



PHYSICÆ ORGANUM

2025

Editores chefes

Olavo Leopoldino da Silva Filho
Marcello Ferreira

Editor gerente

Leonardo Luiz e Castro

Editores associados

Antonio Marques dos Santos
Fabio Luis de Oliveira Paula

Coordenadora editorial

Letícia Maria Rodrigues Wingler

Editores juniores

Ádria Maximino Ferreira da Silva

Amanda Ribeiro Caiana

Carine Zary Durães Froes

Eduardo Barros Alberti Rabelo

Letícia Maria Rodrigues Wingler

Maria Eduarda Barbosa de Melo

Maria Eduarda Barboza Gomes de Oliveira

VOL. 10 — N.º 1

Apresentação

Apresentamos mais um número da *Physicae Organum*, com artigos sobre o teleparalelismo e as teorias $f(T)$, relacionados à teoria da relatividade geral, o espectro do átomo de hidrogênio relativístico e modelos de estrutura eletrônica de átomos. Apresentamos também o discurso de formatura da primeira turma de licenciatura em física à distância da UnB. A partir desta edição, os artigos serão publicados em fluxo contínuo até o fechamento de cada número, com previsão de duas ou três edições por ano.

Corpo Editorial

Editores chefes

Olavo Leopoldino da Silva Filho

Marcello Ferreira

Editor gerente

Leonardo Luiz e Castro

Editores associados

Antonio Marques dos Santos

Fabio Luis de Oliveira Paula

Coordenadora editorial

Letícia Maria Rodrigues Wingler

Editores juniores

(Editores de layout dos artigos)

Ádria Maximino Ferreira da Silva

Amanda Ribeiro Caiana

Carine Zary Durães Froes

Eduardo Barros Alberti Rabelo

Maria Eduarda Barbosa de Melo

Maria Eduarda Barboza Gomes de Oliveira

Editor de capa e composição final

Leonardo Luiz e Castro

Agradecimento

Agradecemos à Biblioteca Central da Universidade de Brasília (BCE/UnB) pelo apoio na configuração e no registro do DOI da revista, em especial à bibliotecária Luísa Chaves Café.

Sumário

1	DISCURSO DE FORMATURA DA PRIMEIRA TURMA DE LICENCIATURA EM FÍSICA A DISTÂNCIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA	1
2	BASES MATEMÁTICAS E CONCEITUAIS PARA O TELEPARALELISMO E PARA AS TEORIAS $f(T)$	6
3	A TRANSFORMAÇÃO DE KUSTAANHEIMO-STIEFEL E O ESPECTRO DE ENERGIA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO RELATIVÍSTICO NÃO-COMUTATIVO	34
4	OBTENÇÃO DA RELAÇÃO FUNCIONAL ENTRE POTENCIAIS EXATOS E POTENCIAIS OBTIDOS DA APROXIMAÇÃO LOCAL NA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE EM CERTOS SISTEMAS FINITOS	45



DISCURSO DE FORMATURA DA PRIMEIRA TURMA DE LICENCIATURA EM FÍSICA A DISTÂNCIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

GRADUATION SPEECH OF THE FIRST CLASS OF THE DISTANCE
LEARNING PHYSICS DEGREE FROM THE UNIVERSITY OF BRASILIA

IRANILDO LIMA DE OLIVEIRA

Universidade de Brasília, Instituto de Física.

Resumo

O discurso de formatura proferido pela primeira turma de Ensino a Distância (EaD) do curso de Física da Universidade de Brasília (UnB) marca um momento histórico na democratização do ensino de ciências. Este artigo analisa o discurso no contexto da proposta pedagógica do curso e do impacto social da EaD em Física. O discurso celebra as conquistas da turma, ao mesmo tempo em que destaca os desafios e oportunidades apresentados por essa modalidade. É um poderoso lembrete de que a EaD pode ser uma força para a inovação educacional, capaz de levar formação de alta qualidade a qualquer pessoa que a busque, independentemente de limitações geográficas ou temporais.

Palavras-chave: Ensino a Distância (EaD); Física; Formatura; Inovação Educacional; Universidade de Brasília (UnB).

Abstract

The graduation speech delivered by the first Distance Learning (DL) class of the Physics course at the University of Brasília (UnB) marks a historic moment in the democratization of science education. This article analyzes the speech in the context of the pedagogical proposal of the course and the social impact of DL in Physics. The speech celebrates the achievements of the class, while also highlighting the challenges and opportunities presented by this modality. It is a powerful reminder that DL can be a force for educational innovation, capable of bringing high quality training to anyone who seeks it, regardless of geographical or time constraints.

Keywords: Distance Learning (DL); Physics; Graduation; Educational Innovation; University of Brasília (UnB).

I. INTRODUÇÃO

Em 2024, a Universidade de Brasília (UnB), em parceria com o sistema Universidade Aberta do Brasil (UAB), celebrou a formatura da primeira turma do curso de Licenciatura em Física na modalidade a distância (EaD). Este evento representa um marco na democratização do ensino de ciências no país, demonstrando o potencial da EaD em levar educação de qualidade a regiões distantes dos grandes centros urbanos. O Instituto de Física da UnB, desde sua criação, dedica-se à formação de professores de Física, tanto na modalidade presencial quanto a distância, consolidando seu compromisso com a formação de profissionais qualificados e com o desenvolvimento da região.

O curso de Licenciatura em Física a distância da UnB, criado em 2017, visa atender à crescente demanda por professores de Física em todo o país. Utilizando uma metodologia inovadora que combina rigor acadêmico com a flexibilidade da EaD, o programa oferece aos estudantes uma formação completa e de qualidade. Através de videoaulas, fóruns online, atividades interativas e encontros presenciais nos polos de apoio, os estudantes são preparados para os desafios da docência no século XXI.

A formatura da primeira turma de EaD em Física representa um passo significativo na democratização do ensino e na formação de professores altamente capacitados. O discurso de formatura, analisado neste artigo, destaca a importância do pioneirismo, da resiliência e da persistência dos estudantes, evidenciando o poder transformador da educação e o compromisso da UnB com a construção de um futuro mais justo e igualitário.

II. DISCURSO

Uma Nova Era na Educação em Física na UnB.

Prezados mestres, familiares, amigos e, acima de tudo, colegas formandos.

É com o coração transbordando de gratidão e alegria que nos reunimos aqui hoje, neste momento singular, para celebrar o ápice de uma jornada desafiadora e transformadora. Cada um de vocês, presentes nesta celebração, representa uma peça fundamental na construção da nossa trajetória. Obrigado por serem os pilares que nos sustentaram, as estrelas que nos guiaram e a energia que nos impulsionou a alcançar este sonho.

Este 09 de outubro de 2024 ecoará na história do Instituto de Física da UnB como um marco: a primeira turma do curso de Licenciatura em Física a distância alça voo, juntando-se aos formandos do Bacharelado e da Licenciatura presencial. É a consagração de um projeto audacioso, que rompe barreiras e democratiza o acesso ao conhecimento, provando que a distância jamais foi sinônimo de separação, mas sim de união em torno de um objetivo comum: a busca pelo saber.

O Instituto de Física, em união com a UAB, cumpre seu papel fundamental na sociedade: formar não apenas físicos, mas agentes de transformação. Indivíduos imbuídos de conhecimento científico, pensamento crítico e responsabilidade social, prontos para desbravar os mistérios do universo e contribuir para a construção de um futuro mais promissor.

A modalidade a distância, outrora vista com desconfiança, emerge como um farol

de esperança, iluminando caminhos e abrindo portas para aqueles que ousam sonhar. Superamos as barreiras geográficas, conciliamos os desafios da vida profissional e acadêmica e provamos que a sede por conhecimento é capaz de vencer qualquer obstáculo.

Relembramos 2017, quando a primeira semente foi lançada, mas o destino nos reservava outros planos. Como nos ensinou o mestre Henfil:

Se não houver frutos, valeu a beleza das flores; se não houver flores, valeu a sombra das folhas; se não houver folhas, valeu a intenção da semente.
(HENFIL, 2013)

E a nossa semente, regada pela persistência e pela esperança, germinou em 2019, dando origem à turma 1/2020. Adentramos a universidade em meio a um turbilhão. A pandemia, com sua força implacável, testou cada fibra da nossa resiliência, nos levando aos limites da adaptabilidade e nos mostrando o poder inabalável da união.

Mas, como o navegador que enfrenta a tempestade e emerge mais forte, nós também saímos dessa experiência transformados. As palavras de Shakespeare ecoam em nossos corações com um novo significado:

Aprendi que certas pessoas vão embora da nossa vida de qualquer maneira, mesmo que desejemos retê-las para sempre. Aprendi que são os pequenos acontecimentos diários que tornam a vida espetacular. Aprendi que as oportunidades nunca são perdidas; alguém vai aproveitar as que você perdeu. Aprende que o tempo não é algo que possa voltar e que não importa em quantos pedaços seu coração foi partido, o mundo não pára para que você o conserte.
(SHAKESPEARE, 2021)

Cada aula online, cada trabalho em grupo, cada desafio superado, tornou-se uma conquista épica em nossa odisseia. A conquista da graduação é uma vitória que se constrói a muitas mãos. Hoje, celebramos não apenas a nossa conquista da linha de chegada, mas também a jornada compartilhada com todos que trilharam conosco esse caminho, mesmo aqueles que ainda não concluíram o curso ou que, por diferentes razões, tiveram que se afastar. Cada um, à sua maneira, contribuiu para a nossa formação, compartilhando momentos de estudo, desafios, alegrias e aprendizados.

Lembramos com carinho dos colegas que seguem em busca desse objetivo, e também daqueles que nos mostraram que a trajetória nem sempre é linear, e que a persistência e as condições de seguir em frente são fundamentais. Que essa conquista seja um incentivo para que todos alcancem seus sonhos, e que a lembrança da nossa caminhada juntos nos inspire a trilhar novos caminhos com a mesma coragem e determinação.

Enfrentamos aqueles que questionavam a qualidade da nossa formação. Com orgulho, ostentamos hoje a nota máxima na avaliação do MEC, uma prova incontestável da excelência do nosso curso. Somos a prova viva de que a modalidade a distância é capaz de formar profissionais brilhantes, comprometidos com a educação e com a construção de um futuro

melhor.

Inspirados pela tenacidade de Darcy Ribeiro, que transformou seus fracassos em vitórias, nos mantivemos firmes em nossa jornada. Sua luta pela educação e por um Brasil mais justo repercutiu em cada um de nós. "Os fracassos são minhas vitórias", ecoa a voz do mestre, lembrando-nos que as adversidades são o combustível que alimenta a chama da persistência. E hoje, aqui estamos, celebrando a vitória daqueles que ousaram desafiar os limites, que persistiram diante das dificuldades e que acreditaram no poder transformador da educação. Somos a materialização do sonho de Darcy Ribeiro, uma legião de educadores prontos para inspirar e conduzir as futuras gerações.

E como não agradecer àqueles que, como estrelas guiando nossos passos, tornaram essa conquista possível? Aos mestres, que com sabedoria e paixão, acenderam em nós a chama da curiosidade, revelando os mistérios do universo e inspirando-nos a desvendar seus enigmas.

Aos funcionários terceirizados e aos técnicos administrativos, que com dedicação e eficiência, nos acolheram e facilitaram nossa jornada, tornando-a mais leve e prazerosa. Aos tutores, que com paciência e sabedoria, nos guiaram pelos caminhos do conhecimento no universo virtual, abrindo portas para novas descobertas. À secretaria do Instituto de Física, nosso eterno agradecimento pelo apoio, carinho e pela inesgotável paciência, especialmente nas últimas semanas, que nos impulsionaram a alcançar a linha de chegada.

À Direção do Centro de Educação a Distância e Tecnologias Educacionais (CEAD/UnB) e à Coordenação Geral da UAB/UnB, por essa parceria visionária que investe na formação de profissionais de excelência, construindo um futuro promissor para a educação e para o país. À UnB, que, de braços abertos, nos acolheu em seu Instituto de Física e Faculdade de Educação, proporcionando-nos uma formação de excelência e a oportunidade de trilhar um caminho de sucesso.

Ao MEC, Capes e ao Governo Federal, por acreditarem no poder da educação e por democratizar o acesso ao ensino superior, abrindo portas para um futuro mais justo e igualitário. E como disse Einstein certa vez, "Luz... é a sombra de Deus." Que a luz do conhecimento continue a nos guiar, iluminando nossos caminhos e nos inspirando a construir um futuro mais brilhante.

Parabéns, formandos! O universo nos aguarda!

Obrigado Deus.....

Formandos:

Ana Paula Lima da Silva

André Luís Pereira Souza.

Carlos Roberto Almeida França.

Deusa Maria Moreira David.

Gilberto Barbosa Lacerda Filho.

Iranildo Lima de Oliveira.

Jailson de Espíndola Bezerra.

Maurício Nunes.

Nelson Rafael Cima.

Raimundo Nonato Veríssimo da Fonseca.
Thaynara Gomes de Moura.

III. CONCLUSÃO

O discurso de formatura da primeira turma de Ensino a Distância (EaD) do curso de Física da Universidade de Brasília (UnB) é um testemunho do poder transformador da educação. Ele destaca a resiliência do espírito humano diante das adversidades e celebra a democratização do conhecimento por meio de abordagens inovadoras de ensino e aprendizagem. O sucesso dessa turma ressalta o potencial da EaD para fornecer educação de alta qualidade, quebrando barreiras e criando oportunidades para estudantes que, de outra forma, não teriam acesso ao ensino superior. Ao embarcarem em sua jornada profissional, esses graduados carregam consigo o orgulho de serem pioneiros e a responsabilidade de contribuir para uma sociedade mais inclusiva e justa. .

REFERÊNCIAS

HENFIL. Se não houver frutos, valeu a beleza das flores. Poética e Cotidiana, 2013. Disponível em: <<https://poeticaecotidiana.blogspot.com/2013/01/se-nao-houver-frutos-valeu-beleza-das.html>>. Acesso em: 6/Out/2024.

SHAKESPEARE, William. Frases de William Shakespeare: aprendi. Pensador, 2021. Disponível em: <<https://www.pensador.com/frases-de-william-shakespeare-aprendi/>>. Acesso em: 5/Out/2024.

RIBEIRO, Darcy. O povo brasileiro: a formação e o sentido do Brasil. São Paulo: Companhia das Letras, 1995.

EINSTEIN, Albert. Como vejo o mundo. Tradução de H. P. de Andrade. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 2015.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA. Instituto de Física. Projeto Pedagógico do Curso de Física - Licenciatura EaD. Brasília, 2022. Disponível em: <https://if.unb.br/images/PPC_EaD_2022_v2024.pdf>. Acesso em: 10 Dez 2024.



BASES MATEMÁTICAS E CONCEITUAIS PARA O TELEPARALELISMO E PARA AS TEORIAS $f(T)$

MATHEMATICAL AND CONCEPTUAL BASIS FOR TELEPARALLELISM AND $f(T)$ THEORIES

LUCCA LOPES DIAS SANTOS ^{*1}, VÍTOR STORTI MESQUITA ^{†1}, VANESSA
CARVALHO DE ANDRADE ^{‡1}

¹Instituto de Física - Universidade de Brasília

Resumo

Considerando o vigente interesse em teorias alternativas à Relatividade Geral (RG), abordamos alguns assuntos que julgamos úteis para a compreensão do Teleparallelismo e das teorias $f(T)$. São expostos, assim, os fundamentos de certos tópicos que frequentemente se fazem necessários durante o processo de estudo de tais formalismos e que podem, desse modo, servir como base para a posterior construção de um ferramental teórico mais sofisticado - realizando-se, ao longo desse processo, a transposição desses assuntos para que estes se apresentem de maneira mais palatável aos estudantes a nível de graduação. Apresentamos uma retrospectiva histórica a respeito das pesquisas na área da Gravitação, bem como uma discussão sobre o que é o Teleparallelismo. São tratados, então, conceitos relativos aos seguintes temas: Teoria de Grupos; Teorias de Calibre; Topologia, Geometria Diferencial e Fibrados; definição de tetradas e sua relação com os espaços externo e interno.

Palavras-chave: Teorias Alternativas. Teleparallelismo. Teorias $f(T)$. Teorias de Calibre. Teoria de Grupos. Fibrados.

Abstract

Considering the current interest in alternative theories of General Relativity (GR), we approach some subjects we find useful for the understanding of the Teleparallelism and of the $f(T)$ theories. We thus show the fundamentals of some topics usually necessary during the study of such formalisms and which can, thereby, act as the basis for the further development of a more sophisticated theoretical background - process through which we transpose these subjects so they can be presented in a more understandable way to undergraduate students. We present a historical retrospective concerning the Gravitation research, as well as a discussion about what

*lucalopes37@gmail.com

†vsmesquita13@gmail.com

‡vcandrade@unb.br

the Teleparallelism is. We then show concepts about the following subjects: Group Theory; Gauge Theories; Topology, Differential Geometry and Fiber Bundles; the definition of tetrads and its relation with the internal and external spaces.

Keywords: *Alternative Theories. Teleparallelism. $f(T)$ Theories. Gauge Theories. Group Theory. Fiber Bundles.*

I. INTRODUÇÃO

A Relatividade Geral (RG), apesar de seu êxito em realizar uma série de previsões teóricas em certos domínios de validade, como o de fenômenos no âmbito de nosso sistema solar, ainda deixa, aparentemente, algumas questões em aberto nos campos da Gravitação e da Cosmologia: há a necessidade de assumir a existência de matéria escura e energia escura, surgem singularidades na teoria quando atuam campos de extrema intensidade, e continua a busca por uma teoria da gravitação quântica consistente, por exemplo (CAPOZZIELLO; LAMBIASE, 2014). Como uma das possíveis formas de lidar com tais questões surge, então, uma miríade de teorias alternativas - ou estendidas - da Gravitação, as quais tentam reformular a teoria da RG proposta por Einstein (CAPOZZIELLO; LAURENTIS, 2015).

Dentre tais teorias alternativas encontram-se o Teleparallelismo Relativístico e as chamadas teorias $f(T)$, responsáveis por reformular a RG como uma teoria de calibre (ou gauge) (ALDROVANDI; PEREIRA, 2012) (CAI et al., 2016). Há, entretanto, diversas outras teorias que tentam, cada uma a sua forma, estender os resultados já obtidos pela RG, visando sua generalização. As chamadas teorias $f(R)$, por exemplo, operam generalizando o argumento da lagrangeana de Einstein-Hilbert, a partir da qual são obtidas as equações de campo de Einstein, para uma função não linear do escalar de curvatura, R , na tentativa de encontrar equações de campo mais gerais (de ordem superior) (CAPOZZIELLO; LAURENTIS, 2011) (MÜLLER et al., 2015).

Nesse contexto, o avanço tecnológico e, por consequência, o aumento da qualidade e da quantidade dos dados observacionais deram a essas teorias alternativas da gravitação - assim como a muitas outras com propostas semelhantes - o ambiente perfeito para seu crescimento de popularidade. Tais teorias tornaram-se amplamente difundidas e estudadas, gerando assim a necessidade de materiais introdutórios para seu estudo e sua compreensão. Com tal necessidade em mente, o presente artigo visa introduzir parte do aparato e dos conceitos físicos e matemáticos necessários para o estudo das teorias alternativas realizando, sempre que possível, uma transposição didática dos assuntos abordados. Mais especificamente, abordaremos, como sugerido no título, alguns dos tópicos necessários para a construção e desenvolvimento de duas teorias alternativas: as teorias Teleparallelismo e $f(T)$.

Dessa forma, os tópicos aos quais nos referimos serão tratados, no presente trabalho, da seguinte maneira: na Seção II é feita uma retrospectiva histórica do estudo da Gravitação, descrevendo o desenvolvimento dos conceitos que levaram à elaboração da teoria teleparalela contemporânea, enquanto a seção III trata do Teleparallelismo em si, abordando alguns de seus aspectos. A Seção IV, por sua vez, apresenta a teoria de grupos, discutindo suas definições, seus geradores e Grupos de Lie - tópicos de grande importância para a

compreensão das teorias de Calibre, assunto abordado na Seção V. Já a Seção VI ocupa-se com a descrição de fibrados, necessários para a construção geométrica do espaço no qual os objetos matemáticos do Teleparalelismo serão definidos, a exemplo das tetradas - as quais constituem o assunto da Seção VII. Apresentamos nossas considerações finais na Seção VIII.

II. UMA RETROSPECTIVA HISTÓRICA

Ao interagir com a natureza, o homem se descobriu interessado nas leis que governam tudo que o cerca e a si mesmo. Esse interesse levou-nos às Ciências da Natureza e, conseqüentemente, à Física, que se dedicou a buscar a origem das interações naturais, a investigar como estas funcionam e a pesquisar como elas se comportam em diferentes situações (TORIBIO, 2015).

Assim, com o filósofo grego Aristóteles (384-322 a.C.) e seu estudo do movimento dos corpos, nasceu a Física (ARISTÓTELES, 2009). Aristóteles esforçou-se para buscar explicações para a queda livre dos corpos, mas foi o matemático e astrônomo pisano Galileu Galilei (1564-1642) quem, ao unir a matemática e a observação, de forma sistemática, usando da experimentação, deu os primeiros passos para uma descrição mais rigorosa do que depois o físico inglês Isaac Newton chamaria de Gravidade.

Galileu explicou de forma revolucionária o movimento dos corpos, dando nova importância à Física como Ciência da Natureza ao mostrar que muitas considerações que até então se acreditava serem verdadeiras, com base nas teorias aristotélicas, na verdade não passavam de equívocos, fornecendo descrições mais adequadas com relação às observações experimentais. Newton, por sua vez, foi capaz de ir ainda mais adiante ao buscar, na matemática, explicações para o movimento dos corpos celestes e ao desenvolver teorias que previam com exatidão o movimentos dos corpos quando sob a ação do que ele chamou de Força Gravitacional - isto é, sob a ação da gravidade (TORIBIO, 2015).

Newton postulou que a interação gravitacional entre corpos ocorre devido a uma propriedade intrínseca à matéria, a qual ele chamou de massa gravitacional (m_g) e que, a princípio, possui diferentes propriedades em relação à massa inercial (m_i), esta relacionada com a resistência em mudar seu estado de movimento. Todavia, sua teoria gravitacional baseia-se na ideia de que a razão entre essas duas massas é igual a um ($m_g/m_i=1$) - conhecida posteriormente como princípio da equivalência fraca. Tal princípio permite-nos dizer que corpos diferentes sentem a gravidade da mesma forma, isto é, que se as condições iniciais de movimento forem as mesmas, partículas diferentes percorrem uma mesma trajetória quando sob a influência de um campo gravitacional. Assim, Newton deu origem ao que chamou de Lei da Gravitação Universal (NEWTON, 2016) (BALOLA, 2011).

Na teoria de Newton para o movimento de partículas, a qual denominamos, de forma geral, de Mecânica Newtoniana - que compreende a teoria universal da gravitação -, a velocidade das partículas, em conformidade com as ideias de Galileu Galilei, é descrita por somas vetoriais (NEWTON, 2012). Entretanto, na segunda metade do século XIX, o avanço na experimentação e a observação de novos dados, junto ao surgimento da Teoria Eletromagnética e das equações de Maxwell, mostravam uma forma diferente de descrever a velocidade das partículas quando em altas velocidades, próximas à da luz. Esses dados não concordavam com a mecânica de Newton, mostrando a necessidade de um novo formalismo

para complementá-la ou substituí-la - isto é, uma nova teoria da relatividade que com eles estivesse de acordo (ALDROVANDI; PEREIRA, 2015).

Foi então que o físico alemão Albert Einstein (1879-1955), em 1905, formulou a Teoria da Relatividade Restrita que, dentre outras coisas, define a velocidade da luz no vácuo como uma constante da natureza (expressa por c); as leis da relatividade passaram, então, a sofrer a influência de um novo parâmetro, conhecido como fator (gama) de Lorentz (γ) (PIATTELLA, 2020). Dez anos depois, em 1915, Einstein publicou trabalhos relativos a uma teoria da gravitação: a Teoria da Relatividade Geral (RG).

A RG apresentava-nos uma nova forma de interpretar a Gravidade, não mais compreendida como uma força, mas sim como uma consequência da geometria do espaço-tempo, de forma que os corpos submetidos a um campo gravitacional descreveriam trajetórias dadas por geodésicas. Com Einstein e a mecânica relativística, as velocidades das partículas não seriam apenas somadas vetorialmente, mas sofreriam também a influência do fator de Lorentz, em acordo com os dados experimentais e com a teoria eletromagnética (LORENTZ et al., 1952) (D'INVERNO, 1998).

As teorias da Relatividade de Einstein sofreram diversas críticas. Todavia, devido ao avanço contínuo do poder de observação e da precisão dos dados, foi possível aferir a grande capacidade de tais teorias em prever e explicar fenômenos anteriormente não respaldados pela Mecânica Newtoniana - o que colaborou com sua ampla difusão (TORIBIO, 2015).

É importante ressaltar, também, que a Relatividade Geral descreve a gravitação utilizando-se de um espaço de quatro dimensões, das quais três se referem a dimensões espaciais, enquanto a quarta refere-se a uma dimensão temporal. Tal espaço possui propriedades intrínsecas de curvatura e torção; todavia, de forma deliberada, Einstein escolheu trabalhar com um espaço-tempo de torção igual a zero no âmbito da RG. Estruturou-se, assim, uma teoria na qual a gravidade é descrita apenas pela curvatura do espaço-tempo, conhecido como espaço-tempo de Levi-Civita (1873-1941) (LORENTZ et al., 1952) (D'INVERNO, 1998).

Essa forma de descrever a gravitação permite que a Gravidade seja profundamente ligada à inércia, tornando impossível sua dissociação. Dessa maneira, a RG torna-se dependente da validade do princípio de equivalência fraca (JIMÉNEZ; HEISENBERG; KOIVISTO, 2019) e, e.g.¹, limita a descrição da energia gravitacional de uma forma dependente da inércia do sistema, diferentemente do que ocorre na Teoria Eletromagnética, por exemplo.

Em contraste com as demais interações fundamentais - Eletromagnetismo, interação Forte e interação Fraca - a gravidade, na RG, é descrita por uma série de estruturas e teorias que, aparentemente, dificultam sua unificação com as demais interações (ALDROVANDI; PEREIRA, 2015). Nesse contexto, Einstein esforçou-se para unificar a gravitação e o eletromagnetismo usando uma estrutura matemática conhecida como estrutura teleparalela - distinta do Teleparalelismo contemporâneo - mas, como não obteve sucesso, abandonou-a. O Teleparalelismo, então, surgiu novamente, após alguns anos, com um novo objetivo: (re-)descrever a Interação Gravitacional, munindo-a de uma nova roupagem e abrangência (JIMÉNEZ; HEISENBERG; KOIVISTO, 2019) (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016).

Mas, afinal, o que é o Teleparalelismo e em qual cenário colocam-se as teorias $f(T)$?

¹Exempli gratia (e.g.): por exemplo (Oxford Languages).

III. O TELEPARALELISMO COMO UMA ALTERNATIVA

Anteriormente, falamos de como o espaço no qual a RG é descrita é munido, dentre outras características, de duas estruturas fundamentais: a curvatura e a torção. De forma consciente, Einstein escolheu escrever a RG apenas usando o espaço-tempo de Levi-Civita, onde a torção é sempre igual a zero e a gravitação é descrita apenas pela curvatura do espaço-tempo (LORENTZ et al., 1952). Todavia, devido às aparentes limitações dessa descrição, surgiu a proposta de, em vez de escolhermos um espaço-tempo de torção igual a zero, escolhermos um espaço-tempo de curvatura zero, isto é, onde a gravidade será dada exclusivamente pela torção. Isso corresponde a escrever uma teoria da gravitação num espaço-tempo conhecido como espaço-tempo de Weitzenböck (ALDROVANDI; PEREIRA, 2015).

O Teleparallelismo adota, então, uma descrição na qual a gravidade é dada exclusivamente pela torção (expressa pelo tensor de torção $T^\rho{}_{\mu\nu}$). É uma teoria que apresenta uma reformulação geométrica da RG, descrita por um campo de tetradas $h^a{}_\mu$, em vez de pela métrica $g_{\mu\nu}$. O Teleparallelismo baseia-se na conexão de Weitzenböck $\Gamma^\lambda{}_{\mu\nu} = h^{a\lambda}\partial_\nu h_{a\mu}$, dada pelo campo de tetradas $h^a{}_\mu$. Por consequência dessa conexão, o tensor de curvatura de Riemann é identicamente nulo ($R^\rho{}_{\mu\nu\lambda} = 0$) (JIMÉNEZ; HEISENBERG; KOIVISTO, 2019) (MALUF, 2013).

Nesse contexto, o Teleparallelismo - também conhecido como Teoria Teleparalela da Gravitação ou, ainda, como Equivalente Teleparalelo da Relatividade Geral (TEGR)² - pode ser compreendido como uma abordagem para descrever a Interação Gravitacional de forma análoga às demais Interações Fundamentais (Eletromagnetismo, interação Forte e interação Fraca). Para isso usa, em seu formalismo, Teorias de Calibre, também conhecidas como Teorias de Gauge. A partir das Teorias de Calibre, dos campos de tetradas, do tensor de torção e de semelhantes recursos matemáticos, aTEGR é, então, capaz de dar uma nova interpretação à gravitação (MALUF, 2013) (ALDROVANDI; PEREIRA, 2015) (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016).

Além disso, aTEGR propõe uma solução à dependência entre gravidade e inércia, possibilitando que, dentre outras coisas, possamos calcular a energia do campo gravitacional de forma independente e completa, assim como na Teoria Eletromagnética. Possibilita também o uso das equações de Lagrange e Hamilton para calcular o momento linear, o momento angular e a energia do campo gravitacional sem a necessidade de preocupação com uma ligação indissociável entre gravidade e inércia (MALUF, 2013).

As teorias $f(T)$, por sua vez, são uma generalização direta do Teleparallelismo, na qual o argumento da lagrangiana que descreve a teoria é substituído por uma função não linear $f(T)$ do escalar de torção T . Consequentemente, surgem equações de campo distintas e mais gerais em relação às obtidas pelo Teleparallelismo (BASILAKOS et al., 2013) (CAI et al., 2016).

Esses são, então, alguns dos motivos pelos quais tanto o Teleparallelismo, quanto as teorias $f(T)$, vêm conquistando popularidade no âmbito das teorias voltadas à descrição da gravitação, difundindo-se no contexto de teorias alternativas à RG.

²Sigla em inglês para Teleparallel Equivalent of General Relativity.

IV. TEORIA DE GRUPOS

Trataremos, nesta seção, da Teoria de Grupos, uma área da Matemática de grande relevância não somente para as teorias de gravitação, mas para diversas outras áreas da Física. Abordaremos o conceito de "grupo", explorando sua definição e suas propriedades; serão apresentados os grupos de Lie e os grupos lineares, assim como os conceitos de "gerador" e de "álgebra", além de sua relação com os grupos em geral. Trataremos, também, da ação de grupos em conjuntos.

IV.1. Definição e Propriedades

Na Física, frequentemente buscamos simetrias nas leis que desenvolvemos e nos objetos e fenômenos que observamos, simetrias estas que implicam invariância sob transformações. Tal invariância é fundamental para podermos trabalhar de diversas perspectivas como, por exemplo, ao analisar um fenômeno a partir do ponto de vista de diferentes observadores, dentre outras possibilidades. Exemplos de transformações são as rotações e a mudança de um sistema de coordenadas a outro. Nesse contexto, a Teoria de Grupos é a ferramenta que usamos para lidar com simetrias em um sistema e, uma vez que uma simetria corresponde, como já dito, à invariância sob dada transformação, podemos imaginar Grupo como uma coleção de transformações (SCHWICHTENBERG, 2015).

Começamos, então, definindo os Grupos mais formalmente.

Definição (Grupo): Um Grupo $G = (G, \circ)$ é um conjunto G de elementos $x, y, \dots$ acompanhado de um mapa

$$G \circ G \rightarrow G \quad (1)$$

tal que os axiomas abaixo são satisfeitos:

(G1) Associatividade: para quaisquer $x, y, z \in G$,

$$(x \circ y) \circ z = x \circ (y \circ z). \quad (2)$$

(G2) Existência de uma identidade: existe um elemento e tal que, para qualquer $x \in G$,

$$x \circ e = e \circ x = x. \quad (3)$$

(G3) Existência de um inverso x^{-1} de x : para todo $x \in G$ existe um elemento de G , chamado inverso de x e escrito x^{-1} , tal que

$$x^{-1} \circ x = x \circ x^{-1} = e. \quad (4)$$

Para todo $x \in G$, o inverso x^{-1} é único, assim como sua identidade e .

Uma quarta propriedade que vale a pena ser mencionada, mas que não é uma condição necessária para um grupo, é a Comutatividade.

(G4) Comutatividade: se, para qualquer $x, y \in G$,

$$x \circ y = y \circ x, \quad (5)$$

então chamamos G comutativo ou Abelian (KREYSZIG, 1991).

Assim, um grupo $(G, \circ)$ é um conjunto G junto a um operador binário $\circ$ definido em G , que satisfaz os axiomas $G1$, $G2$ e $G3$. Em suma, um grupo deve ter as seguintes propriedades: i) Fecho: para todo $g1, g2 \in G$, $g1 \circ g2 \in G$; ii) Elemento identidade; iii) Elemento inverso; iv) Associatividade.

Para melhor entendermos, então, a função dos grupos, vejamos dois exemplos em um espaço de duas dimensões; primeiramente, imaginemos a rotação de um quadrado. Para tal transformação ser simétrica, após a rotação, todos os pontos internos do quadrado original devem ser pontos internos do quadrado transformado; assim, as únicas rotações possíveis são as proporcionais a $\pi/2$. Porém, caso imaginemos a rotação de um círculo unitário, não importa a forma como giramos tal figura, pois os pontos internos permanecerão internos (ao círculo transformado) após a transformação.

O conjunto de transformações que permite que transformemos tais figura de forma simétrica é o que chamamos de grupo.

Faz-se pertinente também o seguinte exemplo: imagine um vetor $\vec{v}$ de comprimento (norma ou módulo) $|\vec{v}|$. Se, após a transformação $\vec{v} \rightarrow \vec{v}'$, a norma permanecer inalterada, ou seja, o comprimento do vetor transformado $|\vec{v}| \rightarrow |\vec{v}'|$ for o mesmo do original, $|\vec{v}| = |\vec{v}'|$, então obtemos uma transformação simétrica. Sabendo que a norma de um vetor é dada pelo produto escalar do vetor por ele mesmo, então a igualdade

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = \vec{v}' \cdot \vec{v}' \quad (6)$$

deve ser verdadeira.

Assim, denotando a transformação por O e escrevendo o vetor transformado $\vec{v} \rightarrow \vec{v}' = O\vec{v}$, obtemos

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = \vec{v}^T \vec{v} \rightarrow \vec{v}'^T \vec{v}' = (O\vec{v})^T O\vec{v} = \vec{v}^T O^T O\vec{v} = \vec{v}^T \vec{v} = \vec{v} \cdot \vec{v} \Leftrightarrow O^T O = I. \quad (7)$$

Essa condição ($O^T O = I$) define o grupo $O(N)$ para matrizes de N dimensões, e dizemos que $O(N)$ é o grupo de todas as matrizes ortogonais $N \times N$. No caso de 2 dimensões, por exemplo, obtém-se $O(2)$, e assim por diante.

Podemos ainda achar um subgrupo do grupo O que inclui apenas rotações. Esse grupo é chamado $SO(N)$ e é definido pela condição $\det(O) = 1$. Usamos S para nos referirmos ao termo *special* e O para nos referirmos ao termo *orthogonal* (SCHWICHTENBERG, 2015).

IV.2. Grupos de Lie

Os Grupos de Lie são grupos que reúnem transformações simétricas contínuas, a exemplo da rotação de vetores em duas ou mais dimensões, e que permitem a derivação das operações multiplicação e inversão. São extremamente importantes para a mecânica moderna e, por consequência, para a Relatividade Geral e para o Teleparalelismo. Os Grupos de Lie são, de forma geral, classificados da seguinte forma:

- (i) Clássicos: $A_N \sim SU(N) \rightarrow$ grupos unitários; $B_{2N} \sim SO(2N+1) \rightarrow$ grupos de rotação; $C_N \sim Sp(2N) \rightarrow$ grupos simpléticos; $D_N \sim SO(2N) \rightarrow$ grupos de rotação.
- (ii) Excepcionais: $G_2; F_4; E_6, E_7, E_8$.

Os grupos de Lie são importantes, dentre outras razões, pois é a partir deles que chegamos ao grupo de Lorentz, que contém as famosas transformações de Lorentz, e ao grupo de Poincaré. Ambos são grupos fundamentais para a formulação da RG e da TEGR.

Para elucidar melhor essa questão, vejamos alguns exemplos em duas dimensões. No espaço Euclidiano $\mathbb{E}^2(x, y)$ obtemos os grupos $SO(2)$, obtido no exemplo da rotação do vetor $\vec{v}$, e $Sp(2)$; no espaço de Minkowski $\mathbb{M}^{1,1}(t; x)$ obtemos o grupo de Lorentz $SO(1, 1)$; e no espaço complexo $\mathbb{C}^2(z_1, z_2)$ obtemos o grupo $SU(2)$. Um outro exemplo, bastante interessante, por sinal, é o espaço de Minkowski complexo $\mathbb{C}^{1,1}$, em que obtemos o grupo $SU(1, 1)$ (WYBOURNE, 1974).

IV.3. Grupos Lineares

Outro tipo de grupo pertinente à nossa discussão, devido ao papel que desempenha na construção da teoria teleparalela (no que diz respeito ao seu arcabouço geométrico) são os chamados grupos lineares. Conforme apresentado em (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016), tais grupos, expressos por $GL(m, K)$, são dados pelo conjunto de todas as matrizes não singulares (isto é, com determinante diferente de zero) de ordem $(m \times m)$.

As entradas das matrizes que constituem os elementos desse tipo de grupo pertencem ao espaço K , o qual pode indicar os espaços $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$ ou $\mathbb{Q}^3$. Isto é, K é tal que $K = \mathbb{R}$, $\mathbb{C}$ ou $\mathbb{Q}$. No escopo do presente trabalho, é de especial importância o grupo linear cujas entradas das matrizes pertencem ao espaço real $\mathbb{R}$, $GL(m, \mathbb{R})$ (ver seção VI.2, sobre fibrados).

IV.4. Geradores e respectivas álgebras

Quando falamos de transformações simétricas, falamos de transformações que não alteram as propriedades dos objetos transformados e, quando trabalhamos com transformações simétricas contínuas, falamos de infinitas transformações simétricas que podem ser parametrizadas continuamente por um ou mais parâmetros (WYBOURNE, 1974). Para tal, usamos uma álgebra chamada Álgebra de Lie⁴, a qual reúne vários grupos de Lie.

Um excelente exemplo é o grupo de simetria do círculo. Tal grupo é contínuo pois o parâmetro de rotação (ângulo de rotação) pode assumir um valor (contínuo) arbitrário. Assim, uma rotação infinitesimal, isto é, uma transformação próxima à proporcionada pelo elemento identidade I , pode ser descrita na forma

$$g(\varepsilon) = I + \varepsilon X, \quad (8)$$

³ $\mathbb{Q}$ refere-se ao conjunto dos quaternions, o qual é um espaço vetorial em $\mathbb{R}$ cuja base é dada por $\{1, i, j, k\}$ (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016).

⁴Associar sempre Álgebra de Lie à simetria contínua.

em que g representa um elemento próximo à identidade, ε^5 representa um número bastante pequeno e X é um objeto chamado gerador.

Apesar de $g(\varepsilon)$ ser uma transformação infinitesimal, ao realizá-la repetidas vezes, obtemos, no limite, uma transformação não infinitesimal. Matematicamente, escrevemos pequenas transformações aplicada diversas vezes como

$$h(\theta) = (I + \varepsilon X)(I + \varepsilon X)(I + \varepsilon X)\dots = (I + \varepsilon X)^k \quad (9)$$

onde k representa a quantidade de transformações realizadas. Considerando θ um parâmetro de transformação finita - um ângulo de rotação - e N um número grande o suficiente, podemos escrever $g(\theta)$ como

$$g(\theta) = I + \frac{\theta}{N}X. \quad (10)$$

Assim, para obtermos a menor transformação, N deve ser o maior possível e, para obtermos uma transformação finita partindo da repetição de uma transformação infinitesimal, devemos fazê-la o máximo de vezes possível. Matematicamente, toma-se o limite

$$h(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I + \frac{\theta}{N}X \right)^N, \quad (11)$$

o qual resulta na função exponencial⁶; logo

$$h(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I + \frac{\theta}{N}X \right)^N = e^{\theta X}. \quad (12)$$

O que mostra que X gera, de certa forma, a transformação finita h (justamente por isso é denominado "gerador").

Assim, para calcular o gerador de determinada transformação finita $h(\theta)$ basta derivarmos a equação (12),

$$\frac{d}{d\theta}h(\theta) = \frac{d}{d\theta}e^{\theta X} = Xe^{\theta X}. \quad (13)$$

Isolando X e avaliando-o no ponto $\theta = 0$, obtemos, então,

$$X = \left. \frac{d}{d\theta}h(\theta) \right|_{\theta=0}. \quad (14)$$

Como exposto anteriormente, um grupo $(G, \circ)$ é uma coleção G de transformações que obedece a determinados axiomas, aliado a uma operação binária $\circ$ que dita como combinar os elementos do grupo. Nesse contexto, para um Grupo de Lie G , dado por uma matriz $n \times n$, a Álgebra de Lie $\mathfrak{g}$ desse grupo é dada por essa matriz X , de ordem $n \times n$, tal que $e^{tX} \in G$, com $t \in \mathbb{R}$ um parâmetro qualquer, e por um operador, chamado parêntese de Lie⁷ $[\cdot]$ que nos diz como podemos combinar essas matrizes.

⁵Na matemática, ε representa um valor infinitesimal, isto é, muito pequeno.

⁶Lembre que $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$.

⁷Chamado em inglês de "Lie bracket".

O parentese de Lie $[,]$ para matrizes do grupo de Lie, X e Y , é dado por $[X, Y] = XY - YX$, e é chamada comutação de X e Y . Os elementos XY e YX não precisam, necessariamente, pertencer à Álgebra de Lie, mas dela faz parte o resultado da aplicação de X e Y ao parêntese de Lie. Sendo assim, observamos que, para a Álgebra de Lie, o produto natural não é o multiplicação de matrizes, mas sim o parêntese de Lie. É válido notar, também, que a Álgebra de Lie é fechada sobre a aplicação do parêntese de Lie. (SCHWICHTENBERG, 2015)

IV.5. Ação de Grupos em Conjuntos e Transformações

Outro relevante aspecto da teoria de grupos, cuja aplicação surge tanto no contexto da RG quanto no da gravidade teleparalela - devido ao arcabouço geométrico utilizado em sua estruturação - é a forma como os elementos de um dado grupo atuam nos elementos de um conjunto qualquer. Referimo-nos, mais especificamente, às chamadas "ação à esquerda" e "ação à direita". Investiguemos, primeiramente, o que significa dizer que um grupo atua em um conjunto.

Considerando um dado grupo, G , e um conjunto, M , bem como elementos g e h de G ($g, h \in G$) e algum elemento p de M ($p \in M$), diz-se que o grupo G atua no conjunto M quando existe algum mapa, f , que leva do produto cartesiano entre M e G até algum elemento de M ; isto é, no que diz respeito a M e G , vale que (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016)

$$f : M \times G \rightarrow M, \quad (15)$$

ou ainda, no que diz respeito aos elementos, vale que

$$(p, g) \rightarrow f(p, g). \quad (16)$$

Além disso, f deve satisfazer às seguintes condições:

- (i) $f(p, e) = p$;
- (ii) $f(f(p, g), h) = f(p, gh)$,

em que e é, como exposto anteriormente, o elemento identidade de G .

Em linhas gerais, o que as equações (15) e (16) indicam é que f é um objeto responsável por relacionar dois elementos, $p \in M$ e $g \in G$, e levá-los a um dado elemento de M . Na prática, é f quem diz como g atua em p , fornecendo como resultado um novo elemento do conjunto M . As condições (axiomas) (i) e (ii), por sua vez, podem ser melhor compreendidas com o auxílio de um exemplo. Tomemos como tal, então, um de nossos casos de interesse: a chamada "ação à direita".

Uma ação à direita de G em M é um caso particular de uma ação f , para o qual se denota $f \equiv R_g$, em que um dado g atua em algum elemento $x \in M$ levando a algum outro elemento $x' \in M$, da seguinte maneira:

$$R_g x = xg = x'. \quad (17)$$

Ou seja, neste caso, R_g é o mapa que diz como x e g devem se combinar, resultando em um x' que pertence a M . O nome "ação à direita" vem justamente do fato de que, nesta aplicação, g atua à direita do elemento de M (neste caso, o elemento x) que está sendo transformado.

Para o caso de uma aplicação à direita o axioma (i) assume, então, a forma

$$f(p, e) = R_g(p, e) = pe = p \in M. \quad (18)$$

Ou seja, no contexto de uma ação à direita, o axioma em (i) garante que a aplicação da identidade fornecerá, necessariamente, o mesmo elemento $p \in M$.

Já a afirmação contida no axioma em (ii) pode ser visualizada com uma análise de cada um dos membros da igualdade; do primeiro membro, vemos que

$$f(f(p, g), h) = R_g(R_g(p, g), h) = R_g(pg, h) = (pg)h, \quad (19)$$

enquanto, partindo do segundo membro, obtém-se

$$f(p, gh) = p(gh). \quad (20)$$

Isto é, a condição (ii) afirma, no caso específico de uma ação à direita, que $(pg)h = p(gh)$: há, de certa forma, associatividade na aplicação de g sobre x .

A ação à esquerda, por sua vez, é definida de maneira completamente análoga, porém a atuação do mapa a ela relativa, L_g , é tal que $L_g : M \times G \rightarrow M$, com $L_g = gx = x'$, com $x, x' \in M$.

V. TEORIAS DE CALIBRE

Com o desenvolvimento da Física ao longo do século XX, as Teorias de Calibre (também chamadas Teorias de Gauge) mostraram-se um ferramental teórico de suma importância. Utilizando-se desse formalismo foi possível, por exemplo, descrever de maneira semelhante o Eletromagnetismo e as Forças Forte e Fraca, em um processo de unificação de algumas das interações fundamentais que evidencia a grande relevância desse tipo de teoria para a Física de Partículas e para demais áreas da Física (MORIYASU, 1983).

Por tais razões, certas classes de Teorias Alternativas tentam reconstruir a Gravitação como uma Teoria de Calibre, sendo o Teleparallelismo uma delas (ALDROVANDI; PEREIRA, 2012). Dessa maneira, consideramos fundamental o conhecimento desse tipo de teoria para uma melhor compreensão da gravitação teleparalela. Introduzimos, então, algumas noções básicas a respeito de Teorias de Calibre, bem como dos conceitos de transformação de Gauge, invariância de Gauge e acoplamento.

V.1. Definição e Conceitos Fundamentais

A fim de entender o que são Teorias de Calibre, precisamos primeiramente compreender o que são Transformações de Gauge (ou de calibre). Estas são transformações de campo - isto é, transformações que atuam em campos, modificando-os - e são caracterizadas pela

propriedade de que os parâmetros da transformação dependem arbitrariamente do ponto no espaço-tempo no qual ela é realizada (RUBAKOV, 2009).

Esse tipo de transformação distingue-se das chamadas transformações globais, que são definidas como aquelas para as quais o parâmetro é invariante. Isto é, podemos considerar, por exemplo, uma dada transformação para algum ponto x no espaço tangente à variedade que representa o espaço-tempo⁸, que depende de algum parâmetro ε , dada por

$$x \rightarrow x' = x + \varepsilon. \quad (21)$$

No que diz respeito a ε não importa se a transformação foi tomada em algum ponto x_1 ou em outro ponto x_2 , com $x_1 \neq x_2$, pois ε permanece o mesmo (no caso de uma transformação global). Então para todos os pontos onde é tomada a variação, no caso das transformações globais, vale que

$$\varepsilon(x_1) = \varepsilon(x_2) = \dots \equiv \varepsilon. \quad (22)$$

Aqui é importante perceber que o que permanece constante é o parâmetro da transformação, e não o valor do campo que atua em cada ponto do espaço. Por exemplo, suponha um campo $\psi \equiv \psi(x^\mu)$ definido em alguma região do espaço-tempo. Caso sofra uma transformação global, quando avaliado no ponto x_1 , esse campo será levado em algum correspondente $\psi'(x_1)$, isto é, $\psi(x_1) \rightarrow \psi'(x_1)$. Para o mesmo campo, avaliado em algum ponto x_2 , teríamos: $\psi(x_2) \rightarrow \psi'(x_2)$. O que gostaríamos de ressaltar é que, em geral, não necessariamente $\psi'(x_1)$ e $\psi'(x_2)$ são iguais. O que permanece constante é o parâmetro da transformação que levou ψ em ψ' em cada caso.

Já para uma transformação de calibre, o valor do parâmetro depende de cada ponto no espaço. Ou seja, vale que

$$\varepsilon \equiv \varepsilon(x^\mu). \quad (23)$$

Nessa perspectiva, invariância por transformações de Gauge (ou simplesmente invariância de Gauge, ou mesmo simetria de Gauge) é a propriedade de que as grandezas observáveis referentes a um dado campo permanecem inalteradas quando os campos correspondentes sofrem transformações de Gauge - isto é, diferentes configurações de campo geram os mesmos observáveis (CAPOZZIELLO; LAURENTIS, 2011). Mas o que isso quer dizer?

Nesse tipo de teoria, os campos não são em si observáveis; o que se observa são as grandezas físicas a eles correspondentes. A invariância de Gauge ocorre quando há mudança na configuração de campos, porém a grandeza observável é mantida a mesma. Mais especificamente, não somente as grandezas físicas, mas também as ações, lagrangianas e equações de movimento mantêm-se inalteradas no caso de uma simetria de Gauge (RUBAKOV, 2009). Uma teoria com a propriedade de ser invariante por transformações de Gauge é chamada de Teoria de Gauge.

⁸A construção geométrica das teorias de calibre será abordada mais adiante, na Seção V: "Geometria Diferencial e Fibrados".

V.1.1 O Eletromagnetismo como Exemplo

Frequentemente, na literatura da área, o Eletromagnetismo é citado como sendo o caso mais simples de uma teoria de Calibre (a exemplo de (RUBAKOV, 2009)). Dessa forma, podemos usá-lo para ilustrar os conceitos expostos até então. Para tal, recorreremos à expressão do tensor de campo eletromagnético, dado por (GRIFFITHS, 2021)

$$F^{\mu\nu} = \frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu} \equiv \partial_\mu A^\nu - \partial_\nu A^\mu. \quad (24)$$

Para melhor compreender cada uma das grandezas expostas na equação 24, é de grande utilidade a discussão realizada em (GRIFFITHS, 2021). Dessa forma, no que diz respeito à formulação tensorial do Eletromagnetismo, seguimos nossa exposição considerando a referência indicada: $F^{\mu\nu}$ é o tensor de campo (ou intensidade de campo) eletromagnético, enquanto A^μ é o potencial 4-vetorial.

Em linhas gerais, $F^{\mu\nu}$ é uma generalização dos campos elétrico e magnético $\vec{E}$ e $\vec{B}$. Isto é, os campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ manifestam-se como casos particulares de $F^{\mu\nu}$. Este tensor pode ser expresso como uma matriz, e pares específicos de índices selecionam elementos específicos dessa matriz, conforme indicado pela expressão (25):

$$F^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 0 & E_x/c & E_y/c & E_z/c \\ -E_x/c & 0 & B_z & -B_y \\ -E_y/c & -B_z & 0 & B_x \\ -E_z/c & B_y & -B_x & 0 \end{bmatrix}, \quad (25)$$

em que B_x , B_y e B_z são componentes do campo magnético $\vec{B}$, E_x , E_y e E_z são componentes do campo elétrico $\vec{E}$ e c é a velocidade da luz. Ou seja, os campos elétrico e magnético são combinados em um único objeto, o tensor intensidade de campo $F^{\mu\nu}$.

Analogamente, A^μ é uma generalização do potencial elétrico V e do potencial vetor $\vec{A}$, em termos do qual $F^{\mu\nu}$ é escrito. Os campos elétrico e magnético podem ser expressos em função do potencial V e do potencial vetor $\vec{A}$ da seguinte maneira:

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (26)$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \quad (27)$$

Assim, ao generalizar as expressões de $\vec{E}$ e $\vec{B}$, faz sentido generalizar também o potencial em função do qual eles são escritos. O potencial 4-vetorial é dado por

$$A^\mu = (V/c, A_x, A_y, A_z). \quad (28)$$

Uma vez compreendida a equação (24), podemos então discutir uma das facetas das simetrias de Calibre inerentes ao Eletromagnetismo. Segundo Rubakov⁹, tanto $F^{\mu\nu}$, a ação e a lagrangiana¹⁰ a ele associadas, quanto as equações de campo e a energia do sistema são

⁹Ver (RUBAKOV, 2009).

¹⁰A expressão para uma lagrangiana na presença de um campo eletromagnético é abordada por Aldrovandi

invariantes por transformações do tipo

$$A^\mu(x) \rightarrow A'^\mu(x) = A^\mu(x) + \partial_\mu \varepsilon(x), \quad (29)$$

com $\varepsilon(x)$ uma função arbitrária (o parâmetro) que depende dos pontos do espaço-tempo. Podemos verificar essa propriedade para o caso do tensor de campo. Substituindo a equação (29) na equação (24), temos que

$$\begin{aligned} F^{\mu\nu} \rightarrow F'^{\mu\nu} &= \partial_\mu (A^\nu + \partial_\nu \varepsilon) - \partial_\nu (A^\mu + \partial_\mu \varepsilon) \\ &= \partial_\mu A^\nu - \partial_\nu A^\mu \\ &= F_{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (30)$$

Ou seja, como a transformação realizada na equação (29) é uma transformação de Gauge, a invariância da equação (30) sob esse tipo de transformação é um dos pontos que caracteriza o Eletromagnetismo como uma teoria de Gauge (ou de Calibre). Neste caso, o "campo não observável" é o potencial 4-vetorial A^μ , enquanto os observáveis físicos são os campos elétrico e magnético. A alteração de A_μ , feita na equação (29), não afetou os observáveis físicos, segundo a equação (30), o que corresponde a reorganizar "os campos não observáveis" mantendo as grandezas físicas invariantes.

V.2. O Acoplamento e Derivadas Covariantes

Um procedimento relacionado às teorias de Calibre que é de grande importância para as teorias da Gravitação é o "acoplamento mínimo", o qual atua como uma forma de recuperar a covariância das transformações. Seguimos, então, com a apresentação da definição de "covariância" e com a discussão a respeito do procedimento de acoplamento mínimo, na qual usamos como exemplo sua aplicação a um caso pertinente.

Segundo (ALDROVANDI; PEREIRA, 2012), uma equação é covariante se preserva sua forma quando sofre transformações gerais de coordenadas. Desse modo, é possível fazer com que equações da Relatividade Restrita continuem válidas na presença da gravitação ao realizar as transformações apropriadas (princípio da covariância); pode-se, assim, obter as equações da RG, a partir das equações correspondentes na Relatividade Restrita, se estas estiverem escritas de forma covariante, quando feitas as transformações necessárias na transição de uma teoria para a outra. Portanto, o princípio da covariância, associado ao acoplamento mínimo, é o responsável por garantir a coerência entre cada teoria.

Tratemos, então, do procedimento de acoplamento para o caso das translações, uma vez que é possível estruturar o Teleparalelismo como uma teoria de Gauge para, especificamente, o grupo das translações (ANDRADE; PEREIRA, 1997). Seguiremos, para essa discussão, o desenvolvimento exposto em (ALDROVANDI; PEREIRA, 2012).

Levando em conta que o gerador das translações infinitesimais é dado por $P_a = \partial/\partial x^a \equiv \partial_a$, podemos considerar a transformação de um campo ψ sob a ação de translações infinitesimais, a qual é expressa por

e Pereira em (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016) e, em contextos mais gerais - para qualquer campo de Gauge -, por Andrade e Pereira em (ANDRADE; PEREIRA, 1997).

$$\delta\psi = \varepsilon^a \partial_a \psi. \quad (31)$$

Para uma transformação global, na qual ε^a (o parâmetro da transformação) é constante, a derivada ordinária ∂_μ de ψ se transforma de maneira covariante,

$$\delta(\partial_\mu \psi) = \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi). \quad (32)$$

Entretanto, para o caso de uma transformação local, na qual o parâmetro assume a forma $\varepsilon^a = \varepsilon^a(x)$, a derivada $\partial_\mu \psi$ não se transforma mais de maneira covariante:

$$\delta(\partial_\mu \psi) = \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + (\partial_\mu \varepsilon^a) \partial_a \psi. \quad (33)$$

Como é possível perceber, na equação (33), surge um termo extra quando é realizada a variação. Esse termo, que possui uma derivada $\partial_\mu \varepsilon^a$, é devido justamente à dependência do parâmetro da transformação em relação ao ponto onde a transformação é realizada - o que leva à ausência de covariância.

A fim de recuperar a covariância, é necessário acrescentar algum termo que "cancele" a contribuição extra que surgiu na equação (33). Esse termo adicional é o potencial B_μ , com o qual é possível definir um novo operador de derivação que recupere a covariância.

B_μ é um elemento da álgebra de Lie do grupo das translações, o qual pode ser usado como base para construir o formalismo teleparalelo. Assim, em função do gerador das translações infinitesimais, B_μ pode ser escrito como

$$B_\mu = B^a{}_\mu P_a. \quad (34)$$

Sob a ação de uma transformação, o comportamento do termo $B^a{}_\mu$ é dado pela expressão

$$\delta B^a{}_\mu = -\partial_\mu \varepsilon^a; \quad (35)$$

esta é uma propriedade importante (e necessária) para que o potencial escolhido recupere a covariância, e será usada adiante.

Nesse contexto, o novo operador de derivação que podemos definir com a introdução de $B^a{}_\mu$, $h_\mu \psi$, se comporta da seguinte maneira:

$$h_\mu \psi = \partial_\mu \psi + B^a{}_\mu \partial_a \psi. \quad (36)$$

Isto é, o operador h_μ , dado pela equação (36), está sendo definido: estamos, artesanalmente, montando uma nova espécie de derivada (h_μ) que substitua a derivada ordinária (∂_μ) e, assim, recupere a covariância. Essa redefinição é feita por intermédio do acréscimo de um novo termo ($B_\mu = B^a{}_\mu P_a$) ao que antes era a derivada ordinária; este termo é o responsável por "cancelar" a parte não covariante da equação (33). Esse objetivo é atingido com a derivada da equação (36), conforme é possível observar nas relações a seguir:

$$\begin{aligned}
 \delta(h_\mu \psi) &= \delta(\partial_\mu \psi + B^a_\mu \partial_a \psi) \\
 &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + (\partial_\mu \varepsilon^a) \partial_a \psi + \delta(B^a_\mu) \partial_a \psi + B^a_\mu \partial_a (\delta \psi) \\
 &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + (\partial_\mu \varepsilon^a) \partial_a \psi - (\partial_\mu \varepsilon^a) \partial_a \psi + B^a_\mu \partial_a (\varepsilon^a \partial_a \psi) \\
 &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + B_\mu \varepsilon^a \partial_a \psi.
 \end{aligned} \tag{37}$$

Fazendo $\varepsilon^a \partial_a (h_\mu \psi)$, vemos que

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^a \partial_a (h_\mu \psi) &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi + B^a_\mu \partial_a \psi) \\
 &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + \varepsilon^a \partial_a B^a_\mu \partial_a \psi \\
 &= \varepsilon^a \partial_a (\partial_\mu \psi) + \varepsilon^a B_\mu \partial_a \psi.
 \end{aligned} \tag{38}$$

Como as equações (37) e (38) coincidem, infere-se como a derivada h_μ (equação (36)), comporta-se covariantemente sob a ação de translações de gauge infinitesimais.

Nesse contexto, a prescrição de acoplamento para o caso das translações infinitesimais consiste justamente no processo de definir uma nova derivada que permaneça covariante quando essas translações são realizadas. Tal objetivo é atingido com a substituição

$$\partial_\mu \psi \rightarrow h_\mu \psi, \tag{39}$$

conforme demonstramos.

VI. GEOMETRIA DIFERENCIAL E FIBRADOS

Outro aspecto muito importante da construção de teorias como o Teleparalelismo e as $f(T)$ (assim como das teorias de Gauge, em geral) é o seu caráter geométrico. Assim, para uma melhor compreensão dessas teorias, faz-se necessário conhecer também as propriedades matemáticas da geometria adotada para descrevê-las, mesmo que de forma qualitativa.

No presente contexto, tais propriedades matemáticas fazem parte da área de geometria diferencial; mais especificamente, constituem objetos geométricos denominados 'fibrados'. Estes, por sua vez, são construídos a partir de variedades, as quais por si só são parte fundamental da descrição geométrica tradicionalmente adotada na RG. Por esse motivo, focaremos nossas atenções no funcionamento dos fibrados propriamente ditos, sem necessariamente abordar todos os pormenores e nuances atrelados à definição de variedades, por intermédio da realização de uma discussão qualitativa desses temas.

VI.1. Variedades Diferenciáveis

Do ponto de vista físico, no contexto da RG, uma variedade pode ser considerada, a grosso modo, um conjunto (ou uma coleção) de pontos com propriedades de conectividade bem definidas. Isto é, trata-se do arcabouço teórico utilizado por Einstein para descrever o espaço-tempo, de forma que seja possível considerar eventos (como aqueles descritos pela

Relatividade Restrita) que ocorram em diferentes pontos e conectá-los - ou associá-los - de alguma maneira. A variedade é, assim, o objeto matemático capaz de estabelecer a noção de como conectar uma região do espaço-tempo (onde ocorre um dado evento físico) à outra região do espaço-tempo (onde demais eventos ocorrem) (HUGHES, 2020).

Dessarte, variedades diferenciáveis de dimensão n são espaços capazes de apresentar uma geometria global curva - ou seja, espaços dotados de aspectos topológicos mais elaborados que os apresentados por espaços planos - mas que, localmente, em pequenas regiões, comportam-se como um espaço plano de dimensão n , $\mathbb{R}^n$. A variedade é construída, então, ao "juntarmos", de forma contínua, cada uma dessas regiões locais¹¹. Tal comportamento encontra-se em acordo com o Princípio da Equivalência de Einstein, segundo o qual as leis da física descritas pela Relatividade Restrita são recuperadas quando em regiões suficientemente pequenas do espaço-tempo (CARROLL, 2004).

Além disso, para definir uma variedade de dimensão n , mesmo no escopo de uma discussão com caráter heurístico, algumas condições devem ser satisfeitas. Dentre elas, uma das mais marcantes, no âmbito deste trabalho, é a da dimensionalidade da variedade: cada espaço plano, de caráter Euclidiano, em cada pequena região da variedade, deve possuir dimensionalidade n . Na prática, isso quer dizer que cada ponto de uma variedade deve possuir o mesmo número de dimensões. Outra propriedade relevante diz respeito à diferenciabilidade da variedade: o fato de ser uma variedade diferenciável indica, qualitativamente, que em cada ponto da variedade as funções ali avaliadas possuem derivadas e que estas são contínuas.

Como exemplos de variedades podem ser citados os espaços $\mathbb{R}^n$, como a linha ($\mathbb{R}^1$) ou o plano ($\mathbb{R}^2$). Uma esfera n -dimensional, definida em um espaço $\mathbb{R}^{n+1}$, também é uma variedade¹², bem como transformações contínuas - a exemplo de rotações em um espaço $\mathbb{R}^n$ - e grupos de Lie também o são (CARROLL, 2004). Variedades são de grande importância pois, na RG, são os objetos responsáveis por descrever o espaço-tempo. Isto é, o espaço físico é representado por uma variedade pseudo-Riemanniana 4-dimensional (SCHUTZ, 2009). Consequentemente, torna-se um ente de grande relevância em nossa discussão pois, no contexto teleparalelo, esse papel é mantido - porém passa a ser parte de uma estrutura geométrica mais arraigada, com a qual as particularidades de uma teoria de Gauge podem ser descritas: a variedade passa a constituir a base de um fibrado.

VI.2. Fibrados

Uma vez introduzidas as noções gerais do que são variedades e de qual o seu papel na RG, podemos tratar dos fibrados. Discutiremos, de forma heurística, sua definição e seu funcionamento. Então, exploraremos suas propriedades por intermédio da apresentação de dois exemplos: os fibrados vetoriais e os fibrados de sistemas (ou bases) lineares. Este último

¹¹Para uma descrição mais formal dessas noções, a discussão realizada em (CARROLL, 2004) pode ser consultada. Para uma apresentação ainda mais detalhada da geometria diferencial, com a definição de variedades feita a partir de espaços topológicos, ver (ISHAM, 1999), (SCHULLER, 2015), (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016) e (NAKAHARA, 2003).

¹²Apesar de uma variedade ser um objeto cuja existência independe de quaisquer outros espaços; não é necessário, por exemplo, que uma variedade esteja imersa em algum espaço Euclidiano de dimensão superior. Ver discussão apresentada em (CARROLL, 2004) para maiores detalhes.

é de especial interesse no presente contexto pois é a estrutura utilizada para a descrição geométrica do Teleparalelismo. Sob tais considerações, usaremos como base em nossa exposição a discussão realizada por Aldrovandi e Pereira em (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016).

VI.2.1 Definição e Noções Fundamentais

Apesar de se mostrar um objeto matemático bastante elaborado, a noção intuitiva do que é um fibrado é razoavelmente direta quando se conhecem as variedades. Em linhas gerais, um fibrado é uma variedade (denominada "base", ou mesmo "espaço base") à qual associamos (anexamos), em cada ponto, outra variedade (denominada "fibra"). Daí o nome "fibrado": trata-se de um espaço ao qual "colamos", em cada ponto, um outro espaço (a "fibra").

Um exemplo de fibrado é aquele constituído por uma esfera (indicada por S^2) e por todos os planos (isto é, espaços do tipo $\mathbb{R}^2$) tangentes a ela. Outro exemplo seria o de uma esfera, S^2 , e todas as retas, $\mathbb{R}^1$, perpendiculares a ela. Nesse sentido, fibrados vetoriais são aqueles cujas fibras são espaços vetoriais - um exemplo proeminente é o do fibrado tangente. Fibrados de sistemas lineares, por sua vez, são aqueles cujas fibras são espaços lineares. Os fibrados vetoriais e os fibrados de sistemas lineares serão abordados, respectivamente, nas seções VI.2.2 e VI.2.3.

Todavia, os espaços base e as fibras não são, por si só, suficientes para determinar completamente um fibrado - é necessário, ainda, definir como eles estão fixados (colados) um ao outro. Tal especificação é realizada pelo chamado "mapa de projeção", o qual abordaremos por intermédio do exemplo dos espaços vetoriais, na seção a seguir. Dizer como a base e as fibras estão anexadas é importante pois, com os mesmos dois espaços, é possível construir diferentes fibrados dependendo da forma como estão associados. Usando o círculo, S^1 , e retas, $\mathbb{R}^1$, por exemplo, poderíamos construir tanto um cilindro, quanto uma fita de Möbius.

Além disso, outra distinção à qual devemos atentarmo-nos é aquela relativa à classificação das fibras utilizadas. Usualmente, uma fibra é uma cópia de um dado espaço em cada ponto da base. No caso do fibrado tangente, por exemplo, quando as fibras são espaços tangentes, são cópias de algum espaço $\mathbb{R}^n$ (a dimensão n do espaço tangente em questão depende da dimensão do espaço base). Esse espaço abstrato, do qual cada fibra é uma cópia, é denominado "fibra típica". É possível definir um objeto matemático no qual as fibras não são necessariamente as mesmas em cada ponto da base, contudo nos concentraremos nas fibras típicas pois estas são as utilizadas na descrição geométrica de teorias como o TEGR.

VI.2.2 Fibrados Vetoriais

Como afirmamos anteriormente, um fibrado vetorial é aquele cujas fibras, F , em cada ponto da base, M , são espaços vetoriais. Então, se consideramos uma variedade diferenciável M qualquer, bem como o conjunto aberto $U \subset M$ (ou seja, U é algum subconjunto aberto de M), podemos definir um fibrado vetorial local, dado pelo produto $U \times F$, para o qual U atua como base - a grosso modo, U pode ser considerado como alguma região da variedade M . Esse fibrado local trata-se, conceitualmente, de um objeto análogo ao que

descrevemos até então como "fibrado" em geral, com a diferença de que neste caso nos focamos, especificamente, no subconjunto U da variedade base e em sua relação (local) com as fibras dos pontos que o compõem.

Nesse contexto, se considerarmos algum ponto $x \in U$, então a fibra, nesse ponto x específico, será dada pelo produto $\{x\} \times F$. Outra propriedade relevante relativa às fibras é que, quando o fibrado é globalmente dado por um produto cartesiano - isto é, um produto direto do tipo $M \times F$ -, ele é classificado como um "fibrado trivial".

Outro objeto de grande importância, além da base e das fibras, é o mapa de projeção π . Trata-se de um mapa $\pi : U \times F \rightarrow U$; ou seja, π é uma operação que leva do fibrado, $U \times F$, até a base, U , realizando uma projeção do fibrado na base. Por essa razão, o mapeamento $\pi : U \times F \rightarrow U$ também é chamado "projeção do fibrado"¹³. Mais especificamente, essa operação possui a propriedade de que, $\forall f \in F$ - isto é, para qualquer vetor f pertencente à fibra F -, vale a relação

$$\pi(x, f) = x. \quad (40)$$

A equação (40) indica como a projeção do fibrado opera: π é capaz de levar de um ponto no fibrado, $U \times F$, dado pela operação entre o ponto $x \in U$ e algum vetor $f \in F$, até o ponto correspondente x em U (o que está de acordo com a projeção $\pi : U \times F \rightarrow U$). Além disso, a fibra no ponto x também pode ser escrita como a imagem inversa de π nesse ponto, $\pi^{-1}(x)$, pois ao operarmos com π^{-1} em ambos os lados da equação (40) obtemos uma relação que recupera a operação entre $\{x\}$ e f (a qual indica a fibra em x) e a iguala a $\pi^{-1}(x)$.

Também é bastante pertinente o papel desempenhado pelo subconjunto aberto U utilizado para definir os fibrados locais. Ele é importante pois, associado a uma bijeção φ (isto é, uma operação simultaneamente injetora e sobrejetora¹⁴), define a chamada "carta fibrada local", dada pelo par (U, φ) - o qual indica a associação entre φ e o subconjunto $U \subset M$. A bijeção φ é tal que, para uma dimensionalidade n grande o suficiente, vale a operação

$$\varphi : U \times F \rightarrow U' \times F' \subset \mathbb{E}^n, \quad (41)$$

a qual expressa como φ atua: basicamente, trata-se de uma operação capaz de levar pontos do fibrado até pontos correspondentes no espaço Euclidiano de ordem n , $\mathbb{E}^n$. O objeto $U' \times F'$, por sua vez, refere-se ao correspondente do fibrado em $\mathbb{E}^n$; é, portanto, um subconjunto desse espaço Euclidiano, de caráter plano.

A utilidade dessa carta fibrada reside no sistema de coordenadas que ela fornece pois, ao defini-la, obtém-se consequentemente um Sistema Local de Coordenadas (LSC)¹⁵ em $U \times F$. Tendo em mente que na RG e no Teleparalelismo uma variedade é usada para representar o espaço-tempo físico, como dito na seção anterior, é possível visualizar a construção desse sistema de coordenadas ao observarmos que, na prática, o que φ faz é associar um ponto do espaço-tempo (neste caso, da variedade M) a um ponto correspondente em um espaço Euclidiano. Ou seja, para cada ponto do espaço físico há uma coordenada correspondente, a qual pertence ao espaço Euclidiano em questão.

¹³Em Inglês utiliza-se o termo "bundle projection" para se referir ao mapa π .

¹⁴Ver (CARROLL, 2004) para mais detalhes a respeito de cada tipo de função/relação.

¹⁵Sigla em Inglês para "local system of coordinates".

Consideremos o caso particular de uma esfera, S^2 , e um plano, $\mathbb{E}^2$: a cada ponto da superfície bidimensional que forma a esfera teríamos um correspondente no plano em $\mathbb{E}^2$, o qual poderia ser dado, por exemplo, por um par de coordenadas (x, y) . O papel de φ seria, neste caso específico, o de levar o ponto na superfície da variedade S^2 - a esfera - até o ponto no plano, atribuindo um sistema de coordenadas bidimensionais para cada ponto da variedade (espaço-tempo, nas teorias da gravitação), os quais a princípio independem de quaisquer sistemas de coordenadas que lhes atribuamos.

Assim, levando em conta todos os demais subconjuntos $U_i \subset M$, bem como suas respectivas bijeções φ_i , tal que a equação (41) seja válida para cada par, obtém-se um conjunto de cartas (U_i, φ_i) . Trata-se de um procedimento análogo ao feito em um processo mais formal de definição de variedades diferenciáveis; é ele o responsável por expressar a propriedade de que, localmente, uma variedade se comporta como um espaço plano de dimensão n .

Podemos, ainda, associar mais um mais um objeto à estrutura descrita até então: supomos um grupo de Lie, G , que atua transitivamente nos elementos de F (ver seções sobre grupos de Lie e ação de grupos e transformações). Ou seja, os elementos da fibra F são passíveis de transformações causadas pelos elementos de algum grupo de Lie G . Tal grupo, então, é denominado "grupo de estrutura" do fibrado. Com ele surge a noção de "fibrados associados", que são fibrados formados por outras fibras F - ou seja, com fibras típicas (modelos) distintas daquelas de um dado espaço -, porém com o mesmo grupo G ¹⁶.

Sob tais perspectivas, levando em consideração os espaços e objetos definidos até aqui, é possível descrever o fibrado como um todo, o qual, em um panorama geral, é chamado de "espaço completo". Este é denotado por

$$P = (M, F, G, \pi). \quad (42)$$

Há, porém, além das estruturas que denotam o espaço completo P , um último objeto relevante na construção de um fibrado vetorial (que se aplica, porém, a um fibrado qualquer): a seção σ . De forma semelhante a como definimos a projeção π , que projetava pontos do fibrado no espaço base ($\pi : U \times F \rightarrow U$), podemos definir também um mapa cuja ação é levar pontos da variedade - mais especificamente, do subconjunto $U \subset M$ - até o fibrado $U \times F$. Isto é, σ é tal que

$$\sigma : U \rightarrow U \times F. \quad (43)$$

Mais especificamente, $\forall p \in U$, vale a propriedade

$$\pi(\sigma(p)) = p, \quad (44)$$

a qual expressa que, se aplicarmos uma seção levando algum ponto p , em U , até seu correspondente no fibrado, e logo em seguida aplicarmos a projeção π , recuperamos o ponto p no espaço base U . Além disso, σ é C^∞ (a derivada de σ , qualquer que seja a sua ordem, é uma função contínua) e sua ação é de caráter local. A utilidade de σ reside no fato de que, em geral, seções especificam os pontos no fibrado.

¹⁶Em fibrados associados, continua-se considerando fibras típicas; isto é, há uma cópia de uma mesma fibra F em cada ponto da base. A diferença é que F é diferente em cada fibrado - em um fibrado associado troca-se F , mas G é mantido.

Um proeminente exemplo de fibrado vetorial é o fibrado de espaços tangentes, denotado por TM . Neste caso, tem-se como fibra um espaço euclidiano de ordem m , $\mathbb{E}^m$, e o grupo estrutural é o grupo linear $GL(m, \mathbb{R})$. Sendo π_T o mapa de projeção associado, o espaço completo do fibrado de espaços tangentes é dado por

$$TM = (M, \mathbb{E}^m, GL(m\mathbb{R}), \pi_T). \quad (45)$$

VI.2.3 Fibrados de Sistemas Lineares

Os fibrados de sistemas lineares, indicados por BM , são de especial importância para nossos objetivos pois possuem certas características geométricas que não estão presentes em outros tipos de fibrados, em geral. Há uma relação íntima entre pontos no fibrado e pontos na base, de particular proximidade, que será explorada ao longo desta seção.

Uma primeira propriedade do fibrado de sistemas lineares é que este é um fibrado principal - um fibrado no qual a fibra coincide com o grupo G . As demais propriedades abordadas nas seções anteriores, todavia, continuam válidas. Assim, considerando cada ponto b no fibrado, bem como cada ponto p , no espaço base M (uma variedade) a ele correspondente, há um mapa de projeção π tal que $p = \pi(b) \in M$. Cada ponto b corresponde a um sistema linear (um conjunto de vetores linearmente independentes) fixado em p - daí o nome "fibrado de sistemas lineares". O grupo associado, por sua vez, é o grupo linear $GL(m, \mathbb{R})$.

Como dito anteriormente, os elementos de $GL(m, \mathbb{R})$ atuam em BM . Desse modo, dado um elemento b (sistema linear) do fibrado,

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_m), \quad (46)$$

um elemento $a = a_{ij} \in GL(m, \mathbb{R})$ atua transformando-o em algum b' :

$$b' = ba = (b'_1, b'_2, \dots, b'_m). \quad (47)$$

Componente a componente, a ação de a em b exposta na equação (47) é dada por

$$b'_i = a^j_i b_j = b_j a^j_i. \quad (48)$$

Ao tratarmos as transformações nas equações (47) e (48), devemos ter em mente que seus componentes são grandezas as quais podem ser representadas por matrizes. Cada $a \in GL(m, \mathbb{R})$ é, na verdade, uma matriz de ordem $m \times m$ (ver seção IV.3, sobre Grupos Lineares), e por isso possui dois índices (a_{ij}) - um representando as linhas, e o outro representando as colunas desse objeto. De forma análoga, cada elemento de b é uma grandeza vetorial (afinal, estamos tratando fibrados de sistemas lineares), de modo que a equação (47) pode ser vista como uma matriz transformando (sendo aplicada) a um vetor, enquanto a equação (48) pode ser visualizada como cada elemento de b' (um vetor b'_i) sendo obtido por intermédio da multiplicação de uma linha (ou coluna) de a por um vetor b_j ¹⁷

¹⁷Ao lidar com grandezas tensoriais, é muito mais vantajoso considerar as relações algébricas entre os índices de cada objeto, para realizar transformações, ao invés de levar em conta a forma matricial dos mesmos. Entretanto, para fins didáticos, quando os tensores possuem poucos índices, a representação matricial pode

(ainda não transformado).

Na base atrelada à carta ao redor do ponto $\pi(b) = p \in M$, formada pelo subconjunto U , cada componente b_i de b pode então ser escrito como

$$b_i = b_i^j \frac{\partial}{\partial x^j}; \quad (49)$$

no fibrado BM , ao redor de b , também é possível estabelecer uma carta, construída a partir dos elementos $\{x^i, b_k^l\}$ (uma vez que o fibrado é construído a partir de um produto entre a base e a fibra em um dado ponto de M - neste caso, ressalta-se que a fibra corresponde ao grupo de estrutura).

Para analisar as propriedades particulares já mencionadas, será utilizado de forma auxiliar um espaço Euclidiano de dimensão m , $\mathbb{E}^m$, além da base M e do fibrado em si. Em $\mathbb{E}^m$, consideremos a base canônica - aqui denotada por $\{K_i\}$ - cujas componentes são ortonormais. Isto é, cada componente K_i pode ser representada por uma matriz coluna cujo j -ésimo elemento é dado por δ_{ij} :

$$K_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; K_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \dots; K_m = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Assim, como o sistema $b \in BM$ também é formado por vetores (ver equação (46)), pode ser compreendido com um mapa (uma transformação) que leva da base canônica, $\{K_k\}$, até o elemento $\{b_k\}$ de b , como indicado na figura (1). Ou seja, ao mesmo tempo que b é um conjunto de vetores linearmente independentes em p (o que representa um ponto em BM), ele também pode ser interpretado como um mapa que transforma os elementos da base canônica nesses vetores linearmente independentes (na prática, b transforma uma série de vetores em outros vetores), os quais, por sua vez, estão fixados à base e constituem, assim, elementos no espaço tangente a p , $T_p M$.

ser útil para facilitar a visualização das operações realizadas, em uma abordagem mais didática.

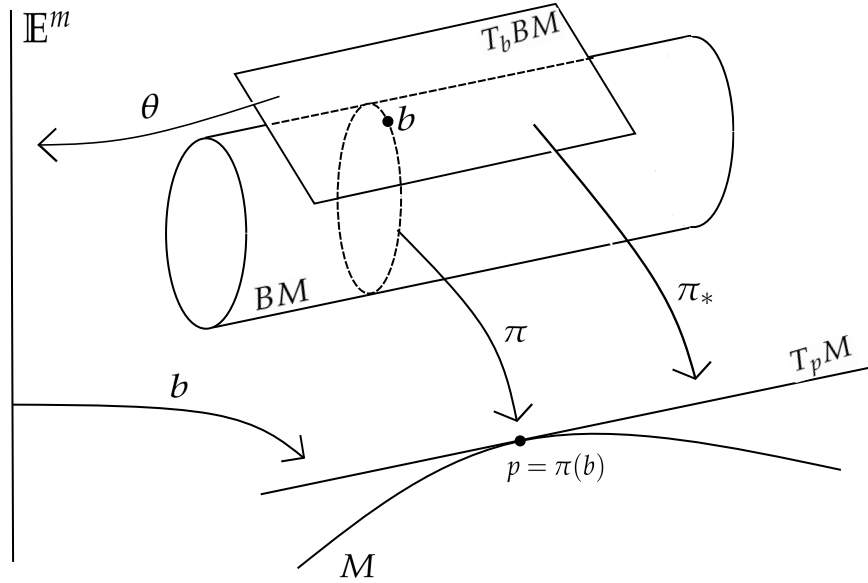


Figura 1: Esquema ilustrativo de um fibrado de sistemas lineares. Imagem inspirada em modelo constante em (ALDROVANDI; PEREIRA, 2016).

Tal propriedade expressa o seguinte comportamento:

$$b : \mathbb{E}^m \rightarrow T_{\pi(b)}M = T_pM, \quad (51)$$

ou, mais especificamente,

$$b(K_k) = b_k. \quad (52)$$

Nesse sentido, o mapa b coloca-se como uma transformação linear entre os espaços vetoriais $\mathbb{E}^m$ e $T_{\pi(b)}M$; além disso, como sugere a equação (52), b é bijetora - o que, na prática, significa que a cada elemento da base ortonormal $\{K_k\}$, b associa um único elemento de $\{b_k\}$. Na medida em que b também preserva as operações entre os elementos de cada espaço, diz-se que b é um isomorfismo.

Em face disso, b é capaz de associar não somente vetores da base de $\mathbb{E}^m$ (equação (50)) aos vetores de $T_{\pi(b)}M$: um vetor $X \in T_{\pi(b)}M$, por exemplo, pode ser expresso como a transformação sob a ação de b - ou seja, como a imagem - de algum vetor $X' = x'^i K_i \in \mathbb{E}^m$, pois vale a relação

$$b(X') = b(x'^i K_i) = x'^i b(K_i) = x'^i b_i = X \in T_{\pi(b)}M. \quad (53)$$

Por esse motivo, quando um elemento do grupo $GL(m, \mathbb{R})$ atua em $\{b_k\}$, tem-se uma consequente ação nos elementos de $\{\mathbb{E}^m\}$.

VI.2.4 Forma de Solda

Uma outra propriedade relevante dos fibrados lineares é a presença de um objeto chamado "forma de solda", cuja ação está ilustrada na figura (1). Uma forma de solda, indicada por θ , é definida justamente em termos de sua ação: ela leva elementos pertencentes

a algum ponto do plano tangente ao fibrado BM , $T_b BM$, até o espaço $\mathbb{E}^m$; isto é,

$$\theta : T_b BM \rightarrow \mathbb{E}^m. \quad (54)$$

Caso definamos, então, um operador π_* que leve de pontos em $T_b BM$, em geral, a pontos em $T_{\pi(b)} M$, podemos descrever a ação de θ como

$$\theta := b^{-1} \circ \pi_*. \quad (55)$$

Trata-se de uma característica bastante especial pois θ é responsável, assim, por associar, intimamente, os espaços tangentes à base e ao fibrado. Ao fazê-lo, permite a definição de objetos e, conseqüentemente, a obtenção de certas propriedades matemáticas as quais desempenham papéis de suma importância para a descrição teleparalela da gravitação. Parte delas serão discutidas na seção a seguir.

VII. TETRADAS

No Equivalente Teleparalelo à Relatividade Geral, utiliza-se como arcabouço geométrico um fibrado. O espaço base desse fibrado é uma variedade 4-dimensional de caráter Riemanniano, responsáveis por representar o espaço-tempo - isto é, o espaço físico no qual ocorrem os fenômenos gravitacionais (bem como, naturalmente, os demais fenômenos físicos). Denomina-se a base desse fibrado, então, "espaço externo" ou "espaço físico"; em sua descrição, são usados índices gregos, da forma $\{\mu, \nu, \rho = 0, 1, 2, 3\}$, os quais são chamados "índices externos" (ALDROVANDI; PEREIRA, 2012).

A cada um dos pontos do espaço externo, associa-se um espaço tangente, o qual corresponde às fibras no âmbito do arcabouço geométrico do fibrado, denominado "espaço interno". Em sua descrição, são utilizados índices latinos, da forma $\{i, j, k = 0, 1, 2, 3\}$, os quais recebem o nome de "índices internos" ou, ainda, de "índices algébricos".

Nesse contexto, assume papel fundamental objetos denominados "tetradas", aos quais nos referimos brevemente na seção III. As tetradas, indicadas por h^a_μ , indicam um campo - denominado "campo de tetradas" - o qual pode ser interpretado como um sistema de referência anexado a algum observador no espaço-tempo. Isto é, tetradas são conjuntos de vetores, munidos de propriedades de ortonormalidade, que descrevem o movimento de algum observador movendo-se ao longo de dada linha de mundo no espaço-tempo; a partir de suas componentes, é possível obter informações a respeito da velocidade e da aceleração de sistemas de referência (SPANIOL, 2011) (D'INVERNO, 1998).

O papel de tais objetos na construção geométrica do Teleparalelismo, porém, vai além de sua interpretação como sistema de referência, pois a partir das tetradas induz-se, no espaço, uma métrica $g_{\mu\nu}$, por intermédio de uma relação dada pela expressão

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} h^a_\mu h^b_\nu. \quad (56)$$

A métrica é um objeto de suma importância para a RG de Einstein pois é ela a responsável não somente por definir a noção de distância no espaço-tempo, como também por determinar qual geometria este assume. Assim, ao induzir uma métrica, as tetradas são as responsáveis por relacionar os espaços externo e interno, conforme indica a equação (56). Isto é, na

medida em que possuem índices internos e externos, é possível contraí-los com a métrica de Minkowski η_{ab} , relativa ao espaço tangente (interno), e obter a métrica Riemanniana $g_{\mu\nu}$, relativa ao espaço físico (externo) - situação descrita pela equação (56). O inverso dessa mesma equação descreve a situação contrária: é possível contrair tetradas com a métrica $g_{\mu\nu}$ e obter a métrica de Minkowski.

Dessarte, $h^a{}_\mu$ é capaz de projetar um vetor U^μ do espaço-tempo no espaço tangente,

$$U^a = h^a{}_\mu U^\mu, \quad (57)$$

enquanto sua inversa, $h_a{}^\mu$, é capaz de trazer vetores U^a do espaço tangente ao espaço-tempo,

$$U^\mu = h_a{}^\mu U^a, \quad (58)$$

conforme indicado em (SPANIOL, 2011).

Tetradas são importantes pois, enquanto na RG, é a amétrica $g_{\mu\nu}$ ¹⁸ o ente fundamental para a descrição da interação gravitacional, no Teleparalelismo são as tetradas os objetos responsáveis por assumir esse papel.

VIII. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao propor um material voltado para o estudo de teorias alternativas específicas - como é o caso do presente trabalho -, consideramos pertinente a aquisição de noções a respeito do desenvolvimento histórico das teorias voltadas para a descrição da Gravitação. Nesse escopo, Newton foi responsável por desenvolver a Teoria da Gravitação Universal, a qual demonstrou grande capacidade de previsão e de explicação para movimentos e estruturas antes desconhecidas. Tal teoria, apesar disso, possui limitações - podemos citar, como exemplo, a descrição do movimento (retrógrado) do planeta Mercúrio. Seguindo o panorama que levou ao desenvolvimento da teoria teleparalela e das $f(T)$, salienta-se como foi então que, com o objetivo de apresentar uma teoria gravitacional que solucionasse tais limitações, o físico alemão Albert Einsteins desenvolveu a Teoria da Relatividade Geral.

A teoria de Einstein foi capaz de expandir os horizontes da física ao descrever corretamente uma miríade de fenômenos não contemplados pelo formalismo newtoniano. Todavia, a RG destoa dos formalismos utilizados na descrição das demais interações fundamentais, na medida em que o Eletromagnetismo e as interações Nucleares Forte e Fraca são descritos a partir de Teorias de Calibre, ou Teorias de Gauge. Tais teorias descrevem essas três interações através de campos, enquanto a RG descreve a Gravitação por intermédio da geometria espaço-temporal. Tal discrepância coloca-se, aparentemente, como um dos fatores responsáveis por dificultar, ou até mesmo impedir, a unificação da Gravitação com as demais interações fundamentais.

Com isso em mente, durante o século XX, diversos cientistas, inclusive Albert Einstein, tentaram desenvolver teorias que contornassem essa situação. Dentre estas, surgiu a teoria Teleparalela, ou o Teleparalelismo, que, como vimos, tem como objetivo descrever a Gravitação como uma Teoria de Calibre. Com isso, esse formalismo visa não somente

¹⁸Ou as conexões de Levi-Civita. Ver (CARROLL, 2004) para uma discussão a respeito do papel da métrica e das conexões como objetos fundamentais da descrição da gravitação.

facilitar a unificação da gravitação com as demais interações fundamentais, como também solucionar limitações que a própria Relatividade Geral apresenta.

Dado o interesse que tal tipo de teoria suscita, neste trabalho apresentamos algumas das ferramentas que julgamos relevantes para a sua compreensão. Com isso, pretendemos que as discussões realizadas possam servir como base inicial para a apreensão de assuntos que constituem o cerne do Teleparallelismo Relativístico e, conseqüentemente, de teorias como as $f(T)$, que generalizam a teoria telepara pela por intermédio de modificações na lagrangiana da teoria (GOLOVNEV; GUZMÁN, 2021).

Naturalmente, não se propõe que o presente material esgote o assunto, ou mesmo que sirva como fonte ou guia único para o estudo dos tópicos nele constantes (ou assuntos a estes correlatos). Ressaltamos que se visa, com este artigo, a construção de uma base que permita aos interessados no estudo do assunto uma aproximação mais amigável ao tema - anseio instigado nos autores ao longo do processo de aprendizagem desses mesmos temas.

Sob tais perspectivas, foi elaborada uma exposição de alguns tópicos relevantes para a construção de tal base teórica. Realizou-se, tanto quanto possível, um processo de transposição do conhecimento relativo ao ferramental matemático inerente à Teoria de Grupos, às Teorias de Calibre, à geometria diferencial e às tetradas. Espera-se que, aos interessados, seja possível aprofundar e refinar a formalização dos conceitos aqui trabalhados, bem como expandi-los para tópicos além daqueles tratados - dada a vastidão do arcabouço teórico relativo a esse campo de estudo.

REFERÊNCIAS

- ALDROVANDI, R.; PEREIRA, J. Teleparallelism: A new way to think the gravitational interaction. *arXiv preprint arXiv:1506.03654*, 2015. 9, 10
- ALDROVANDI, R.; PEREIRA, J. G. *Teleparallel gravity: an introduction*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 173. 7, 16, 19, 29
- ALDROVANDI, R.; PEREIRA, J. G. *An introduction to geometrical physics*. [S.l.]: World scientific Publishing Company, 2016. 9, 10, 13, 15, 19, 22, 23, 28
- ANDRADE, V. D.; PEREIRA, J. Gravitational lorentz force and the description of the gravitational interaction. *Physical Review D*, APS, v. 56, n. 8, p. 4689, 1997. 19
- ARISTÓTELES. *Física I-II*. [S.l.]: Campinas, SP; Editora da Unicamp, 2009. 8
- BALOLA, R. *Princípios matemáticos da filosofia natural: a lei da inércia*. Tese (Doutorado), 2011. 8
- BASILAKOS, S. et al. Noether symmetries and analytical solutions in $f(t)$ cosmology: A complete study. *Physical Review D*, APS, v. 88, n. 10, p. 103526, 2013. 10
- CAI, Y.-F. et al. $f(t)$ teleparallel gravity and cosmology. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 79, n. 10, p. 106901, 2016. 7, 10

- CAPOZZIELLO, S.; LAMBIASE, G. Open problems in gravitational physics. *arXiv preprint arXiv:1409.3370*, 2014. 7
- CAPOZZIELLO, S.; LAURENTIS, M. D. Extended theories of gravity. *Physics Reports*, Elsevier, v. 509, n. 4-5, p. 167–321, 2011. 7, 17
- CAPOZZIELLO, S.; LAURENTIS, M. D. Extended gravity: State of the art and perspectives. In: WORLD SCIENTIFIC. *THE THIRTEENTH MARCEL GROSSMANN MEETING: On Recent Developments in Theoretical and Experimental General Relativity, Astrophysics and Relativistic Field Theories*. [S.l.], 2015. p. 1097–1112. 7
- CARROLL, S. M. *An Introduction to General Relativity: Spacetime and Geometry*. San Francisco: Addison Wesley, 2004. 22, 24, 30
- D'INVERNO, R. *Introducing Einstein's Relativity*. [S.l.]: Oxford University Press, 1998. 9, 29
- GOLOVNEV, A.; GUZMÁN, M.-J. Foundational issues in f (t) gravity theory. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, World Scientific, p. 2140007, 2021. 31
- GRIFFITHS, D. J. *Introduction to electrodynamics* fourth edition. 2021. 18
- HUGHES, S. *Introduction and the geometric viewpoint on physics*. MIT OpenCourseWare, 2020. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=iRVfaR3N5K4&list=PLU14u3cNGP629n_3fX7HmKKgin_rqGzbx>. Acesso em: 15/01/2022. 22
- ISHAM, C. J. *Modern differential geometry for physicists*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 1999. v. 61. 22
- JIMÉNEZ, J. B.; HEISENBERG, L.; KOIVISTO, T. S. The geometrical trinity of gravity. *Universe*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 5, n. 7, p. 173, 2019. 9, 10
- KREYSZIG, E. *Introductory functional analysis with applications*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1991. v. 17. 12
- LORENTZ, H. A. et al. *The principle of relativity: a collection of original memoirs on the special and general theory of relativity*. [S.l.]: Courier Corporation, 1952. 9, 10
- MALUF, J. W. The teleparallel equivalent of general relativity. *Annalen der Physik*, Wiley Online Library, v. 525, n. 5, p. 339–357, 2013. 10
- MORIYASU, K. *An elementary primer for gauge theory*. [S.l.]: World Scientific, 1983. 16
- MÜLLER, D. et al. Future dynamics in f (r) theories. *The European Physical Journal C*, Springer, v. 75, n. 1, p. 1–12, 2015. 7
- NAKAHARA, M. *Geometry, topology and physics*. [S.l.]: CRC press, 2003. 22
- NEWTON, I. *Principia - Princípios Matemáticos de Filosofia Natural, Livro II: O Movimento dos Corpos (em Meios com Resistência) e Livro III: O Sistema do Mundo (Tratado Matemático)*. [S.l.]: Editora da Universidade de São Paulo, 2012. v. 2. 8

NEWTON, I. *Principia - Princípios Matemáticos de Filosofia Natural, Livro 1*. [S.l.]: Editora da Universidade de São Paulo, 2016. v. 1. 8

PIATTELLA, O. F. O artigo fundador da teoria da relatividade restrita: Sobre a eletrodinâmica dos corpos em movimento. *Cadernos de Astronomia*, v. 1, n. 1, p. 157–176, 2020. 9

RUBAKOV, V. *Classical theory of gauge fields*. [S.l.]: Princeton University Press, 2009. 17, 18

SCHULLER, F. *A thorough introduction to the theory of general relativity*. 2015. The WE-Heraeus International Winter School on Gravity and Light, Linz, Austria.
<https://www.youtube.com/playlist?list=PLFeEvEPtX_0S6vxxiiNPrJbLu9aK1UVC_>, Acesso em 11 out. 2021. 22

SCHUTZ, B. *A First Course in General Relativity*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009. 22

SCHWICHTENBERG, J. *Physics from symmetry*. [S.l.]: Springer, 2015. 11, 12, 15

SPANIOL, E. P. *Gravitoeletromagnetismo na Gravidade Teleparalela*. Tese (Doutorado) — Universidade de Brasília, Brasília, 12 2011. 29, 30

TORIBIO, A. M. V. *História da Física*. [S.l.]: Universidade Federal do Espírito Santo, Secretaria de Ensino a Distância, 2012, 2015. 8, 9

WYBOURNE, B. G. *Classical groups for physicists*. [S.l.]: John Wiley and Sons, Inc., New York, 1974. 13



A TRANSFORMAÇÃO DE KUSTAAHEIMO-STIEFEL E O ESPECTRO DE ENERGIA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO RELATIVÍSTICO NÃO-COMUTATIVO

THE KUSTAAHEIMO-STIEFEL TRANSFORMATION AND THE ENERGY SPECTRUM OF THE RELATIVISTIC NON-COMMUTATIVE HYDROGEN ATOM

M. MAROCOLO¹, R.G.G. AMORIM^{1,2}

¹Instituto de Física, Universidade de Brasília.

²Faculdade do Gama, Universidade de Brasília.

Resumo

Nesse artigo, o espectro de energia e a função de onda associada ao átomo de hidrogênio tridimensional serão encontradas. Para isso, a equação de Klein-Gordon independente do tempo será resolvida para uma partícula sem spin com o auxílio da transformação de Kustaanheimo-Stiefel.

Palavras-chave: Espectro de energia; Função de onda; Átomo de hidrogênio; Equação de Klein-Gordon; Partícula sem spin; Transformação de Kustaanheimo-Stiefel

Abstract

In this article, the energy spectrum and the wave function associated with the tridimensional hydrogen atom will be determined. For that, the time-independent Klein-Gordon equation will be solved for a spinless particle with the aid of the Kustaanheimo-Stiefel transformation.

Keywords: Energy spectrum; Wave function; Hydrogen atom; Klein-Gordon equation; Spinless particle; Kustaanheimo-Stiefel Transformation.

I. INTRODUÇÃO

A mecânica quântica surgiu da experimentação e da observação, aparecendo para explicar o comportamento de sistemas físicos atômicos e subatômicos. O surgimento de ideias como o comportamento dual da luz, comprovada por Thomas Young em 1803, a radiação de corpo negro, enunciada por Gustav Kirchhoff em 1859 e a sugestão de quantização da energia

de Ludwig Boltzmann em 1877 foram as bases da mecânica quântica (CARUSO; OGURI, 2007). Com isso, ficou nítida a necessidade da criação de uma base matemática e física para descrever esses sistemas quânticos.

Após todo esse embasamento, noções sobre autovalores, autovetores, operadores e comutatividade foram usados juntamente com o conceito de função de onda e estado quântico em busca de equações que descrevessem esses sistemas.

Por se mostrar abstrata no início, várias interpretações sobre a mecânica quântica vieram para ajudar na sua visualização. A mais famosa é a interpretação de Copenhague (EINSTEIN, 2014), que reflete uma natureza probabilística da mecânica quântica e propõe como o ato de observar pode afetar esses sistemas. Porém, também há a interpretação de Bohm, que afirma o postulado Louis de Broglie e diz que a função de onda é responsável por carregar e guiar a partícula.

Em 1926, Erwin Schrödinger publicou sua equação para descrever como um estado quântico ou uma função de onda ψ evolui no espaço e no tempo (SCHRÖDINGER, 1926), como pode ser visto a seguir na equação (1) a seguir.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

A equação foi de extrema importância para a época e outras equações apareceram para acrescentar algo a mais nela, seja considerando o *spin* da partícula, efeitos eletromagnéticos e a relatividade. Com isso, a equação de Klein-Gordon veio para descrever como um estado quântico se comporta em velocidades próximas à da luz já que a equação Schrödinger não é consistente com relatividade especial.

Para solucionar essas equações, ou seja, encontrar as funções de onda e os níveis de energia, algumas técnicas de resolução de equações diferenciais começaram a ser implementadas, sendo a mais comumente utilizada a separação de variáveis. Além disso, a mudança do sistema de coordenadas juntamente com transformadas, transformações lineares e não lineares auxiliam no momento da resolução.

Esse artigo apresentará na seção II a equação de Klein-Gordon e a energia potencial elétrica. Na seção III a transformação de Kustaanheimo-Stiefel será mostrada. Na seção IV a transformação será aplicada à equação de Klein-Gordon para a obtenção da função de onda e na seção V, os níveis de energia associados. E por fim, na seção VI serão feitas as conclusões finais.

II. EQUAÇÃO DE KLEIN-GORDON E O POTENCIAL DE COULOMB

A equação de Klein-Gordon é a equação de rege como uma partícula quântica, sem *spin* e próximas a velocidade da luz evolui espacial e temporalmente. Ela tem algumas representações, sendo a mais comum a expressão no espaço de momento, como pode ser visto na equação (2) a seguir, onde o operador momento foi isolado.

$$\hat{\mathbf{p}}^2 \psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hat{E}^2}{c^2} - m^2 c^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

A equação acima é a relação de energia-momento da relatividade, porém, o momento

linear não é clássico e sim o operador quântico $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Outro termo de extrema importância na equação (2) é o operador energia $\hat{E}$, que para o átomo de hidrogênio será a energia do elétron E mais a energia potencial V .

A energia potencial que dita a interação próton-elétron é a energia potencial elétrica ou potencial de Coulomb que é expressa pela equação a seguir.

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|} \quad (3)$$

Como pode ser visto na equação (3) o potencial elétrico não depende do tempo, ou seja, na equação de Klein-Gordon, a função de onda será em função somente do espaço, ou seja, $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})$ ou para simplificar a notação, somente ψ .

Dessa maneira, substituindo $\hat{E} = E + V(\mathbf{r})$ na equação (2) tem-se a equação (4) a seguir.

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = \left(\frac{E^2}{c^2} + \frac{2e^2E}{4\pi\epsilon_0 c^2 |\mathbf{r}|} + \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 c^2 |\mathbf{r}|^2} - m^2 c^2 \right) \psi \quad (4)$$

Considerando $\frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 c^2} \cong 0$ e substituindo $|\mathbf{r}| = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ pode-se obter a equação (5).

$$\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) \psi - \frac{\kappa}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \psi = \varepsilon \psi \quad (5)$$

Em que $\kappa = \frac{2e^2E}{4\pi\epsilon_0 c^2}$ e $\varepsilon = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2$.

III. TRANSFORMAÇÃO DE KUSTAAHEIMO-STIEFEL

A transformação de Kustaanheimo-Stiefel apareceu na tentativa de generalizar a transformação de Levi-Civita (BREITER; LANGNER, 2018). Porém, devido ao teorema de Hurwitz (AHLFORS, 1966), essa transformação não é possível para o caso tridimensional, sendo possível ser feita somente em quatro dimensões. Logo, a transformação de Kustaanheimo-Stiefel é uma transformação não linear $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que obedece as seguintes equações a seguir com a condição $vdu - udv - wdt + tdw = 0$.

$$\begin{aligned} x &= 2(us - vw) \\ y &= 2(uw + vs) \\ z &= u^2 + v^2 - s^2 - w^2 \end{aligned} \quad (6)$$

Considerando a função $f(x, y, z)$ ou $f(x(u, v, s, w), y(u, v, s, w), z(u, v, s, w))$ pode-se aplicar a regra da cadeia em f para encontrar suas derivadas parciais.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial u} \\ \frac{\partial}{\partial v} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2s & 2w & 2u \\ -2w & 2s & 2v \\ 2u & 2v & -2s \\ -2v & 2u & -2w \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Isolando as derivadas parciais em x , y e z tem-se as equações a seguir.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{1}{2\rho} \left(s \frac{\partial}{\partial u} - w \frac{\partial}{\partial v} + u \frac{\partial}{\partial s} - v \frac{\partial}{\partial w} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{1}{2\rho} \left(w \frac{\partial}{\partial u} + s \frac{\partial}{\partial v} + v \frac{\partial}{\partial s} + u \frac{\partial}{\partial w} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{1}{2\rho} \left(u \frac{\partial}{\partial u} + v \frac{\partial}{\partial v} - s \frac{\partial}{\partial s} - w \frac{\partial}{\partial w} \right)\end{aligned}$$

Em que $\rho = u^2 + v^2 + t^2 + w^2 = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Logo, pode-se aplicar os operadores momento linear e obter as relações a seguir.

$$p_x = \frac{1}{2\rho} (sp_u - wp_v + up_s - vp_w) \quad (7)$$

$$p_y = \frac{1}{2\rho} (wp_u + sp_v + vp_s + up_w) \quad (8)$$

$$p_z = \frac{1}{2\rho} (up_u + vp_v - sp_s - wp_w) \quad (9)$$

IV. FUNÇÃO DE ONDA

Com os operadores momento no domínio de Kustaanheimo-Stiefel pode-se agora, transformar a equação (5) de $\mathbb{R}^3$ para $\mathbb{R}^4$, ou seja $\psi = \psi(u, v, s, w)$, com as equações (7), (8) e (9). Logo, se obtém a equação a seguir, sob a condição $vp_u - up_v - wp_s + sp_w = 0$.

$$\left(p_u^2 + p_v^2 + p_s^2 + p_w^2 \right) \psi - \varepsilon(u^2 + v^2 + s^2 + w^2)\psi = 2\kappa\psi \quad (10)$$

Considerando a não comutatividade entre 2 planos distintos, o plano $u - v$ e o plano $s - w$, eles satisfazem $[\hat{u}, \hat{v}] = [\hat{s}, \hat{w}] = i\theta$. Logo, os operadores momento linear e posição linear podem ser dados pelas relações a seguir.

$$\begin{cases} \hat{p}_u = -i\hbar \frac{\partial}{\partial u} \\ \hat{p}_v = -i\hbar \frac{\partial}{\partial v} \\ \hat{p}_s = -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \\ \hat{p}_w = -i\hbar \frac{\partial}{\partial w} \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{u} = u - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial u} \\ \hat{v} = v - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial v} \\ \hat{s} = s - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial s} \\ \hat{w} = w - i\frac{i\theta}{2} \frac{\partial}{\partial w} \end{cases} \quad (11)$$

Substituindo as relações de (11) na equação (10) chega-se na equação a seguir.

$$-\left(\hbar^2 - \frac{\varepsilon\theta^2}{4} \right) \nabla_{ks}^2 \psi + i\varepsilon \left(u \frac{\partial}{\partial v} - v \frac{\partial}{\partial u} + w \frac{\partial}{\partial s} - s \frac{\partial}{\partial w} \right) \psi - \varepsilon\rho\psi = 2\kappa\psi \quad (12)$$

Em que ∇_{ks}^2 é o laplaciano nas coordenadas de Kustaanheimo-Stiefel, ou seja, $\nabla_{ks}^2 = \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial w^2}$.

Fazendo a separação de variáveis $\psi(u, v, s, w) = g(u, v)h(s, w)$ e substituindo em (12), chega-se na equação a seguir, em que $\lambda = \frac{\varepsilon\theta^2}{4} + \hbar^2$.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{g} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \right) + \frac{i\varepsilon\theta}{g} \left(u \frac{\partial g}{\partial v} - v \frac{\partial g}{\partial u} \right) - \varepsilon(u^2 + v^2) - \kappa \\ = \\ \frac{\lambda}{h} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial w^2} \right) + \frac{i\varepsilon\theta}{h} \left(w \frac{\partial h}{\partial s} - s \frac{\partial h}{\partial w} \right) - \varepsilon(s^2 + w^2) - \kappa \end{aligned}$$

Como a equação é análoga para g e h pode-se resolver somente para uma delas. Aqui será resolvida somente para g e a solução para h será encontrada por analogia.

Fazendo o lado direito da equação igual a Δ , tem-se a equação a seguir.

$$\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} + \frac{i\varepsilon\theta}{\lambda} \left(u \frac{\partial g}{\partial v} - v \frac{\partial g}{\partial u} \right) - \frac{\varepsilon}{\lambda}(u^2 + v^2)g - (\kappa + \Delta)g = 0 \quad (13)$$

Fazendo uma nova substituição de variáveis $q = u^2 + v^2$ na equação (13), logo $g(u, v) = g(q)$ e tem-se a equação a seguir.

$$q \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} + \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\varepsilon}{4\lambda} q g - \frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} g = 0 \quad (14)$$

Fazendo $g(q) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}q} \phi(q)$ e substituindo na equação (14).

$$q \frac{\partial^2 \phi}{\partial q^2} + \left(1 - 2q \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}} \right) \frac{\partial \phi}{\partial q} + \frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} \phi = 0 \quad (15)$$

Uma nova substituição de variáveis foi feita, fazendo $\eta = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}q$ para chegar na próxima equação.

$$\eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + (1 - \eta) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \sqrt{\frac{\lambda}{\varepsilon}} \left(\frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}} \right) \phi = 0 \quad (16)$$

A equação (16) é equação diferencial de Laguerre com solução sendo os polinômios de Laguerre dado pela expressão a seguir.

$$L_n(\eta) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{n!}{(n-k)!(k!)^2} \eta^k$$

Além disso, o termo que acompanha ϕ (vindo da equação da função g) é um número inteiro n_1 e para a equação da função h é um número inteiro n_2 . Logo, para a variável g tem-se a solução (17) e para h em (18) a seguir.

$$g(u, v) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2)} L_{n_1} \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2) \right) \quad (17)$$

$$h(s, w) = e^{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2)} L_{n_2} \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2) \right) \quad (18)$$

Logo, a função de onda no espaço de Kustaanheimo-Stiefel é dada pela multiplicação da equação (17) e da equação (18) e é vista na equação (19).

$$\psi(u, v, s, w) = e^{-\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}\rho} L_{n_1} \left(2\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}(u^2 + v^2) \right) L_{n_2} \left(2\sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}}(s^2 + w^2) \right) \quad (19)$$

V. NÍVEIS DE ENERGIA

Como dito na seção IV os números que acompanham a função g é um número inteiro n_1 e para a função h é um número n_2 vistos na equação (20) e (21) a seguir.

$$n_1 = \sqrt{\frac{\lambda}{\epsilon}} \left(\frac{\kappa + \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}} \right) \quad (20)$$

$$n_2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\epsilon}} \left(\frac{\kappa - \Delta}{4\lambda} - \sqrt{\frac{\epsilon}{4\lambda}} \right) \quad (21)$$

Fazendo $N = n_1 + n_2 + 1$ ainda tem-se um número inteiro, logo, após manipulações chega-se na equação a seguir.

$$N^2 = \frac{\kappa^2}{4\lambda\epsilon} \quad (22)$$

Substituindo $\kappa = \frac{2e^2 E}{4\pi\epsilon_0 c^2}$, $\epsilon = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2$ e $\lambda = \frac{\epsilon \hbar^2}{4} + \hbar^2$ pode-se isolar a energia E chegando a equação a seguir.

$$aE^4 - bE^2 + d = 0 \quad (23)$$

Que tem solução dada pela equação (24).

$$E_N = \sqrt{\frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4ad}}{2a}} \quad (24)$$

Em que:

$$a = \frac{\theta^4}{c^4}$$

$$b = 2\theta^2 m^2 + \frac{4\hbar^2}{c^2} + \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0^2 c^4 N^2}$$

$$c = m^2 c^2 (\theta^2 m^2 c^2 + 4\hbar^4)$$

VI. CONCLUSÃO

A transformação de Kustaanheimo-Stiefel se mostrou muito útil na resolução da equação de Klein-Gordon para o átomo de hidrogênio tridimensional. Ela transformou um problema $\mathbb{R}^3$ em $\mathbb{R}^4$, que inicialmente não aparenta ajudar, porém, o problema em quatro dimensões pode ser solucionado com separação de variáveis em duas dimensões, ou seja " $\mathbb{R}^4 = \mathbb{R}^2 \mathbb{R}^2$ ".

A partir daí, técnicas de substituição de variáveis foram usadas para encontrar a solução da função de onda no espaço de Kustaanheimo-Stiefel, vista na equação (19).

Além disso, um resultado muito importante foi achado na equação (24). Observou-se que a energia depende de um número inteiro N , resultado condizente que a equação de Schrödinger, ou seja, mesmo considerando que o elétron é uma partícula relativística suas energia continuam quantizadas e a ideia sobre pacotes de energia permanecem valendo, assim como no caso não-relativístico.

REFERÊNCIAS

AHLFORS, L. *Complex analysis: An introduction to the theory of analytic functions of one complex variable*. 3. ed. Estados Unidos: McGraw-Hill, 1966. ISBN 0-07-000657-1. 36

BREITER, S.; LANGNER, K. The extended lissajous–levi-civita transformation. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, Estados Unidos, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10569-018-9862-4>>. 36

CARUSO, F.; OGURI, V. *Física Moderna: Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos*. 2. ed. São Paulo, Brasil: Elsevier, 2007. ISBN 85-352-1878-5. 35

EINSTEIN, A. *Letters on Wave Mechanics: Correspondence with H. A. Lorentz, Max Planck, and Erwin Schrödinger*. Estados Unidos: Open Road Integrated Media, 2014. ISBN 1480479888. 35

SCHRÖDINGER, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review Journals Archive*, Suíça, 1926. 35



OBTENÇÃO DA RELAÇÃO FUNCIONAL ENTRE POTENCIAIS EXATOS E POTENCIAIS OBTIDOS DA APROXIMAÇÃO LOCAL NA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE EM CERTOS SISTEMAS FINITOS

DERIVATION OF THE FUNCTIONAL RELATION BETWEEN EXACT POTENTIALS AND THOSE OBTAINED FROM THE LOCAL APPROXIMATION IN DENSITY FUNCTIONAL THEORY FOR CERTAIN FINITE SYSTEMS

CARINE ZARY DURÃES FROES, ANTONIO CARLOS PEDROZA

Universidade de Brasília, Instituto de Física

Resumo

Este artigo tem como objetivo determinar, para certos sistemas finitos, a relação entre os potenciais de troca e correlação exatos — potenciais que surgem na descrição de sistemas eletrônicos de muitos corpos pelas equações de Kohn-Sham — e aqueles obtidos pela aproximação LDA, "Local Density Approximation" da Teoria do Funcional da Densidade. A possibilidade de encontrar tais relações pode permitir a identificação de potenciais exatos desconhecidos de outros sistemas, utilizando os potenciais conhecidos obtidos por meio da aproximação local LDA. Para isso, foram analisadas as relações entre esses potenciais para os átomos de Berílio (Be) e Lítio (Li), usando-se potenciais exatos previamente obtidos. Os resultados mostraram que o potencial exato não é determinado pela multiplicação do potencial (LDA) por um fator constante para cada átomo. No entanto, isso pode constituir-se numa aproximação extremamente razoável.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade; Potenciais de Troca e Correlação; Aproximação Local; Be; Li.

Abstract

This article aims to determine, for certain finite systems, the relation between the exact exchange-correlation potentials — which arise in the description of many-body electronic systems through the Kohn-Sham equations — and those obtained through the Local Density Approximation (LDA) of Density Functional Theory. The possibility of finding such a relationship may allow for the identification of unknown exact potentials in other systems by using known potentials obtained through the LDA. To this end, the relations between these potentials were analyzed for the

Beryllium (Be) and Lithium (Li) atoms, using previously obtained exact potentials. The results showed that the exact potential is not determined by simply multiplying the LDA potential by a constant factor for each atom. However, this may serve as an extremely reasonable approximation.

Keywords: DFT; Exchange-Correlation Potentials; LDA; Be; Li.

I. INTRODUÇÃO

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) é uma forma alternativa à função de onda multidimensional para representar um sistema de muitos elétrons. Ela se baseia na ideia de que a densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$ contém todas as informações sobre o sistema, o que permite calcular suas propriedades eletrônicas (HOHENBERG; KOHN, 1964; PEDROZA, 2016). Na abordagem usual da DFT a equação fundamental é a equação de Kohn-Sham, (KOHN; SHAM, 1965) na qual os elétrons interagem com um potencial efetivo que inclui o potencial externo aos elétrons, a interação coulombiana entre densidades e o potencial de troca-correlação. Este último termo é obtido formalmente como a derivada funcional do funcional de troca e correlação.

Assim, dentro do formalismo da DFT, a escolha do funcional de troca e correlação é crucial para a precisão dos cálculos. A Aproximação da Densidade Local (LDA, do inglês "*Local Density Approximation*") é uma das formas mais simples de aproximar esse funcional. Na LDA, considera-se um gás de elétrons em um fundo de cargas positivas inertes, em que as propriedades de troca e correlação em cada ponto do sistema podem ser descritas como se os elétrons formassem, localmente em torno desse ponto, um gás de elétrons homogêneo (PARR; YANG, 1995).

O objetivo motivador deste trabalho foi o de buscar determinar a relação entre potenciais exatos e aqueles obtidos pela LDA para certos sistemas finitos, motivado pela possibilidade de encontrar relações gerais entre esses potenciais que possam ser utilizados em sistemas nos quais os potenciais exatos não são conhecidos. Em particular, procuramos verificar, nos casos estudados, se é razoável a aproximação que considera como constante a razão entre esses potenciais de troca e correlação, exato e LDA.

II. METODOLOGIA

A metodologia utilizada no desenvolvimento desse projeto consistiu na busca de uma possível relação entre os potenciais exatos de alguns sistemas finitos e aqueles obtidos pela LDA. Foram utilizados dados da densidade exata, do potencial exato, obtido por um dos autores e do potencial LDA (obtido através da Aproximação da Densidade Local). (ALMBLADH; PEDROZA, 1984). Assim, foi desenvolvido um programa em Python para extrair essas informações de arquivos de texto e gerar gráficos que mostrem diferentes relações entre esses potenciais em função da densidade exata para átomos de *Be* e *Li*.

III. TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

A Teoria do Funcional da Densidade é usada como alternativa para descrever de forma realística um sistema de muitos elétrons (PEDROZA, 2016). Essa teoria transforma o complicado problema de resolver a equação de Schroedinger para uma função de onda de N elétrons $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, em um problema muito mais simples, que depende apenas da densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$ na coordenada $\vec{r}$ (PARR; YANG, 1995), onde

$$\rho(\vec{r}) = \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N. \quad (1)$$

I. Motivação

Para entender a situação que é resolver um sistema de muitos elétrons, considere a equação de Schroedinger independente do tempo

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

com a evolução temporal dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

onde ψ é a parte espacial da solução e Ψ inclui tanto a parte espacial como a temporal. A Hamiltoniana desse sistema é dada por

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

onde, o primeiro termo representa o operador energia cinética, o segundo termo o potencial externo aos elétrons e o último termo é a repulsão coulombiana entre os elétrons (PEDROZA, 2016).

A energia total do sistema pode ser obtida calculando o valor esperado da Hamiltoniana:

$$\begin{aligned} E[\psi] &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \\ &= \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \hat{H} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N, \end{aligned} \quad (4)$$

sendo, portanto, um funcional da função de onda $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, a qual é solução da equação (2).

A função de onda $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, ignorando as variáveis de spin, é uma função de $3N$ variáveis, onde 3 é o número de dimensões e N representa o número de elétrons. Para $N > 1$, a equação (2) possui apenas soluções numéricas, que, mesmo assim, podem não ser viáveis devido às limitações computacionais (PEDROZA, 2016). Por exemplo, o átomo de Ne possui 10 elétrons, resultando em 30 variáveis espaciais na função de onda. Dessa forma, para gerar uma malha de apenas 10 pontos, seria necessário armazenar 10^{30} dados, ou seja,

10^{30} bytes. Como cada HD de 1TB armazena em torno de 10^{12} bytes, seriam necessários 10^{18} HDs para armazenar apenas os dados do Ne (PEDROZA, 2016).

II. Teoremas de Hohenberg-Kohn

Em um sistema eletrônico modelado pela Hamiltoniana dada pela equação (3), a função de onda e a energia do estado fundamental são obtidas ao minimizar o funcional de energia apresentado na equação (4). Para um sistema com N elétrons, a seleção da função $w(\vec{r})$ determina a Hamiltoniana, e a combinação com o número N determina as características do estado fundamental e as propriedades eletrônicas (HOHENBERG; KOHN, 1964; PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995).

II.1 Teorema 1

O primeiro teorema de Hohenberg-Kohn (1964) afirma que a energia total de um sistema é um funcional da densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$ desse sistema. (HOHENBERG; KOHN, 1964; PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995).

A demonstração deste teorema é simples. No caso não degenerado, basta escolher dois potenciais diferentes $w_1(\vec{r})$ e $w_2(\vec{r})$ com $w_1(\vec{r}) - w_2(\vec{r}) \neq cte$, mas determinando a mesma densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$. O resultado dessa hipótese é um absurdo matemático. É possível encontrar mais detalhes sobre a prova desse teorema na referência (HOHENBERG; KOHN, 1964; PEDROZA, 2016).

Portanto, uma dada densidade eletrônica do estado fundamental só pode gerar um único potencial externo aos elétrons. Assim, uma vez determinada a densidade eletrônica, o potencial externo e a Hamiltoniana do sistema também estarão definidos como funcionais da densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$. Com a Hamiltoniana, é possível resolver a equação de Schrödinger (2) e determinar a função de onda ψ , que também será funcional de $\rho(\vec{r})$, assim como qualquer propriedade física do sistema. Esse método transforma um problema de $3N$ variáveis em um problema de 3 variáveis espaciais, independentemente do número de elétrons. Além disso, o método pode descrever qualquer estado energético do sistema, não se limitando apenas ao estado fundamental.

II.2 Teorema 2

O segundo Teorema de Hohenberg-Kohn (1964) (HOHENBERG; KOHN, 1964; PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995) postula que o funcional da energia $E_w[\rho]$ atinge o seu valor mínimo em um determinado ρ_1 com o seu valor sendo a energia do estado fundamental $E_0 = E_w[\rho_1]$ (PARR; YANG, 1995), ou seja,

$$E_0 \leq E_w[\rho]. \quad (5)$$

para todo $\rho \neq \rho_1$. A prova deste teorema, leva em conta o Teorema 1. É possível encontrar mais detalhes sobre a prova desse teorema em (PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995).

Assumindo que $E_w[\rho]$ é uma funcional diferenciável, a equação (5) requer que a densi-

dade do estado fundamental satisfaça o princípio variacional da energia,

$$\frac{\delta (E_w[\rho] - \lambda \int \rho(\vec{r}) d^3r)}{\delta \rho(\vec{r})} = 0, \quad (6)$$

onde δ indica uma derivada funcional, e λ é um multiplicador de Lagrange (PEDROZA, 2016), resultante do vínculo de a integral da densidade eletrônica sobre todo o volume produzir o número total N de elétrons. A energia do estado fundamental de um sistema com N elétrons pode ser obtida variando $\rho(\vec{r})$ até que se atinja o valor mínimo de $E_w[\rho]$ (PEDROZA, 2016).

III. Kohn-Sham

III.1 O Método de Kohn-Sham

Os *Teoremas 1 e 2* asseguram a existência do funcional $E_w[\rho]$ e confirmam que a energia pode ser calculada através do princípio variacional 6. No entanto, esses teoremas não fornecem uma maneira direta de determinar a expressão do funcional para a energia (PEDROZA, 2016). No entanto, a energia do estado fundamental de um sistema de muitos elétrons pode ser obtida pela equação (4), que pode ser escrita como:

$$E_w[\rho] = \int w(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3r + F[\rho], \quad (7)$$

onde

$$F[\rho] = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{ee} | \psi \rangle. \quad (8)$$

Aplicando-se a equação (7) na equação (6), obtém-se

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} + w(\vec{r}) = \lambda, \quad (9)$$

onde novamente λ é o multiplicador de Lagrange associado à restrição $\int \rho(\vec{r})d^3r = N$ (PARR; YANG, 1995).

Do ponto de vista clássico, é possível usar a energia de interação entre densidades de carga para descrever o termo $\langle \psi | \hat{V}_{ee} | \psi \rangle$ (PEDROZA, 2016). Ou seja, sendo $\rho(\vec{r})$ a densidade eletrônica em um ponto $\vec{r}$ e $\rho'(\vec{r}')$ a densidade eletrônica em um ponto $\vec{r}'$,

$$V[\rho] = \langle \psi | \hat{V}_{ee} | \psi \rangle = \frac{1}{2} \int \rho(\vec{r})v(\vec{r} - \vec{r}')\rho(\vec{r}')d^3r.$$

Com isso, a equação (9) se torna,

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

onde $V_H(\vec{r}) = \delta V[\rho] / \delta \rho(\vec{r})$ é chamado de Potencial de Hartree. Dessa forma, o único termo desconhecido passa a ser o funcional da energia cinética $T[\rho]$ que inclui, além da energia

cinética do sistema, as correções que aparecem ao se passar da interação coulombiana clássica para a quântica (PEDROZA, 2016).

Uma possibilidade para obter esse funcional, é o modelo de Thomas-Fermi, que constrói formas aproximadas para $\hat{T}[\rho]$ e $\hat{V}_{ee}$. No entanto, ele troca a acurácia pela simplicidade, tornando-se um método inacurado para o tratamento de átomos (PARR; YANG, 1995). Já o método de Khon-Sham faz o contrário, trocando a simplicidade pela acurácia, resultando num método que, apesar de exigir cálculos mais elaborados, produz uma descrição mais precisa dos sistemas eletrônicos, sendo capaz de obter mais detalhes da estrutura eletrônica, resultando em previsões mais realistas para as propriedades físicas e químicas dos átomos.

III.2 Equações de Kohn-Sham

A proposta de W. Kohn e L. Sham (PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995), foi utilizar outra forma para o funcional $F[\rho]$. De fato, adicionando e subtraindo um termo funcional da Energia Cinética relativo a um sistema de elétrons sem interação $T_0[\rho]$ na equação (8), pode-se escrever

$$F[\rho] = V[\rho] + T_0[\rho] + E_{xc}[\rho], \quad (10)$$

onde $E_{xc}[\rho]$ é chamado de funcional da Energia de Troca e Correlação, que é matematicamente igual a $T[\rho] - T_0[\rho]$ e também inclui as correções ao se passar da interação coulombiana quântica para a clássica com o Potencial de Hartree (PEDROZA, 2016).

Com isso, a equação (9) se torna,

$$\frac{\delta T_0[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} + v_{efe}(\vec{r}) = \lambda, \quad (11)$$

onde

$$v_{efe}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + w(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}) \quad (12)$$

é chamado de Potencial Efetivo e o termo

$$v_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (13)$$

é chamado de Potencial de Troca e Correlação.

A equação (11), com a condição (13), é a mesma equação que seria obtida da Teoria do Funcional da Densidade quando aplicada a um sistema de elétrons não interagentes movendo-se em um potencial externo $v_{efe}(\vec{r})$ (PARR; YANG, 1995). Com isso, dado um potencial $v_{efe}(\vec{r})$, é possível obter a densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$ que satisfaz a equação (11) resolvendo a equação de Schroedinger para N elétrons não interagentes

$$\left[\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{efe}(\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}), \quad (14)$$

com

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2. \quad (15)$$

As equações (14) e (15) são chamadas de *Equações de Kohn-Sham*. Na equação (13), v_{efe} depende de $\rho(\vec{r})$, então as equações (12), (14) e (15) só podem ser resolvidas com um método auto-consistente (PARR; YANG, 1995). Isso porque, para obter $\phi_i(\vec{r})$, é preciso conhecer $V_H(\vec{r})$ e $v_{xc}(\vec{r})$, que dependem de $\rho(\vec{r})$, dado pela equação (15), que depende de $\phi_i(\vec{r})$ (PEDROZA, 2016). A solução desse problema começa partindo-se de funções conhecidas $\phi_i^{(0)}(\vec{r})$, que são usadas para a construção de $\rho^{(0)}(\vec{r})$ através da equação (15). Com $\rho^{(0)}(\vec{r})$, obtém-se $V_H^{(0)}(\vec{r})$ e $v_{xc}^{(0)}(\vec{r})$. Resolvendo-se a equação de Schroedinger (14), obtém-se novas funções $\phi_i^{(1)}(\vec{r})$. Esse processo é repetido até que o método atinja a auto-consistência, ou seja, que se recupere, na k -ésima iteração, as funções $\phi_i(\vec{r})$ da $(k-1)$ -ésima iteração. Quando isso ocorrer, juntamente com as funções de onda, serão obtidos $V_H(\vec{r})$ e $v_{xc}(\vec{r})$, e as energias ϵ_i terão atingidos a auto-consistência.

IV. Aproximação da Densidade Local (LDA)

As equações de Kohn-Sham (14) e (15) não estão completamente definidas, pois o termo $E_{xc}[\rho]$ (equação (13)) não é conhecido. Para obter o funcional para a energia de troca e correlação, Kohn e Sham consideraram partir de um gás eletrônico localmente homogêneo. No entanto, como um sistema composto por apenas elétrons não é estável devido à repulsão coulombiana, então, é adicionado um fundo de cargas positivas inertes para estabilizar o sistema (PEDROZA, 2016).

A aproximação de Kohn-Sham da densidade local, ou "*local - density approximation*" (LDA), é dada por:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}(\rho) d^3r, \quad (16)$$

onde $\epsilon_{xc}(\rho)$ é a Energia de Troca e Correlação por partícula de um gás de elétron uniforme de densidade ρ , que pode ser obtida localmente. O Potencial de Troca e Correlação correspondente será obtido pela equação (16) juntamente com a equação (13), resultando em

$$v_{xc}(\vec{r}) = \epsilon_{xc}(\rho) + \rho(\vec{r}) \frac{\partial \epsilon_{xc}(\rho)}{\partial \rho}.$$

A função ϵ_{xc} pode ser separada em termos de troca e correlação

$$\epsilon_{xc}(\rho) = \epsilon_x(\rho) + \epsilon_c(\rho).$$

A parte de troca $\epsilon_x(\rho)$ é conhecida (PARR; YANG, 1995), e dada por

$$\epsilon_x(\rho) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3\rho(\vec{r})}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Já o termo de correlação $\epsilon_c(r_{rs})$ só pode ser obtido numericamente. Os melhores resultados foram obtidos por Ceperley e Adler (PEDROZA, 2016), que calcularam a energia de correlação, ϵ_c , para um gás de elétrons uniforme em estados sem polarização de spins (paramagnético) e com polarização (ferromagnéticos) para diferentes valores da quantidade

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (17)$$

utilizando o método de Monte Carlo Quântico (PEDROZA, 2016; PARR; YANG, 1995; CEPERLEY; ALDER, 1980). Os valores obtidos por Ceperley e Adler foram reproduzidos por uma expressão analítica para ϵ_c em função de r_s evitando, assim, sucessivos procedimentos de interpolação num cálculo auto-consistente. Diferentes parametrizações para essa função analítica foram obtidas, como pode ver visto em (PEDROZA, 2016).

V. Aproximações não Locais

Embora os resultados obtidos usando a LDA tenham sido, em geral, melhores do que se poderia esperar de uma aproximação tão forte como essa, ainda assim, novas aproximações para o funcional de troca e correlação, E_{xc} , foram necessárias para uma descrição mais realistas das propriedades eletrônicas da matéria. Assim, surgiram as Aproximações de Gradiente Generalizado(GGA), a de meta-GGA, de Trocas Exatas, SCAN etc (PERDEW; BURKE; ERNZERHOF, 1996; PERDEW et al., 2005; ZIESCHE; KURTH; PERDEW, 1998; SUN; RUZSINSZKY; PERDEW, 2015; KRIEGER; LI; IAFRATE, 1992a; KRIEGER; LI; IAFRATE, 1992b; LI; KRIEGER; IAFRATE, 1993).

Essas novas aproximações tornaram-se tão complexas computacionalmente que em muitos casos são implementadas de forma não auto-consistentes. Elas são chamadas de pós auto-consistentes. Por exemplo, faz-se um cálculo auto-consistente numa aproximação mais simples e obtém-se as funções de onda e as energias de uma partícula. Essas funções são então usadas nas expressões para a energia total nas aproximações mais complexas.

Uma possibilidade de evitar essas dificuldades computacionais é a de obter o potencial de troca e correlação numa aproximação mais simples, por exemplo, a LDA, e por um fator de escala obter a esse potencial numa aproximação mais complexa. Essa proposta foi inicialmente feita por Cafiero e Gonzalez e aperfeiçoada por Lima et al. (CAFIERO; GONZALEZ, 2005; LIMA et al., 2007).

Segundo esse últimos autores, conhecido o potencial de troca e correlação numa dada aproximação A, então, esse potencial numa outra aproximação B pode ser obtido pela relação

$$v_{xc}^B(\vec{r}) = \frac{E_{xc}^A[\rho]v_{xc}^B(\vec{r}) - E_{xc}^B[\rho]v_{xc}^A(\vec{r})}{E_{xc}^A[\rho]} + F[\rho]v_{xc}^A(\vec{r}) \quad (18)$$

onde $E_{xc}^{A,B}[\rho]$ é o respectivo funcional de troca e correlação para a aproximação A e B; $v_{xc}^{A,B}(\vec{r})$ é o correspondente potencial de troca e correlação na aproximação A ou na B. Por sua vez, o fator $F[\rho]$ depende globalmente de cada densidade, mas não de cada coordenada espacial $\vec{r}$.

Eles também mostraram que o primeiro termo do lado direito da equação (18), em geral, é desprezível diante do segundo termo. Com isso, a relação entre os potenciais de troca e correlação das duas aproximações envolvidas passa a ser:

$$v_{xc}^B(\vec{r}) = F[\rho]v_{xc}^A(\vec{r}) \quad (19)$$

tornando a relação bem mais simples e prática se, claro, $F[\rho]$ for conhecido.

Toda a dedução feita para obter essa relação permanece se em lugar da aproximação B aparecer o potencial exato, ou seja, nos casos em que o potencial de troca e correlação exato for conhecido, é possível obter $F[\rho]$ a partir de uma dada aproximação A, por exemplo, a LDA.

Esses potenciais exatos são conhecidos para alguns sistemas finitos (ALMBLADH; PEDROZA, 1984) e a partir deles podemos obter numericamente $F[\rho]$. A obtenção desse fator constituiu no objetivo principal do presente trabalho.

IV. RESULTADOS OBTIDOS

Para buscar uma relação entre os potenciais de troca e correlação exatos (v_{xc}) e aqueles obtidos pela aproximação LDA (v_{xc}^{LDA}), foram elaborados gráficos utilizando dados obtidos por um dos autores do presente trabalho (ALMBLADH; PEDROZA, 1984), para os átomos de berílio e lítio. Para isso, foram desenvolvidos programas em Python para extrair os dados referentes a v_{xc} , v_{xc}^{LDA} e a densidade exata (ρ) de um arquivo texto, para obter relações entre esses potenciais para gerar as curvas desejadas para a investigação dessas relações.

Primeiramente, buscou-se estudar o comportamento das curvas da razão

$$\frac{v_{xc}}{v_{xc}^{LDA}} \quad (20)$$

em função da densidade local exata ρ . Em seguida, um procedimento análogo foi feito para

$$\frac{v_{xc} - v_{xc}^{LDA}}{v_{xc}}, \quad (21)$$

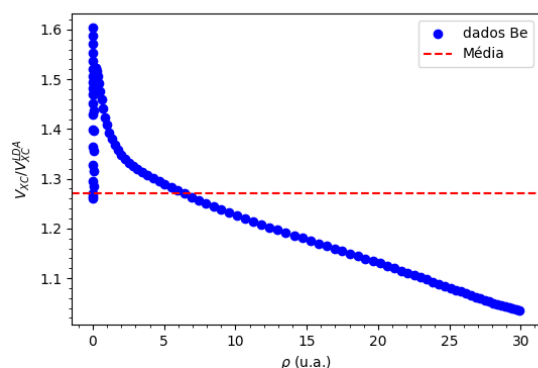
também em função da densidade local exata ρ .

A motivação para analisar essas duas relações decorre do fato que se os potenciais realmente obedecem a equação (19), com $F[\rho]$ constante, então as quantidades representadas nas equações (20) e (21) também serão constantes. Como consequência, qualitativamente, os gráficos deverão ser similares.

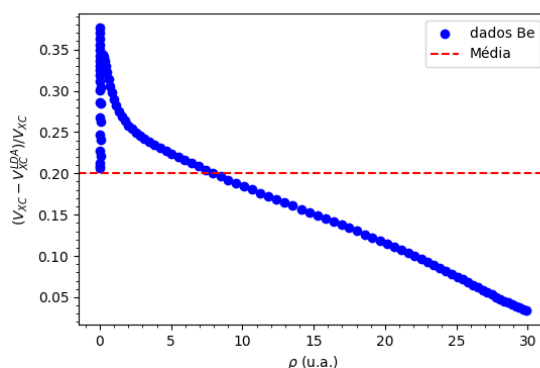
I. BERÍLIO

O átomo de Be possui quatro elétrons e a configuração para o Estado Fundamental é $1s^2 2s^2$ caracterizando um sistema de camadas fechadas. Consequentemente, os potenciais podem ser apresentados em função das densidades eletrônicas radiais.

As Figuras 1 foram geradas a partir das equações (20) e (21) para o átomo de Be. O gráfico 1a apresenta v_{xc}/v_{xc}^{LDA} , enquanto o gráfico 1b mostra $(v_{xc} - v_{xc}^{LDA})/v_{xc}$, todos em função da densidade eletrônica ρ , dada em unidades atômicas. As linhas pontilhadas representam os valores das médias aritméticas das relações de potenciais (20) e (21), respectivamente.



(a) Razão v_{xc}/v_{xc}^{LDA} para o átomo de Be em função da densidade ρ .



(b) Diferença com razão $(v_{xc} - v_{xc}^{LDA})/v_{xc}$ para o átomo de Be em função da densidade ρ .

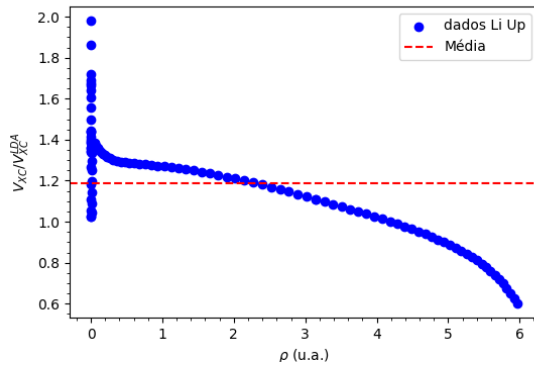
Figura 1: Gráficos gerados com os dados do átomo de Be (ALMBLADH; PEDROZA, 1984).

Os gráficos mostram que a relação entre os potenciais exatos e LDA não são constantes. Por outro lado, essa relação não se afasta muito de um valor médio, indicando que a aproximação feita por (CAFIERO; GONZALEZ, 2005; LIMA et al., 2007) foi razoável. Por outro lado, a semelhança entre os dois gráficos reforça a hipótese de considerar essa relação entre os potenciais como constante.

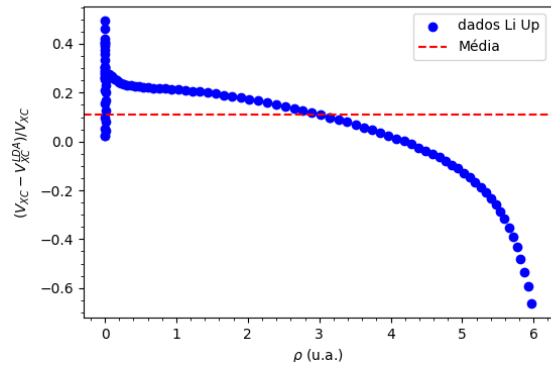
II. LÍTIO

O átomo de Li possui três elétrons e a configuração para o Estado Fundamental é $1s^2 2s$ constituindo-se, pois, num sistema de camada aberta. Nesse caso o tratamento mais adequado é a utilização da versão com densidade radial de spins (BARTH; HEDIN, 1972).

As Figuras 2 e 3 apresentam quatro gráficos gerados a partir das equações (20) e (21) para o átomo de Li. No caso Li foram usadas as densidades de spin em lugar da densidade eletrônica. Consequentemente, essas densidades de spin foram separados em "up" e "down" correspondendo à componente z do spin total igual a $+\hbar/2$ ("up") e a $-\hbar/2$ ("down"), respectivamente. Os gráficos 2a e 3a apresentam v_{xc}/v_{xc}^{LDA} , enquanto os gráficos 2b e 3b mostram $(v_{xc} - v_{xc}^{LDA})/v_{xc}$, todos em função da densidade de spin ρ dada em unidades atômicas. As linhas pontilhadas representam os valores das médias aritméticas das relações de potenciais (20) e (21), apresentadas na Tabela I, juntamente com os intervalos de densidades ρ_{min} e ρ_{max} utilizados para cada átomo.

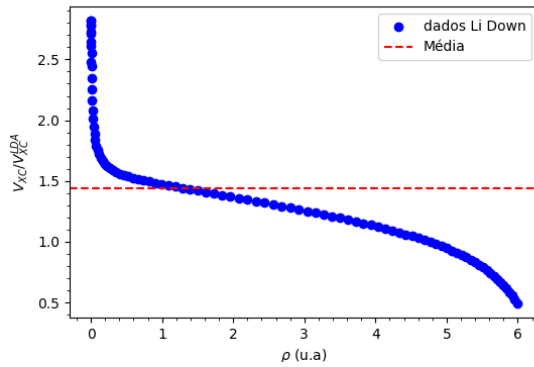


(a) Razão v_{xc}/v_{xc}^{LDA} para o átomo de Li com spin "up" em função da densidade ρ .

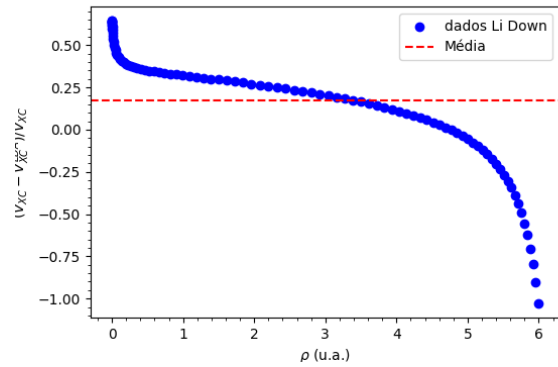


(b) Diferença com razão $(v_{xc} - v_{xc}^{LDA})/v_{xc}$ para o átomo de Li com spin "up" em função da densidade ρ .

Figura 2: Gráficos gerados com os dados do átomo de Li com spin "up" (ALMBLADH; PEDROZA, 1984).



(a) Razão v_{xc}/v_{xc}^{LDA} para o átomo de Li com spin "down" em função da densidade ρ .



(b) Diferença com razão $(v_{xc} - v_{xc}^{LDA})/v_{xc}$ para o átomo de Li com spin "down" em função da densidade ρ .

Figura 3: Gráficos gerados com os dados do átomo de Li com spin "down" (ALMBLADH; PEDROZA, 1984).

De forma semelhante ao caso do Be, os gráficos mostram que a relação entre os potenciais exatos e LDA também não são constantes. Por outro lado, aqui também vemos que essa relação não se afasta muito de um valor médio, indicando novamente que a aproximação feita por (CAFIERO; GONZALEZ, 2005; LIMA et al., 2007) foi razoável. Por outro lado, novamente vemos que a semelhança entre os dois gráficos reforça a hipótese de considerar essa relação entre os potenciais como constante.

Em ambos os casos, Be e Li, notamos que o desvio de um valor médio se dá principalmente para valores muito baixos e para valores muito altos da densidade eletrônica e de spin. Uma das razões para isso pode ser a qualidade dos dados para essas regiões. No entanto, a essa essência desse afastamento de uma razão constante vem do fato de a LDA considerar o sistema de elétrons como homogêneo, enquanto nesses extremos tal hipótese ser menos realista, como também ocorre nas regiões de mudança de camadas, como pode ser visto na (ALMBLADH; PEDROZA, 1984).

Relatamos na Tabela I as densidades mínima e máxima que foram utilizadas na construção dos gráficos e no cálculo das médias, utilizando os valores calculados das relações (20) e (21) e utilizando os dados fornecidos pelo orientador. As médias calculadas a partir da equação (20) foram representadas na tabela como Média 1, enquanto as médias calculadas utilizando a equação (21) foram chamadas de Média 2.

	ρ_{min} (u.a.)	ρ_{max} (u.a.)	Média 1	Média 2
Be	0.01091	29.89970	1.27107	0.20057
Li "down"	0.00012	5.99250	1.43760	0.17413
Li "up"	0.00012	5.96672	1.18902	0.11145

Tabela 1: Dados utilizados na construção dos gráficos apresentados nas Figuras 1, 2 e 3. As quantidades ρ_{min} e ρ_{max} são, respectivamente, as densidades mínima e máxima. As quantidades referidas como Média 1 e Média 2 são, respectivamente, as médias calculadas com os valores calculados das relações (20) e (21).

V. CONCLUSÃO

Usando a Teoria do Funcional da Densidade, em especial a Aproximação Local (LDA), foi possível realizar uma análise comparativa entre os potenciais exatos de determinados sistemas finitos e os correspondentes obtidos por meio da LDA. Nossos resultados para os átomos de Be e do Li, mostram que a relação entre o Potencial de Troca Exato e obtido pela LDA não é uma relação constante, independente da densidade. No entanto, os resultados mostraram que assumir essa relação como uma constante, para cada um dos átomos, pode ser uma boa aproximação. Para reforçar esses argumentos, é necessário fazer uma análise similar para os outros sistemas finitos disponíveis (ALMBLADH; PEDROZA, 1984). Em seguida, confirmada, pelo menos nesses casos disponíveis, pode-se usar, para cada átomo, a relação obtida modificando o Potencial de Troca e Correlação num cálculo LDA e, então, verificar se ao final o resultado obtido aproxima-se do resultado exato para o correspondente átomo. A continuidade do presente trabalho ocorre nesse caminho.

REFERÊNCIAS

- ALMBLADH, C. O.; PEDROZA, A. C. Density-functional exchange-correlation potentials and orbital eigenvalues for light atoms. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 29, p. 2322–2330, May 1984. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.29.2322>>. 42, 49, 50, 51, 52
- BARTH, U. V.; HEDIN, L. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 5, n. 13, p. 1629, 1972. 50
- CAFIERO, M.; GONZALEZ, C. Approximate self-consistent potentials for density-functional-theory exchange-correlation functionals. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 71, p. 042505, Apr 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.042505>>. 48, 50, 51

CEPERLEY, D. M.; ALDER, B. J. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 45, p. 566–569, Aug 1980. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.566>>. 48

HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 136, p. B864–B871, Nov 1964. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>>. 42, 44

KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 140, p. A1133–A1138, Nov 1965. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>>. 42

KRIEGER, J. B.; LI, Y.; IAFRATE, G. J. Construction and application of an accurate local spin-polarized kohn-sham potential with integer discontinuity: Exchange-only theory. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 45, p. 101–126, Jan 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.45.101>>. 48

KRIEGER, J. B.; LI, Y.; IAFRATE, G. J. Systematic approximations to the optimized effective potential: Application to orbital-density-functional theory. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 46, p. 5453–5458, Nov 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.46.5453>>. 48

LI, Y.; KRIEGER, J. B.; IAFRATE, G. J. Self-consistent calculations of atomic properties using self-interaction-free exchange-only kohn-sham potentials. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 47, p. 165–181, Jan 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.47.165>>. 48

LIMA, M. P. et al. Simple implementation of complex functionals: Scaled self-consistency. *The Journal of chemical physics*, AIP Publishing, v. 126, n. 14, 2007. 48, 50, 51

PARR, R. G.; YANG, W. Density-functional theory of the electronic structure of molecules. *Annual review of physical chemistry*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 46, n. 1, p. 701–728, 1995. 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48

PEDROZA, A. C. Teoria do funcional da densidade; uma possível solução para o problema de muitos elétrons da mecânica quântica. *Physicae Organum vol. 2, n.1*, 2016. 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48

PERDEW, J. P.; BURKE, K.; ERNZERHOF, M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, APS, v. 77, n. 18, p. 3865, 1996. 48

PERDEW, J. P. et al. Prescription for the design and selection of density functional approximations: More constraint satisfaction with fewer fits. *The Journal of chemical physics*, AIP Publishing, v. 123, n. 6, 2005. 48

SUN, J.; RUZSINSZKY, A.; PERDEW, J. P. Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 115, p. 036402, Jul 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.036402>>. 48

ZIESCHE, P.; KURTH, S.; PERDEW, J. P. Density functionals from lda to gga. *Computational Materials Science*, v. 11, n. 2, p. 122–127, 1998. ISSN 0927-0256. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025697002061>>. 48