

Q1 - Átomo de Hélio (20 pontos)

Neste problema, exploraremos um sistema atômico simples mas que só pôde ser satisfatoriamente compreendido em meados do século XX: o átomo de Hélio, ilustrado na Figura 1. Diferente do hidrogênio, que admite uma solução analítica relativamente simples, a determinação dos estados eletrônicos do átomo de Hélio exige a realização de aproximações físicas ou o uso intensivo de recursos computacionais.

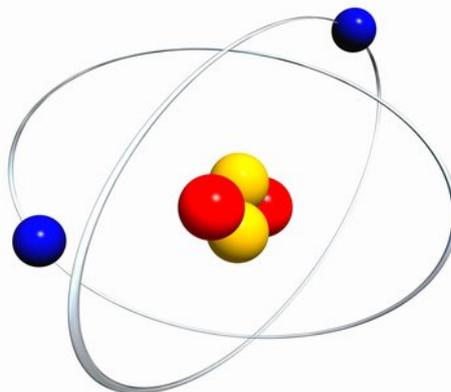


Figura 1: Diagrama esquemático corpuscular do átomo de Hélio.

Essa questão é dividida em 4 partes: A, B, C e D. Na parte A, apresentamos o sistema de unidade atômicas, que simplifica bastante as contas a serem realizadas nas demais partes. Na parte B, obtemos resultados úteis a partir do estudo do íon He^+ . Na parte C, conseguimos estimar algumas propriedades físicas do átomo de He. Finalmente, na parte D, apresentamos como o conceito de carga nuclear efetiva pode ser naturalmente extraído dos resultados obtidos.

Cada uma das quatro partes contém itens que podem ser resolvidos de forma independente dos demais itens da prova.

Se necessário, use:

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}, \text{ para } a > 0.$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax} dx = \frac{2}{a^3}, \text{ para } a > 0.$$

Parte A - Sistema de unidades atômicas (2,0 ponto)

Para simplificar as contas envolvidas na resolução deste problema, os físicos costumam utilizar o sistema de unidades atômicas (SUA). Nesse sistema, as unidades de massa, comprimento, tempo e carga elétrica são escolhidas de tal forma a se obter valores unitários para as seguintes constantes físicas:

- Carga elementar $e = 1,602 \cdot 10^{-19} C$;
- Massa do elétron $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} kg$;
- Constante eletrostática do vácuo $K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 N \cdot m^2 / C^2$;
- Constante reduzida de Planck $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34} J \cdot s$.

Dessa forma, pode-se suprimir todas essas constantes físicas de nossas contas. Valores numéricos podem ser obtidos utilizando conversões de unidades e as fórmulas simplificadas obtidas podem ser convertidas para o sistema internacional de unidades (SI) mediante uma simples análise dimensional.

A.1 Determine o valor de 1 unidade de comprimento (1 uL.) do SUA no Sistema Internacional de Unidades. 1,0pt

A.2 A unidade de energia no SUA é chamada de hartree (1 H). Calcule o valor de 1H no SI. 1,0pt

Parte B - Íon He^+ (8,0 pontos)

Começaremos o nosso estudo de sistemas eletrônicos pelo íon He^+ com $Z = 2$ prótons no núcleo e um único elétron. Por ser um sistema monoelétrônico, esse íon ainda pode ser descrito pela teoria semiclássica de Bohr. Nessa teoria o momento angular do elétron L é quantizado e o elétron orbita o núcleo em órbitas r_n discretas.

B.1 Quais valores numéricos podem ser observados para o momento angular L do elétron no íon He^+ no sistema atômico de unidades? Expresse seu resultado livre de qualquer constante física. 0,5pt

Observe que certas quantidades atômicas podem ser facilmente expressas no SUA. A partir desse ponto, expresse todas as suas respostas nesse sistema de unidades, exceto quando pedido explicitamente.

B.2 Utilize o modelo semiclássico do átomo de Bohr para determinar os valores numéricos da energia E_1 e do raio r_1 do estado eletrônico fundamental do íon He^+ no SUA. 1,5pt

Na teoria quântica moderna, o elétron não é mais representado como uma esfera orbitando o núcleo, mas como um sistema físico cujo estado quântico pode ser representado como um função de onda $\psi(\vec{r})$. Fortuitamente, as previsões de espectros de energia feitas através do modelo do átomo de Bohr levam a valores corretos.

Além disso, os valores de órbita previstos admitem uma relação simples com os orbitais atômicos. Uma órbita circular de raio r_1 , por exemplo, pode ser associada a uma função de onda esféricamente simétrica dada por

$$\psi_1(\vec{r}) = A_1 e^{-r/r_1}. \quad (23)$$

A função de onda $\psi(\vec{r})$ não tem significado físico direto, mas o seu módulo ao quadrado pode ser interpretado como uma densidade volumétrica de probabilidade de se encontrar a partícula em uma determinada região infinitesimal do espaço. Assim, a probabilidade P de se encontrar o elétron em alguma região Ω do espaço pode ser calculada como

$$P = \iiint_{\Omega} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r. \quad (24)$$

O valor da constante A_1 pode ser obtido em função de r_1 usando argumentos de probabilidade total.

B.3 Calcule o valor da constante A_1 para o estado ψ_1 . Deixe sua resposta em termos de r_1 . Lembre-se que o átomo de hélio é um sistema tridimensional. 2,0pt

Deixar a resposta do item anterior em função de r_1 , assim como de outros resultados a seguir, será conveniente para análises feitas na parte C deste problema.

Em termos eletrostáticos, essa natureza deslocalizada do elétron pode ser representada matematicamente por uma densidade de carga elétrica dada (no SI) por

$$\rho(\vec{r}) = -e|\psi(\vec{r})|^2. \quad (27)$$

Nessa aproximação substituímos o modelo do sistema atômico baseado em interação entre partículas por um modelo de interação entre o núcleo atômico e os elétrons na sua vizinhança, conforme ilustrado na Figura 2.

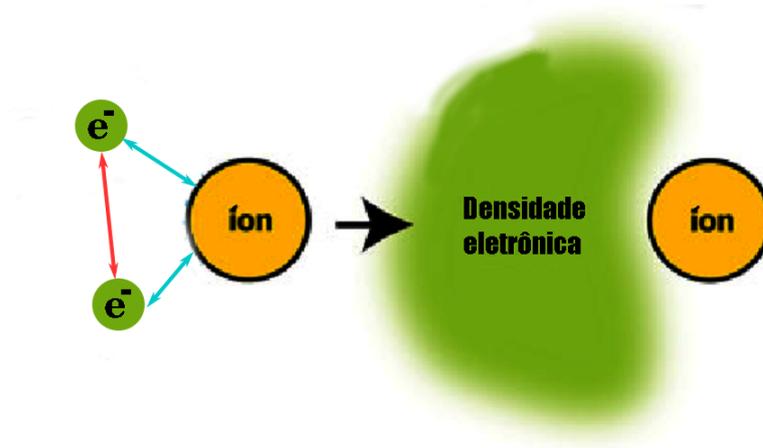


Figura 2: Ilustração da substituição do modelo de partículas puntiformes por uma densidade de carga no caso do átomo de Hélio neutro. As esferas amarelas representam o núcleo atômico, os elétrons podem admitir uma interpretação como partículas (à esquerda) ou como uma nuvem de carga deslocalizada (à direita).

B.4 Calcule a energia eletrostática de interação núcleo-elétron, U_{ne}^+ , segundo o modelo quântico proposto. Deixe sua resposta em termos de r_1 . 2,0pt

A energia cinética quântica do elétron no íon He^+ pode ser estimada de diferentes formas. Utilizaremos o funcional de von Weizsäcker, que fornece o valor da energia cinética de um elétron, em função da densidade de carga associada a ele. A expressão desse funcional para uma distribuição de carga esfericamente simétrica $\rho(r)$ pode ser obtida por meio de uma integração em todo o espaço dada por

$$K = \frac{1}{8} \iiint_{\mathcal{R}^3} \frac{[\rho'(r)]^2}{\rho(r)} d^3r, \quad (30)$$

em que $\rho'(r)$ representa a derivada da função $\rho(r)$.

B.5 Calcule a energia cinética, K_1 , segundo o modelo quântico proposto. Deixe sua resposta em termos de r_1 . 1,5pt

B.6 Compare as energias K_1 e U_{ne}^+ previstas pelo modelo corpuscular de Bohr e o modelo quântico proposto, que representa o elétron como uma distribuição de carga ρ . 0,5pt

Parte C - Átomo de He (8,0 pontos)

A mecânica quântica apresenta um formalismo matemático que descreve com muito sucesso uma grande diversidade de sistemas físicos. Entretanto, as equações matemáticas envolvidas tendem a ser muito sofisticadas. O átomo de He neutro, por exemplo, já é um sistema bem desafiador de ser descrito de maneira exata.

Nessa terceira parte do problema, apresentaremos um caminho para alcançar uma descrição aproximada do estado fundamental desse sistema físico através de considerações físicas relativamente simples. Admita que, nesse estado, ambos os elétrons têm uma parte espacial da sua função de onda dada por

$$\psi_2(\vec{r}) = A_2 e^{-r/r_2}, \quad (34)$$

similar ao estado quântico do elétron no íon He^+ , mas com o seu valor original perturbado devido à interação coulombiana entre os dois elétrons. Essa hipótese não viola o princípio da exclusão de Pauli, porque cada elétron

pode ter um número quântico de *spin* diferente.

A hipótese de funções de onda $\psi_1(r)$ e $\psi_2(r)$ similares permite reaproveitar uma série de resultados do sistema quântico monoelétrônico para o sistema de dois elétrons. O valor de r_2 pode ser estimado *a posteriori* de diferentes formas.

- | | | |
|------------|--|-------|
| C.1 | Aproveitando os resultados da parte B, escreva o valor da interação U_{ne} do núcleo com um dos elétrons do átomo de Hélio, assim como a energia cinética de cada elétron, K_2 . Deixe suas respostas em função de r_2 . | 1,0pt |
|------------|--|-------|

Caso você não tenha resolvido a parte B, utilize as seguintes expressões para U_{ne} e K_2 :

$$U_{ne} = c_1 r_2^\alpha \quad e \quad K_2 = c_2 r_2^\beta,$$

em que c_1 , c_2 , α e β são constantes numéricas adequadas.¹

O principal desafio em modelar sistemas com muitos elétrons é a interação de coulombiana elétron-elétron U_{ee} . Neste modelo, podemos estimar o valor dessa interação considerando a interação repulsiva de uma distribuição eletrônica $\rho_2(\vec{r}_1)$, do primeiro elétron, associada ao estado quântico $\psi_2(\vec{r}_1)$ com uma segunda distribuição eletrônica $\rho_2(\vec{r}_2)$ idêntica a primeira, mas associada ao segundo elétron.

- | | | |
|------------|--|-------|
| C.2 | Indique uma expressão de U_{ee} em termos de uma (ou mais) integral(is). Não é necessário encontrar o valor numérico da integral, basta indicar sua resposta em termos da função $\rho_2(\vec{r})$ e fatores geométricos convenientes. | 2,0pt |
|------------|--|-------|

O cálculo do valor dessa(s) integral(is) exige de um trabalho algébrico razoável. Você não precisa calcular o seu valor agora. Para que você possa continuar a desenvolver o modelo do átomo de He, assuma que U_{ee} pode ser escrito em termos de r_2 como

$$U_{ee} = \frac{5}{8r_2}. \quad (38)$$

- | | | |
|------------|---|-------|
| C.3 | Escreva a energia total do átomo de Hélio, conforme as aproximações realizadas para as componentes cinéticas e eletrostáticas relevantes. Suponha que o núcleo do átomo permanece em repouso. Deixe sua resposta em função de r_2 . | 2,0pt |
|------------|---|-------|

Conforme dito no início desta parte, o parâmetro r_2 foi inserido de forma arbitrária e carece da determinação de seu valor numérico. O seu valor pode ser estimado mediante diferentes tipos de argumentos físicos a partir das quantidades calculadas até aqui.

- | | | |
|------------|---|-------|
| C.4 | Ofereça uma estimativa do melhor valor possível de r_2 , segundo o modelo apresentado. Calcule o valor numérico da energia total do átomo de He no SUA. | 2,0pt |
|------------|---|-------|

- | | | |
|------------|--|-------|
| C.5 | Calcule a energia de ionização do átomo de He. | 1,0pt |
|------------|--|-------|

Parte D - Raios atômicos e carga nuclear efetiva (2,0 ponto)

Nesta última parte do problema, discutiremos algumas interpretações que podem ser extraídas dos resultados obtidos na Parte C. Ainda que você não tenha resolvido a parte anterior, tenha em mente que algumas das tendências observadas podem ser esperadas mediante uma análise qualitativa do sistema.

¹**Dica:** Se suas respostas não ficaram parecidas com essas expressões. Revise suas contas e verifique se suas respostas estão escritas no SUA.

D.1 Qual dos dois raios efetivos é maior: r_1 ou r_2 ? Ofereça pelo menos uma razão física para que isso aconteça em poucas palavras. 1,0pt

O modelo do átomo de Bohr estabelece uma relação simples entre o raio r_1 e o número atômico $Z = 2$ do íon de He^+ . Para sistema com muitos elétrons, é possível estabelecer uma relação análoga entre o raio efetivo do sistema atômico e uma carga nuclear efetiva Z_{ef} do núcleo 'sentida' pelo elétron mais externo.

D.2 Calcule a carga nuclear efetiva Z_{ef} do átomo de Hélio. 1,0pt

Q2 - Sistemas multi-energéticos e temperaturas absolutas negativas (20 pontos)

Este problema consiste de quatro (4) partes, todas relativas ao estudo de sistemas termodinâmicos multi-energéticos, em equilíbrio ou não, nos quais a entropia tem um papel fundamental. A parte **A** trata de sistemas que possuem dois níveis de energia. Na parte **B** estudaremos a temperatura como uma função estatística da energia do sistema. Por fim, nas partes **C** e **D**, passaremos a abordar aspectos de sistemas de três níveis de energia, um pouco mais complexos.

Uma breve introdução

A temperatura de um sistema composto por um grande número de partículas pode ser convenientemente considerada como um parâmetro que determina a distribuição de energia entre as partículas. Quando a temperatura é baixa, a probabilidade de encontrar a partícula em estados de alta energia é pequena. Em certos sistemas pode acontecer que a probabilidade de encontrar partículas em estados de alta energia é maior que a de encontrá-las em estados de baixa energia; a temperatura desses sistemas pode ser considerada negativa. A distribuição de *spins* fracamente interagentes, em um sistema de núcleos atômicos ($s = 1/2$), acontece entre dois possíveis estados energéticos, para várias temperaturas. A “linha” U representa o nível de alta energia e a L, a de baixa energia. O número de *spins* em cada estado energético é proporcional ao número de setas em cada linha. As direções das setas indicam as duas possíveis direções dos *spins*.

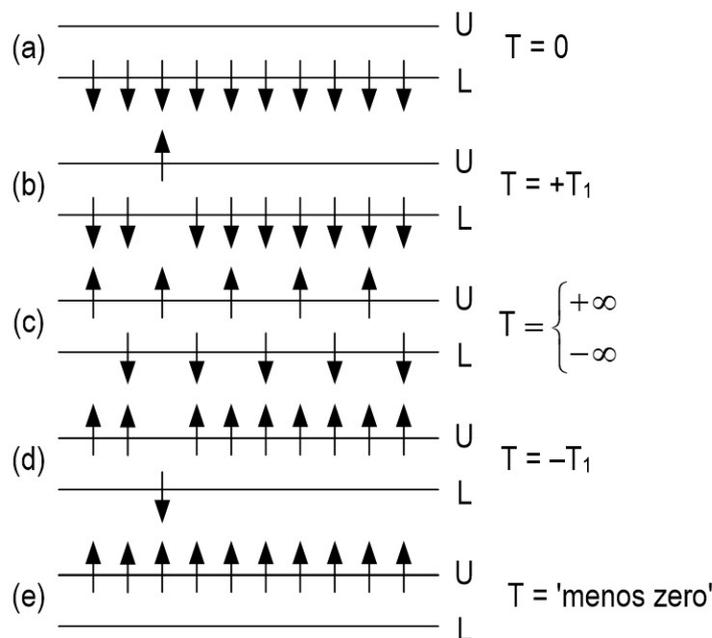


Figura 3: Diagrama de níveis de energia e diferentes temperaturas possíveis.

Para processos reversíveis, a segunda lei da termodinâmica prevê a relação entre a entropia S e a energia E de um sistema da forma:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{N,X}$$

considerando a entropia e a energia funções multivariadas, isto é, funções de N , E e uma variável “generalizada” X que pode representar qualquer parâmetro externo (volume, campo elétrico, campo magnético *etc*).

Parte A - Sistema de dois níveis energéticos (6,0 pontos)

Nesta parte, analisaremos o caso simples de um sistema de N_0 *spins* no estado fundamental de energia nula ($\epsilon = 0$) e N_1 *spins* no estado excitado de energia $\epsilon > 0$, tal que $N = N_0 + N_1$ é fixo. Os N_0 *spins* serão considerados “down” (\downarrow) e os N_1 *spins*, “up” (\uparrow). Suponha que os *spins* sejam distinguíveis, pelo qual o número de estados nos que podem acomodar este arranjo é dado por:

$$\Omega = \frac{N!}{N_0!N_1!}$$

Então, a energia e a entropia de Boltzmann deste sistema são, respectivamente:

$$E = \epsilon N_1$$

$$S = k_B \ln \Omega = k_B (N \ln N - N_0 \ln N_0 - N_1 \ln N_1)$$

A expressão anterior é resultado da aplicação da fórmula de Stirling.

$$\ln n! = n \ln n - n$$

O coeficiente k_B é a constante de Boltzmann. A seguir você pode considerar $k_B = 1$, por simplicidade de notação.

A.1 A partir da definição de temperatura relacionada com a energia e a entropia do sistema. Mostre que as frações de *spins* “up” e *spins* “down” em relação ao número total de *spins* do sistema são dadas por: 2,0pt

$$\frac{N_1}{N} = \frac{\exp\{-\epsilon/T\}}{1 + \exp\{-\epsilon/T\}}$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{1 + \exp\{-\epsilon/T\}}$$

respectivamente.

A energia livre de Helmholtz de um sistema termodinâmico está relacionada com a energia e a entropia através da seguinte equação:

$$F = E - TS$$

A.2 Prove que a energia livre do sistema, em função de suas “variáveis naturais”, T e N , pode ser escrita na forma: 1,0pt

$$F(T, N) = -TN \ln(1 + \exp\{-\epsilon/T\})$$

Na expressão anterior, a variável conjugada à energia por *spin* ϵ é $-\frac{\partial F}{\partial \epsilon} = -\frac{N \exp\{-\epsilon/T\}}{1 + \exp\{-\epsilon/T\}} = -N_1$. Isto faz N_1 a variável natural para descrever o arranjo dos *spins* no sistema, para o qual, o plano $N_1 - \epsilon$ é análogo ao plano P-V comum.

A.3 Considere agora as duas possibilidades seguintes: $T > 0$ e $T < 0$. Esboce o gráfico de $\frac{N_1}{N}$ em função de ϵ e apresente os valores principais. 2,0pt

A.4 A partir da equação para a energia livre do item A.2, mostre que a entropia por *spin*, $\frac{S}{N}$, neste tipo de sistema, só depende da razão ϵ/T , e encontre seu valor para $\epsilon/T \rightarrow 0$. 1,0pt

A expressão encontrada no item anterior representa a entropia por *spin* do sistema de dois níveis de *spins*.

Parte B - Temperaturas absolutas negativas (7,0 pontos)

A Figura 4 representa, de forma esquemática, o comportamento da entropia em função da energia de um sistema termodinâmico de dois níveis. As tangentes do gráfico em E_1 e E_2 são verticais.

B.1 A partir da análise da Figura 4, faça um esboço do comportamento da temperatura absoluta em função da energia do sistema termodinâmico, $T(E)$. 1,0pt

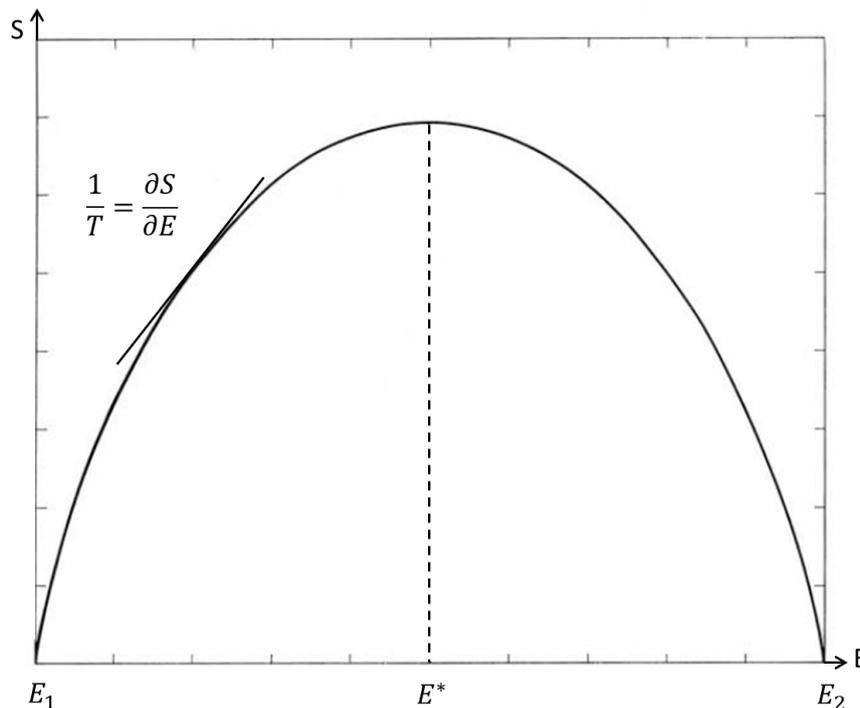


Figura 4: Esboço da dependência entre entropia e energia. Fonte: adaptação de “Negative Absolute Temperatures” Charles E Hecht. Brooklyn College, The City University of New York, Brooklyn 11210. Journal of Chemical Education, Volume 44, Number 3, March 1967.

A linha tracejada vertical na Figura 4 marca a máxima entropia do sistema, correspondente a temperaturas infinitas segundo a definição fornecida. A região da esquerda corresponde às temperaturas “mais frias”, enquanto região à direita corresponde às temperaturas “mais quentes”. Ao longo da direção positiva do eixo da energia se estabelece um gradiente de temperaturas que pode ser interpretado a partir da Figura 5.

A densidade populacional de certo nível energético i , excitado, responde à estatística de Boltzmann $n_i = \frac{N_i}{N_0} \sim \exp\{-\epsilon_i/kT\}$, onde N_i e N_0 são as populações dos estados i e o estado fundamental, respectivamente.

O fator de Boltzmann pode ser usado para expressar a probabilidade de transição entre dois níveis cuja diferença de energia é $\Delta\epsilon$, $P(\Delta\epsilon) \sim \exp\left\{-\frac{\Delta\epsilon}{kT}\right\}$, aqui prescindimos de constantes numéricas. Observe, por exemplo, que, para temperaturas positivas, transições com aumento de energia são mais raras do que transições com decréscimo de energia.

B.2 Explique por que estados termodinâmicos com temperatura absoluta negativa são mais energéticos do que configurações à temperatura positiva. 1,0pt

Considere uma máquina térmica que trabalhe com um ciclo de Carnot. Suponha que um dos reservatórios

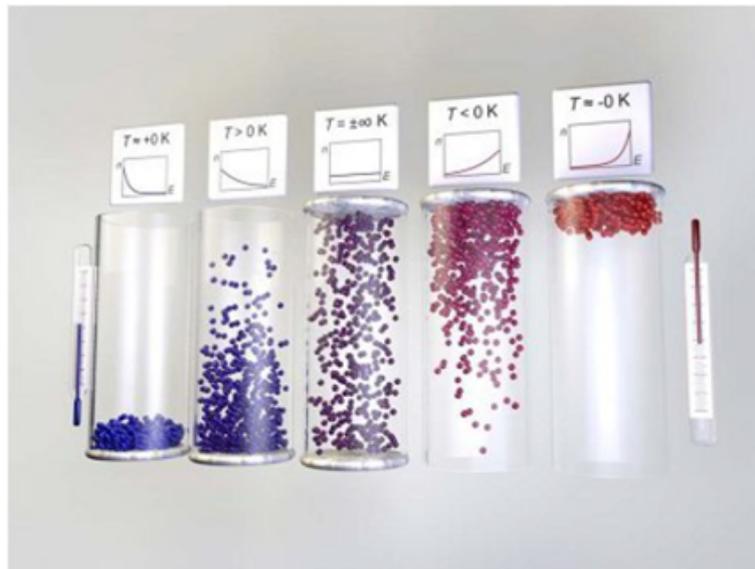


Figura 5: Gradiente de temperaturas. Fonte: adaptação de <https://questcosmic.wordpress.com/2016/08/12/uma-termodinamica-quantica-antes-que-o-inferno-congele/>

possui temperatura absoluta positiva, como usualmente, mas que no outro negativa, isto é $T_A > 0 > T_B$, T_A e T_B são as temperaturas dos reservatórios A e B , respectivamente. Assuma $|T_A| > |T_B|$.

B.3 Mostre que, numa máquina como esta, os calores envolvidos ΔQ_A e ΔQ_B terão o mesmo sinal. 2,0pt

O resultado do item anterior se mostra diferente do usual, onde os calores tem sinais diferentes, isto é, um reservatório cede calor enquanto o outro o absorve.

B.4 Compare os módulos dos calores envolvidos no funcionamento desta máquina. Mostre seu resultado a partir da análise do gráfico da Figura 4. 2,0pt

Para máquinas desse tipo, o rendimento ainda pode ser definido como a razão do trabalho realizado e o calor fornecido pela fonte quente.

B.5 Escreva o intervalo de possíveis valores para a eficiência desse motor. 1,0pt

Parte C - Sistema de três níveis de energia (3,0 pontos)

Um sistema de três níveis tem algumas características novas não encontradas nos dois níveis e lança mais luz sobre os problemas associados à entropia de Gibbs. Neste tipo de sistema (por exemplo, um sistema de *spins*), especificar a energia e o número total de *spins* é insuficiente para fixar todos os níveis populacionais. A seguir, consideremos, neste sistema, que a condição de máxima entropia (equilíbrio) se cumpre se $\frac{\partial S}{\partial N_0} = 0$, onde N_0 é o número de *spins* no estado fundamental, cuja energia é nula ($\epsilon_0 = 0$). Também, neste sistema, o número de *spins* total é conservado, assim como sua energia total. Considere que N_1 , N_2 , $\epsilon_1 > 0$ e $\epsilon_2 > \epsilon_1$ são as populações e as energias do primeiro e segundo níveis, correspondente ao sistema em questão.

C.1 Analogamente ao que foi feito na análise do sistema anterior, de dois níveis, escreva as expressões do número de partículas, da energia e da entropia deste sistema. 1,0pt

C.2 Use as condições colocadas na introdução para mostrar que

2,0pt

$$\frac{1}{\epsilon_i} \ln \frac{N_i}{N_0} = C,$$

em que o subíndice i representa o nível i de energia, sem ser o do estado fundamental, representado pelo subíndice 0. A constante C é uma constante negativa, igual a $-\frac{1}{k_B T}$.

Desta forma a população do nível energético i responde à estatística de Boltzmann $N_i = N_0 \exp\left\{-\frac{\epsilon_i}{k_B T}\right\}$, como assumido na parte C.

Parte D - Modelo de “três níveis” para a infecção pelo HIV (4,0 pontos)

Um trabalho recentemente publicado na literatura modela o processo de infecção linfáticas do tipo T-CD4⁺ pelo HIV, a partir de um autômato celular. Estas células podem estar em três possíveis estados: susceptível, infectada, e morta. Esses três estados podem ser relacionados a um sistema de três níveis de energia descrito anteriormente.

Neste trabalho se usa o modelo de três níveis energéticos baseado em “transições” entre estes os três estados das células linfáticas. As regras do autômato estabelecem que: uma célula saudável é infectada em função da sua vizinhança (isto não constitui um processo probabilístico, em princípio); uma célula morta pode ser recuperada pelo organismo com uma probabilidade p_r . As células que são reincorporadas ao sistema podem ser susceptíveis (saudáveis), com probabilidade $1 - p_i$ ou infectadas, com probabilidade p_i .

Células infectadas morrem espontaneamente depois de certo intervalo de tempo. A reincorporação de células mortas é representada, neste modelo, como uma transição entre estados. A variável p_{m-i} representa a probabilidade da transição do estado mortas até o estado infectadas; por sua parte p_{m-s} simula a probabilidade da transição entre os estados mortas e saudáveis. As probabilidades associadas aos processos de reincorporação são:

$$p_{m-i} = p_r \times p_i \quad (\text{transição morta} \rightarrow \text{infectada})$$

$$p_{m-s} = p_r \times (1 - p_i) \quad (\text{transição morta} \rightarrow \text{saudável})$$

O esquema da Figura 6 mostra os níveis de energia e suas possíveis transições no estudo da dinâmica do processo de infecção.

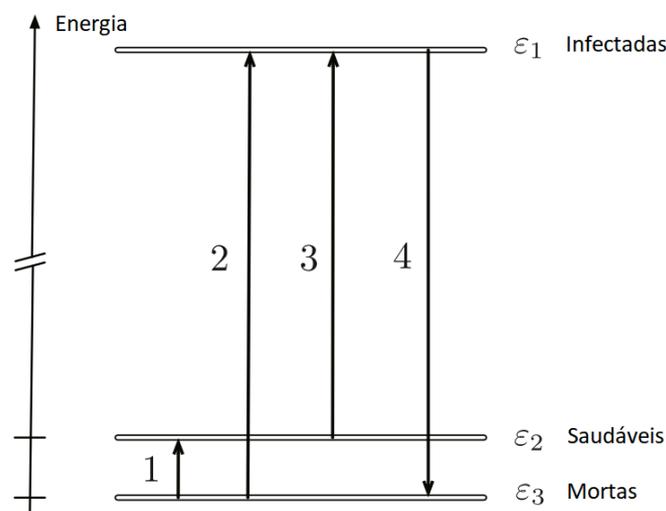


Figura 6: Níveis energéticos no modelo de infecção por HIV. Fonte: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124239>

A densidade de células de cada tipo, envolvidas no processo, variam no tempo segundo mostrado no gráfico da Figura 7.

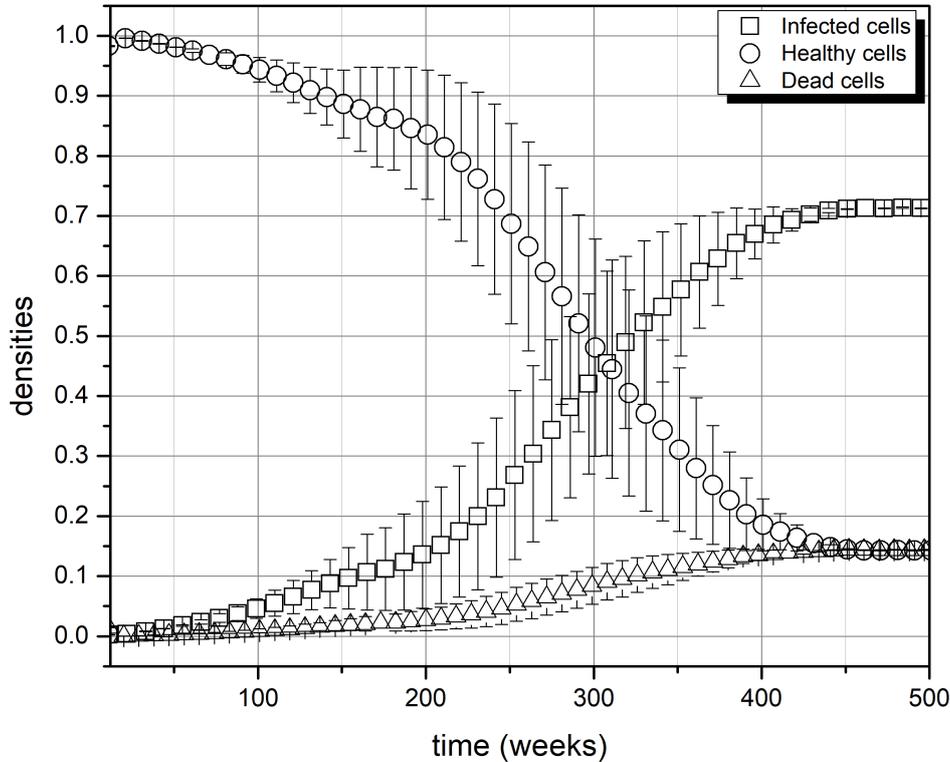


Figura 7: Dinâmica da infecção por HIV. Os triângulos representam as células mortas, os círculos, as saudáveis e os quadrados, as infectadas. Fonte: Adaptado de <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124239>

No gráfico de entropia em função da energia $S(E)$ mostrado na Figura, 8 podemos identificar o estado de equilíbrio no sistema como o atrator mais à direita, cujo valor da energia está destacado em azul. À direita do ponto de máxima entropia no gráfico, a temperatura estatística do sistema é negativa, correspondendo a uma inversão da população, que neste modelo significa o momento em que a densidade de células infectadas ultrapassa a densidade de células saudáveis.

As seguintes equações caracterizam o sistema, a partir das densidades das espécies envolvidas, n_j , das energias, ϵ_j , e a entropia s , por partícula, em qualquer instante de tempo.

$$\begin{aligned} n_i(t) + n_s(t) + n_m(t) &= 1 \\ \epsilon_i n_i(t) + \epsilon_s n_s(t) + \epsilon_m n_m(t) &= \varepsilon(t) \\ -n_i(t) \ln n_i(t) - n_s(t) \ln n_s(t) - n_m(t) \ln n_m(t) &= s(t) \end{aligned}$$

Apenas as duas probabilidades associadas às reincorporações são probabilísticas, e são suficientes para resolver o problema. Considere que as probabilidades de transição entre os estados das células podem ser associadas às diferenças energéticas entre os níveis de energia através do fator de Boltzmann $P(\Delta\epsilon) \sim \exp\{-\Delta\epsilon\}$. Consideramos aqui $k_B T = 1$ por simplicidade, o que faz com que as energias sejam vistas como grandezas adimensionais.

D.1 Encontre uma expressão para a diferença energética entre os “níveis” próprios deste sistema. As probabilidades de transição entre os estados são: $p_i = 10^{-5}$ e $p_r = 0,99$. 1,5pt

Nessa dinâmica ilustrada pela Figura 7, podemos ver que depois de mais de 400 semanas, o sistema atinge o equilíbrio. Podemos ver que, nesse estado, as densidades de células saudáveis e mortas são praticamente iguais

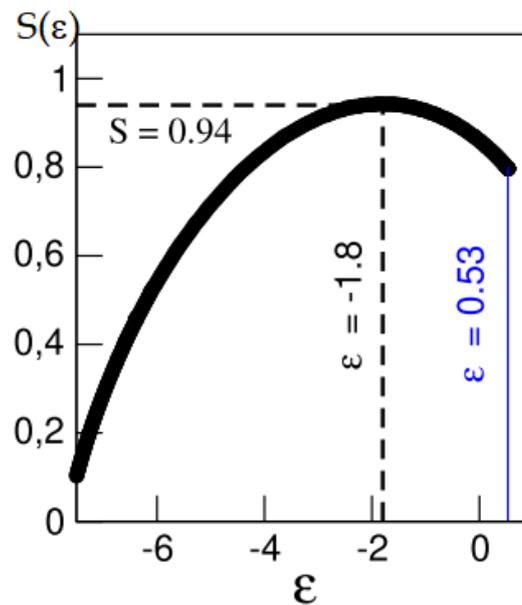


Figura 8: Entropia vs. energia no modelo de infecção por HIV. Fonte: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124239>

e bem menores que as densidades de células infectadas, que terão atingido um nível elevado, levando ao declive do sistema imunológico, dando lugar a doenças “oportunistas” que acabam levando à morte do indivíduo.

D.2 A partir das condições de equilíbrio do sistema, e do resultado do item anterior, encontre os valores das energias de cada um dos níveis característicos do processo. Use duas casas decimais. 1,0pt

No gráfico da Figura 7, percebe-se que, as máximas flutuações nas densidades dos diferentes tipos de células acontecem no sistema justo quando ocorre a inversão nas populações de células, ao redor de 300 semanas após o início da infecção. Isto ocorre, em geral, devido à instabilidade dos sistemas nesta fase. Esse ponto (instante) é decisivo desde o ponto de vista clínico, e justifica o início da terapia antes de que isto aconteça.

D.3 A partir da análise do gráfico de evolução do HIV, faça uma estimativa da máxima flutuação da energia do sistema (use duas casas decimais), que pode ser expressa pela seguinte definição de desvio relativo 1,5pt

$$\sigma_{\epsilon} = \left| \frac{\delta\epsilon}{\epsilon} \right|$$

Q3 - Efeito de Poynting-Robertson (20 pontos)

Neste problema, analisaremos o *Efeito de Poynting-Robertson*, um efeito em que planetas em órbitas ao redor de uma estrela podem sofrer uma espécie de força de atrito. O que é mais surpreendente é que essa força age proporcional à velocidade, como se fosse uma resistência do ar, mesmo no vácuo! Esse atrito é uma consequência da radiação emitida pela estrela possuindo uma pequena componente *tangencial*, quando incidente nos planetas em órbita. Neste problema analisaremos esse fenômeno e como ele afeta a órbita da Terra.

Na Parte **A**, exploraremos o efeito da componente radial da pressão de radiação na órbita, considerando um planeta em uma órbita circular e em equilíbrio térmico. Na Parte **B**, calcularemos o valor da força de atrito, em ambos no referencial do planeta e no referencial do Sol. Já na Parte **C**, analisaremos a dinâmica da órbita na presença da força de atrito e, na Parte **D**, calcularemos valores numéricos das quantidades envolvidas.

Enfatizamos que as partes **A**, **B**, e **C** são razoavelmente independentes entre si. Recomendamos ler todos os problemas antes de começar a solução.

Ao longo deste problema, podem ser úteis as constantes físicas definidas na tabela abaixo. Essas constantes podem ser usadas conforme necessário e apenas na parte **D** o valor numérico delas será relevante. Solicita-se que utilize os símbolos abaixo.

| Constante | Símbolo | Valor |
|-------------------------------|-------------|---|
| Constante de Gravitação | G | $6.67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{N}\cdot\text{m}^2}{\text{kg}^2}$ |
| Constante de Stefan Boltzmann | σ | $5.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4}$ |
| Temperatura do Sol | T_{\odot} | $5.77 \cdot 10^3 \text{ K}$ |
| Massa do Sol | M_{\odot} | $1.99 \cdot 10^{30} \text{ kg}$ |
| Raio do Sol | R_{\odot} | $6.96 \cdot 10^8 \text{ m}$ |
| Velocidade da luz | c | $3.00 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ |
| Distância Sol Terra | l_{\odot} | $1.50 \cdot 10^{11} \text{ m}$ |
| Raio da Terra | r_T | $6.37 \cdot 10^6 \text{ m}$ |
| Massa da Terra | m_T | $5.97 \cdot 10^{24} \text{ kg}$ |

Parte A - Efeitos da Pressão de Radiação (4,0 pontos)

Nesta parte, começaremos analisando o efeito da pressão de radiação radial na órbita de um planeta ao redor de uma estrela. Considere um planeta de densidade uniforme, massa m e raio r , orbitando uma estrela de raio R e massa M à temperatura T_0 . O planeta está numa órbita circular de raio l em volta da estrela. Adicionalmente, assuma que o planeta é um corpo negro ideal em equilíbrio térmico. Isto é, ele absorve todo o calor incidente, e todo ponto do planeta está na mesma temperatura. Finalmente, ao longo de todas as partes da questão, assuma o planeta e a estrela emitem radiação segundo a Lei de Stefan-Boltzmann.

A.1 Calcule a velocidade de órbita do planeta em volta da estrela v , em função de l, M e constantes, desconsiderando inicialmente o efeito da pressão de radiação. 0,2pt

A.2 Calcule o calor por unidade de área e tempo emitido pela estrela a uma distância l da estrela, em função de R, T_0, l e constantes. 0,6pt

Como explicado, considerando que o planeta está em equilíbrio térmico, agora podemos calcular a temperatura do planeta.

A.3 Calcule o calor por unidade de tempo ϕ_P emitido pelo planeta em função de R, T_0, l, r e constantes. 0,4pt

A.4 Calcule a temperatura de equilíbrio do planeta T_{eq} em função de R, T_0, l, r e constantes. 0,8pt

Agora, vamos considerar o efeito da pressão de radiação no planeta, e como essa força afeta a velocidade da órbita calculada no item **A.1**.

A.5 Calcule a pressão de radiação emitida pela estrela incidindo no planeta a uma distância l , em função de T_0, R, l e constantes, desprezando a velocidade do planeta em relação a c . 0,8pt

A.6 Agora considerando o valor da pressão de radiação, calcule o valor da velocidade de órbita do planeta em volta da estrela. 0,6pt

Com o resultado obtido acima, podemos identificar para quais tipos de planeta o fenômeno é mais relevante.

A.7 Lembrando a hipótese de uma densidade de massa constante do planeta, para que tipo de planeta o efeito da pressão de radiação é mais relevante comparado à gravitação? Para planetas com raio grande ou pequeno? 0,6pt

Na **Parte D** analisaremos numericamente o efeito da pressão de radiação comparado à gravitação, e poderemos comprovar o resultado acima para o caso da Terra. Para a resolução do resto da prova, despreze os efeitos da pressão de radiação radial na órbita do planeta.

Parte B - Origem da Força de Atrito (9,0 pontos)

Nesta parte, calcularemos o valor da força de atrito descrita na introdução, e buscaremos explicar o fenômeno nos referenciais do planeta e no da estrela. Começaremos nos itens **B.1-B.3** calculando a força no referencial do planeta. Similarmente à Parte **A**, vamos considerar um planeta em uma órbita circular, e utilize as mesmas variáveis definidas antes. Por conveniência, assuma que o planeta orbita a uma velocidade $v \ll c$. Note que, neste referencial, os raios de luz emitidos pelo Sol chegam no planeta levemente inclinados (veja a Figura 9a)). Que, por sua vez, causa a pressão de radiação a possuir uma pequena componente tangencial à órbita.

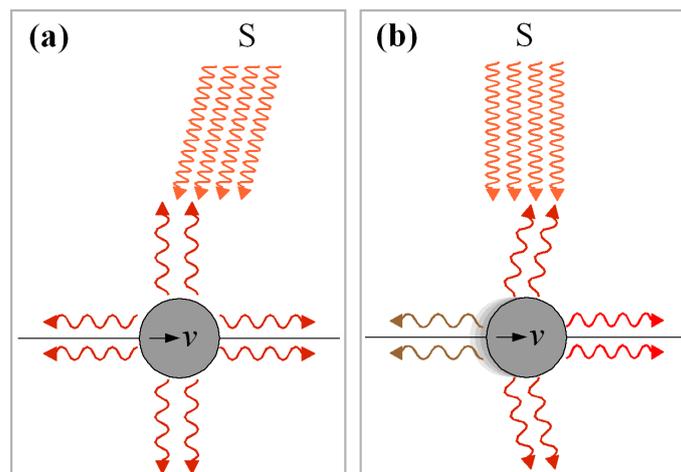


Figura 9: **a)** Visualização no referencial do planeta, onde os raios de luz da estrela S chegam levemente inclinados. **b)** Visualização no referencial da estrela S , onde a emissão de radiação pelo planeta não é isotrópica devido ao movimento do planeta. Fonte: https://en.wikipedia.org/wiki/Poynting%E2%80%93Robertson_effect

Os fótons incidem no planeta levemente inclinados, isso leva a pressão de radiação a possuir uma pequena componente tangencial, causando a força de atrito discutida. Nos itens **B.1-B.3** iremos calcular a força no

referencial do planeta.

B.1 Assumindo $v \ll c$, qual o valor aproximado do ângulo φ , definido como o ângulo entre a direção radial, e a direção dos raios de luz incidentes no planeta. 1,0pt

B.2 Com o resultado acima para φ , ache o valor aproximado da força de atrito sofrido pelo planeta. Dê sua resposta em função dos parâmetros da **Parte A**. 1,0pt

Como a força encontrada é tangencial e contrária à direção de movimento, ela faz com que a órbita lentamente perca energia. Na Parte **C**) analisaremos como isso afeta a dinâmica do movimento do planeta.

B.3 Mostre que a taxa de dissipação da energia total do sistema pode ser escrita da forma 1,0pt

$$\frac{dE}{dt} = -\lambda \frac{v^2}{l^2}, \quad (53)$$

em que λ depende apenas de propriedades da estrela e do planeta, e não da distância entre elas. Encontre λ em função dos parâmetros da parte **A**.

Com os itens acima, mostramos que a força no referencial do planeta é causada pelos fótons incidentes no planeta inclinados. No entanto, este argumento não consegue explicar a origem dessa força no referencial da estrela, já que neste referencial os fótons são emitidos perfeitamente radialmente. Notavelmente, a explicação do fenômeno no referencial da estrela tem uma origem muito mais sutil e é associada ao fato que a emissão de calor pelo planeta *não é isotrópica* no referencial da estrela.

De fato, no referencial da estrela, a emissão de calor do planeta possui uma direção preferencial, tal que mais fótons são emitidos na direção de movimento do que contra a direção de movimento. Este fenômeno gera uma pequena força contrária ao movimento, como retratado na Figura 9 **b**). Para calcular essa força no referencial da estrela, consideramos um fóton de frequência f emitido a um ângulo θ à direção de movimento, como na Figura 10. No referencial do planeta, este fóton é emitido radialmente, porém no referencial da estrela a frequência e o ângulo são afetados por efeitos relativísticos. Para a resolução dos itens **B.4** ao **B.6** assumamos $v \ll c$.

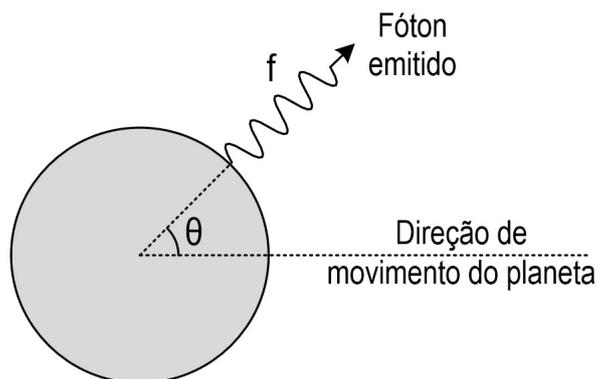


Figura 10: Visualização do planeta e um fóton de frequência f emitido. No referencial do planeta, um fóton é emitido radialmente a um ângulo θ com respeito a direção de seu movimento.

B.4 Considere um fóton de frequência f emitido pelo planeta a um ângulo θ no referencial do planeta. No referencial da estrela, qual o valor deste ângulo θ' ? O ângulo θ' é maior ou menor que θ ? Justifique. 2,0pt

B.5 Considere o mesmo fóton do problema **B.4**. No referencial da estrela, qual o valor desta frequência f' ? 2,0pt

B.6 Utilizando os resultados anteriores, calcule a força de atrito no planeta no referencial da estrela. Expresse seu resultado em função de v , c e o calor emitido por unidade de tempo ϕ_P calculado em **A.3**. Compare com o resultado obtido em **B.2**. 2,0pt

Parte C - Decaimento da órbita (4,0 pontos)

Agora, analisaremos como a força de atrito afeta a dinâmica da órbita. Novamente, consideramos a mesma situação como nas partes anteriores. Considere que a variação da energia do planeta calculada no item **B.4** pode ser escrita como

$$\frac{dE}{dt} = -\lambda \frac{v^2}{l^2} \quad (69)$$

e deixe seus resultados da **Parte C** em função de λ . Usando a expressão acima, acharemos uma expressão para $l(t)$, o raio da órbita em função do tempo, e calcularemos o tempo para a força de atrito causar o decaimento total da órbita. Considere que o decaimento da órbita é lento.

C.1 Encontre uma expressão para $\frac{dE}{dt}$ em função de $M, m, l, \frac{dl}{dt}$ e constantes. 1,0pt

C.2 Com o resultado de **C.1** e a equação 69, encontre uma expressão para $\frac{dl}{dt}$. 1,0pt

C.3 Resolva a equação para $l(t)$, assumindo que $l(t=0) = l_0$. 1,0pt

Embora seja apenas uma aproximação da realidade, consideremos que a órbita decai “completamente” quando a equação encontrada na parte C.3 satisfaz $l(t) = 0$.

C.4 Calcule o tempo aproximado t_D para a órbita decair completamente. 1,0pt

Parte D - Valores numéricos (3,0 pontos)

Agora, vamos computar alguns valores numéricos para analisar quanto esse fenômeno é relevante para a Terra e o Sol. Em particular, mostraremos que a aproximação não relativística que fizemos é válida. Calcularemos a razão entre a força da pressão de radiação radial e a força gravitacional, e concluiremos obtendo aproximadamente quantos anos levará para que a órbita da Terra decaia.

D.1 Mostre numericamente que a aproximação não relativística que fizemos é válida. 1,0pt

D.2 Calcule o valor numérico da razão entre a força da pressão de radiação e a gravitacional. 1,0pt

D.3 Calcule o valor aproximado de t_D em anos encontrado na Parte **C.4**. Comente sobre a relevância do efeito no sistema Terra-Sol. 1,0pt

O seu resultado da parte D3 acima deveria indicar que o *Efeito de Poynting-Robertson* não é particularmente relevante para a Terra. No caso, ela é mais importante para partículas de poeira cósmica, onde esse efeito é mais estudado.