



**Universidade Federal de Uberlândia  
Instituto de Física**

**Licenciatura em Física**

**SISTEMAS DE SPINS INTERAGENTES:  
UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA**

**Maísa Poiani**

**Uberlândia-MG  
2023**

**Maísa Poiani**

**SISTEMAS DE SPINS INTERAGENTES:  
UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado à Coordenação do Curso de Licenciatura em Física como requisito parcial para obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Orientador: Edson Vernek

**Uberlândia-MG  
2023**



**Universidade Federal de Uberlândia  
Instituto de Física**

**Coordenação do Curso de Licenciatura em Física**

A banca examinadora, conforme abaixo assinado, certifica a adequação deste trabalho de conclusão de curso para obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Uberlândia, 01 de dezembro de 2023

**BANCA EXAMINADORA**

---

Edson Vernek

---

Ricardo Kagimura

---

Adevailton Bernardo dos Santos

**Uberlândia-MG  
2023**

# Agradecimentos

Agradeço principalmente ao Prof. Dr. Edson Vernek, que sempre foi como um mestre, apresentando uma paciência inesgotável e alegria imensa em transmitir seus conhecimentos, que não são poucos. Sempre me inspirarei nesse grande cientista para seguir com amor a carreira acadêmica. Graças ao seu incentivo, motivação e orientação nesta trajetória que hoje chego aqui.

Agradeço aos meus colegas de curso que mantiveram a união para estudarmos juntos e não deixar nenhum membro desistir de um caminho tão gratificante, contando sempre com a graça e companheirismo que só eles têm.

Além disso, agradeço aos meus pais por sempre acreditarem na minha melhor versão e me apoiarem em todas as minhas decisões, sendo essenciais para me ajudar a seguir em frente.

Por último, mas não menos importante, agradeço ao Prof. Dr. Adevailton Bernardo dos Santos e ao Prof. Dr. Ricardo Kagimura, coordenadores do curso de Licenciatura em Física da Universidade Federal de Uberlândia em diferentes períodos. Ambos são e foram incríveis em seus cargos, sendo grandes apoiadores dos alunos durante o período de formação.

# Resumo

O ensino de física é, por si só, desafiador. Entretanto, com a crescente popularidade da mecânica quântica, a temática é por vezes associada a contextos não científicos, o que torna urgente a necessidade de difundir conhecimentos básicos sobre física de sistemas quânticos ainda na educação básica. Em razão disso, este estudo visa promover uma introdução acessível e descomplicada aos sistemas de spins interagentes, utilizando o modelo de Heisenberg para analisar cadeias de spins. Para isso, construímos uma fundamentação teórica que ampara a diagonalização de matrizes e o estudo de fenômenos quânticos, inclusive abordando o Efeito Kondo. Ademais, a partir da criação e uso de programas computacionais, obtivemos resultados numéricos exatos que nos permitiram interpretar quantidades físicas relevantes, que foram fundamentais para a contextualização dos sistemas interagentes. Tudo isso é contextualizado para os alunos da educação básica utilizando peças de encaixe palpáveis e coloridas para ilustrar conceitos do mundo quântico. Essa abordagem se enquadra à metodologia de gamificação, que torna o aprendizado mais envolvente e acessível aos alunos. Os discentes se tornam protagonistas da construção do saber aproveitando o passatempo clássico de montagem de peças e trabalhando a inclusão. Por fim, percebemos que a gamificação se mostrou uma estratégia eficaz para o docente tornar o aprendizado mais envolvente e acessível, habilitando os alunos a explorarem conceitos mais complexos no campo da mecânica quântica, que são elucidados na construção teórica desse trabalho.

**Palavras-chave:** Física Moderna e Contemporânea; Mecânica quântica; Spins; Ensino; Gamificação.

# Abstract

Teaching Physics is inherently challenging. However, with the growing popularity of quantum mechanics, the topic is sometimes associated with non-scientific contexts, which urges the dissemination of basic knowledge about physics of the quantum realm in elementary education. Therefore, this study aims to promote an accessible and uncomplicated introduction to interacting spin systems, using the Heisenberg model to analyze spin chains. To this end, we built a theoretical foundation that supports the diagonalization of matrices and the study of quantum phenomena, including addressing the Kondo Effect. Furthermore, from the creation and use of computer programs, we obtained exact numerical results that allowed us to interpret relevant physical quantities, which were fundamental for the contextualization of interacting systems. All of this is contextualized for basic education students using tangible and colorful fitting pieces to illustrate concepts from the quantum world. This approach fits into the gamification methodology, which makes learning more engaging and accessible to students. Students become protagonists in the construction of knowledge, taking advantage of the classic pastime of assembling parts and working towards inclusion. Finally, we realized that gamification proved to be an effective strategy for teachers to make learning more engaging and accessible, enabling students to explore more complex concepts in the field of quantum mechanics, which are elucidated in the theoretical construction of this work.

**Keywords:** Modern and Contemporary Physics; Quantum Mechanics; Spins; Teaching; Gamification..

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>I</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>II</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Fundamentação Teórica</b>	<b>4</b>
2.1 A Quantização da Energia . . . . .	4
2.2 Mecânica Quântica e Matrizes . . . . .	6
2.3 Spins . . . . .	7
2.3.1 Interação entre spins . . . . .	8
2.4 Efeito Kondo . . . . .	9
2.5 Gamificação na Física Teórica . . . . .	9
<b>3 Metodologia</b>	<b>11</b>
<b>4 Desenvolvimento</b>	<b>13</b>
4.1 Um pouco de álgebra . . . . .	13
4.1.1 Spin 1/2 isolado . . . . .	13
4.1.2 Caso de dois spins 1/2 . . . . .	14
4.2 Caso de três spins 1/2 - Análises Computacionais . . . . .	17
4.3 Perspectiva Pedagógica . . . . .	23
4.3.1 Adequações . . . . .	26
<b>5 Conclusões</b>	<b>28</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>30</b>
<b>Apêndice A Código de diagonalização</b>	<b>33</b>
A.1 Inclusão do magnetismo . . . . .	38

# Lista de Figuras

2.1	Comparação da Lei de Planck com a teoria clássica. . . . .	4
4.1	Matriz hamiltoniana para dois spins com sua base como índice. . . . .	15
4.2	Matriz hamiltoniana para dois spins diagonalizada com sua base como índice. . . . .	16
4.3	Matriz hamiltoniana para três spins com sua base como índice. . . . .	17
4.4	Modelo utilizado para a correlação de três spins. . . . .	18
4.5	Valor esperado para cada acoplamento $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ em função de $J$ . Onde $J_{12} = J_{13} = J$ e $J_{23} = 0$ . Note que as correlações são iguais e positivas para $J < 0$ pois estão paralelos entre si. Por outro lado, $J > 0$ , apenas os spins 2 e 3 que estão indiretamente acoplados apresentam correlação positiva. Os outros estão correlacionados antiparalelamente. . . . .	19
4.6	Níveis de energia do sistema em função de $J$ . Onde $J_{12} = J_{13} = J$ e $J_{23} = 0$ . Cada nível de energia é representado por uma linha no gráfico. Note que no caso $J < 0$ , o existem 4 estados de menor energia, enquanto que para $J > 0$ existem apenas 2. Veja discussão no texto. . . . .	20
4.7	Função partição em função da temperatura, de 0,01 a 1. Onde $J_{12} = J_{13} = J$ e $J_{23} = 0$ . . . . .	20
4.8	Entropia do sistema em função da temperatura, de 0,01 a 1. Onde $J_{12} = J_{13} = J$ e $J_{23} = 0$ . . . . .	21
4.9	Energia dos níveis do sistema em função do campo magnético. Onde usamos $J_{13} = J_{12} = 0.5$ , $J_{23} = 0$ e $T = 0$ . . . . .	22
4.10	Valores esperados para cada $S^z$ em função do campo magnético. Onde usamos $J_{13} = J_{12} = 0.5$ , $J_{23} = 0$ e $T = 0$ . . . . .	22
4.11	Valores esperados para cada acoplamento $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ em função do campo magnético. Onde usamos $J_{13} = J_{12} = 0.5$ , $J_{23} = 0$ e $T = 0$ . . . . .	22
4.12	Ilustração do esquema de peças utilizado no jogo. . . . .	24
4.13	Ilustração da disposição de peças para calcular $S^z \uparrow\rangle$ . . . . .	24
4.14	Ilustração da disposição de peças para calcular $S^z \downarrow\rangle$ . . . . .	25
4.15	Ilustração da disposição de peças para calcular $S_1^- \uparrow, \uparrow\rangle$ . . . . .	25
4.16	Sinais em braille úteis à atividade. . . . .	27



# Lista de Tabelas

4.1	Tripletos e Singleto, auto estados de H. . . . .	17
-----	--	----

# 1. Introdução

No início do século XX, a física clássica se mostrava concreta em todos os âmbitos observáveis do mundo macro. Até que em 1900 o físico alemão Max Planck voltou sua atenção para o micro, mais especificamente para a radiação de corpo negro. Ao estudar a radiação eletromagnética emitida por um corpo metálico aquecido, Planck percebeu que a distribuição de comprimentos de onda observada discordava dos resultados previstos pela mecânica clássica. Minuciosamente, o físico notou que as energias das ondas estavam em função de suas frequências, mantendo uma proporcionalidade entre as duas variáveis, contradizendo a afirmação da teoria clássica de que a energia independe da frequência aplicada ao corpo. Quanto à essa proporcionalidade, Planck postulou que a energia depende de uma constante  $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ , - denominada Constante de Planck, considerada como o ponto inicial da mecânica quântica [10].

A evolução científica que a mecânica quântica proporcionou, não parou por aí, trouxe, inclusive, novos conceitos matemáticos. Em 1925, o também físico alemão Werner Heisenberg, expôs a mecânica matricial, que trata do cálculo de grandezas observáveis perpassando por matrizes, como os comprimentos de onda, intensidade e polarização de linhas espectrais [17]. Tal postulado deu origem à diversas outras análises físicas, como a Notação de Dirac - ou Notação Bra-ket -, onde Paul Dirac se aproximou da álgebra linear ao perceber a necessidade da representação de estados físicos com um objeto que está em um espaço vetorial complexo, separando-os ainda em Kets e Bras. Kets são vetores dentro do Espaço de Hilbert, uma homenagem à David Hilbert, que estudou espaços vetoriais em infinitas dimensões. Já os Bras estão no Espaço Dual a este primeiro, uma associação ao dualismo que existe entre Kets e Bras, uma vez que os últimos são os conjugados dos primeiros [23].

Embora a mecânica quântica tenha muitas originalidades, alguns conceitos derivam do estudo do clássico, ou seja, do ato de se questionar e investigar, como é o caso do Spin. Ao estudar as partículas elementares, foi descoberto que elas possuem um momento angular do centro de massa ( $L$ ) e um momento angular intrínseco ( $S$ ), denominados, respectivamente, momento angular orbital e spin. A diferença é que, um elétron por exemplo, não pode ter seu spin decomposto em orbitais e cada partícula possui um valor único de spin, enquanto o valor do orbital pode variar conforme a dinâmica do átomo. O caso de maior destaque que utilizaremos no presente trabalho é o de spin  $S = 1/2$ , que algebricamente possui os autoestados *up* e *down*, respectivamente representados por

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Ademais, também trataremos dos operadores de spin, que nada mais são que as famosas Matrizes de Pauli, hermitianas observáveis que se tornam muito úteis em vários estudos [12].

Outro fato interessante sobre a mecânica quântica é que nela não é costumeiro dividir em subáreas como na clássica, onde, por exemplo, as pesquisas de eletromagnetismo raramente cruzam as de óptica, que se distanciam da termodinâmica e etc. Aqui, não é possível fazer tanta distinção entre os tópicos, os estudos são mais intrínsecos uns aos outros. Um forte exemplo disso é o denominado Efeito Kondo, que estudando a mecânica e a termodinâmica de materiais, observamos a condutividade eletromagnética. Nesse efeito, era esperado que ao diminuir a temperatura de um material, a resistividade elétrica também caísse, porém, depois de uma certa temperatura limite - a Temperatura Kondo -, ambos voltam a subir. Esse comportamento se deve ao acoplamento de spins, às propriedades anti-ferromagnéticas ou ferromagnéticas do material em questão, diferenças de energia e entre outros tópicos envolvidos. Ademais, o Efeito Kondo também conta com variações em cenários diferentes, sendo uma teoria abrangente, com implicações primordiais na física da matéria condensada e aplicações em dispositivos eletrônicos [20].

A teoria apresentada pelo físico Japonês Jun Kondo é um avanço consideravelmente recente da física quântica, tendo em vista que possui menos de 100 anos, mas nem por isso é um tema menos complexo ou de menor importância científica. Assim como a maioria dos estudos avançados em mecânica quântica, a teoria Kondo apresenta diversos obstáculos ao ser transformada do formalismo em que costuma ser apresentada até uma linguagem coloquial e acessível. Se colocarmos em perspectiva, por exemplo, alunos do ensino básico, se torna uma tarefa desafiadora explicar sequer o conceito básico do que é a Temperatura Limite Kondo, uma vez que existe um pré conceito sobre a complexidade da física quântica; advindo de um bloqueio para com as ciências exatas e seus estereótipos. A partir desse pensamento, faz-se possível contornar a situação a partir da contextualização histórica e epistemológica da ciência [15], expondo aos alunos de Ensino Básico o contexto de postulação da teoria e porquê ela se fez revolucionária, provocando a motivação dos colegas e fazendo com que a ciência se torna mais acessível.

Visto isso, é fundamental destacar que os objetivos desse trabalho se baseiam no suprimento dessa escassez de acesso ao conhecimento científico, mantendo o enfoque na perspectiva pedagógica da gamificação para a divulgação da mecânica quântica. Sabe-se que a propagação da ideia de inacessibilidade das ciências exatas não advém somente do meio adulto, mas desde a base escolar. Desde a infância a matemática é encarada como a mais complexa dentre as habilidades requeridas ao público infantil [21], portanto buscamos aqui mapear estratégias que utilizam do conhecimento que o estudante deve dispor durante o ensino básico para mostrar que um efeito tão importante e pouco mencionado quanto o Kondo não é algo aterrorizante e vale a pena ser estudado, ou utilizado como pontapé inicial para influenciar o ingresso em outras áreas de estudo, mesmo que não na física. Como metodologia para tal, estudamos o comportamento de partículas em um sistema com campo magnético através de métodos analíticos e de simulações computacionais dispendo de diferente bibliotecas *Python*, então buscamos maneiras de traduzir estudos em quântica de forma didática e alcançável ao público da educação básica,

interpretando como o ensino de física vem sido aplicado no Brasil.

Todavia, é de comum conhecimento que nos dias atuais, os docentes têm um obstáculo adicional: a disseminação extremamente frequente de informações advinda da presença intrínseca das tecnologias no dia-a-dia [19]. Tal fenômeno, além de distrair os alunos em sala de aula, também os atinge com notícias falsas e sem fundamento científico. Com a popularização da mecânica quântica, muitas ideias distintas carregaram a nomenclatura, mas em nada se relacionam com a nanociência [4]. É por isso que a democratização do acesso ao conhecimento que aqui propomos se faz tão necessária, embora seja mais dificultosa ainda no cenário atual da educação [19]. É buscando motivar os alunos da educação básica da nossa sociedade, que propomos a aplicação da gamificação, uma vez que essa diversificação da sala de aula tradicional fornece ao estudante a oportunidade de ser o ator principal da sua construção de conhecimento. Ao mesmo tempo, o professor atua como guia da atividade, garantindo que a todo momento haja aprendizagem autônoma e diversão na construção do conhecimento [24]. Parafrazeando Rubem Alves: “Pois o que vocês ensinam não é um deleite para a alma? Se não fosse, vocês não deveriam ensinar. E se é, então é preciso que aqueles que recebem, os seus alunos, sintam prazer igual ao que vocês sentem.” [2].

Em suma, após muitas discussões e reflexões, elaboramos uma atividade baseada no uso do tradicional jogo de peças de encaixe, porém personalizaremos cada elemento para ilustrar a interação entre spins. Dessa maneira, o manuseamento dos objetos pode ser feito por parte dos alunos a partir da orientação do professor, que seguirá o caminho necessário para que a contextualização seja feita em etapas do conceito mais básico até a complexidade que a turma caminhar. Apresentamos alguns modelos de acoplamento de spins e os comparamos com resultados obtidos computacionalmente. Outrossim, o professor pode acessar o código de diagonalização de matrizes e plotagem de gráficos pertinente à atividade nos anexos desse trabalho, como uma maneira de apresentar números exatos correspondentes aos cenários que os alunos criarão com as peças. Ainda mencionando Rubem Alves, o professor deve exercer a função de pastor do conhecimento, trazer às ovelhas(estudantes) a luz do conhecimento, “lembrem-se de que vocês são pastores da alegria, e que a sua responsabilidade primeira é definida por um rosto que lhes faz um pedido: “Por favor, me ajude a ser feliz...”” [2].

## 2. Fundamentação Teórica

### 2.1 A Quantização da Energia

No período antecessor ao da mecânica quântica, haviam muitas certezas acerca da ciência estabelecida até então, a física clássica. Porém, com novos estudos a respeito do comportamento de partículas subatômicas, surgiram experimentos que contradiziam o previsto pela teoria clássica. O primeiro grande passo para a separação entre a mecânica clássica e a quântica foi feito por Max Planck ao estudar a radiação de um corpo negro. Planck definiu tal corpo como um objeto cuja temperatura faz com que esse absorva toda a energia recebida e emita apenas radiação. A partir disso, o físico concluiu que a intensidade de cada comprimento de onda da radiação emitida variava em função da temperatura do corpo, ao contrário do previsto classicamente, que impunha que a intensidade de radiação depende do material do corpo. Realizando o experimento e os cálculos diversas vezes, Planck percebeu que a teoria clássica realmente não se comprovava, que a energia medida não se apresentava continuamente, mas em pequenas quantidades. Planck propôs, então, um gráfico (mostrado na figura 2.1) que corrige a catástrofe do ultravioleta, o que ficou historicamente conhecido como o nascimento da teoria da mecânica quântica [10].

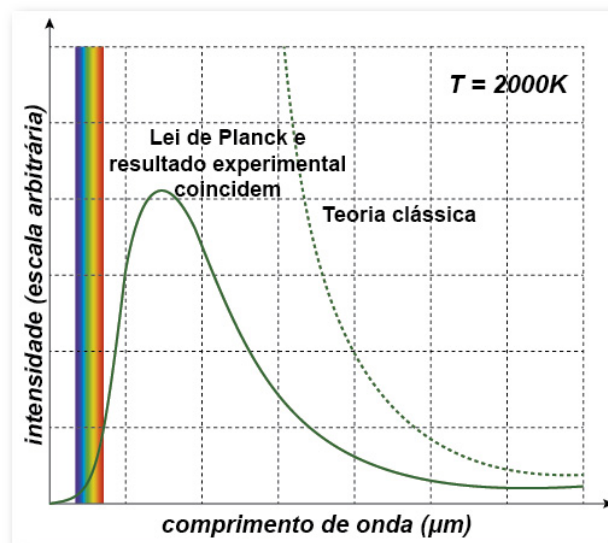


Figura 2.1: Comparação da Lei de Planck com a teoria clássica.

Fonte: [www.ifl.unicamp.br](http://www.ifl.unicamp.br)[1]

Cinco anos após a publicação do trabalho de Planck, Albert Einstein propôs uma explicação

mais detalhada para o fenômeno, ao qual denominou de Efeito Fotoelétrico. O efeito descreve o comportamento de um material que emite radiação ao ser exposto à radiação eletromagnética em uma frequência específica. Essa frequência deve ser suficiente para que o corpo emita um elétron como consequência à exposição aos fótons provindos da radiação. Com isso, o nível energético dos elétrons sobe e então acontece a reação de emissão de um átomo de carga elétrica negativa. Novamente equiparando à teoria clássica, era esperado que o corpo absorvesse a energia dos fótons a qualquer temperatura e bastaria um período de tempo para o elétron saltar. No entanto, o que o Efeito Fotoelétrico comprova é que é necessário que a frequência de radiação seja alta o suficiente para tal, sem que o tempo de espera seja necessário; uma vez que se a frequência estiver abaixo do necessário, o elétron não saltaria, portanto o tempo de espera seria infinito [10].

Tais estudos foram o pontapé inicial para o desenvolvimento da mecânica quântica (que segue até os dias atuais). Para prosseguir estruturando a base da área científica, Niels Bohr propôs, em 1913, o seu modelo do átomo de hidrogênio. Bohr comprovou que os elétrons são atraídos pelo núcleo devido à uma força eletrostática, responsável pela força centrípeta que os mantém estáveis em suas orbitas. Esta estabilidade resulta do fato de que, mesmo acelerados, os elétrons não emitem radiação, a menos que interajam com o meio externo, trocando energia. Para a transição de nível orbital, o elétron absorve ou emite fótons, de maneira que tanto o fóton quanto o elétron têm certos valores determinados de energia, dados respectivamente pelas equações (2.2) e (2.3) abaixo. Essas fórmulas satisfazem um postulado de Planck de 1905, a qual diz “Qualquer ente físico com um grau de liberdade cuja coordenada é uma função senoidal do tempo (isto é, executa oscilações harmônicas simples) pode possuir apenas energias totais e que satisfaçam a relação (2.1)” [10, 13].

$$E = nh\nu \quad (n=0,1,2,3\dots) \quad (2.1)$$

$$E(n)_{\text{eletron}} = -\frac{1}{n^2} \times 13,6 \text{ eV} \quad (2.2)$$

$$\Delta E_{\text{foton}} = h\nu = \left( \frac{1}{n_{\text{baixa}}^2} - \frac{1}{n_{\text{alta}}^2} \right) \times 13,6 \text{ eV} \quad (2.3)$$

sendo  $E$  a energia,  $h$  a constante de Planck,  $\nu$  a frequência e  $n$  o nível energético.

Em vista do exposto, percebe-se que a mecânica quântica teve uma origem controversa e surpreendente, uma vez que em muitos casos suas previsões divergiam do previsto pela física clássica. Porém, a quântica trouxe um grande avanço para a ciência mundial, possibilitando à humanidade maior compreensão a respeito do universo. Isso se deve pois o estudo de partículas subatômicas e sua dinâmica resultaram em experimentações que revolucionaram, inclusive, o mundo da tecnologia, saindo dos laboratórios de pesquisa científica de alta complexidade para aplicação prática no nosso dia-a-dia. Portanto, a compreensão de conceitos básicos da física quântica é de fundamental importância na sociedade atual. A divulgação precisa desses conceitos e o seu escopo é também importante para inibir a propagação de informações distorcidas sobre o tema tão comuns nos nossos dias [4].

## 2.2 Mecânica Quântica e Matrizes

O trabalho de Bohr, agregado ao de Planck, Einstein e dentre outros cientistas citados na seção anterior, se somam às teorias apresentadas posteriormente por Heisenberg, vencedor do prêmio Nobel de Física de 1932 pela “criação da mecânica quântica”. Heisenberg não só estabeleceu o famoso Princípio da Incerteza como também trouxe um novo aspecto matemático para a álgebra e o cálculo diferencial e integral utilizados na mecânica quântica. A mecânica matricial é considerada como um passo inicial rumo à linguagem matemática da quântica, razão pelo qual foi atribuído o Nobel à Heisenberg, considerado um dos pioneiros na área. Werner organizou essa abordagem matemática em matrizes para encontrar grandezas físicas e propriedades mensuráveis -como momento, posição, espectros de energia e campo eletromagnético-, descrevendo-as como operadores, que agem em vetores de estados e descrevem um sistemas mecânico [10].

Mais detalhadamente, a mecânica matricial dá base para uma maneira de interpretação de funções de onda, que nada mais são que a sintetização em forma de função matemática da distribuição espacial e temporal de uma partícula em um sistema quântico. Nesse tratamento, geralmente, a função de onda é chamada de  $\Psi$  (psi) e depende de variáveis espaciais ou grandezas físicas relevantes ao cenário.  $\Psi$  é representada por uma matriz coluna, a qual cada elemento representa a probabilidade de encontrar uma partícula em determinado estado do sistema referido. Os operadores citados anteriormente são matrizes de diversas formas que atuam nos vetores de estado (matriz coluna  $\Psi$ ) e resultam em um dado sobre o sistema. Por exemplo, ao atuar o operador posição  $\hat{X}$  (matriz infinita, onde cada elemento representa a probabilidade de encontrar a partícula em uma posição específica) em  $\Psi$  obtém-se a posição da partícula correspondente no sistema [12].

Ademais, ao medir uma grandeza física, os resultados possíveis são denominados autovalores, que nada mais é que o valor de multiplicação utilizado para transformar linearmente um vetor. Exemplificando,  $\alpha$  é autovalor do operador  $\hat{X}$  se a Eq. (2.4) é satisfeita, onde  $u$  é um vetor não nulo. A partir daí, encontra-se  $\alpha$  aplicando o método exposto na Eq. (2.5), onde  $I$  é a matriz identidade. Analisando mais cuidadosamente a situação, percebe-se que para cada autovalor existe um ou mais autovetores não nulos associados que seguem à regra imposta na relação (2.4). Portanto, aplicando à física quântica, resume-se que os autovalores configuram as probabilidades de medições de observáveis e seus autovetores correspondem à descrição dos estados em que essas medições são determinadas [23].

$$\hat{X}u = \alpha u \quad (2.4)$$

$$\det(\hat{X} - \alpha I) = 0 \quad (2.5)$$

No mesmo período, seguindo a linha de raciocínio de Heisenberg, Erwin Schrödinger postulou a equação de Schrödinger, função de onda que descreve o comportamento do vetor de estado ao longo do tempo de uma determinada partícula ou sistema físico. A equação de Schrödinger relaciona a derivada em função do tempo com o operador hamiltoniano  $H$  equivalente à energia

do sistema, ou seja, analisa a evolução temporal do estado quântico. Se o sistema não apresenta variações em suas características ao longo do tempo, utiliza-se a Eq. (2.6), denominada Equação de Schrödinger Independente do Tempo, que viabiliza o cálculo dos níveis de energia do sistema (autovalores), juntamente com as funções de onda associadas à cada nível (autovetores). Em contrapartida, se existe dinâmica temporal, está intrínseco que também existem variações nas funções de onda do sistema em diferentes momentos e também diferentes resultados de medição de observáveis, resultados estes dados pela relação (2.7), onde  $h$  é a constante de Planck [12].

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.6)$$

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi. \quad (2.7)$$

## 2.3 Spins

Ainda em se tratando da equação de Schrödinger, aplicando-a ao cenário dos spins, pode-se calcular as probabilidades de medição de observáveis relacionados à essa propriedade, como a componente do spin em uma determinada direção, a magnetização e as correlações entre partículas entrelaçadas. Paralelamente, dentro de estudo das propriedades de elétrons, estabelece-se a dinâmica de quantização de spins, descoberta a partir dos experimentos de Otto Stern e Walther Gerlach em 1922. O experimento consiste basicamente da ação de enviar feixes de elétrons para um aparato através de uma trajetória que perpassa um campo magnético  $\vec{B}$  perpendicular ao movimento das partículas. Classicamente, era esperado uma projeção contínua no aparador, mas observou-se uma distribuição em duas direções diferentes, designadas como *spin up* ( $\uparrow$ ) e *spin down* ( $\downarrow$ ), assumindo respectivamente os valores  $+\frac{1}{2}$  e  $-\frac{1}{2}$ , que representam a projeção do spin ao longo do eixo  $Z$ . Quando estuda-se a dinâmica do spin de partículas ao longo de cada eixo, utiliza-se das Matrizes de Pauli, criadas pelo físico austríaco Wolfgang Pauli. As matrizes tem a forma: [12]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Tomando maior atenção à essas representações algébricas, notamos que o quadrado de cada matriz de Pauli é igual à matriz identidade  $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Porém, a realização da operação de comutação entre as matrizes nos demonstra que os spins têm uma natureza não comutativa. Diferente da aplicação do quadrado, o cálculo dos autovalores e autovetores apresentam diferentes resultados para cada matriz. Isso possibilita a escolha de um eixo de projeção de



preferência para cada estudo, na maioria dos casos utiliza-se o eixo  $Z$ . Ainda, uma vez que spins possuem uma rotação intrínseca e valores quantizados (como  $\frac{1}{2}$ ,  $-\frac{3}{2}$ ,  $1...$ ), podem ser correlacionados. Dependendo das propriedades de cada momento envolto no cenário em questão, forma-se um entrelaçamento e uma distribuição complexa, denominada figurativamente de **nuvem de spins** [7]. O nome de dá justamente pela forma indefinida e por estar ligado à um comportamento coletivo de sistemas quânticos.

### 2.3.1 Interação entre spins

Um spin isolado pode ser pensado (pelo menos de maneira pouco rigorosa) como um pequeno momento magnético, tal qual uma agulha de bússola, que possui dois polos, norte e sul. Esse pequeno ímã cria em torno de si um campo magnético capaz de interagir com qualquer outro. Tal interação tende a fazer com que os polos desses dois momentos magnéticos fiquem opostos entre si [7]. Embora essa seja uma visão clássica e, portanto, insuficiente para descrever a física associadas aos spins, que são quânticos, ela nos ajuda a compreender melhor o que acontece com os últimos. Ainda, apesar do fato de que os mecanismos de interação entre elétrons são mais complicados, a analogia clássica é útil para compreender a interação entre momentos magnéticos de íons atômicos e entre íons e spins de elétrons em materiais, por exemplo.

Em um sistema de muitos spins em um dado material, as interações ocorrem aos pares. Mesmo assim, são capazes de produzir um estado quântico coletivo que pode determinar as propriedades magnéticas macroscópicas do material [10]. Isto é, como a substância reage à presença de um campo magnético externo. Há uma variedade de propriedades físicas de sistemas materiais cujos mecanismos mais elementares estão intrinsecamente relacionados com as interações entre spins nesses materiais. Do ponto de vista teórico, é simplesmente fascinante compreender o comportamento coletivo de sistemas interagentes. Esse campo de pesquisa, conhecido como sistemas fortemente correlacionados, tem despertado interesse de cientistas desde os primórdios da mecânica quântica [14].

Outrossim, como a interação entre spins possui grande significância na mecânica quântica, é claro que é necessário aplicar e, por conseguinte, desenvolver ferramentas matemáticas, uma delas sendo a mecânica matricial. Heisenberg representou as interações entre spins (com  $S = 1/2$ ) através de operadores de spins, os quais tomam a forma de matrizes em uma dada representação. Esse modelo de interação entre spins costuma levar o nome de **Modelo de Heisenberg** [23]. A ideia aqui é apresentar um desenvolvimento de álgebra linear básica que fique acessível para indivíduos com conhecimento elementar em matrizes quadradas, determinantes, etc. Para tanto, utilizamos do modelo

$$H = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.11)$$

onde  $J$  é uma constante real que mede a intensidade com que os spins interagem entre si, enquanto que  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  representam operadores de spin, que podem ser representados por matrizes de Pauli.

## 2.4 Efeito Kondo

Em sistemas metálicos, um spin individual localizado (ou impureza magnética) pode interagir com uma coleção de outros spins providos pelos elétrons de condução. Um dos possíveis fenômenos físicos que resulta desse mecanismo é o que chamamos de **blindagem entre spins**. Isso ocorre porque um grupo de elétrons com seus spins circundam o momento magnético central (que constitui a impureza magnética) conspiram para anular o efeito desse campo a longa distância. Pictorialmente, esses spins externos que se alinham (em geral opostamente ao spin central), formam uma nuvem de spins em volta do átomo central, que tem seu efeito magnético reduzido a longas distâncias. Portanto, essa partícula sofre uma redução da sua interação com outras mais afastadas. Daí porque se dá a noção de blindagem magnética. Esse fenômeno tem sido extensivamente estudado teórica e experimentalmente em pesquisas científicas nas últimas décadas. Dentre os diversos exemplos destacamos a belíssima realização do Efeito Kondo, descoberto nos anos 1990 através do uso de um gás bidimensional de elétrons com impurezas magnéticas em superfícies metálicas. Esse é o caso de átomos de Cobalto sobre superfície de Cobre, em que os elétrons livres do Cobre blindam os spins dos átomos de Cobalto [14].

Mais explicitamente, as interações de troca entre os spins dos elétrons e os momentos magnéticos localizados dos átomos magnéticos no material formam uma nuvem de spin dos elétrons de condução ao redor do átomo magnético. Essa nuvem de spin é, resumidamente, uma descrição pictórica do comportamento coletivo dos spins que se instalam no sistema quando a temperatura do sistema é menor que um certo valor característico, chamado de Temperatura Kondo ( $T_K$ ) [14]. Nesse regime, a correlação é tão relevante que resulta em efeitos macroscópicos observáveis, tal como a drástica modificação nas propriedades de transporte do sistema.

Do ponto de vista teórico, não possui um tratamento exato, como é típico de sistemas de muitos corpos interagentes. Entretanto, alguns estudiosos utilizam da Teoria de Perturbação de Anderson para descrever de modo aproximado o Efeito Kondo. O Físico Jun Kondo, pioneiro na explicação do fenômeno, propôs que o acoplamento entre o spin localizado no átomo e os elétrons do metal a qual a partícula é exposta, provoca uma perturbação na Hamiltoniana do sistema e, conforme a temperatura diminui, a interação dos elétrons com o momento de spin do átomo provocam o efeito coletivo da blindagem do spin localizado [7, 8]. Apesar de ser um efeito largamente estudado desde a sua descoberta, ainda constitui tema de grande interesse em física da matéria condensada com consequências importantes em diversos sistemas físicos tais como pontos quânticos, moléculas em metais, etc.

## 2.5 Gamificação na Física Teórica

Metodologias ativas são estratégias de ensino que visam motivar o aluno a participarem diretamente do processo de aprendizagem. Tais ações geram autonomia através do enfrentamento de situações-problema reais, que estimulam o aluno a investigar, debater e ir além da sala de aula tradicional [16]. Habilitações como essas são exigidas na atual Base Nacional

Curricular Comum (BNCC), para formar cidadãos preparados às situações do cotidiano e que saibam resolver problemas contemporâneos [9]. Como uma dessas questões atuais é a crescente disseminação de notícias falsas envolvendo a mecânica quântica, a metodologia ativa de ensino é mais que bem-vinda nesse trabalho, tendo nossos objetivos em perspectiva [5].

A gamificação é uma abordagem que advém das metodologias ativas de aprendizagem. Neste aspecto, são empregados elementos e mecânicas de jogos em contextos normalmente não relacionados à esse tipo de passatempo. Ao enriquecer a aula com competições, recompensas e desafios em prol de um objetivo, o aprendizado se torna envolvente [6]. Entretanto, para motivar os ouvintes, o mentor da atividade deve estabelecer as regras de forma clara, bem como explicitar o motivo inicial e final para a realização dos jogos [25]. Dessa maneira, a absorção de conteúdos será facilitada de forma lúdica, inclusive, aprimorando habilidades cognitivas e sociais e estreitando o laço professor-aluno.

Na física, a gamificação auxilia na compreensão de conceitos complexos, uma vez que é um meio contundente de ilustrar conceitos teóricos que por vezes são muito abstratos para o estudante [5]. Quem nunca ouviu um professor dizendo que “física só se aprende praticando”? E que meio mais atrativo de praticar física que a aplicando ao contexto de jogos familiares ao aluno? De trilhar uma trajetória dividida em fases e, ao mesmo tempo, diagnosticar a autonomia e aplicação de saberes do aluno? Essa metodologia ativa é uma aliada dos docentes e discentes em diferentes aspectos, por isso, iremos usufruir da ideia da gamificação para abordar mecânica quântica na educação básica.

### 3. Metodologia

Embora o tema dessa proposta apresente um conteúdo de pesquisa científica avançada e de ponta, traz também no seu cerne um objetivo pedagógico. Nesse sentido, o caráter exploratório da proposta baseia-se na aplicação dos conceitos fundamentais da Mecânica Quântica e no ensino da física de sistemas interagentes de spins, em particular do Efeito Kondo, na educação básica. Portanto, propomos uma apresentação extensa, que inclui desde a base introdutória da mecânica quântica até o efeito Kondo propriamente dito. Reconhecemos que essa proposta é ambiciosa e o trabalho ainda não foi experimentado na prática, portanto é uma tese de método hipotético-dedutivo.

Para atingir nossos objetivos, antes de tudo foi necessário que a autora estudasse o problema físico em questão, já que por ser um assunto avançado, não é comumente abordado nos cursos de graduação. Para tal, os estudos contaram com revisão literária baseada principalmente no livro Mecânica Quântica, de David J. Griffiths e *Modern Quantum Mechanics*, de J. J. Sakurai. A partir daí, em conjunto com o professor orientador, inciou-se a diagonalização analítica da Hamiltoniana do problema, envolvendo um acoplamento de dois spins e posteriormente de três. Esse estudo analítico exato, infelizmente, não pode ser generalizado para um número arbitrariamente grande de spins, porque o tamanho das matrizes com as quais precisamos lidar cresce rapidamente nessa ocasião.

É por isso que, do ponto de vista teórico, os problemas de muitos corpos interagentes não permitem dos tratamentos analíticos exatos. Tendo em vista essa limitação prática, utilizou-se da programação em *python* para obter a diagonalização numérica exata e então acrescentar outros elementos, como o campo magnético e impurezas. Além disso, foram exploradas diversas bibliotecas cujo cunho é de apoio à física computacional, onde, com o embasamento anterior, tornou-se possível compreender a investigação de simetrias e de sistemas maiores. Ainda assim, há uma limitação computacional, já que com o crescimento do número de spins a memória RAM dos computadores se torna um limitante.

A despeito das limitações teóricas impostas pela própria natureza do problema, nosso objetivo é abordar o fenômeno de interação entre spins por uma perspectiva pedagógica. Nesse sentido, a primeira pergunta que, naturalmente, fizemos foi: É possível instruir um aluno de escola de educação básica a respeito de um tema específico da mecânica quântica? Cremos que a resposta seja afirmativa, mas quais seriam as barreiras e oportunidades? Superar as dificuldades e aproveitar as oportunidades são uns dos desafios propostos nesse projeto.

É pensando nessas dificuldades que elaboramos um trabalho que serve inteiramente como

guia para o professor. Desde o início até o fim, nos orientamos pelos processos de preparação e aplicação de uma aula, seguindo a seguinte distribuição: Para o planejamento das atividades, o docente se prepara estudando a seção de introdução e fundamentação teórica; para a concretização da ação, a seção desenvolvimento é um guia do que pode ser aplicado na sala, buscando utilizar de uma linguagem simples e detalhada acerca dos conceitos físicos - aqui, o professor trilha o caminho da turma conforme o avanço dos discentes.

## 4. Desenvolvimento

### 4.1 Um pouco de álgebra

#### 4.1.1 Spin 1/2 isolado

Em se tratando da álgebra da mecânica quântica de spins, vamos começar pelo caso mais simples de um único spin  $S = 1/2$ . A ideia é ver como os chamados operadores de spin funcionam. Quando falamos de spin 1/2, na realidade estamos pensando em um momento magnético que é a metade do momento fundamental  $\hbar$ , portanto equivale a meio momento fundamental [12]. Sendo esse o caso dos elétrons, cujo spin é compreendido como o grau de liberdade com que os elétrons podem se apresentar. Além disso, os elétrons podem se mover no espaço tridimensional, de modo que a eles são conferidos os graus de liberdade espaciais, ao que chamamos de graus de liberdade orbital. Em certas condições, os spins dos elétrons podem estar vinculados como os graus de liberdades orbitais e, portanto, eles não podem se apresentar de modo independente. Esse fenômeno é denominado acoplamento spin-órbita e tem grande importância na física, estendendo-se desde a estrutura fina dos átomos de muitos elétrons [23]. Tal tema é de demasiado interesse desde o nascimento da mecânica quântica, até os materiais topológicos estudados nos dias atuais. No presente trabalho vamos desprezar completamente os graus de liberdade orbital do elétron e tratar apenas o seu spin.

Vamos considerar um único elétron (ou um momento magnético  $S = 1/2$  qualquer). Quanto ao seu spin, esse sistema pode se apresentar de duas formas,  $+\hbar/2$  ou  $-\hbar/2$ , ao longo de qualquer direção. Isto ocorre porque os spins são momentos magnéticos quantizados intrínsecos aos elétrons, o que significa que um dado spin 1/2 só pode ter as componentes  $\pm\hbar/2$  ao longo de uma dada direção, logo, só há duas configurações possíveis. A essas configurações damos o nome de estados quânticos, representados por  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , correspondendo respectivamente às projeções  $+\hbar/2$  e  $-\hbar/2$  ao longo do eixo de quantização. É comum convencionar a direção  $z$  para analisar os estados dos spin de um dado sistema, de maneira que as componentes referem-se às projeções do spin  $\vec{S}$  ao longo do eixo  $z$  [27]. A essas projeções associamos um operador  $S^z$ , cujas propriedades são:

$$S^z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \quad \text{e} \quad S^z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle. \quad (4.1)$$

A expressão acima significa que os estados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  são autoestados de  $S^z$ , pois a atuação do

operador  $S^z$  sobre cada um deles resulta no mesmo estado multiplicado por uma constante escalar [27].

Outrossim, sistemas de muitas partículas podem se apresentar de diversas maneiras ou configurações. Por exemplo, um sistema de  $n$  spins  $S = 1/2$  fixos no espaço pode se apresentar de  $2^n$  configurações distintas. Ao se estudar um sistema com 2 elétrons não interagentes, no que concerne os seus spins, temos quatro possíveis configurações (ou estados) [23].

#### 4.1.2 Caso de dois spins 1/2

Um sistema de dois elétrons é precisamente o caso de um sistema de spins 1/2. Se tomarmos a direção  $z$ , no caso de 2 elétrons podemos ter apenas as possibilidades  $|\uparrow, \uparrow\rangle$  (*up, up*);  $|\uparrow, \downarrow\rangle$  (*up, down*);  $|\downarrow, \uparrow\rangle$  (*down, up*) e  $|\downarrow, \downarrow\rangle$  (*down, down*). Essas diferentes configurações correspondem aos diferentes projeções de spin ao longo do eixo  $z$  que cada spin pode se manifestar. Como temos 2 spins, representamos essas combinações como  $|m_1, m_2\rangle$ , onde  $m_1, m_2 \in \{\uparrow, \downarrow\}$ . Embora seja arbitrária a escolha da ordem em que os subíndices “1” e “2” aparecem, uma vez escolhida, ela deve ser respeitada durante todas as etapas dos cálculos analíticos ou numéricos. Assim, com a convenção adotada, o spin “1” vive na primeira “casa” enquanto o spin “2” vive na segunda. Para cada “casa” definimos um operador  $S_i^z$ , com  $i = 1, 2$ . Cada operado atua exclusivamente sobre a sua casa correspondente [10]. Assim,

$$S_i^z |m_1, m_2\rangle = \frac{\hbar m_i}{2} |m_1, m_2\rangle, \quad \text{para } i = 1, 2. \quad (4.2)$$

Nesse caso, a nossa base é formada por  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$ , que são ortonormais, ou seja, obedecem a

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1 \quad (4.3)$$

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0. \quad (4.4)$$

Para o caso de dois spins 1/2, o número quântico associado à cada átomo  $m$  descreve a soma de  $m_1$  e  $m_2$ . Logo, nesse cenário, temos três possíveis valores de  $m$ : -1; 0 e 1. Sendo que -1 descreve o acoplamento  $|\downarrow, \downarrow\rangle$ , 0 descreve  $|\uparrow, \downarrow\rangle$  e  $|\downarrow, \uparrow\rangle$  e, finalmente, 1 descreve  $|\uparrow, \uparrow\rangle$  [12]. A partir de todos esses subsunçores, podemos agora unir todas as nossas informações anteriores e construir a Matriz de Heisenberg para esse modelo. Vimos o Modelo do Hamiltoniano de Heisenberg na Eq. (2.11) e, tendo os valores para  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  estabelecidos de acordo com a Eq. (4.2) temos todas as ferramentas para seguir em frente. Aqui, mantemos  $J$  indeterminada, lembrando que o determinamos como a constante real que mede a intensidade com que os spins interagem entre si. O docente então, constrói junto aos seus alunos a matriz da figura 4.1

Para diagonalizá-la, utilizamos de um conceito base da álgebra linear. Não é comum abordar a temática no ensino médio, mas, com o suporte do docente, os discentes que já estudaram operações com matrizes podem desenvolver essas novas habilidades apenas com os saberes matemáticos que já possuem. Inicialmente, nos guiamos pelo fato que uma matriz diagonal

$$\begin{array}{ccccc}
& |\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \\
\langle\uparrow\uparrow| & \frac{\hbar^2}{4}J & 0 & 0 & 0 \\
\langle\uparrow\downarrow| & 0 & \frac{-\hbar^2}{4}J & \frac{\hbar^2}{2}J & 0 \\
\langle\downarrow\uparrow| & 0 & \frac{\hbar^2}{2}J & \frac{-\hbar^2}{4}J & 0 \\
\langle\downarrow\downarrow| & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{4}J
\end{array}$$

Figura 4.1: Matriz hamiltoniana para dois spins com sua base como índice.

Fonte: Autores

é aquela em que todos os elementos fora da sua diagonal principal são nulos. Para obtermos a forma diagonalizada da nossa matriz, partimos do preceito matemático que estabelece que, para uma matriz quadrada ser diagonalizável, é necessário existir uma matriz  $P$  inversível que cumpra a equação

$$P^T H P = H_D, \quad (4.5)$$

onde  $H_D$  é a matriz diagonalizada e  $H$  é a nossa matriz original.<sup>1</sup>

Para fins de descomplicação dos cálculos, isolamos  $H$  conforme equação (4.6). Isso é chamado de decomposição espectral da matriz  $H$ .

$$H = P H_D P^T \quad (4.6)$$

Para encontrar  $P$ ,  $H_D$  e  $P^T$ , é preciso primeiramente deduzir os autovalores e os autovetores da matriz  $H$ . Sabemos que cada autovetor está associado a um autovalor. Além disso, como a única parte não diagonalizada da matriz hamiltoniana para dois spins 1/2 é o seu centro, podemos focar nossa operação para tratar apenas desses valores centrais, da seguinte forma:

$$H_c = \begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2}{4}J & \frac{\hbar^2}{2}J \\ \frac{\hbar^2}{2}J & \frac{-\hbar^2}{4}J \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Para encontrar os autovalores, subtraímos uma constante  $\lambda$  de cada valor da diagonal principal e calculamos o determinante da nova matriz, igualando-o a zero.

$$H_c = \begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2}{4}J - \lambda & \frac{\hbar^2}{2}J \\ \frac{\hbar^2}{2}J & \frac{-\hbar^2}{4}J - \lambda \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

<sup>1</sup>Em geral, é empregado  $H = P H_D P^\dagger$ . Mas, nesse caso, estamos lidando com uma matriz real, portanto podemos seguir utilizando  $P$  transposta para fins didáticos. Isso porque o conceito de matriz transposta é mais simples que o de matriz adjunta hermitiana.



$$\det H_c = \left(\frac{-\hbar^2}{4}J - \lambda\right)\left(\frac{-\hbar^2}{4}J - \lambda\right) - \left(\frac{\hbar^2}{2}J\right)^2 = 0 \quad (4.9)$$

Assim, descobrimos dois valores para a constante  $\lambda$ :  $\lambda_1 = \frac{\hbar^2}{4}J$  e  $\lambda_2 = \frac{-3\hbar^2}{4}J$ . Aqui, já temos a nossa matriz  $H_D$  diagonalizada, uma vez que a sua diagonal é dada pelos autovalores. Aplicando ao nosso problema, encontramos a matriz diagonalizada da figura 4.2.

	$ \uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle +  \downarrow\uparrow\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle -  \downarrow\uparrow\rangle)$	$ \downarrow\downarrow\rangle$
$\langle\uparrow\uparrow $	$\frac{\hbar^2}{4}J$	0	0	0
$\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow $	0	$\frac{\hbar^2}{4}J$	0	0
$\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow $	0	0	$\frac{-3\hbar^2}{4}J$	0
$\langle\downarrow\downarrow $	0	0	0	$\frac{\hbar^2}{4}J$

Figura 4.2: Matriz hamiltoniana para dois spins diagonalizada com sua base como índice.  
Fonte: Autores

Para conferir o resultado, precisamos calcular o autovetor associado a cada  $\lambda$ , construímos duas novas matrizes: uma subtraindo  $\lambda_1$  de cada elemento e outra subtraindo  $\lambda_2$ . Em ambas, multiplicamos por uma matriz coluna  $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$  e igualamos a outra matriz coluna  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ .

$$\begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2}{4}J - \frac{\hbar^2}{4}J & \frac{\hbar^2}{2}J - \frac{\hbar^2}{4}J \\ \frac{\hbar^2}{2}J - \frac{\hbar^2}{4}J & \frac{-\hbar^2}{4}J - \frac{\hbar^2}{4}J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2}{4}J - (\frac{-3\hbar^2}{4}J) & \frac{\hbar^2}{2}J - (\frac{-3\hbar^2}{4}J) \\ \frac{\hbar^2}{2}J - (\frac{-3\hbar^2}{4}J) & \frac{-\hbar^2}{4}J - (\frac{-3\hbar^2}{4}J) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Dessa forma, conseguimos o primeiro autovetor, resultado da Eq. (4.10), igual à  $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ .

Enquanto o segundo vetor, resultado da Eq. (4.11), é igual à  $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ . Esses vetores serão atribuídos as colunas da matriz  $P$ , citada anteriormente. Analogamente, temos a matriz transposta  $P^T$ . A averiguação da diagonalização se dá pela Eq. (4.6). Como resultado, obtemos uma igualdade verdadeira, comprovando que a diagonalização teve sucesso. Aplicando todos esses valores na Eq. (4.2), obtemos  $S = 1$  de três maneiras diferentes, mas em apenas uma organização do acoplamento obtemos  $S = 0$ . Assim, chegamos ao conceito de tripletos e singletos, representados na tabela 4.1, onde separamos as três bases em que obtemos  $S = 1$  e a única em que obtemos  $S = 0$ , juntamente com seus respectivos números quânticos.

$S = 1$		$S = 0$	
$m = 1$	$ \uparrow, \uparrow\rangle$	$m = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow, \downarrow\rangle) - ( \downarrow, \uparrow\rangle)$
$m = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow, \downarrow\rangle) + ( \downarrow, \uparrow\rangle)$		
$m = -1$	$ \downarrow, \downarrow\rangle$		

Tabela 4.1: Tripletos e Singlete, auto estados de H.

## 4.2 Caso de três spins 1/2 - Análises Computacionais

Analogamente aos estudos realizados na sessão anterior, construímos a hamiltoniana segundo o modelo da Eq. (4.12). Para explorar o acoplamento de spins, optamos por manter o segundo e o terceiro spins do sistema sem correlações, portanto  $J_{23}$  tem o valor 0, defronte à  $J_{12}$  e  $J_{13}$  que acompanham  $J$ , conforme ilustra a figura 4.4. Assim, obtemos uma matriz 8x8 (figura 4.3).

$$H = \sum_{i,j=1}^3 J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.12)$$

	$ \uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$\langle\uparrow\uparrow\uparrow $	$\frac{\hbar^2}{4}(J_{12} + J_{13} + J_{23})$	0	0	0	0	0	0	0
$\langle\uparrow\uparrow\downarrow $	0	$\frac{\hbar^2}{4}(J_{12} - J_{13} - J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{13})$	0	0	0	0
$\langle\uparrow\downarrow\uparrow $	0	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{4}(-J_{12} + J_{13} - J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{12})$	0	0	0	0
$\langle\downarrow\uparrow\uparrow $	0	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{13})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{12})$	$\frac{\hbar^2}{4}(-J_{12} - J_{13} + J_{23})$	0	0	0	0
$\langle\uparrow\downarrow\downarrow $	0	0	0	0	$\frac{\hbar^2}{4}(-J_{12} - J_{13} + J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{13})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{12})$	0
$\langle\downarrow\uparrow\downarrow $	0	0	0	0	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{13})$	$\frac{\hbar^2}{4}(J_{12} - J_{13} - J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{23})$	0
$\langle\downarrow\downarrow\uparrow $	0	0	0	0	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{12})$	$\frac{\hbar^2}{2}(J_{23})$	$\frac{\hbar^2}{4}(-J_{12} + J_{13} - J_{23})$	0
$\langle\downarrow\downarrow\downarrow $	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{\hbar^2}{4}(J_{12} + J_{13} + J_{23})$

Figura 4.3: Matriz hamiltoniana para três spins com sua base como índice.

Fonte: Autores

Visto a relação entre o aumento no nível de complexidade dos cálculos e o acréscimo no número de spins interagentes no sistema, faz-se necessário uso de recursos computacionais para permitir estudar sistemas maiores e de maneira numericamente exata. Ainda assim, há um imite imposto pela capacidade dos computadores, portanto, é instrutivo explorar os limites computacionais para estudar sistemas interagentes relativamente grandes. Para além das soluções exatas, existem tratamentos aproximados para sistemas maiores, mas não abordaremos nesse trabalho. Aqui, utilizamos da linguagem *python* e das bibliotecas *numpy*, *math*, *scipy*

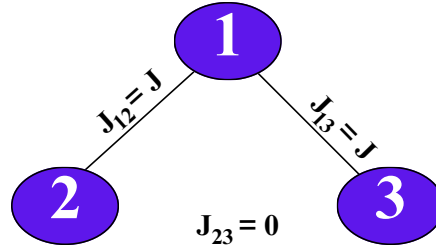


Figura 4.4: Modelo utilizado para a correlação de três spins.

Fonte: Autores

e *pyplot* para efetuar diagonalização de matrizes e o cálculo de correlação eletrônica para um sistema de 3 spins. A matriz de correlação é diagonalizada para diferentes valores de interações entre os spins ( $J_{12}$ ,  $J_{13}$  e  $J_{23}$ ) e, em seguida, algumas propriedades do sistema são calculadas e plotadas, como valores esperados, níveis de energia, degenerescência e entropia. Todo o código está anexado nos apêndices A e A.1.

De maneira mais minuciosa, o código conta inicialmente com a definição da matriz de correlação, que denominamos de função *Correlation\_Operator*. A qual cria uma matriz de correlação para um sistema de 3 spins com as interações  $J_{12}$ ,  $J_{13}$  e  $J_{23}$  fornecidas como argumentos. A matriz é definida como uma matriz 8x8 (de oito linhas e oito colunas), onde cada elemento representa uma combinação de operadores entre os spins, representada na figura 4.3 da sessão anterior. A partir daí, é necessário implementar um *loop* para controle da variação dessas interações, portanto, o código define uma faixa de valores para as interações  $J_{12}$ ,  $J_{13}$  e  $J_{23}$ . Para cada valor de interação, a matriz Hamiltoniana H é construída somando as contribuições das interações proporcionais a  $J_{12}$ ,  $J_{13}$  e  $J_{23}$ .

Tendo tal estrutura, podemos diagonalizar a matriz com a função *eigh* da biblioteca *scipy.linalg*, que retorna os autovalores (aVals) e autovetores (aVecs) da matriz H com poucas linhas de código. Em seguida, para cada conjunto de autovetores, o programa calcula os valores esperados dos operadores de correlação  $O_{12}$ ,  $O_{13}$  e  $O_{23}$ , que são relativos a cada acoplamento de spins, ou seja,  $O_{ij} = \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ . Isso é feito iterando sobre os autovetores, multiplicando-os pelos operadores correspondentes e calculando o valor esperado. Os resultados são armazenados nas variáveis  $x_{12}$ ,  $x_{13}$  e  $x_{23}$ , que serão usadas posteriormente para análise da variação dos valores esperados em função da flutuação da variável de interação J.

Para permitir cálculos a temperatura finita, implementamos a função partição  $Z(T)$  dada por

$$Z(T) = \sum_n e^{-\beta[E_n - E_0]}, \quad (4.13)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ ,  $E_n$  é energia do n-ésimo auto estado e  $E_0$  é a energia do estado fundamental. Nota-se que  $\beta$  é um quantidade que carrega consigo a temperatura  $T$  e a Constante de Boltzmann  $k_B$ . Além disso, a função partição desempenha um papel importante no estudo das propriedades termodinâmicas de um sistema físico, como por exemplo, a magnetização, a

suscetibilidade magnética. Em particular, a partir da Eq. (4.13), podemos obter o número de estados de menor energia, ou seja, a degenerescência do estado fundamental. Aqui utilizamos  $Z(T)$  para calcular a entropia do sistema em função da temperatura:

$$S(T) = k_B \ln Z(T) \quad (4.14)$$

Para proceder com a análise numérica, vamos começar por mostrar como as propriedades físicas do sistema dependem dos acoplamentos  $J_{ij}$ . Primeiramente, a figura 4.5 nos informa a relação entre o acoplamento de dois spins e a variação de  $J$ . Como o nosso programa permite ao usuário manipular os valores de  $J$ , que representa a intensidade com que os spins interagem, assim o fizemos. Nesse cenário, o interesse era criar um gráfico para estudar como cada acoplamento se comportaria com a variação desses valores. A partir da observação da figura 4.6, é possível concluir que os spins 2 e 3 não estão correlacionados, uma vez que o valor esperado  $\langle \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 \rangle$  se comporta de maneira diferente dos demais: variando de 0 à  $+1/4$ ; enquanto  $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$  e  $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 \rangle$  têm seus valores esperados variando de  $-1/2$  até  $1/4$ .

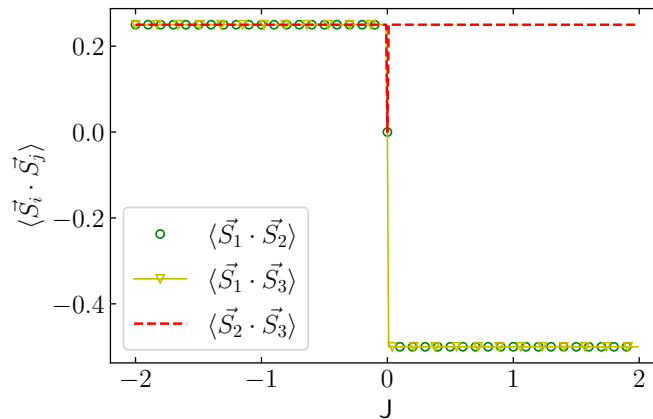


Figura 4.5: Valor esperado para cada acoplamento  $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$  em função de  $J$ . Onde  $J_{12} = J_{13} = J$  e  $J_{23} = 0$ . Note que as correlações são iguais e positivas para  $J < 0$  pois estão paralelos entre si. Por outro lado,  $J > 0$ , apenas os spins 2 e 3 que estão indiretamente acoplados apresentam correlação positiva. Os outros estão correlacionados antiparalelamente.

Fonte: Autores

A partir dessa análise, agora é interessante focalizar nos níveis de energia do sistema de três spins enquanto  $J$  é variado, representada na figura 4.6. Aqui, é possível perceber que alguns níveis têm valores coincidentes, uma vez que seguem o mesmo caminho no gráfico. Portanto, há um grau de degenerescência no sistema, que será contabilizado pela função partição implementada (Eq. 4.13). Ainda, percebe-se que, quando  $J$  é negativo, quatro níveis apresentam o mesmo valor de menor energia, ao passo que em  $J$  positivo temos dois níveis iguais de menor energia. Podemos compreender isso de modo bastante simples. No caso de  $J < 0$ , é energeticamente favorável que os spins tenha o máximo de alinhamento possíveis. Portanto, a soma dos spins deve ser máxima. Assim a soma dos três spins deve ser  $S_{\max} = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2$ . O

estado fundamental deve ter a degenerescência  $2S_{\max} + 1 = 4$ . Daí os 4 níveis de menor energia. Por outro lado, para  $J > 0$ , é energeticamente favorável que o spin total seja mínimo. Com 3 spin  $1/2$  temos  $S_{\min} = 1/2$ . Assim a degenerescência será  $2S_{\min} + 1 = 2$ .

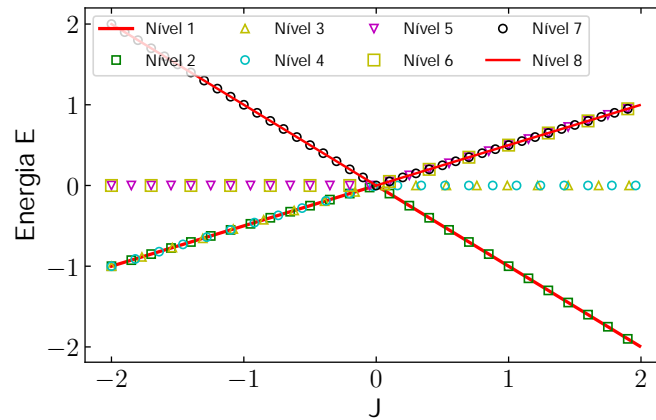


Figura 4.6: Níveis de energia do sistema em função de  $J$ . Onde  $J_{12} = J_{13} = J$  e  $J_{23} = 0$ . Cada nível de energia é representado por uma linha no gráfico. Note que no caso  $J < 0$ , o existem 4 estados de menor energia, enquanto que para  $J > 0$  existem apenas 2. Veja discussão no texto.

Fonte: Autores

Visto isso, é interessante agora, analisar o grau de degenerescência do estado fundamental. Conseguimos tal valor de maneira rápida através da função partição  $Z$  implementada, apresentada na figura 4.7 abaixo. É notável o aumento de  $Z$  quando o valor da temperatura  $T$  também cresce. Com a temperatura tendendo a zero, a degenerescência é constante, isso se deve pois a temperatura é mais um fator de agitação dos átomos do sistema, atribuindo uma organização em mais níveis iguais.

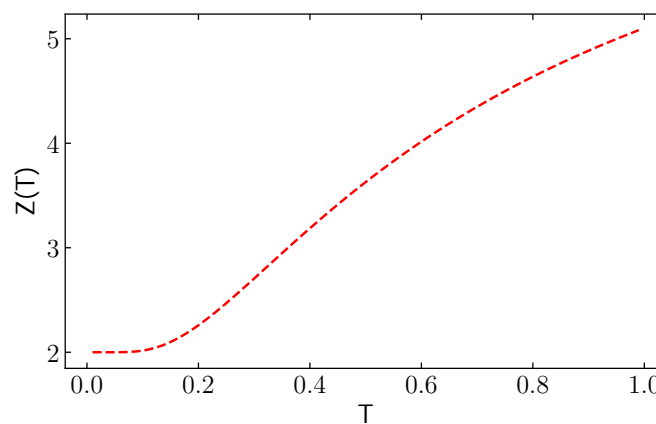


Figura 4.7: Função partição em função da temperatura, de 0,01 a 1. Onde  $J_{12} = J_{13} = J$  e  $J_{23} = 0$ .

Fonte: Autores

Além disso, conforme cálculos relativos à mecânica estatística citados anteriormente (Eq. (4.14)), sabemos que, uma vez que temos a função partição de um sistema, também temos a

sua entropia, que segue no gráfico 4.8 abaixo. O comportamento da entropia é semelhante ao da degenerescência, uma vez que é dada pelo logaritmo natural de  $Z$ .

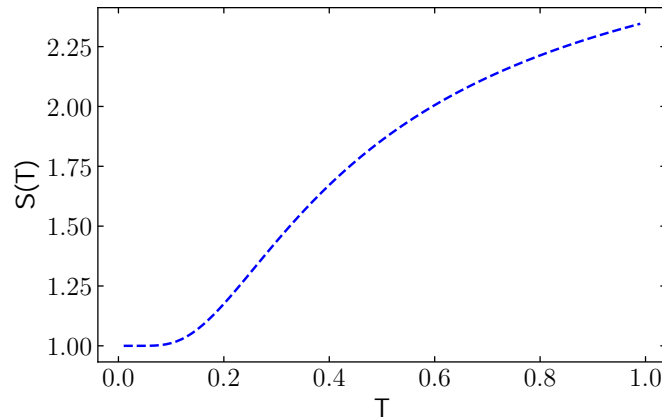


Figura 4.8: Entropia do sistema em função da temperatura, de 0,01 a 1. Onde  $J_{12} = J_{13} = J$  e  $J_{23} = 0$ .

Fonte: Autores

Vamos agora analisar como o sistema se comporta na presença de um campo magnético. Ainda utilizamos o modelo de Heisenberg, agora ligeiramente modificado adicionando o fator giromagnético, o magneton de Bohr e, claro, o campo magnético. Temos:

$$H = \sum_{i,j=1}^3 (i \neq j) J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B B \sum_{j=1}^3 S_j^z \quad (4.15)$$

Tendo o campo magnético em perspectiva, é importante analisar o comportamento dos níveis de energia com o campo. Além disso, estudamos o valor esperado de  $S_z$  para cada spin. Reforçamos que todo o código do programa utilizado se encontra no apêndice, mais especificamente em A.1. Os gráficos obtidos se encontram nas figuras 4.9 a 4.11. Nesse caso, mantemos a constante de correlação entre os spins fixa, de maneira que  $J_{13} = J_{12} = 0.5$  e  $J_{23} = 0$ .

É perceptível, comparando o gráfico da figura 4.9 ao da figura 4.5, que os níveis de energia agora estão todos distintos. Aqui, a presença do campo quebra a degenerescência porque nesse caso de 3 spins 1/2, não temos a possibilidade de spin total inteiro. De modo que todas as projeções  $S^z \neq 0$ , e, portanto, respondem ao campo magnético.

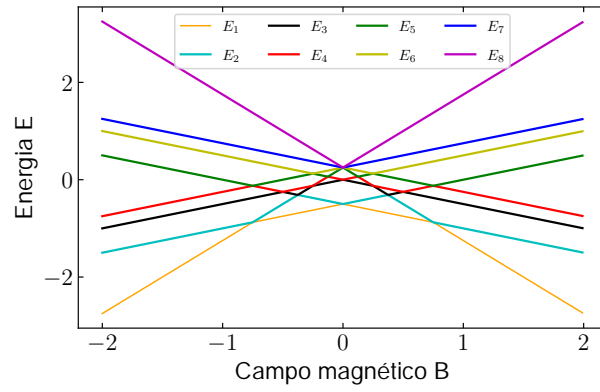


Figura 4.9: Energia dos níveis do sistema em função do campo magnético. Onde usamos  $J_{13} = J_{12} = 0.5$ ,  $J_{23} = 0$  e  $T = 0$ .

Fonte: Autores

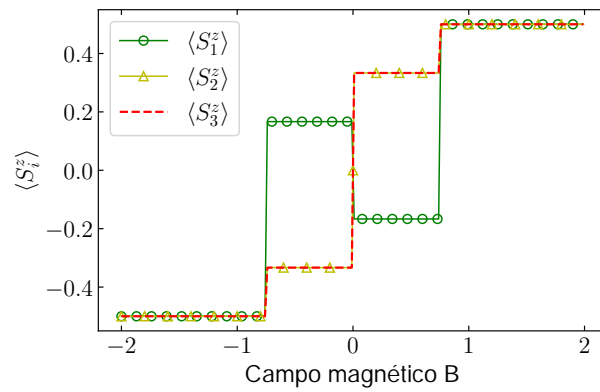


Figura 4.10: Valores esperados para cada  $S^z$  em função do campo magnético. Onde usamos  $J_{13} = J_{12} = 0.5$ ,  $J_{23} = 0$  e  $T = 0$ .

Fonte: Autores

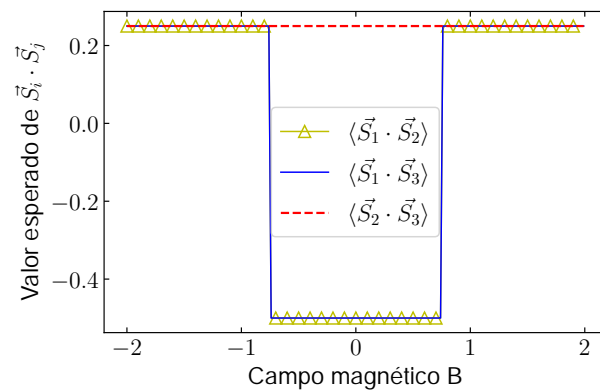


Figura 4.11: Valores esperados para cada acoplamento  $\langle S_i \cdot S_j \rangle$  em função do campo magnético. Onde usamos  $J_{13} = J_{12} = 0.5$ ,  $J_{23} = 0$  e  $T = 0$ .

Fonte: Autores

### 4.3 Perspectiva Pedagógica

Sabemos que um dos principais desafios do ensino de física é superar o esteriótipo comum contra as exatas que estipula que a área possui um grau de dificuldade avançado, mas quem nunca teve um professor de ciências totalmente apegado às metodologias tradicionais de ensino? Walter H. G. Lewin, físico neerlandês, uma vez disse “professores que tornam a física chata são criminosos”. uma das primeiras atitudes para não cometer tal crime é utilizar de analogias mais palpáveis aos alunos, buscando ilustrar toda a teoria complexa a respeito da natureza. Ainda, com o avanço cada vez mais rápido das tecnologias e a sua constante presença no nosso cotidiano, muitos professores se deparam com alunos distraídos durante a aula entretidos com jogos alheios à matéria. É daí que surgiu a ideia da metodologia de gamificação. O termo “gamificação” significa o uso de técnicas, estéticas e dinâmicas inerentes em jogos em ambientes geralmente não relativos a jogos. O uso da gamificação dentro da sala de aula pode proporcionar o aprimoramento de habilidades, engajamento e otimização da aprendizagem, além de proporcionar desafios e oportunidades de socialização, com o trabalho em equipe. [22]

Pensando no fato de que o crescimento exponencial de tecnologias tem como consequência as tornar ultrapassadas com a mesma rapidez, os *games* utilizados na educação também precisam ser constantemente renovados [6]. Porém, buscando a atemporalidade, propomos o uso de peças de encaixe para remeter à álgebra acerca da mecânica quântica. Conforme a figura 4.12 ilustra, estados kets são como conectores parte retos e parte arredondados, vamos chama-los de peça  $E_1$ . Já os bras, possuem mesmo formato, porém contrário, denominamos peça  $E_2$ . Os operadores se encaixam aos bras e aos kets, transformando-os em objetos mais alongados, mas com o mesmo perfil. Quando adicionamos mais decorações às peças, ganhamos mais um grau de liberdade, de forma que a atividade de manuseio das peças se torna mais abrangente e ganha novas possibilidades.

Vale ressaltar que, antes de tudo, a mecânica quântica deve ser contextualizada aos alunos, perpassando pela sua origem até a explicação do que são spins. Para isso, recomendamos aos docentes a leitura da sessão 2 desse trabalho. Tendo todas as peças envolvidas esclarecidas, o professor pode começar a brincar com suas combinações. Na figura 4.13 exemplificamos a operação  $S^z|\uparrow\rangle$ , estabelecendo o esquema de formação do operador  $S^z$  e do estado  $|\uparrow\rangle$ . Como sendo um ponto de início da prática, é importante deixar claro para o aluno o valor em que cada combinação resulta. Nesse momento, o aluno pode ser desafiado a montar um novo esquema, dessa vez calculando  $S^z|\downarrow\rangle$ , devendo obter o mesmo resultado da figura 4.14.

Evoluindo a dimensão do problema, pensemos, por exemplo, na operação  $S_1^-|\uparrow, \uparrow\rangle$ , o operador  $S_1^-$  é representado como uma peça do tipo **S** com um número 1 ao centro, acima de outra peça **S** com a decoração + e -, que ao ser conectada com duas peças do tipo  $up_2$  temos uma visão mais clara de como a operação toda funciona. Como o primeiro estado  $|\uparrow\rangle$  está acoplado com a peça 1, se mantém; já no caso do segundo  $|\uparrow\rangle$ , como sabemos, a multiplicação de um fator positivo por um negativo resulta em outro negativo de mesmo valor, no caso um *ket down* ( $|\downarrow\rangle$ ). Confira a dinâmica de peças na figura 4.15. Note que, se desejássemos realizar a ope-



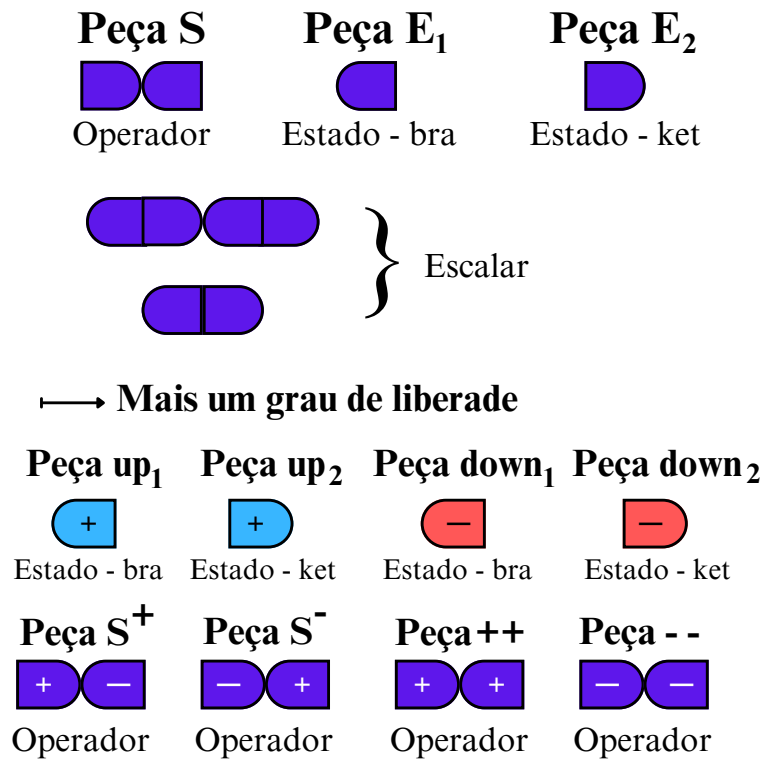


Figura 4.12: Ilustração do esquema de peças utilizado no jogo.

Fonte: Autores

$$\longrightarrow S^z | \uparrow \rangle$$

Representações:

$$S^z = \frac{\hbar}{2} \left( \begin{array}{|c|c|} \hline + & + \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline - & - \\ \hline \end{array} \right)$$

$$| \uparrow \rangle = \begin{array}{|c|} \hline + \\ \hline \end{array}$$

Cálculos:

$$S^z | \uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \left( \begin{array}{|c|c|} \hline + & + \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline - & - \\ \hline \end{array} \right) \begin{array}{|c|} \hline + \\ \hline \end{array}$$

$$\longrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline + & + \\ \hline \end{array} = 1 \text{ e } \begin{array}{|c|c|} \hline - & + \\ \hline \end{array} = 0$$

$$S^z | \uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{array}{|c|} \hline + \\ \hline \end{array}$$

Figura 4.13: Ilustração da disposição de peças para calcular  $S^z | \uparrow \rangle$

Fonte: Autores

ração  $S_1^- | \uparrow \rangle$ , teríamos uma discrepância entre a altura das peças operador e a altura das peças estado. Assim, é visível ao aluno que não é possível atuar termos de diferentes dimensões.

Uma vez que temos  $n$  números de peças  $\uparrow$  e  $\downarrow$ , então teremos  $2^n$  possibilidades de acoplamento, sendo que cada um possui um nível de energia, que calculamos conforme a seção 4.1. Deixamos aos professores e aos alunos a liberdade de manipular as peças para realizar tais

$$\begin{aligned} &\longrightarrow S^z |\downarrow\rangle \\ &\text{Representações:} \\ S^z &= \frac{\hbar}{2} \left( \begin{array}{cc} + & + \\ - & - \end{array} - \begin{array}{cc} - & - \\ + & + \end{array} \right) \\ |\downarrow\rangle &= \begin{array}{c} - \\ - \end{array} \\ &\text{Cálculos:} \\ S^z |\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left( \begin{array}{cc} + & + \\ - & - \end{array} - \begin{array}{cc} - & - \\ + & + \end{array} \right) \begin{array}{c} - \\ - \end{array} \\ &\longrightarrow \begin{array}{cc} + & - \\ - & - \end{array} = 0 \text{ e } \begin{array}{cc} - & - \\ + & - \end{array} = 1 \\ S^z |\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{array}{c} - \\ - \end{array} \end{aligned}$$

Figura 4.14: Ilustração da disposição de peças para calcular  $S^z|\downarrow\rangle$ 

Fonte: Autores

$$\begin{aligned} &\longrightarrow S_1^- |\uparrow, \uparrow\rangle \\ S_1^- &= \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ - & + \end{array} \quad |\uparrow, \uparrow\rangle = \begin{array}{c} + \\ + \end{array} \\ &= \uparrow \\ S_1^- |\uparrow, \uparrow\rangle &= \begin{array}{ccc} 1 & 1 & + \\ - & + & + \end{array} \\ &= 1 \\ S_1^- |\uparrow, \uparrow\rangle &= \begin{array}{c} + \\ - \end{array} \end{aligned}$$

Figura 4.15: Ilustração da disposição de peças para calcular  $S_1^-|\uparrow, \uparrow\rangle$ 

Fonte: Autores

cálculos ou de partir da prática para a teoria. A partir dessa ideia, o grupo também pode contabilizar o grau de degenerescência do sistema. Ademais, conhecendo o grau de degenerescência, podemos utilizar a Eq. (4.14) da seção anterior para calcular rapidamente a entropia do sistema, dada pelo logaritmo natural da degenerescência. Esses dois últimos valores podem ser confirmados pelo programa detalhado na seção 4.2, cujo código também se encontra nos apêndices desse trabalho. A questão é que essa proposta é apenas uma base para uma imensidão de conhecimentos que podem ser gerados com os aparatos que aqui apresentamos, uma vez que

a atividade aguça a criatividade e curiosidade do aluno, que pode ir muito além do que nós conseguimos.

### 4.3.1 Adequações

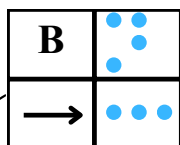
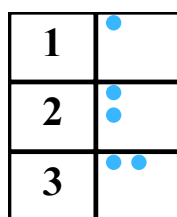
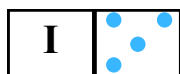
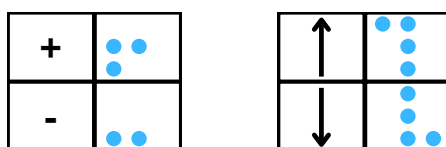
O principal objetivo de nossas atividades é democratizar o acesso ao conhecimento de mecânica quântica, começando pelo básico. Mas, é claro que dentro do democratizar precisamos incluir a todas as pessoas, pois todas as mentes têm potencial para serem guiadas rumo à luz e o prazer do conhecimento [2]. Tendo tal fato em vista, citamos Andréa Werner, fundadora do Instituto Lagarta Vira Pupa, voltado a ações para inclusão social de pessoas com deficiência. Em entrevista, a ativista proferiu: “Investir em inclusão escolar é o que vai educar nossa sociedade para quebrar essa roda da exclusão e incluir as pessoas com deficiência em todos os lugares.”. É justamente pensando na educação da sociedade e inclusão, que sugerimos nessa seção algumas adaptações das atividades que facilitam a percepção e compreensão de pessoas com baixa visão, cegueira, Transtorno do Espectro Autista (TEA) e/ou Transtorno de Déficit de Atenção e Hiperatividade (TDAH).

Tal ênfase também é necessária devido à pesquisas que apontam o déficit na preparação de docentes para lidarem com pluralidades, uma vez que apenas 21,1% dos professores afirmam ter recebido orientações quanto à técnicas para trabalhar com alunos com baixa visão [3]. É claro que toda a turma se torna o principal condutor do seu aprendizado com jogos, mas como aqui queremos destacar a inclusão - que é dever do professor e direito do aluno -, ainda adaptamos as peças com sinais em braille que podem ser colados na superfície de cada uma, inclusive com material descartável. Seguem na figura 4.16 elementos presentes nas objetos apresentadas nessa obra e que podem ser utilizados com o avanço do uso da técnica.

Quanto aos indivíduos dentro do TEA, existe uma metodologia denominada Comunicação Alternativa, que utiliza de recursos alternos à aula para que uma comunicação professor-aluno se estabeleça, trazendo consigo a possibilidade do estudante se expressar e construir seu conhecimento com autonomia [11]. Por conseguinte, propomos a adequação da ação que aqui descrevemos para os docentes da seguinte maneira: A presença de objetos extraordinários às aulas tradicionais, suas diferentes cores e possibilidades de posicionamento atraem e auxiliam discentes neurodiversos a terem um contato real com o conteúdo lecionado [26].

Ademais, pensando na aprendizagem significativa de pessoas com TDAH, vale destacar que esse transtorno não faz com que o aluno tenha um intelecto inferior, mas com que tenha dificuldades em manter a concentração em atividades prolongadas [18]. Em aulas cuja concentração é exigida de forma intensa, como as aulas de física, os obstáculos podem ser mais perceptíveis. A gamificação também é uma estratégia muito utilizada para que possam interagir com a aprendizagem dentro da sala de aula como um protagonista, avançando de acordo com seu próprio ritmo [26].

→ **Sinais em braille úteis à atividade**



Para escrever um vetor, deve-se utilizar esse elemento seguido da letra que representa o vetor

Figura 4.16: Sinais em braille úteis à atividade.

Fonte: Autores

## 5. Concl usões

A presente pesquisa científica abordou conceitos iniciais acerca de sistemas quânticos de spins interagentes. Abordagem essa que carrega um propósito pedagógico, uma vez que o principal objetivo é tornar esse conhecimento acessível ao público da educação básica. Para isso, nos apoiamos em pesquisas bibliográficas acerca do ensino de física e da gamificação para elaborar um guia para os docentes. Assim, dissertamos acerca da história da mecânica quântica, da mecânica matricial e da interação de spins, perpassando, inclusive, por concepções iniciais do Efeito Kondo.

Quanto aos resultados numéricos, obtivemos a diagonalização da matriz hamiltoniana para dois spins interagentes de maneira rápida e simplificada, e então partimos para o apoio de análises computacionais. Com isso, plotamos gráficos que evidenciam a interação entre spins seguindo o modelo de Heisenberg, que conta com a constante de intensidade de interação  $J$  e o campo magnético  $B$ . Dessa maneira, concluimos que spins paralelos entre si apresentam o valor esperado para a correlação positivo quando  $J < 0$ , defronte ao fato que quando  $J > 0$ , temos resultados positivos apenas para o valor esperado de spins indiretamente acoplados. Ainda, como a natureza tende sempre a um estado de mínima energia, é favorável alinhar o máximo de spins possível quando  $J < 0$ , portanto o estado fundamental tem degenerescência igual a  $2S_{max} + 1$ . Entretanto, quando  $J > 0$ , o cenário é contrário, ou seja, é favorável que a degenerescência do estado fundamental seja mínima ( $g = 2S_{min} + 1$ ).

A implementação da função partição às linhas de código proporcionou a análise do grau de degenerescência do sistema em função da temperatura, bem como a entropia. Percebe-se que a temperatura é um fator que influencia na organização dos átomos, tal qual o campo magnético. No entanto, enquanto a presença de uma temperatura não nula no sistema faz com que a degenerescência cresça proporcionalmente à temperatura, o campo magnético impossibilita a medição de valores esperados inteiros para cada spin.

Para demonstrar todas essas interações microscópicas, organizamos peças de encaixe para que representassem operadores, estados, spins e impurezas magnéticas. As peças são tateáveis e de diferentes cores, possibilitando a inclusão de alunos com baixa visão, cegueira, TEA e TDAH. E não só, mas também, podemos concluir que os estudantes se tornam verdadeiros construtores do conhecimento, uma vez que são desafiados a conduzirem a atividade a partir das orientações do professor. Isso quebra mais uma barreira muito vista nas salas de aula atualmente, que é a distancia entre o professor e o aluno, de modo que o primeiro não consegue prender a atenção do último, que se encontra frequentemente rodeado de inúmeras informações

que o desfoca.

Essa atividade também se faz aliada do professor pelo fato de desenvolver novas habilidades nos alunos que são exigidas na BNCC, como a manipulação de tecnologias e o uso da linguagem científica. Isso advém do contato com a matemática e a física envolvidas no problema, que se estendem da teoria conceitual e da diagonalização de matrizes até o manuseio dos programas computacionais disponibilizados. Mais uma vez afirmamos que todos esses objetivos têm sua efetividade baseada em literaturas recentes, que contemplam o atual cenário educacional. A pesquisa não foi aplicada com qualquer turma, mas sugerimos que a ação seja desenvolvida de acordo com os avanços do grupo. Nesse sentido, novos graus de liberdade podem ser estudados, criando, inclusive, novas peças. Tudo isso contribui para a formação de cidadãos informados, que não contribuem para a disseminação de falsas notícias envolvendo as ciências. Além disso, junto com a autoridade que o uso do jogo trás ao aluno, buscamos apresentar a felicidade do aprendizado.

# Referências Bibliográficas

- [1] *O quantum de luz*. ifi.unicamp.br. <https://www.ifi.unicamp.br/~fauth/10origensMecanicaQuantica/10quantumdeluz/0quantumdeluz.html>, acesso em: 10/03/2023.
- [2] Alves, R.: *A Alegria de Ensinar*. Papyrus Editora, 2<sup>a</sup> ed., 2012.
- [3] Aparecida Tapia Maruyama, P.R.S.S. e Rehder, J.R.L.: *Percepção dos professores da rede regular de ensino sobre os problemas visuais e a inclusão de alunos com baixa visão*. <https://www.scielo.br/j/rbof/a/g8xKhDH757bHQ4b7V7xMhjy/?lang=pt>, acesso em: 30/10/2023.
- [4] Bailas, G. e Vieira, G.: *Apropriação e descontextualização da Mecânica Quântica na Era da Pós-Verdade*. BIS. Boletim Do Instituto De Saúde, 21:111–120.
- [5] Barros, M.V. e Barros, M.A.: *Implementação de uma Metodologia Ativa para o Ensino da Dualidade Onda Partícula no Ensino Médio*. Caminhos da Educação Matemática em Revista, 2021.
- [6] Burke, B.: *Gamificar: Como a gamificação motiva as pessoas a fazerem coisas extraordinárias*. DVS Editora, 2015.
- [7] D. Goldhaber-Gordon, Hadas Shtrikman, D.M.D.A.M.U.M. e Kastner, M.A.: *Kondo effect in a single-electron transistor*. 391:156–159, 1998. <https://doi.org/10.1038/34373>, acesso em: 17/03/2023.
- [8] E. Abrahams, P. Anderson, D.L. e Ramakrishnan, T.: *Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions*. 42(10):673, 1979.
- [9] Educação, B.M. da: *Base Nacional Comum Curricular*. MEC, 2018.
- [10] Eisberg, R. e Resnick, R.: *Física quântica : átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Campus, 1994.
- [11] Figueiredo Walter, C.C. de e Paula Nunes, L.R. d'Oliveira de: *Comunicação alternativa para alunos com Autismo no ensino regular*. Revista Educação Especial, 2013.
- [12] Griffiths, D.J.: *Mecânica Quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011.

- [13] Haendler, B. L.: *"Centrifugal"force and the Bohr model of the hydrogen atom*. Journal of Chemical Education, 58(9):719, 1981.
- [14] Hewson, A. C.: *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, 2ª ed., 1993.
- [15] Hoernig, A. F. e Massoni, N. T.: *Física Quântica na Escola Básica: investigações para a promoção de uma Aprendizagem Conceitual, Histórica e Epistemológica*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 43, 2021.
- [16] Junior, S. T. G.: *Gamificação como Metodologia Ativa de Aprendizagem da Matemática na Educação Básica: Revisão de Literatura*, 2021.
- [17] Leite, A. e Simon, S.: *Werner Heisenberg e a Interpretação de Copenhague: a filosofia platônica e a consolidação da teoria quântica*, vol. 8. Scientiae studia, 3ª ed., 2010.
- [18] Oliveira, J. V. B. de: *TDAH: dificuldades e alternativas para ensinar física a estudantes do ensino médio*, 2023.
- [19] Oliveira Rangel, L. S. F. d. S. Flaminio de e Ribeiro, C. E.: *Ensino de Física mediado por tecnologias digitais de informação e comunicação e a literacia científica*. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 2012. <https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/2175-7941.2012v29nesp1p651>, acesso em: 07/09/2023.
- [20] Ribeiro, L. C.: *Efeitos de Muitos Corpos nas Propriedades de Transporte em Sistemas Nanoscópicos. Efeito Kondo e Magnetismo em Estruturas de Pontos Quânticos*. <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/colecao.php?strSecao=resultado&nrSeq=16195@1>, acessado em 16/03/2023.
- [21] Ricardo, E. C. e Freire, J. C.: *A concepção dos alunos sobre a física do ensino médio: um estudo exploratório*. <https://www.scielo.br/j/rbef/a/pQXFH3DqqbvMf6JW6rxXjJs/?lang=pt>, acesso em: 07/09/2023.
- [22] S. Borges, Helena M. Reis, V. H. S. D. I. I. B. Simone de e Seiji Isotani, P. A. J. e: *Gamificação Aplicada à Educação: Um Mapeamento Sistemático*. Anais do II Congresso Brasileiro de Informática na Educação e do XXIV Simpósio Brasileiro de Informática na Educação, 2013.
- [23] Sakurai, J. J.: *Modern quantum mechanics: Revised Edition*. Addison-Wesley, 1994.
- [24] Silva, G.L.S. João Batista da e Castro, J.B. de: *Gamificação como estratégia de aprendizagem ativa no ensino de Física*. <https://www.scielo.br/j/rbef/a/Tx3KQcf5G9PvcgQB4vswPbq/?format=html&lang=pt>, acesso em: 07/09/2023.
- [25] Silva Altafini, B. A. da e Silva Santos Goulart, E. da: *Metodologia Ativa de Aprendizagem: Gamificação*. Integra EaD, 2020.



- [26] Stella Silva, A. V. e Mello, W.: *Gamificação Virtual para Alunos com Autismo e TDAH na Formação de Professores de Ciências: Gamificação Virtual para Alunos Neurodiversos*. Científica Digital, 2023.
- [27] Zettili, N.: *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. John Wiley Sons Inc, 2009.

## A. Código de diagonalização

Para fins de simulação, caso seja o interesse do professor, seguem os códigos que criamos e utilizamos para construir cada gráfico apresentado. Optamos pela linguagem *Python*, lançando mão das bibliotecas *numpy*, *math*, *scipy* e *matplotlib*.

```
1
2 # Importando bibliotecas que utilizaremos
3 import numpy as np
4 import math
5 from scipy.linalg import eigh
6 import matplotlib.pyplot as plt
7
8 plt.rcParams['text.usetex'] = True
9
10 # Definindo o operador de correlacao  $O_{ij}$ , que esta associado ao
11 #acoplamento  $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ 
12
13 # Aqui, a variavel  $J_{ij}$  esta implementada conforme matriz feita
14 #manualmente na secao 4.2 desse trabalho
15 def Correlation_Operator(J12, J13, J23):
16     O = np.matrix([
17         [(J12+J23+J13)/4, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0],
18
19         [0, (J12 - J23 - J13)/4, J23/2, J13/2, 0, 0, 0, 0],
20
21         [0, J23/2, (-J12 - J23 + J13)/4, J12/2, 0, 0, 0, 0],
22
23         [0, J13/2, J12/2, (-J12 + J23 - J13)/4, 0, 0, 0, 0],
24
25         [0, 0, 0, 0, (-J12 + J23 - J13)/4, J13/2, J12/2, 0],
26
27         [0, 0, 0, 0, J13/2, (J12 - J23 - J13)/4, J23/2, 0],
28
29         [0, 0, 0, 0, J12/2, J23/2, (-J12 - J23 + J13)/4, 0],
30
31         [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, (J12 + J23 + J13)/4]
32     ])
33     return O
34
35 # Armazenando os autovetores na variavel aVecs, que esta definida
```

```

36 #como cada coluna da matriz diagonalizada
37 def getColuna(aVecs, n):
38     return [i[n] for i in aVecs]
39
40
41 # Definindo os operadores O_ij, de maneira que ao se tratar de um
42 #certo O, o J_ij correspondente tera valor 1 e os demais valor 0
43 O12=Correlation_Operator(1,0,0)
44 O13=Correlation_Operator(0,1,0)
45 O23=Correlation_Operator(0,0,1)
46
47 # Abrindo as listas x_ij, que armazenarao os resultados dos O_ij
48 x12_list = []
49 x13_list = []
50 x23_list = []
51
52 # Abrindo a lista que armazenara os valores das energias do sistema
53 e_list = []
54
55 # O loop a seguir esta baseado na variacao de J, que definimos
56 #arbitrariamente de forma que os spins 2 e 3 n o se conectem (J=0)
57 J_i = np.arange(-2,2,0.01)
58 for J in J_i:
59     print(J)
60
61     J13 = J
62     J12 = J
63     J23= 0
64
65     # A matriz hamiltoniana final devera contar com cada um dos operadores
66     #de correlacao
67     H=Correlation_Operator(J12,0,0)+Correlation_Operator(0,J13,0)+
68     Correlation_Operator(0,0,J23)
69
70     # A diagonalizacao e feita apenas em uma linha a partir desse comando,
71     #advindo da biblioteca scipy.linalg
72     aVals,aVecs = eigh(H)
73
74     # Os proximos tres comandos servem para checar a diagonalizacao,
75     #uma vez que sabemos que devemos obter a matriz original ao multiplicar
76     #a matriz diagonalizada pelos autovetores transpostos e, apos, pelos
77     #autovetores
78     Hd=aVecs.conj().T*H*aVecs
79
80     np.set_printoptions(suppress=True)
81     print(Hd)
82     print("aVEcs = ",aVecs)
83
84     # Aqui estamos interessados em armazenar os autovalores m nimos para

```

```
81     #os proximos calculos
82     x12 = 0
83     x13 = 0
84     x23 = 0
85     x0 = aVals.min()
86
87     # k servira como uma variavel contadora no loop,
88     #que atua em cada nivel multiplicando o autovetor do estado fundamental
89     #por cada x_ij e entao pelo autovetor do estado fundamental transposto
90     k=0
91     for i in range (8):
92         if abs(aVals[i]-x0) < 1e-10:
93             k+=1
94     for i in range(k):
95         psi = getColuna(aVecs, i)
96         psiT = np.transpose(psi)
97
98         a = psiT.dot(O12)
99         x12 += (a.dot(psi))[0,0]/k
100
101         a = psiT.dot(O13)
102         x13 += (a.dot(psi))[0,0]/k
103
104         a = psiT.dot(O23)
105         x23 += (a.dot(psi))[0,0]/k
106
107     print("J12 =", J12, "; J23 =", J23, "; J13 =", J13)
108     print("12:", x12)
109     print("13:", x13)
110     print("23:", x23)
111
112     x12_list = np.append(x12_list, x12)
113     x13_list = np.append(x13_list, x13)
114     x23_list = np.append(x23_list, x23)
115
116     e_list = np.append(e_list, aVals)
117
118 # Exibindo no terminal o valor de autovetor de cada nivel energetico
119 print(aVecs[:,0])
120 print(aVecs[:,1])
121 print(aVecs[:,2])
122 print(aVecs[:,3])
123 print(aVecs[:,4])
124 print(aVecs[:,5])
125 print(aVecs[:,6])
126 print(aVecs[:,7])
127
128 e_list = e_list.reshape(len(J_i),8)
129
```

```

130 print(e_list.shape, len(J_i))
131
132
133 #plotagens
134 fig, ax = plt.subplots(tight_layout=True)
135 ax.plot(J_i, x12_list, 'g', markevery=10, marker='o', markersize=5, linewidth
    =0, markerfacecolor='none', label=r'\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle \
    rangle$')
136 ax.plot(J_i, x13_list, 'y', markevery=17, marker='v', markersize=5, linewidth
    =1, markerfacecolor='none', label=r'\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 \rangle \
    rangle$')
137 ax.plot(J_i, x23_list, 'r--', label=r'\langle \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 \rangle \
    rangle$')
138 ax.set_xlabel('J')
139 ax.set_ylabel(r'\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \ rangle$')
140 ax.legend()
141 ax.tick_params(which='major', direction='in', axis='y', reset='true', width
    =0.8 )
142 ax.tick_params(which='major', direction='in', axis='x', reset='true', width
    =0.8 )
143 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
144 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
145 plt.savefig('valorEsperadoo.pdf')
146 plt.show()
147
148 fig, bx = plt.subplots(tight_layout=True)
149 bx.plot(J_i, e_list[:,0], 'r', markevery=10, marker='', markersize=5,
    linewidth=2, markerfacecolor='none', label='N vel 1')
150 bx.plot(J_i, e_list[:,1], 'g', markevery=15, marker='s', markersize=5,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 2')
151 bx.plot(J_i, e_list[:,2], 'y', markevery=23, marker='^', markersize=5,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 3')
152 bx.plot(J_i, e_list[:,3], 'c', markevery=18, marker='o', markersize=5,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 4')
153 bx.plot(J_i, e_list[:,4], 'm', markevery=15, marker='v', markersize=5,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 5')
154 bx.plot(J_i, e_list[:,5], 'y', markevery=30, marker='s', markersize=7,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 6')
155 bx.plot(J_i, e_list[:,6], 'k', markevery=10, marker='o', markersize=5,
    linewidth=0, markerfacecolor='none', label='N vel 7')
156 bx.plot(J_i, e_list[:,7], 'r', markevery=10, marker='', markerfacecolor='none
    ', label='N vel 8')
157 bx.set_xlabel(r'J')
158 bx.set_ylabel(r'Energia E')
159 bx.legend(loc=2,
    labelspace=1,
160         labelspace=1,
161         ncol=4, fontsize=10)
162 bx.tick_params(which='major', direction='in', axis='y', reset='true', width
    =0.8 )

```

```
163 bx.tick_params(which='major',direction='in', axis='x',reset='true', width
    =0.8 )
164 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
165 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
166 plt.savefig('variacaoJJ.pdf')
167 plt.show()
168
169 print(e_list[250,:])
170
171 # Funcao particao para contabilizacao do grau de degenerescencia
172 Kb = 1 # Constante de Boltzmann, igualamos a 1 para facilitar as analises
173 T_list = np.arange(0.01,1,0.01) # Variacao da temperatura
174
175 # Definindo a funcao particao
176 def particaoZ(e_list, T):
177     beta = 1 / (T * Kb)
178     s1 = sum(math.exp(-beta * (E - e_list.min()))) for E in e_list)
179     return s1
180
181 soma = []
182
183 for T in T_list:
184     soma = np.append(soma, particaoZ(e_list[250,:], T))
185
186 # Definindo a entropia do sistema a partir da funcao particao
187 S = []
188 for x in soma:
189     S = np.append(S, Kb * math.log(x))
190
191
192 # Plotagem de graficos
193 fig, cx = plt.subplots(tight_layout=True)
194 cx.plot(T_list, soma, 'r--')
195 cx.set_xlabel(r'T')
196 cx.set_ylabel(r'Z(T)')
197 cx.tick_params(direction='in', axis='y',reset='true', width=0.8 )
198 cx.tick_params(direction='in', axis='x',reset='true', width=0.8 )
199 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
200 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
201 plt.savefig('zetaa.pdf')
202 plt.show()
203
204 fig, dx = plt.subplots(tight_layout=True)
205 dx.plot(T_list, S/math.log(2), 'b--')
206 dx.set_xlabel(r'T')
207 dx.set_ylabel(r'S(T)')
208 dx.tick_params(direction='in', axis='y',reset='true', width=0.8 )
209 dx.tick_params(direction='in', axis='x',reset='true', width=0.8 )
210 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
```

```

211 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
212 plt.savefig('entropiaa.pdf')
213 plt.show()

```

## A.1 Inclusão do magnetismo

Para estudo do comportamento do sistema em termos da variação do campo magnético, o docente deve comentar as variações de  $T$  e de  $J$  ou criar um novo arquivo, uma vez que o programa apenas nos permite estudar uma variação por vez. O código será o seguinte:

```

1
2 # Importando bibliotecas que utilizaremos
3 import numpy as np
4 from math import pow
5 from scipy.linalg import eigh, inv
6 import matplotlib.pyplot as plt
7
8 plt.rcParams['text.usetex'] = True
9
10 # Definindo o operador de correlacao O_ij, que esta associado ao
11 #acoplamento <S_i . S_j>
12
13 # Aqui, a variavel J_ij esta implementada conforme matriz feita
14 #manualmente na secao 4.2 desse trabalho
15 def Correlation_Operator(J12,J13,J23):
16     O = np.matrix([
17         [(J12+J23+J13)/4,0,0,0,0,0,0,0],
18
19         [0,(J12-J23-J13)/4,J23/2,J13/2,0,0,0,0],
20
21         [0,J23/2,(-J12-J23+J13)/4,J12/2,0,0,0,0],
22
23         [0,J13/2,J12/2,(-J12+J23-J13)/4,0,0,0,0],
24
25         [0,0,0,0,(-J12+J23-J13)/4,J13/2,J12/2,0],
26
27         [0,0,0,0,J13/2,(J12-J23-J13)/4,J23/2,0],
28
29         [0,0,0,0,J12/2,J23/2,(-J12-J23+J13)/4,0],
30
31         [0,0,0,0,0,0,0,(J12+J23+J13)/4]
32     ])
33     return O
34
35 # Armazenando os autovetores na variavel aVecs, que esta definida
36 #como cada coluna da matriz diagonalizada
37 def getColuna(aVecs, n):
38     return [i[n] for i in aVecs]

```

```

39
40 #Separando o operador para cada spin
41 def Sz_Operator():
42     h=1
43     S1 = np.matrix([
44         [(h/2),0,0,0,0,0,0,0],
45         [0,(h/2),0,0,0,0,0,0],
46         [0,0,(h/2),0,0,0,0,0],
47         [0,0,0,(-h/2),0,0,0,0],
48         [0,0,0,0,(h/2),0,0,0],
49         [0,0,0,0,0,(-h/2),0,0],
50         [0,0,0,0,0,0,(-h/2),0],
51         [0,0,0,0,0,0,0,(-h/2)]
52     ])
53
54     S2 = np.matrix([
55         [(h/2),0,0,0,0,0,0,0],
56         [0,(h/2),0,0,0,0,0,0],
57         [0,0,(-h/2),0,0,0,0,0],
58         [0,0,0,(h/2),0,0,0,0],
59         [0,0,0,0,(-h/2),0,0,0],
60         [0,0,0,0,0,(-h/2),0,0],
61         [0,0,0,0,0,0,(h/2),0],
62         [0,0,0,0,0,0,0,(-h/2)]
63     ])
64
65     S3 = np.matrix([
66         [(h/2),0,0,0,0,0,0,0],
67         [0,(-h/2),0,0,0,0,0,0],
68         [0,0,(h/2),0,0,0,0,0],
69         [0,0,0,(h/2),0,0,0,0],
70         [0,0,0,0,(-h/2),0,0,0],
71         [0,0,0,0,0,(h/2),0,0],
72         [0,0,0,0,0,0,(-h/2),0],
73         [0,0,0,0,0,0,0,(-h/2)]
74     ])
75
76     Sz = (S1 + S2 + S3)
77     return S1,S2,S3
78
79 def colunas(autoVets, n):
80     return [c[n] for c in autoVets]
81
82 # Definindo os operadores O_ij, de maneira que ao se tratar de um
83 #certo O, o J_ij correspondente tera valor 1 e os demais valor 0
84 O12=Correlation_Operator(1,0,0)
85 O13=Correlation_Operator(0,1,0)
86 O23=Correlation_Operator(0,0,1)
87

```



```

88 # Abrindo as listas x_ij, que armazenarao o resultado dos 0_ij
89 x12_list = []
90 x13_list = []
91 x23_list = []
92
93 # Abrindo a lista que armazenara os valores das energias do sistema
94 e_list = []
95 S1,S2,S3 = Sz_Operator()
96 ''' S1 = Sz_Operator(1,0,0)
97 S2 = Sz_Operator(0,1,0)
98 S3 = Sz_Operator(0,0,1)'''
99
100 x1_list = []
101 x2_list = []
102 x3_list = []
103
104 autoVals_list = []
105
106 B_i = np.arange(-2,2,0.01)
107 for B in B_i:
108
109     print(B)
110
111     # Observe que o campo varia e J e fixado
112     J13 = 0.5
113     J23 = 0
114     J12= 0.5
115
116     H=Correlation_Operator(J12,0,0)+Correlation_Operator(0,J13,0)+
117     Correlation_Operator(0,0,J23)-B*(S1+S2+S3)
118
119     aVals,aVecs = eigh(H)
120     autoVals, autoVets = eigh(H)
121
122     # Os proximos tres comandos servem para checar a diagonalizacao,
123     #uma vez que sabemos que devemos obter a matriz original ao multiplicar
124     #a matriz diagonalizada pelos autovetores transpostos e, apos, pelos
125     #autovetores
126     Hd=aVecs.conj().T*H*aVecs
127
128     np.set_printoptions(suppress=True)
129     print(Hd)
130
131     x12 = 0
132     x13 = 0
133     x23 = 0
134     x0 = aVals.min()
135
136     x1 = 0

```

```
135     x2 = 0
136     x3 = 0
137     x_0 = autoVals.min()
138
139     k=0
140     for i in range (8):
141         if abs(aVals[i]-x0) < 1e-10:
142             k+=1
143     for i in range(k):
144         psi = getColuna(aVecs, i)
145         psiT = np.transpose(psi)
146
147         a = psiT.dot(O12)
148         x12 += (a.dot(psi))[0,0]/k
149
150         a = psiT.dot(O13)
151         x13 += (a.dot(psi))[0,0]/k
152
153         a = psiT.dot(O23)
154         x23 += (a.dot(psi))[0,0]/k
155
156     print("J12 =", J12, "; J23 =", J23, "; J13 =", J13)
157     print("12:", x12)
158     print("13:", x13)
159     print("23:", x23)
160
161     x12_list = np.append(x12_list, x12)
162     x13_list = np.append(x13_list, x13)
163     x23_list = np.append(x23_list, x23)
164
165     e_list = np.append(e_list, aVals)
166
167     for c in range(k):
168         psi = getColuna(autoVets, c)
169         psiT = np.transpose(psi)
170
171         x = psiT.dot(S1)
172         x1 += (x.dot(psi))[0,0]/k
173
174         x = psiT.dot(S2)
175         x2 += (x.dot(psi))[0,0]/k
176
177         x = psiT.dot(S3)
178         x3 += (x.dot(psi))[0,0]/k
179
180     print("S1:", x1)
181     print("S2:", x2)
182     print("S3:", x3)
183
```

```

184     x1_list = np.append(x1_list, x1)
185     x2_list = np.append(x2_list, x2)
186     x3_list = np.append(x3_list, x3)
187
188     autoVals_list = np.append(autoVals_list, autoVals)
189 print(aVecs[:,0])
190 print(aVecs[:,1])
191
192 e_list = e_list.reshape(len(B_i),8)
193
194 print(e_list.shape, len(B_i))
195
196 #plotagens
197 fig, ax = plt.subplots(tight_layout=True)
198 ax.plot(B_i, x12_list, 'y', markevery=10, marker='^', markersize=8,
199         linewidth=1, markerfacecolor='none', label=r'$\langle \vec{S}_1 \rangle \cdot \langle \vec{S}_2 \rangle$')
200 ax.plot(B_i, x13_list, 'b', markevery=13, marker='', markersize=5, linewidth=
201         =1, markerfacecolor='none', label=r'$\langle \vec{S}_1 \rangle \cdot \langle \vec{S}_3 \rangle$')
202 ax.plot(B_i, x23_list, 'r--', label=r'$\langle \vec{S}_2 \rangle \cdot \langle \vec{S}_3 \rangle$')
203 ax.set_xlabel(r'Campo magnético B')
204 ax.set_ylabel(r'Valor esperado de $\langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle$')
205 ax.tick_params(direction='in', axis='y', reset='true', width=0.8)
206 ax.tick_params(direction='in', axis='x', reset='true', width=0.8)
207 # A linha acima pode ser comentada, caso voc não queira salvar o grafico
208 # em pdf, que sera salvo na mesma pasta em que o arquivo do programa se
209 # encontra no seu computador
210 ax.legend()
211 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
212 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
213 plt.savefig('Bsij.pdf')
214 plt.show()
215
216 fig, bx = plt.subplots(tight_layout=True)
217 bx.plot(B_i, e_list[:,0], linewidth=1, color='orange', marker='',
218         markeredgcolor='orange', markerfacecolor='none',
219         label='$E_1$')
220 bx.plot(B_i, e_list[:,1], 'c-', label='$E_2$')
221 bx.plot(B_i, e_list[:,2], 'k-', label='$E_3$')
222 bx.plot(B_i, e_list[:,3], 'r-', label='$E_4$')
223 bx.plot(B_i, e_list[:,4], 'g-', label='$E_5$')
224 bx.plot(B_i, e_list[:,5], 'y-', label='$E_6$')
225 bx.plot(B_i, e_list[:,6], 'b-', label='$E_7$')
226 bx.plot(B_i, e_list[:,7], 'm-', label='$E_8$')
227 bx.set_xlabel(r'Campo magnético B')
228 bx.set_ylabel(r'Energia E')
229 bx.legend(loc=9,

```

```
225     labelspring=1,
226     ncol=4, fontsize=10)
227 bx.tick_params(direction='in', axis='y', reset='true', width=0.8 )
228 bx.tick_params(direction='in', axis='x', reset='true', width=0.8 )
229 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
230 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
231 plt.savefig('energiaB.pdf')
232 plt.show()
233
234 autoVals_list = autoVals_list.reshape(len(B_i),8)
235
236 print(e_list.shape, len(B_i))
237
238 fig, cx = plt.subplots(tight_layout=True)
239 cx.plot(B_i, x1_list, 'g', markevery=13, marker='o', markersize=6, linewidth
        =1, markerfacecolor='none', label=r'$\langle S_1^z \rangle$')
240 cx.plot(B_i, x2_list, 'y', markevery=20, marker='^', markersize=6, linewidth
        =1, markerfacecolor='none', label=r'$\langle S_2^z \rangle$')
241 cx.plot(B_i, x3_list, 'r--', label=r'$\langle S_3^z \rangle$')
242 cx.set_xlabel(r'Campo magnético B')
243 cx.set_ylabel(r'$\langle S_i^z \rangle$')
244 cx.tick_params(direction='in', axis='y', reset='true', width=0.8 )
245 cx.tick_params(direction='in', axis='x', reset='true', width=0.8 )
246 cx.legend()
247 plt.rcParams['font.serif'] = ['Helvetica']
248 plt.rcParams.update({'font.size': 16})
249 plt.savefig('szB.pdf')
250 plt.show()
```