

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO – UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS DE SÃO BERNARDO
CURSO DE LICENCIATURA EM CIÊNCIAS NATURAIS- QUÍMICA

MARCELO HENRIQUE SOUZA DA SILVA

USO DE SOFTWARE EDUCACIONAL PARA O ESTUDO DA REDE
CRISTALINA

São Bernardo- MA

2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO – UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS DE SÃO BERNARDO
CURSO DE LICENCIATURA EM CIÊNCIAS NATURAIS- QUÍMICA

MARCELO HENRIQUE SOUZA DA SILVA

USO DE SOFTWARE EDUCACIONAL PARA O ESTUDO DA REDE
CRISTALINA

Monografia apresentada ao Curso de
Licenciatura em Ciências Naturais/Química
da Universidade Federal do Maranhão como
requisito para conclusão de curso.
Orientador: Prof.Dr. Josberg Silva Rodrigues

São Bernardo- MA

2022

MARCELO HENRIQUE SOUZA DA SILVA

**USO DE SOFTWARE EDUCACIONAL PARA O ESTUDO DA REDE
CRISTALINA**

Monografia apresentada ao Curso de
Licenciatura em Ciências Naturais/Química
da Universidade Federal do Maranhão como
requisito para conclusão de curso.

Aprovado em:

BANCA EXAMINADORA

Prof. Josberg Silva Rodrigues (orientador)

Doutor em Física Teórica – UFMA

UFMA – Centro São Bernardo

Prof.^a Gilvana Nascimento Rodrigues Cantanhede

Mestra em Educação - UFMA

UFMA – Centro São Bernardo

Prof. Thiago Targino Gurgel

Doutor em Física da Matéria Condensada– UFS

UFMA – Centro São Bernardo

"Nada pode ser obtido sem uma espécie de sacrifício. Para se obter algo é preciso oferecer algo em troca de valor equivalente. Esse é o princípio básico da alquimia, a Lei da Troca Equivalente".

(Edward Elric)

"A principal meta da educação é criar homens que sejam capazes de fazer coisas novas, não simplesmente repetir o que outras gerações já fizeram. Homens que sejam criadores, inventores, descobridores. A segunda meta da educação é formar mentes que estejam em condições de criticar, verificar e não aceitar tudo que a elas se propõe".

(Jean Piaget)

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus, que em sua fidelidade e amor, tem me sustentado dia após dia, me proporcionando chegar até aqui com êxito em minha jornada pela Universidade.

Aos meus avós Maria Dalva Aceno e Vicente Serafim a quem devo gratidão por ter sempre me ensinado a seguir o caminho certo e que também acreditavam que eu era capaz de realizar meus objetivos.

Em especial agradeço minha mãe Francisca Maria Souza da Silva, que me fez orgulhar-se do que sou, esse trabalho é principalmente para você. Ao meu irmão pelo total apoio e compreensão mesmo longe. Ao meu irmão de coração Diego Júlio por estar sempre presente com seu total apoio, a que devo a gratidão de sempre estar me lembrando que se o trabalho é para entregar amanhã não será hoje que irei fazer.

Aos meus amigos e amigas Andreleny, Richard, Simone, Vinicius, Venâncio, Welinton, pois com vocês a vida acadêmica teve um novo significado, e em especial a minha dupla de estudo Verônica Cardoso pela amizade e por aprendermos juntos respeitando sempre a opinião um do outro.

A minha namorada Luiza Amélia por estar sempre ao meu lado ajudando, dando apoio e motivação. Esse trabalho também é seu.

Aos meus professores pelos ensinamentos durante minha jornada pela UFMA, em especial ao meu orientador Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues pela constante ajuda e orientação nesse trabalho.

Por fim, dedico esse trabalho aos meus entes queridos que não existem neste plano terreno, minha avó Antônia Maria Souza da Silva e meu tio Zenaldo Souza da Silva.

RESUMO

Este trabalho teve como objetivo propor uma discussão acerca da utilização das diferentes aplicações no processo de ensino-aprendizagem no ensino do Componente Curricular Física e Química e para melhor compreensão de como está se dando o processo de aprendizagem com o uso de ferramentas didáticas para a formação de discentes mais críticos e que buscam cada vez mais qualidade da educação. O objetivo geral desta monografia é Estudar a rede cristalina e suas aplicações tendo o auxílio do software crystalwalk; demonstrar a importância de softwares educativos como recurso didático na sala de aula da Educação superior por meio de seu uso como elemento interdisciplinar; e de uma forma mais específica, Conhecer os principais conceitos relacionados ao estudo da rede cristalina, Conhecer o software crystalwalk, Realizar uma oficina para tratar sobre a rede cristalina e o uso do software crystalwalk, perceber as causas que dificultam a compreensão das representações gráficas e incentivar o interesse de nossos alunos por meio de atividades no plano tridimensional, A metodologia aplicada no trabalho foi uma pesquisa bibliográfica nos principais meios de pesquisa de bibliografias online disposta nos sites, eletrônicos Scientific Electronic Library Online (SCIELO) e Google acadêmico com um intuito a alcançar a base teórica do trabalho, com isso pode-se contextualizar a construção, aplicação de questionário esses que foram fundamentados dentro da oficina oferecidas os participante da pesquisa que teve como tema o estudo da rede cristalina utilizando o software Crystalwalk. Alcançando assim o principal objetivo do trabalho estudar a rede cristalina utilizando um software educacional no processo.

Palavra – chave: Educação, Software CrystalWalk, Rede Cristalina.

ABSTRACT

This work aimed to propose a discussion about the use of different applications in the teaching-learning process in the teaching of the Curriculum Component Physics and Chemistry and for a better understanding of how the learning process is taking place with the use of didactic tools for training of students who are more critical and who seek more and more quality in education. The general objective of this monograph is to study the crystal lattice and its applications with the help of crystalwalk software; demonstrate the importance of educational software as a teaching resource in the higher education classroom through its use as an interdisciplinary element; and in a more specific way, Knowing the main concepts related to the study of the crystalline network, Knowing the crystalwalk software, Conducting a workshop to deal with the crystalline network and the use of the crystalwalk software, understanding the causes that make it difficult to understand the graphic representations and to encourage the interest of our students through activities in the three-dimensional plan, The methodology applied in the work was a bibliographic research in the main means of research of online bibliographies arranged on the websites, electronic Scientific Electronic Library Online (SCIELO) and Google academic with a view to to reach the theoretical basis of the work, with this, it is possible to contextualize the construction, application of these questionnaires that were based on the workshop offered to the participants of the research that had as its theme the study of the crystalline network using the Crystalwalk software. Thus achieving the main objective of the work to study the crystal lattice using educational software in the process.

Key-words: Education, Software CrystalWalk. Crystalline network.

ÍNDICE DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 Estruturas cúbicas (da esquerda para direita: simples, centrado e face centrada	13
Figura 2 14 Rede de Bravais	16
Tabela 1 Ângulos da rede cristalina	17

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	11
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	13
2.1. O QUE É REDE CRISTALINA?	14
2.2. OSCILADOR HARMÔNICO SIMPLES	17
2.3. OSCILADOR HARMÔNICO AMORTECIDO	19
2.4. OSCILADOR HARMÔNICO FORÇADO	20
2.5. OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO	23
2.6. CRISTAIS FOTÔNICOS	24
2.7. FUNÇÕES DE BLOCH	29
2.8. CONCEITO DE FÔNON	32
2.9. SOFTWARE CRYSTALWALK	33
3. METODOLOGIA	35
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	37
4.1. Análise da primeira parte do questionário	37
4.2. Análise da segunda parte do questionário.	40
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	41
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	42

1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, tem se tornado recorrente as preocupações por parte de pesquisadores sobre a necessidade de se intensificarem as reflexões em relação aos processos de ensino e de aprendizagem, principalmente, em relação a importância de se abordar os conceitos da Física e química em consonância com realidade dos sujeitos (COSTA, 2012). Nesse sentido, pode-se inferir que ao se abordar conceitos e nomenclatura química de uma forma mais próxima a realidade dos alunos, pode-se contribuir para proporcionar novas possibilidades tanto de representação quanto de interpretação das informações de mundo, sobretudo, de forma crítica visando o desenvolvimento integral dos alunos.

O ensino relacionado a física e a química é retratado como recurso didático, pois traz inúmeras informações que são apresentadas holisticamente, oferecendo dados e servindo de importante instrumento na realização de pesquisas. Tal estudo pode servir de ponte entre o discente e a realidade, visto que os dados trazidos podem ser observados fisicamente no mundo real. (NETO, 2017)

Diante do exposto anteriormente, o fato de trabalhar com cristalografia em sala de aula pode contribuir também para a aquisição de uma nova linguagem, linguagem simbólica, na qual os alunos por meio de representações gráficas da realidade podem dar um passo adiante em termos do processo de construção de conhecimento acerca das informações de cada material. Portanto, tal processo pode ocasionar um grande salto em termos de desenvolvimento cognitivo, no qual passarão do concreto para o pensamento abstrato, que começa no ensino Fundamental anos finais, e se desenvolve no Ensino Médio, reverberando-se ao longo da vida adulta.

Para isso, é necessário exercitar tanto o corpo quanto a mente, uma vez que as primeiras experiências da realidade do aluno partem dele como objeto físico para o que o cerca (em apenas uma direção) e posteriormente, no próximo estágio cognitivo, essas experiências são internalizadas, abstratas e deduzidas hipóteses (em ambas as direções).

A aquisição de habilidades cartográficas pelos alunos implica um grau de abstração e alto desenvolvimento cognitivo, que começa no final da etapa da Educação Básica e continua na fase de Educação Secundária Obrigatória, evoluindo ao longo de sua vida adulta. Inclui aprender uma nova língua, a simbólica. Pelas

considerações anteriores, adquirir essas habilidades pode permitir um desenvolvimento integral da pessoa, que sente e entende o ambiente em que vive. Sua interação com o ambiente e seus pares favorece a evolução do pensamento crítico que ajuda na tomada de decisão, resolução de problemas etc.

O presente trabalho será realizado por meio de uma análise qualitativa, baseada em uma revisão bibliográfica, exploratória e descritiva. A revisão de literatura realizada neste trabalho envolveu publicações indexadas no banco de dados eletrônicos Scientific Electronic Library Online (SCIELO) e Google acadêmico.

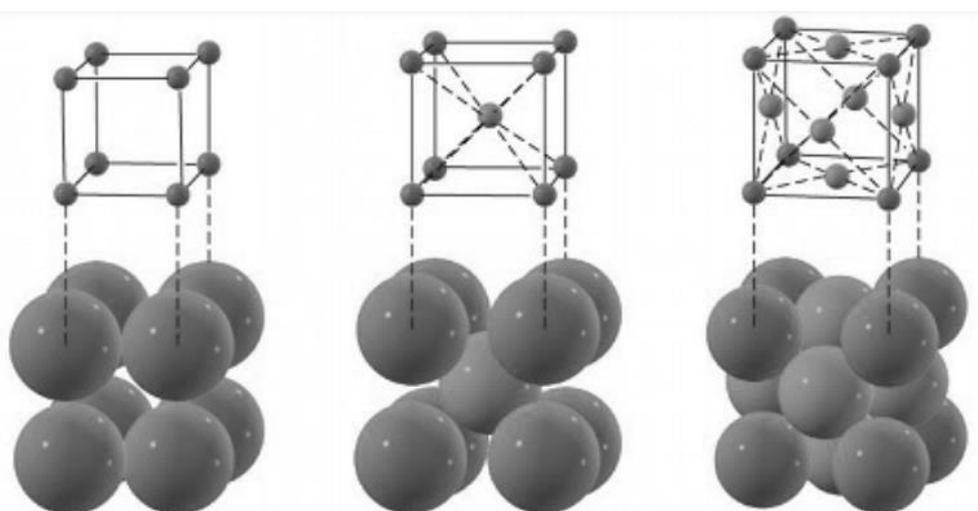
Uma pesquisa bibliográfica se desenvolve utilizando materiais já elaborados por pesquisadores, constituídos principalmente de artigos científicos e livros. É por meio do estudo exploratório que o pesquisador tem mais proximidade com o tema, podendo expandir seu conhecimento e aperfeiçoar ideias e conceitos. Já com relação à pesquisa descritiva, ela auxilia na busca e esclarecimento de conceitos e ideias. O objetivo geral desta monografia é estudar a rede cristalina e suas aplicações tendo o auxílio do software crystalwalk; demonstrar a importância de softwares educacionais como recurso didático na sala de aula da Educação superior por meio de seu uso como elemento interdisciplinar; e de uma forma mais específica, Conhecer os principais conceitos relacionados ao estudo da rede cristalina, Conhecer o software crystalwalk, Realizar uma oficina para tratar sobre a rede cristalina e o uso do software crystalwalk, perceber as causas que dificultam a compreensão das representações gráficas e incentivar o interesse de nossos alunos por meio de atividades, para que eles atinjam habilidades completas e de acordo com sua idade. Para todos os citados, foi proposta para este estudo uma base teórica baseada em múltiplas fontes bibliográficas, como livros especializados, textos, artigos e periódicos consultados na internet. Por tanto, este trabalho é de natureza bibliográfica e descritiva.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Em muitos estudos da natureza, são encontrados padrões ou aspectos que se repetem no espaço; tais padrões estão relacionados por elementos de simetria. Podem ser, por exemplo, as pétalas de uma rosa; as faces de um cristal de quartzo que se repetem a cada certo número de graus; outro exemplo são as duas mãos, que idealmente são o reflexo uma da outra.

A cristalografia é a ciência que estuda os corpos cristalinos sólidos e as leis que regem o seu crescimento; é a ciência que estuda as formas e propriedades físico-químicas da matéria no estado cristalino. A palavra cristalografia vem do grego *Kristallos* + gráfico = cristal mais descrição. Os gregos determinaram a água congelada como cristal. O quartzo claro é chamado de cristal rochoso, que se formou quando a água congelou e ficou petrificada. Essa interpretação foi válida até a Idade Média. A definição atual é que um cristal é todo mineral com formas poliédricas (DUARTE *et al*, 2019).

Cristais, como algumas substâncias como sal ou açúcar, são compostos de pequenos cristais. Suas partículas estão dispostas em padrões tridimensionais regulares, como cubos ou hexágonos. A maioria dos metais se cristaliza em três estruturas cristalinas cúbicas: cúbica simples; cúbica de corpo centrado e cúbica de face centrada (GARCIA *et al*, 2020).



Fonte: PUC 2022

Outra estrutura bastante comum é a estrutura hexagonal compacta; porque a energia é liberada à medida que os átomos se aproximam e se tornam mais intimamente ligados uns aos outros, então eles têm menor energia e são mais estáveis. Essas estruturas têm a característica de serem muito compactas, ou seja, possuem poucos furos nelas. Cristais, como algumas substâncias como sal ou açúcar, são compostos de pequenos cristais. Suas partículas estão dispostas em padrões tridimensionais regulares, como cubos ou hexágonos (FRANCO; DO CARMO; DINIZ, 2021).

As redes são organizações geométricas tridimensionais no espaço que são características das partículas do sólido. Desta forma, as distribuições na rede dos elementos podem ser estudadas e mais informações podem ser obtidas a partir delas. A vacância ocorre quando em certo lugar de um cristal deveria haver um átomo, mas não há nada, isto é, um vazio. Ocorre entre cristais ou metais, em pequenos espaços interatômicos, este é ocupado por outro elemento; por exemplo, no aço, o carbono é introduzido em pequenos espaços que existem no ferro, provocando alterações importantes em suas propriedades como dureza, tenacidade e resistência (MASCARENHAS, 2021).

Todos os cristais são constituídos por pequenos cristais (grãos). Cada grão tem seus átomos organizados de forma diferente de seus vizinhos, embora tenham a mesma estrutura cristalina. Materiais de grãos grandes são caracterizados por terem maior condutividade térmica e elétrica e por serem fáceis de usar. Materiais de granulação fina são menos propensos à ruptura quando são aquecidos.

2.1. O QUE É REDE CRISTALINA?

A maioria dos sólidos na natureza é cristalina, o que significa que os átomos, moléculas ou íons que os formam estão dispostos geometricamente no espaço. Esta estrutura ordenada muitas vezes não é visível a olho nu porque são constituídas por um conjunto de microcristais orientados de diferentes maneiras, formando uma estrutura policristalina aparentemente amorfa. Essa "ordem" se opõe à desordem que se manifesta em gases ou líquidos. Quando um mineral não possui uma estrutura cristalina, ele é chamado de amorfo (OLIVEIRA, 2005).

As redes cristalinas são fundamentalmente caracterizadas por uma ordem ou periodicidade. A estrutura interna dos cristais é representada pela chamada célula

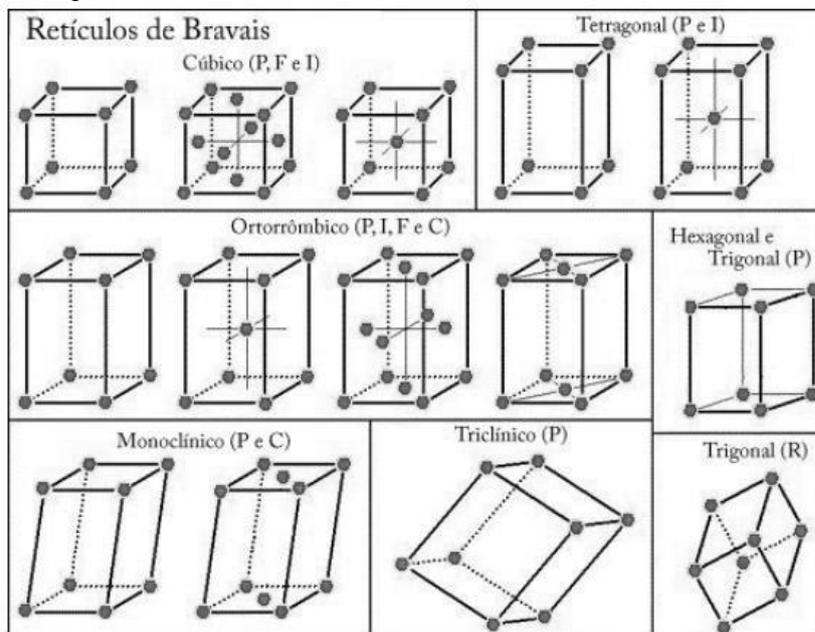
unitária que se repete várias vezes nas três direções do espaço. O tamanho desta célula é determinado pelo comprimento de suas três arestas (a , b , c), e a forma pelo valor dos ângulos entre as ditas arestas (α , β , γ). O conjunto de elementos de simetria de um objeto que passa por um ponto define a simetria total do objeto (grupo de simetria de pontos). Existem muitos grupos de pontos, mas em cristais estes têm que ser compatíveis com a periodicidade (repetitividade por tradução) então existem apenas 32 grupos de pontos possíveis que são chamados de classes de cristais. Combinando as duas translações e o ângulo que elas fazem uma com a outra (OLIVEIRA, 2005).

Se formamos uma rede espacial empilhando essas redes planas, existem apenas quatorze formações possíveis que representam as formas mais simples pelas quais a matéria cristalina pode se decompor sem perder suas propriedades originais, são chamadas de redes de Bravais (FRANCO; DO CARMO; DINIZ, 2021).

Os cristais têm formas mais ou menos regulares com definição de arestas, faces e vértices. Internamente, eles são compostos de partículas que têm relações e distâncias fixas entre si; esses parâmetros internos são estudados por meio de raios X, enquanto os externos são feitos medindo-se os ângulos formados por suas faces (FRANCO; DO CARMO; DINIZ, 2021).

Os minerais têm uma estrutura cristalina. Neles os átomos são ordenados formando “caixas” que se repetem em todas as direções sem deixar lacunas entre eles. A caixa é chamada de célula unitária. Com base na razão entre os lados e os ângulos de sua célula unitária, os minerais podem ser classificados em 7 sistemas de cristal. Em alguns sistemas cristalinos é possível colocar mais elementos ou nós de várias maneiras dentro da célula unitária. Isso dá origem a 14 redes cristalinas diferentes, como Bravais demonstrou matematicamente em 1848. Por isso, elas são chamadas de redes de Bravais (GARCIA *et al*, 2020).

Figura 2 14 Rede de Bravais



Fonte: USP, 2022.

Um cristal é caracterizado pela repetição triperiódica de um padrão. Esta tripla periodicidade impõe restrições às possibilidades de simetria: as únicas possíveis são as de rotação de eixos de ordem 1, 2, 3, 4 e 6.

Os três vetores a , b e c que caracterizam as translações na rede são os vetores base. O volume obtido sobre os vetores é a malha.

Os pontos extremos dos vectores:

$$\vec{r} = a\vec{u} + b\vec{v} + c\vec{w}, \quad (1)$$

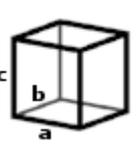
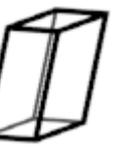
com a , b , c sendo números inteiros, são os nós do reticulado.

A escolha dos vetores de base é arbitrária mas mantém a malha que coloca, da melhor forma, em evidência a simetria. Em alguns casos, uma malha múltipla permite uma melhor representação das simetrias de um cristal. Em todos os casos, a origem da malha é arbitrária. Estes são os vetores base relevantes. (DUARTE et al, 2019).

A tabela a seguir mostra as características dos 7 sistemas de cristal. Na primeira linha são indicados seus nomes, na segunda as proporções dos lados (a , b ,

c) da célula unitária e na última linha são os ângulos que esses lados formam entre si (α , β , γ).

Tabela 1 Ângulos da rede cristalina

Cúbico	Tetragonal	Hexagonal	Trigonal	Rômboico	Monoclínica	Triclínica
Todos iguais $a=b=c$	Dois iguais		Todos iguais $a=b=c$	Todos os três lados são diferentes abc .		
Ângulos retos $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$		$\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$	$\alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$	Ângulos retos $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$\alpha=\beta=90^\circ\neq\gamma$	$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90^\circ$
						

Fonte: (GARCIA *et al*, 2020).

Ao colocarmos nós em certas posições de uma célula unitária e preenchermos o espaço repetindo essa célula, obtemos 14 redes espaciais ou redes de Bravais:

Elemental ou primitivo: os elementos são colocados apenas nos vértices da célula unitária. Todos os 7 sistemas de cristal têm uma rede primitiva.

Centrado no interior: além dos vértices, há um nó no centro da célula. Existe em rômboico, tetragonal e cúbico.

Centrado nas bases: nos vértices e no centro de duas faces opostas. Somente em monoclínica e rômboica.

Face-centrada – Em todos os vértices e no centro de todas as faces da célula unitária. É possível em rômboico e cúbico.

2.2. OSCILADOR HARMÔNICO SIMPLES

O oscilador harmônico é um dos sistemas mais estudados em física, pois qualquer sistema que oscile em torno de um ponto de equilíbrio estável pode ser estudado em uma primeira aproximação como se fosse um oscilador. A principal característica de um oscilador harmônico é que ele está submetido a uma força

restauradora, que tende a devolvê-lo ao ponto de equilíbrio estável, com intensidade (módulo) proporcional à separação desse ponto (BAI, 2020).

,

$$F = -k(x - x_0) \quad (2)$$

com k sendo a constante elástica e x_0 é a posição de equilíbrio, que podemos tomar sem perda de generalidade .

A força restauradora é conservativa, portanto tem uma energia potencial associada,

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad (3)$$

O oscilador harmônico simples é o caso mais simples, onde apenas a força restauradora é considerada. Levando em conta que, a equação (1) nos dá a seguinte equação

$$F = ma = m \frac{d^2 x}{dt^2} \quad (4)$$

Ou na notação de Newton

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (5)$$

onde os dois pontos indicam a derivada segunda em relação ao tempo e $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ é a frequência natural de vibração. A solução geral desta equação pode ser escrita na forma

$$x(t) = A \sin(\omega_0 t + \varphi_0) \quad (6)$$

em que A é a amplitude e φ_0 é a constante de fase, sendo obtidos impondo as condições iniciais.

2.3. OSCILADOR HARMÔNICO AMORTECIDO

Este caso mais realista consiste em levar em conta o atrito do ar, que tende a amortecer a oscilação. O modelo mais usual consiste em tomar um atrito proporcional à velocidade,

$$\vec{F}_r = -b\dot{\vec{x}} \quad (7)$$

De modo que a equação diferencial, obtida da segunda lei de Newton, é da forma

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (8)$$

A solução geral para esta equação depende da relação entre γ e ω_0 . Temos três casos:

Caso $\gamma < \omega_0$. A solução é da forma

$$x(t) = Ae^{-\gamma t} \text{sen}(\omega_1 t + \varphi_0) \quad (9)$$

em que $\omega_1 = \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$.

O caso que $\gamma = \omega_0$. A solução geral é

$$x(t) = (A + B)e^{-\gamma t} \quad (8)$$

Por fim, temos o caso $\gamma > \omega_0$. A nova solução geral é

$$x(t) = Ae^{-\gamma t} \text{senh}(\omega_1 t + \varphi_0) \quad (9)$$

com $\omega_1 = \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$.

2.4. OSCILADOR HARMÔNICO FORÇADO

Dizemos que um oscilador é forçado se uma força externa for aplicada sobre o corpo de massa m . O caso mais interessante é quando a força externa também é periódica, por exemplo cosenoidal,

$$F = f_0 \cos \omega t \quad (10)$$

Esta força torna-se um termo não homogêneo na equação diferencial do movimento.

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{f_0}{m} \cos \omega t \quad (11)$$

E a solução geral é da forma

$$x(t) = A \sin(\omega_0 t + \varphi) + \frac{f_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t \quad (12)$$

Como visto na solução anterior, eq. (12), é singular no caso da força forçante ter a mesma frequência que a frequência natural do oscilador. Neste caso, temos um oscilador ressonante simples, cuja solução é

$$x(t) = A \sin(\omega_0 t + \varphi) - \frac{f_0}{2m\omega_0^2} t \sin \omega t \quad (13)$$

Neste caso, obtém-se uma solução secular, ou seja, cuja amplitude aumenta ao longo do tempo até se tornar muito grande. Fisicamente, esta solução não faz sentido, pois mais cedo ou mais tarde o atrito, que sempre existe, mas neste caso negligenciamos, entrará em ação impedindo que a amplitude de oscilação cresça indefinidamente. Neste caso mais geral incluímos uma força de forçamento do tipo (10) para um oscilador amortecido. (VIZOTTO; DE FIGUEIREDO CAMARGO, 2018). A equação diferencial completa é então:

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{f_0}{m} \cos \omega t \quad (14)$$

Neste caso, a solução geral é da forma

$$x(t) = x(t) + A_p \cos(\omega t + \alpha) \quad (15)$$

Onde a solução geral do oscilador não forçado, dada pelas equações (7) - (9) de acordo com a relação entre $x(t)$, γ , ω_0 e também

$$A_p = \frac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\gamma\omega)^2}}, \quad (17)$$

$$\alpha = \arctan \frac{2\gamma\omega}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

Como visto, a solução particular, proporcional a A_p , é a única que importa para tempo longos, pois todas as soluções da equação homogênea decaem exponencialmente. Assim, temos um estado estacionário, correspondente a oscilações de amplitude A_p .

Neste caso, a solução é válida para todas as frequências do oscilador harmônico forçado. No entanto, vemos que a amplitude de resposta é máxima para uma frequência: a frequência de ressonância,

$$\omega_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\gamma^2} \quad (18)$$

Muitos sistemas podem ser estudados a partir do oscilador harmônico: molas, pêndulos (na aproximação de pequenos ângulos), etc. Em geral, qualquer sistema que oscile em torno de um ponto de equilíbrio estável pode ser estudado, em uma primeira aproximação, a partir do oscilador harmônico. Isso se torna evidente se a energia potencial em torno do ponto de equilíbrio estável for desenvolvida por Taylor,

$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=x_0} (x-x_0)^2 + \dots \quad (19)$$

Onde não há termo da primeira derivada porque estamos em um ponto de equilíbrio, comparando este desenvolvimento com a equação (2), pode-se realizar a

identificação $\frac{dU}{dx} = 0$.

$$k = \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=x_0} \quad (20)$$

Sendo um ponto de equilíbrio estável, a derivada é positiva, e, portanto, a força (2) tende a restaurar a posição de equilíbrio. Em primeiro lugar, todas as equações obtidas nada mais são do que casos particulares da segunda lei de Newton e, portanto, todas as considerações de aplicabilidade da segunda lei de Newton são, ao mesmo tempo, aplicáveis a este caso.

Por outro lado, como vemos na equação, o oscilador harmônico nada mais é do que a aproximação de manter apenas o termo de segunda ordem na expansão de Taylor, portanto os resultados obtidos serão válidos se não envolverem deslocamentos de equilíbrio excessivamente grandes, de modo que é uma boa aproximação não tomar termos de ordem superior (LAGE, 2019).

Preciso observar que, para os casos com amortecimento, tomar a força como proporcional à velocidade é, novamente, uma aproximação. Neste caso, a expressão para atrito viscoso é difícil de obter, e uma aproximação como a que usamos costuma ser útil, apenas em regime laminar, o que geralmente se traduz em pedir que a velocidade da oscilação não seja excessivamente alta.

Finalmente, essa aproximação em segunda ordem no potencial eq. (19) com a identificação dada pela eq. (20) será útil na dedução matemática do conceito de fônon.

2.5. OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

O oscilador harmônico quântico corresponde ao tratamento do oscilador clássico usando ferramental teórico da mecânica quântica mais especificamente solucionando a equação de Schrodinger, possuindo solução analítica.

Na mecânica quântica, o hamiltoniano de um oscilador harmônico unidimensional é escrito na forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \quad (21)$$

No qual o acento circunflexo indica que estamos lidando com operadores e \hat{x} , \hat{p}_x são os operadores de posição e momento, dados por:

$$\hat{x} = x\hat{1}; \quad \hat{p}_x \equiv \frac{i}{\hbar} \frac{d}{dx} \quad (22)$$

O operador hamiltoniano pode ser escrito de maneira mais simples usando os operadores reduzidos X e P:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad \text{e} \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}} \quad (23)$$

X e P satisfazem a seguinte equação notável:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hat{1} \quad (24)$$

[X, P] sendo o comutador de X e P.

O operador H pode ser escrito da seguinte forma em termos de X e P:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (25)$$

Vamos procurar os autovalores e os autovetores de H:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (26)$$

Para isso vamos introduzir três novos operadores: o operador a. Seu conjugado hermitiano (indicado com uma cruz sobrescrita) e o operador número N:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \quad \text{e} \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (27)$$

O comutador de \hat{a} e de \hat{a}^\dagger é o operador identidade:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{1} \quad (28)$$

Assim é facilmente demonstrado que:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) \quad (29)$$

Assim podemos escrever:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) \quad (30)$$

Levando à quantização da energia do oscilador harmônico e observamos que autovetores do operador H também são os autovetores do operador N.

Já as autofunções de H são obtidas da equação abaixo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x) = 0 \quad (31)$$

Tem como soluções os polinômios de Hermite.

2.6. CRISTAIS FOTÔNICOS

Um fóton é uma partícula elementar que, de acordo com os princípios da física quântica, compõe a luz. Como todas as partículas elementares, os fótons não têm estrutura interna conhecida e não são compostos de outras partículas menores. Os fótons são as partículas transportadoras de luz visível, luz ultravioleta, luz infravermelha, raios X, raios gama e todas as outras formas de radiação eletromagnética. Eles viajam no vácuo com velocidade constante e têm massa invariante zero (eles não têm massa). Os fótons, por outro lado, não têm carga elétrica (DOS SANTOS; LOBO, 2018).

Os fótons são atualmente considerados responsáveis pela geração de todos os campos magnéticos e elétricos. Numerosos processos naturais causam a emissão de fótons: se uma partícula eletricamente carregada é acelerada, por exemplo, essas partículas elementares são emitidas. Para a física quântica, um fóton é uma partícula elementar. A ciência dedicada ao estudo da produção e controle de fótons é

conhecida como fotônica. Uma das aplicações mais importantes dos fótons é o laser, que possui múltiplos usos. Os fótons também são aplicados em microscópios e em comunicações ópticas (LIMA *et al*, 2018).

Se lermos os documentos sobre a composição da luz que foram escritos ao longo da história, veremos que até o século XVIII quase todas as teorias falavam da presença de partículas. A razão pela qual demorou tanto para que essas ideias fossem formalmente aceitas foi porque os cientistas da época não sabiam como explicar certos fenômenos (como birrefringência, refração ou difração da luz) com base no modelo das partículas (CARUSO; OGURI, 2021).

A luz visível é composta de fótons. Ao longo do século XVII, os cientistas René Descartes, Robert Hooke e Christian Huygens tentaram resolver essa impossibilidade de associar partículas a fenômenos luminosos propondo teorias ondulatórias, segundo as quais a luz se propaga por meio de ondas, mecânica que emite uma fonte de luz. Apesar de seus esforços, as teorias que apontam para partículas (que hoje conhecemos como fótons) permaneceram em vigor, em grande parte graças ao trabalho de Isaac Newton.

No entanto, no início do século XIX os modelos de ondas ganharam grande importância quando Augustin Fresnel e Thomas Young mostraram que com essas teorias era perfeitamente possível explicar difração e interferência. Mais tarde, Heinrich Hertz confirmou as ideias de James Clerk Maxwell de que a luz era uma onda eletromagnética e isso punha em perigo a permanência do modelo de fótons (CARUSO; OGURI, 2021).

Mas a teoria das ondas não foi suficiente para explicar a luz em sua totalidade: garantiu que ela dependia exclusivamente de sua intensidade, enquanto vários experimentos mostraram que, ao contrário, dependia apenas de sua frequência, Albert Einstein desempenhou um papel fundamental na fusão das teorias de ondas e fótons, pois apontou que as anomalias observadas em muitos testes poderiam ser explicadas pela presença de pontos quânticos na onda de luz com independência para se mover, embora a difusão da onda fosse contínua no espaço (LIMA *et al*, 2018).

O fóton é uma partícula indivisível que sempre se move na velocidade da luz. Esta é a velocidade máxima de propagação possível no Universo. Nenhum corpo material pode alcançá-lo porque a resistência da matéria a ser acelerada, sua inércia,

umenta com a velocidade e se torna infinita na velocidade da luz. Para atingir essa velocidade seria necessário aplicar a esse corpo uma força de magnitude infinita, que não existe na natureza (DOS SANTOS; LOBO, 2018).

O fóton se move na velocidade da luz porque não é uma partícula material; sua massa é zero. Isso tem a consequência adicional de que sua velocidade não pode ser diminuída; isto é, os fótons não podem ser parados, eles existem apenas em movimento na velocidade da luz. Como também não podemos nos mover nessa velocidade, é impossível parar ou alcançar um fóton para examiná-lo. Nem faz sentido imaginar um aspecto físico disso; se for redondo e com costuras como uma bola de beisebol, ou liso, branco e com uma ponta preta como uma bola de bilhar. Os pontos que aparecem nas fotos de baixa exposição não são fótons, mas sim os traços que eles deixam quando os cristais de sal desse metal que os absorvem se transformam em prata metálica (LIMA *et al*, 2018).

A possibilidade de partículas sem massa se moverem à velocidade da luz foi antecipada por Einstein na teoria da relatividade. É por isso que eles são chamados de "partículas relativísticas". Existem outras partículas relativísticas com propriedades diferentes das do fóton. Neutrinos, por exemplo, não são visíveis ao olho humano; branco e com um ponto preto como uma bola de bilhar.

Os fótons são produzidos pela movimentação de cargas elétricas. As cargas elétricas produzem simultaneamente forças elétricas e magnéticas que se propagam no espaço à velocidade da luz como ondas eletromagnéticas. Os fótons se movem em direções precisas, mas são encontrados apenas onde ocorrem ondas de forças elétricas e magnéticas geradas por cargas. Um fóton, todo completo, pode ser encontrado em qualquer lugar onde existam essas forças; mais provável naqueles lugares onde essas forças são maiores. À medida que as forças eletromagnéticas se propagam na forma de ondas, o fóton pode ser encontrado com maior probabilidade em locais de interferência construtiva dessas ondas e com menor ou nenhuma probabilidade naqueles de interferência destrutiva. Isso, em alguns fenômenos como difração (LIMA *et al*, 2018).

Os fótons se manifestam como partículas, pois concentram suas energias, seus movimentos e seus efeitos em regiões definidas e separadas. Em uma fotografia eles produzem marcas localizadas como se a energia de cada fóton, que transforma os cristais da emulsão fotográfica, estivesse concentrada em um pequeno pacote. De

fato, o primeiro passo nessa transformação é uma colisão entre um fóton e uma partícula eletricamente carregada do cristal, um elétron, que é liberado como resultado do impacto como se fosse a colisão de duas bolinhas de gude (CARUSO; OGURI, 2021).

Esse fenômeno, denominado "efeito fotoelétrico", encontra grande utilidade na produção de corrente elétrica por meio da luz nas chamadas "células fotoelétricas". Observando as trajetórias de elétrons colidindo com fótons, verifica-se que essas colisões ocorrem exatamente como se elétron e fóton fossem duas bolas de bilhar; isto é, os ângulos das trajetórias e as energias das duas partículas antes e depois da colisão são idênticas às de duas bolas de bilhar microscópicas com as mesmas energias.

Não há fótons sem ondas porque a própria natureza da luz é dual; tem aspectos corpusculares e ondulatórios simultaneamente e, embora dependa do que é feito com a luz qual dos dois tipos de propriedade se torna aparente, o outro aspecto sempre aparecerá de alguma forma. Por exemplo, para descrever colisões de fótons, o aspecto de onda é mostrado e torna-se necessário ao expressar a energia do fóton, uma vez que inevitavelmente compreende a frequência de uma onda. Os aspectos corpuscular e ondulatório são, de fato, complementares. A teoria moderna da luz dá precisão a essa complementaridade ao tornar os dois aspectos inseparáveis na descrição matemática da radiação por cargas elétricas. As descrições e previsões de fenômenos de luz obtidos com esta teoria se encaixam notavelmente bem nos fatos experimentais e apoiam as ideias básicas acima (DOS SANTOS; LOBO, 2018).

Também é interessante notar que as primeiras ideias básicas sobre a luz nunca foram realmente abandonadas. A propagação retilínea sempre foi um suporte da teoria corpuscular, e a difração foi da teoria ondulatória. As ondas eletromagnéticas não são leves, mas descrevem corretamente sua propagação no espaço.

Os cristais fotônicos são compostos de pelo menos dois materiais dielétricos dispostos periodicamente no espaço. Ao prestar atenção na periodicidade que os cristais fotônicos apresentam, podemos classificá-los como unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais. Os cristais fotônicos unidimensionais são os mais simples, pois os dielétricos são dispostos de tal forma que há apenas periodicidade em relação ao índice de refração em uma direção. Este tipo de configuração pode ser obtido alternando um meio de alto índice de refração com um meio de baixo índice de

refração. Esse tipo de configuração também é conhecido em óptica como sistema multicamadas. Aqui, o aparecimento das zonas proibidas decorre do fato de que nas interfaces entre os meios de alto e baixo índice de refração ocorre forte espalhamento, resultando em interferência destrutiva, para ondas transmitidas ou refletidas dependendo dos parâmetros do cristal fóton unidimensional (LIMA *et al*, 2018).

Como se pode inferir, esse tipo de configuração não proporciona controle completo sobre as ondas eletromagnéticas que se propagam nas diferentes direções do espaço. Embora essa configuração tenha limitações, os cristais fotônicos unidimensionais são de fácil manuseio, pois suas bandas proibidas dependem de parâmetros de fácil manuseio nessa geometria, como a largura dos meios que compõem o sistema multicamadas, o contraste entre índices dos dielétricos utilizados ou mesmo o parâmetro da rede que mede a periodicidade do sistema.

Um cristal fotônico é bidimensional quando apresenta periodicidade relativa ao índice de refração em duas direções do espaço e combinações lineares destes. Eles podem ser obtidos, por exemplo, posicionando periodicamente hastes dielétricas com alto índice de refração dentro de um dielétrico com baixo índice de refração, como o ar, ou pode-se obter uma estrutura que seja uma imagem negativa deste primeiro, onde é possível tirar um dielétrico com alto índice de refração e perfure-o para que os buracos sigam um padrão periódico.

Como no caso unidimensional, a banda proibida é novamente controlada por uma série de parâmetros; seja o parâmetro de estrutura da rede, o contraste entre os índices de refração envolvidos, as propriedades dispersivas dos dielétricos e até mesmo defeitos na estrutura cristalina. Diz-se que um cristal fotônico é tridimensional diz-se quando apresenta periodicidade no índice de refração nas três direções do espaço. Neste tipo de geometria, se uma onda eletromagnética atingir o sistema de qualquer direção, em sua propagação pelo sistema, notará a mudança periódica dos índices, podendo produzir o efeito da banda proibida. Desta forma é possível controlar uma onda eletromagnética através do uso da banda proibida sem nos importar em qual direção ela se propaga (CARUSO; OGURI, 2021).

Neste tipo de geometria existem configurações muito mais compatíveis do que nos casos unidimensionais e bidimensionais, como algumas estruturas estudadas pela física do estado sólido, como a estrutura do diamante, a cúbica de face centrada ou a de corpo centrado cúbico.

Deve-se lembrar um fato importante em cristais fotônicos, que é que existe um problema de escala, que é que a periodicidade dos índices de refração, ou seja, a distribuição espacial dos dielétricos deve ser da mesma ordem de grandeza. Magnitude do que o comprimento de onda das ondas eletromagnéticas com as quais vamos lidar. Isso nos diz que se quisermos obter band gaps na faixa de luz visível, devemos construir cristais fotônicos com uma constante de rede da ordem de centenas de nanômetros, o que implica em alta precisão na fabricação.

2.7. FUNÇÕES DE BLOCH

Na física do estado sólido, as funções de Bloch são as funções de onda de uma única partícula, tipicamente um elétron, em um potencial periódico, como aquele definido por um cristal. Eles foram introduzidos em 1928 pelo físico Felix Bloch, que ficou conhecido em homenagem ao seu nome.

São funções de onda em que a energia formada por ondas planas é modulada no espaço por uma função periódica $u_n(\vec{k})$, com período igual ao do potencial do sistema quântico associado a ela: além de descrever os estados próprios do hamiltoniano (energia total do sistema) para os elétrons em um cristal, eles podem ser usados para outros sistemas, tais como os fótons em um cristal fotônico (TANAUE; BRUNO ALFONSO, 2020).

Essa descrição é garantida por um resultado geral da mecânica quântica, conhecido como Teorema de Bloch. De acordo com o teorema de Bloch, as funções ψ podem ser rotuladas apenas por dois números quânticos: o vetor de onda k que varia, de acordo com as condições de contorno periódicas, na chamada 1ª zona Brillouin do Cristal. O vetor $\pm \vec{k}$ é chamado de quase-momento do elétron (com função de onda $\psi_n(\vec{k})$) no cristal, dada por:

$$\Psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (32)$$

em que \vec{r} é o vetor posição.

O fato de que os íons da rede ocuparem posições regulares implica uma periodicidade espacial do potencial $u_k(\vec{r})$. De fato, se R é um vetor da rede, como mostra a função da onda (21), o potencial u terá a propriedade:

$$u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r}), \quad (33)$$

Na medida em que todos os pontos de uma rede de Bravais são equivalentes, é intuitivo pensar que se $\psi(r)$ e $\Psi_k(\vec{r} + \vec{R})$ são funções de onda em r e $r + R$ respectivamente, devemos ter:

$$|\Psi_k(\vec{r} + \vec{R})|^2 = |\Psi_k(\vec{r})|^2, \quad (34)$$

u , em outras palavras, essas funções só diferem de um fator de fase global, que escreveremos como $\exp(i(k \cdot R))$:

$$u_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}), \quad (35)$$

Este é o teorema de Bloch. A função $\psi_k(\vec{r})$ é em geral escrita sob a forma:

$$\psi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (36)$$

Onde $u_k(r)$ é uma função que também possui a periodicidade da rede, ou seja:

$$u_k(r + R) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (37)$$

Sob a forma (24) o teorema de Bloch exibe uma periodicidade notável a respeito de elétrons em um potencial periódico, a de que eles se comportam como partículas livres, com uma função de onda essencialmente igual a uma onda plana, modulada em amplitude pela função $u_k(r)$. É fácil verificar que (37) satisfaz a (36). Um cristal pode ser descrito por um sistema quântico que obedece às condições periódicas de Born-von Karman. Dentro da rede cristalina, é possível identificar uma célula fundamental, que pode ser descrita por três vetores de base, indicados por a_1, a_2 e a_3 (GOMES, 2018).

Isso significa que o Hamiltoniano é expresso da seguinte forma: onde o potencial vetor (r) respeita a condição de periodicidade: Sob essas condições, o

Hamiltoniano muda com os três operadores de translação, pois os operadores de translação também mudam a cada outro, que pode ser diagonalizada simultaneamente com o hamiltoniano T (ANAUE; BRUNO ALFONSO, 2020b).

O hamiltoniano do elétron no cristal pode ser escrito como a soma de uma parte atômica e uma parte do cristal:

$$H = H_{at} + H_{er} \quad (38)$$

onde, por hipótese, $H_{er} \ll H_{at}$.

Como foi dito acima, $\varphi(r)$ é um auto estado de H_{at} com autovalor E_0 , ou seja:

$$H_{at}\varphi(r) = E_0\varphi(r) \quad (39)$$

Quando um elétron está próximo a um ponto R da rede, sua função de onda será aproximadamente igual $\varphi(r - R)$. Postula-se que a função de onda do elétron em qualquer ponto do cristal é uma combinação linear dos orbitais atômicos:

$$\psi_k(r) = \sum_R C_{k,R}\varphi(r - R) \quad (40)$$

Na medida em que esta função deve ser normalizada e satisfazer o teorema de Bloch, Eq. (22), impomos que:

$$C_{k,R} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik \cdot R}$$

Em que N é o número de sítios da rede.

Portanto:

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ik \cdot R} \varphi(r - R) \quad (41)$$

Esta é a função de onda do elétron no cristal, na aproximação de ligação forte. Ela satisfaz ao teorema de Bloch e é normalizada. A equação (34). mostra um exemplo de ψ_k para vários valores de k, usando funções atômicas do tipo 3s, ou seja, $l = 0$. Para $k = 0$ as funções estão centradas nos sítios da rede. Para $k = \frac{\pi}{a}$ ou seja, no limite da primeira zona de Brillouin, as funções de onda de sítios vizinhos invertem o sinal devido ao fator $\exp\left(\frac{i(\pi a)}{a}\right) = -1$, do teorema de Bloch.

Para catalogar estados, é usado o vetor k, chamado de vetor de onda de Bloch, é usado: os autoestados da forma hamiltoniana, em geral, uma base de um espaço de Hilbert e assumem normalizado em uma célula, ou seja : na notação de Dirac, as funções de Bloch são indicadas pela notação $\psi(k)$, em que a equação acima é entendida como um produto escalar e se escreve simplesmente os estados são

precisamente as funções de Bloch. fator, uma função $u_k(r)$ periódico na rede, o número quântico da banda e o vetor de onda cristalino k .

Portanto, este último tem como autovalores as energias dos estados, enquanto os operadores de translação A têm autovalores da norma unitária exprimíveis na forma: $\psi(r) = uK(r)e^{ik.r}$. São ondas planas cuja estrutura é modulada no espaço por uma função periódica. O vetor de onda k está localizado no chamado espaço recíproco, também periódico, que se baseia nos vetores onde o vetor r , é o volume da célula. As funções de indexação de onda são únicas se o vetor k estiver limitado à primeira zona de Brillouin.

2.8. CONCEITO DE FÔNON

Um fônon é uma quantidade de energia encontrada dentro de uma vibração. Estes estão presentes em todos os objetos que vibram ativamente, como cristais de quartzo. Uma maneira de pensar em um fônon é como uma partícula ressonante dentro de uma onda. Assim como um "fóton" é uma partícula quântica dentro de uma onda de luz, um fônon é uma partícula dentro de uma onda sonora. O termo "phonon" é derivado da palavra grega "phone", que significa "som ou voz" (DOS SANTOS; LOBO, 2018).

O físico russo Igor Tamm é creditado com a primeira teoria do conceito de fônons. Desde que esse conceito foi introduzido em 1932, essas quantidades foram integradas ao ramo da física conhecido como mecânica quântica. Eles fazem parte de pesquisas emergentes e contínuas em física. Um fônon é frequentemente classificado como uma "quasipartícula" ou "excitação coletiva", o que geralmente significa que pode ser observado como um fenômeno, mas não especificamente extraído como um objeto físico individual.

Os fônons não se comportam como partículas independentes, mas interagem com outros fônons dentro de um objeto. Essa interação faz com que grupos de fônons formem cadeias ou estruturas de treliça. Um fônon pode transferir sua energia para o

próximo na cadeia. Uma rede ou grande grupo destes é capaz de transferir energia contínua na forma de eletricidade ou calor.

Muitos termodinamicistas consideram o comportamento dos fônons a chave para a criação de materiais condutores ou isolantes altamente eficientes. A alta condutividade é importante nas áreas de computação e armazenamento de energia, enquanto o isolamento extremo é útil para materiais de blindagem. A pesquisa continua, pois, alguns cientistas acreditam que materiais úteis podem ser construídos como resultado do estudo da maneira como os fônons operam e interagem (GOMES, 2018).

Pesquisadores do Instituto de Tecnologia de Massachusetts criaram um desses materiais em 2010. Os especialistas combinaram várias camadas de diferentes materiais cristalinos em um padrão projetado para refletir fônons. Durante o experimento, o material cristalino parou com sucesso o movimento dos fônons e os fez refletir ou "saltar" na direção oposta TANAUE; BRUNO ALFONSO, 2020).

A pesquisa do fônion pode levar a desenvolvimentos práticos no futuro. Alguns exemplos de invenções possibilitadas pela manipulação de fônons incluem proteção térmica para naves espaciais, isolamento superior para ambientes de congelamento e coletores de energia para dispositivos vestíveis. A manipulação bem-sucedida pode levar a avanços científicos semelhantes ao rápido crescimento da eletrônica de estado sólido, como transistores, durante a segunda metade do século XX.

2.9. SOFTWARE CRYSTALWALK

A fim de auxiliar os alunos na criação de cristais tridimensionais e como os átomos químicos interagem para fazer cristais, o Instituto de Pesquisa Energética e Nuclear (IPEN) da USP desenvolveu o software CrystalWalk podendo ser acessado em PC, tablet e smartphone. Essa ferramenta serve para avaliar o conhecimento dos alunos no tocante à estrutura cristalina.

No CrystalWalk, os estudantes podem escolher os átomos e estruturas que compõem o resultado final, dando-lhes experiência prática com a formação de cristais. Apesar do fato de as restrições do CrystalWalk ao uso do cristalógrafo proibirem os estudantes de descobrir as estruturas cristalinas subjacentes das moléculas, as

restrições do cristalógrafo CrystalWalk são cruciais do ponto de vista educativo (BARDELLA, 2016).

CrystalWalk oferece personalização e visualização online de cristais 3D. Este recurso pode ser benéfico para estudantes de ciência e engenharia de materiais, educadores e investigadores. CrystalWalk foi concebido para satisfazer uma procura na ciência dos materiais e nas ferramentas de ensino de engenharia para a estrutura de cristais. Isto mostra que novos programas podem ser estabelecidos para satisfazer os requisitos dos alunos.

CrystalWalk é utilizado em cursos de ciência e engenharia de materiais para mostrar uma nova e mais simples abordagem cristalográfica. Ao fundir uma malha com um motivo translacional ou simétrico, forma estruturas cristalinas. Deve ser oferecida uma interface de utilizador intuitiva, bem como compatibilidade com dispositivos multi-touch como o Oculus Rift e tecnologias de impressão 3D como o Ultimaker. O CrystalWalk é uma estrutura de desenvolvimento de aplicações web de código aberto e de fácil utilização. Alavanca tecnologia de ponta como HTML5/WebGL e uma arquitetura orientada para serviços (BARDELLA, 2016).

3. METODOLOGIA

Para o desenvolvimento deste trabalho foi realizado pesquisa bibliográfica para fundamentação teórica do mesmo e um estudo de caso de caráter quantitativo e qualitativo por se tratar de uma investigação minuciosa onde as variáveis foram verificadas analisadas com o objetivo de se identificar como está se dando o uso das linguagens em sala de aula, estudando também autores ligados à temática abordada que possam fornecer o embasamento necessário para compreensão da realidade local.

Para Gil (2002 pg. 44), pesquisa bibliográfica ... "é desenvolvida com base em material já elaborado, constituído principalmente de livros e artigos científicos". Analisando até neste ponto, podemos concordar que a pesquisa bibliográfica é baseada em livros e outros escritos. Sua principal vantagem da pesquisa bibliográfica reside no fato de permitir ao investigador a cobertura de uma gama de fenômenos muito mais ampla do que aquela que poderia pesquisar diretamente. Esta vantagem se torna particularmente importante quando o problema de pesquisa requer dados muito dispersos pelo espaço.

Para Gil (2017) A pesquisa quantitativa é um método de pesquisa social que utiliza a quantificação nas modalidades de coleta de informações e no seu tratamento, mediante técnicas estatísticas, tal como percentual, média, desvio-padrão, coeficiente de correlação, análise de regressão, entre outros.

O produto educacional desenvolvido é fruto de uma prévia investigação e se justifica pela possibilidade de produção de conhecimento científico específico sobre a rede cristalina utilizando o software crystalwalk. No qual teve como público alvo os alunos da disciplina Laboratório de Física, do curso de licenciatura em ciências naturais Química, 6º período, turma 2019.2, (período– noturno) da UFMA – Centro São Bernardo. A coleta de dados em primeiro momento foi dada pela a aplicação de um questionário destinado aos 6 alunos no formato *online* pelo formulário google forms e encaminhado via grupo de WhatsApp no dia no dia 09 de junho de 2022, com o intuito de avaliar preliminarmente o conhecimento do alunado a respeito do tema.

Em segundo momento no dia 23 de junho de 2022 foi ministrada uma oficina com o título Estudo da Rede Cristalina, onde foram apresentados conceitos teóricos

que em primeira partida formam a base conceitual dos conhecimentos prévios do estudo, a partir dessa oficina teórica os alunos puderam visualizar e agregar conceitos dos mais diversos: como o que é um Cristal? O que é um sistema cristalino? O que são células unitárias? Que informações são necessárias para descrever a estrutura cristalina? O que é a rede cristalina? E como estar dispostos as 14 redes de Bravais.

Dentro da oficina foi apresentado aos estudantes o software CrystalWalk com uma apresentação teórica e logo após, os estudantes foram convidados a abrirem o software nos computadores, utilizando o link de pesquisa, software CrystalWalk (<https://crystalwalk.herokuapp.com/>); onde poderão construir uma representação das estruturas da rede cristalina e observar como é composta a célula unitária no plano tridimensional da plataforma, trasladando assim a teoria para a observação e prática.

A participação dos alunos bem como a utilização do Laboratório de Informática foi autorizada pelo professor Josberg Silva Rodrigues e pelo técnico do laboratório de informática Tiago Matias da Silva, tendo participado da oficina 17 alunos do 6° e 9° período do curso de Ciências Naturais/Química.

Tal estudo por ser científico, teve a preocupação com a utilização de métodos de investigação, podendo ser levado a debates em congressos científico-pedagógicos e publicado em revistas científicas que poderão, por conseguinte, extrair novos resultados sobre o tema e, assim, responder de forma eficaz às necessidades educacionais, em especial sobre a exposição do assunto. Percebe-se, portanto, a relevância da investigação do tema apresentado e delimitado nesta proposta como contribuição para os saberes e para as práticas docentes, em especial por se apresentar adequada à área de formação de Professores de física e química.

Os objetivos são promover a modernização do ensino da física e química assim como previsto em variadas habilidades da nova BNCC; utilizando uma plataforma digital interativa, composta de visualização e comparação; além diversos tipos de inputs audiovisuais e dar ao educando, a oportunidade do auto aprendizado, visto que a interação com o conteúdo poderá proporcionar isso.

Este estudo encoraja os professores e administradores no setor de educação a considerarem tais aplicações como uma ferramenta de ensino, dando-lhes a chance de planejar e desenvolver uma integração eficaz em suas práticas de ensino dentro do currículo existente.

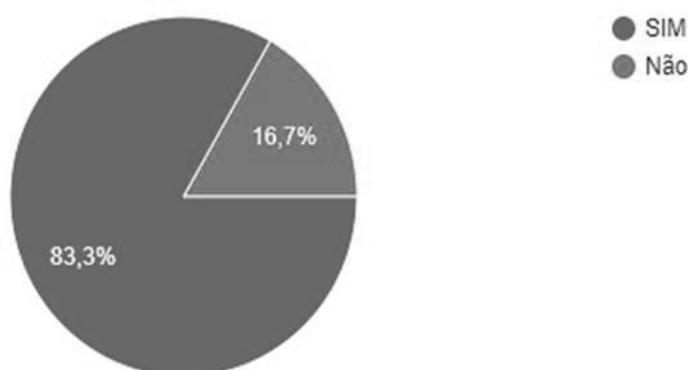
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Análise da primeira parte do questionário

Inicialmente os alunos foram questionados sobre sua percepção de cristais em seu cotidiano, como ilustra o Gráfico 1.

Gráfico 1 – Você consegue observar a presença de algum cristal em seu cotidiano?

6 respostas



Como pode ser visto, nesta pequena amostra, 83,3% dos alunos conseguem observar a presença de cristais em seu cotidiano. Enquanto 16,7% dos alunos não têm conhecimento da presença desses cristais no seu dia a dia.

Os alunos também foram questionados se poderiam identificar esses cristais. Assim obtendo as seguintes respostas:

Açúcar.

O açúcar e o sal de cozinha

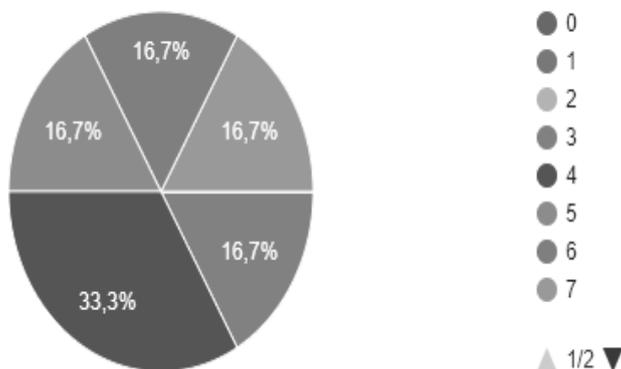
Geralmente é de sal e açúcar. Mas existem algumas pedras com estruturas cristalinas bem comuns no solo, parecem até diamantes.

Acredito que grãos de sal, açúcar e flocos de neve tem uma estrutura cristalina que é presente no cotidiano.

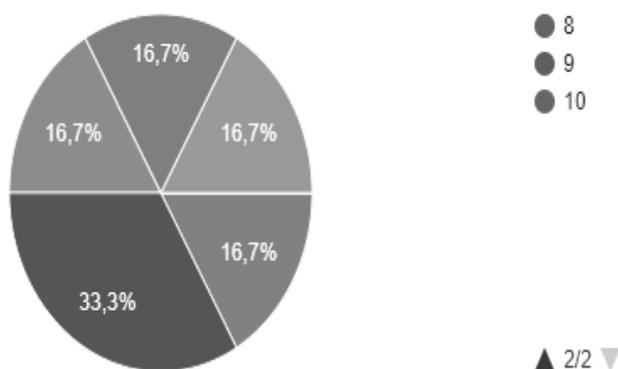
Sal de cozinha (cloreto de sódio).

Gráfico 2 – Em relação ao seu conhecimento com relação aos conceitos de rede cristalina e cristais, avalie-o em uma escala de 0 a 10.

6 respostas



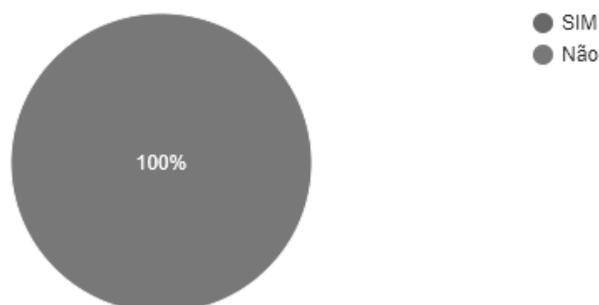
6 respostas



Como ilustra o Gráfico 2, dos 17 alunos entrevistados apenas 4 responderam que em uma escala de 0 a 10, tem um nível de conhecimento 4. O desconhecimento acerca do que seriam esses conceitos de estruturas pode ter contribuído para que houvesse esse tipo de resposta. De forma geral, os alunos mostram acreditar que o seu conhecimento prévio pode ser medido através da escala.

Gráfico 3– Você conhece ou já teve contato com o Software CrystalWalk?

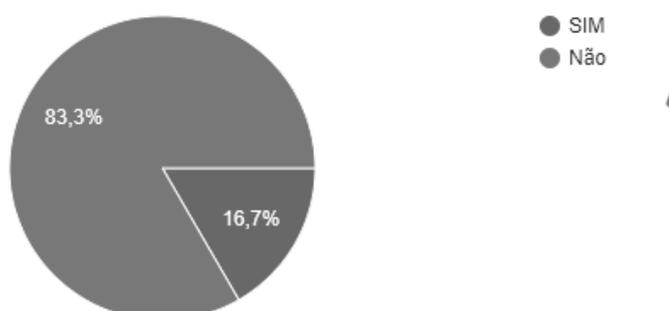
6 respostas



Como pode ser visto, cerca de 100% responderam negativamente. O fato de a maioria dos alunos não conhecer esse tipo de tecnologia pode ser um aliado do professor, considerando que os alunos precisam ser introduzidos neste mundo tecnológico. Esses jovens fazem parte da primeira geração submersa na tecnologia, a Geração Z, e considerando o perfil desses primogênitos digitais a utilização de recursos tecnológicos como o software CrystalWalk como ferramenta educacional no ensino é possível, mas também oferece grandes possibilidades no que se refere à melhoria do processo de ensino-aprendizagem e observação crítica.

Gráfico 4- Dentro do contexto de rede cristalina você poderia conceituar célula unitária?

6 respostas



A maioria dos alunos respondeu negativamente (10 alunos) o gráfico mostra a participação apenas de 6, como pode ser visto no Gráfico 4. Apesar disso, o número considerável de alunos que responderam afirmativamente aponta que os docentes da

instituição não somente têm conhecimento do que é uma rede cristalina, mas também entendem o papel da célula unitária disposta dentro de um sistema cristalino.

4.2. Análise da segunda parte do questionário.

Utilizando o conhecimento adquirido com a oficina, os alunos foram questionados com cinco questões.

O que são células unitárias?

Que informações são necessárias para descrever uma estrutura cristalina?

O que é um sistema cristalino?

De acordo com a observação da estrutura cristalina construída no software Crystalwalk o que pode se concluir a respeito de sua construção.

Com a utilização do software Crystalwalk, você concorda que houve a redução da complexidade do conceito de rede cristalina?

A análise minuciosa das respostas dos alunos a tais questionamentos mostra que o trabalho conjunto de teoria e prática, efetiva-se em forma de conhecimento prévio e duradouro uma vez que esses conceitos se enraízam em forma de resposta dentro do que se é questionado. Em relação às perguntas relacionadas a utilização e observação do Software CrystalWalk, mostra que 100% dos alunos constataram em suas respostas que a utilização de tal recurso facilitou a percepção e tornou bem menos complexo o entendimento das estruturas cristalinas criadas a partir do software.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir de uma avaliação empírica da prática docente tem-se notado a pouca simpatia que os jovens sentem pelas disciplinas de Física, Química e Matemática; rejeição ou medo inculcados desde os primeiros níveis escolares, por isso ao fazer este trabalho voltado para a disciplina de Física foi observado que há muito ensino nestes aspectos.

Os softwares de simulação tridimensional como o CrystalWalk, têm se tornado cada vez mais realistas, oferecendo a possibilidade ao aluno controlar e observar a dinâmica dos fenômenos representados em seu plano. Em se tratando do CrystalWalk, o mesmo possibilitou que os alunos tivessem contato direto com o objeto em estudo, neste caso, a rede cristalina, possibilitando que a partir de situações-problemas lançadas durante a oficina os alunos refletissem sobre suas ações e interpretações, que podiam levá-los a erros ou acertos na resolução das questões, fazendo com que os mesmos fossem cautelosos na busca de respostas.

É preciso considerar os interesses que eles têm e tornar as sessões mais atrativas para eles e estar em constante busca de métodos mais atrativos para facilitar o aprendizado dos alunos.

Espero que assim como pessoalmente considerei as atividades marcantes e interessantes, espero que os alunos também, pois são direcionados a eles na busca de participação e motivação para se aprofundar no estudo da física. Agora que essa etapa acabou, percebo que estou realmente começando o trabalho real.

Diante dos resultados obtidos nesse trabalho conclui-se que o software CrystalWalk facilitou a aprendizagem da percepção da rede cristalina e suas estruturas, tendo sido verificada uma aceitação em 100% da parte dos alunos como recurso didático.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BAI, Lucas Bueno Lima. **Revisitando o Oscilador Harmônico Quântico via transformada de Fourier**. 2020.

BARDELLA, Fernando. **Crystalwalk: um software didático-interativo para síntese e visualização de estruturas cristalinas**. São Paulo: USP, 2016.

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. Sobre a necessidade do conceito de fóton. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 43, 2021.

DOS SANTOS, Caio Matheus Fontinele; LOBO, Matheus Pereira. FÓTON NA ESCALA DE PLANCK. In: **II Workshop em Ensino de Física do Tocantins**. 2018.

DUARTE, Vitor Santos *et al.* **Análise estrutural e topológica de um Novo híbrido sulfonamida-chalcona**. 2019.

FRANCO, Chris Hebert; DO CARMO, Weberton Reis; DINIZ, Renata. Introdução à quantificação de fases cristalinas: Um exemplo prático e ilustrativo sobre os fundamentos. **Jornal Experimental técnico**, v. 4, n. 03, p. 20-34, 2021.

GARCIA, Leandro Borges *et al.* **O estudo da geometria espacial motivado pela cristalografia**. 2020.

GOMES, Arianne Vellasco. **Estrutura eletrônica de cristais: generalização mediante o cálculo fracionário**. 2018.

LAGE, Eduardo. O oscilador harmônico. **Revista de Ciência Elementar**, v. 7, n. 2, 2019.

LIMA, Francisco de Assis Fernandes; DA COSTA, Franklin Roberto. A linguagem cartográfica e o ensino-aprendizagem da Geografia: algumas reflexões. **Geografia Ensino & Pesquisa**, v. 16, n. 2, p. 105-116, 2012.

LIMA, Nathan Willig *et al.* Um estudo metalinguístico sobre as interpretações do fóton nos livros didáticos de física aprovados no PNLDEM 2015: elementos para uma sociologia simétrica da educação em ciências. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, p. 331-364, 2018.

MASCARENHAS, Yvonne Primerano. O Problema da Fase em Cristalografia. **Journal of Experimental Techniques and Instrumentation**, v. 4, n. 03, p. 1-19, 2021.

NETO, José Alves Calado. O saber cartográfico no ensino de geografia: considerações sobre sua aplicação na educação básica. **Pensar Geografia**, v. 1, n. 2, 2017.

OLIVEIRA, Ivan S. **Introdução à física do estado sólido**. Editora Livraria da Física, 2005.

SENA, Carla Cristina R. Gimenes; DO CARMO, Waldirene Ribeiro. Cartografia Tátil: o papel das tecnologias na Educação Inclusiva. **Boletim Paulista de Geografia**, v. 99, p. 102-123, 2018.

TANAUE, Helena Borlina; BRUNO-ALFONSO, Alexys. Análise das funções de Wannier de um cristal fotônico unidimensional. **Caderno de resumos**, p. 10, 2019.

TANAUE, Helena Borlina; BRUNO-ALFONSO, Alexys. Otimização de funções de Wannier em cristais fotônicos sem simetria de inversão. **Proceeding series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 7, n. 1, 2020.

VIZOTTO, Giovana Pereira; DE FIGUEIREDO CAMARGO, Rubens. Oscilador Harmônico Fracionário. **Proceeding series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 6, n. 1, 2018.

APÊNDICE

O estudo da Rede Cristalina: Questionário 1.

1. E-mail.
2. Você consegue observar a presença de algum cristal em seu cotidiano?
3. Se sua resposta foi afirmativa a questão anterior identifique o nome desse cristal.
4. Em relação ao seu conhecimento com relação aos conceitos de rede cristalina e cristais, avalie-o em uma escala de 0 a 10.
5. Você conhece ou já teve contato com o Software CrystalWalk?
6. Dentro do contexto de rede cristalina você poderia conceituar célula unitária?

O estudo da Rede Cristalina: Questionário 2.

7. O que são células unitárias?
8. Que informações são necessárias para descrever uma estrutura cristalina?
9. O que é um sistema cristalino?
10. De acordo com a observação da estrutura cristalina construída no software Crystalwalk o que pode se concluir em respeito de sua construção.
11. Com a utilização do software Crystalwalk, você concorda que houve a redução da complexidade do conceito de rede cristalina?