



Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual Paulista

---

---

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.011/02

## Equações de Estado Exóticas na Equação de Einstein

Léo Gouvêa Medeiros

Orientador

*Prof. Dr. Ruben Aldrovandi*

novembro de 2002

“Tornar o simples complicado é fácil; tornar o complicado simples, isso sim é criatividade”  
Charles Mingus - Compositor de Jazz

## Agradecimentos

À minha mãe que me “atura” até hoje.

Ao meu pai com o qual tenho frutíferas conversas.

À minha tia Cira e meu tio Taio que sempre me apoiaram nos caminhos que escolhi.

Ao Cassius, Pegé e Rodrigo, pelos trabalhos desenvolvidos juntos.

Ao meu orientador Prof. Ruben Aldrovandi pela excelente orientação.

À Prof. Zara, pela suas excelentes aulas e pelo carinho para comigo.

Ao Prof. Pimentel pela sua amizade.

Ao Prof. Galetti, pelas discussões sobre o potencial nuclear.

A todos meus amigos da escalada, nos quais, muitas vezes, deposito a minha vida através de um nó na ponta da corda.

Aos colegas do IFT.

À FAPESP, pelo apoio financeiro.

Por fim, gostaria de agradecer a todas as pessoas deste mundo, que de alguma forma contribuíram para minha formação.

---

## Resumo

Sabemos, do modelo padrão da cosmologia, que quatro equações regem a dinâmica do universo. As duas primeiras são as equações de Friedmann, a terceira é a equação de conservação do tensor energia momento e a última é uma equação de estado. Através desta equação de estado podemos definir 3 períodos bastante distintos na evolução de nosso universo:  $p = 0$ , era da matéria;  $p = \frac{\epsilon}{3}$ , era da radiação;  $-\epsilon \leq p \leq -\frac{\epsilon}{3}$ , era inflacionária.

Por outro lado, baseado na termodinâmica, é razoável supor que a equação de estado do universo primordial seja bastante complexa, principalmente devido ao fenômeno de produção de pares.

Nesta dissertação, propomos algumas equações de estado  $p(kT)$  para o universo primordial, baseado em um gás de fótons mais um gás de nucleons provenientes da radiação. Utilizando o método de Mayer de expansão em clusters, estes nucleons são tratados estatisticamente como partículas clássicas que interagem através de potenciais nucleares fenomenológicos.

A principal característica destas equações de estado é que, devido à forte atração da interação nuclear, conforme a energia  $kT$  aumenta a pressão torna-se negativa. Portanto, as equações de estado  $p(kT)$  são capazes de ligar de forma natural as relações  $p = \frac{\epsilon}{3}$ , da era da radiação, e  $-\epsilon \leq p \leq -\frac{\epsilon}{3}$ , da era inflacionária, possibilitando assim um mecanismo físico de geração de inflação no universo primordial.

**Palavras Chaves:** cosmologia; equações de estado; potencial nuclear; sistemas estatísticos com interação; nucleons.

**Áreas do conhecimento:**1.05.01.03-7.

---

## Abstract

We know, from the standard model of cosmology, that four equations determine the dynamics of the universe. The first two are the Friedmann's equations, the third one is the equation of the conservation of the energy-momentum tensor and the last one is a equation of state. Through this equation of state we can define 3 much distinct periods in the evolution of the universe:  $p = 0$ , matter era;  $p = \frac{\epsilon}{3}$ , radiation era;  $-\epsilon \leq p \leq -\frac{\epsilon}{3}$ , inflationary era.

Nevertheless, based on thermodynamics, it's reasonable to suppose that the equation of state of the early universe is very complex, mainly due to the pair production phenomenon.

In this dissertation we propose some equations of state  $p(kT)$  for the early universe, based in a gas of fotons plus a gas of radiation-belonging nucleons. Using the Mayer's method of cluster expansions, these nucleons are treated statistically as classical particles that interact through phenomenological nuclear potentials.

The main characteristic of these equations of state is that, due to the strong attraction of the nuclear interaction, as the energy  $kT$  grows the pressure become negative. Thus, the equations of state  $p(kT)$  are able to link naturally the equation  $p = \frac{\epsilon}{3}$ , of the radiation era, and  $-\epsilon \leq p \leq -\frac{\epsilon}{3}$ , of the inflacionary era, enabling in this way a physical mechanism that produces inflation in the early universe.

# Índice

<b>1</b>	<b>O Modelo Padrão da Cosmologia</b>	<b>1</b>
1.1	Introdução . . . . .	1
1.2	Equações de Friedmann . . . . .	2
1.3	Modelo dominado pela matéria . . . . .	7
1.4	Modelo dominado pela radiação . . . . .	8
1.5	Modelo Inflacionário . . . . .	11
1.6	Solução geral das equações de Friedmann . . . . .	13
1.7	História térmica do universo . . . . .	15
<b>2</b>	<b>Sistemas Estatísticos com Interação</b>	<b>17</b>
2.1	Introdução . . . . .	17
2.2	Expansão em cluster para um gás clássico . . . . .	17
2.3	Equação de estado - Expansão do virial . . . . .	19
2.4	Discussão sobre o significado da pressão em um gás real . . . . .	21
2.4.1	O Stress interno para gases reais . . . . .	22
2.5	Exemplos de cálculos dos coeficientes do virial . . . . .	27
2.5.1	Potencial simplificado de Lennard-Jones . . . . .	27
2.5.2	Potencial de esferas duras . . . . .	29
2.6	Cálculo de densidades na abordagem do equilíbrio . . . . .	31
<b>3</b>	<b>Potencial Nuclear</b>	<b>36</b>
3.1	Introdução . . . . .	36
3.2	Potencial retangular baseado no dêuteron . . . . .	36
3.2.1	Dados experimentais do dêuteron . . . . .	37
3.2.2	Descrição teórica para o dêuteron . . . . .	38
3.3	Estrutura geral das forças nucleares . . . . .	43
3.4	Potenciais fenomenológicos . . . . .	47
3.4.1	Potenciais de Reid . . . . .	48

---

<b>4</b>	<b>Equações de Estado do Período Pré-Nucleossíntese</b>	<b>52</b>
4.1	Introdução . . . . .	52
4.2	Equações de estado do modelo $\gamma + N$ . . . . .	53
4.2.1	Equação de estado baseada no potencial retangular . . . . .	55
4.2.2	Equação de estado baseada no potencial tipo hardcore . . . . .	59
4.2.3	Equação de estado baseada no potencial tipo softcore . . . . .	62
4.3	Influências das equações de estado na cosmologia . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Discussão Final</b>	<b>66</b>
<b>A</b>	<b>Desenvolvimento Completo da Expansão em Cluster</b>	<b>69</b>
<b>B</b>	<b>Cálculo do <math>a_3(kT)</math> para o potencial retangular</b>	<b>78</b>
	<b>Referências</b>	<b>85</b>

# Capítulo 1

## O Modelo Padrão da Cosmologia

### 1.1 Introdução

O objetivo da Cosmologia é o de descrever o universo e sua evolução. Um conceito preliminar importante para a Cosmologia é que o universo\*, fisicamente falando, representa o todo, ou seja, ele não tem fronteiras e portanto não é possível “sair” do universo. Dito isso, o universo pode ser tratado como um sistema físico isolado, cuja evolução é determinada através de interações entre suas partes. São essas interações que coletivamente geram os efeitos medidos aqui na Terra.

Hoje são conhecidas quatro interações fundamentais na natureza. Duas delas (interações forte e fraca) são de curto alcance. A interação eletromagnética é de longo alcance, porém a existência de duas cargas distintas, uma que gera atração e outra que gera repulsão, faz com que as cargas tendam a se cancelar de forma a produzir um meio eletricamente neutro. Note que se integrarmos a lei de Gauss  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho$  em todo universo, necessariamente teremos  $\rho = 0$ . Portanto a interação eletromagnética pode ser desprezada em larga escala. Por último, temos a interação gravitacional que é de longo alcance e sempre atrativa.

Devido a este fato, é razoável supor que a evolução do universo seja governada apenas pela interação gravitacional. Como se sabe, essa interação é descrita pela Relatividade Geral e tem por equações fundamentais as equações de Einstein.

Com base em todos estes argumentos, criou-se um modelo cosmológico, baseado na Relatividade Geral, chamado de modelo padrão.

Neste primeiro capítulo, baseado nas referências [1], [2] e [3], pretendemos apresentar de forma resumida alguns dos principais pontos do modelo padrão.

---

\*Aqui é feita uma distinção entre universo (com letra minúscula), que representa apenas o todo material, e Universo (com letra maiúscula), representa TUDO. Tecnicamente falando, o “universo” se refere apenas a seção espacial do espaço-tempo. Nessa Dissertação, vamos tratar apenas do universo material.



## 1.2 Equações de Friedmann

Uma das bases do modelo padrão está no elemento de linha de *Robertson-Walker* (*R. W.*)\*,

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t) \left[ \frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 d\theta^2 + r^2 \text{sen}^2 \theta d\phi^2 \right], \quad (1.1)$$

sendo  $r$ ,  $\theta$  e  $\phi$  as coordenadas espaciais,  $t$  a coordenada temporal,  $a(t)$  o fator de escala e  $k$  o parâmetro de curvatura podendo valer -1,0 ou 1. Esta métrica é obtida invocando-se o princípio cosmológico (o universo é homogêneo e isotrópico) e o princípio de Weyl (as galáxias, tomadas como unidades de observação, seguem geodésicas não interceptantes). Vale ressaltar que, pelas observações, a distribuição de matéria não é homogênea, e muitas galáxias não seguem o princípio de Weyl (ocorre interceptação), porém espera-se que o universo como um todo obedeça, com boa aproximação, os dois princípios.

As equações que regem o universo são obtidas usando 1.1 na equação de Einstein:

$$R_{\mu\nu} = -8\pi G S_{\mu\nu}, \quad (1.2)$$

onde  $R_{\mu\nu}$  é o tensor de *Ricci* e  $S_{\mu\nu}$  é termo de fonte.

Através da métrica, podemos calcular o tensor de *Ricci* da seguinte forma: Com o auxílio de (1.1) calcula-se a conexão *de Levi-Civita*, em seguida determina-se o tensor de *Riemann*, e finalmente através de uma contração deste tensor chegamos ao tensor de *Ricci*. Os resultados são:

$$R_{tt} = \frac{3\ddot{a}}{a}, \quad (1.3)$$

$$R_{ti} = 0, \quad (1.4)$$

$$R_{ij} = (a\ddot{a} + 2\dot{a}^2 + 2k)\tilde{g}_{ij}, \quad (1.5)$$

sendo  $\tilde{g}_{ij}$  as componentes da métrica divididas por  $a^2(t)$  e  $i, j = 1, 2$  ou  $3$  (apenas a parte espacial). Estas 3 equações estão relacionadas com a geometria do universo.

---

\*Consideramos  $c=1$ .

Precisamos também determinar o conteúdo do universo descrito pelo tensor de energia momento da forma de um fluido perfeito:

$$T_{\mu\nu} = -pg_{\mu\nu} + (p + \rho)U_\mu U_\nu, \quad (1.6)$$

sendo  $p(t)$  e  $\rho(t)$  a pressão e a densidade respectivamente. Na média o conteúdo do universo está em repouso em relação às coordenadas espaciais comóveis, logo temos as seguintes equações para a quadri-velocidade:

$$U^t = 1 \quad U^i = 0. \quad (1.7)$$

O termo de fonte na equação de Einstein é da forma:

$$S_{\mu\nu} = T_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}T^\lambda{}_\lambda - \frac{\Lambda}{8\pi G}g_{\mu\nu}. \quad (1.8)$$

sendo  $\Lambda$  a constante cosmológica. Com o auxílio de (1.1), (1.6) e (1.7) podemos calcular (1.8):

$$S_{tt} = \frac{1}{2}(\rho + 3p - \frac{2\Lambda}{8\pi G}), \quad (1.9)$$

$$S_{ti} = 0, \quad (1.10)$$

$$S_{ij} = -\frac{1}{2}(\rho - p + \frac{2\Lambda}{8\pi G})g_{ij}. \quad (1.11)$$

Finalmente, podemos escrever as equações de Einstein, dadas em (1.2), utilizando (1.3), (1.5), (1.9) e (1.11). A equação da componente temporal resulta em

$$3\ddot{a} = -4\pi G(\rho + 3p - \frac{2\Lambda}{8\pi G})a, \quad (1.12)$$

e a equação das componentes espaciais resulta em

$$a\ddot{a} + 2\dot{R}^2 + 2k = +4\pi G(\rho - p + \frac{2\Lambda}{8\pi G})a^2. \quad (1.13)$$

Eliminado  $\ddot{a}$  das equações (1.12) e (1.13), obtemos a forma final das 2 equações diferenciais que, juntamente com a equação de estado, regem a dinâmica do universo:

$$\dot{a}^2 = \left[ 2 \left( \frac{4\pi G}{3} \right) \rho + \frac{\Lambda}{3} \right] a^2 - k, \quad (1.14)$$

$$\ddot{a} = \left[ \frac{\Lambda}{3} - \frac{4\pi G}{3} (\rho + 3p) \right] a. \quad (1.15)$$

Combinando as equações (1.14) e (1.15), ou utilizando a equação de conservação do tensor energia momento  $\nabla_\mu T^{\mu\nu} = 0$ , podemos obter uma terceira relação dada por:

$$\frac{d}{dR}(\rho a^3) = -3pa^2. \quad (1.16)$$

A equação (1.16), juntamente com uma equação de estado do tipo  $p = p(\rho)$ , nos permite relacionar a densidade de energia com o fator de escala.

Vamos agora analisar algumas propriedades físicas do modelo padrão no caso em que a constante cosmológica é igual a zero ( $\Lambda = 0$ ), utilizando apenas as equações (1.14), (1.15) e (1.16) .

$$\dot{a}^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho a^2 - k, \quad (1.17)$$

$$\ddot{a} = -\frac{4\pi G}{3} (\rho + 3p) a. \quad (1.18)$$

Como se sabe, o parâmetro de escala  $a(t)$  é definido positivo, pois ele mede o tamanho espacial do universo. O fator  $\frac{\dot{a}(t)}{a(t)}$ , que representa a velocidade de expansão relativa, também é positivo, pois as observações indicam um red-shift e não um blue-shift. Porém, a quantidade  $\frac{\ddot{a}(t)}{a(t)}$ , que representa a aceleração relativa, será negativa sempre que a quantidade  $\rho + 3p$  for positiva. Com estas 3 informações sabemos que a curva de  $a(t)$  versus  $t$  é crescente com concavidade para baixo, o que significa que a atração gravitacional representada pela pressão e pela densidade de energia tende a diminuir a velocidade de expansão do universo. Mas será que esta atração gravitacional é forte o suficiente para parar a expansão do universo? Para respondermos esta questão vamos começar analisando a equação (1.16). É fácil de verificar através desta equação que, para uma pressão positiva, a densidade de energia  $\rho$  deve

decrecer mais rápido do que  $a^{-3}$ . Logo, se tomarmos  $a \rightarrow \infty$ , na equação (1.17) temos o primeiro termo do lado direito indo a zero, portanto:

$$\dot{a}^2 = -k. \quad (1.19)$$

Para  $k = -1$ , a velocidade de expansão será sempre positiva, ou seja o universo se expandirá para sempre (universo aberto). Para  $k = 0$ , a velocidade de expansão chegará a zero com  $t \rightarrow \infty$ , ou seja o universo tenderá a parar em um tempo infinito (universo plano). E finalmente, para  $k = 1$  a expansão do universo irá parar em um tempo finito (ver equação 1.17) e provavelmente neste caso o universo voltará para a situação inicial onde  $a = 0$  (universo fechado).

Vamos agora relacionar o parâmetro de curvatura  $k$  com os valores de hoje em dia da pressão ( $p_0$ ) e da densidade de energia ( $\rho_0$ ). Invertendo a equação (1.17) podemos escrever,

$$\rho_0 = \frac{3}{8\pi G} \left( \frac{k}{a_0^2} + H_0^2 \right), \quad (1.20)$$

sendo  $a_0$  o valor de hoje em dia para o fator de escala e  $H_0$  a constante de Hubble ( $H_0 \equiv \frac{\dot{a}(t_0)}{a(t_0)}$ ). Substituindo (1.20) em (1.18), podemos escrever

$$p_0 = -\frac{1}{8\pi G} \left[ \frac{k}{a_0^2} + H_0^2(1 - 2q_0) \right], \quad (1.21)$$

onde  $q_0$  representa o parâmetro de desaceleração dado por  $q_0 \equiv -\ddot{a}(t_0) \frac{a(t_0)}{\dot{a}^2(t_0)}$ .

Existem boas razões para se acreditar que hoje em dia a densidade de energia é muito mais importante do que a pressão ( $\rho_0 \gg p_0$ ), portanto podemos desconsiderar  $p_0$  em (1.21) e relacionar os parâmetros observáveis  $H_0$  e  $q_0$  com a curvatura  $k$ :

$$\frac{k}{a_0^2} = H_0^2(2q_0 - 1). \quad (1.22)$$

Vemos, de (1.22), que o valor de  $q_0$  determina a curvatura espacial  $k$ . Substituindo (1.22) em (1.20) obteremos

$$\Omega_{b0} = \frac{\rho_0}{\rho_c} = 2q_0, \quad (1.23)$$

sendo  $\rho_c \equiv \frac{3H_0^2}{8\pi G}$ . Finalmente, analisando as equação (1.22) e (1.23), podemos ver que a medida da densidade de energia do universo de hoje pode determinar os possíveis

destinos para o universo, quais sejam: *aberto* se  $\rho_0 < \rho_c$ ; *fechado* se  $\rho_0 > \rho_c$ ; *plano* se  $\rho_0 = \rho_c$ .

Medidas observacionais indicam os seguintes valores para a constante de Hubble e o parâmetro  $\Omega_{b0}$  [3]:

$$H_0 = 100h \frac{km}{Mpc.seg} \quad 0,0052 \leq \Omega_{b0}h^2 \leq 0,026, \quad (1.24)$$

onde  $h$  representa a incerteza na medida da constante de Hubble.

Vamos voltar agora à primeira equação de Friedmann com constante cosmológica (equação 1.14), e reescrevê-la em termos do fator  $H(t) = \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}$  e das densidades relativas  $\Omega_b = \frac{\rho}{\rho_c}$ ,  $\Omega_\Lambda = \frac{\Lambda}{3H_0^2}$  e  $\Omega_k(t) = -\frac{k}{a^2(t)H_0^2}$ . Dividindo-a por  $a^2(t)$  e por  $H_0$ , temos:

$$\frac{H^2}{H_0^2} = \frac{\rho}{\rho_c} - \frac{k}{a^2(t)H_0^2} + \frac{\Lambda}{3H_0^2} = \Omega_b + \Omega_k(t) + \Omega_\Lambda. \quad (1.25)$$

Sendo que esta última equação está sujeita ao seguinte vínculo  $\Omega_{b0} + \Omega_{k0}(t) + \Omega_\Lambda = 1$  (o índice zero representa valores atuais).

A segunda equação de Friedmann (equação 1.15) pode ser combinada com a primeira a fim de escrevermos uma equação que contenha a derivada temporal do fator  $H(t) = \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}$ . Segue:

$$\dot{H} = \frac{\ddot{a}}{a} - H^2 = -4\pi G(\rho + p) + \frac{k}{a^2}. \quad (1.26)$$

Por fim, eliminando a densidade de energia em (1.26) com o auxílio de (1.25) e escolhendo como unidade de tempo  $H_0^{-1}$ , temos:

$$H^2 = \frac{\rho}{\rho_c} - \frac{k}{a^2(t)} + \frac{\Lambda}{3}. \quad (1.27)$$

$$\dot{H} = -\frac{3}{2}H^2 - \frac{3p}{2\rho_c} - \frac{k}{2a^2} + \frac{\Lambda}{2}. \quad (1.28)$$

As equações (1.27) e (1.28) são as equações de Friedmann de forma simplificada com unidades convenientes. Nas próximas seções, apenas para termos uma idéia qualitativa, vamos utilizar estas 2 equações para estudar os modelos dominados pela matéria, pela radiação e pela inflação. Nos três casos faremos a simplificação  $\Lambda = k = 0$ .

### 1.3 Modelo dominado pela matéria

Neste modelo a matéria constituída de bárions não relativísticos ( $kT \ll 1\text{GeV}$ ) prevalece sobre os fótons, ou seja, a energia em forma de matéria é muito mais importante do que a energia em forma de radiação. Até pouco tempo atrás acreditava-se que este modelo descrevia o universo dos dias de hoje\*.

Supondo a pressão de matéria dada pela expressão de um gás ideal não relativístico  $p_b = n_b kT_b$  nas equações de Friedmann<sup>†</sup> (1.26), temos uma combinação da pressão com a densidade da forma

$$\rho_b + p_b/c^2 = n_b[m + kT_b/c^2] = \frac{n_b}{c^2}[mc^2 + kT_b]. \quad (1.29)$$

Pela equação (1.29) e supondo  $kT \ll 1\text{GeV}$  é fácil de perceber que a pressão de bárions é desprezível se comparado com a densidade de massa. Portanto para o caso de referência ( $\Lambda = k = 0$ ) as equações de Friedmann (1.27) e (1.28) resultam em:

$$\dot{H} = -\frac{3}{2}H^2 = -\frac{3\rho_b}{2\rho_c}. \quad (1.30)$$

Utilizando a condição inicial  $H(t = 0) = \infty$ , temos que a solução de (1.30) resulta em:

$$H(t) = \frac{2}{3t}, \quad (1.31)$$

ou em termos do fator de escala:

$$\frac{da}{a} = \frac{2}{3} \cdot \frac{dt}{t} \Rightarrow \frac{a(t)}{a_0} = \left(\frac{t}{t_0}\right)^{2/3}. \quad (1.32)$$

Podemos reescrever (1.32) utilizando definição de red-shift ( $1 + z = \frac{a(t_0)}{a(t)}$ ) e a equação (1.31):

$$1 + z = \left(\frac{t_0}{t}\right)^{2/3} = \left(\frac{2}{3H_0 t}\right)^{2/3}. \quad (1.33)$$

---

\*Antes de medidas de distâncias de supernovas indicarem que a expansão do universo está acelerando.

<sup>†</sup>Restauramos a velocidade da luz para comparação entre a energia de repouso e a energia cinética.

Substituindo  $t$  de (1.33) em (1.31), segue

$$\frac{H^2}{H_0^2} = (1+z)^3, \quad (1.34)$$

sendo que esta última expressão relaciona a função de Hubble com o red-shift. Finalmente, com o auxílio de (1.30) temos:

$$\frac{\rho_b}{\rho_c} = \frac{H^2}{H_0^2} \Omega_{b0} = (1+z)^3 \Omega_{b0}. \quad (1.35)$$

Da equação (1.35) podemos obter o valor numérico para a densidade de massa dos bárions,

$$\rho_b = 1,878 \times 10^{-26} \Omega_{b0} h^2 (1+z)^3 \text{kg/m}^3, \quad (1.36)$$

e dividindo (1.36) pela massa do próton, obtemos a densidade numérica de bárions:

$$n_b = 11 \Omega_{b0} h^2 (1+z)^3 \text{m}^{-3}. \quad (1.37)$$

É interessante, também, para fins ilustrativos, calcular a pressão de radiação  $p_b$ , desprezada inicialmente. Para isso basta substituímos (1.37) na equação de estado de um gás ideal. Adimensionalmente temos:

$$\frac{p_b}{c^2 \rho_c} = 9,2 \cdot 10^{-14} T_b (1+z)^3 h^2 \Omega_{b0}. \quad (1.38)$$

## 1.4 Modelo dominado pela radiação

O modelo dominado pela radiação ocorre quando a contribuição da energia em forma de radiação é muito maior do que a energia em forma de matéria. Neste caso, os bárions são desprezados, levando-se em conta apenas os fótons. Espera-se que no passado, antes da era dominada pela matéria, este modelo descreva o universo.

Segundo o red-shift gravitacional, a energia de um fóton aumenta linearmente com  $z$ . Mais precisamente  $\epsilon = \epsilon_0(1+z)$ . Como a energia deste fóton é proporcional a  $kT$ , temos:

$$T_\gamma = T_{\gamma 0}(1+z). \quad (1.39)$$

Sabendo que a temperatura de hoje é da ordem de  $T_{\gamma 0} = 2,7 \text{ }^\circ K$ , podemos calcular por exemplo qual é o red-shift na época da recombinação\*, sabendo que nesta época a temperatura era da ordem de  $T_\gamma = T_b \approx 3000K$ , o que corresponde a um red-shift de  $z \approx 1,1 \times 10^3$ .

Por outro lado, a densidade de energia de radiação de um corpo negro é dada por:

$$\rho_\gamma = aT_\gamma^4, \quad (1.40)$$

sendo  $a$  a constante de corpo negro<sup>†</sup>.

Dividindo (1.40) pela densidade crítica  $\rho_c$  temos:

$$\frac{\rho_\gamma}{\rho_c} = 2,1 \times 10^{-7} T_\gamma^4 h^{-2}. \quad (1.41)$$

E substituindo (1.39) em (1.41) segue:

$$\frac{\rho_\gamma}{\rho_c} = N(1+z)^4 \quad \text{com} \quad N = 1,1 \cdot 10^{-5} h^{-2}. \quad (1.42)$$

A equação de estado para um gás de fótons é dada por  $p_\gamma = \frac{\rho_\gamma}{3}$ , logo para o caso de referência ( $\Lambda = k = 0$ ) as equações de Friedmann (1.27) e (1.28) resultam em:

$$\dot{H} = -2H^2 = -2\frac{\rho_\gamma}{\rho_c} \Rightarrow H^2 = N(1+z)^4. \quad (1.43)$$

Para uma condição de contorno do tipo  $H(t=0) = \infty$ , a solução de (1.43) implica em

$$H(t) = \frac{1}{2t}, \quad (1.44)$$

ou, em termos do fator de escala,

$$\frac{da}{a} = \frac{dt}{2t} \Rightarrow a(t) = a_0 \sqrt[2]{\frac{t}{t_0}}. \quad (1.45)$$

Antes da recombinação, existia o equilíbrio térmico entre a matéria e a radiação, pois com os elétrons livres, o livre caminho médio dos fótons era muito pequeno.

\*Recombinação - Prótons e elétrons se ligam formando um átomo neutro.

†Estamos considerando novamente  $c=1$ .



Portanto como o universo, antes da recombinação, tem uma única temperatura, com o auxílio de (1.39), podemos medir esta temperatura em red-shift. Isto implica, também, em  $z$  ser um ótimo parâmetro de tempo.

Utilizando a equação de estado e a equação (1.42) podemos determinar a pressão de radiação adimensionalmente:

$$\frac{p_\gamma}{c^2 \rho_c} = \frac{N}{3}(1+z)^4. \quad (1.46)$$

Vamos agora comparar os valores de densidade de “energia” e de pressão entre as eras da matéria e da radiação. Dividindo (1.42) por (1.36) temos,

$$\frac{\rho_\gamma}{\rho_b} = 2,31 \cdot 10^{-5} (1+z) \Omega_{b0}^{-1}, \quad (1.47)$$

e dividindo (1.46) por (1.38) segue:

$$\frac{p_\gamma}{p_b} \approx \frac{(1+z)10^{10}}{T}, \quad (1.48)$$

sendo que esta última equação vale apenas no caso em que a pressão de matéria é dada por um gás ideal.

É importante ressaltar que as equações (1.47) e (1.48) não correspondem à realidade, visto que elas comparam um universo composto só de matéria com um universo composto só de radiação, porém nos casos onde  $\rho_\gamma \ll \rho_b$  e  $\rho_\gamma \gg \rho_b$  a equação (1.47) é uma excelente aproximação. Através de (1.47), podemos inferir em ordem de grandeza, o ponto em que a densidade de “energia” de radiação ultrapassa a densidade de “energia” de matéria, fazendo simplesmente  $\rho_\gamma \simeq \rho_b$ . Este ponto ocorre para  $z \simeq 4 \cdot 10^4 \Omega_{b0}$ .

Para  $z > 10^5$ , o modelo dominado pela radiação descreve com boa aproximação a evolução do universo<sup>‡</sup>.

Por último, vamos definir uma variável temperatura como

$$\tau = \frac{kT_\gamma}{mc^2} = 2,5 \times 10^{-13} (1+z), \quad (1.49)$$

e escrever a densidade numérica de fótons ( $n_\gamma$ ) e de bárions ( $n_b$ ) da seguinte forma:

$$n_\gamma = 0,24 \left( \frac{\tau}{\lambda_c} \right)^3, \quad (1.50)$$

---

<sup>‡</sup>Salvo um curto período inflacionário inicial.

e

$$n_b = 6,3 \times 10^{-9} \Omega_{b0} h^2 \left( \frac{\tau}{\lambda_c} \right)^3, \quad (1.51)$$

onde o comprimento de onda Compton para o próton é  $\lambda_c = \frac{\hbar c}{mc^2} = 2,08 \times 10^{-14} \text{ cm}$ .

## 1.5 Modelo Inflacionário

Diferente dos modelos dominados pela matéria e pela radiação, a equação de estado do modelo inflacionário não possui uma origem física. Na verdade, até hoje ninguém conseguiu explicar a origem de uma equação de estado do tipo necessário,

$$p = -\rho. \quad (1.52)$$

Porém, acredita-se que o universo primordial experimentou um curto período inflacionário. Esta crença está baseada, entre outras coisas, na resolução dos problemas de planura e horizonte.

(i) *Problema de planura - Por que a densidade inicial de energia do universo era muito próxima da densidade crítica?*

(ii) *Problema de horizonte - O universo como um todo, no início, deveria estar em contato causal para podermos ter equilíbrio térmico, como o observado na radiação cósmica de fundo.*

Suponha então que, em um determinado período, a equação de estado do universo seja dada por (1.52). As equações de Friedmann (1.27) e (1.28), com  $\Lambda = k = 0$ , assumem a seguinte forma:

$$H^2 = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad (1.53)$$

$$\dot{H} = -\frac{3}{2}H^2 + \frac{3\rho}{2\rho_c}. \quad (1.54)$$

Combinado (1.53) com (1.52), segue:

$$\dot{H} = 0 \quad \Rightarrow \quad H(t) = C, \quad (1.55)$$

sendo  $C$  uma constante arbitrária.

Resolvendo (1.55), em termos de fator de escala  $a(t)$  temos:

$$\frac{1}{a} \frac{da}{dt} = C \quad \Rightarrow \quad a(t) = a_0 e^{Ct} \quad (1.56)$$

onde  $a_0$  é outra constante arbitrária.

Segundo (1.56), vemos que uma equação de estado do tipo  $p = -\rho$ , gera uma expansão exponencial para o universo. O fato mais importante desta solução é que, diferentemente dos outros 2 modelos, o universo sofre uma expansão acelerada, i.e  $\ddot{a}(t) > 0$ . É importante lembrar que se tivermos uma expansão acelerada por um determinado período resolveremos os problemas de planura e horizonte.

Uma inspeção um pouco mais detalhada nas equações de Friedmann nos revela que qualquer equação de estado do tipo

$$p = (\gamma - 1)\rho, \quad (1.57)$$

sendo

$$0 \leq \gamma \leq \frac{2}{3}, \quad (1.58)$$

nos leva a uma expansão acelerada do fator de escala.

Logo, uma equação de estado (1.57), que satisfaça a condição (1.58), nos define um modelo de inflação generalizado.

Observe que (1.57), também conhecida como equação barotrópica, é bastante geral e pode englobar vários modelos de universo.

$\gamma = 1$	Modelo dominado pela matéria.
$\gamma = 4/3$	Modelo dominado pela radiação.
$\gamma = 0$	Modelo inflacionário.
$0 \leq \gamma \leq \frac{2}{3}$	Modelo inflacionário generalizado.

Tabela 1.1 - Respectivos valores de  $\gamma$  para cada modelo de universo.

Uma análise interessante a ser feita com respeito a equação barotrópica é o que acontece com o universo quando  $\gamma < 0$ . Utilizando a equação (1.16) temos:

$$\frac{d}{da}(\rho a^3) = -3p a^2 \quad \Rightarrow \quad a^3 \frac{d\rho}{da} = -3a^2(\rho + p). \quad (1.59)$$

Observe que para  $\gamma < 0$  temos  $\rho + p < 0$ , portanto

$$a^3 \frac{d\rho}{da} > 0. \quad (1.60)$$

Como  $a^3 > 0$ , a equação (1.60) nos diz que um aumento no tamanho espacial do universo acarreta em um acréscimo na densidade de energia total  $\rho$ . Isto é claramente um absurdo, pois o universo é um sistema fechado e por definição sem fronteiras. Portanto, se quisermos usar a equação barotrópica para descrever a evolução do universo, deve-se respeitar a condição  $\gamma \geq 0$ .

## 1.6 Solução geral das equações de Friedmann

Em um universo termalizado ( $z > 10^3$ ) temos uma única temperatura, o que nos permite resolver as equações de Friedmann analiticamente. Usando como variável de tempo o red-shift, temos as seguintes relações:

$$z(t) = \frac{a_0}{a(t)} - 1 \implies \frac{dz}{dt} = -\frac{a_0}{a^2(t)} \dot{a}(t) = -(z+1)H(t). \quad (1.61)$$

Vamos definir também uma função  $f(z)$  como:

$$f(z) = \frac{H^2(z)}{H_0^2}, \quad (1.62)$$

sendo  $f(0) = 1$ .

Se observarmos as equações de Friedmann (1.27) e (1.28), vemos que a segunda equação é que rege a dinâmica de expansão, sendo a primeira utilizada apenas para termos um vínculo entre a função de Hubble e a densidade de energia. Para resolvermos (1.28) de forma analítica, precisamos saber como  $\dot{H}(t)$  se expressa em termos da função  $f(z)$ :

$$\frac{df(z)}{dz} = 2 \frac{H(z)}{H_0^2} \frac{dH}{dz} \implies (1+z) \frac{df(z)}{dz} = -\frac{2}{H_0^2} \frac{dH}{dz} \frac{dz}{dt} = -2\dot{H}(t), \quad (1.63)$$

onde na última passagem utilizou-se a unidade  $H_0^{-1} = 1$ .

Usando as equações (1.61), (1.62), e (1.63) em (1.28) temos:

$$(1+z) \frac{df}{dz} = 3f + 3\frac{p}{\rho_c} + \frac{k}{a_0^2}(1+z) - \Lambda. \quad (1.64)$$

Como foi visto na seção anterior, a única contribuição da pressão vem da radiação, logo utilizando (1.46), em unidades com  $c = 1$  segue:

$$(1+z) \frac{df}{dz} = 3f + N(1+z)^4 + \frac{k}{a_0^2}(1+z) - \Lambda. \quad (1.65)$$

Fazendo a mudança de variável  $x = z+1$ , temos  $f(x=1) = 1$  e a equação (1.65) muda para:

$$x \frac{df}{dx} = 3f + Nx^4 + \frac{k}{a_0^2}x - \Lambda. \quad (1.66)$$

Esta equação é facilmente resolvida pelo método de Frobenius e sua solução é

$$f(x) = Nx^4 - \frac{k}{a_0^2}x^2 + \frac{\Lambda}{3} + x^3 \left( 1 + \frac{k}{a_0^2} - \frac{\Lambda}{3} - N \right), \quad (1.67)$$

ou em termos da função de Hubble  $H(z)$

$$H^2(z) = N(1+z)^4 - \frac{k}{a_0^2}(1+z)^2 + \frac{\Lambda}{3} + (1+z)^3 \left( 1 + \frac{k}{a_0^2} - \frac{\Lambda}{3} - N \right). \quad (1.68)$$

É interessante notar que no caso de referência ( $\Lambda = k = 0$ ), a equação (1.68) se reduz a:

$$H^2(z) = N(1+z)^4 + (1-N)(1+z)^3. \quad (1.69)$$

O primeiro termo de (1.69) representa o domínio da radiação [como na equação (1.43)] e o segundo termo representa o domínio da matéria [como em (1.34)].

Uma expressão para o fator de expansão em função do tempo pode ser obtida através de (1.68) e (1.61),

$$H(t) = a \frac{da}{dt} = \sqrt{Na_0^4 - ka^2 + \frac{\Lambda a^4}{3} + a_0^3 \left( 1 + \frac{k}{a_0^2} - \frac{\Lambda}{3} - N \right)} a \quad (1.70)$$

cuja solução é dada por:

$$t - t_0 = \int_{a(t_0)}^{a(t)} \frac{xdx}{\sqrt{Na_0^4 - kx^2 + \frac{\Lambda x^4}{3} + a_0^3 \left( 1 + \frac{k}{a_0^2} - \frac{\Lambda}{3} - N \right)} x}. \quad (1.71)$$

## 1.7 História térmica do universo

Nesta última parte do primeiro capítulo, vamos descrever qualitativamente as várias épocas e os seus principais eventos, baseado na referência [4]. Um resumo desta história é apresentado na tabela 1.1.

-  $kT > 100\text{GeV}$  :

Nesta época, estamos em um regime de temperaturas e densidades muito altas. Neste regime, as ferramentas utilizadas para os cálculos são meras extrapolações especulativas da física que nós entendemos, porém assumimos que as técnicas e os princípios gerais ainda podem ser aplicados. É neste período que a inflação cosmológica, baseado em um campo escalar chamado Inflaton \*, deve ocorrer.

Depois do fim da inflação, teremos possivelmente um período dominado por partículas não relativísticas (domínio da matéria) chamado de *Cold Big Bang*. Eventualmente, estas partículas decaíram em partículas relativísticas e produziram um universo dominado pela radiação. Este processo é chamado de *reaquecimento*. Neste cenário mais simples, a radiação dominará até o *turning point* ( $kT \simeq 10\text{eV}$ ).

-  $100\text{GeV} > kT > 10\text{eV}$  :

A física deste período é descrita pelo modelo padrão de partículas ou alguma extensão supersimétrica deste. O primeiro fenômeno que deve ocorrer durante esta época é a transição de fase eletrofraca, onde as interações eletromagnéticas e fraca ganharam identidades distintas. Outro fenômeno importante que deverá ocorrer neste período é a transição de fase quark-hadron por volta de  $150\text{MeV}^\dagger$ .

Para valores menores do que  $10\text{MeV}$  já estamos com uma física cosmológica, bem mais acessível e podemos prever algumas coisas com um maior grau de confiança. Em particular, por volta de  $0.1\text{MeV}$ , deve ocorrer a nucleossíntese primordial, pois cálculos sobre a nucleossíntese a essas energias, predizem corretamente a abundância dos elementos mais leves.

Por volta de  $10\text{eV}$  temos o turning point, onde a densidade de energia da matéria (não relativística) começa a ser mais importante do que a densidade de energia da radiação.

-  $kT < 10\text{eV}$  :

Logo depois do turning point, ainda próximo dos  $10\text{eV}$ , ocorre o fenômeno

---

\*Vale ressaltar que até o presente momento ninguém conseguiu obter o Inflaton baseado nas GUT's.

† Apesar de muitos acreditarem que acima de  $150\text{MeV}$  ocorrerá o desconfinamento, nem a teoria (QCD) nem a experiência conseguiram determinar a energia no qual ocorre a transição de fase.

da recombinação<sup>‡</sup>, onde elétrons e prótons se combinam para formar o átomo de hidrogênio. Com um meio eletricamente neutro ocorre o desacoplamento dos fótons, produzindo o que hoje detectamos como sendo a radiação cósmica de fundo.

Devemos ter também neste período a formação de estruturas, incluindo os grandes sistemas ligados gravitacionalmente, tais como: galáxias, aglomerados de galáxias, etc.

<b>t</b>	<b>kT</b>	<b>Eventos</b>
$10^{-42} s$	$10^{18} GeV$	Começo da Inflação?
$10^{-32\pm 6} s$	$10^{13\pm 3} GeV$	Fim da Inflação, Começo do Cold Big Bang?
$10^{-18\pm 6} s$	$10^{6\pm 3} GeV$	Começo do Hot Big Bang?
$10^{-10} s$	$100 GeV$	Transição de fase Eletrofraca?
$10^{-4} s$	$100 MeV$	Transição de fase Quark-hadron?
$10^{-2} s$	$10 MeV$	$\gamma, \nu, e, \bar{e}, n$ e $p$ todos em equilíbrio térmico.
$1 s$	$1 MeV$	desacoplamento de $\nu$ , e aniquilação de $e\bar{e}$ .
$100 s$	$0.1 MeV$	Nucleossíntese.
$10^4 anos$	$10 eV$	Turning point.
$10^4 anos$	$10 eV$	Formação dos átomos, desacoplamento dos $\gamma$ .
$\sim 10^9 anos$	$10^{-4} eV$	Formação das primeiras estruturas ligadas.
<i>Hoje</i>	$2.728/k K$	O presente

Tabela 1.2 - História térmica do universo.

---

<sup>‡</sup> $T \simeq 3000 K$

## Capítulo 2

# Sistemas Estatísticos com Interação

### 2.1 Introdução

Sistemas estatísticos com interação são muito difíceis de se resolver analiticamente devido à dificuldade de se calcular a função de partição. Para se ter uma idéia, não existe nenhuma função de partição a 3 dimensões, de partículas interagentes, que tenha sido completamente calculada. O que se faz normalmente é o desenvolvimento de um método sistemático onde as várias quantidades físicas são descritas por uma expansão em série, no qual o primeiro termo corresponde ao sistema sem interação, e os termos subsequentes provém correções das interações interpartículas.

No caso de gases reais\*, obedecendo à estatística clássica, foi desenvolvido um método de expansão, por Mayer e colaboradores (1937), que leva em conta a interação entre partículas. Este método é denominado de método de expansão em clusters. Sua generalização, para gases que obedecem às estatísticas quânticas, foi iniciado por Kahn e Uhlenbeck (1938) e aperfeiçoado por Lee e Yang (1960).

Pretendemos neste segundo capítulo, descrever o método de expansão em clusters, baseado em [5], com uma especial ênfase para o significado da equação de estado. Iremos discutir, também, como se obtém a densidades de partículas interagentes, baseada na abordagem do equilíbrio.

### 2.2 Expansão em cluster para um gás clássico

Vamos começar com um sistema físico de um gás clássico de  $N$  partículas, com apenas uma espécie monoatômica, no qual a energia potencial é dada pela soma da interação entre duas partículas. O Hamiltoniano deste sistema é dado por

---

\*Gases com interação.



$$H = \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} \right) + \sum_{i < j} u_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (2.1)$$

sendo que a segunda soma em (2.1) é feita sobre todos os  $N(N - 1)/2$  pares de partículas. Vamos supor agora que a força entre dois corpos é do tipo central, ou seja a função  $u_{ij}$  depende somente das distâncias  $r_{ij}$  entre partículas.

Uma vez dado o Hamiltoniano, podemos escrever a função de partição do sistema como:

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int \exp \left\{ -\beta \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} \right) - \beta \sum_{i < j} u_{ij} \right\} d^{3N} p d^{3N} r \quad (2.2)$$

onde  $\beta = 1/kT$  e  $h$  é a constante de Planck.

A integração nos momentos é facilmente resolvida,

$$\frac{1}{h^{3N}} \int \exp \left\{ -\beta \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} \right) \right\} d^{3N} p = \left( \frac{\sqrt{2\pi m k T}}{h} \right)^{3N} = \frac{1}{\lambda^{3N}} \quad (2.3)$$

sendo  $m$  a massa da partícula, e  $\lambda$  o seu comprimento de onda térmico.

Reescrevendo a nossa função de partição, temos

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N! \lambda^{3N}} Z_N(V, T) \quad (2.4)$$

onde  $Z_N(V, T)$  é a integral de configuração dado por:

$$Z_N(V, T) = \int \exp \left\{ -\beta \sum_{i < j} u_{ij} \right\} d^{3N} r = \int \prod_{i < j} (e^{-\beta u_{ij}}) d^{3N} r. \quad (2.5)$$

Introduziremos agora a função de duas partículas, definida como:

$$f_{ij} = e^{-\beta u_{ij}} - 1. \quad (2.6)$$

A função de duas partículas é zero na ausência de interação; na presença de interação  $f_{ij}$  é diferente de zero, porém para temperaturas suficientemente altas esta função tende a  $-1$ . Esperamos que para altas temperaturas\*, o integrando de (2.5) seja independente da posição, ou seja os termos de interação sejam desprezíveis.

---

\*Na verdade  $kT \gg u_{ij}$ .

Reescrevendo a integral de configuração (2.4) com o auxílio de (2.6), podemos expandir o integrando em potências das funções  $f_{ij}$ ,

$$Z_N(V, T) = \int \prod_{i < j} (1 + f_{ij}) d^{3N} r = \int \left[ 1 + \sum f_{ij} + \sum f_{ij} f_{kl} + \dots \right] d^{3N} r. \quad (2.7)$$

Através da noção de *l-cluster* e da consequente noção de integral de cluster, podemos calcular  $Z_N(V, T)$  e portanto obter a função de partição. Este cálculo é extremamente laborioso e cansativo, podendo ser encontrado no apêndice 1. Nossa função de partição é dada por

$$\Theta(z, V, T) = \exp \left[ \sum_{l=1}^{\infty} b_l z^l \frac{V}{\lambda^3} \right] \quad (2.8)$$

sendo  $b_l^\dagger$  as integrais de clusters e  $z = e^{\mu\beta}$  a fugacidade (Ver apêndice 1).

É importante ressaltar que a função de partição obtida é referente ao ensemble macro-canônico, e o motivo desta mudança é apresentada também no apêndice 1.

Com o auxílio de (2.8) podemos calcular a pressão e a densidade de partículas do nosso gás,

$$\frac{p}{kT} \equiv \lim_{V \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{V} \ln \Theta(z, V, T) \right) = \frac{1}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} b_l z^l \quad (2.9)$$

e

$$n = \frac{N}{V} \equiv \lim_{V \rightarrow \infty} \left( \frac{z}{V} \frac{\partial \ln \Theta(z, V, T)}{\partial z} \right) = \frac{1}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} l b_l z^l, \quad (2.10)$$

As equações (2.9) e (2.10) são as equações obtidas do formalismo de Mayer-Ursell. Na próxima seção, discutiremos sobre a equação de estado do sistema, através da eliminação da fugacidade.

### 2.3 Equação de estado - Expansão do virial

Vamos supor que podemos escrever uma equação de estado, baseados nas equações (2.9) e (2.10), através de uma série de potências da densidade, ou seja,

---

<sup>†</sup>Em princípio, estas integrais  $b_l$  se tornam independentes do volume no limite termodinâmico ( $V \rightarrow \infty$ ).

$$\frac{p}{nkT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l(T)(n\lambda^3)^{l-1}. \quad (2.11)$$

Esta expansão é denominada expansão do virial, e os coeficientes  $a_l(T)$  são chamados de coeficientes do virial.

Esta abordagem é válida somente no caso em que nosso gás possui apenas uma fase gasosa. Se nós tentarmos utilizar (2.11) para estudar fenômenos como condensação, ponto crítico e fase líquida, encontraremos sérios problemas como: validade dos limites em (2.9) e (2.10); convergência da soma em  $l$ ; dependência do volume nas integrais de clusters  $b_l$ .

Utilizando as equações (2.9), (2.10) e (2.11), vamos obter a relação dos coeficientes do virial  $a_l$  com as integrais de clusters  $b_l$ .

$$\begin{aligned} (b_1 z^1 + b_2 z^2 + b_3 z^3 + \dots) &= (b_1 z^1 + 2b_2 z^2 + 3b_3 z^3 + \dots) \times \\ &[a_1 + a_2(b_1 z^1 + 2b_2 z^2 + 3b_3 z^3 + \dots) + \\ &a_3(b_1 z^1 + 2b_2 z^2 + 3b_3 z^3 + \dots)^2 + \dots]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Vamos considerar em (2.12) apenas termos menores ou iguais a potências de  $z^3$ . Segue-se que:

$$\begin{aligned} b_1 z^1 + b_2 z^2 + b_3 z^3 &= (b_1 a_1) z^1 + (2b_2 a_1 + b_1^2 a_2) z^2 + \\ &(3b_3 a_1 + 2b_2 a_2 b_1 + 2b_1 b_2 a_2 + a_3 b_1^3) z^3. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Comparando os termos de mesma potência temos\*:

$$a_1 = b_1 = 1. \quad (2.14)$$

$$a_2 = -b_2 = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \int_0^{\infty} (e^{-u(r)/kT} - 1) r^2 dr. \quad (2.15)$$

$$a_3 = 4b_2^2 - 2b_3 = \frac{-1}{3\lambda^6} \iiint_0^{\infty} f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_{12} d^3 r_{13}. \quad (2.16)$$

---

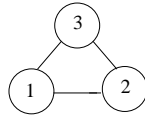
\*Obs: As expressões das integrais de cluster  $b_1$ ,  $b_2$  e  $b_3$  encontram-se no apêndice 1.

Podemos obter também o coeficiente  $a_4$  como sendo,

$$a_4 = -20b_2^3 + 18b_2b_3 - 3b_4. \quad (2.17)$$

Os coeficientes do virial são completamente determinados pelos  $b_1, b_2, \dots, b_l$ .

Da equação (2.16) vemos que o terceiro coeficiente do virial depende apenas do 3-cluster dado por:



Isto sugere que os outros  $a_l$  de ordem mais alta sejam determinados apenas por um subgrupo especial dos  $l$ -clusters<sup>†</sup>. Isto de fato é verdade, e no limite termodinâmico podemos escrever os coeficientes do virial como,

$$a_l = -\frac{l-1}{l(l-1)!\lambda^{3(l-1)}V} \times (\text{a soma de todos os } l\text{-clusters irreduzíveis}), \quad (2.18)$$

sendo que um  $l$ -cluster irreduzível é um gráfico de  $l$ -partículas multiplamente conectado, ou seja existe ao menos dois caminhos não interceptantes, inteiramente diversos, ligando quaisquer 2 partículas neste gráfico.

Esta propriedade dos coeficientes  $a_l$  é muito importante para começarmos a discutir as diferenças entre a equação de estado (2.11) e a equação da pressão (2.9).

## 2.4 Discussão sobre o significado da pressão em um gás real

É razoável supor que em um sistema termodinâmico (como um gás em equilíbrio térmico), a pressão dependa da temperatura e da densidade das partículas, ou seja  $p(n, T)$ . Este fato pode ser entendido intuitivamente pensando-se em modelos cinéticos para a obtenção de uma equação de estado.

Vamos então analisar o significado da equação (2.11). Escrevendo-a explicitamente até terceira ordem, temos:

$$p = nkT(1 + a_2n\lambda^3 + a_3n^2\lambda^6). \quad (2.19)$$

É fácil de perceber que esta equação é a generalização da equação de estado de um gás ideal, apresentando 2 termos de correção. O primeiro termo de correção

---

<sup>†</sup>Veja o apêndice 1 para um melhor entendimento do significado de um  $l$ -cluster.

$a_2 k T n^2 \lambda^3$  representa a contribuição de interação 2 a 2 das partículas, enquanto que o segundo termo de correção  $a_3 k T n^3 \lambda^6$  representa interações 3 a 3. É interessante notar que o segundo termo de correção representa o caso em que todas as três partículas são influenciadas pelas outras duas. Se considerarmos que o potencial entre as partículas é de curto alcance e que a densidade não é muito alta, é razoável supor que o segundo termo de correção seja bem menor que o primeiro, pois a probabilidade de termos 3 partículas interagindo mutuamente é bem menor do que termos apenas 2.

Devido à propriedade dos coeficientes do virial dependerem somente dos clusters irreduzíveis (equação (2.18)), esta análise feita apenas para os dois primeiros termos de correção pode ser estendida para a soma completa dos coeficientes  $a_l$ . Ou seja, podemos dizer que para potenciais de curto alcance e densidades relativamente baixas, a equação de estado para gases reais (2.11) deve convergir. Em alguns casos teremos uma equação de estado realista considerando apenas os primeiros termos de (2.11).

É importante ressaltar que a convergência da equação (2.9) é muito mais difícil de ser analisada, pois os termos  $b_l$  dependem de todos os  $b_k$  onde  $k < l$ .

### 2.4.1 O Stress interno para gases reais

Como estamos interessados em cosmologia, uma discussão importante a ser feita é qual o significado da pressão na cosmologia. Sabemos que a pressão aparece na cosmologia via o tensor energia momento.

Utilizando a referência [6], podemos escrever o tensor energia momento de um fluido perfeito quadridimensional, e analisar o significado de cada uma das suas componentes.

**Comentário** *É importante salientar a diferença entre um gás perfeito ou ideal e um fluido perfeito. Um gás perfeito é um gás onde a energia referente à interação entre seus constituintes é desprezível em comparação com a energia cinética destes mesmos constituintes. Porém um fluido perfeito é definido como sendo um fluido que em cada ponto tem uma velocidade  $\vec{v}$ , na qual um observador que está com essa velocidade, vê o fluido de forma isotrópica\*. Isto ocorre quando o caminho livre médio entre colisões é pequeno comparado com a escala de comprimento usada pelo observador.*

---

\*Note que esta definição concorda plenamente com o princípio cosmológico: o universo é isotrópico visto de um referencial comóvel.

O fluxo de quantidade de movimento através do elemento de superfície de um corpo é a força que atua sobre este elemento, ou seja, é a pressão.

Em um referencial onde o fluido está parado temos:

$$T_{ik} = p\delta_{ik} \quad \text{e} \quad T_{00} = \rho. \quad (2.20)$$

sendo  $p$  a pressão interna e isotrópica e  $\rho$  a densidade de energia.

Passando para um referencial qualquer podemos escrever (2.20) como

$$T_{\mu\nu} = (p + \rho)U_\mu U_\nu - p\eta_{\mu\nu}. \quad (2.21)$$

As várias componentes da equação (2.21), podem ser interpretadas da seguinte forma:

$T_{00} = \frac{\rho+p(v/c)^2}{\sqrt{1-(\frac{v}{c})^2}}$	densidade de energia.
$T_{0j} = \frac{v_j}{c} \frac{\rho+p}{(1-(\frac{v}{c})^2)}$	fluxo de densidade de energia.
$T_{i0} = \frac{v_i}{c} \frac{\rho+p}{(1-(\frac{v}{c})^2)}$	densidade de momento, $i$ -ésima componente.
$T_{ij} = p\delta_{ij} + \frac{v_i v_j}{c^2} \frac{\rho+p}{(1-(\frac{v}{c})^2)}$	tensor de stress relativístico em 3 dimensões.

Tabela 2.1 - Significado das componentes do tensor energia momento de um fluido perfeito.

Vale observar que o tensor de stress em 3 dimensões representa o fluxo da quantidade de momento através de uma superfície perpendicular ao vetor relacionado com a  $i$ -ésima componente. Este tensor se reduz ao tensor de stress  $\Pi_{ij}$  quando tomado o limite não relativístico [6].

Analisando a tabela 2.1 juntamente com a parte espacial da equação (2.20) percebemos que a pressão  $p$  está diretamente relacionada com o tensor de stress.

Um outro fato relevante a ser apontado é a diferença entre a definição da pressão superficial e da pressão interna de um sistema.

Baseado em [7], vamos entender então a diferença entre pressão superficial e pressão interna, e como o stress se relaciona com estas definições de pressão.

Definimos pressão superficial, considerando que  $pdSdn$  é a média do trabalho realizado por um campo de fronteira em um ensemble, quando o elemento  $dS$  da fronteira se move uma distância  $dn$  normal a ela própria.

O parágrafo acima se refere apenas a fronteira de um ensemble, ou seja a relação entre este ensemble e o mundo exterior. Trataremos a seguir do conceito de pressão interna ao ensemble.

A média do stress por unidade de área que cruza qualquer superfície imaginária dentro do ensemble é definida como sendo a força resultante por unidade de área exercida pelos sistemas do lado A sobre o lado B, em conjunto com a transferência de momento por unidade de área por segundo de A para B de sistemas que cruzam a superfície de A para B e de B para A. O stress exercido pelo lado A sobre o lado B é necessariamente igual e oposto ao stress exercido de B para A desde que as forças obedeam à terceira lei de Newton.

O stress é definido, em geral, como um tensor simétrico de segunda ordem, com seis componentes independentes:  $p_{xx}, p_{yy}, p_{zz}, p_{xy}, p_{xz}, p_{yz}$ . Para qualquer gás (ou fluído) em equilíbrio<sup>†</sup> ele se reduz necessariamente a simples forma  $p_{xx} = p_{yy} = p_{zz}$ ,  $p_{xy} = p_{xz} = p_{yz} = 0$ . Este stress simples e isotrópico por unidade de área, sempre normal a superfície na qual ele atua, é definido como sendo a pressão.

A verificação desta simplificação, e o cálculo explícito da pressão através de qualquer superfície interna é imediato para gases perfeitos. A força entre os sistemas é desprezível, assim por exemplo,  $p_{xx}$  é a taxa de transferência de x-momento através da unidade de superfície unitária normal ao eixo x.

Partículas com componente x de velocidade entre  $u$  e  $u + du$  carregam momento  $mu$  através da superfície, e o número de partículas cruzando uma unidade de área no tempo  $dt$  é o número de partículas em um volume  $udt$ .

Assim, pela lei de distribuição de Maxwell, o número de partículas é dado por:

$$n(u) = \frac{N}{V} udt \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{mu^2}{2kT}} du. \quad (2.22)$$

Logo a componente  $p_{xx}$  em um intervalo  $dt$  é:

$$p_{xx} = \int n(u) m u du = \frac{Nm}{V} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-\frac{mu^2}{2kT}} du = \frac{N}{V} kT. \quad (2.23)$$

valores similares são obtidos para  $p_{yy}$  e  $p_{zz}$ .

Com um cálculo similar a (2.23), é fácil de verificar que taxa de transferência de x-momento através da unidade de superfície unitária normal ao eixo y, definida como  $p_{xy}$  é identicamente nula. Analogamente temos  $p_{xz} = p_{yz} = 0$ .

Comparando (2.23) com (2.20) podemos escrever,

---

<sup>†</sup>Isto é análogo a dizer que estamos em um referencial parado.

$$p_{id} = nkT. \quad (2.24)$$

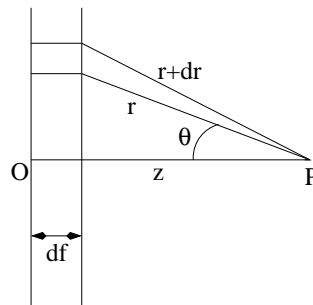
A equação (2.24) representa a pressão interna de um gás sem interação. Note que através de modelos simples de teoria cinética dos gases, obtemos a mesma equação de estado para um gás ideal [8]. Porém a pressão calculada via teoria cinética é uma pressão exercida pelas partículas sobre a superfície do recipiente. De fato, podemos afirmar que na ausência de campos externos, a pressão interna é constante em toda parte do gás, e é igual à pressão na fronteira..

Vamos supor agora que estamos tratando não mais com um gás ideal e sim com um gás de partículas interagentes. Então para o cálculo da pressão interna, além do termo de gás ideal (2.24), obtido através da transferência de momento, temos também um termo extra baseado na interação<sup>‡</sup> entre os constituintes.

Vale lembrar que, na ausência de campos externos, continua válida a afirmação de que o stress interno é necessariamente uma pressão isotrópica<sup>§</sup>, igual à pressão de fronteira.

Para o cálculo deste termo extra, nós temos que calcular a média da força por unidade de área que todas as partículas de um lado da interface geométrica exerce sobre aquelas partículas do outro lado.

Vamos considerar uma fatia de um plano infinito de espessura  $df$  e calcular a média da força  $dF_{P0}$  exercida por todas as partículas que estão dentro desta fatia, sobre uma partícula  $P$  a uma distância  $z$ .



O número médio de partículas entre  $r$  e  $r + dr$  a uma distância de  $P$  é:

$$n(r) = 2\pi r dr \frac{N}{V} df \exp[-V(r)/kT]. \quad (2.25)$$

Obs: Em (2.25) utilizamos a lei de distribuição de Boltzmann para pares de moléculas.

<sup>‡</sup>Interação apenas duas a duas.

<sup>§</sup>Esta afirmação é válida apenas no caso de potencias centrais.



A força resultante ao longo do eixo  $PO$ , exercida por um elemento da fatia, é dada por:

$$dF_{PO} = n(r) \cos \theta \left( -\frac{\partial V}{\partial r} \right) = 2\pi \frac{N}{V} z df \left( -\frac{\partial V}{\partial r} \right) \exp[-V(r)/kT] dr. \quad (2.26)$$

A força média que todos as partículas internas a esta fatia exercem sobre a partícula em  $P$  é obtida integrando  $r$  de  $z$  até infinito:

$$dF = \frac{2\pi N}{V} z df \int_z^\infty \left( -\frac{\partial V}{\partial r} \right) \exp[-V(r)/kT] dr = \frac{-2\pi N kT}{V} z df \{ \exp[-V(z)/kT] - 1 \}. \quad (2.27)$$

Obs: As componentes perpendiculares ao eixo  $PO$  se anulam.

Portanto a força média por unidade de área sobre partículas que estão dentro de uma fatia com espessura  $dz$ , no qual há  $\frac{N}{V} dz$  partículas é:

$$dp_{int} = \frac{dF}{dS} = -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} z dz df \{ \exp[-V(z)/kT] - 1 \} \quad (2.28)$$

Repassando  $z$  para  $z + f$  ¶, a distância entre 2 fatias quaisquer, e integrando sobre todo o intervalo  $[0, \infty]$ , obtemos o stress total por unidade de área, devido ao potencial  $V(r)$ .

$$\begin{aligned} p_{int} &= -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} \int_0^\infty \int_0^\infty (z + f) dz df \{ \exp[-V(z + f)/kT] - 1 \} \Rightarrow \\ p_{int} &= -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} \int_0^\infty x dx \{ \exp[-V(x)/kT] - 1 \} \int_0^x dy \Rightarrow \\ p_{int} &= -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} \int_0^\infty r^2 dr \{ \exp[-V(r)/kT] - 1 \} = a_2(T) \lambda^3 n^2 kT, \end{aligned} \quad (2.29)$$

sendo  $a_2(T)$  dado por (2.15).

Se juntarmos as equações (2.24) e (2.29) obtemos,

---

¶ A fatia de espessura  $df$  está na origem. De modo geral ela está a uma distância  $f$  da origem.

$$p = nkT + a_2(T)\lambda^3 n^2 kT = nkT(1 + a_2(T)\lambda^3 n) \quad (2.30)$$

que é exatamente a mesma equação (2.11) quando consideramos apenas correção de primeira ordem.

O fato de obtermos o mesmo resultado por dois meios completamente diferentes (formalismo de Mayer e cálculo direto do stress interno), reforça a validade da equação de estado (2.11) na descrição sistemas termodinâmicos<sup>||</sup>.

## 2.5 Exemplos de cálculos dos coeficientes do virial

Voltemos nossa atenção para dois exemplos ilustrativos de gases com interação, que possam ser descritos adequadamente por uma equação de estado do tipo (2.11), representada apenas pelos primeiros coeficientes do virial. Ou seja, estamos falando de gases pouco densos sujeitos a interações de curto alcance.

### 2.5.1 Potencial simplificado de Lennard-Jones

Um potencial semi-empírico formulado por Lennard e Jones em 1924 tem sua forma dada por

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2.31)$$

onde  $\epsilon$  e  $\sigma$  são constantes arbitrárias.

Este potencial, com as constantes adequadas, é bastante útil na descrição de forças moleculares de um gás.

A função dada por (2.31) possui um mínimo de valor  $-\epsilon$ , a uma distância  $r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma$ , sendo que para valores de  $r \ll \sigma$  temos  $V(r) \rightarrow \infty$ , e para valores de  $r \gg \sigma$  temos  $V(r) \rightarrow -0$ . A parte à esquerda do mínimo é dominada por uma interação repulsiva, que começa a ser importante quando as partículas estão muito próximas umas das outras, e a parte a direita do mínimo é dominada por uma interação atrativa que diminui conforme aumenta a distância interpartícula.

A fim de podermos obter alguns resultados qualitativos podemos propor uma simplificação do potencial de Lennard-Jones:

$$\begin{aligned} V(r) &= +\infty, \text{ se } r < r_0. \\ V(r) &= -V_0 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6, \text{ se } r \geq r_0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

---

<sup>||</sup>O sistema termodinâmico deve apresentar baixa densidade e interação de curto alcance.

Note que a parte repulsiva de (2.31) foi trocada por um *hard core*, que corresponde a considerarmos cada partícula como tendo um volume impenetrável de diâmetro igual a  $r_0$ .

Utilizando então o potencial simplificado de Lennard-Jones dado por (2.32), podemos calcular o termo  $a_2$  de (2.11) com o auxílio da equação (2.15). Segue:

$$a_2 = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^{r_0} -r^2 dr + \int_{r_0}^{\infty} \left( \exp\left(\frac{V_0}{kT} \left(\frac{r_0}{r}\right)^6\right) - 1 \right) r^2 dr \right]. \quad (2.33)$$

Supondo que a energia cinética das partículas seja muito maior do que o potencial de interação entre elas ( $V_0 \ll kT$ ), podemos aproximar a exponencial em (2.33) pelos primeiros termos de sua expansão, e reescrever a equação para o coeficiente  $a_2$  como:

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^{r_0} -r^2 dr + \int_{r_0}^{\infty} \left( 1 + \left(\frac{V_0}{kT} \left(\frac{r_0}{r}\right)^6\right) - 1 \right) r^2 dr \right] \Rightarrow \\ a_2 &= \frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^{r_0} r^2 dr - \int_{r_0}^{\infty} \frac{V_0}{kT} \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 r^2 dr \right]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Logo, calculando o valor das integrais temos:

$$a_2 = \frac{2\pi r_0^3}{3\lambda^3} \left[ 1 - \frac{V_0}{kT} \right]. \quad (2.35)$$

Substituindo (2.35) e (2.14) em (2.11) podemos escrever a equação de estado do nosso sistema com uma correção de primeira ordem em relação ao gás ideal.

$$p = nkT \left( 1 + \frac{2\pi r_0^3 n}{3} \left[ 1 - \frac{V_0}{kT} \right] \right) = nkT \left( 1 + \frac{2\pi r_0^3 n}{3} \right) - n^2 \frac{2\pi r_0^3 V_0}{3}. \quad (2.36)$$

Lembrando que  $v = (V/N) = 1/n$  denota o volume específico do sistema, e definindo\*  $4v_0 \equiv \frac{2\pi r_0^3}{3}$ , podemos reescrever (2.36) como:

$$\left( p - \frac{4v_0 V_0}{v^2} \right) = \frac{kT}{v} \left( 1 + \frac{4v_0}{v} \right) \simeq \frac{kT}{v} \left( 1 - \frac{4v_0}{v} \right)^{-1}, \quad (2.37)$$

sendo que na última passagem assumimos  $v \gg v_0$  (gás pouco denso).

---

\*Note que  $v_0$  é o volume da esfera de diâmetro  $r_0$ .

Finalmente escrevendo

$$a = 4v_0V_0 \quad \text{e} \quad b = 4v_0, \quad (2.38)$$

a equação (2.37) se identifica com a aproximação de *van der Walls* para uma equação de estado de um gás real:

$$\left(p - \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = kT. \quad (2.39)$$

Note que o parâmetro  $b$  da equação (2.39) é exatamente quatro vezes o volume molecular  $v_0$ .

Com isso, podemos concluir que a equação de van der Walls representa bem um gás suficientemente diluído, onde a interação é aproximadamente dada por (2.32), e que a energia referente a esta interação é bem menor que a energia cinética das partículas.

### 2.5.2 Potencial de esferas duras

Provavelmente, a interação mais simples à qual partículas interagentes podem estar sujeitas, é uma interação do tipo de esferas duras. Fisicamente falando, esta interação supõe que as partículas do gás possuem um volume finito impenetrável<sup>†</sup>, com um diâmetro dado por  $r_0$ . Esta interação é representada por um potencial do tipo

$$\begin{aligned} V(r) &= +\infty, & \text{se } r < r_0 \\ V(r) &= 0, & \text{se } r > r_0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Baseado então em um potencial do tipo de (2.40), calculemos os dois primeiros termos de correção do virial.

O cálculo de  $a_2$  é bastante simples e pode ser feito em uma linha:

$$a_2 = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^{r_0} -r^2 dr \right] = \frac{2\pi r_0^3}{3\lambda^3} = \frac{4v_0}{\lambda^3} \quad (2.41)$$

sendo que, como na seção anterior,  $v_0$  representa o volume da esfera de diâmetro  $r_0$ .

O cálculo de  $a_3$  é realizado com o auxílio de (2.16),

---

<sup>†</sup>Um caroço duro.

$$a_3 = \frac{-1}{3\lambda^6} \int_0^\infty f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_{12} d^3 r_{13}. \quad (2.42)$$

Para realizarmos este cálculo, devemos fixar as partículas 1 e 2 e deixar a partícula 3 assumir todas as posições possíveis no qual o integrando de (2.42) é diferente de zero. Através de (2.6) é fácil de ver que este integrando, quando diferente de zero, é igual a  $um$ .

Logo a integral a ser calculada é da forma

$$a_3 = \frac{1}{3\lambda^6} \int_0^{r_0} \left\{ \int' d^3 r_{13} \right\} d^3 r_{12}, \quad (2.43)$$

sendo a integração linha feita em todo o volume de interesse.

Como sabemos das condições  $r_{13} < r_0$  e  $r_{23} < r_0$ , o volume de integração linha é exatamente o volume da intersecção de duas esferas, com seus centros fixados nas partículas 1 e 2 respectivamente. Veja figura 2.1.

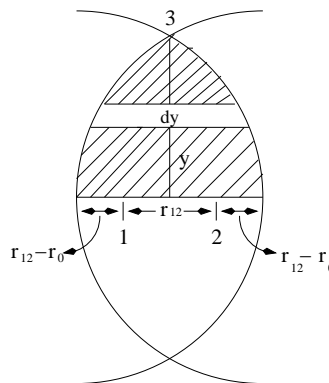


Figura 2.1: Região de integração

Observe que, se fizermos uma rotação em torno do eixo de  $r_{12}$ , da parte rachurada, obteremos o volume total que obedece às condições  $r_{13} < r_0$  e  $r_{23} < r_0$ . Logo utilizando como variável  $y$ , o volume linha a ser calculado é dado por:

$$\int' d^3 r_{13} = \int_0^{\sqrt{r_0^2 - (r_{12}/2)^2}} \left[ 2\sqrt{r_0^2 - y^2} - r_{12} \right] 2\pi y dy. \quad (2.44)$$

Note que o termo que está entre colchetes representa o comprimento da fatia de espessura  $dy$ , enquanto que o termo  $2\pi y$  representa a revolução desta fatia em torno do eixo de  $r_{12}$ . Calculando esta integral, temos:

$$\int d^3r_{13} = \frac{4\pi}{3} \left\{ r_0^3 - \frac{3r_0^2 r_{12}}{4} + \frac{r_{12}^3}{16} \right\}. \quad (2.45)$$

Substituindo (2.45) em (2.43) obtemos:

$$a_3 = \frac{1}{3\lambda^6} \int_0^{r_0} \left\{ \frac{4\pi}{3} \left\{ r_0^3 - \frac{3r_0^2 r_{12}}{4} + \frac{r_{12}^3}{16} \right\} \right\} d^3r_{12} = \frac{5\pi^2 r_0^6}{18\lambda^6} = \frac{10v_0^2}{\lambda^6}. \quad (2.46)$$

Finalmente, com o auxílio das equações (2.14), (2.41) e (2.46) podemos escrever a equação de estado do gás de esferas duras com correção até segunda ordem:

$$p = nkT(1 + 4v_0 n + 10v_0^2 n^2). \quad (2.47)$$

No capítulo 4, iremos utilizar o mesmo procedimento de cálculo do  $a_3$ , para um potencial que possuirá, além de um caroço duro, uma parte atrativa constante.

## 2.6 Cálculo de densidades na abordagem do equilíbrio

Dizemos que uma reação de um determinado processo está em equilíbrio quando o número de partículas de cada espécie permanece constante. Isto pode ser representado de forma genérica da seguinte forma:



Sabemos que no ensemble macro-canônico o número de partículas de um sistema depende de seus respectivos potenciais químicos  $\mu$ 's.

**Comentário** *O potencial químico  $\mu$  é a energia que deve ser fornecida para o sistema a fim de acrescentarmos o número de partículas em um.*

Este equilíbrio pode ser expresso matematicamente sob a forma

$$\mu_A + \mu_B = \mu_C + \mu_D. \quad (2.49)$$

A equação (2.49) nos diz que em um processo (2.48), a energia para produzir as partículas  $C$  e  $D$  a partir de  $A$  e  $B$  é a mesma para produzir  $A$  e  $B$  a partir de  $C$  e  $D$ .

Um fato importante, que deve ser levado em conta no cálculo das densidades de um determinado elemento, é a possibilidade da existência de graus de liberdade internos. Por exemplo, no caso de elétrons temos o spin como grau de liberdade interno.

Para introduzirmos este grau de liberdade extra em nosso sistema estatístico devemos alterar a função de partição macro-canônica da seguinte forma:

$$\Theta(z, V, T) = \exp \left[ g \sum_{l=1}^{\infty} b_l z^l \frac{V}{\lambda^3} \right], \quad (2.50)$$

sendo  $g$  o número de valores assumidos pelo grau de liberdade interno. Por exemplo, no caso de um elétron temos  $g = 2^*$ .

É fácil de verificar que a introdução de  $g$  na função de partição implica nas seguintes mudanças de (2.9) e (2.11):

$$\frac{p}{kT} = \frac{g}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} b_l (z)^l \quad (2.51)$$

e

$$n = \frac{g}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} l b_l (z)^l. \quad (2.52)$$

Vale lembrar que estas mudanças não alteram em nada as equações das seções 2.3 e 2.4.

Vamos desenvolver agora o cálculo das densidades para um sistema com interação.

Suponha que estamos tratando de uma interação de curto alcance, e que a fugacidade  $z$  seja razoavelmente menor que 1. Neste caso, a equação (2.52) pode ser aproximada apenas pelos primeiros termos:

$$n = \frac{g}{\lambda^3} (b_1 z + 2b_2 z^2). \quad (2.53)$$

Sabendo que  $b_1 = 1$ , podemos reescrever (2.53) como:

---

\*Referente as duas possibilidades de spin.

$$z^2 + \frac{z}{2b_2} - \frac{n\lambda^3}{2b_2g} = 0. \quad (2.54)$$

Resolvendo esta equação de segundo grau para a fugacidade, segue:

$$z = e^{\mu/kT} = \frac{1}{4b_2} \left( -1 \pm \sqrt[2]{1 + \frac{8b_2n\lambda^3}{g}} \right). \quad (2.55)$$

Note que para termos uma fugacidade  $z$  sempre positiva e para recuperarmos o caso de gás ideal, devemos utilizar apenas o sinal positivo em (2.55). Finalmente, podemos obter o potencial químico como função da densidade e da temperatura.

$$\mu = kT \ln \left[ \frac{1}{4b_2} \left( -1 + \sqrt[2]{1 + \frac{8b_2n\lambda^3}{g}} \right) \right]. \quad (2.56)$$

A equação (2.56), juntamente com a condição de equilíbrio (2.49), relaciona as densidades das partículas de uma dada reação.

Apresentaremos a seguir dois exemplos ilustrativos:

**Exemplo 1:** Seja a mistura de dois gases  $A_1 + A_2$ , que interagem fracamente através de um potencial  $V_X$ , dando outras duas partículas  $B_1 + B_2$ , que também interagem fracamente através de um potencial  $V_Y$ . Suponhamos também que nenhuma das 4 partículas possua graus de liberdade internos.

A condição de equilíbrio nos diz que,

$$\mu_{A_1} + \mu_{A_2} = \mu_{B_1} + \mu_{B_2}. \quad (2.57)$$

Para cada partícula temos uma equação do tipo (2.56), que com o auxílio de (2.57) resulta em:

$$\frac{\left( -1 + \sqrt[2]{1 + 8b_{X2}n_{A_1}\lambda_{A_1}^3} \right) \left( -1 + \sqrt[2]{1 + 8b_{X2}n_{A_2}\lambda_{A_2}^3} \right)}{\left( -1 + \sqrt[2]{1 + 8b_{Y2}n_{B_1}\lambda_{B_1}^3} \right) \left( -1 + \sqrt[2]{1 + 8b_{Y2}n_{B_2}\lambda_{B_2}^3} \right)} = \frac{b_{X2}^2}{b_{Y2}^2}. \quad (2.58)$$

Note que os  $b$ 's e os  $\lambda$ 's são conhecidos em (2.58). Portanto, ainda que complicada, obtemos uma relação entre as densidades das 4 partículas.



**Exemplo 2:** Seja um sistema onde a produção de pares  $\gamma + \gamma \leftrightarrow p + \bar{p}$  esteja em equilíbrio.

A diferença entre prótons e antiprótons reside no fato de suas cargas terem sinais opostos, portanto temos  $\lambda_p = \lambda_{\bar{p}}$  e  $g_p = g_{\bar{p}}$ . Suponha também que o potencial de interação entre os prótons seja o mesmo para os antiprótons ( $b_{2p} = b_{2\bar{p}}$ )<sup>†</sup>. Logo, podemos escrever que  $\mu_p = \mu_{\bar{p}}$ .

Utilizando a condição de equilíbrio, segue:

$$2\mu_\gamma = 2\mu_p \leftrightarrow \mu_\gamma = \mu_p. \quad (2.59)$$

Como os fótons devem fornecer energia para a produção dos nucleons, temos

$$\mu_\gamma = -m_p c^2. \quad (2.60)$$

Substituindo (2.60) e (2.56) em (2.59) podemos escrever,

$$-m_p c^2 = kT \ln \left[ \frac{1}{4b_2} \left( -1 + \sqrt{1 + \frac{8b_2 n \lambda^3}{g}} \right) \right]. \quad (2.61)$$

Finalmente, isolando a densidade na equação anterior, segue:

$$n_p = n_{\bar{p}} = \frac{g}{8b_2 \lambda^3} \left\{ \left[ 1 + 4b_2 \exp(-m_p c^2 / kT) \right]^2 - 1 \right\}. \quad (2.62)$$

Em um gás de fótons a altas temperaturas, a equação (2.62) nos fornece a densidade de nucleons interagentes. É importante observar que esta temperatura não pode ser alta demais, a ponto de tornar os nucleons relativísticos. Vale lembrar também que um dos argumentos para desprezarmos os termos superiores a  $l = 2$  em (2.52) foi a suposição de  $z \ll 1$ . Veja a tabela a seguir:

	$z^2 = e^{-2m_p c^2 / kT}$	$z^3 = e^{-3m_p c^2 / kT}$	$z^3 / z^2 = e^{-m_p c^2 / kT}$
$kT = m_p c^2 / 3$	$e^{-6} \simeq 0.0025$	$e^{-9} \simeq 0.00012$	$e^{-3} \simeq 0.05$
$kT = m_p c^2 / 2$	$e^{-4} \simeq 0.018$	$e^{-6} \simeq 0.0025$	$e^{-2} \simeq 0.14$
$kT = m_p c^2$	$e^{-2} \simeq 0.14$	$e^{-3} \simeq 0.05$	$e^{-1} \simeq 0.37$

Tabela 2.2 - Comparação entre os termos  $z^2$  e  $z^3$  para alguns valores de  $kT$ .

<sup>†</sup>Por exemplo o potencial nuclear.

Calculando, para (2.62), o limite de fraca interação  $b_2 \ll 1$ , temos:

$$n_p \simeq \frac{g}{8b_2\lambda^3} \{1 + 8b_2 \exp(-m_p c^2/kT) - 1\} = \frac{g}{\lambda^3} \exp(-m_p c^2/kT). \quad (2.63)$$

Esta última equação é bastante conhecida e pode ser encontrada nas referências [1] e [9].

Voltaremos a falar deste segundo exemplo no capítulo 4.

## Capítulo 3

### Potencial Nuclear

#### 3.1 Introdução

No capítulo anterior, desenvolvemos todo um formalismo sobre sistemas estatísticos com interação, sendo esta interação expressa por uma função potencial do tipo central. O tipo de interação em que estamos interessados é a interação nuclear forte ou simplesmente interação forte.

Esta interação tem como característica um alcance bastante curto\* e conduz a processos que ocorrem em um intervalo de tempo muito pequeno. A interação forte atua sobre todas as partículas constituídas de quarks, como prótons, nêutrons, mésons etc, que são comumente chamadas de *hádrons*.

Um fato importante que devemos salientar é a diferença entre a interação forte entre nucleons baseada na troca de mésons, e a interação forte entre quarks baseada na troca de glúons. Apesar de podermos, em um nível mais fundamental, tratar os nucleons como constituídos de quarks (com troca de glúons), muitas vezes é mais conveniente tratar esses nucleons como partículas fundamentais (com troca de mésons).

Neste capítulo, trataremos a interação forte através de potenciais nucleares fenomenológicos bastante simples. Em alguns casos poderemos identificar relações entre a interação via potencial e a interação via troca de partículas, no caso, mésons.

#### 3.2 Potencial retangular baseado no dêuteron

Com o propósito de construir um potencial nuclear bastante simplificado, desenvolveremos nesta seção [10] um modelo bastante simples para o dêuteron, utilizando para isso a mecânica quântica.

---

\*Poucos férmions.

### 3.2.1 Dados experimentais do dêuteron

Existem dois tipos diferentes de dados experimentais sobre o sistema de dois nucleons. O primeiro tipo considera as características do único sistema nuclear ligado de dois corpos, o dêuteron. As propriedades estáticas do dêuteron, tais como energia de ligação, momento angular, paridade, o tamanho etc, podem ser utilizadas para testar teorias e verificar as características do potencial nuclear. O segundo tipo de dados experimentais é baseado no estudo de espalhamento de um nucleon por outro. Na prática, isto significa que nucleons colidem com outros nucleons e são realizadas medidas de probabilidades de colisão, distribuições angulares etc.

Baseados nesses dois tipos de experimentos podemos inferir uma série de propriedades do dêuteron.

**Energia de ligação:** A energia de ligação do dêuteron é de aproximadamente  $2.23 \text{ MeVs}$ . Este número é a média de vários experimentos obtidos através de medidas de massa atômica e de reações nucleares. Existem essencialmente dois métodos diretos de medida da energia de ligação do dêuteron: um método consiste na medida da energia do raio gama liberado quando um próton e um nêutron se combinam para formar o dêuteron (captura  $n-p$ ); o outro método consiste em medir a energia da radiação gama que quebra a ligação entre o próton e o nêutron (foto-desintegração).

**Momento angular:** O momento angular do *estado fundamental* nuclear pode ser determinado por radiofrequência, métodos de microondas, etc. Segundo essas experiências o momento angular do dêuteron é  $J = 1$ .

**Paridade:** A paridade de um estado nuclear não pode ser medida diretamente. Ela pode ser determinada indiretamente por estudos de desintegração nuclear e outras reações.

**Momento de dipolo magnético:** Através de métodos de absorção de ressonância magnética, a razão entre o momento de dipolo magnético do dêuteron e o do próton tem sido medido com precisão de 5 partes em  $10^8$ . O resultado desta medida é  $\mu_d/\mu_p = 0.307012193 \pm 0.000000015$ .

**Momento de quadrupolo elétrico:** O método de feixe molecular em radiofrequência tem sido usado para determinar o momento de quadrupolo do dêuteron como  $Q = 0.00282$ .

**Raio do dêuteron:** Utilizando espalhamento de elétrons a altas energias, pode-se estudar a distribuição de carga elétrica do próton e do nêutron. Os resultados do dêuteron têm sido comparados com previsões teóricas baseadas em imagens de ondas mecânicas deste núcleo. Uma das conclusões deste estudo é que o  $rms^*$  do raio eletromagnético do dêuteron é aproximadamente  $2.1fm$ . O raio  $rms$  do próton é aproximadamente  $0.8fm$ .

### 3.2.2 Descrição teórica para o dêuteron

No centro de massa do sistema, a equação de Schrödinger de um problema de dois corpos é dado por

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi, \quad (3.1)$$

onde  $r$ , presente no operador  $\nabla$ , na função de onda e em  $V$ , representa a distância de separação entre as duas partículas;  $m$  é a massa reduzida, dada por

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (3.2)$$

$V$  é o potencial que descreve as forças agindo entre os dois corpos; e  $E$  é a energia de ligação. Para o estado fundamental do dêuteron, essa energia é

$$E = -E_B = -2.23MeVs. \quad (3.3)$$

O potencial  $V$  é uma função desconhecida. Esta função deve ser escolhida de tal forma a representar o mais fielmente possível a interação nuclear, ou seja, com nossa prescrição teórica, devemos ser capazes de explicar, o melhor possível, os dados experimentais do dêuteron.

Por simplicidade, vamos começar assumindo que este potencial é um potencial do tipo central  $V(r)$ . Quando o potencial é esfericamente simétrico, nós sabemos que a equação de Schrödinger se desacopla, ao escrevermos as soluções na forma

$$\Psi = \left(\frac{u_l}{r}\right) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.4)$$

$Y_{lm}(\theta, \phi)$  são as funções harmônico-esféricas, e  $u_l$  é a solução da equação de onda radial,

---

\*Root-mean-square.

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u_l = 0. \quad (3.5)$$

O terceiro termo entre os colchetes, em (3.5), é chamado de potencial centrífugo, em analogia com a força centrífuga clássica quando o momento angular é  $l(l+1)\hbar^2$ . Como estamos interessados no estado de mais baixa energia (estado fundamental) tomaremos  $l = 0$  (um estado tipo  $S$ ).

Na figura 3.1, apresentamos a função potencial que resulta em uma das soluções mais simples para a equação de Schrödinger radial (3.5):

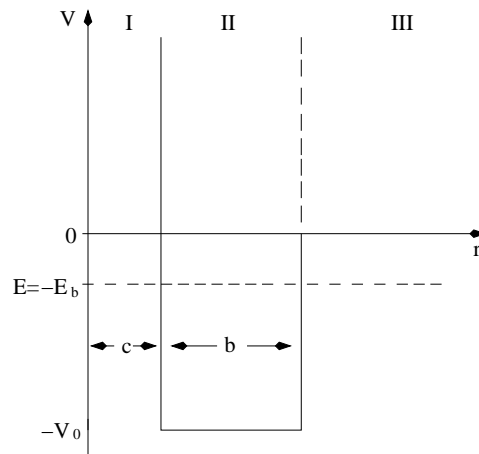


Figura 3.1: Potencial nuclear com 3 regiões distintas.

O potencial infinito para  $r < c$  faz com que as partículas não se aproximem a uma distância menor ou igual a  $c$ , uma da outra. Devido a estudos de espalhamento nêutron-próton a altas energias, acredita-se que o potencial nuclear contenha algum tipo de tal “hard core”. O poço quadrado, de largura  $b$  e profundidade  $V_0$ , é o potencial mais simples que permite a formação de estados ligados. O único argumento para supor que a parte atrativa do potencial nuclear é da forma de um poço quadrado é a simplicidade.

O que vamos fazer a seguir é resolver o problema de mecânica quântica, ajustando os parâmetros  $b$ ,  $c$  e  $V_0$  de tal forma a satisfazer alguns dos dados experimentais do dêuteron.

É fácil de perceber pela figura 3.1 que a função de onda na região I é zero, portanto basta resolvermos a equação (3.5) nas regiões II e III.

Na região II, a equação a ser resolvida é da forma:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E_B] u = 0, \quad (3.6)$$

onde  $V_0$  e  $E_B$  são números positivos. A solução desta equação que satisfaz a condição de contorno  $u(r = c) = 0$  é:

$$u_{\text{II}} = A \sin K(r - c), \quad (3.7)$$

sendo  $A$  a constante de normalização e

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_B)}}{\hbar}. \quad (3.8)$$

Na região III, a equação (3.5) é da forma:

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2mE_B}{\hbar^2}u = 0. \quad (3.9)$$

A solução de (3.9) deve satisfazer a condição  $u(r = \infty) = 0$ , logo

$$u_{\text{III}} = Be^{-qr}, \quad (3.10)$$

onde  $B$  é a constante de normalização e

$$q = \frac{\sqrt{2mE_B}}{\hbar}. \quad (3.11)$$

A função de onda completa deve incluir ainda o harmônico-esférico referente à  $l = 0$ . Porém,  $Y_{00}$  é constante igual  $\sqrt{4\pi}$ , sendo que para o cálculo de qualquer valor esperado teremos sempre  $4\pi$  referente à integração na parte angular. Ou seja, podemos tratar este problema de forma unidimensional (apenas em  $r$ ) utilizando as soluções (3.7) e (3.10).

Impondo as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada em  $r = c + b$ , podemos escrever, com o auxílio de (3.7) e (3.10),

$$AK \cos(Kb) = -qBe^{-q(c+b)} \quad (3.12)$$

e

$$A \sin(Kb) = Be^{-q(c+b)}. \quad (3.13)$$

Dividindo estas duas equações obtemos finalmente:

$$K \cot(Kb) = -q. \quad (3.14)$$

A equação (3.14) relaciona dois parâmetros  $b$  e  $V_0$  com a energia de ligação  $E_B$  do dêuteron (note que  $c$  não está presente nesta equação). Por exemplo, se escolhermos de forma arbitrária  $V_0 = 40 \text{ MeVs}$ , sabendo que  $E_B = 2.23 \text{ MeVs}$ , teremos  $b = 1.895 \text{ fm}$ .

Apenas com (3.14) não foi possível determinarmos o valor de alguma das constantes  $b$ ,  $c$  e  $V_0$ . Aliás, para determinarmos estes três parâmetros precisamos de três equações independentes, possivelmente referentes a três dados experimentais distintos.

Não vamos entrar nos detalhes do cálculo, porém com dados de espalhamento de nucleons a altas energias, podemos estimar o alcance do hard core das forças nucleares [10] como sendo

$$c = 0.4 \text{ fm}. \quad (3.15)$$

A terceira equação necessária virá do cálculo do raio quadrático médio  $\langle r_d^2 \rangle$ , e da informação que o dêuteron tem um raio de aproximadamente  $2.1 \text{ fm}$ .

Para efetuar este cálculo, devemos primeiramente normalizar a função de onda:

$$A^2 \int_c^{c+b} \text{sen}^2 K(r-c) dr + B^2 \int_{c+b}^{\infty} e^{-2qr} dr = 1. \quad (3.16)$$

Note que não temos o jacobiano  $r^2$  pois a parte radial da função de onda é dada por  $u(r)/r$ .

A primeira integral de (3.16) pode ser resolvida com uma transformação trigonométrica do tipo  $\sin^2 x = \frac{1-\cos 2x}{2}$ . Logo,

$$\begin{aligned} \frac{A^2}{2} \left[ b - \frac{\sin 2Kb}{2K} \right] + \frac{B^2}{2} e^{-2q(c+b)} &= 1 \Rightarrow \\ \frac{A^2}{2} \left[ b - \frac{\cos(Kb) \sin(Kb)}{K} \right] + \frac{B^2}{2} e^{-2q(c+b)} &= 1 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Substituindo (3.13) e (3.14) em (3.17), segue:

$$\frac{A^2}{2} \left[ b + \frac{\cos^2(Kb)}{q} + \frac{\sin^2(Kb)}{q} \right] = 1 \Rightarrow \frac{A^2}{2} \left[ b + \frac{1}{q} \right] = 1. \quad (3.18)$$



Portanto, as constantes de normalização são:

$$A^2 = \frac{2q}{1 + bq} \quad (3.19)$$

e

$$B^2 = \frac{2q \sin^2(Kb) e^{2q(c+b)}}{1 + bq}. \quad (3.20)$$

Para compararmos a predição teórica do tamanho do dêuteron com o raio  $rms$ , basta calcular a média do quadrado da distância do próton ao centro de massa  $\langle r_d^2 \rangle$ . Esta distância é metade da separação  $r$  entre o próton e o nêutron. Segue-se que:

$$\langle r_d^2 \rangle = A^2 \int_c^{c+b} \left(\frac{r}{2}\right)^2 \sin^2 K(r-c) dr + B^2 \int_{c+b}^{\infty} \left(\frac{r}{2}\right)^2 e^{-2qr} dr. \quad (3.21)$$

A resolução das integrais (3.21) se dá através de integração por partes e da utilização da identidade geométrica  $\sin^2 x = \frac{1 - \cos 2x}{2}$  na primeira integral. Portanto temos:

$$\begin{aligned} \langle r_d^2 \rangle = & \frac{B^2}{4} \left\{ \frac{(c+b)^2 e^{-2q(c+b)}}{2q} + \frac{(c+b) e^{-2q(c+b)}}{2q^2} + \frac{e^{-2q(c+b)}}{4q^3} \right\} - \\ & \frac{A^2}{8} \left[ \frac{(c+b)^2 \sin(2Kb)}{2K} + \frac{(c+b) \cos(2Kb)}{2K^2} - \frac{c}{2K^2} - \frac{\sin(2Kb)}{4K^3} \right] + \\ & \frac{A^2}{4} \left\{ \frac{(c+b)^3}{6} - \frac{c^3}{6} \right\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Substituindo as constantes de normalização  $A$  e  $B$  pelos seus respectivos valores dados em (3.19) e (3.20), e utilizando a equação (3.14) para nos livrarmos das funções trigonométricas, podemos, depois de um pouco de manipulação, escrever (3.22) como:

$$\langle r_d^2 \rangle = \frac{1}{8q^2} - \frac{1}{8K^2} + \frac{(2c+b)(1+qb)}{8q} + \frac{c^4}{4} - \frac{qb^3}{24(1+qb)}. \quad (3.23)$$

Observe que  $\langle r_d^2 \rangle$  é função dos parâmetros  $b$ ,  $c$  e  $V_0$ , sendo que a dependência em  $V_0$  aparece somente no segundo termo de (3.23).

Note que tratamos o próton como pontual o que sabemos não ser correto. Na verdade, o próton tem um raio de aproximadamente  $0.8fm$ . Desta forma, se admitirmos que a carga do próton se distribui por todo o volume do dêuteron com uma distribuição esfericamente simétrica, veremos que isto equivale a adicionar à equação (3.23) o termo correspondente ao raio quadrático médio do próton. Assim sendo,

$$\langle r_d^2 \rangle = \frac{1}{8q^2} - \frac{1}{8K^2} + \frac{(2c+b)(1+qb)}{8q} + \frac{c^4}{4} - \frac{qb^3}{24(1+qb)} + \langle r_p^2 \rangle. \quad (3.24)$$

Esta última equação é a uma das equações que juntamente com (3.14) e (3.15), nos permite determinar o valor dos três parâmetros arbitrários do nosso potencial.

Substituindo o valor de  $c$ , dado por (3.15), em (3.24), e utilizando os dados referentes à energia de ligação do deuteron  $E_B = 2.23MeVs$ , raio do deuteron  $\langle r_d^2 \rangle^{1/2} = 2.1fm$  e raio do próton  $\langle r_p^2 \rangle^{1/2} = 0.8fm$ , resulta que as equações (3.14) e (3.24) ficam dependentes apenas dos valores de  $b$  e  $V_0$ .

Finalmente podemos isolar  $K$  em (3.24), substituí-lo na equação (3.14), e resolver numericamente<sup>†</sup> esta nova equação. Com isso determinamos os valores de  $b$  e  $V_0$ :

$$b = 1.311fm \quad e \quad V_0 = 75.6MeVs \quad (3.25)$$

É importante ressaltar que pequenas mudanças na medida do raio *rms* do deuteron  $\langle r_d^2 \rangle^{1/2}$ , alteram significativamente os valores de  $b$  e  $V_0$ .

As equações (3.25) e (3.15) determinam completamente o potencial nuclear retangular (ver a figura 3.2).

Devemos enfatizar contudo, que apesar de sua simplicidade, a parte atrativa deste potencial, representado por um poço quadrado, é bastante não realista.

### 3.3 Estrutura geral das forças nucleares

Nesta seção, baseado em [11], pretende-se estudar qual a estrutura das forças nucleares. Resultados de vários experimentos em física nuclear, implicam em uma série de propriedades para as forças nucleares:

1. existência de uma força central;
2. existência de uma força central dependente do spin;

---

<sup>†</sup>O cálculo numérico foi feito com o auxílio do Mathematica 4.0, e difere ligeiramente dos valores encontrados em [10].

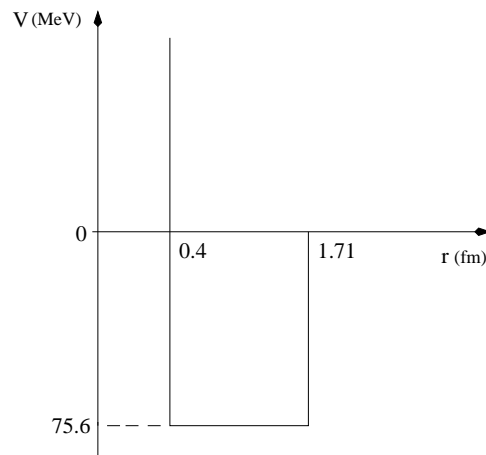


Figura 3.2: Potencial nuclear retangular.

3. existência de uma força não central;
4. existência de uma força originada de termos de acoplamento spin-órbita;
5. as forças nucleares não dependem do isospin;

Sabemos ainda que as forças nucleares têm o caráter de troca, sendo de **curto alcance** e fortemente repulsivas para distâncias muito pequenas entre os nucleons ( $r < 0.5 fm$ ).

**Comentário** *O formalismo de isospin trata os prótons e nêutrons de forma indistingüível no que se refere à interação nuclear. Neste formalismo temos apenas nucleons com isospin para cima (prótons) e isospin para baixo (nêutrons). A matemática usada para descrever o isospin é idêntica àquela usada para descrever o spin do elétron, logo a álgebra deste formalismo é a álgebra do  $SU(2)$ .*

Pretendemos então indicar um potencial, o mais geral possível, do qual se pode deduzir os resultados das observações para todas as energias possíveis. Até hoje não se conseguiu um potencial no sentido de uma lei universal, e em particular devemos colocar a questão de sabermos se a descrição da interação entre nucleons a altas energias via potencial faz sentido. Para energias acima de  $300 MeV$  teremos processos de criação e aniquilação de mésons, portanto o modelo de espalhamento não relativista, baseado em potencial, só é válido sob certas condições. Por exemplo, a  $450 MeV$  a seção de choque referente ao espalhamento inelástico descreve menos de 10% da seção de choque referente ao espalhamento elástico\*, porém sobe para

---

\*O espalhamento é dito elástico quando não excitamos nenhum grau de liberdade interno dos constituintes, e a soma das energias cinéticas permanece constante.

mais de 40% da seção eficaz total a  $650\text{MeV}$ . Como temos que utilizar a equação de Schrödinger para tratarmos um sistema de  $N$  nucleons, seria interessante determinar um potencial nucleon-nucleon válido em um domínio de até  $450\text{MeV}$ . Vamos então começar a construir este potencial genérico.

O termo mais simples a ser incluído é um potencial central de curto alcance, com uma dependência apenas radial (força de Wigner). Podemos escreve-lo sob a forma

$$V_c(r). \quad (3.26)$$

O próximo termo a ser incluído é uma força central dependente do spin. Como esta força tem de ser independente do sistema de coordenadas, devemos utilizar escalares que contenham o spin de dois nucleons  $\vec{\sigma}_1$  e  $\vec{\sigma}_2^\dagger$ . Devido às relações de comutação entre as componentes de  $\vec{\sigma}$ , existem apenas dois escalares independentes no espaço de spin: por exemplo 1 e  $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ . Logo, o termo de potencial dependente do spin pode ser escrito como:

$$V_\sigma(r) \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \equiv V_\sigma(r) P_\sigma, \quad (3.27)$$

onde a dependência radial aparece na função  $V_\sigma(r)$ .

O operador  $P_\sigma$  é chamado de operador de troca de spin e assume valores  $+1$  para um estado tripleto simétrico e  $-1$  para um estado singleto antisimétrico. É fácil de perceber que este operador permuta os spins das partículas.

O terceiro termo é referente à parte não central do potencial. O próton e o nêutron, sendo partículas de spin  $1/2$ , não podem ter momentos superiores ao dipolar [11]. Portanto, espera-se que a dependência angular da força seja do tipo de uma interação dipolar. Em física clássica, a energia potencial de um dipolo elétrico no campo de outro é dada por:

$$-\left(\frac{1}{r^3}\right) \left[ 3 \left( \vec{d}_1 \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \left( \vec{d}_2 \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) - \left( \vec{d}_1 \cdot \vec{d}_2 \right) \right]. \quad (3.28)$$

O termo  $1/r^3$ , em (3.28), é devido ao campo elétrico. Logo, substituindo este termo por uma função depende de  $r$  referente às forças nucleares, e conservando a dependência angular, temos:

$$V_T(r) \left[ 3 \left( \vec{\sigma}_1 \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \left( \vec{\sigma}_2 \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) - \left( \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) \right] \equiv V_T(r) S_{1,2}. \quad (3.29)$$

---

<sup>†</sup> $\vec{\sigma}$  é um vetor cujas as componetes são as matrizes de Pauli.

Este potencial é chamado de potencial tensorial. Com o auxílio de algumas propriedades é fácil de ver que no caso de  $\vec{\sigma}_1 = -\vec{\sigma}_2$  (estado singlete) o potencial tensorial se anula.

Levando em conta a existência de um acoplamento spin-órbita, podemos incluir outros dois operadores com suas respectivas funções arbitrárias:

$$V_{SL}(r) \left[ \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \right] \equiv V_{SL}(r) (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (3.30)$$

e

$$V_{LL}(r) \left[ \frac{1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{L} \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{L} + \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{L} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{L}) \right] \equiv V_{LL}(r) L_{12}. \quad (3.31)$$

Note que em (3.30) temos os termos lineares em  $\vec{p}$  que correspondem a uma energia de acoplamento de spin-órbita, e em (3.31) temos os termos quadráticos em  $\vec{p}$ .

Por último, devemos levar em conta uma possível mudança na dependência radial das 5 funções arbitrárias, devido a uma troca de isospin. Como sabemos que a interação nuclear não deve depender do isospin<sup>‡</sup>, é razoável supor que um potencial geral contenha um operador referente ao isospin, juntamente com funções radiais. Este novo termo seria responsável por compensar qualquer mudança devido á troca de isospin.

Como a álgebra de isospin é idêntica á álgebra de spin, podemos construir um operador análogo ao operador dado em (3.27):

$$P_\tau \equiv \frac{1}{2} (1 + \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2). \quad (3.32)$$

Este operador é chamado de operador de troca de isospin, em analogia com operador de troca de spin.

Finalmente, com o auxílio de (3.26), (3.27), (3.29), (3.30) e (3.31), e utilizando também (3.32), pode-se escrever o potencial geral como:

$$V(r) = \left[ V_c(r) + V_\sigma(r) P_\sigma + V_T(r) S_{1,2} + V_{SL}(r) (\vec{L} \cdot \vec{S}) + V_{LL}(r) L_{12} \right] + P_\tau \left[ V'_c(r) + V'_\sigma(r) P_\sigma + V'_T(r) S_{1,2} + V'_{SL}(r) (\vec{L} \cdot \vec{S}) + V'_{LL}(r) L_{12} \right] \quad (3.33)$$

---

<sup>‡</sup>Isto significa que o hamiltoniano deve ser invariante sob uma rotação no espaço de isospin.

A equação (3.33) representa apenas uma forma geral e matemática para o potencial da interação nuclear. Devemos então estabelecer critérios que determinem estas funções, sendo bastante razoável que algumas delas se anulem. Devemos exigir que este potencial seja capaz de descrever corretamente as seguintes grandezas observáveis: fases de espalhamento nucleon-nucleon; propriedades de alguns núcleos simples, em particular o dêuteron; densidade de saturação, energia de ligação, energia de simetria para a matéria nuclear e energias de superfície para nucleons finitos.

Existem dois caminhos distintos a seguir para determinarmos as várias funções radiais: pode-se procurar de forma empírica um conjunto de funções que satisfaça as condições citadas anteriormente, ou pode-se deduzir o valor destas funções através dos processos de troca de mésons<sup>§</sup>, responsáveis pelas forças nucleares. Porém, como o processo de troca de um pión (OPEP) não é suficiente, é mais simples procurar por potenciais fenomenológicos que, para raios grandes ( $r > 1.4 fm$ ), concordem com o resultado do potencial de OPEP<sup>¶</sup>.

### 3.4 Potenciais fenomenológicos

O objetivo desta seção é simplesmente apresentar alguns potenciais fenomenológicos, a fim de usarmos no capítulo seguinte.

Dois potenciais fenomenológicos razoavelmente conhecidos são os potenciais de Hamada-Johnston [12] e Reid [13]. Estes potenciais distinguem-se no seu comportamento para pequenos raios. Sabe-se que por volta de  $200 MeV$ , a defasagem do espalhamento nucleon-nucleon de um estado  $^1S_0$  passa por zero, tornando-se em seguida negativa. Isto implica que o potencial torna-se subitamente repulsivo. Para explicar este fato, o potencial de Hamada-Johnston tem um hard-core repulsivo por volta de  $0,485 fm$ . Existem outros potenciais, que também explicam corretamente estas fases de espalhamento sem recorrer a um hard-core. Este é o caso, por exemplo, do potencial soft-core de Reid.

**Comentário** *O estado de dois nucleons é representado pela notação espectroscópica  $^{3s+1}l_J$ , sendo  $s$  o spin total,  $l$  o momento angular orbital total e  $J$  o momento angular total.*

Apresentaremos a seguir, alguns potenciais fenomenológicos obtidos em [13].

---

<sup>§</sup>píons, omegas, etc

<sup>¶</sup>A parte radial deste potencial tem essencialmente a forma de um potencial de Yukawa.

### 3.4.1 Potenciais de Reid

No artigo de Reid [13], temos uma forma diferente de potencial para cada estado  $NN$  (nucleon-nucleon). Estes potenciais são ajustados fenomenologicamente, dentro de intervalos de energia de 0 a  $350\text{MeVs}^*$ . Cabe a nós escolher quais destes potenciais serão importantes para o estudo do capítulo seguinte.

Estamos interessados em trabalhar com um gás de nucleons provenientes da radiação, ou seja, nucleons formados pela reação  $\gamma + \gamma \leftrightarrow N + \bar{N}$ . Por uma questão de simplicidade, vamos supor que a imensa maioria destes nucleons tenha momento angular orbital  $l = 0$ . Com isso, os dois únicos estados possíveis em uma interação  $NN$ , são os estados  $^1S_0$  e  $^3S_1$ . É interessante lembrar que o dêuteron é a mistura de um desses estados  $^3S_1$  com um estado  $^3D_1^\dagger$ .

O estado  $^1S_0$  tem isospin  $T = 1$  enquanto que o estado  $^3S_1$  tem isospin  $T = 0$ . Isto ocorre porque a função de onda total do sistema de dois nucleons deve ser antisimétrica. Portanto, como  $l = 0$  implica em uma parte espacial simétrica da função de onda, temos que: se o spin total é zero ( $^1S_0$  antisimétrico), então o isospin total deve ser um ( $T = 1$  simétrico); e se o spin total é um ( $^3S_1$  simétrico), então o isospin total deve ser zero ( $T = 0$  antisimétrico).

Reid, em seu artigo, propõe ainda, para cada estado, dois tipos diferentes de potenciais: um chamado de hard-core, onde a parte repulsiva é tratada como um potencial infinito; e outro chamado de soft-core, sendo a parte repulsiva perfeitamente ajustada à parte atrativa.

#### Estado $^1S_0$

Para este estado, o potencial do tipo hard-core (HC) é ajustado por:

$$V_{HC}(^1S_0) = -\frac{1.43k}{r}(e^{-0.7r} + 39.633e^{-2.1r}), \quad (3.34)$$

sendo que  $k = 10.463\text{MeV}$  é obtido de OPEP, com um raio do hard-core dado por  $r_c = 0.423\text{fm}$ .

O potencial HC pode ser visto na figura 3.3.

---

\*Para energias maiores que  $280\text{MeVs}$ , temos uma razoável produção de píons e a equação de Schrödinger começa a tornar-se inapropriada.

†Na verdade  $^3D_1$  contribui apenas com aproximadamente 4% da probabilidade total.

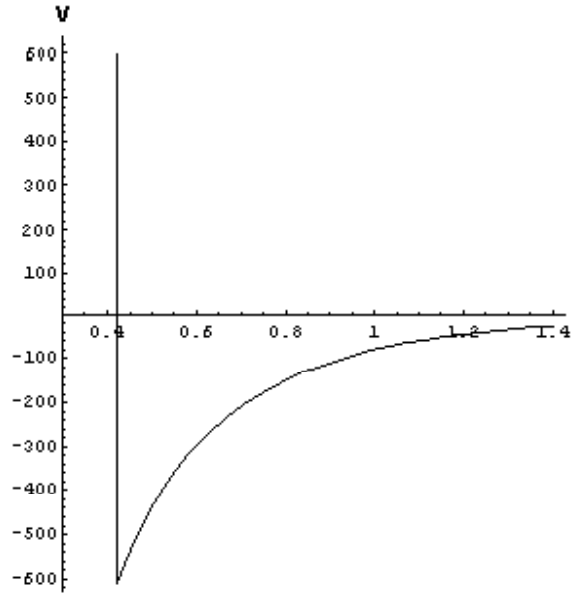


Figura 3.3: Potencial nuclear com hard-core para o estado  ${}^1S_0$ . O potencial  $V$  é medido em  $MeVs$  e a distância  $r$  é medida em  $fm$ .

O potencial do tipo soft-core (SC) de  ${}^1S_0$  é descrito por:

$$V_{SC}({}^1S_0) = -\frac{1.43ke^{-0.7r}}{r} - \frac{2360.36e^{-2.8r}}{r} + \frac{9272.41e^{-4.9r}}{r}. \quad (3.35)$$

O gráfico referente a (3.35) pode ser visto na figura 3.4.

Segundo [13], ambos os potenciais de  ${}^1S_0$  estão em ótima concordância com os dados experimentais de phase shift.

### Estado ${}^3S_1$

Vemos em [13] que as informações sobre o potencial do estado  ${}^3S_1$  aparecem acopladas ao estado  ${}^3D_1$ . Este “potencial acoplado” apresenta uma forma geral do tipo

$$V({}^3S_1 - {}^3D_1) = V_c + V_T S_{1,2} + V_{SL} \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (3.36)$$

onde os operadores  $S_{1,2}$  e  $\vec{L} \cdot \vec{S}$  são definidos em (3.29) e (3.30).

Como estamos interessados apenas no potencial de  ${}^3S_1$ , podemos eliminar o último termo de (3.36), pois nesse estado temos  $l = 0$ . Como no capítulo seguinte iremos utilizar apenas potenciais centrais, vamos desprezar também, a componente tensorial  $V_T$  em (3.36).



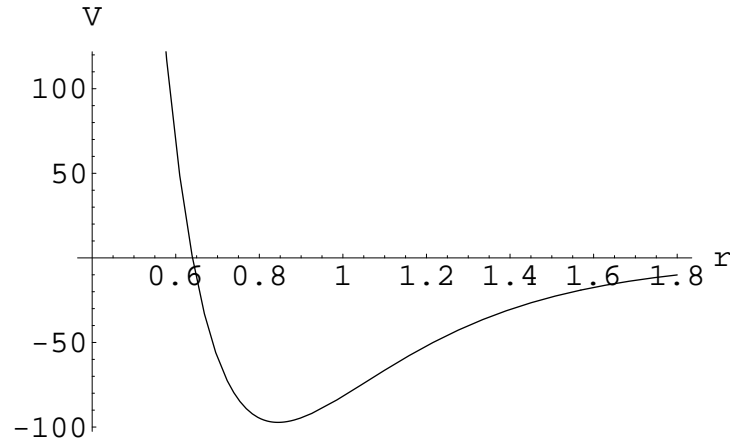


Figura 3.4: Potencial nuclear tipo soft-core para o estado  $^1S_0$ . O potencial  $V$  é medido em  $MeVs$  e a distância  $r$  é medida em  $fm$ .

Dito isto, podemos escrever o potencial HC de  $^3S_1$ , como:

$$V_{HC}(^3S_1) = -\frac{1.43k}{r}(e^{-0.7r} + 387.4e^{-4.2r}), \quad (3.37)$$

sendo o raio do hard-core deste potencial, dado por  $r_c = 0.548fm$ .

Este potencial é apresentado na figura 3.5.

O potencial SC de  $^3S_1$  é dado por:

$$V_{SC}(^3S_1) = -\frac{1.43ke^{-0.7r}}{r} + \frac{150.6e^{-1.4r}}{r} - \frac{4164.2e^{-2.8r}}{r} + \frac{11142.8e^{-4.2r}}{r}. \quad (3.38)$$

O gráfico referente a (3.38) é mostrado na figura 3.6.

Segundo [13], a concordância entre os potenciais HC e SC de  $^3S_1$  com os dados experimentais de phase shift é boa até energias de  $200MeVs$ . A partir deste valor a correspondência piora bastante, estando claramente discordante a  $350MeVs$ .

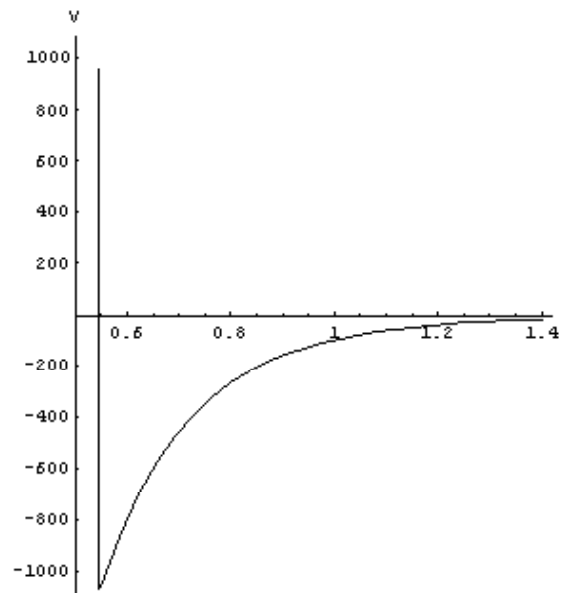


Figura 3.5: Potencial nuclear com hard-core para o estado  ${}^3S_1$ . O potencial  $V$  é medido em  $MeVs$  e a distância  $r$  é medida em  $fm$ .

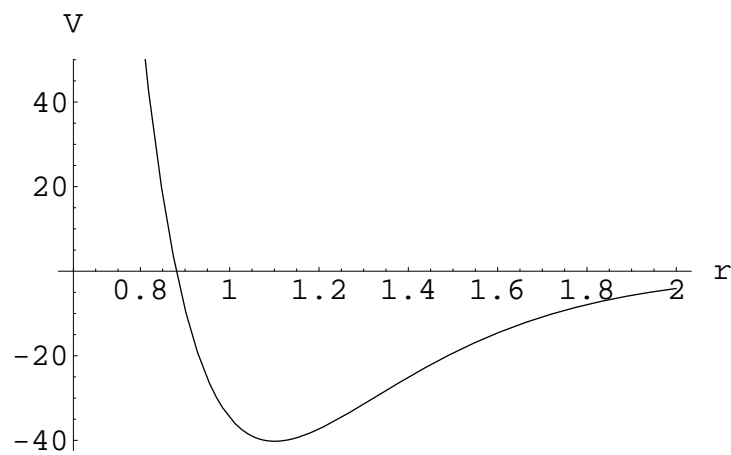


Figura 3.6: Potencial nuclear tipo soft-core para o estado  ${}^3S_1$ . O potencial  $V$  é medido em  $MeVs$  e a distância  $r$  é medida em  $fm$ .

## Capítulo 4

# Equações de Estado do Período Pré-Nucleossíntese

### 4.1 Introdução

Neste quarto capítulo, faremos uso do formalismo desenvolvido nos capítulos 2 e 3, com o intuito de obter equações de estado a altas energias que possam ser aplicadas à cosmologia do período pré-nucleossíntese .

O período pré-nucleossíntese é o período imediatamente anterior à formação dos elementos leves cosmológicos (dêuteron,  $He^{+2}$  etc). Sabe-se que o início da formação destes elementos só ocorrerá quando o universo tiver uma energia média menor que a energia de ligação do dêuteron ( $E_B \simeq 2.23MeV$ ). Definimos, então, o começo do período pré-nucleossíntese quando  $z \geq 2.10^{12}$ , ou em termos da energia  $kT \geq 4MeV$ .

Um fato importante a ser discutido é quais são os constituintes relevantes à cosmologia neste período. Na seção 1.4 vimos que, a partir de  $z \gtrsim 10^5$ , a densidade de energia da radiação ultrapassa a densidade de energia da matéria\*. Portanto, em uma primeira análise é razoável supor que no período pré-nucleossíntese o conteúdo do universo seja dominado pelos fótons. Porém, sabemos, que para energias suficientemente altas, estes fótons começaram a produzir uma boa quantidade de pares de partículas. Em particular, a centenas de  $MeVs$  teremos uma quantidade razoável de nucleons sendo produzidos. É importante lembrar que a densidade de nucleons provenientes da radiação  $n_N$  é muito superior aos nucleons  $n_b$  presentes nos dias de hoje, veja tabela 4.1:

---

\*Durante todo este capítulo consideraremos  $\Lambda = 0$ .

	$kT \simeq 100MeV$	$kT \simeq 200MeV$	$kT \simeq 300MeV$
$n_b(fm^{-3})$	$8.2 \times 10^{-10}$	$6.6 \times 10^{-9}$	$2.2 \times 10^{-8}$
$n_N(fm^{-3})$	$1.5 \times 10^{-6}$	$4.6 \times 10^{-4}$	$4.0 \times 10^{-3}$

Tabela 4.1: Comparação entre as densidade  $n_b$  e  $n_N$ .

Uma equação de estado a altas energias deveria levar em conta além de fótons, partículas produzidas via produção de pares e suas respectivas interações. Como é inviável trabalharmos com muitas partículas e seus respectivos processos de interação, faremos a simplificação de considerarmos apenas fótons e nucleons provenientes da radiação.

As quatro espécies de nucleons produzidas serão os próton  $p$ , os antiprótons  $\bar{p}$ , os nêutrons  $n$  e os antinêutrons  $\bar{n}$ . Sabemos também que estas quatro partículas interagem através da força nuclear forte<sup>†</sup>. Utilizando então um tratamento não relativístico, vamos supor que a interação forte entre estes nucleons é representada por potenciais nucleares como aqueles descritos no capítulo anterior.

Uma última simplificação a ser feita é a de considerarmos nossos nucleons como partículas clássicas.

Resumidamente falando, temos então o seguinte modelo para o conteúdo do universo pré-nucleossíntese: *gás de fótons mais gás de nucleons*, sendo estes nucleons tratados como partículas clássicas interagentes e não relativísticas. Chamaremos este modelo de  $\gamma + N$ .

## 4.2 Equações de estado do modelo $\gamma + N$

Segundo a lei de Dalton ou lei das pressões parciais, podemos escrever a equação de estado do sistema fótons ( $\gamma$ ) mais nucleons ( $N$ ) como:

$$p(n_N, kT) = p_\gamma(kT) + p_N(kT, n_N), \quad (4.1)$$

sendo  $kT$  a energia e  $n_N$  a densidade de nucleons.

Na seção 1.4, vimos que a equação de estado para um gás de fótons é da forma

$$p_\gamma(kT) = \frac{\rho_\gamma(kT)}{3}, \quad (4.2)$$

---

<sup>†</sup> $p$  e  $\bar{p}$  sofrerão interação eletromagnética, porém o universo como um todo continuará eletricamente neutro, o que significa que não teremos efeitos globais devido a este tipo de interação.

onde  $\rho_\gamma$  é a densidade de energia de radiação de um corpo negro, dada por

$$\rho_\gamma(kT) = \frac{\pi^2}{15\hbar^3 c^3} (kT)^4. \quad (4.3)$$

Como  $p_N$  trata-se de um gás clássico de partículas interagentes (gás real), utilizaremos então todo o formalismo discutido no capítulo 2. Segundo (2.11), podemos escrever a pressão do gás de nucleons através da expansão do virial

$$p_N(kT, n_N) = n_N kT \sum_{l=1}^{\infty} a_l(T) (n_N \lambda^3)^{l-1}, \quad (4.4)$$

sendo  $a_l(T)$  os coeficientes do virial (ver seção 2.3) e  $\lambda$  o comprimento de onda térmico dos nucleons.

Sabemos, porém, que a interação entre estes nucleons é de curto alcance (interação nuclear), portanto é bastante razoável supor que  $p_N$ , dado por (4.4), possa ser aproximada pelos três primeiros termos (ver seção 2.4). Logo, a equação de estado que representará o gás de nucleons é,

$$p_N(kT, n_N) \simeq n_N kT (1 + a_2(T) n_N \lambda^3 + a_3(T) n_N^2 \lambda^6). \quad (4.5)$$

Substituindo as equações (4.2) e (4.5) em (4.1), obtemos a equação de estado do modelo  $\gamma + N$ .

$$p(n_N, kT) = \frac{\pi^2}{45\hbar^3 c^3} (kT)^4 + n_N kT (1 + a_2(kT) n_N \lambda^3 + a_3(kT) n_N^2 \lambda^6). \quad (4.6)$$

Uma observação a ser feita é o fato de considerarmos a mesma temperatura para o gás de fótons e o gás de nucleons, ou seja, o sistema está termalizado. No caso da cosmologia, isto é válido para períodos anteriores à recombinação  $z \gtrsim 3 \cdot 10^3$ .

Na equação (4.6), a pressão aparece como função da densidade de nucleons  $n_N$  e da energia  $kT$ . Como tencionamos aplicar este tipo de equação de estado no período pré-nucleossíntese\*, seria interessante obtermos a pressão apenas como função de  $kT$ .

Segundo a referência [9], para energias acima de  $20 MeV$ , a reação  $\gamma + \gamma \leftrightarrow N + \bar{N}$  está em equilíbrio, ou seja, a densidade de nucleons permanece constante. Neste

---

\*Lembre-se que em um universo termalizado a energia  $kT$  pode ser tomada como parâmetro de tempo.

caso, podemos calcular esta densidade através de uma abordagem do equilíbrio. Este método é descrito na seção 2.6, e segundo o exemplo 2 daquela seção, a densidade de uma das espécies de nucleons (por exemplo o próton), é dado pela seguinte equação:

$$n_p(T) = n_{\bar{p}}(T) = \frac{g}{8b_2(kT)\lambda^3} \left\{ [1 + 4b_2(kT) \exp(-m_p c^2/kT)]^2 - 1 \right\}, \quad (4.7)$$

onde  $g$  é o número de valores assumidos pelo grau de liberdade interno,  $m_p$  é a massa do próton e  $b_2(kT)$  é a integral dada por (2.15).

Vale lembrar que a equação acima é válida quando a fugacidade  $z$  é muito menor que um (veja tabela 2.2 - seção 2.6).

Como a interação nuclear é independente do isospin, temos que o termo de interação  $b_2(kT)$  é o mesmo para o próton e para o nêutron.

Portanto, sabendo que  $g$  representa o grau de liberdade de spin e desprezando a diferença entre a massa do próton e do nêutron, temos a seguinte equação para a densidade de qualquer uma das quatro espécies de nucleons:

$$n_{Nx}(kT) = \frac{2}{8b_2(kT)\lambda^3} \left\{ [1 + 4b_2(kT) \exp(-m_N c^2/kT)]^2 - 1 \right\}. \quad (4.8)$$

Finalmente, com o auxílio de (4.6) e (4.8), e sabendo como as espécies de nucleons interagem entre si, podemos obter a pressão do modelo  $\gamma + N$  apenas como função de  $kT$ .

O próximo passo é utilizar os potenciais nucleares apresentados no capítulo anterior para obter a forma explícita das equações de estado tipo  $p(kT)$ .

#### 4.2.1 Equação de estado baseada no potencial retangular

O potencial nuclear retangular foi obtido na seção 3.2. Ele consiste de um poço quadrado atrativo com um caroço duro repulsivo. Sua forma pode ser visualizada na figura 3.1.

Neste primeiro modelo vamos supor que todas as quatro espécies de nucleons ( $p$ ,  $\bar{p}$ ,  $n$ ,  $\bar{n}$ ) interajam entre si somente através do potencial retangular. Logo, a densidade total de nucleons é  $n_N = 4n_{Nx}$ , onde  $n_{Nx}$  é dado por (4.8).

Utilizando então este potencial, podemos calcular os termos de interação  $a_2(T)$  e  $a_3(T)$ .

Do capítulo 2, vemos que o coeficiente  $a_2$  é dado pela seguinte integral:

$$a_2(kT) = -b_2(kT) = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \int_0^{\infty} (e^{-u(r)/kT} - 1)r^2 dr. \quad (4.9)$$

Para o potencial retangular, segue:

$$a_2 = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^c (-1)r^2 dr + \int_c^{b+c} (e^{V_0/kT} - 1)r^2 dr \right] \Rightarrow$$

$$a_2 = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ \int_0^c (-1)r^2 dr + \int_c^{b+c} (e^{V_0/kT} - 1)r^2 dr \right] \Rightarrow$$

$$a_2(kT) = -b_2(kT) = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \left[ (-1)\frac{c^3}{3} + (e^{V_0/kT} - 1) \cdot \left( \frac{(b+c)^3}{3} - \frac{c^3}{3} \right) \right]. \quad (4.10)$$

Observe que  $V_0$  representa a profundidade do poço,  $b$  a largura do poço e  $c$  o alcance do caroço duro. Os valores numéricos deste parâmetros foram obtidos na seção 3.2.2.

O coeficiente  $a_3$  é obtido resolvendo-se a seguinte integral:

$$a_3(kT) = \frac{-1}{3\lambda^6} \int_0^\infty \int_0^\infty f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_{12} d^3 r_{13}, \quad (4.11)$$

onde  $f_{ij} = e^{-u_{ij}/kT} - 1$  é chamada de função de duas partículas.

A integral (4.11) é resolvida generalizando-se o método geométrico utilizado no cálculo de  $a_3$ , para o gás de esferas duras (seção 2.5.2). Este cálculo é demasiadamente longo, e consiste basicamente em determinarmos uma série de volumes de esferas e volumes de intersecções de esferas (veja apêndice 2). É importante ressaltar que, segundo o nosso método de cálculo, a condição  $b + c \geq 3c$  deve ser respeitada.

Logo, utilizando os resultado de  $a_2$  e  $a_3$ , e as equações (4.6) e (4.8), obtemos  $p_R(kT)$ , cujo o gráfico é mostrado na figura 4.1.

Para baixas energias ( $kT < 230 \text{ MeVs}$ ), o gráfico de  $p_R(kT)$  apresenta um comportamento crescente. Isto é justificável, pois a estas energias a densidade de nucleons ainda é bastante baixa para termos algum efeito referente a interação. Porém, por volta de  $270 \text{ MeVs}$  vemos uma súbita mudança e a pressão começa a diminuir conforme a energia aumenta, tornando-se negativa a energias próximas de  $310 \text{ MeVs}$ . Este fato surpreendente ocorre devido o termo de interação  $a_2(kT)$  superar os outros termos de (4.6). Mais precisamente falando, é a parte atrativa do potencial em  $a_2(kT)$  [segundo termo de (4.10)] que supera todos os outros. As implicações desta equação de estado na cosmologia serão bastante interessantes, principalmente na faixa de  $270 \text{ MeVs}$  a  $340 \text{ MeVs}$ .

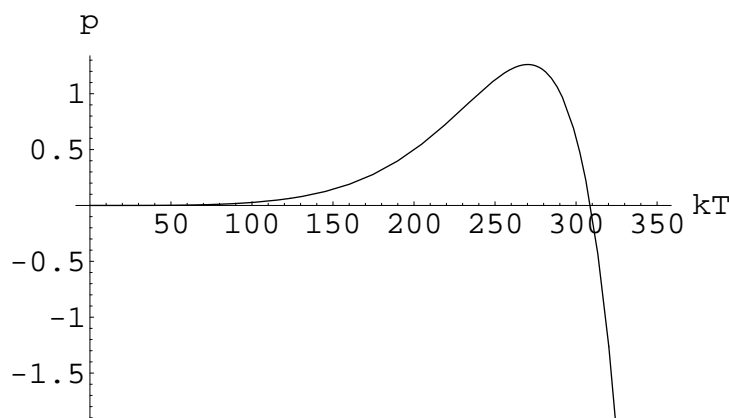


Figura 4.1: Gráfico da pressão pela energia, onde a pressão está em unidades de  $MeVs/\lambda_c^3$  e a energia está em unidade de  $MeVs$ . Lembre que  $\lambda_c$  é chamado de comprimento de onda Compton.

Vamos nos ater agora a justificar algumas das aproximações do modelo  $\gamma + N$ .

Um dos objetivos do cálculo de  $a_3(kT)$  é fundamentar um argumento em favor da convergência da equação de estado (4.4), e principalmente justificar o fato de desprezarmos os termos superiores a  $a_3(kT)$  na descrição do gás interagente de nucleons. Vamos comparar o módulo do terceiro termo da expansão de  $p_R(kT, n_N)$  em (4.5) com o segundo, definindo para isso a função

$$f_R(kT) \equiv 1 - \sqrt{\left(\frac{a_3(kT) n^2 \lambda^6}{a_2(kT) n \lambda^3}\right)^2}. \quad (4.12)$$

Quanto mais próximo  $f_R(kT)$  estiver da unidade, melhor será nossa confiança na expansão do Virial, e maior será a importância da correção de segunda ordem em detrimento da correção de terceira ordem (ver figura 4.2).

Percebemos que na faixa de energia de interesse, o termo de ordem três é bem menos importante que o de segunda ordem. A  $400MeV$   $a_3(T) n^2 \lambda^6$  é cerca de 50% do valor de  $a_2(T) n \lambda^3$ . A medida que  $kT$  cresce, aumenta a importância dos termos de ordem superior: a  $600MeV$ , o termo de terceira ordem é comparável a magnitude do termo de segunda ordem.

Uma vez que  $a_3(T) n^2 \lambda^6 < a_2(T) n \lambda^3$  para valores de energias  $kT < 350MeV$  temos uma boa justificativa para considerarmos apenas os primeiros termos da expansão do virial (4.4).

Uma segunda aproximação a ser analisada é o fato de tratarmos os nucleons como um gás clássico.



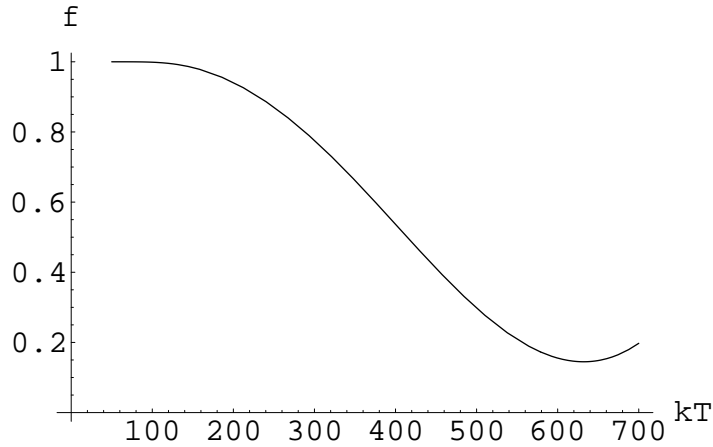


Figura 4.2: Comparação entre  $a_3 n^2 \lambda^6$  e  $a_2 n \lambda^3$ . Escrevemos  $kT$  em  $MeV$ .

Sabe-se que um sistema de partículas (como nucleons) pode ser tratado classicamente quando a distância média interpartícula  $(V/N)^{1/3}$  de um sistema é muito maior que o comprimento de onda térmico  $\lambda$ , ou seja,

$$\lambda \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \Rightarrow n\lambda^3 \ll 1. \quad (4.13)$$

Definimos então uma função chamada limite clássico como

$$Lc_R(kT) \equiv 4n_{Nx}(kT)\lambda^3(kT). \quad (4.14)$$

Esta nova função representa a densidade de nucleons multiplicada pelo comprimento de onda térmico ao cubo.

O gráfico  $Lc_R(kT)$  pode ser visto na figura 4.3.

Para energias de  $250 MeVs$ , a função  $Lc_R$  é da ordem de 0.2, porém este valor tende a subir, chegando 0.8 para energias de aproximadamente  $350 MeVs$ . Baseado na condição (4.13), conclui-se então que o tratamento clássico torna-se extremamente duvidoso conforme a energia aumenta.

Por fim, é interessante sintetizar algumas conclusões obtidas do modelo  $\gamma + N$  com um potencial retangular:

(i) para energias superiores à  $270 MeVs$ , a pressão começa a diminuir conforme a energia aumenta;

(ii) próximo de  $310 MeVs$  a pressão torna-se negativa;

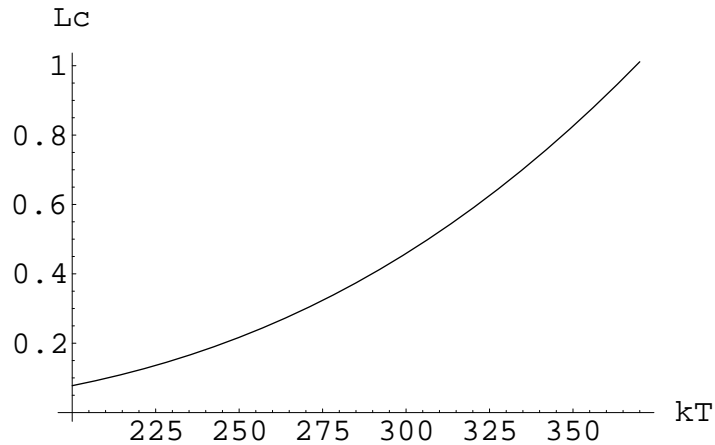


Figura 4.3: Função limite clássico versus a energia  $kT$  em  $MeVs$ .

(iii) ao que tudo indica, na faixa de  $270 MeVs$  á  $380MeVs$ , o primeiro termo de correção  $a_2(T) n\lambda^3$  é dominante, o que implica em podermos desprezar todos os termos de ordem superior;

(iv) a aproximação clássica para os nucleons não é muito boa, piorando sensivelmente conforme a energia aumenta.

Lembremos que o potencial retangular é bastante não realista. Nas seções 4.2.2 e 4.2.3 faremos uso de potenciais fenomenológicos bem mais realistas.

#### 4.2.2 Equação de estado baseada no potencial tipo hardcore

Diferentemente do potencial retangular, potenciais fenomenológicos são bem mais realistas para a descrição da interação nuclear. Porém, a determinação destes potenciais exigem uma série de informações extras sobre os nucleons interagentes. Como feito no capítulo anterior, adotaremos algumas simplificações referentes aos nucleons provenientes da produção de pares:

(i) vamos supor que a imensa maioria destes nucleons tenha momento angular orbital  $l = 0$ . Com isso, os dois únicos estados possíveis em uma interação  $NN$ , são os estados  $^1S_0$  e  $^3S_1$  referentes a spins antiparalelo e paralelo respectivamente;

(ii) vamos supor também que todos os nucleons interagem com todos somente através dos potenciais<sup>†</sup> de  $^1S_0$  e  $^3S_1$ .

Os potenciais fenomenológicos com hardcore  $^1S_0$  e  $^3S_1$  foram apresentados na seção 3.4.1, figuras 3.3 e 3.5.

---

<sup>†</sup>Em alguns casos esta afirmação não é verdade. Lembremos que no caso de nucleons ( $l = 0$ ) que tenham spin e isospin idênticos, teremos uma forte “repulsão” fermiônica.

Segundo nossas simplificações é bastante razoável supor que número de nucleons com spin  $\uparrow$  seja igual ao número de nucleons com spin  $\downarrow$ , portanto metade das interações serão descritas pelo potencial  $^1S_0$  e a outra metade pelo potencial  $^3S_1$ .

Voltemos então às equações básicas (4.6) e (4.8) referentes ao cálculo da pressão  $p(kT)$ . Os termos de interação  $a_2(kT)$  e  $b_2(kT)$  sofrerão as seguintes mudanças:

$$\begin{aligned} a_2(kT) &\longrightarrow \frac{a_2^{^1S_0}(kT) + a_2^{^3S_1}(kT)}{2} \\ b_2(kT) &\longrightarrow \frac{b_2^{^1S_0}(kT) + b_2^{^3S_1}(kT)}{2}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Note-se que, novamente, a densidade total de nucleons é  $n_N = 4n_{Nx}$ .

As mudanças (4.15) implementam as afirmações (i) e (ii). Como na seção anterior o termo de interação  $a_3(kT)$  se mostrou desprezível na faixa de energia de interesse, desprezaremos sua contribuição nos cálculos.

O cálculo da integral que representa os termos  $a_2$  e  $b_2$  será feito em duas partes. O hardcore é calculado analiticamente, como o primeiro termo em (4.10). Já a parte atrativa dada por (3.34) e (3.37) é calculada numericamente, com o auxílio do software *Mathematica 4*. A região de integração numérica vai desde o limite do hardcore ( $0,42fm$  para  $^1S_0$  e  $0,55fm$  para  $^3S_1$ ) até  $2,5fm$ . É fácil de verificar pelas figuras 3.3 e 3.5 que, para distâncias superiores a  $2,5fm$  a região de integração é desprezível.

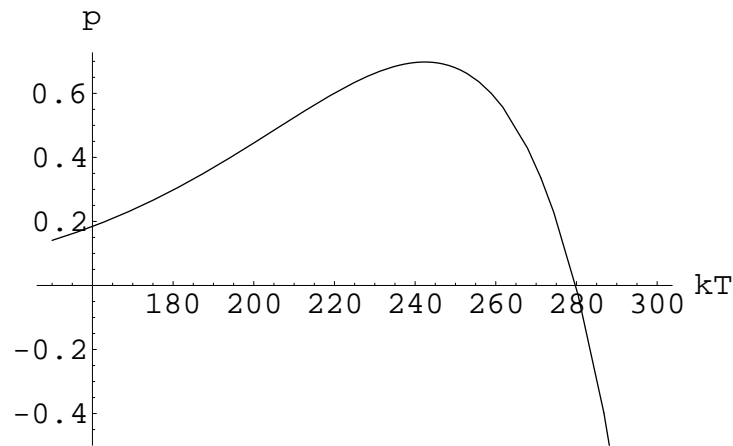


Figura 4.4: Gráfico da pressão pela energia, onde a pressão está em unidades de  $MeVs/\lambda_c^3$  e a energia está em unidades de  $MeVs$ .

Na figura 4.4, vemos que o comportamento da equação  $p_{HC}(kT)$  é análogo à da seção anterior. O ponto onde a pressão começa a diminuir com a energia é

aproximadamente  $240 \text{ MeV s}$ , e por volta de  $280 \text{ MeV s}$  a pressão torna-se negativa! Se compararmos os gráficos das figura 4.1 e figura 4.4, vemos que o fenômeno de pressão negativa ocorre primeiramente no gráfico da figura 4.4. Isto é explicado devido a diferença entre a parte atrativa dos potenciais.

Como feito na seção anterior, vamos analisar a validade da aproximação clássica, através da função  $L_{HC}(kT)$  definida de forma análoga a (4.14). Observe-se que, agora, a densidade  $n_{Nx}$  é obtida com os termos de interação tipo (4.15).

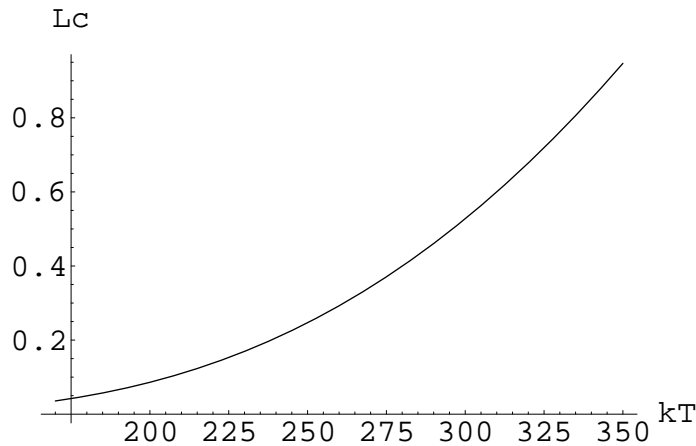


Figura 4.5: Função limite clássico versus a energia  $kT$  em  $\text{MeV s}$ .

Vemos, da figura 4.5, que para energias de  $280 \text{ MeV s}$  a função  $L_{HC}$  é da ordem de 0.4, porém este valor tende a subir, chegando 0.9 para energias de aproximadamente  $350 \text{ MeV s}$ . Como na seção anterior, concluímos que o tratamento clássico torna-se extremamente duvidoso conforme a energia aumenta.

É importante lembrar que segundo [13], a validade destes potenciais fenomenológicos é para energias de até  $350 \text{ MeV s}$ .

Sintetizando as principais conclusões do modelo  $\gamma + N$  com um potencial tipo hardcore:

- (i) para energias superiores à  $240 \text{ MeV s}$ , a pressão começa a diminuir conforme a energia aumenta;
- (ii) próximo de  $280 \text{ MeV s}$  a pressão torna-se negativa;
- (iii) como no caso do potencial retangular, a aproximação clássica para os nucleons não é muito boa, e piora sensivelmente conforme a energia aumenta;
- (iv) na faixa de interesse entre  $240 \text{ MeV s}$  à  $350 \text{ MeV s}$ , o noção de potencial continua válida.

### 4.2.3 Equação de estado baseada no potencial tipo softcore

O tratamento matemático do modelo  $\gamma + N$  com um potencial fenomenológico tipo softcore, é idêntico ao do modelo com potencial hardcore. Adotaremos as duas simplificações da seção anterior, utilizaremos as mesmas mudanças nos termos de interação (4.15) e desprezaremos o termo  $a_3(kT)$  de interação. Contudo, as formas dos potenciais  $^1S_0$  e  $^3S_1$  de hardcore e softcore são diferentes. Os potenciais de softcore são suaves e não apresentam pontas. Estes potenciais são dados pelas equações (3.35) e (3.38).

O cálculo da integral dos termos de interação  $a_2$  e  $b_2$  foi feito numericamente com o auxílio do software *Mathematica 4*. A região de integração vai de  $0.1 fm$  até  $2.5 fm$ . Note que não podemos começar de zero, pois as funções (3.35) e (3.38) são divergentes neste ponto.

O gráfico da pressão  $p_{SC}(kT)$  é mostrado na figura 4.6.

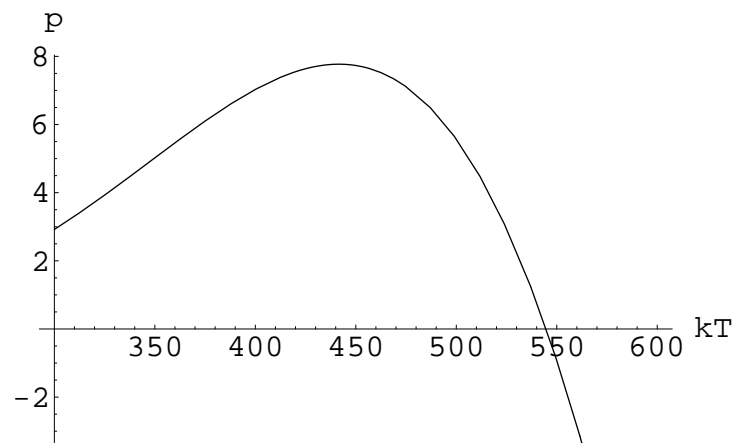


Figura 4.6: Gráfico da pressão pela energia, onde a pressão está em unidades de  $MeVs/\lambda_c^3$  e a energia está em unidades de  $MeVs$ .

A região onde a pressão é negativa ocorre para valores superiores à  $540 MeVs$ . Este valor é muito superior quando comparado aos valores dos outros dois modelos de potenciais. Esta grande discrepância ocorre devido a diferença da parte atrativa dos três potenciais.

A título de completeza, analisemos a aproximação clássica com o auxílio da função  $Lc_{SC}(kT)$ , definida equivalentemente à (4.14).

Sabendo da condição (4.13), vemos claramente na figura 4.7, que na região de  $550 MeVs$  não vale a aproximação clássica para os nucleons.

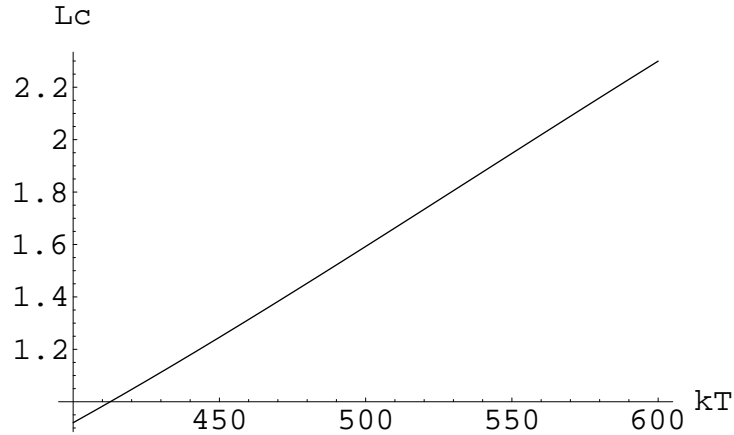


Figura 4.7: Função limite clássico versus a energia  $kT$  em  $MeVs$ .

Sintetizando as principais informações do modelo  $\gamma + N$  com um potencial fenomenológico tipo softcore:

- (i) a noção de potencial não é válida na região onde temos pressão negativa;
- (ii) a aproximação clássica para os nucleons não é válida acima de  $400MeVs$ ;
- (iii) o modelo não pode ser usado para gerar pressão negativa.

### 4.3 Influências das equações de estado na cosmologia

O principal objetivo desta dissertação é de utilizar possíveis equações de estado a altas energias, com o intuito de explicar o período inflacionário da cosmologia.

Como visto na seção 1.6, acredita-se que o universo passou por um curto período inflacionário. Nesta seção, iremos explorar a possibilidade de uma inflação generalizada, como aquela dada pelas equações (1.57) e (1.58). Utilizando (1.57) podemos definir uma função  $\gamma(kT)$  como:

$$\gamma(kT) \equiv \frac{p(kT)}{\rho(kT)} + 1, \quad (4.16)$$

onde  $p$  é a equação de estado (ou pressão) e  $\rho$  é a densidade total de energia.

Lembremos que a aceleração (ou inflação) ocorrerá para  $0 \leq \gamma(kT) \leq \frac{2}{3}$ .

No modelo  $\gamma + N$ , a densidade total de energia é obtida através da soma da densidade de energia dos fótons com a densidade de energia dos nucleons.

$$\rho(kT) = \tilde{\rho}_\gamma(kT) + \rho_N(kT). \quad (4.17)$$

A função  $\rho_\gamma(kT)$  é dada pela equação (4.3), resta-nos então determinar  $\rho_N(kT)$ . Considerando que a energia cinética dos nucleons é desprezível em comparação com sua energia de repouso\*, a densidade de energia dos nucleons assume a seguinte forma:

$$\rho_N(kT) = m_N c^2 n_N(kT), \quad (4.18)$$

sendo  $m_N$  a massa do nucleon e  $n_N$  a densidade de nucleons.

Como temos quatro espécies distintas de nucleons ( $p, \bar{p}, n, \bar{n}$ ), a equação (4.18) pode ser reescrita sob a forma

$$\rho_N(kT) = 4m_N c^2 n_{Nx}(kT), \quad (4.19)$$

onde  $n_{Nx}(kT)$  é dado por (4.8).

Na seção anterior, a equação de estado  $p(kT)$  foi obtida para três formas diferentes de potenciais: potencial retangular ( $Pr$ ), potencial fenomenológico com hardcore ( $Phc$ ) e potencial fenomenológico com softcore ( $Psc$ ). Como o modelo  $\gamma + N$  com  $Psc$  não é válido na região de pressão negativa, vamos analisar apenas os outros dois.

### Modelo $\gamma + N$ com potencial retangular

Como feito na seção 4.2.1, podemos obter a pressão  $p_R(kT)$  com o auxílio das equações (4.6) e (4.8), e dos resultados de  $a_2(kT)$  [equação (4.10)] e  $a_3(kT)$  (apêndice 2). Já a densidade total de energia  $\rho_R(kT)$  é obtida através das equações (4.17) e (4.19), e do resultado de  $b_2(kT)$  [equação (4.10)].

O gráfico da função  $\gamma_R(kT)$  pode ser visualizado na figura 4.8.

No intervalo de energia, aproximadamente entre  $340 \text{ MeVs}$  e  $390 \text{ MeVs}$  ( $0 \leq \gamma_R(kT) \leq \frac{2}{3}$ ), temos um período inflacionário para o universo!

---

\*Lembremos que todo o desenvolvimento feito no capítulo 2, está baseado em partículas não relativísticas.

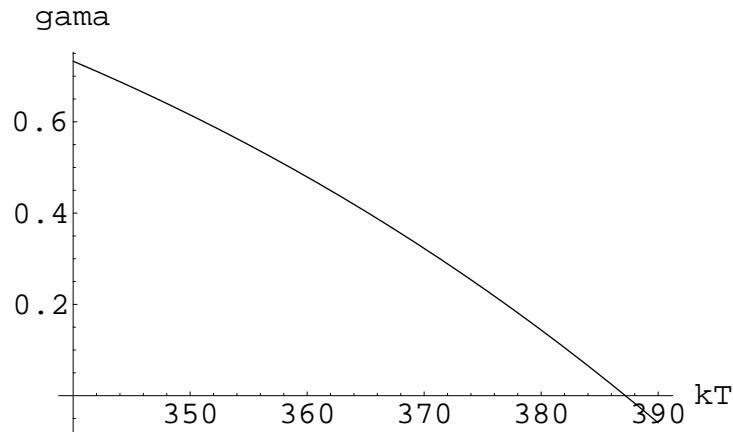


Figura 4.8: Gráfico da função  $\gamma_R(kT)$  pela energia  $kT$  em  $MeV$ .

### Modelo $\gamma + N$ com potencial fenomenológico tipo hardcore

As funções  $p_{HC}(kT)$  e  $\rho_{HC}(kT)$  são obtidas através das mesmas equações do modelo  $\gamma + N$  com  $Pr$ , diferindo apenas nos cálculos dos termos de interação  $a_2$  e  $b_2$ . Esses termos são calculados numericamente, como explicado na seção 4.2.2.

O gráfico da função  $\gamma_{HC}(kT)$  é visto na figura 4.9.

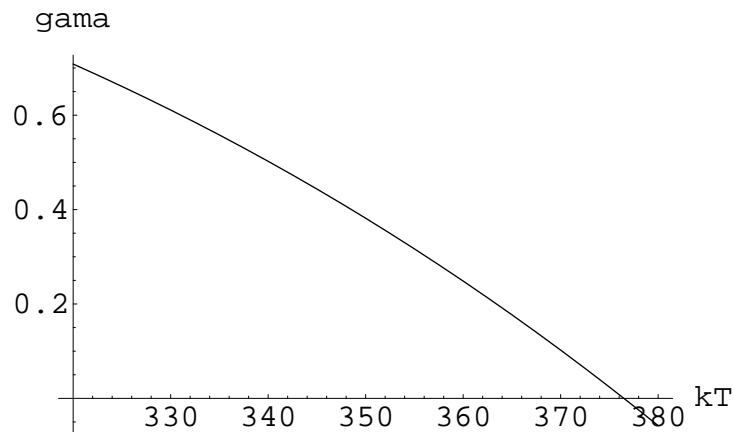


Figura 4.9: Gráfico da função  $\gamma_{HC}(kT)$  pela energia  $kT$  em  $MeV$ .

Novamente, percebe-se que entre o intervalo de energia de  $320 MeVs$  e  $377 MeVs$  ( $0 \leq \gamma_{HC}(kT) \leq \frac{2}{3}$ ), temos um período inflacionário para o universo! Note que neste modelo, o período de aceleração começa  $20 MeVs$  mais cedo quando comparado com o  $\gamma_R(kT)$ .

Um fato relevante a se observar é que ambas as equações de estado  $p_R(kT)$  e  $p_{HC}(kT)$  têm a propriedade de ligar o período dominado pela radiação com o período inflacionário de forma contínua, sem prejudicar a nucleossíntese ( $kT < 4MeVs$ ).



## Capítulo 5

### Discussão Final

O objetivo desta dissertação foi o de tentar obter uma equação de estado fenomenológica a altas energias, e aplicá-la na cosmologia. Para isso, utilizamos um modelo de gás de fótons mais gás de nucleons, sendo estes nucleons aqueles vindos da produção de pares  $\gamma + \gamma \leftrightarrow N + \bar{N}$ . É importante lembrar também que estes nucleons foram tratados como partículas clássicas interagentes e não relativísticas, e que desconsideramos a influência de outras partículas como elétrons, pósitrons, neutrinos etc. Este modelo foi chamado de modelo  $\gamma + N$ .

Uma grande vantagem deste modelo simplista é a ligação contínua entre as equações de estado da radiação ( $p = \frac{\rho}{3}$ ) e de um possível período inflacionário ( $-\rho \leq p < -\frac{\rho}{3}$ ), possibilitando de forma natural a formação dos elementos leves (nucleossíntese). Como se sabe, um dos maiores feitos do modelo padrão do Big Bang é a previsão da abundância destes elementos leves. Segundo este modelo, a nucleossíntese ocorreu em um período inferior à  $kT \simeq 2 \text{ MeV}s$ , utilizando para isso uma equação de estado tipo radiação ( $p = \frac{\rho}{3}$ ).

Outro ponto a favor do modelo  $\gamma + N$  é que, diferentemente dos modelos inflacionários baseados em campo escalar, o mecanismo gerador de inflação deste modelo (atração entre os nucleons) é bastante claro.

Apesar das vantagens descritas acima, devemos lembrar que, para tornar o modelo mais tratável, foram feitas várias simplificações que geram alguns problemas.

O primeiro problema é que, conforme a energia aumenta, o modelo perde a validade. Isto ocorre pois tratamos os nucleons de forma clássica e não relativística. Segundo [13] a noção dos potenciais fenomenológicos de hardcore e softcore, para a interação forte, é válida para energias de até  $350 \text{ MeV}s$ . Acima deste valor, os efeitos relativísticos começam a se tornar bastante importantes. Como visto nas figuras 4.3 e 4.5, a condição para tratarmos os nucleons de forma clássica também perde a validade conforme a energia aumenta. Podemos então, dividir o modelo em três faixas de energia:  $kT \leq 280 \text{ MeV}s$  onde provavelmente o modelo é válido;  $280$

$MeVs < kT \leq 350 MeVs$  onde temos dúvidas, principalmente sobre a aproximação clássica;  $kT > 350 MeVs$  onde provavelmente o modelo não seja válido. Lembremos que o nosso melhor resultado (modelo  $\gamma + N$  com potencial tipo hardcore) indica um período inflacionário entre  $320 MeVs$  e  $377 MeVs$ . Outro fato importante a ser levado em conta é que, segundo as figuras 4.8 e 4.9 (gráficos referentes ao período inflacionário) nada impede que a função  $\gamma(kT) < 0$ , o que é um absurdo (ver seção 1.5). Podemos considerar este fato como outro indicativo da não validade do modelo  $\gamma + N$  a altas energias. Vale observar ainda que, como este modelo não determina o começo da inflação, não é possível estudar os problemas de horizonte e planura.

Outra simplificação que pode gerar problemas se refere aos tipos de interação consideradas entre os nucleons. Sabemos que o potencial retangular não é realístico, porém os potenciais fenomenológicos apresentados no capítulo 3, apesar de realísticos, também não representam todas as possibilidades de interação entre os nucleons. Nesta dissertação, consideramos apenas potenciais centrais de momento angular orbital igual a zero<sup>†</sup> ( $l = 0$ ). Porém, como se sabe, a energias de centenas de  $MeVs$  termos não centrais começam a ser importantes na descrição da interação forte. Já o caso de sistemas de dois nucleons com  $l = 0$ , é um pouco mais complicado. O que ocorre de fato é que o momento angular de cada nucleon dependerá da conservação da helicidade dos fótons no processo de produção de pares. Portanto teremos interações associadas a  $l \neq 0$  que deveriam ter sido consideradas. Além disso, não levamos em conta os possíveis efeitos de “repulsão” fermiônica<sup>‡</sup>, na interação de duas partículas idênticas.

Uma terceira desvantagem do modelo  $\gamma + N$  reside no fato de considerarmos apenas fótons e nucleons como conteúdo relevante. Sabe-se que para energias de centenas de  $MeVs$  teremos uma imensa produção de outras partículas como elétrons, pósitrons, neutrinos etc. E mesmo que as interações entre estas partículas sejam irrelevantes, elas alterarão de forma significativa a densidade de energia do universo [1]. Na verdade, nem sabemos se é coerente falarmos sobre nucleons a centenas de  $MeVs$ . É possível que a essas energias ocorra o desconfinamento, e ao invés de um gás de nucleons teremos um gás quarks, com um possível período de transição de fase quark-nucleon.

Podemos, então, resumir em três as simplificações que trazem dúvidas ao modelo  $\gamma + N$ : aproximação clássica não relativística para os nucleons; simplificação na interação entre estes nucleons; e desconsideração das outras partículas provenientes também da produção de pares.

---

<sup>†</sup>No caso, o momento angular total do sistema de dois nucleons interagentes é zero.

<sup>‡</sup>É possível associarmos, para partículas clássicas, um potencial que simularia a “repulsão” fermiônica.

Uma última análise a ser feita, e talvez a mais importante, é sobre a validade da equação de estado  $p(n, T)$ , dada em (2.11). Será que esta equação continua válida conforme a pressão diminui tornando-se negativa? Apesar de em nenhum momento analisarmos o equilíbrio termodinâmico do sistema, é bem possível que ele seja violado. Outro fato preocupante ocorre quando analisamos os efeitos de um potencial atrativo nas equações  $p(z, T)$  e  $n(z, T)$ , dadas em (2.9) e (2.10). Se observarmos os termos de interação  $b_l s$  (apêndice 1) vemos que, no caso de um potencial atrativo, todos estes termos são positivos. Portanto, as equações  $p(z, T)$  e  $n(z, T)$  são necessariamente positivas. Por outro lado, sabemos que a equação de estado  $p(n, T)$  pode ser negativa quando utilizamos um potencial atrativo. A pergunta então a ser feita é como  $p(n, T)$  torna-se negativa, se ela é obtida de  $p(z, T)$  e  $n(z, T)$ , através da eliminação da fugacidade? Ou em outras palavras, a equação de estado  $p(n, T)$  continua válida para pressões negativas? Um atenuante para esta questão é que na seção 2.4.1 discutimos um meio alternativo de obter os dois primeiros termos de  $p(n, T)$ , baseado no cálculo direto do tensor de stress (ou pressão interna). E segundo este cálculo não há nenhuma restrição em termos pressão negativa para potenciais atrativos.

Por fim, podemos concluir que apesar do modelo  $\gamma + N$  ser demasiadamente simples para garantir um período inflacionário, ele nos faz refletir sobre a importância para a cosmologia, de uma equação de estado a altas energias.

## Apêndice A

### Desenvolvimento Completo da Expansão em Cluster

Como foi visto no começo do capítulo 2, a função de partição de um sistema clássico com interação pode ser escrita como

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N! \lambda^{3N}} Z_N(V, T), \quad (\text{A.1})$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda térmico e  $Z_N(V, T)$  é a integral de configuração dado por:

$$Z_N(V, T) = \int \exp \left\{ -\beta \sum_{i < j} u_{ij} \right\} d^{3N} r = \int \prod_{i < j} (e^{-\beta u_{ij}}) d^{3N} r. \quad (\text{A.2})$$

Introduzindo agora a função de duas partículas ou função de Mayer,

$$f_{ij} = e^{-\beta u_{ij}} - 1, \quad (\text{A.3})$$

podemos reescrever a integral de configuração (A.2), expandindo seu integrando em potências das funções  $f_{ij}$ . Segue-se que

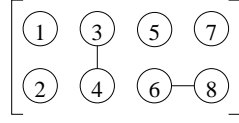
$$Z_N(V, T) = \int \prod_{i < j} (1 + f_{ij}) d^{3N} r = \int \left[ 1 + \sum f_{ij} + \sum f_{ij} f_{kl} + \dots \right] d^{3N} r. \quad (\text{A.4})$$

Nosso principal objetivo agora passa a ser expressar os diversos termos de (A.4) de uma maneira mais tratável. Para isso, usamos um engenhoso recurso: associamos cada integral envolvendo as funções  $f_{ij}$  a um gráfico de  $N$  partículas.

*Exemplo:* Se  $N = 8$ , o termo

$$t_A = \int f_{34} f_{68} d^3 r_1 \dots d^3 r_8 \quad (\text{A.5})$$

que faz parte da integral de configuração  $Z_8(V, T)$  pode ser associado ao gráfico de 8 partículas dado a seguir:

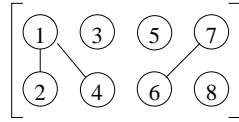


Note que os círculos denotam as partículas e as linhas fixam os pares de partículas interagentes.

Um outro termo de  $Z_8(V, T)$  é

$$t_B = \int f_{12} f_{14} f_{67} d^3 r_1 \dots d^3 r_8, \tag{A.6}$$

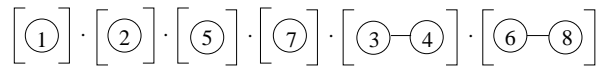
e este termo é associado ao gráfico de 8 partículas que segue



Observado os termos  $t_A$  e  $t_B$  de  $Z_8(V, T)$  e os gráficos a eles associados percebemos ser possível uma fatoração. De fato para  $t_A$  escrevemos,

$$t_A = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \int d^3 r_5 \int d^3 r_7 \int f_{34} d^3 r_3 d^3 r_4 \int f_{68} d^3 r_6 d^3 r_8 \tag{A.7}$$

equivalente ao gráfico



Podemos, então, dizer que o termo  $t_A$  da expansão de  $Z_8$  representa uma *configuração* e que é constituído de dois tipos de aglomerados, ou *clusters*, sendo encontrados quatro clusters de uma partícula cada e dois clusters de 2 partículas cada.

Analogamente,  $t_B$  representa uma configuração (ou estado) possível para um sistema de oito partículas em que há três clusters de uma partícula, um cluster de duas partículas, e um cluster de três partículas.

Apresentemos agora um resumo das definições vistas até o momento:

- **Gráfico de  $N$ -partículas:** É a coleção de  $N$  círculos distintos, numerados  $1, 2, 3, \dots, N$ , com um número de linhas ligando alguns ou todos os círculos.

Se pares distintos de círculos, que são ligados através destas linhas, são denotados pelos símbolos  $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda$  (cada símbolo denotando um par distinto de índices no conjunto  $1, 2, 3, \dots, N$ ) então o gráfico representa o termo

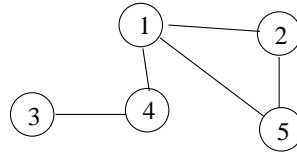
$$\int (f_\alpha f_\beta f_\gamma \dots f_\lambda) d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N \quad (\text{A.8})$$

da expansão (A.4) de  $Z_N$ .

Um gráfico que possuir o mesmo número de partículas ligadas que o descrito anteriormente, mas com um conjunto  $(\alpha', \beta', \gamma', \dots, \lambda')$  de pares interagentes distintos de  $(\alpha, \beta, \gamma, \dots, \lambda)$  será contado como um gráfico distinto, pois representa um termo diferente da expansão.

**- $l$ -cluster:** É um gráfico de  $l$  partículas no qual cada um dos  $l$  círculos, numerados de  $1, 2, 3, \dots, l$ , está diretamente ou indiretamente ligado a cada outro círculo.

O gráfico a seguir é um gráfico de cinco partículas que também é um 5-cluster:

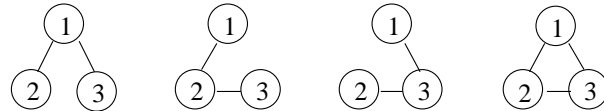


Este gráfico é representado pela seguinte integral:

$$\int f_{12} f_{14} f_{15} f_{25} f_{35} d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_5. \quad (\text{A.9})$$

Note que um cluster não pode ser decomposto em gráficos mais simples da mesma forma que o termo integral a ele associado não pode ser fatorado.

Consideremos mais um exemplo de cluster. Desta vez tome-se um grupo de três partículas; elas podem formar quatro 3-clusters diferentes:



Concluimos que um grupo de  $l$  partículas, com  $l > 2$ , pode levar a uma variedade de  $l$ -clusters, alguns dos quais podem ser iguais em valor (a integração dos termos correspondentes levam a um mesmo valor).

Depois dessa longa digressão, é natural afirmar que

$$Z_N(V, T) = (\text{a soma de todos os gráficos distintos de } N\text{-partículas}), \quad (\text{A.10})$$

devido à correspondência um a um entre os vários termos da expansão (A.4) e os vários gráficos de  $N$  partículas.

A quantificação de (A.10) virá mediante a definição de *integral de cluster*  $b_l$ , a qual leva em conta a variedade de maneiras que um  $l$ -cluster pode apresentar. A integral de cluster é definida por:

$$b_l(V, T) = \frac{1}{l! \lambda^{3(l-1)} V} \times (\text{soma de todos os } l\text{-cluster}) \quad (\text{A.11})$$

Definida dessa maneira  $b_l(V, T)$  é adimensional e se aproxima de um valor finito, no limite  $V \rightarrow \infty$ , sendo que este valor é independente do tamanho e da forma do container (a menos que ele seja muito ondulado).

As propriedades de  $b_l(V \rightarrow \infty, T)$  citadas podem ser justificadas como segue. Mantenha fixa uma das  $l$  partículas, digamos, na posição  $\vec{r}_1$ , e faça a integração sobre as coordenadas das  $(l - 1)$  partículas restantes. Devido ao fato que as funções de Mayer  $f_{ij}$  estendem-se apenas sobre um pequeno intervalo de distâncias, esta integração se estenderia somente sobre uma região limitada do espaço disponível, fornecendo um resultado praticamente independente do volume do container do gás. Depois, fazemos a integral sobre a coordenada  $\vec{r}_1$  da partícula que havia sido fixada e obtemos um fator  $V$ , que cancela o volume  $V$  do denominador de  $b_l(V, T)$ , (A.11). Então, a dependência da integral de cluster no tamanho e forma do recipiente é um “efeito de superfície” e desaparece no limite  $V \rightarrow \infty$ .

Exemplifiquemos o cálculo de algumas integrais de cluster:

$$b_1 = \frac{1}{1! \lambda^{3(1-1)} V} \cdot \left[ \textcircled{1} \right]$$

ou

$$b_1 = \frac{1}{V} \int d^3 r_1 = 1. \quad (\text{A.12})$$

Para  $b_2$  temos:

$$b_2 = \frac{1}{2! \lambda^{3(2-1)} V} \cdot \left[ \textcircled{1} - \textcircled{2} \right]$$

ou

$$b_2 = \frac{1}{2 \lambda^3 V} \int f_{12} d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{1}{2 \lambda^3 V} \iint f(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (\text{A.13})$$

Note que o potencial  $u_{ij}$  e, conseqüentemente, a função  $f_{ij}$  dependem apenas da distância interpartícula  $r_{12} = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ , i.e., o potencial  $u_{ij}$  é do tipo central.

Conhecendo algumas identidades da função delta de Dirac em três dimensões, podemos reescrever (A.13) como:

$$b_2 = \frac{1}{2\lambda^3 V} \iiint f(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \delta^3(\vec{r}_{12} - (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)) d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_{12} \quad (\text{A.14})$$

Integrando (A.14) primeiramente em  $\vec{r}_2$ , segue:

$$b_2 = \frac{1}{2\lambda^3 V} \iint f(|\vec{r}_{12} + \vec{r}_1 - \vec{r}_1|) d^3 r_1 d^3 r_{12} = \frac{1}{2\lambda^3 V} \int d^3 r_1 \int f(r_{12}) d^3 r_{12} \quad (\text{A.15})$$

Finalmente, usando coordenadas esféricas com a origem fixada em uma das duas partículas, temos:

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1}{2\lambda^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(r) r^2 \text{sen}\theta d\phi d\theta dr \Rightarrow \\ b_2 &= \frac{2\pi}{\lambda^3} \int_0^\infty f(r) r^2 dr = \frac{2\pi}{\lambda^3} \int_0^\infty (e^{-u(r)/kT} - 1) r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

O cálculo de  $b_3$  é análogo:

$$b_3 = \frac{1}{3! \lambda^{3(3-1)} V} \cdot \left[ \begin{array}{c} \textcircled{1} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \textcircled{2} \quad \textcircled{3} \end{array} + \begin{array}{c} \textcircled{1} \\ \diagup \quad \text{---} \quad \diagdown \\ \textcircled{2} \quad \textcircled{3} \end{array} + \begin{array}{c} \textcircled{1} \\ \text{---} \quad \diagdown \\ \textcircled{2} \quad \textcircled{3} \end{array} + \begin{array}{c} \textcircled{1} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \textcircled{2} \quad \textcircled{3} \end{array} \right]$$

Na forma integral segue:

$$\begin{aligned} b_3 &= \frac{1}{3! \lambda^6 V} \left[ \int f_{12} f_{13} d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 + \int f_{12} f_{23} d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 \right] + \\ &\frac{1}{3! \lambda^6 V} \left[ \int f_{13} f_{23} d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 + \int f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Como as três primeiras integrais da equação (A.17) têm o mesmo valor numérico escrevemos:

$$b_3 = \frac{1}{6\lambda^6 V} \left[ 3V \iint f_{12} f_{13} d^3 r_{12} d^3 r_{13} + V \iint f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_{12} d^3 r_{13} \right], \quad (\text{A.18})$$



onde usamos o mesmo truque de inserir a identidade escrita em termos da função delta, como foi feito para obtermos  $b_2$ .

Comparando o primeiro termo de (A.18) com  $b_2$  dado por (A.15), podemos, finalmente, escrever  $b_3$  como:

$$b_3 = 2b_2^2 + \frac{1}{6\lambda^6} \iint f_{12}f_{13}f_{23}d^3r_{12}d^3r_{13} \quad (\text{A.19})$$

Usando os  $b_l$  vemos como calcular  $Z_N(V, T)$ , conforme (A.10).

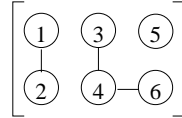
Um gráfico de  $N$  partículas consistirá de um número de clusters dos quais, digamos  $m_1$  são 1-clusters,  $m_2$  são 2-clusters,  $m_3$  são 3-clusters, e assim por diante.

Estamos, então, entendendo  $m_l$  como o número de vezes que um  $l$ -cluster aparece num gráfico de  $N$  partículas.

O conjunto  $\{m_l\}$  deve satisfazer a condição

$$\sum_{l=1}^N lm_l = N, \quad m_l = 0, 1, 2, \dots, N \quad (\text{A.20})$$

Veja o exemplo de um gráfico com  $N = 6$  partículas:

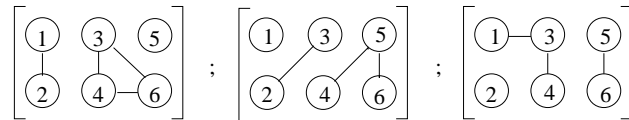


$$\{m_l\} = \{m_1 = 1; m_2 = 1; m_3 = 1; m_4 = m_5 = m_6 = 0\} \quad (\text{A.21})$$

Ou seja,

$$\sum_{l=1}^6 lm_l = 1.1 + 2.1 + 3.1 + 4.0 + 5.0 + 6.0 = 6 \quad (\text{A.22})$$

Perceba que o conjunto dado por (A.21) não especifica um único gráfico. Outros gráficos que podem ser associados a este conjunto são:



Logo um, dado conjunto  $\{m_l\}$  representa uma coleção de gráficos. A soma total dos gráficos associados aos  $\{m_l\}$  é chamada de  $S\{m_l\}$ . Agora, se somarmos sobre

todos os conjuntos  $\{m_l\}$  possíveis estaremos obtendo a soma sobre todos os gráficos de  $N$  partículas. Podemos escrever então

$$Z_N(V, T) = \sum_{\{m_l\}} S\{m_l\} \quad (\text{A.23})$$

onde a somatória linha em (A.23) percorre todos os conjuntos que estão de acordo com o vínculo (A.20).

Procuramos avaliar  $S\{m_l\}$ . O conjunto dos  $l$ -cluster, em número de  $m_l$ , são contados assim:

$$\left[ \text{○} \right]^{m_1} \left[ \text{○} \text{---} \text{○} \right]^{m_2} \left[ \begin{array}{c} \text{○} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{○} \text{---} \text{○} \end{array} \right]^{m_3} \dots$$

De forma geral, podemos expressar esta contagem como:

$$\prod_l (\text{soma sobre todos os } l\text{-clusters})^{m_l}. \quad (\text{A.24})$$

As integrações em (A.4) têm valores que são determinados, em essência, pela configuração do sistema: não interessa realmente qual é a terceira partícula ou qual é a oitava. Apenas os tipos de interação é que vão determinar quantas funções  $f_{ij}$  aparecerão sob o sinal de integração.

Logo, se permutarmos as  $N$  partículas do gráfico, obteremos  $N!$  sistemas de mesma configuração que também precisam ser contados. Portanto, multiplicamos (A.24) por  $N!$ .

Observe que todas as  $l$  partículas de um  $l$ -cluster podem ser permutadas entre si sem provocar alteração em (A.24), nosso sistema de contagem. Portanto, devemos dividir (A.24) por  $(l!)^{m_l}$  para cada valor de  $l$ , dando um divisor total de  $(1!)^{m_1} (2!)^{m_2} (3!)^{m_3} \dots = \prod_l (l!)^{m_l}$ . Descontamos assim as trocas de partículas dentro de cada cluster.

Há ainda mais um divisor de (A.24).  $l$ -clusters formados por partículas diferentes dão a mesma configuração, i.e., permutações de  $l$ -clusters entre si devem ser descontadas; isto para cada um dos clusters. Então, dividimos (A.24) por  $(m_1)! (m_2)! (m_3)! \dots = \prod_l (m_l)!$ .

Com (A.24) e as observações acima, acabamos as contagens, e encontramos  $S\{m_l\}$  como

$$S\{m_l\} = N! \prod_l \frac{(\text{soma sobre todos os } l\text{-clusters})^{m_l}}{(m_l)! (l!)^{m_l}} \quad (\text{A.25})$$

Porém, da definição de integral de cluster, (A.11), temos

$$(\text{soma de todos os } l\text{-clusters}) = l! \lambda^{3(l-1)} V b_l \quad (\text{A.26})$$

Substituindo (A.26) em (A.25), vêm:

$$S\{m_l\} = N! \prod_l \frac{(l! \lambda^{3(l-1)} V b_l)^{m_l}}{(m_l)! (l!)^{m_l}} = N! \prod_l \frac{\lambda^{3l m_l}}{(m_l)!} \left( \frac{V b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l} \Rightarrow \quad (\text{A.27})$$

$$S\{m_l\} = N! \lambda^{3 \sum_l l m_l} \prod_l \frac{1}{(m_l)!} \left( \frac{V b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l}; \quad (\text{A.28})$$

que pode ser reecrita usando o vínculo (A.20):

$$S\{m_l\} = N! \lambda^{3N} \prod_l \frac{1}{(m_l)!} \left( \frac{V b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l} \quad (\text{A.29})$$

A integral de configuração (A.23) fica, portanto

$$Z_N(V, T) = N! \lambda^{3N} \sum'_{\{m_l\}} \left\{ \prod_l \frac{1}{(m_l)!} \left( \frac{V b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l} \right\} \quad (\text{A.30})$$

A função de partição o sistema segue, agora, das equações (A.30) e (A.1):

$$Q_N(V, T) = \sum'_{\{m_l\}} \left\{ \prod_l \frac{1}{(m_l)!} \left( \frac{V b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l} \right\} \quad (\text{A.31})$$

A somatória linha é complicada pela condição restritiva (A.20) a ser obedecida por todo conjunto  $\{m_l\}$ . Uma possibilidade de contornarmos este problema é considerarmos a função de partição macro-canônica do sistema:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N(V, T) \quad (\text{A.32})$$

onde  $z$  é a fugacidade. Escrevemos

$$z^N = z^{\sum_l m_l} = \prod_l (z^l)^{m_l} \quad (\text{A.33})$$

e substituimos os resultados (A.31) e (A.33) em (A.32):

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{m_l\}} \left\{ \prod_{l=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{(m_l)!} \left( \frac{V z^l b_l}{\lambda^3} \right)^{m_l} \right] \right\} \quad (\text{A.34})$$

Uma somatória restrita sobre os conjuntos  $\{m_l\}$ , submetida a condição (A.20), seguida de uma somatória sobre todos os valores de  $N$  equivale a uma somatória sem vínculos sobre todos os conjuntos possíveis  $\{m_l\}$ . Logo

$$\begin{aligned} \Theta(z, V, T) &= \sum_{m_1, m_2, \dots = 0}^{\infty} \left\{ \prod_{l=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{(m_l)!} \left( z^l b_l \frac{V}{\lambda^3} \right)^{m_l} \right] \right\} \\ &= \prod_{l=1}^{\infty} \left\{ \sum_{m_l=0}^{\infty} \left[ \frac{1}{(m_l)!} \left( z^l b_l \frac{V}{\lambda^3} \right)^{m_l} \right] \right\} \\ &= \prod_{l=1}^{\infty} \left[ \exp \left( z^l b_l \frac{V}{\lambda^3} \right) \right] \Rightarrow \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

$$\Theta(z, V, T) = \exp \left[ \sum_{l=1}^{\infty} \left( z^l b_l \frac{V}{\lambda^3} \right) \right] \quad (\text{A.36})$$

A equação (A.36) representa a função de partição do ensemble macro-canônico, de um sistema estatístico clássico, que possui interação.

## Apêndice B

### Cálculo do $a_3(kT)$ para o potencial retangular

Através de um método análogo ao da seção 2.5.2, pretendemos calcular o terceiro coeficiente do virial  $a_3(kT)$ , dado por

$$a_3(kT) = \frac{-1}{3\lambda^6} \int_0^\infty \int f_{12} f_{13} f_{23} d^3 r_{12} d^3 r_{13}, \quad (\text{B.1})$$

referente a um potencial retangular:

$$V(r) = \left\{ \begin{array}{ll} +\infty, & \text{se } r \leq r_1 \\ -V_0 & \text{se } r_1 < r \leq r_2 \\ 0 & \text{se } r > r_2 \end{array} \right\} \quad (\text{B.2})$$

As funções de duas partículas, dadas por

$$f_{ij} = e^{-u_{ij}/kT} - 1, \quad (\text{B.3})$$

podem ser reescritas de acordo com (B.2):

$$f_{ij}(r) = \left\{ \begin{array}{ll} -1 & \text{se } r \leq r_1 \\ e^{+\beta V_0} - 1 & \text{se } r_1 < r \leq r_2 \\ 0 & \text{se } r > r_2 \end{array} \right\}, \quad i = 1, 2, 3 \text{ e } j = 2, 3, \quad (\text{B.4})$$

onde  $\beta = \frac{1}{kT}$ .

Como (B.4) é constante, a integral (B.1) resume-se ao cálculo de volumes, sob certas restrições. Utilizando (B.4), podemos separar o coeficiente  $a_3$  da seguinte forma:

$$a_3 = \frac{1}{3\lambda^6} \left\{ \int_0^{r_1} \left[ \int' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12} - (e^{+\beta V_0} - 1) \int_{r_1}^{r_2} \left[ \int'' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12} \right\} \quad (\text{B.5})$$

Para entender melhor como calcular as integrais dentro dos colchetes, analisemos a figura B.1, referente a integral linha de (B.5).

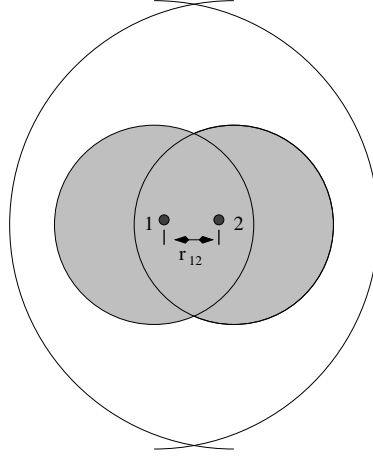


Figura B.1: Configuração da integral linha.

Na figura B.1 estão desenhadas quatro esferas, duas centradas na partícula 1 e duas centradas na partícula 2. As esferas hachuradas representam o alcance da interação de hardcore, portanto estas esferas têm raio  $r_1$ . E as esferas externas representam o alcance do poço quadrado, portanto estas esferas têm raio  $r_2$ .

Segundo a figura B.1, a região dada pela integral linha, pode ser separada em três regiões distintas: a primeira região é dada pela intersecção das duas esferas hachuradas, onde as funções  $f_{13} = f_{23} = -1$ ; a segunda região é dada pelas partes não interceptantes das esferas hachuradas, sendo neste caso  $f_{13} = -1$  e  $f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$  ou vice-versa; e a terceira região é dada pela parte em branco da figura B.1 (referente a intersecção das esferas externas), menos as esferas hachuradas, e neste caso  $f_{13} = f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$ . Note que qualquer região fora da intersecção das esferas externas faz com que  $f_{13}$  ou  $f_{23}$  seja zero. Ou seja, estas três regiões compreendem todas as possíveis regiões no qual a partícula 3 pode visitar sem que as as funções  $f_{13}$  ou  $f_{23}$  sejam zero.

Voltemos agora nossa atenção para a integral duas linhas de (B.5). De forma análoga à integral linha, pode-se definir todas as possíveis regiões de integração onde as funções  $f_{13}$  e  $f_{23}$  são diferentes de zero. Porém, como a distância  $r_{12}$  varia de  $r_1$  até  $r_2$ , devemos quebrar a segunda integral de (B.5) em três configurações:

$$\int_{r_1}^{r_2} [\dots] d^3 r_{12} = \left\{ \int_{r_1}^{2r_1} [\dots] d^3 r_{12} + \int_{2r_1}^{r_2-r_1} [\dots] d^3 r_{12} + \int_{r_2-r_1}^{r_2} [\dots] d^3 r_{12} \right\}, \quad (\text{B.6})$$

onde os termos entre colchetes são

$$[\dots] = \int'' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \quad (\text{B.7})$$

A configuração da integral duas linhas referente ao primeiro termo de (B.6) é dada na figura B.2.

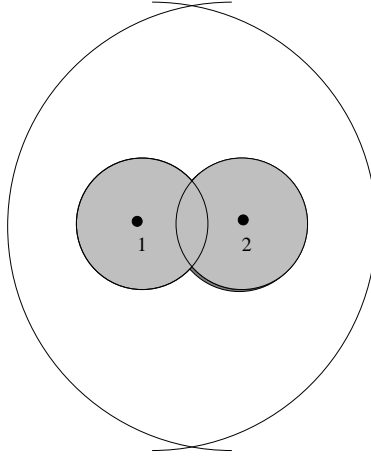


Figura B.2: Configuração da integral duas linhas referente a  $\int_{r_1}^{2r_1} [\dots] d^3 r_{12}$ .

Na figura B.2 vemos que as regiões pertinentes de integração, desta configuração, são análogas às três regiões da figura B.1. Porém, é importante notar que as partículas 1 e 2 estão localizadas na região externa da intersecção das duas esferas hachuradas, e conseqüentemente no limite superior  $2r_1$  estas esferas apenas se tocam.

A configuração da integral duas linhas referente ao segundo termo de (B.6) é dada na figura B.3.

Com o auxílio da figura B.3 pode-se determinar duas regiões distintas de integração: a primeira região é dada pelas esferas hachuradas, onde  $f_{13} = -1$  e  $f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$  ou vice-versa; e a segunda região é dada pela parte em branco (referente à intersecção das duas esferas externas), menos a parte hachurada, e neste caso  $f_{13} = f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$ . Note que no limite superior  $r_2 - r_1$  a borda da esfera hachurada da partícula 1 toca a borda da esfera externa da partícula 2.

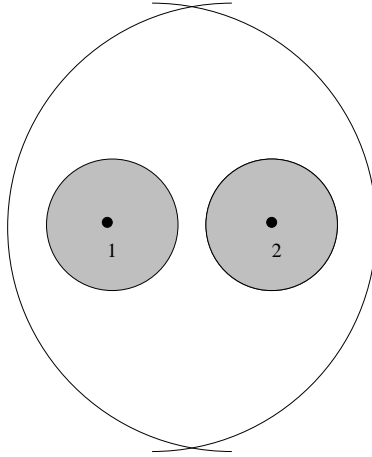


Figura B.3: Configuração da integral duas linhas referente a  $\int_{2r_1}^{r_2-r_1} [\dots] d^3r_{12}$ .

A configuração da integral duas linhas referente ao terceiro e último termo de (B.6) é dada na figura B.4.

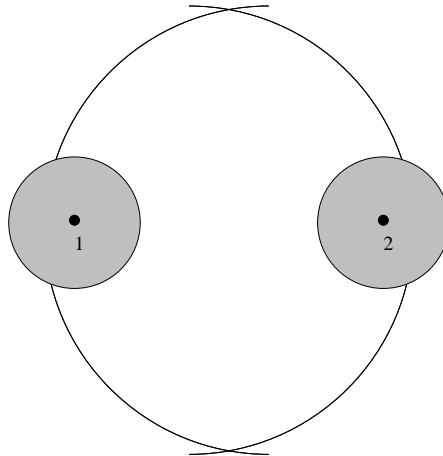


Figura B.4: Configuração da integral duas linhas referente a  $\int_{r_2-r_1}^{r_2} [\dots] d^3r_{12}$ .

Com o auxílio da figura B.4 pode-se novamente determinar duas regiões distintas de integração: a primeira região é dada pela parte hachurada que está dentro da intersecção das esferas externas, onde  $f_{13} = -1$  e  $f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$  ou vice-versa; e a segunda região é dada pela parte em branco (referente a intersecção das duas esferas externas), menos a primeira região, e neste caso  $f_{13} = f_{23} = (e^{+\beta V_0} - 1)$ .

É importante ressaltar que as configurações das figuras B.2, B.3 e B.4 são válidas no caso em que temos a condição  $r_2 \geq 3r_1$ .



Voltando então para a equação (B.1), podemos reescreve-la como:

$$a_3(\beta) = \frac{-1}{3\lambda^6} [I_1 + I_2 + I_3 + I_4], \quad (\text{B.8})$$

sendo

$$I_1 = (-1) \int_0^{r_1} \left[ \int' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12}, \quad (\text{B.9})$$

$$I_2 = (e^{+\beta V_0} - 1) \int_{r_1}^{2r_1} \left[ \int'' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12}, \quad (\text{B.10})$$

$$I_3 = (e^{+\beta V_0} - 1) \int_{2r_1}^{r_2 - r_1} \left[ \int'' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12}, \quad (\text{B.11})$$

$$I_4 = (e^{+\beta V_0} - 1) \int_{r_2 - r_1}^{r_2} \left[ \int'' f_{13} f_{23} d^3 r_{13} \right] d^3 r_{12}. \quad (\text{B.12})$$

Lembremos ainda que  $I_1$  é resolvida com a auxílio da figura B.1,  $I_2$  é resolvida com a auxílio da figura B.2,  $I_3$  é resolvida com a auxílio da figura B.3 e  $I_4$  é resolvida com a auxílio da figura B.4.

Para calcular estas quatro integrais basta saber calcular três tipos diferentes de volumes:

### Volume da esfera

O volume da esfera é dado por,

$$V_1^{r_0} = \frac{4}{3} \pi r_0^3, \quad (\text{B.13})$$

onde  $r_0$  é o raio da esfera.

### Volume da intersecção de duas esferas de raios idênticos

Este volume foi calculado na seção 2.5.2, e é dado por

$$V_2^{r_0} = \frac{4\pi}{3} \left\{ r_0^3 - \frac{3r_0^2 r_{12}}{4} + \frac{r_{12}^3}{16} \right\}, \quad (\text{B.14})$$

sendo  $r_0$  o raio das esferas e  $r_{12}$  a distância de separação de seus centros.

**Volume da intersecção de duas esferas de raios diferentes**

Este terceiro volume é um pouco mais complicado de se calcular, porém as integrais a serem resolvidas, como nos outros casos, continuam sendo triviais. Apresentaremos apenas o resultado:

$$\begin{aligned}
 V_3^{r_1, r_2} = & \frac{2\pi}{3} \left\{ r_1^3 - \frac{r_1^2 (r_1^2 - r_2^2)}{2r_{12}} - \frac{r_1^2 r_{12}}{2} - r_{12}^3 + \frac{(r_1^2 - r_2^2)^4}{16r_{12}r_1^4} + \frac{r_{12}^7}{16r_1^4} \right\} + \\
 & \frac{2\pi}{3} \left\{ \frac{3r_{12}^3 (r_1^2 - r_2^2)^2}{8r_1^4} + \frac{r_{12}^5 (r_1^2 - r_2^2)}{4r_1^4} + \frac{r_{12} (r_1^2 - r_2^2)^3}{4r_1^4} - \frac{3r_2^2 r_{12}}{2} \right\} + \\
 & \frac{2\pi}{3} \left\{ \frac{3r_2^2 (r_1^2 - r_2^2)^2}{8r_1^2 r_{12}} + \frac{3r_2^2 r_{12} (r_1^2 - r_2^2)}{4r_1^2} + \frac{3r_2^2 r_{12}^3}{8r_1^2} \right\} + \\
 & \frac{2\pi}{3} \left\{ \frac{3r_{12}^3}{2} - \frac{3r_{12} (r_1^2 - r_2^2)^2}{8r_1^2} - \frac{3r_{12}^3 (r_1^2 - r_2^2)}{4r_1^2} - \frac{3r_{12}^5}{8r_1^2} + r_2^3 \right\} + \\
 & \frac{2\pi (r_1^2 - r_2^2)}{48r_1^4} \left[ 3r_{12}^3 (r_1^2 + r_2^2) - r_{12}^5 - 3r_{12} (r_1^2 + r_2^2)^2 + \frac{(r_1^2 + r_2^2)^3}{r_{12}} \right] + \\
 & \frac{2\pi}{48r_1^4} \left[ 3r_{12}^5 (r_1^2 + r_2^2) - r_{12}^7 - 3r_{12}^3 (r_1^2 + r_2^2)^2 + r_{12} (r_1^2 + r_2^2)^3 \right], \quad (\text{B.15})
 \end{aligned}$$

onde  $r_1$  é o raio da esfera menor,  $r_2$  é o raio da esfera maior e  $r_{12}$  a distância de separação de seus centros.

Apenas a título de completeza, vejamos se (B.15) reduz-se a (B.14) no caso de  $r_1 = r_2 = r_0$ .

$$\begin{aligned}
 V_3^{r_0, r_0} = & \frac{2\pi}{3} \left\{ r_0^3 - \frac{r_0^2 r_{12}}{2} - r_{12}^3 + \frac{r_{12}^7}{16r_0^4} - \frac{3r_0^2 r_{12}}{2} + \frac{3r_0^2 r_{12}^3}{8r_0^2} + \frac{3r_{12}^3}{2} + r_0^3 - \frac{3r_{12}^5}{8r_0^2} \right\} + \\
 & \frac{2\pi}{3} \left\{ \frac{3r_{12}^5 (r_0^2 + r_0^2)}{16r_0^4} - \frac{r_{12}^7}{16r_0^4} - \frac{3r_{12}^3 (r_0^2 + r_0^2)^2}{16r_0^4} + \frac{r_{12} (r_0^2 + r_0^2)^3}{16r_0^4} \right\} \quad (\text{B.16})
 \end{aligned}$$

Simplificando e juntando os termos de mesma potencia em (B.16):

$$V_3^{r_0, r_0} = \frac{4\pi}{3} \left\{ r_0^3 + r_0^2 r_{12} \left( -\frac{1}{4} - \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \right) + r_{12}^3 \left( -\frac{1}{2} + \frac{3}{16} + \frac{3}{4} - \frac{3}{8} \right) \right\} \Rightarrow$$

$$V_3^{r_0, r_0} = \frac{4\pi}{3} \left\{ r_0^3 - \frac{3r_0^2 r_{12}}{4} + \frac{r_{12}^3}{16} \right\}. \quad (\text{B.17})$$

Comparando as equações (B.17) e (B.14) vemos que elas são idênticas, o que condiz com nossas expectativas.

Por fim, com o auxílio das figuras B.1, B.2, B.3 e B.4 e das equações (B.9), (B.10), (B.11), (B.12), (B.13), (B.14) e (B.15), podemos escrever as integrais  $I_1$ ,  $I_2$ ,  $I_3$  e  $I_4$  como função dos volumes  $V_1$ ,  $V_2$  e  $V_3$ .

Definindo

$$f(\beta) \equiv e^{+\beta V_0} - 1, \quad (\text{B.18})$$

segue:

$$I_1 = -4\pi \int_0^{r_1} r_{12}^2 \{V_2^{r_1} - 2f(\beta) [V_1^{r_1} - V_2^{r_1}] + [f(\beta)]^2 [V_2^{r_2} - 2V_1^{r_1} + V_2^{r_1}]\} dr_{12}, \quad (\text{B.19})$$

$$I_2 = 4\pi f(\beta) \int_{r_1}^{2r_1} r_{12}^2 \{V_2^{r_1} - 2f(\beta) [V_1^{r_1} - V_2^{r_1}] + [f(\beta)]^2 [V_2^{r_2} - 2V_1^{r_1} + V_2^{r_1}]\} dr_{12}, \quad (\text{B.20})$$

$$I_3 = -4\pi f(\beta) \int_{2r_1}^{r_2-r_1} r_{12}^2 \{2f(\beta)V_1^{r_1} - [f(\beta)]^2 [V_2^{r_2} - 2V_1^{r_1}]\} dr_{12}, \quad (\text{B.21})$$

$$I_4 = -4\pi f(\beta) \int_{r_2-r_1}^{r_2} r_{12}^2 \{2f(\beta)V_3^{r_1,r_2} - [f(\beta)]^2 [V_2^{r_2} - 2V_3^{r_1,r_2}]\} dr_{12}. \quad (\text{B.22})$$

Lembremos que tanto  $V_2$  quanto  $V_3$  dependem de  $r_{12}$ .

## Referências

- [1] J. V. Narlikar, *Introduction to Cosmology*, 3rd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [2] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology. Principles and Applications of The General Theory of Relativity*, J. Wiley, New York, 1972.
- [3] R. Aldrovandi & J.G. Pereira, *An Introduction to Physical Cosmology*, notas internas do IFT, 2000.
- [4] A. R. Liddle & D. H. Lyth, *Cosmological Inflation and Large-Scale Structure*, University Press, Cambridge, 2000.
- [5] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2nd. ed., Butterworth Heinemann, Oxford, 2001.
- [6] Landau e Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 2nd ed., Butterworth Heinemann, 1987.
- [7] R. H. Fowler, *Statistical Mechanics*, 2nd ed., Cambridge, 1955.
- [8] H. M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 2*, 3rd ed., Edgard Blücher, 1996.
- [9] Ya. B. Zeldovich and I. D. Novikov, *Relativistic Astrophysics II: The Structure and Evolution of the Universe*, University of Chicago Press, 1981.
- [10] H. Enge, *Introduction to nuclear physics*, Addison-Wesley, 1966.
- [11] T. M. Kuckuk, *Física Nuclear*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1993.
- [12] T. Hamada & I. D. Johnston, *A Potential Model Representation of Two-Nucleon Data Below 315 MeV*, Nuclear Physics 34, 382, 1962.
- [13] R. Reid, *Local Phenomenological Nucleon-Nucleon Potentials*, Annals of Physics 50, 411, 1968.
- [14] R. Aldrovandi, J. Gariel & G. Marçilhacy, *On the pre-nucleosynthesis cosmological period*, artigo não publicado.

- [15] Landau e Lifshitz, *Statistical Mechanics*, , Pergamon Press, 1970.
- [16] K.C. Chung, *Introdução à física nuclear*, Ed. UERJ, 2001.