia Valero
Paulo Ferrari

Comitê Científico

Dr. Ademir Santana
Dra. Adriana Pereira Ibaldo
Dr. Agnelo Marconi Maniero
Dr. Antonio Carlos Pedroza
Dr. Antony Marco Mota Polito
Dr. Bernardo Mello
Dr. Bruno Vieira Ribeiro
Dr. Clovis Maia
Dr. Ivan Soares Ferreira
Dr. José David Mangueira Vianna
Dr. Junio Márcio Rosa Cruz
Dra. Leticia Nunes Coelho
Dr. Marcus Bastos Lacerda Santos
Dr. Olavo Leopoldino da Silva Filho
Dr. Paulo Lima Júnior
Dra. Reva Garg
Dra. Roseline Strieder
Dra. Vanessa Carvalho

Contatos

<http://periodicos.unb.br/index.php/physicae>
physicaeorganum@gmail.com