Dados para a realização da prova:
Pressão atmosférica: $P_{atm} = 10^5$Pa
Massa molar do ar: M_{ar}=29 g/mol.
Constante universal dos gases: R=8,31 J/ mol K.
Permissividade do vácuo: $\epsilon_0 = 8,85.10^{-12}C^2/N^2m^2$.
Velocidade da luz no vácuo: $c = 3.10^8$ m/s
Carga do elétron: $e = 1,6.10^{-19}$ C
Massa do elétron: $m = 9,1.10^{-31}$ kg

Q1 - Gol de trivela! (20 pontos) [1]

Este problema é inspirado em um gol de falta feito por um dos melhores laterais-esquerdos que já vestiu a camisa da seleção brasileira de futebol: Roberto Carlos (RC6). O gol aconteceu em 1997 contra a seleção francesa. Trata-se de um dos gols de falta mais bonitos da história do futebol.

A cobrança partiu a D=35 m do gol francês, o jogador brasileiro imprimiu uma velocidade de 100 km/h na bola. Mais impressionante do que a velocidade da bola foi a sua trajetória nos instantes seguintes: a bola passou à direita da barreira de jogadores franceses, fez uma curva acentuada e atingiu finalmente o gol. A trajetória da bola foi tão imprevisível que o goleiro francês, Fabien Barthez, sequer esboçou reação. A charge abaixo ilustra o fenômeno descrito.

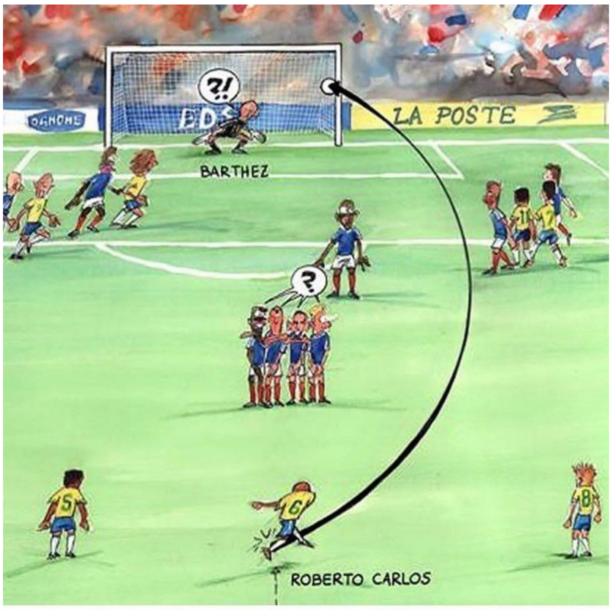


Figura 1: Charge ilustrativa do gol de Roberto Carlos contra a seleção francesa em 1997. Imagem retirada de @mundodabola em https://rb.gy/qrrqky. Acesso em 30/01/2023.

Neste problema, discutiremos que princípios físicos estão envolvidos nessa cobrança de falta tão impressionante. O problema é composto de duas parte (A,B) independentes nas quais diferentes efeitos são investigados. Por fim, na parte C do problema aplicamos os resultados encontrados à cobrança de falta que inspirou o problema.

Para descrever a dinâmica da bola, utilizaremos um sistema de coordenadas curvilíneas tangente-normal (t, n) ilustrado a seguir. O parâmetro s indica a distância percorrida pela bola, $\hat{t}$ da direção instantânea da velocidade bola, que faz um ângulo $\theta(s)$ a direção da bola com a visada direta do gol (direção frontal), e $\hat{n}$ representa a direção radial instantânea do movimento. Por simplicidade, desprezaremos o movimento vertical da bola, de tal forma que o movimento dela pode ser descrito em apenas duas dimensões.

[1]Autoria do prof. Dr. Ivan Guilhon (IPhO 2014)

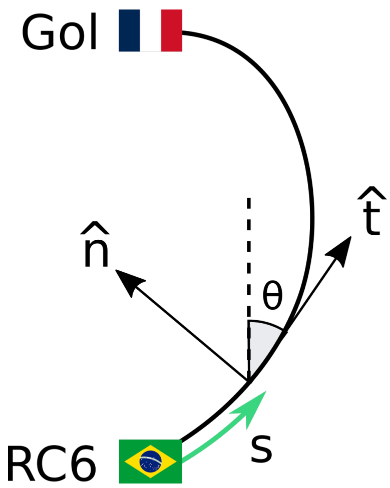


Figura 2: Sistema de coordenadas utilizado para descrever a trajetória da bola.

Parte A - Força de arrasto (7 pontos)

O primeiro efeito que podemos considerar na dinâmica da bola é o efeito do arrasto do ar. Ao deslocar-se no ar, a uma bola de futebol de massa M =450 g e raio R =10 cm desloca junto de si uma massa de ar a seu redor. Esse efeito pode ser mensurado por um fator multiplicativo η sobre a massa da bola para obtenção da massa efetiva do sistema (bola+ar) dado por

$$\eta = \frac{M'}{M} = 1 + \frac{\rho}{2\rho_b}, \tag{1}$$

em que ρ é a densidade do ar e ρ_b representa a densidade de massa da bola.

A.1	Assumindo que no momento da cobrança de falta a pressão atmosférica era de 1 atm e a temperatura local era de 20^oC, determine o valor da massa efetiva M' da bola.	2,0pt

Mais importante que o efeito de correção de massa é o efeito da força de arrasto. Ao deslocar-se num fluído com densidade ρ, a uma velocidade v a bola sofre uma força F_D (o índice D vem da palavra inglesa *drag*, que significa arrasto) de arrasto proporcional a velocidade ao quadrado

$$F_D = C_D k v^2, \tag{2}$$

em que k é uma constante física que depende exclusivamente do raio da bola R e da densidade do ar ρ e $C_D \approx$0,6 é um fator numérico adimensional. A força de arrasto é sempre orientada no sentido oposto ao da velocidade do móvel.

A.2	Utilize argumentos de análise dimensional para determinar como o coeficiente k depende das grandezas físicas mencionadas.	2,0pt

Uma bola sujeita aos efeitos descritos apresenta uma redução de sua velocidade em função da distância percorrida s que pode ser descrita como uma função exponencial

$$v(s) = v_0 e^{-s/\mathcal{L}}, \tag{3}$$

em que $\mathcal{L}$ é um parâmetro de comprimento típico de penetração do móvel no meio material em que ocorre o amortecimento do movimento. Despreze quaisquer outros efeitos não mencionados no enunciado até aqui.

A.3	Determine o valor do parâmetro $\mathcal{L}$ para uma bola que se desloca num campo de futebol. Compare-o com o comprimento do campo de futebol $L = 100m$.	3,0pt

Parte B - Efeito Magnus (8 pontos)

O segredo dessa cobrança de falta foi imprimir altas velocidades linear, v_0, e angular, ω_0, à bola. Estima-se que o chute de trivela de Roberto Carlos tenha imprimido uma velocidade angular na bola de cerca de ω= 60 rad/s, em torno do eixo vertical e constante ao longo de todo o movimento.

Essa técnica futebolística é conhecida como 'chute de trivela'. A realização de uma trajetória curva pela bola deve-se a um efeito aerodinâmico conhecido como 'efeito Magnus'. Uma explicação preliminar do efeito foi feita em 1672 por sir Isaac Newton, observando partidas de tênis, mas uma descrição mais detalhada do fenômeno só foi elaborada em 1852, pelo físico alemão Heinrich Gustav Magnus.

Assumindo o referencial da bola, o ar se desloca com um fluxo constante de velocidade v_0. Devido ao efeito de rotação da bola, a velocidade do fluxo de ar na sua vizinhança é perturbado. Pode-se assumir que a velocidade do fluxo de ar em um ponto extremo da bola, A, da bola é igual a $v_A = v_0 - \omega R$, em que R representa o raio da bola, enquanto a velocidade no ponto diametralmente oposto, B, é $v_B = v_0 + \omega R$. A velocidade angular ω da bola é assumida constante ao longo de todo o movimento.

B.1	Desprezando efeitos associados à perda de energia mecânica no sistema, estime a diferença de pressão do ar $\Delta P = P_A - P_B$ entre os pontos A e B.	2,5pt

O gradiente de pressão observado é responsável por exercer uma força sobre a bola capaz de curvar sua trajetória. A variação de pressão é complexa, dependendo de diferentes parâmetros dos escoamento. Para fins de estimativa, suponha que a pressão do ar no hemisfério da bola que contém o ponto A é submetido a uma pressão P_A e o outro hemisfério, que contém o ponto B, é submetido a uma pressão P_B.

B.2	Considerando a aproximação acima descrita, determine uma expressão para a força Magnus, F_L, que atua sobre a bola em termos de ρ, v, ω e R.	2,0pt

A força F_L (índice L vem do inglês *lift*, termo usado na aerodinâmica que costuma incluir o efeito Magnus e outras interações com o ar) é perpendicular a velocidade da bola, sendo responsável por curvar sua trajetória. Apesar da aproximação de pressão constante em cada hemisfério ser bastante grosseira, ela é capaz de fornecer a correta dependência da força Magnus com os parâmetros do sistema, podendo ser corrigida para valores experimentais mediante um coeficiente numérico multiplicativo C_L que, por simplicidade, consideraremos unitário.

B.3	Determine uma expressão de descreva a deflexão da direção da velocidade da bola com respeito a distância s percorrida, $\Delta\theta(s)$. Deixe sua resposta em função de fatores numéricos, ρ, ω, R, M', v_0 e $\mathcal{L}$.	3,5pt

Parte C - Cobrança de falta (5 pontos)

Ao longo da questão discutimos alguns efeitos dinâmicos envolvidos no gol de falta de Roberto Carlos. Nessa parte calcularemos algumas quantidades físicas envolvidas nesse chute em particular. A figura 3 ilustra a posição e a velocidade inicial da bola de futebol.

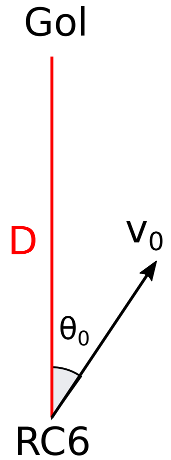


Figura 3: Posição e a velocidade inicial da bola de futebol.

C.1	Determine a expressão do raio de curvatura inicial da trajetória da bola da cobrança de falta do Roberto Carlos.	1,5pt

C.2	Desprezando o efeito do arrasto na bola, estime o ângulo θ_0 entre o alvo do chute e a direção inicial da velocidade inicialmente imprimida na bola.	2,5pt

Uma vez que existem efeitos de dissipação, a trajetória real não é uma circunferência, mas uma espiral de formato mais complexo.

C.3	Discuta qual o efeito da força de resistência de arrasto F_D sobre o raio de curvatura da bola. O raio de curvatura aumenta ou diminui conforme a evolução do movimento?	1,0pt

Gabarito A.1:

A.1) Segundo o enunciado, temos que

$$M' = M\left(1 + \frac{\rho}{2\rho_b}\right). \tag{4}$$

i) Cálculo da densidade da bola:

$$\rho_b = \frac{M}{4/3\pi R^3} = 107kg/m^3. \tag{5}$$

ii) Cálculo da densidade do ar:

$$PV = nRT \rightarrow \rho = \frac{PM}{RT}. \tag{6}$$

Substituindo os valores numéricos de pressão, massa molar, constante universal dos gases e temperatura, segue que

$$\rho = 1,2kg/m^3. \tag{7}$$

iii) Cálculo de massa efetiva da bola:

$$M' = M\left(1 + \frac{\rho}{2\rho_b}\right) = 452g. \tag{8}$$

Critérios de avaliação:
Cálculo da densidade da bola = 0,5 pt
Cálculo da densidade do ar = 1,0 pt
Cálculo da massa efetiva M' = 0,5 pt

Gabarito A.2:

A.2) Do formato da equação de força de resistência fornecida, segue que

$$k = \frac{F_D}{C_D v^2}, \tag{9}$$

portanto, a dimensão da constante k é dada por

$$[k] = kg.m^{-1}. \tag{10}$$

A combinação de densidade ρ e raio R que nos fornece essa dimensão é

$$k = \rho R^2. \tag{11}$$

Critérios de avaliação:
Dimensão de k = 1,0 pt
Resposta final = 1,0 pt

Gabarito A.3:

A.3) Da 2^a lei de Newton

$$F_D = M'\frac{dv}{dt} = M'\frac{dv}{ds}\frac{ds}{dt} = M'v\frac{dv}{ds}. \tag{12}$$

Substituindo as expressões de F_D e $v(s)$, considerando o sentido postivo das grandezas vetoriais como o de $\hat{t}$

$$-0,6\rho R^2 v^2 = -M'v\frac{v_0 e^{-s/\mathcal{L}}}{\mathcal{L}} \tag{13}$$

$$0,6\rho R^2 v^2 = M'\frac{v^2}{\mathcal{L}}. \tag{14}$$

Isolando $\mathcal{L}$, chegamos à resposta final desejada

$$\mathcal{L} = \frac{M'}{0,6\rho R^2} = 62,8m. \tag{15}$$

O valor de $\mathcal{L}$ é menor, mas da mesma ordem de grandeza do que L. Conclui-se que o futebol não é um esporte no qual se possa realizar um chute gol-a-gol, sem desprezar efeitos de resistência do ar.

Critérios de avaliação:
Relacionar F_D e dv/ds = 1,0 pt
Expressão de $\mathcal{L}$ = 1,0 pt
Cálculo numérico de $\mathcal{L}$ e comparação com L= 1,0 pt

Gabarito B.1:
A equação de Bernoulli pode ser usada, segundo as aproximações propostas,

$$P_A + \frac{\rho v_A^2}{2} + \rho g h_A = P_B + \frac{\rho v_B^2}{2} + \rho g h_B. \tag{16}$$

Desprezando a diferença de altura dos pontos

$$\Delta P = P_A - P_B = \frac{\rho}{2}(v_B^2 - v_A^2). \tag{17}$$

Substituindo os valores de velocidade fornecidos

$$\Delta P = 2\rho v\omega R. \tag{18}$$

Critérios de avaliação:
Equação de Bernoulli corretamente enunciada = 1,5 pt
Expressão de ΔP = 1,0 pt

Gabarito B.2:

O gradiente de pressão é simplificado para a hipótese de pressão constante para cada hemisfério. A força resultante pode ser calculado por meio de cálculo integral ou pelo uso da área efetiva da bola, $A_{ef} = \pi R^2$. Utilizando a área efetiva, conclui-se que o valor da força Magnus é dado por

$$F_L = 2\pi\rho v\omega R^3. \tag{19}$$

Critérios de avaliação:
Cálculo de integrais ou enunciado do uso de área efetiva = 1,0 pt
Resposta final = 1,0 pt

Gabarito B.3:
A força F_L assume o papel de resultante centrípeta do movimento

$$F_L = M'\frac{v^2}{r}, \tag{20}$$

em que r representa o raio da trajetória da bola. A expressão do raio da trajetória é dado por

$$r = \frac{M'v^2}{F_L} = \frac{M'v}{2\pi\rho\omega R^3}. \tag{21}$$

Para um deslocamento infinitesimal, segue que $ds = r(s).d\theta$. Assim, segue que

$$\theta(s) = \int_0^s \frac{2\pi\rho\omega R^3}{M'v} ds' = \int \frac{2\pi\rho\omega R^3}{M'v_0} e^{s'/\mathcal{L}} ds' \tag{22}$$

$$\theta(s) = \frac{2\pi\rho\omega R^3}{M'v_0} \mathcal{L}(e^{s/\mathcal{L}} - 1). \tag{23}$$

Critérios de avaliação:
Força centrípeta = 0,5 pt
Relação $s \times \theta$ = 1,5 pt (explicitando ou não o raio de curvatura)
Expressão de $\theta(s)$ = 1,5 pt

Gabarito C.1:
Conforme anteriormente demonstrado, a expressão do raio da trajetória é dado por

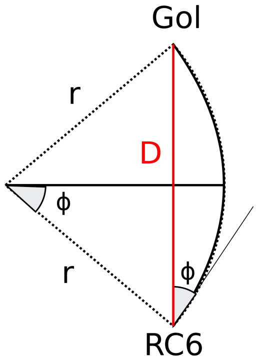
$$r = \frac{M'v^2}{F_L} = \frac{M'v}{2\pi\rho\omega R^3}. \tag{24}$$

Substituindo os valores numéricos, segue que

$$r = 27m. \tag{25}$$

Critérios de avaliação:
Expressão de r = 0,75 pt
Valor numérico de r = 0,75 pt

Gabarito C.2:
No caso em que o arrasto é desprezível a trajetória da bola tem raio de curvatura constante. Portanto, sob essas aproximações a trajetória descrita é um trecho de circunferência de raio de curvatura $r = 27m$ e corda de $D = 35m$, conforme ilustrado na figura a seguir.



O ângulo desejado é dado pela expressão

$$\phi = asen\left(\frac{D}{2r}\right) = 40^o. \tag{26}$$

Critérios de avaliação:
Demontrar formato circular da trajetória = 1,0 pt
Identificar o ângulo da direção do chute com a metade do arco de circunferência descrito = 1,0 pt
Resposta final = 0,5 pt

Gabarito C.3:
Como

$$r = \frac{M'v^2}{F_L} = \frac{M'v}{2\pi\rho\omega R^3}, \tag{27}$$

a redução da velocidade da bola causada pelo arrasto diminui o raio de curvatura da bola.

Critérios de avaliação:
Resposta satisfatória = 1,0 pt

Q2 - Modelo de Thomson e tempo de vida clássico do átomo [2] (20 Pontos)

Na virada dos séculos XIX e XX, o debate sobre a estrutura atômica havia entrado na questão da distribuição de cargas elétricas em um átomo. A parte A do problema consistirá na obtenção de previsões de energia de ionização de um átomo de Lítio, baseando-se no modelo de Thomson. Essa parte é independente das partes seguintes do problema.

Na parte B, discutiremos o problema do colapso radioativo do átomo clássico. Finalmente, na parte C, aprimoraremos o formalismo da parte B expressando alguns resultados em termos do raio clássico do elétron e incluindo efeitos relativísticos.

Parte A - J. J. Thomson e o átomo de Lítio. (8,5 pontos)

J. J. Thomson propôs um modelo do átomo no qual os elétrons, pontuais e carregados negativamente, estão localizados dentro de uma distribuição contínua de carga positiva com uma forma esférica de raio igual ao raio atômico. As previsões deste modelo foram confirmadas apenas em um conjunto limitado de fatos experimentais, no entanto, o valor histórico do modelo o torna interessante o suficiente para ser tratado em um problema eletrostático.

Recentemente, o modelo de Thomson reviveu no estudo das propriedades eletrônicas do 'cluster', que é um agregado de átomos metálicos. Na teoria dos metais, muitas vezes empregamos um modelo no qual a distribuição discreta das cargas positivas nos íons é substituída por um meio contínuo de cargas positivas. Correspondentemente, na teoria dos aglomerados metálicos, o agregado de íons positivos de um aglomerado é substituído por uma esfera na qual as cargas positivas são uniformemente distribuídas.

Segundo o modelo de Thomson, um átomo de Lítio possui três elétrons localizados no interior em uma esfera homogeneamente carregada de carga positiva $+3e$ e raio R. Os elétrons podem ocupar qualquer lugar no interior da esfera.

A.1	Escreva as expressões do campo elétrico e o potencial em todos os pontos do espaço gerada pela distribuição de carga elétrica associada às cargas positivas do átomos.	1,0pt

A.2	Faça os gráficos dos módulos do campo e do potencial em função da distância r do centro da esfera e deixe sua resposta em função do campo e do potencial elétrico na sua superfície, E_0 e V_0, respectivamente.	1,0pt

Devido à sua repulsão mútua, os elétrons são distribuídos dentro do átomo em diferentes posições. Estados estacionários são associados a distribuições de elétrons em equilíbrio mecânico. O átomo de Lítio neutro, Li^0, por exemplo, admite dois estados estacionários.

Podemos ainda definir um parâmetro de energia do sistema atômico como

$$U_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}.$$

A.3	Expresse a energia eletrostática associada a cada uma das duas configurações de equilíbrio possíveis para o átomo de Lítio na forma em função de U_0. Identifique o estado fundamental do sistema neutro.	4,0pt

A.4	Assumindo que o raio R da distribuição de carga positiva do cátion Li^+ é o mesmo para o átomo neutro, determine a energia do estado de equilíbrio do íon Li^+ em função de U_0.	2,0pt

[2] Autoria de Prof. Dr. Ramón Ramayo

A.5	Calcule a energia de ionização do átomo de lítio, segundo o modelo de Thomson em função de U_0.	0,5pt

Gabarito:

A.1 Usando lei de Gauss, para $r \geq R$

$$E(r)\, 4\pi r^2 = \frac{3e}{\epsilon_0} \tag{1}$$

$$E(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{3e}{r^2} = E_0\left(\frac{R}{r}\right)^2 \tag{2}$$

com

$$E_0 = E(R) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{3e}{R^2}, \tag{3}$$

Assim, para $r \leq R$

$$E(r)\, 4\pi r^2 = \frac{3e}{\epsilon_0}\frac{r^3}{R^3} = E_0\left(\frac{r}{R}\right) \tag{4}$$

O potencial...para $r \geq R$

$$V(r) = -\int_{\infty}^{r} E_0\frac{R^2}{r^2}dr = E_0\frac{R^2}{r} = V_0\left(\frac{R}{r}\right), V_0 = E_0 R \tag{5}$$

e para $r \leq R$

$$V(r) = V(R) - \int_{R}^{r} E dr = \ldots = \frac{V_0}{2}\left[3 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right]. \tag{6}$$

Pontuação total: 1,0 pontos
Distribuição: 0,25 pontos por cada expressão (1,0)

A.2 Gabarito:

Os gráficos seguem abaixo...
Pontuação total: 1,0 pontos Distribuição: 0,5 pontos por cada gráfico

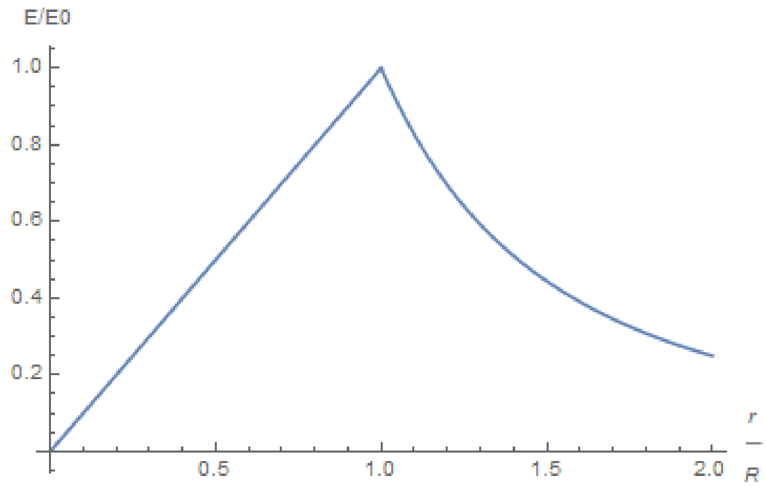


Figura 4: Gráfico do campo elétrico, item A1.

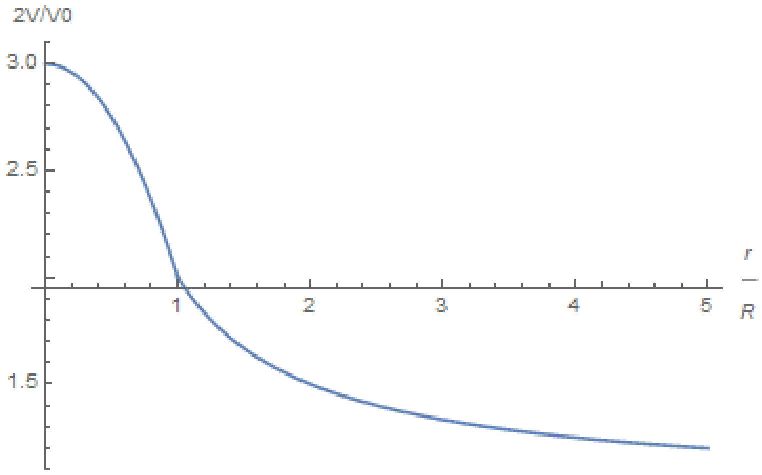


Figura 5: Gráfico do potencial elétrico, item A1.

Gabarito:

A.3
Situação de equilíbrio 1: três elétrons alinhados (1, 2 e 3), com um deles (2) no centro. Cálculo da distância.

O campo da distribuição de cargas negativas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(-)} = E_2 + E_3 = \frac{5}{12} E_0 \left(\frac{R}{x_1}\right)^2, \tag{7}$$

...o campo da distribuição de cargas positivas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(+)} = E_0 \left(\frac{x_1}{R}\right), \tag{8}$$

$$E_1^{-} = E_1^{+}, \tag{9}$$

então

$$x_1 = \left(\frac{5}{12}\right)^{3/2} R \tag{10}$$

Cálculo da energia...
Método 1:

$$U_+ = \frac{\epsilon_0}{2} \int_{espaco} E\left(r\right)^2 \tag{11}$$

$$dv = 2\pi r^2 dr \tag{12}$$

Método 2:

$$dU_+ = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r} q\left(r\right) dq \tag{13}$$

$$q\left(r\right) = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho \tag{14}$$

$$dq = 4\pi r^2 \rho dr \tag{15}$$

Assim...

$$dU_+ = \frac{4}{3}\frac{\pi}{\epsilon_0}\rho^2 r^4 dr \tag{16}$$

Então...

$$U_+ = \int_0^R \frac{4}{3}\frac{\pi}{\epsilon_0}\rho^2 r^4 dr \tag{17}$$

Nas duas variantes o resultado é o mesmo...

$$U_+ = \frac{27e^2}{20\pi\epsilon_0 R} \tag{18}$$

Então...

$$U(x_1) = U_+ + U_- + U_{+/-} \tag{19}$$

$$U_- = U_{12} + U_{13} + U_{32} \tag{20}$$

$$U_{12} = U_{32} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{x_1} \tag{21}$$

$$U_{13} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{2x_1} \tag{22}$$

$$U_{+/-} = -3eV_{dentro}(x_1) = -3e\frac{V_0}{2}\left[3 - \frac{x_1^2}{R^2}\right] \tag{23}$$

Substituindo tudo...

$$U(x_1) \approx -2,5U_0 \tag{24}$$

Situação de equilíbrio 2: elétrons no vértice de um triângulo equilátero, equidistantes do centro. Cálculo da distância.

O campo da distribuição de cargas negativas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(-)} = 2E\cos 30^0 = ... = \frac{1}{3\sqrt{3}}E_0\left(\frac{R}{x_2}\right)^2, \tag{25}$$

...o campo da distribuição de cargas positivas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(+)} = E_0\left(\frac{x_2}{R}\right), \tag{26}$$

$$E_1^- = E_1^+, \tag{27}$$

então

$$x_2 = \frac{R}{\sqrt{3}}. \tag{28}$$

Cálculo da energia.

$$U(x_2) = U_+ + U_- + U_{+/-} \tag{29}$$

$$U_- = U_{12} + U_{23} + U_{13} \tag{30}$$

$$U_{+/-} = -3eV(x_2) = -\frac{3e^2}{\pi\epsilon_0 R} \tag{31}$$

$$U_{12} = U_{21} = U_{23} = U_{32} = U_{31} = U_{13} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\sqrt{3}x_2}, \tag{32}$$

então...

$$U_- = 3\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\sqrt{3}x_2} = \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \tag{33}$$

A energia fica, substituindo tudo...

$$U\left(x_2\right)=\frac{27e^2}{20\pi\epsilon_0 R}-\frac{9e^2}{4\pi\epsilon_0 R}\approx -3,6U_0 \tag{34}$$

Pontuação: 4,0 pontos.
1,0 ponto por x_1
1,0 ponto por $U\left(x_1\right)$
1,0 ponto por x_2
1,0 ponto por $U\left(x_2\right)$

A.4
A configuração do átomo ionizado Li^+ consiste em dois elétrons alinhados ao longo do diâmetro, equidistantes do centro. Cálculo da distância.
O campo da distribuição de cargas negativas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(-)}=\frac{1}{12}E_0\left(\frac{R}{x_3}\right)^2, \tag{35}$$

...o campo da distribuição de cargas positivas sobre o elétron 1...

$$E_1^{(+)}=E_0\left(\frac{x_3}{R}\right), \tag{36}$$

$$E_1^-=E_1^+, \tag{37}$$

então

$$x_3=\frac{R}{12^{3/2}}. \tag{38}$$

Cálculo da energia.

$$U\left(x_3\right)=U_++U_-+U_{+/-} \tag{39}$$

$$U_-=U_{12}=\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{x_3} \tag{40}$$

$$U_{+/-}=-2eV\left(x_3\right) \tag{41}$$

finalmente...substituindo tudo, da mesma forma que para $U\left(x_1\right)$ e $U\left(x_2\right)$...

$$U\left(x_3\right)=\frac{27e^2}{20\pi\epsilon_0 R}+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}\left(\frac{3}{2\left(18^{1/3}\right)}+\frac{12^{1/3}}{2}-9\right)\approx -2,9U_0 \tag{42}$$

Pontuação total: 2,0 pontos
Distribuição: 1,0 ponto por x_3
1,0 ponto por $U\left(x_3\right)$

A.5 A energia de ionização...

$$\Delta U=U\left(x_3\right)-U\left(x_2\right)\approx 0,7U_0 \tag{43}$$

Pontuação total: 0,5 pontos
Distribuição: 0,5 ponto pela expressão da energia de ionização

Parte B - Colapso radiativo do átomo clássico (4,5 pontos)

Resultados de experimentos de espalhamento de partículas α por folhas de ouro realizados por Rutherford indicaram que deveria existir uma alta concentração de massa no centro do átomo, o que levou a abandonar a ideia de uma distribuição contínua de carga positiva no volume ocupado pelo átomo. O modelo foi substituído por um modelo no qual a carga positiva é confinada em um núcleo maciço de carga elétrica positiva em torno do qual orbitam os elétrons.

O modelo proposto enfrentava o problema de não conseguir explicar a estabilidade da matéria, que será o assunto desta parte do problema. Considere um átomo de hidrogênio, no qual um elétron gira em órbita circular em torno do núcleo. Da eletrodinâmica clássica, sabe-se que cargas elétricas aceleradas irradiam energia a uma taxa descrita pela fórmula de Larmor:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{1}{6\pi\epsilon_0}\frac{q^2a^2}{c^3}, \tag{1}$$

em que q é a carga elétrica da partícula móvel, a sua aceleração, ϵ_0 permissividade elétrica do vácuo e c a velocidade da luz no vácuo.

Segue do resultado anterior que, para átomos nos quais efeitos relativísticos são desprezíveis, considerar cada revolução como circular – conhecida como aproximação adiabática – é uma excelente aproximação.

B.1	A razão entre a energia perdida por revolução e a energia cinética do elétron pode ser escrita em função de fatores numéricos e da razão entre a velocidade do elétron e a velocidade da luz, v/c, como $$k\left(\frac{v}{c}\right)^n.$$ Determine k e n.	2,0pt

B.2	Considerando a aproximação adiabática, calcule a frequência $f(r)$ da onda emitida pelo elétron em função do raio da órbita r, permissividade elétrica ε_0, carga do elétron e massa do elétron m.	0,5pt

B.3	Usando o tamanho típico de um átomo (1 Å$= 10^{-10}$ m) e do núcleo (1 fm$= 10^{-15}$ m), estime o tempo necessário para que o elétron caia sobre o núcleo atômico de acordo com o modelo clássico.	2,0pt

B.1 Órbita circular...

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \to v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr} \to K = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \tag{2}$$

O período da órbita...

$$T = \frac{2\pi r}{v} \tag{3}$$

então...

$$\Delta E \approx \frac{dE}{dt}T = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2a^2}{c^3}T = ... = -\frac{e^2}{3\epsilon_0 c^3}\frac{v^3}{r} \tag{4}$$

Daí...

$$|\frac{\Delta E}{K}| = ... = \left(\frac{8\pi}{3}\right)\left(\frac{v}{c}\right)^3 = k\left(\frac{v}{c}\right)^n \ll 1, \tag{5}$$

onde

$$k = \frac{8\pi}{3},$$

e

$$n = 3$$

Pontuação total: 2,0 pontos
Distribuição: 0,5 ponto por expressão da energia cinética.
1,5 ponto pela expressão de $|\Delta E/K|$, k e n

B.2

$$\omega^2 r = \frac{1}{m}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \rightarrow \omega = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3}} = 2\pi f \tag{6}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m}}\,(r(t))^{-3/2} \tag{7}$$

Pontuação total: 0,5 pontos
Distribuição: 0,25 ponto por ω
0,25 ponto por $f \sim r^{-3/2}$

B.3

$$E = K + U = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \tag{8}$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt}\left(-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}\right) = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2 a^2}{c^3} \tag{9}$$

$$\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{c^3}\frac{v^4}{r^2} \rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{4}{3c^3}\left(\frac{v^2}{r}\right)^2 \tag{10}$$

$$\frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{mr^2} \tag{11}$$

Então...

$$\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{4}{3c^3}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{mr^2}\right)^2 \rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{e^4}{12\pi^2\epsilon_0^2 m^2 c^3 r^4} \tag{12}$$

$$-r^2 dr = \frac{e^4}{12\pi^2\epsilon_0^2 m^2 c^3} dt \tag{13}$$

$$-\int_{r_i}^{r_f} r^2 dr = \int_0^{t_{queda}} \frac{e^4}{12\pi^2\epsilon_0^2 m^2 c^3} dt \tag{14}$$

...com $r_i = 10^{-10}$ m e $r_f = 10^{-15}$ m...

$$t_{queda} \sim 1,1.10^{-10} s \tag{15}$$

Pontuação total: 2,0 pontos
Distribuição: 0,25 ponto pela expressão da energia
0,5 ponto pela expressão de $\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{r}\right)$
0,25 ponto pela expressão de $\frac{v^2}{r}$
1,0 ponto pelo cálculo do tempo de queda.

Parte C - Efeitos relativísticos no tempo de vida do átomo (7,0 pontos)

Como o elétron está acelerando, uma análise clássica sugere que ele irradiará energia continuamente até que o elétron colapse sobre o núcleo.O efeito da radiação de energia, calculada da forma normal a partir da aceleração do elétron, faz com que este não descreva mais órbitas estacionárias, mas se aproximará do núcleo descrevendo órbitas de dimensões cada vez menores, e com frequência cada vez maior; o elétron na média ganhando em energia cinética ao mesmo tempo em que todo o sistema perde energia.

Uma vez que a matéria mantém-se estável durante um intervalo de tempo maior do que o estimado pelo clássico, verifica-se a necessidade de incluir outros efeitos no modelo.

Veremos a seguir proposta realizadas por Bohr para esse modelo antes que o seu tradicional modelo semi-clássico fosse proposto. Considere que no estado fundamental do átomo de hidrogênio o elétron se move em uma órbita circular inicial de raio $a_0 = 5,3 \times 10^{-11} m$ em torno do próton, que se supõe estar rigidamente fixado no espaço. Uma das hipóteses usadas por Bohr para tentar estudar o "colapso" do átomo foi associar um "raio clássico" r_0 ao elétron

$$r_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{m_0 c^2}. \tag{2}$$

Dessa forma, o elétron não é considerado uma partícula puntiforme, mas uma esfera com um raio característico r_0. Veja a figura a seguir.

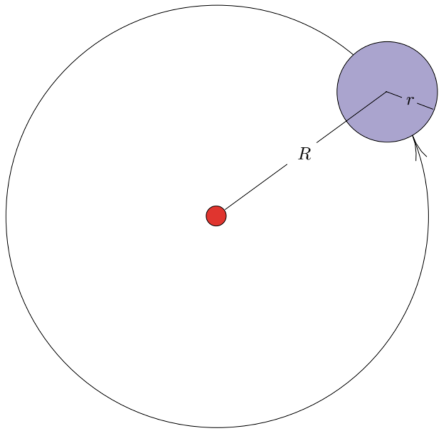


Figura 6: Modelo atômico clássico de Bohr, considerando o "raio clássico"do elétron.

Considerando o modelo descrito, com o raio clássico r_0 do elétron, responda às perguntas a seguir. A aproximação adiabática deve ser assumida ao longo de todo o processo.

C.1	Escreva a expressão da potência radiada, em função de r_0, da posição do elétron r, em qualquer instante tempo, da massa do elétron, m, e da velocidade da luz.	1,0pt

C.2	Estime a razão entre as velocidades radial e tangencial do elétron no movimento até o colapso. Forneça sua resposta em função de r e r_0.	1,5pt

À medida que o elétron realiza uma movimento em direção ao núcleo, pode ser que a sua velocidade passe a ser comparável com a velocidade da luz. Usualmente, os efeitos relativísticos começam a ser relevantes quando a velocidade do elétron atinge 0,1c.

C.3	Determine o raio da órbita r_{rel} do elétron a partir do qual é necessário incluir efeitos relativísticos.	0,5pt

Bohr estimou assim que seria possível que o elétron viaje parte de seu trajeto em velocidades relativísticas. Nestes últimos itens, estudaremos os efeitos relativísticos sobre o movimento do elétron no modelo do átomo de hidrogênio.

A fórmula de Larmor pode ser nesse caso adaptada para o elétron relativístico substituindo a aceleração a pela aceleração a_{rel} do elétron, medida no seu referencial próprio.

C.4	Encontre a componente centrípeta da aceleração relativística do movimento do elétron no átomo de hidrogênio. Expresse sua resposta em termos do fator γ de Lorentz.	1,5pt

C.5	Calcule o fator γ de Lorentz do elétron relativístico em função de r e r_0. Suponha verdeira a condição de $r \gg r_0$ e considere apenas termos de primeira ordem em (r_0/r).	1,0pt

C.6	Analise se as correções relativísticas aumentam ou diminuem o tempo de queda do elétron previsto pelo modelo clássico.	1,5pt

C.1

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2a^2}{c^3} \tag{3}$$

$$a \sim a_r = \frac{1}{m}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \tag{4}$$

Então...substituindo a aceleração na expressão da potencia...

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{c^3}\left(\frac{1}{m}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\right)^2 \tag{5}$$

Substituindo agora o raio "clássico"do elétron...

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{r_0^3}{r^4}mc^3 \tag{6}$$

Pontuação total: 1,0 ponto
Distribuição: 0,5 ponto pela expressão de dE/dt em função de r
0,5 ponto pela expressão da potência em função de r_0 e r

C.2 As componente da velocidade do elétron...

$$v_r = \frac{dr}{dt}, v_\theta = r\frac{d\theta}{dt} \tag{7}$$

...do item B3...

$$v_r = \frac{dr}{dt} = -\frac{4}{3}\frac{r_0^2}{r^2}c \tag{8}$$

$$\frac{mv_\theta^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \tag{9}$$

$$v_\theta = c\sqrt{\frac{r_0}{r}} \tag{10}$$

Comparando...

$$|\frac{v_\theta}{v_r}| = \frac{c\sqrt{\frac{r_0}{r}}}{\frac{4}{3}\frac{r_0^2}{r^2}c} \tag{11}$$

Assim...

$$|\frac{v_\theta}{v_r}| \sim \left(\frac{r}{r_0}\right)^{3/2} \gg 1 \tag{12}$$

Pontuação total: 1,5 ponto
Distribuição: 0,5 ponto pela expressão de v_r
0,5 ponto pela expressão de v_θ
0,5 ponto pela expressão da relação

C.3 Em função dos efeitos relativísticos...
$v/c \sim v_\theta/c =$ 0,1, então...

$$0,1 = \frac{c\sqrt{\frac{r_0}{r}}}{c} = \sqrt{\frac{r_0}{r}} \tag{13}$$

Finalmente...

$$r_{rel} \sim 100 r_0 \tag{14}$$

Pontuação total: 0,5 pontos
Distribuição: 0,25 ponto por $v_\theta/c = 0,1$
0,25 ponto por $r \sim 100r_0$

C.4 A componente centrípeta da aceleração...

$$a_c \sim -r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 = -\frac{r_0}{r^2}c^2 \tag{15}$$

A componente tangencial...

$$a_\theta \ll a_c \tag{16}$$

Então...a aceleração relativística...

$$a' = \frac{d^2r'}{dt'^2} = \frac{d}{dt'}\left(\frac{dr'}{dt'}\right) \tag{17}$$

A variação do raio da órbita acontece na direção perpendicular ao movimento do elétron, assim $dr' = dr$
O tempo medido no referencial do elétron é o tempo próprio, o menor de todos, por tanto $dt' = dt/\gamma$
Então...

$$a' = \frac{d^2r}{dt^2}\gamma^2 = a\gamma^2 = a_c\gamma^2 = -\frac{r_0}{r^2}c^2\gamma^2 \tag{18}$$

Pontuação total: 1,5 pontos
Distribuição: 0,5 pela aceleração
0,5 ponto pelas transformações relativísticas para r e t (0,25 por cada uma)
0,5 ponto pela expressão da aceleração relativística

C.5 Para uma órbita relativística...

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2a'^2}{c^3} = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2a_r^2}{c^3}\gamma^4 \tag{19}$$

Na aproximação adiabática a massa relativística não varia...

$$\frac{F}{\gamma m} = a = a_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\frac{1}{\gamma m} \tag{20}$$

Substituindo a na equação da energia liberada...

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{c^3}\gamma^4\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\frac{1}{\gamma m}\right)^2 = -\frac{2}{3}\gamma^2\frac{r_0^3}{r^4}mc^3 \tag{21}$$

$$\frac{r_0}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2 r} = \gamma\frac{v^2}{c^2} = \gamma\beta^2 \sim \gamma\left(1-\frac{1}{\gamma^2}\right) \tag{22}$$

$$\gamma^2 - \gamma\frac{r_0}{r} - 1 = 0 \tag{23}$$

$$\gamma = \frac{\frac{r_0}{r} + \sqrt{\frac{r_0^2}{r^2}+4}}{2} = \sqrt{1+\frac{r_0^2}{4r^2}} + \frac{r_0}{2r} \sim 1 + \frac{r_0}{2r} \tag{24}$$

Pontuação total: 1,0 ponto
0,25 pontos pela expressão de a
0,25 pontos pela expressão da energia liberada
0,5 pela expressão de γ

C.6
A energia total no referencial fixo é...

$$E = \gamma mc^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \left(\gamma - \frac{r_0}{r}\right)mc^2 \approx \left(1 - \frac{r_0}{2r}\right)mc^2 \tag{25}$$

Então...derivando e comparando com a expressão encontrada anteriormente para a energia liberada...

$$\frac{dE}{dt} \approx \left(\frac{r_0}{2r^2}\right)\frac{dr}{dt}|_{rel}mc^2 = -\frac{2}{3}\gamma^2\frac{r_0^3}{r^4}mc^3 \tag{26}$$

Assim, finalmente, usando a expressão para a velocidade radial, encontrada anteriormente, no item C2...

$$\frac{dr}{dt}|_{rel} \approx -\frac{4}{3}\frac{r_0^2}{r^2}c\gamma^2 = -\frac{4}{3}\frac{r_0^2}{r^2}c\left(1+\frac{r_0}{2r}\right)^2 = \frac{dr}{dt}\left(1+\frac{r_0}{2r}\right)^2 \gtrapprox \frac{dr}{dt} \tag{27}$$

Com isso, o aumento da velocidade radial indica uma pequena diminuição do tempo de "queda" do elétron.

Pontuação total: 1,5 pontos
Distribuição: 0,5 ponto pela expressão da Energia
0,5 ponto pela potência
0,5 ponto pelo resultado final.

Q3 - O Modelo XY e transições de fase (20 pontos) [3]

Neste problema analisaremos a termodinâmica de um modelo extremamente importante na mecânica estatística: o modelo XY. Esse modelo explica o comportamento de materiais cujos *spins* estão restritos a orientar-se apenas na direção x, y, conforme seu nome. Aplicações deste modelo são uma área de pesquisa muito ativa em áreas como supercondutividade, superfluidos, materiais bidimensionais *etc.*

O interesse nesse modelo advem de uma transicao de fase muito específica, a famosa transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT ou KT-transition). Em 2016, o prêmio Nobel de Física foi dado ao par de cientistas Michael Kosterlitz e David Thouless pelo seu trabalho neste fenômeno (infelizmente, Berezinskii já havia morrido). Essa transição de fase é caracterizada pelo aparecimento espontâneo de *vórtices* dentro do material, essencialmente quando a direção dos spins do material se alinham e formam círculos concêntricos no plano, chamados de vórtices.

Na **Parte A** e **Parte B**, analisaremos o modelo XY de forma simplificada, considerando dipolos magnéticos em apenas uma dimensão, e discutiremos se o sistema apresenta uma transição de fase. Na **Parte C**, analisaremos o modelo em uma malha de duas dimensões, e estudaremos o comportamento de vórtices e suas energias. Em seguida, na **Parte D** encontraremos uma estimativa da temperatura da transição de fase. Finalmente, na **Parte E** analisaremos interações entre vórtices. Com exceção da **Parte E**, todas as partes podem ser resolvidas independentes das anteriores. Recomenda-se a leitura de todo o problema antes de começar a sua solução.

Em todas as partes do problema, assuma que estamos considerando um material de spins em equilíbrio térmico a temperatura T.

Note: Quando assumimos que $x \gg 1$, é possível assumir também que $\ln x \gg 1$.

Parte A - O Sistema de um Spin (1,5 pontos)

Para começar o problema, considere um único dipolo magnético $\vec{m}$ no plano $x-y$ tal que $\vec{m} = m(\hat{y}\cos\theta + \hat{x}\sin\theta)$ onde $-\pi < \theta \leq \pi$. **Apenas** na parte A, considere um campo magnético externo $\vec{B} = B\hat{y}$.

A.1	Dado o dipolo magnético $\vec{m}$ e o campo magnético $\vec{B}$ acima, qual a energia de interação entre o dipolo e o campo? Escreva sua resposta em termos de B, m, θ.	0,5pt

Agora, imaginemos que esse spin esteja imerso em equilibrio termico num meio a temperatura T. Lembre que sistemas em equilíbrio térmico satisfazem uma *distribuição de Boltzmann*, isto é, a densidade de probabilidade $p(\theta)$ de se encontrar o sistema em um angulo θ com energia $E(\theta)$ é proporcional a $\exp\left(-\frac{E(\theta)}{k_B T}\right)$ e k_B é a constante de Boltzmann.

Com isso em mente, agora podemos computar a energia média do nosso sistema. As seguintes integrais podem ser úteis:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \exp(k\cos\theta)\, d\theta = 2\pi I_0(k)\ , \quad \int_{-\pi}^{\pi} \cos\theta \exp(k\cos\theta)\, d\theta = 2\pi I_1(k)\ , \text{ e } I_1(k) = \frac{dI_0(k)}{dk}, \tag{1}$$

em que I_0 e I_1 são as funções modificadas de Bessel de ordem 0 e 1. Para os items a seguir, assuma que essas funções são conhecidas. Expresse seus resultados utilizando essas funções e suas derivadas.

A.2	Compute a energia média do sistema acima, em termos de m, B e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, além das integrais I_0, I_1. **Dica** Encontre a densidade de probabilidade $p(\theta)$ em função da direção θ do dipolo. Como que se normaliza esta distribuição?	1,0pt

[3] Autoria de Thomas e Thiago Bergamaschi (@IPhO 2018 e 2016)

Gabarito:

A.1 $E = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -mB\cos\theta$.

A.2 Dado que o sistema esta em equilibrio termico, a distribuicao da energia $p(E)$ e proporcional a $p(E) = p(\theta) \propto e^{-\beta E(\theta)} = e^{\beta m B \cos\theta}$. Primeiro, encontremos o fator de normalização da distribuição:

$$N = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta m B \cos\theta} = 2\pi I_0(\beta m B) \Rightarrow p(\theta) = e^{\beta m B \cos\theta}/(2\pi I_0(\beta m B)). \quad (2)$$

E depois, a energia media:

$$\bar{E} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta p(\theta) E(\theta) = -\frac{mB}{2\pi I_0(\beta m B)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta m B \cos\theta} \cos\theta = -mB \cdot \frac{I_1(\beta m B)}{I_0(\beta m B)} \quad (3)$$

Marking Scheme:
Item A.1
- $+0,5$ pela expressão correta.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Item A.2
- $+0,4$ pela expressão correta de $\int p(\theta)E(\theta)$
- $+0,4$ por incluir o fator de normalização da probabilidade.
- $+0.2$ Escrever o resultado com as funções I_1, I_0.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Parte B - A Cadeia de Spins em 1D (4,0 pontos)

Nesta próxima parte do problema, começaremos a analisar interações entre dipolos em equilíbrio térmico. Especificamente, considere um sistema de N desses dipolos magnéticos fazendo uma cadeia em uma dimensão como na figura 7. Assuma também que não temos mais um campo externo $\vec{B}$, que somente os dipolos adjacentes na cadeia interagem.

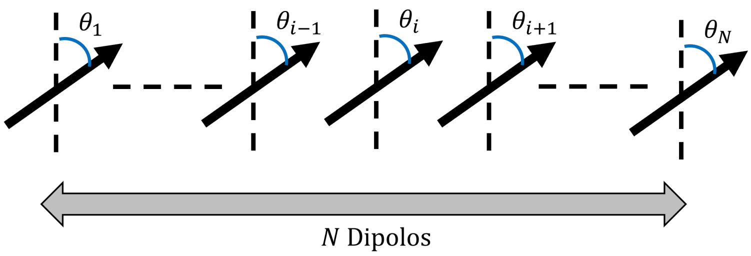


Figura 7: Cadeia 1D de N dipolos.

Se o i-ésimo dipolo é escrito da forma $\vec{m}_i = m(\hat{y}\cos\theta_i + \hat{x}\sin\theta_i)$, com ângulos θ_i para $i = 1 \cdots N$, definimos a energia de interação entre dipolos adjacentes pela equação:

$$E_{i,i+1} = -\frac{J}{m^2} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_{i+1}, \text{ para uma constante } J > 0. \quad (4)$$

B.1	Indique a energia total de uma configuração do sistema de dipolos $E(\theta_1, \ldots, \theta_N)$, e escreva a equação da *densidade de probabilidade* para os N ângulos $p(\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_N)$, em função de β, J e dos ângulos $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_N$ da configuração. Você não precisa desenvolver completamente as expressões, basta deixar seu resultado em função de integrais e somatórias.	1,0pt

É possível demonstrar que a expressão anterior pode ser reescrita em termos da diferença entre ângulos de dois spins seguidos, $\Delta_i = \theta_i - \theta_{i+1}$. É provável que você julgue interessante reescrever as expressões do item anterior em função desses parâmetros.

B.2 Considerando o limite $N \to \infty$, encontre a energia média do sistema por dipolo $\mathcal{E} = \langle E/N \rangle$. Deixe sua resposta em termos de β, J e as funções de Bessel I_0, I_1 fornecidas na parte A. 1,0pt

Um jeito de analisar se o sistema apresenta uma transição de fase é verificar se o calor específico apresenta discontinuidades como função da temperatura. Por exemplo, a transição da água do estado sólido ao líquido apresenta uma descontinuidade do calor específico de c_{gelo} para $c_{\text{água}}$, da qual se pode pode inferir que o sistema apresenta uma transição de fase. Aqui analisaremos o nosso sistema de modo similar.

B.3 Dada a energia média encontrada acima, mostre que o calor específico $c(K)$ (por dipolo) é dado por: 0,5pt

$$c(K) = k_B K^2 \frac{d}{dK} \frac{I_1(K)}{I_0(K)}$$

Onde $K = \beta \cdot J$.

Para continuar resolvendo a Parte B, precisaremos de certas propriedades das funções I_0 e I_1. Na figura 8, plotamos o gráfico da razão $g(K) = \frac{I_1(K)}{I_0(K)}$.

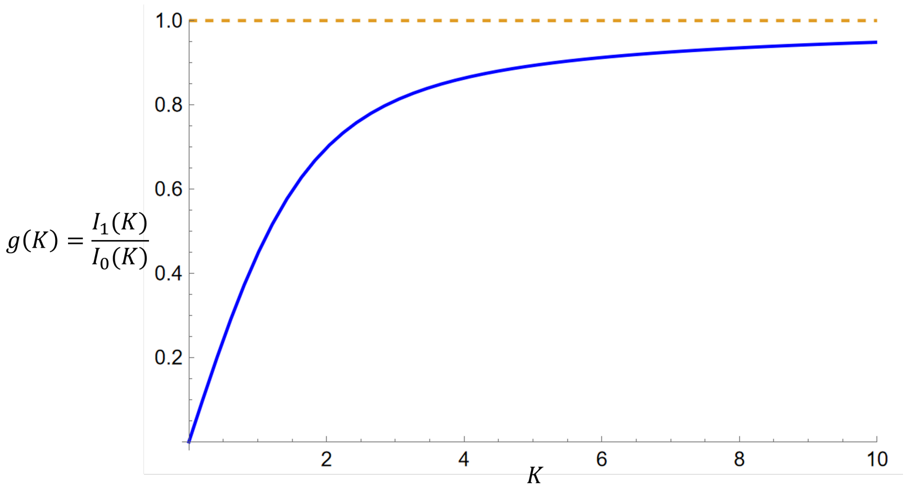


Figura 8: Um esboço de $g(K) = I_1(K)/I_0(K)$.

B.4 Esboce *aproximadamente* um gráfico de $c(K)$. Neste esboço, não se preocupe em dar o valor ou local de mínimos/máximos. Indique apenas os limites de $K \to 0/\infty$, e se existe ou não discontinuidades. Voce pode querer usar que: 1,0pt

$$g(K) = \frac{K}{2} \text{ para } K \approx 0, \text{ e } g(K) = 1 - \frac{1}{2K} - \frac{1}{8K^2} \text{ para } K \to \infty.$$

B.5 Existe transição de fase nesse modelo? 0,5pt

Com esses resultados em mente, podemos partir para trabalharmos com uma malha de dipolos de duas dimensões. É neste cenário que temos a formação de *vórtices*, como iremos observar.

Gabarito:

B.1 Note que a energia de um par é simplesmente $E_{i,i+1} = -J \cdot \cos(\theta_i - \theta_{i+1})$. A energia total é dada pela soma das energias entre pares adjacentes:

$$E(\theta_1, \ldots, \theta_N) = \sum_i E_{i,i+1} = -J \cdot \sum_{i=1}^{N-1} \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \tag{5}$$

A densidade de probabilidade $p(\theta_1 \ldots \theta_N) \propto e^{-\beta E(\theta_1,\ldots,\theta_N)}$, e seu fator de normalização é

$$Z = \int d\theta_1 d\theta_2 \ldots d\theta_N e^{-\beta E(\theta_1,\ldots,\theta_N)} \tag{6}$$

Logo $p(\theta_1 \ldots \theta_N) = Z^{-1} \cdot e^{-\beta E(\theta_1,\ldots,\theta_N)}$.

Marking Scheme:

Item B.1

- $+0,4$ pela expressão correta da energia entre pares de dipolos.
- $+0.3$ pela expressão da energia total como uma soma de todos os pares.
- $+0.3$ expressão normalizada da distribuição de probabilidade em funções de somas e integrais.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Gabarito:

B.2 Note que a energia depende apenas das diferenças $\Delta_i = \theta_i - \theta_{i+1}$ entre ângulos adjacentes. Usando uma troca de variáveis, podemos re-escrever o fator de normalização Z que definimos na parte B.1 a seguir:

$$Z = \int d\Delta_1 d\Delta_2 \ldots d\Delta_{N-1} d\theta_N e^{-\beta E(\Delta_1,\ldots,\Delta_{N-1})} = \tag{7}$$

$$= 2\pi \int d\Delta_1 d\Delta_2 \ldots d\Delta_{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} e^{\beta J \cos\Delta_i} = 2\pi(2\pi I_0(\beta J))^{N-1}. \tag{8}$$

Onde primeiro integramos sobre θ_N, e depois usamos que os limites das integrais sobre θ e Δ são periódicos em $[-\pi, \pi]$, e finalmente notamos que as integrais sobre os Δ_i's são independentes e dão I_0. Para concluir,

$$\mathcal{E} = \frac{1}{N} \int d\theta_1 d\theta_2 \ldots d\theta_N p(\theta_1 \ldots \theta_N) E(\theta_1 \ldots \theta_N) = \tag{9}$$

$$= -\frac{J}{N} \cdot \frac{2\pi}{Z} \cdot \sum_{i=1}^{N-1} \int d\Delta_1 d\Delta_2 \ldots d\Delta_N \cos\Delta_i \prod_{k=1}^{N-1} e^{\beta J \cos\Delta_k} = \tag{10}$$

$$= -\frac{2\pi}{Z} \cdot \frac{J}{N} \cdot (N-1) \cdot (2\pi I_1(\beta J)) \cdot (2\pi I_0(\beta J))^{N-2} \approx -J \cdot \frac{I_1(\beta J)}{I_0(\beta J)} \tag{11}$$

Onde seguimos os mesmos passos de Z e usamos o limite $N \gg 1$.

Marking Scheme:

Item B.2

- $+0,4$ por perceber que integrar sobre os angulos é igual a integrar sobre a diferença dos angulos.
- $+0.3$ por lembrar os fatores de normalização da probabilidade.
- $+0.3$ reconhecer as integrais I_1, I_0 definidas previamente.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Gabarito:
B.3 O calor específico é dado por

$$c(T) = \frac{d}{dT}\mathcal{E} = -\frac{1}{k_B}\frac{1}{T^2}\frac{d}{d\beta}\mathcal{E} = -k_B\beta^2\frac{d}{d\beta}\mathcal{E} = k_B K^2 \frac{d}{dK}\frac{\mathcal{E}}{J} = k_B K^2 \frac{d}{dK}\frac{I_1(K)}{I_0(K)} \tag{12}$$

B.4 Note que em $K \to 0$:

$$\frac{dg(K)}{dK} = \frac{1}{2} \Rightarrow c(K) = \frac{k_B}{2}K^2 \tag{13}$$

Similarmente, em $K \to \infty$:

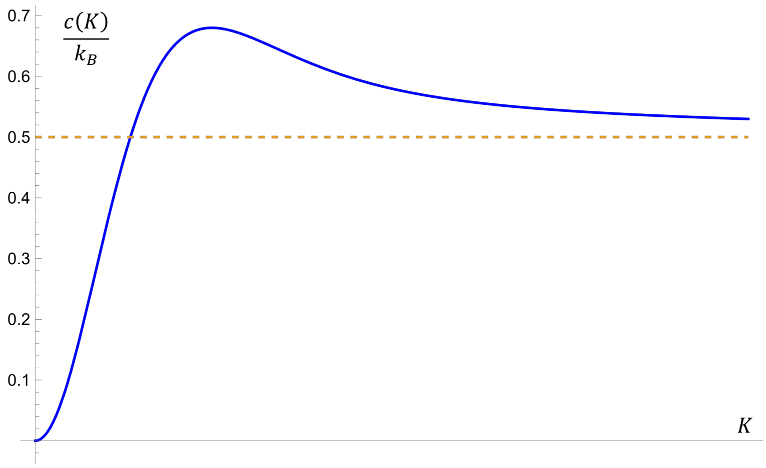
$$\frac{dg(K)}{dK} = \frac{1}{2K^2} + \frac{1}{4K^3} \Rightarrow c(K) = k_B\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4K}\right) \tag{14}$$

Perceba que $c(K)$ tende para k_B por acima, implicando que $c(K)$ contém um máximo. Logo, o esboço fica como na próxima folha.

Continuação do Gabarito da **B.4** na próxima folha:

Gabarito:

Importantemente, perceba que $c(K) = 0$, $c(K \to \infty) \to k_B/2$, e a função tem no mínimo um máximo, como retratado ao lado. Adicionalmente, note que como $g(K)$ é contínuo e diferenciavél, esperamos que $c(K)$ também seja.



B.5 Não, pois $c(K)$ é contínuo.

Marking Scheme:
Item B.3
- $+0,5$ calcular $c(T)$ usando regra da cadeia em β.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Item B.4
- $+0,2$ comportamento em $K \to 0$
- $+0.4$ comportamento em $K \to \infty$
- $+0.4$ reconhecer que precisamos de no mínimo um máximo.
- $-0,1$ cada erro de aritmética, ou esquecer de por nome nos eixos do esboço.

Item B.5
- $+0,5$ reconheceu que não tem transição de fase.

Parte C - Cadeias de Spins em 2D (6,5 pontos)

Nessa parte, estudaremos uma generalizaçao do sistema da parte B, onde os dipolos se extendem numa malha em duas dimensões. Infelizmente, o fenômeno com uma malha de duas dimensões é muito mais complexo, e precisamos fazer uma série de aproximações para que ele seja tratável. Especificamente, tomaremos o limite de uma malha muito grande e dipolos muito perto um dos outros, para que podemos resolver o problema no limite *contínuo*.

Considere uma malha **circular** de N dipolos no plano $x-y$ como na figura 9, tal que o espaçamento entre dipolos é a, e que o raio aproximado da malha circular é $L \gg a$.

C.1	Assumindo que N é muito grande, encontre uma relação aproximada entre N, L e a.	0,5pt

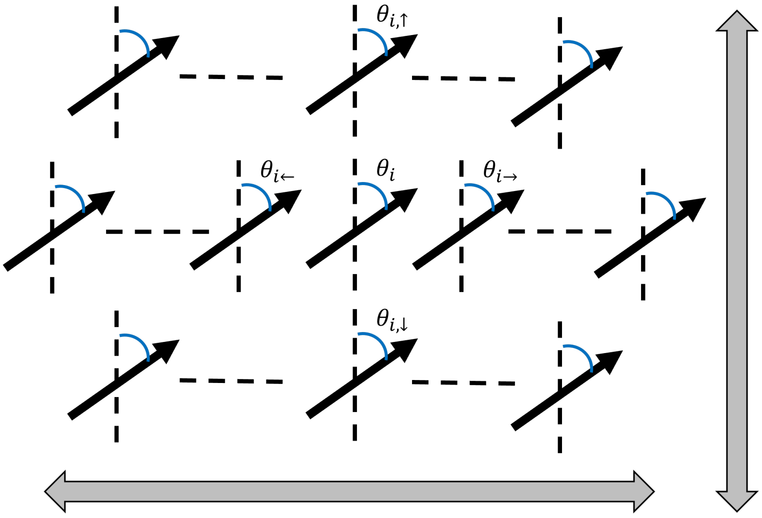


Figura 9: Cadeia 2D de dipolos numa malha circular de raio L.

Novamente, assuma que cada dipolo é representado como $\vec{m} = m(\hat{y}\cos\theta + \hat{x}\sin\theta)$, e a energia do sistema é dada por:

$$E = -\frac{J}{m^2}\sum_{\langle i,j\rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j, \text{ para uma constante } J > 0. \tag{15}$$

Onde agora a soma é sobre os pares $\langle i,j\rangle$ de dipolos adjacentes na malha 2D: ou seja, cada dipolo interage com o dipolo acima (que tem ângulo $\theta_{i,\uparrow}$), embaixo ($\theta_{i,\downarrow}$), esquerda ($\theta_{i,\leftarrow}$), e direita ($\theta_{i,\rightarrow}$) a ele na figura 9.

Assumindo que θ_i varie muito lentamente entre sítios, (ou seja, $\theta_i \approx \theta_{i,\uparrow} \approx \theta_{i,\downarrow} \approx \theta_{i,\leftarrow} \approx \theta_{i,\rightarrow}$), e que $L \gg a$, podemos tomar o *limite da continuidade* do nosso sistema. Nesse limite, $\theta(x,y)$ vira uma função das coordenadas x, y, e a soma vira uma integral sobre o espaço 2D, tal que podemos escrever a energia do sistema como:

$$E = E_0 + \frac{J'}{2}\iint dS|\vec{\nabla}\theta|^2, \text{ onde } \vec{\nabla}\theta = \hat{x}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial\theta}{\partial y}, \text{ e } |\vec{\nabla}\theta|^2 = \vec{\nabla}\theta\cdot\vec{\nabla}\theta = \left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)^2 \tag{16}$$

em que dS representa um elemento de área.

C.2	Encontre expressões para E_0 e J' na equação 16 em função de J, L, e a.	2,0pt

C.3	Os momentos de dipolo estão livres para adotar qualquer posição de acordo com a temperatura do sistema. O que se pode afirmar a respeito de $\theta(x,y)$ na condição de temperatura nula, $T = 0K$?	0,5pt

Quando $T > 0$, existem soluções muito mais complexas e interessantes para $\vec{\nabla}\theta(x,y)$. Embora não deduziremos aqui, quando $T \approx 0$, se espera que as configurações macroscópicas mais prováveis de $|\vec{\nabla}\theta(x,y)|$ correspondem a

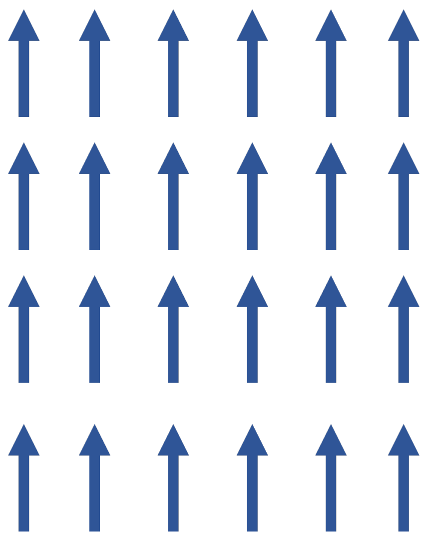


Figura 10: Figura ilustrando a direção dos dipolos com todos os dipolos apontando na mesma direção.

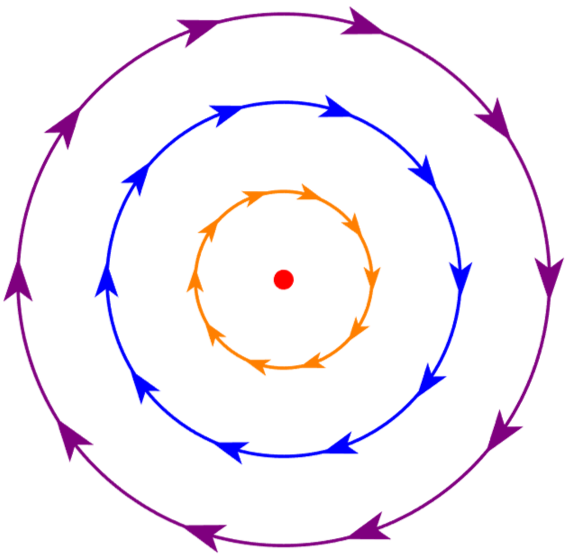


Figura 11: Figura ilustrando o comportamento dos dipolos com um vórtice de $n = 1$ em r_0.

mínimos locais na energia. Pode se provar que esses mínimos satisfazem a equação de Laplace em 2D, $\vec{\nabla}^2\theta = 0$. Para os items restantes dessa questão, assuma que essa equação descreve o nosso sistema.

Há múltiplos tipos de solução para essa equação. A solução não trivial mais simples se trata de um *vórtice*, uma solução cilindricamente simétrica ao redor de um ponto $\vec{r}_0$ no plano. Soluções para $\theta(x, y)$ de um vórtice localizado em $\vec{r}_0$ satisfazem uma forma simplificada das condições de contorno do problema C.3:

$$\oint_\Gamma \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} = \begin{cases} 2\pi n & \text{se } r_0 \in \Gamma \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{17}$$

Onde $r_0 \in \Gamma$ se o vortice esta dentro da area contida por Γ, integramos por Γ no sentido horário, e o parâmetro n é uma *constante* independente da curva Γ, a chamada *carga do vórtice*. Note a similaridade da equação 17 acim com a *Lei de Ampère* usada em eletromagnetismo:

$$\oint_\Gamma \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I_{\text{cond}} \text{ onde } I_{\text{cond}} \text{ é a corrente contida em } \Gamma \tag{18}$$

No nosso caso, o campo magnético $\vec{B}$ corresponde a $\vec{\nabla}\theta$, e o termo $\mu_0 I_{\text{cond}}$ corresponde a ao valor $2\pi n$. Recomendamos pensar nessa analogia com magnetismo ao decorrer deste problema.

Este tipo de soluções é denominado um vórtice devido ao comportamento da direção dos dipolos. Para isso, note a diferença entre as figuras 10 e 11. A figura 10 retrata o comportamento da direção dos dipolos em um cenário onde todos estão apontando para cima com o mesmo $\theta = 0$. Na figura 11 esquematizamos o comportamento da direção dos dipolos no plano para $n = 1$. Estamos considerando que o ponto vermelho representa a localização do vórtice r_0, e que as setas representam a direção dos dipolos. Perceba que a direção dos dipolos traça círculos em volta de r_0. Está ilustrado a direção dos dipolos para três círculos em amarelo, azul, e roxo a raios diferentes em volta do vórtice em r_0.

C.4	Assuma que exista um vórtice de carga n localizado na origem $(0, 0)$. Encontre uma expressão para $\lvert\vec{\nabla}\theta(x, y)\rvert$ em termos de n e $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$. **Dica:** Talvez a similaridade com a *Lei de Ampère* seja útil.	2,0pt

Com isso em mente, podemos estimar a energia de um vórtice. Infelizmente, a equação 16 da energia no limite contínuo diverge se integrarmos sobre todo o plano. Para evitar isso, integre a partir de $|r| = a$, ou seja, a partir de dipolos adjacentes ao dipolo na origem.

C.5 Mostre que a energia mínima de um vórtice E_V pode ser escrito da forma 1,5pt

$$E_V = C \cdot \ln \frac{L}{a} + E_0 \tag{19}$$

e encontre C em função de J', a, L. Lembre que E_0 foi definido na equação 16.

Gabarito:

C.1 Cada dipolo ocupa uma área quadrada de lado a. Desprezando efeitos de borda, $Na^2 \approx \pi L^2 \Rightarrow N = \pi(L/a)^2$.

C.2 Note que $E = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$. Se $\theta_i \approx \theta_j$, então usando a approximação de pequenos ângulos $\cos x \approx 1 - \frac{1}{2}x^2$ e desprezando efeitos de borda,

$$E \approx -J \sum_{\langle i,j\rangle} 1 + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} (\theta_i - \theta_j)^2 \tag{20}$$

Note que $\sum_{\langle i,j\rangle} 1 = \frac{1}{2} \cdot 4 \cdot N$, e portanto $E_0 = -2JN \approx -2\pi J \cdot (L/a)^2$, usando o resultado da parte C.1. Note agora que $\theta_i - \theta_j \approx (\vec{r_i} - \vec{r_j}) \cdot \vec{\nabla}\theta$, e portanto

$$\sum_{\langle i,j\rangle} (\theta_i - \theta_j)^2 \approx \int \frac{dS}{a^2} \cdot a^2 \left(\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)^2 \right) = \int dS |\vec{\nabla}\theta|^2. \tag{21}$$

Tal que $J' = J$.

Marking Scheme:

Item C.1
- $+0,5$ reconheceu que argumento contando área pode ser aplicado.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Item C.2
- $+0,5$ expandiu o termo de cos corretamente.
- $+0,5$ reconhecer que o termo constante $E_0 = -2JN$.
- $+0,5$ escrever a diferença de angulos como gradiente.
- $+0.5$ transformar a soma em integral devido a pequeno espaçamento.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Gabarito:

C.3 Quando $T = 0K$, o sistema se encontra na configuração de energia mínima. Note que a energia do sistema aumenta se $\vec{\nabla}\theta \neq 0$. Logo, $\theta(x, y)$ é constante, independente de x, y.

C.4 As condições de contorno de um vórtice correspondem a de um fio infinito de corrente $\mu_0 I = 2\pi n$ passando perpendicular ao plano na posição $\vec{r}_0$. Considere agora um círculo de raio r ao redor de um vortice localizado na origem. A 'Lei de Ampere' fala que

$$|\vec{\nabla}\theta| \cdot 2\pi r = 2\pi n \Rightarrow |\vec{\nabla}\theta| = \frac{n}{r} \tag{22}$$

C.5 Desprezando a região $|r| \leq a$, e usando a simetria cilindrica do problema, podemos computar a energia do vortice:

$$E_V = E_0 + \frac{J}{2}\int_a^L 2\pi r|\vec{\nabla}\theta|^2 = E_0 + J'\pi n^2 \cdot \int_a^L \frac{1}{r} = E_0 + J'\pi n^2 \ln\frac{L}{a} \tag{23}$$

A energia minima corresponde ao caso $n = 1$, onde $C = J'\pi$.

Marking Scheme:

Item C.3

- $+0,5$ reconhecer que $T = 0$ implica energia mínima e alinhamento.

Item C.4

- $+0,5$ reconhecer que Lei de Ampere neste problema é uma analogia com um fio infinito.
- $+0,5$ reconhecer que $|\vec{\nabla}\theta|$ é constante em volta de um círculo de raio r.
- $1,0$ obter corretamente $|\vec{\nabla}\theta|$.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Item C.5

- $+0,5$ reconhecer a simetria cilíndrica do problema.
- $+1,0$ integrar de a até L para evitar as divergências.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Parte D - A Formação de Vórtices em 2D (2,5 pontos)

Analisaremos a seguir a condição necessária para a formação de vórtices. Para isso, podemos calcular a variação da energia livre de Helmholtz do sistema, definida como

$$F = E - T \cdot S, \tag{24}$$

quando sistema com nenhum vórtice passa a apresentar um vórtice, em que E é a energia do sistema, S é sua entropia, e T sua temperatura. A energia livre de Helmholtz F é uma quantidade muito relevante na física pois a sua redução caracteriza processos espontâneos em condições de temperatura e pressão constantes.

Para obter a diferença da energia livre de Helmholtz ΔF, só nos resta estimar o aumento da entropia do sistema $\Delta S = S_{1\ \text{Vortex}} - S_{0\ \text{Vortex}}$ devido a introduçao de um vórtice.

Isso pode ser feito usando a equação de Boltzmann para entropia, $\Delta S = k_B \log \Omega$, onde Ω neste caso é o número de possíveis posições do centro do vórtice em um dos dipolos na nossa malha de raio L. Despreza efeitos de borda.

D.1	Estime Ω e ΔS, em função de k_B, L e a.	1,5pt

Agora podemos encontrar a expressão para ΔF. Lembre que já calculamos a energia devido a presença de um vórtice no item **C.6**.

D.2	Encontre a variação ΔF da energia livre de Helmholtz. Acima de qual temperatura T_{KT} temos a produção espontânea de vórtices? Escreva suas respostas em função de J', L, a, k_B, ou usando a constante C definida no problema C.5.	1,0pt

Essa transição de fase entre a produção espontânea e não espontânea de vórtices é denominada a transição de *Kosterlitz-Thouless*, e é extremamente importante em fenômenos de supercondutividade e superfluidos. Michael Kosterlitz e David Thouless compartilharam o Prêmio Nobel de Física em 2016 pelo seu trabalho nessa transição de fase do modelo XY.

Gabarito:

D.1 Desprezando efeitos de borda, se o nosso sistema contem N dipolos, entao o numero de jeitos diferentes que podemos posicionar o centro do vortice na nossa malha é $\Omega \approx N$. Pela parte C.1, sabemos que $N \approx (L/a)^2$, e logo pela equacao de Boltzmann:

$$\Delta S \approx 2 \cdot k_B \ln \frac{L}{a} \tag{25}$$

D.2 Note que o aumento da energia ΔE pela introducao de um vortice é $\Delta E = E_V - E_0 = C \ln L/a$. Logo, a diferença das energias livres é

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S \approx (C - 2 \cdot k_B \cdot T) \ln \frac{L}{a} \tag{26}$$

Quando $\Delta F < 0$, teremos a formacao espontanea de vortices. Essa transicao occorre quando

$$T > T_{KT} = \frac{C}{2k_B} = \frac{J}{k_B} \cdot \frac{\pi}{2}. \tag{27}$$

Marking Scheme:

Item D.1

- $+1,0$ contar Ω de qualquer forma que obtenha dependência $(L/a)^2$.
- $+0,5$ obter ΔS para $L >> a$.
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Item D.2

- $+0,5$ perceber que para T grande suficiente $\Delta F < 0$
- $+0,5$ obter expressão no limite de L grande para T_{KT}
- $-0,1$ cada erro de aritmética.

Parte E - Interações entre Pares de Vórtices (5,5 pontos)

Nessa parte, estudaremos as interações entre pares de vórtices no plano. Para isso, note que a equação de Laplace é linear, e portanto combinações lineares de soluções para $\theta(x, y)$ também são soluções.

Para resolver os itens da parte E, considere o seguinte sistema de dois vórtices: um vórtice de carga $n = 1$ na posição $(-R, 0)$, e outro de carga $n = -1$ na posição $(R, 0)$.

E.1 Similarmente como na figura 11, esboçe a direção dos dipolos nesta configuração de dois vórtices. Voce pode assumir que $\theta(0, 0) = \pi$ no seu desenho. **Dica** Retorne a analogia eletromagnética da parte C.4. A que corresponde esse par de vórtices? 2,0pt

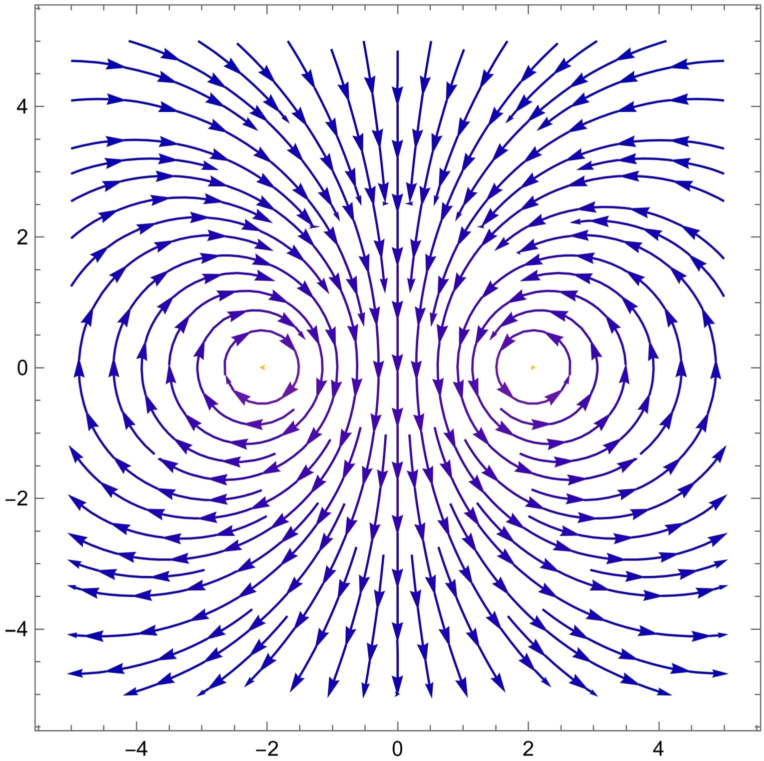
Novamente, nossa expressão para a energia no limite contínuo (a equação 16) diverge se intergrarmos $|\vec{\nabla}\theta|^2$ sobre todo o plano $x - y$. Então, para estimar a energia no item E.2. abaixo despreze a área de raio a ao redor de cada vórtice.

E.2 Assumindo $L \gg R \gg a$, estime a energia de um par de vórtices em função de L, R, a e J'. Não se preocupe com fatores numéricos constantes, apenas a dependência sobre os parâmetros relevantes. 2,0pt

E.3 Quando $T < T_{KT}$ (do problema D.2.), é possível observar a produção espontânea de vórtices de alguma forma? Justifique. 1,5pt

Gabarito:

E.1 Perceba que nossa configuração com um vórtice com $n = 1$ em $(-R, 0)$ e um com $n = -1$ em $(R, 0)$ tem similaridade com um caso com dois fios infinitos um em $(-R, 0)$ com corrente entrando o plano, e um em $(R, 0)$ com corrente saindo do plano. Logo, precisamos apenas esboçar a direção do campo magnético neste caso. Este esboço é um exercício simples de magnetismo, e se trata de duas contribuiçoes, um com o campo no sentido horário, e um no anti-horário, como abaixo, onde consideramos o problema com $R = 2$.



Pontos integrais são dados caso o aluno indique o comportamento correto em $x = 0$, e o comportamento perto de cada vórtice.

Solução Alternativa

Uma solução alternativa do problema obtém uma solução analítica para o gradiente como abaixo, e usa isso para fazer o esboço:

Consideremos um ponto fixo (x, y) no plano, e defina as distancias

$$r_+ = (y^2 + (x - R)^2)^{1/2}, r_- = (y^2 + (x + R)^2)^{1/2} \tag{28}$$

do ponto (x, y) até a posicao $(\pm R, 0)$ de cada vortice. Na parte C.5, chegamos a conclusao que $\vec{\nabla}\theta$ de um vortice centrado na origem formava circulos concentricos ao redor da origem, e correspondia ao campo magnetico de um fio de corrente perpendicular ao plano. Logo, $\vec{\nabla}\theta(x, y)$ de um vortice centrado em $\vec{r}_0 = (\pm R, 0)$ é dado por

$$\vec{\nabla}\theta(x, y) = \frac{1}{r_\pm}\left(\hat{y}\frac{x \mp R}{r_\pm} - \hat{x}\frac{y}{r_\pm}\right) \tag{29}$$

Por linearidade, $\vec{\nabla}\theta$ do sistema de dois vortices é simplesmente a soma desses ‘campos magneticos’:

$$\vec{\nabla}\theta(x, y) = \hat{y}\left(\frac{x - R}{r_+^2} - \frac{x + R}{r_-^2}\right) - \hat{x}\left(\frac{y}{r_+^2} - \frac{y}{r_-^2}\right). \tag{30}$$

Gabarito:

E.2 Este problema contém uma variedade de diferentes soluções. Começaremos com soluções mais simples, antes de discutir mais complexas. Enfatizamos que como estamos apenas interessado na dependência dos parâmetros, pode ser feito várias aproximações e analogias para obter a resposta.

Solução 1 - Razoavelmente Formal
Fazendo a analogia com magnetismo, pensando em dois fios infinitos como na **E.1**, sabemos que a densidade de energia magnética é dada por $\frac{B^2}{2\mu_0}$, e que a energia total por unidade de comprimento é $\int dS \frac{B^2}{2\mu_0}$. No entanto, como na nossa analogia B corresponde a $\vec{\nabla}\theta$, essa quantia corresponde precisamente a energia que queremos computar $\int dS|\vec{\nabla}\theta|^2$. Logo, caso calculamos a energia no caso magnético isso ira corresponder ao nosso problema.
Devido a isso, considere dois fios infinitos com espessura a separados por r, cada um carregando corrente I em direções opostas. Note que a força por unidade de comprimento entre dois fios infinitos separados por r é $f = -\frac{\mu_0 I^2}{2\pi r}$. Para pegar a energia, precisamos integrar essa força do ponto de energia 0 ate energia finita separados por $2R$, e neste caso isso corresponde a integrar de $r = 2a$ até $2R$, e obteremos $\varepsilon = -\int_{2a}^{2R} f dr = \frac{\mu_0 I^2}{2\pi} \ln \frac{R}{a}$. Para levar esse resultado com magnetismo de volta para o nosso problema com vórtices, note que não se preucupamos com fatores constantes, e logo a unica parte importante é o fator de $\ln \frac{R}{a}$ na resposta. Logo, a energia do par de vórtices deve ser da forma $E = J' \ln \frac{R}{a}$.

Solução 2 - Menos Formal
Outra possível solução usa a analogia com eletromagnetismo muito mais informalmente. Considere a mesma analogia com fios infinitos em direções opostas, e no infinito junte os fios formando um loop. Iremos calcular a indutância por comprimento desse loop, e escrevemos $\varepsilon = \frac{LI^2}{2}$. Para a indutância por comprimento, note que o fluxo é:

$$\phi = \frac{\mu_0 I}{2\pi} \int_a^{2R-a} dr \frac{1}{r} + \frac{1}{2R-r} \approx \frac{\mu_0 I}{2\pi} \ln \frac{R}{a} \Rightarrow L \propto \ln \frac{R}{a} \tag{31}$$

Logo, a energia vai ser proporcional a L, dando novamente a depência com $E = J' \ln \frac{R}{a}$.

Gabarito:

Solução 3 - Mais Formal
Para estimar a energia do par de vortices, primeiro estimaremos a energia do sistema a distancia muito grande $\Lambda \gg R$ da origem, porem, pequena comparada $L \gg \Lambda$ ao tamanho da malha. Note que, nesse limite,

$$r_+ \approx r_- \approx \Lambda \tag{32}$$

e pela parte E.1, $|\vec{\nabla}\theta| \approx R/\Lambda^2$. Portanto, a energia do sistema a distancia $[\Lambda, L]$ da origem é (ignorando constantes)

$$\frac{J}{2}\int_\Lambda^L dr \cdot 2\pi r|\vec{\nabla}\theta|^2 \approx JR^2 \cdot \int_\Lambda^L dr \cdot r^{-3} \approx JR^2(\Lambda^{-2} - L^{-2}) \approx J \cdot (R/\Lambda)^2. \tag{33}$$

E a energia do sistema proximo ao par de vortices? Nesse limite, fazer a integral exata é bem complicado, porém se so tivermos interessados na dependencia de a, J, Λ há um jeito simples de se approximar o resultado. Na parte E.1, deduzimos que $\vec{\nabla}\theta$ do par de vortices e a soma $= \vec{\nabla}\theta_1 + \vec{\nabla}\theta_2$ do campo de cada vortice. Logo,

$$|\vec{\nabla}\theta|^2 = |\vec{\nabla}\theta_1 + \vec{\nabla}\theta_2|^2 \le 2\big(|\vec{\nabla}\theta_1|^2 + |\vec{\nabla}\theta_2|^2\big) \tag{34}$$

E podemos approximar a energia proximo aos vortices como se eles agissem independente um do outro. Novamente desprezando os efeitos de borda na regiao a distancia a de $(\pm R, 0)$, temos:

$$\frac{J'}{2}\int^\Lambda dS|\vec{\nabla}\theta|^2 \le J'\int^\Lambda dS|\vec{\nabla}\theta_1|^2 + J'\int^\Lambda dS|\vec{\nabla}\theta_2|^2 \approx J' \cdot \int_a^\Lambda dr\frac{1}{r} = J' \ln\frac{\Lambda}{a} \tag{35}$$

E portanto nossa estimativa da energia do par de vortices é

$$E_{par} = J' \cdot \left(\ln\frac{\Lambda}{a} + (R/\Lambda)^2\right) \tag{36}$$

A nossa estimativa é valida se $R \ll \Lambda \ll L$. Como não nos preocupamos com constantes numéricas, podemos escolher $\Lambda = 10^3 \cdot R$, e concluímos que

$$E_{par} \approx J' \cdot \ln R/a. \tag{37}$$

E.3 Note que a energia de um par de vortices é proporcional a $\ln R/a$, enquanto de um vortice só é proporcional a $\ln L/a$. Se $L \gg R \gg a$, a qualquer temperatura finita $T > 0$ a probabilidade de encontrarmos um par de vórtices e muito maior que de encontrarmos vórtices livres. Logo, e sim possível observar a produção espontânea de vórtices abaixo de T_{KT}.

Marking Scheme:

Item E.1
- $+1,0$ perceber que a analogia corresponde a dois fios infinitos.
- $+0,5$ comportamento correto para posições perto dos vórtices.
- $+0,5$ comportamento correto para $x = 0$.
- $-0,1$ para erros qualitativos no esboço

Item E.2
- $+2,0$ qualquer argumento que obtém $\ln\frac{R}{a}$. Como existe inúmeras soluções, essa parte será preenchida após a prova

Item E.3
- $+0,5$ perceber que como $L >> R >> a$, E_{par} é sempre menor que a de vórtices juntos.
- $+1,0$ perceber que a entropia se mantém logo sempre temos pares de vórtices.