



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT-T.009/07

Equação de Estado para o Universo Primordial

Léo Gouvêa Medeiros

Orientador

Prof. Dr. Ruben Aldrovandi

Setembro de 2007

Dedico este trabalho
aos meus filhos.

Agradecimentos

À minha mãe e a meu pai que têm me apoiado nesta fase de transição.

À minha esposa Debora Hashiguchi por todo o carinho demonstrado durante estes quatro anos.

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

Ao meu orientador Prof. Ruben Aldrovandi pela excelente orientação.

Ao Prof. Pimentel e à Gabi, pela grande amizade.

Aos pesquisadores R. Kamiński e L. Leśniak que responderam prontamente as minhas dúvidas sobre o espalhamento káon-káon.

A professora Silmara, por ter sido a primeira pessoa a me falar sobre cosmologia. Eu tinha apenas 10 anos.

Ao Nicolai Gromov, meu primeiro professor sobre cosmologia. Ele ministrou o curso de fundamentos de cosmologia oferecido pelo planetário do parque do Ibirapuera. Isso foi entre 1993 e 1995.

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

Ao pessoal da sala 7 e à todos os 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

O principal objetivo desta tese é explorar o papel das interações nucleares durante o universo primordial. Para tanto, importamos para a cosmologia um formalismo da mecânica estatística de equilíbrio baseado em sistemas interagentes relativísticos. A partir deste formalismo e utilizando uma abordagem fenomenológica das interações nucleares, construímos equações de estado cosmológicas constituídas de fótons, léptons e hádrons interagentes, e aplicamos estas equações no modelo padrão da cosmologia.

Supondo certas extrapolações, as equações de estado propostas são capazes de gerar um regime de expansão acelerada primordial (inflação) conectado continuamente com a era da radiação existente durante a nucleossíntese. Este período inflacionário é suficientemente intenso para resolver os problemas de planura e horizonte, permitindo também uma explicação natural de porque o universo está se expandindo. Contudo, devemos ressaltar que todos estes resultados são obtidos apenas para um universo simétrico de matéria e antimatéria.

Resumidamente falando, o trabalho realizado sugere que os processos de interação nuclear são importantes para a evolução do universo primordial podendo inclusive ser os responsáveis pelo período inflacionário.

De uma perspectiva mais ampla, esta tese também tem por objetivo estabelecer um procedimento formal capaz de incluir termos de interação como fonte de gravitação na cosmologia. Este procedimento é baseado na teoria de ensembles da mecânica estatística, e em princípio pode ser aplicado sempre que o fluido cósmico estiver em equilíbrio termodinâmico.

Palavras Chaves: cosmologia; equações de estado; interação forte; sistemas estatísticos com interação; hádrons.

Áreas do conhecimento:1.05.01.03-7.

Abstract

The main purpose of this thesis is to explore the role of the nuclear interactions during the early universe. For that, we import to cosmology an equilibrium statistical mechanics formalism based for relativistic interacting systems. Using this formalism and a phenomenological approach of the nuclear interactions, we built cosmological equations of state including photons, leptons and interacting hadrons and apply them to the cosmological standard model.

Supposing certain extrapolations, the proposed equations of state are able to produce a primordial acceleration (inflation) continually linked with the radiation era present during the nucleosynthesis. This inflationary period is effective enough to solve the flatness and horizon problems, and it still allows a natural explanation for why the universe is expanding. However, we must stress that all these results are obtained only for a matter-antimatter symmetric universe.

The research made suggest that the nuclear interactions are important for the early universe evolution and it might be the responsible for the inflationary period.

This thesis has also the purpose of establishing a formal procedure able to include interaction terms as sources of gravitation in cosmology. This procedure is based in the ensemble theory of statistical mechanics, and can in principle be applied whenever the cosmic fluid is in thermodynamical equilibrium.

Índice

Introdução	1
1 Universo Primordial Ideal	6
1.1 Introdução ao modelo cosmológico padrão	6
1.2 Características gerais do universo pré-nucleossíntese	9
1.3 Condição de equilíbrio para o fluido cósmico	14
1.4 Introdução à teoria geral da inflação	20
1.4.1 Motivação dos modelos inflacionários	20
1.4.2 Características gerais da inflação	23
2 Sistemas Estatísticos Interagentes	25
2.1 Sistemas estatísticos com uma componente	25
2.1.1 Expansão em termos da constante de acoplamento	26
2.1.2 Expansão em termos da fugacidade	31
2.2 Equações de estado	46
2.2.1 O significado físico das quantidades p , ρ e n	50
2.2.2 Comparação explícita entre as série z e n para a pressão	55
2.2.3 Estabilidade termodinâmica	57
2.3 Sistemas multicomponentes	59
2.3.1 Sistema multicomponente em termos das fugacidades	60
2.3.2 Equações de estado multicomponentes	62
3 Teoria do Espalhamento e o Problema de Dois Corpos	64
3.1 Relação da matriz S com o operador $\hat{S}$	64
3.2 O problema de dois corpos	70
3.2.1 Relação da matriz S_2 com as defasagens δ_l	70
3.2.2 Relação do segundo coeficiente da fugacidade com δ_l	73
4 Interação Hadrônica	78
4.1 Características gerais dos sistemas hadrônicos	78
4.1.1 Hádrons relevantes para o universo Pns	79

4.2	Abordagem fenomenológica da interação hadrônica	82
4.2.1	Interação entre píons, káons e nucleons	85
5	Universo Primordial Real	94
5.1	Considerações gerais para o universo Pns real	94
5.2	Equações de estado primordiais	96
5.2.1	EoS para hádrons	97
5.2.2	EoS de partículas ideais	105
5.2.3	EoS completas	106
5.3	Validade das equações de estado na cosmologia	109
5.3.1	Instabilidade nas EoS cosmológicas	110
5.3.2	Desconfinamento	112
5.3.3	Convergência das séries de ρ e p	113
5.4	Consequências cosmológicas	116
5.4.1	O fator de escala $a(kT)$ e o tempo $t(kT)$ para curvatura nula .	117
5.4.2	O regime inflacionário	119
5.4.3	Origem e evolução do universo para $k = 0$	127
6	Considerações Finais	130
A	Sistema Estatístico Relativístico Ideal	132
A.1	Estatística clássica	133
A.2	Estatística quântica	136
A.3	Contagem de diagramas conexos	140
B	Cálculo do Traço de $\hat{W}$ e Relações entre $\hat{T}$, $\hat{\Omega}$ e $\hat{S}$.	143
B.1	Extensão analítica	143
B.2	Identities entre operadores	146
C	Cálculo Explícito dos Coeficientes do Virial	148
C.1	Sistema de uma componente	148
C.2	Sistema de duas componentes	149
D	Limites Não Relativísticos	152
D.1	O espalhamento não relativístico	152
D.2	O segundo coeficiente da fugacidade	160
E	Formalismo de Potenciais Separáveis	162

F	Ajuste e Gráficos das Funções Defasagens	165
F.1	Espalhamento $\pi\pi$	165
F.1.1	Onda S	165
F.1.2	Onda P	166
F.1.3	Onda D	167
F.2	Espalhamento πK	167
F.2.1	Onda S	167
F.2.2	Onda P	168
F.3	Espalhamento πN	168
F.3.1	Onda S	169
F.3.2	Onda P	169
F.3.3	Onda D	170
F.4	Espalhamento KK	171
F.4.1	Onda S	172
F.5	Espalhamento KN	172
F.5.1	Onda S	172
F.5.2	Onda P	173
F.5.3	Onda D	174
F.6	Espalhamento NN	175
F.6.1	Onda S	175
F.6.2	Onda P	176
F.6.3	Onda D	177
	Referências	179

Introdução

Até o presente momento, o maior sucesso da cosmologia se deve ao desenvolvimento do chamado modelo padrão do Big Bang. Como se sabe, este modelo foi estabelecido com base em dois princípios condizentes com as observações em larga escala do universo: o *princípio cosmológico*, que postula que o universo é espacialmente homogêneo e isotrópico, e o *princípio de tempo universal* que admite para a variedade $\mathcal{M}$ quadridimensional do espaço-tempo uma topologia de produto direto $\mathcal{M} = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3$, e que permite a adoção de um tempo cosmológico para a folheação da variedade $\mathcal{M}$ [1, 2]. Baseado nestes dois princípios constrói-se um elemento de linha conhecido como intervalo de Friedmann-Robertson-Walker (FRW) [3], [4]. Por outro lado, os termos de fonte na cosmologia podem ser simulados satisfatoriamente através do tensor energia-momento de um fluido perfeito. Então, através da equação de Einstein é possível derivar duas equações de movimento (equações de Friedmann) para a cosmologia. Estas duas equações, juntamente com uma equação que relaciona a pressão p com a densidade de energia ρ , são capazes de descrever a evolução do universo por completo.

A relação entre p e ρ pode ser obtida diretamente através de uma *equação de estado* (EoS) tipo $p(\rho)$, ou indiretamente, quando p e ρ são obtidas através de funções conhecidas como *funções de distribuição*. É bastante razoável supor também que esta relação possa ser determinada pelas várias abordagens da *mecânica estatística* (ME).

Pode-se dividir a mecânica estatística em duas áreas bem definidas [5]: ME no equilíbrio*, cuja abordagem se dá, por exemplo, via ensembles; e ME fora do equilíbrio, caracterizada por funções de distribuição que geram, por exemplo, equações cinéticas, como as equações de Boltzmann e Vlasov-Landau. É importante ressaltar que, enquanto as funções de distribuição podem descrever sistemas estatísticos dentro e fora do equilíbrio, a teoria dos ensembles, cujos entes fundamentais são as funções de partição, só existe para sistemas em equilíbrio.

Em diferentes situações a cosmologia se vale de ambas as abordagens da ME. Por

*Entende-se por equilíbrio o conceito de *equilíbrio termodinâmico*, onde se pode definir a grandeza *temperatura*.

exemplo: equações de estado obtidas via função de partição são usadas para descrever o modelo Λ CDM, os períodos dominados pela radiação ou pela matéria, etc. [6, 7]; já as funções de distribuição determinadas através da equação de Boltzmann são utilizadas nos modelos cosmológicos perturbativos relacionados diretamente com as anisotropias na radiação cósmica de fundo e com o processo de formação de estruturas [8].

Porém, na imensa maioria dos casos, os modelos cosmológicos levam em conta apenas termos cinéticos, esquecendo-se dos chamados *termos dinâmicos* referentes ao processo de interação entre os constituintes. De fato, a cosmologia padrão (sem levar em conta os tratamentos perturbativos) apresenta uma descrição dos constituintes do universo na qual as interações têm o papel somente de produzir novas partículas e termalizar o sistema [1, 6, 9]. Já a cosmologia moderna (perturbativa) introduz os termos de interação através da determinação de funções de distribuição com o uso da equação de Boltzmann [8]. Porém, mesmo nesta abordagem perturbativa, a interação é computada de forma demasiadamente parcial, uma vez que a definição usual do tensor energia momento através das funções de distribuição determina apenas termos cinemáticos da função pressão [10, 11]. Portanto, podemos afirmar de forma contundente que, salvo poucas exceções [12, 13], a ***“cosmologia atual não leva em conta, como fonte direta de gravitação, termos de interação”***.

Antes de começar a discussão sobre a real necessidade da inclusão dos termos dinâmicos na cosmologia, é importante definir quando se pode utilizar, para o fluido cósmico, a abordagem em equilíbrio da ME.

O grande problema que enfrentamos na questão do equilíbrio é que, segundo o modelo padrão baseado na métrica de FRW[†],

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t) \left[\frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \right], \quad (0.1)$$

o fluido cósmico está se expandindo.

Porém, durante o universo primordial, as taxas de reação entre os vários constituintes presentes são muito maiores que a taxa de expansão do universo. Neste caso podemos nos valer do conceito termodinâmico de *expansão quasi-estática* e tratar o fluido cósmico como estando em equilíbrio. Trataremos esta questão de forma mais aprofundada no capítulo 1.

Conforme a temperatura vai diminuindo as componentes do fluido cósmico vão se desacoplando [9, 8]. Surge então a seguinte pergunta: uma vez que uma dada componente separa-se do resto do fluido, será que a condição de equilíbrio para esta componente permanece válida? Através das funções de distribuição, podemos colo-

[†]Via de regra adotaremos $\hbar = c = 1$.

car a questão anterior de forma muito mais precisa. Supondo que a componente desacoplada não tenha auto-interação, será que existe em geral uma função de distribuição de equilíbrio válida no espaço plano em expansão?[‡] A resposta para esta pergunta é não [14]. Provar esta afirmação não é trivial, mas ela está ligada ao fato de não termos vetores de Killing tipo tempo espacialmente constantes em FRW plano [11].

Porém, para certas situações limite, como nos casos de componentes ultra-relativísticas e não-relativísticas, é possível construir funções de distribuição no equilíbrio para o espaço em expansão.

Veja-se que, desde o universo primordial, as partículas “estáveis” que se desacoplam são ultrarelativísticas (fótons e neutrinos) ou não relativísticas (matéria bariônica e escura[§]), e permanecem neste estado até os dias de hoje. Portanto, é lícito tratá-las via a abordagem da ME no equilíbrio.

Concluimos então que o fluido cósmico usual, dentro do modelo do Big Bang pode ser sempre tratado nas condições de equilíbrio termodinâmico, e que o tratamento fora do equilíbrio é necessário somente para a cosmologia perturbativa.

Voltemos agora para a discussão da inclusão dos termos de interação como fonte de gravitação.

Qualitativamente, podemos separar o fluido cósmico completo em três componentes distintas: uma parte cinética T , relacionada com velocidades, uma parte dinâmica V , relacionada com interações e uma parte massiva M , relacionada com as massas de repouso dos constituintes. Deste modo, a condição necessária para que a interação entre os constituintes seja uma fonte de gravitação relevante para a cosmologia é,

$$V(\Delta t) \gtrsim T(\Delta t) + M(\Delta t), \quad (0.2)$$

onde Δt representa um determinado período cosmológico.

Como cada período apresenta características distintas (principalmente no que se refere a interações), vamos nos limitar a discutir apenas dois períodos cosmológicos: universo recente, onde $z \lesssim 20$, e universo *pré-nucleossíntese* (Pns), onde $kT \gtrsim 20 \text{ MeV}$ ou $z \gtrsim 10^{12}$.

Das várias componentes do universo recente (fótons, matéria não-relativística, etc), uma das mais importantes para sua evolução é a matéria não-relativística. De fato, no momento atual ($z = 0$) a massa de repouso M_{NR} desta componente

[‡]Devido aos dados cosmológicos mais recentes, vamos supor durante toda a tese que $k = 0$.

[§]Estamos considerando que a matéria escura já era não relativística no período do seu desacoplamento.

corresponde a aproximadamente 30% do conteúdo total do universo [15], e conforme recuamos para o passado ela se torna cada vez mais relevante [16]. É importante notarmos que a matéria não-relativística possui uma interação V_{NR} (interação *gravitacional Newtoniana*), responsável pela formação e evolução das estruturas do universo, e que os dados experimentais indicam um aumento na relevância desta interação conforme z diminui (as estruturas estão crescendo) [17]. Como o termo cinético T_{NR} é completamente desprezível quando comparado com M_{NR} , a importância da interação gravitacional local V_{NR} para a cosmologia pode ser determinada através da comparação entre M_{NR} e V_{NR} . Não pretendemos responder a esta questão nesta tese, porém vamos explicitar três principais efeitos que controlam a efetividade de V_{NR} .

1. Conforme o fator de escala $a(t)$ aumenta, a distância de interação $d = a(t)r$ (onde r é a distância comóvel) também o faz, diminuindo assim a contribuição cosmológica de V_{NR} .
2. Em período de expansão desacelerada (acelerada), o horizonte comóvel aumenta (diminui), aumentando (diminuindo) a participação cósmica da interação gravitacional local.
3. Conforme o universo evolui, os constituintes básicos do fluido cósmico se alteram, passando por estágios como os de partículas fundamentais (nucleons, etc.), nuvens de hidrogênio, galáxias e aglomerados de galáxias.

Lembrando que a interação gravitacional Newtoniana é uma interação de *longo alcance*, é de se pensar se ela de fato contribuirá como fonte de gravitação para o universo atual.

No universo Pns, a alta temperatura do fluido cósmico garante a existência de uma grande quantidade de partículas (γ, ν, π, K , etc.), sendo que a grande maioria destas partículas interage entre si[¶]. Então, a pergunta a se fazer é: os vários processos de interação são de fato importantes para a produção de gravitação no período Pns? Este tipo de análise é relativamente complexo, pois o fluido deve ser analisado como um todo. Lembremos que os termos de interação podem ser positivos ou negativos, dependendo do tipo de interação (repulsiva ou atrativa) e pode haver cancelamentos globais. Apesar disto, resultados recentes do RHIC (*Relativistic Heavy Ion Collider*) [18], indicam que um fluido a altíssimas temperaturas (poucas centenas de MeV) possui uma forte interação nuclear entre seus constituintes, sendo inclusive capaz de gerar um estado tipo “líquido” para a matéria hadrônica CGC

[¶]O grau e o tipo de interação variam para cada espécie.

(*Color Glass Condensate*) [19]. Do ponto de vista da QCD, este sistema é constituído basicamente por três quarks (u, d, s) e gluons, e nessa faixa de energia a interação forte entre estes quarks supera em muito as suas energias cinéticas e de repouso. Portanto, para os quarks vale a relação $V_q(\Delta t_{Pns}) \geq T_q(\Delta t_{Pns}) + M_q(\Delta t_{Pns})$. Ainda assim, o fluido cósmico apresenta outras espécies que devem ser computadas para que o critério dado em (0.2) possa ser aplicado. O objetivo central desta tese é desenvolver uma EoS realista, que leve em conta os termos de interação relevantes para o período Pns, e explorar suas consequências para a cosmologia do universo primordial.

A organização geral da tese é a seguinte: no primeiro capítulo daremos uma descrição geral do universo primordial tal qual aparece nos livros textos usuais. Em particular, explicitaremos a idéia abstrata de inflação e suas consequências mais imediatas. O segundo capítulo é dedicado à construção geral da teoria de sistemas estatísticos interagentes em equilíbrio. Neste capítulo mostraremos como associar a parte dinâmica de uma EoS à matriz S de um dado sistema. A ligação da matriz S com a teoria do espalhamento e o problema estatístico de dois corpos é discutida no terceiro capítulo. Mostraremos neste capítulo como escrever a interação entre dois corpos em termos das funções *defasagens*. No capítulo 4 serão apresentados as características gerais da interação forte e suas partículas (hádrons), no regime de baixas energias. Daremos ênfase especial à abordagem experimental da interação hadrônica, via defasagens. A construção da EoS para o universo primordial, bem como suas consequências cosmológicas, são apresentadas no quinto capítulo. Neste capítulo, discutiremos também a validade da EoS proposta, e a possibilidade de um regime inflacionário alavancado pelos efeitos de interação. Os resultados finais são resumidos no sexto e último capítulo, sendo as conclusões da tese apresentadas no final.

Capítulo 1

Universo Primordial Ideal

Neste capítulo, apresentaremos as características gerais do modelo do Big Bang, dando um maior enfoque ao universo primordial tal qual aparece nos livros textos usuais [1, 6, 8, 9, 20]. Estamos interessados em estabelecer o conteúdo de partícula do fluido cósmico, e em como ocorre o processo de termalização deste fluido. Abordaremos também alguns tópicos relacionados ao período inflacionário.

1.1 Introdução ao modelo cosmológico padrão

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 material, 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.

Das quatro interações fundamentais existentes, a mais importante para a cosmologia é a interação gravitacional, que como se sabe é bem descrita pela teoria da Relatividade Geral. Baseado nesta teoria, criou-se um modelo cosmológico padrão, conhecido como modelo do Big Bang.

O modelo do Big Bang é implementado pelas equações de campo da Relatividade Geral, através de dois princípios fundamentais condizentes com as observações em larga escala do universo: o *princípio cosmológico* e o *princípio de tempo universal*. Através destes princípios, obtém-se a métrica de FRW (0.1), e com o auxílio desta, as equações de Friedmann,

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \left[\frac{8\pi G}{3}\rho + \frac{\Lambda}{3}\right] - \frac{k}{a^2} \quad (1.1)$$

e

$$\left(\frac{\ddot{a}}{a}\right) = \left[\frac{\Lambda}{3} - \frac{4\pi G}{3}(\rho + 3p)\right]. \quad (1.2)$$

Nas equações acima $a(t)$ representa o fator de escala, k o parâmetro de curvatura assumindo valores de $-1, 0$ e 1 e Λ a constante cosmológica do tipo geométrica*. Os termos de fonte de gravitação, densidade de energia ρ e pressão p , foram obtidos supondo que o conteúdo do universo é descrito por um tensor energia momento tipo fluido perfeito. O sistema de coordenadas utilizado é o sistema que acompanha a expansão (sistema comóvel).

É possível combinar as duas equações de Friedmann em uma terceira relação que expressa a dependência do fator de escala com os termos de fonte p e ρ :

$$\frac{d}{da}(\rho a^3) = -3pa^2. \quad (1.3)$$

A expressão acima é também consequência direta da conservação covariante do tensor energia momento.

Para fins de comparação com dados cosmológicos observacionais, é interessante definir a função de Hubble e as densidades relativas:

$$H(t) \equiv \frac{\dot{a}}{a}, \quad \Omega \equiv \frac{\rho}{\rho_c} \quad \text{com} \quad \rho_c = \frac{3H_0^2}{8\pi G}, \quad (1.4a)$$

$$\Omega_k \equiv -\frac{k}{a^2 H_0^2} \quad \text{e} \quad \Omega_\Lambda \equiv \frac{\Lambda}{3H_0^2}, \quad (1.4b)$$

onde $H_0 = 73 \pm 4 \text{ Km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$ (constante de Hubble) [22].

Utilizando estas definições, a primeira equação de Friedmann pode ser reescrita como:

$$\frac{H^2}{H_0^2} = \Omega_T + \Omega_k \quad \text{com} \quad \Omega_T = \Omega + \Omega_\Lambda. \quad (1.5)$$

Uma consequência direta desta última equação é que, em princípio, o parâmetro de curvatura k pode ser determinado conhecendo-se o valor de Ω_T e de H . Em particular, com os valores atuais temos:

$$\Omega_{T0} + \Omega_{k0} = 1. \quad (1.6)$$

Para determinar a evolução do universo precisamos, além de (1.1) e (1.2), uma terceira equação que relaciona a pressão com a densidade de energia. Dentro do

*Por constante cosmológica geométrica entende-se que Λ pertence ao lado esquerdo das equações de Einstein.

modelo cosmológico padrão (não perturbativo), esta relação é usualmente obtida de equações de estado derivadas da *mecânica estatística ideal* (sem interação). Segundo o apêndice A, a pressão p_i , a densidade numérica n_i e a densidade de energia ρ_i da i -ésima componente de um fluido ideal são dadas por [1, 6, 8, 9]:

$$n_i = \frac{g_i}{(2\pi)^3} \int f_i(\vec{p}) d^3p, \quad (1.7a)$$

$$\rho_i = \frac{g_i}{(2\pi)^3} \int E_i(\vec{p}) f_i(\vec{p}) d^3p, \quad (1.7b)$$

$$p_i = \frac{g_i}{(2\pi)^3} \int \frac{|\vec{p}|^2}{3E_i(\vec{p})} f_i(\vec{p}) d^3p, \quad (1.7c)$$

onde g_i é a degenerescência, E_i é a relação de dispersão relativística, e $f_i(\vec{p})$ são as funções de distribuição dadas por

$$f_i(\vec{p}) = \frac{1}{[e^{\beta(E_i - \mu_i)} \mp 1]}, \quad \beta \equiv \frac{1}{kT}. \quad (1.8)$$

O sinal superior (inferior) é referente a estatística de Bose-Einstein (Fermi-Dirac). Observação: aqui, o potencial químico $\mu_i = \mu_i^{NR} + m_i$, com μ_i^{NR} sendo o potencial químico não relativístico que normalmente aparece nos livros texto padrão de ME [21].

Nota-se que para aplicarmos (1.7b) e (1.7c) nas equações de Friedmann, precisamos somar sobre todas as i -ésimas componentes.

Os texto clássicos de cosmologia, como [1, 8, 9, 6], seguem este tipo de abordagem.

Existem dois limites bastante importantes das equações (1.7a), (1.7b) e (1.7c) para a caracterização da evolução do universo: limite ultrarelativístico não degenerado ($kT \gg m_i$ e $kT \gg \mu_i$),

$$n_i \simeq \begin{cases} \frac{1,202}{\pi^2} g_i (kT)^3 & \text{(Bose - Einstein)} \\ \frac{3}{4} \frac{1,202}{\pi^2} g_i (kT)^3 & \text{(Fermi - Dirac)} \end{cases}, \quad (1.9)$$

$$\rho_i \simeq \begin{cases} \frac{\pi^2}{30} g_i (kT)^4 & \text{(Bose - Einstein)} \\ \frac{7}{8} \frac{\pi^2}{30} g_i (kT)^4 & \text{(Fermi - Dirac)} \end{cases}, \quad (1.10)$$

$$p_i = \frac{\rho_i}{3}; \quad (1.11)$$

e limite não relativístico ($kT \ll m$),

$$n_i \simeq g_i \left(\frac{m_i kT}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-(m-\mu)/kT}, \quad (1.12)$$

$$\rho_i \simeq m_i n_i, \quad (1.13)$$

$$p_i \simeq n_i kT \ll \rho_i. \quad (1.14)$$

Segundo a cosmologia observacional, o universo atual é constituído de cinco componentes: radiação γ , neutrinos ν , matéria bariônica b , matéria escura dm e energia escura de . O modelo cosmológico mais simples, condizente com os dados experimentais, infere que os neutrinos e a radiação são componentes do tipo ultrarelativístico determinadas por (1.11), a matéria bariônica e escura são do tipo não-relativístico dadas por (1.13) e (1.14) e a energia escura é consequência da existência de uma constante fundamental (constante cosmológica). Note que, neste modelo, todas as cinco componentes evoluem independentemente umas das outras.

Os valores atuais para estas componentes são [22]:

$$\Omega_{\gamma 0} = (4,6 \pm 0,5) \times 10^{-5}; \quad \Omega_{\nu 0} < 0,014 \text{ (95\% L. C.)}; \quad (1.15a)$$

$$\Omega_{b0} = 0,042 \pm 0,005; \quad \Omega_{dm0} = 0,20 \pm 0,04; \quad (1.15b)$$

$$\Omega_{de0} = 0,76 \pm 0,06; \quad \Omega_{T0} = 1,003 \pm 0,017. \quad (1.15c)$$

1.2 Características gerais do universo pré-nucleossíntese

O conceito de universo primordial é bastante vasto e engloba uma série de períodos cosmológicos distintos. Por exemplo, é comum considerar as épocas do desacoplamento matéria-radiação ($kT_\gamma \sim 0,1 \text{ eV}$), da nucleossíntese ($kT_\gamma \sim 1 \text{ MeV}$) e da transição eletrofraca ($kT_\gamma \sim 100 \text{ GeV}$) como pertencentes ao universo primordial. Nesta tese, estamos interessados em um período específico do universo primordial, conhecido como período pré-nucleossíntese (Pns). Definiremos este período como sendo o período imediatamente anterior à nucleossíntese, na qual os nucleons (prótons e nêutrons) estão em equilíbrio termodinâmico com o resto do fluido cósmico ($kT_\gamma \gtrsim 20 \text{ MeV}$). Estritamente falando, qualquer faixa de energia acima de 20 MeV pertence ao período Pns. Porém, nesta tese vamos retringir a análise a até poucas centenas de MeV .

Para estudar o universo Pns, vamos supor que o modelo padrão possa ser extrapolado até períodos anteriores à nucleossíntese primordial. Esta extrapolação não é muito ousada, uma vez que este modelo funciona muito bem até escalas de 1 MeV , sendo inclusive capaz de prever a abundância dos elementos leves [23].

Portanto, adotaremos uma postura otimista e utilizaremos o modelo padrão para tentar descrever o período Pns.

Sabemos que o universo atual é dominado por uma componente de matéria não-relativística mais uma componente de energia escura (Λ), e que as componentes ultrarelativísticas (fótons e neutrinos) são completamente desprezíveis. Porém, conforme retrocedemos ao passado a situação muda de figura. De fato, utilizando as EoS (1.11) e (1.14) em (1.3) é fácil de mostrar que

$$\rho_{\gamma,\nu} = \rho_{\gamma 0,\nu 0} \left(\frac{a_0}{a} \right)^4 \quad \text{e} \quad \rho_{b,dm} = \rho_{b 0,dm 0} \left(\frac{a_0}{a} \right)^3. \quad (1.16)$$

Agora, substituindo estes resultados na primeira equação de Friedmann, vemos que em um determinado momento as componentes ultrarelativísticas sobrepõem todas as outras componentes, incluindo a curvatura. Utilizando os valores experimentais atuais verifica-se que este momento é por volta de $kT_\gamma \sim 1 \text{ eV}$. Portanto, em princípio, as componentes ultrarelativísticas (UR) devem dominar completamente a evolução do universo durante o período Pns*. Um período cosmológico dominado exclusivamente por partículas ideais UR é comumente chamado na literatura de *era da radiação*.

As equações de Friedmann para o universo Pns podem ser escritas como:

$$\left(\frac{\dot{a}}{a} \right)^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho \quad (1.17)$$

e

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

A próxima questão importante é quais são as componentes relevantes do fluido cósmico neste período e, em particular, quais destas componentes são UR . Para responder a esta pergunta deve-se lembrar que, com o aumento de kT , o processo de produção de pares torna-se cada vez mais importante, gerando uma gama variada de partículas. Restringindo a análise a poucas centenas de MeV , podemos listar as várias partículas relevantes baseados no modelo padrão de partículas:

- Bósons fundamentais: fóton (γ).
- Léptons: elétrons (e^-), pósitrons (e^+), muon (μ^-), antimuons (μ^+), neutrinos do elétron e do muon (ν_e, ν_μ) e antineutrinos do elétron e do muon ($\bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu$).

*Mostraremos no capítulo 5 que isto não é bem verdade.

- Hádrons: píons (π^+, π^-, π^0), káons ($K^+, K^-, K^0, \bar{K}^0$), nucleons (p, n) e anti-nucleons ($\bar{p}, \bar{n}$).

Nesta relação devemos chamar a atenção para dois fatos: a poucas centenas de MeV a quantidade de tau (τ^-) e antitau (τ^+) é bastante baixa, e portanto os neutrinos e antineutrinos tauônicos ($\nu_\tau, \bar{\nu}_\tau$) são suprimidos; no caso de hádrons, estamos levando em conta apenas os hádrons estáveis, desprezando assim o conteúdo de partícula das várias ressonâncias (maiores informações são dadas no capítulo 4);

A seguir, listaremos uma série de propriedades destas partículas:

Partícula	Massa (MeV)	Estados de Spin g	Comportamento à 20 MeV
γ	0	2	Ultrarelativístico
e^-, e^+	0,51	2	Ultrarelativístico
μ^-, μ^+	105,66	2	Não relativístico
$\nu_e, \nu_\mu, \bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu$	~ 0	1	Ultrarelativístico
π^+, π^-	139,6	1	Não relativístico
π^0	134,98	1	Não relativístico
K^+, K^-	493,68	1	Não relativístico
$K^0, \bar{K}^0$	497,65	1	Não relativístico
$p, \bar{p}$	938,27	2	Não relativístico
$n, \bar{n}$	939,57	2	Não relativístico

Tabela 1.1: Propriedades das partículas relevantes para o fluido cósmico Pns.

As quantidades termodinâmicas destas partículas podem ser obtidas diretamente das equações (1.7a), (1.7b) e (1.7c), desde que se tenha conhecimento sobre o potencial químico μ_i de cada uma delas. Supondo equilíbrio químico[†], μ_i pode ser determinado através de considerações sobre as leis de conservação obedecidas pelas várias reações possíveis. A regra básica é que μ_i é aditivamente conservada em todas as reações. Em particular:

- Fótons podem ser emitidos ou absorvidos em qualquer reação em número arbitrário, ou seja $\mu_\gamma = 0$. De fato, fazendo $E = h\nu$ em (1.8) reconhecemos a distribuição de Planck para um corpo negro. Os limites experimentais para o potencial químico do fótons são $\mu_\gamma/kT < 9 \times 10^{-5}$ [24].

[†]A idéia de equilíbrio químico na cosmologia está intimamente ligada com a idéia de equilíbrio termodinâmico. Comentaremos mais sobre isso na próxima seção.

- (ii) A reação $\gamma + \gamma \leftrightarrow l + \bar{l}$ implica que os potenciais químicos de partículas e antipartículas são iguais e opostos, $\mu_l = -\mu_{\bar{l}}$.
- (iii) Um possível conjunto de reações que permite determinar os potenciais químicos das várias partículas listadas na tabela 1.1 são:

$$\begin{aligned}
e^- + \bar{\nu}_e &\leftrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu; & n + \bar{p} &\leftrightarrow e^- + \bar{\nu}_e; & n + \bar{p} &\leftrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu; \\
\pi^+ &\leftrightarrow \mu^+ + \nu_\mu; & \pi^- &\leftrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu; & \pi^0 &\leftrightarrow \gamma + \gamma; \\
K^+ &\leftrightarrow \mu^+ + \nu_\mu; & K^- &\leftrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu; & K^0, \bar{K}^0 &\leftrightarrow \pi^0 + \pi^0.
\end{aligned}$$

Portanto, os vários potenciais químicos estão relacionados da seguinte forma:

$$\mu_{e^-} - \mu_{\nu_e} = \mu_{\mu^-} - \mu_{\nu_\mu} = \mu_n - \mu_p; \quad (1.19a)$$

$$\mu_{\pi^+} = \mu_{\mu^+} - \mu_{\bar{\nu}_\mu}; \quad \mu_{\pi^-} = \mu_{\mu^-} - \mu_{\nu_\mu}; \quad \mu_{\pi^0} = 2\mu_\gamma = 0; \quad (1.19b)$$

$$\mu_{K^+} = \mu_{\mu^+} - \mu_{\bar{\nu}_\mu}; \quad \mu_{K^-} = \mu_{\mu^-} - \mu_{\nu_\mu}; \quad \mu_{K^0} = \mu_{\bar{K}^0} = 2\mu_{\pi^0} = 0. \quad (1.19c)$$

Por outro lado, devido ao modelo padrão de partículas[‡], existem apenas quatro quantidades conservadas: carga N_q , número bariônico N_b , número leptônico do elétron N_e e número leptônico do muon N_m . Portanto, devem existir apenas quatro potenciais químicos independentes que tomaremos como sendo os μ_p , μ_{e^-} , μ_{ν_e} e μ_{ν_μ} . Note que uma análise cuidadosa das relações (1.19a), (1.19b) e (1.19c) corrobora esta conclusão.

Estas quatro quantidades conservadas são determinadas através das densidades numéricas das várias espécies em questão. Utilizando os conceitos do modelo padrão de partículas temos:

$$N_q = n_{e^-} - n_{e^+} + n_{\mu^-} - n_{\mu^+} + n_p - n_{\bar{p}} + n_{\pi^-} - n_{\pi^+} + n_{K^-} - n_{K^+}; \quad (1.20a)$$

$$N_b = n_p + n_n - n_{\bar{p}} - n_{\bar{n}}; \quad N_e = n_{e^-} + n_{\nu_e} - n_{e^+} - n_{\bar{\nu}_e}; \quad N_m = n_{\mu^-} + n_{\nu_\mu} - n_{\mu^+} - n_{\bar{\nu}_\mu}; \quad (1.20b)$$

Agora, experimentalmente sabemos que o fluido cósmico é, com boa aproximação, um meio eletricamente neutro, ou seja $N_q \simeq 0$. Sabemos também que a densidade numérica bariônica é muito menor do que a densidade numérica dos fótons. De fato, os dados atuais indicam que $\frac{N_b}{n_\gamma} \leq 10^{-8}$. Esta razão permanece constante

[‡]Por modelo padrão de partículas entende-se o modelo eletrofraco mais QCD.

desde o momento atual até o período Pns, pois durante todo este intervalo N_b é extritamente proporcional a a^{-3} e $n_\gamma \sim (kT)^3$ é aproximadamente proporcional a a^{-3} . Infelizmente, sabe-se muito pouco sobre a densidade numérica dos neutrinos, e portanto não podemos determinar N_e e N_m . Porém, como N_b é pelo menos 8 ordens de grandeza menor do que n_γ , é razoável supor também que N_e e N_m sejam muito menores que n_γ . Sendo assim, dentro de uma boa aproximação, podemos considerar os quatro números quânticos como sendo iguais a zero:

$$N_q = N_b = N_e = N_m = 0. \quad (1.21)$$

Agora, utilizando (1.21), fica fácil determinar os potenciais químicos. Das equações (1.20a) e (1.20b) e lembrando que os μ 's de partículas e antipartículas têm sinais opostos, concluímos que N_q , N_b , N_e e N_m são funções ímpares dos quatro potenciais químicos independentes μ_p , μ_{e^-} , μ_{ν_e} e μ_{ν_μ} . Portanto, para que estas funções sejam zero, devemos ter necessariamente,

$$\mu_i = 0 \quad (1.22)$$

para qualquer uma das espécies citadas na tabela 1.1.

Existe uma pequena quantidade de partículas que não provêm das reações de produção de pares (bárions, elétrons e matéria escura). Estas partículas são completamente irrelevantes no período Pns (tipo era da radiação), porém são elas que sobrevivem aos processos de aniquilação e formam as estruturas do universo atual.

Para ver que elas são de fato irrelevantes, vamos considerar que durante o universo Pns,

$$\frac{N_b}{n_\gamma} \simeq 10^{-8} \quad (1.23)$$

Neste caso, sabendo que $N_q \simeq 0$ e utilizando (1.15b), (1.16) e (1.23), obtemos:

$$\frac{\tilde{n}_b}{n_\gamma} \simeq 10^{-8}; \quad \frac{\tilde{n}_{e^-}}{n_\gamma} \simeq \frac{\tilde{n}_{e^-}}{n_e} \simeq 10^{-8}; \quad \frac{\tilde{n}_{dm}}{n_\gamma} \simeq 5 \frac{m_b}{m_{dm}} \quad \frac{\tilde{n}_b}{n_\gamma} \simeq 5 \frac{m_b}{m_{dm}} 10^{-8}, \quad (1.24)$$

onde $\tilde{n}_b$, $\tilde{n}_{e^-}$ e $\tilde{n}_{dm}$ são as densidades numéricas de bárions, elétrons e matéria escura que constituem o universo atual; n_e é a densidade de elétrons advindas da produção de pares; m_b e m_{dm} são as massa dos bárions e da matéria escura com $m_b \leq m_{dm}$. É importante ressaltar que as razões apresentadas acima são constantes apenas no caso de uma expansão tipo era da radiação.

Da equação (1.24), percebe-se que mesmo a componente ultrarelativística dada por $\tilde{n}_{e^-}$ (elétrons atuais) é irrelevante quando comparada com n_γ ou n_e (elétrons

provenientes da produção de pares). Portanto, é lícito ignorarmos toda a matéria atual na descrição do universo Pns.

Feitas todas estas considerações sobre o fluido cósmico primordial podemos voltar à descrição do universo Pns. A densidade de energia que aparece em (1.17) e (1.18) é determinada com o auxílio de (1.10) e da tabela 1.1:

$$\rho_{UR} = \rho_\gamma + \rho_{e^-} + \rho_{e^+} + \rho_{\nu_e} + \rho_{\nu_\mu} + \rho_{\bar{\nu}_e} + \rho_{\bar{\nu}_\mu} = \frac{9}{2}\rho_\gamma = \frac{9\pi^2}{30}(kT)^4. \quad (1.25)$$

Substituindo ρ_{UR} em (1.17) obtemos a função de Hubble em função de kT :

$$H(kT) = \left(\frac{\dot{a}}{a}\right) = \sqrt{\frac{4\pi^3}{5} \frac{(kT)^2}{m_{Pl}}}, \quad (1.26)$$

onde $m_{Pl} \equiv G^{-1/2} = 1,221 \times 10^{22} \text{ MeV}$.

A relação entre o fator de escala e a energia kT é determinada comparando (1.25) com (1.16):

$$kT = \frac{A}{a}, \quad (1.27)$$

onde A é uma constante que depende T_0 e a_0 .

Agora, substituindo esta última equação em (1.26), e resolvendo a equação diferencial resultante com a condição inicial $a(t = 0) = 0$, obtemos o seguinte resultado:

$$a(t) = A \left(\frac{16\pi^3}{5}\right)^{1/4} \left(\frac{t}{m_{Pl}}\right)^{1/2}. \quad (1.28)$$

Por fim, substituindo (1.27) neste último resultado, conseguimos relacionar a energia kT com o tempo cosmológico:

$$kT = \left(\frac{16\pi^3}{5}\right)^{-1/4} \left(\frac{t}{m_{Pl}}\right)^{-1/2}. \quad (1.29)$$

Estas quatro últimas equações determinam a evolução do universo primordial em uma fase tipo era da radiação.

1.3 Condição de equilíbrio para o fluido cósmico

Na seção anterior utilizamos os conceitos de equilíbrio químico e termodinâmico para determinar as propriedades do fluido cósmico Pns, mas em nenhum momento dissemos quais são as condições necessárias para que o equilíbrio seja alcançado durante este período.

Este tipo de questão é usualmente abordada da seguinte forma [9]: uma dada componente só estará em equilíbrio com o resto do fluido cósmico se as taxas de reação $\Gamma_i(T)$ desta componente com as outras partículas forem muito maiores que a taxa de expansão do universo $H(T)$. Neste caso, a relação

$$\Gamma(T) \gg H(T) \quad (1.30)$$

é satisfeita, e podemos aplicar o conceito termodinâmico de *expansão quasi-estática*, em que, a cada infinitésimo de expansão, todo o fluido cósmico está em equilíbrio termodinâmico. Se $\Gamma(T)$ representa a taxa de produção de uma dada espécie de partícula, a condição (1.30) é suficiente para que haja também o equilíbrio químico.

A existência de equilíbrio termodinâmico e químico no universo Pns é extremamente conveniente, pois ela permite que adotemos a mecânica estatística usual definida no $\mathbb{R}^3$ (espaço de fase dado por $\frac{1}{(2\pi)^3} \iint d^3x d^3p$), e que as várias densidades numéricas sejam obtidas através de equações do tipo de (1.7a).

Usualmente, a taxa de interação por partícula é definida como:

$$\Gamma \equiv n\sigma |\vec{v}|, \quad (1.31)$$

onde n é a densidade de partículas alvo e $\sigma |\vec{v}|$ é a seção de choque da interação vezes a velocidade relativa entre as partículas.

A seguir, vamos estudar as condições de equilíbrio para o universo Pns em uma fase tipo era da radiação. Nestas condições, a relação entre (1.30) e o equilíbrio termodinâmico cosmológico pode ser melhor entendida através da quantidade *número de interações por partícula* N_{int} . Esta quantidade, definida como

$$N_{int} = \int_t^\infty \Gamma(\bar{t}) d\bar{t}, \quad (1.32)$$

determina o número de interações sofridas por uma dada partícula do tempo t em diante.

Supondo que a taxa de interação é do tipo $\Gamma(kT) = B(kT)^n$, onde B é uma constante arbitrária e $n > 2$, podemos utilizar (1.29) para rescrever $\Gamma(kT)$ como $\Gamma(t)$,

$$\Gamma(\bar{t}) = B [kT(\bar{t})]^n = B \left[\frac{C}{\bar{t}} \right]^{n/2}, \quad (1.33)$$

sendo $C \equiv \left(\frac{16\pi^3}{5m_{Pl}^2} \right)^{-1/4}$.

Substituindo (1.33) em (1.32), segue para $n \neq 2$:

$$N_{int} = \int_t^\infty B \left[\frac{C}{\bar{t}} \right]^{n/2} d\bar{t} = B \left[\frac{C}{t} \right]^{n/2} \frac{2t}{(n-2)}. \quad (1.34)$$

E utilizando (1.26), (1.29) e (1.33) temos:

$$N_{int} = \frac{1}{(n-2)} \left[\frac{\Gamma(t)}{H(t)} \right]. \quad (1.35)$$

Da equação acima é fácil de ver que a condição de equilíbrio termodinâmico para a cosmologia pode ser escrita como em (1.30), uma vez que um alto número de interações ($N_{int} \gg 1$) propicia a termalização do fluido cósmico.

O próximo passo é mostrar que o fluido Pns está de fato em equilíbrio. Para isso, precisamos selecionar uma série de reações envolvendo as várias partículas deste período e, a partir destas, mostrar que a condição (1.30) é satisfeita.

Neste estudo, utilizaremos seis conjuntos de interações:

- (i) Interações eletromagnéticas entre léptons eletrônicos ultrarelativísticos: $e^+ + e^- \leftrightarrow e^+ + e^-$, $e^- + e^- \leftrightarrow e^- + e^-$, etc..
- (ii) Interação eletromagnética entre mesons não relativísticos e fótons: $\pi^\pm + \gamma \leftrightarrow \pi^\pm + \gamma$, $K^\pm + \gamma \leftrightarrow K^\pm + \gamma$.
- (iii) Interação eletromagnética entre léptons eletrônicos e fótons (espalhamento Compton): $e^\pm + \gamma \leftrightarrow e^\pm + \gamma$.
- (iv) Interações fracas entre léptons eletrônicos: $\nu_e + \bar{\nu}_e \leftrightarrow e^+ + e^-$, $\nu_e + e^+ \leftrightarrow \nu_e + e^+$, etc..
- (v) Interações fracas entre léptons muônicos e eletrônicos: $\nu_e + \mu^- \leftrightarrow \nu_\mu + e^-$, etc..
- (vi) Interação fraca entre léptons eletrônicos e nucleons: $n + \nu_e \leftrightarrow e^- + p$.

Veja que, nesta seleção, as interações fracas são as responsáveis pela produção de partículas e, portanto, somente elas contribuem para o equilíbrio químico.

As seções de choque apresentadas a seguir são aproximações de cálculos em nível de árvore das várias reações listadas [1, 9, 25].

(i) Primeiro conjunto de interações: A seção de choque com alto momento transferido para o espalhamento $e^\pm + e^\pm \leftrightarrow e^\pm + e^\pm$ é

$$\sigma_{e^\pm e^\pm} \simeq \frac{\alpha^2}{(kT)^2}, \quad (1.36)$$

onde $\alpha = 1/137$ é a constante de estrutura fina.

Agora, utilizando (1.9) e (1.31), podemos determinar a taxa de reação deste espalhamento,

$$\Gamma_{e^\pm e^\pm} \simeq n_{e^\pm} \sigma_{e^\pm e^\pm} = \frac{3}{2} \frac{1,202}{\pi^2} \alpha^2 (kT). \quad (1.37)$$

Obs: a velocidade relativa entre partículas ultrarelativísticas é $|\vec{v}| \simeq c = 1$.

Comparando então $\Gamma_{e^\pm e^\pm}$ com a função de Hubble (1.26) temos:

$$\frac{\Gamma_{e^\pm e^\pm}}{H} \simeq 0,04 \frac{\alpha^2 m_{Pl}}{kT} \simeq \frac{2,6 \times 10^{16} \text{ MeV}}{kT}. \quad (1.38)$$

Desta última equação é fácil de ver que para $20 \text{ MeV} < kT < \text{poucas centenas de MeV}$ (período Pns de interesse), a condição de termalização entre e^- e e^+ é completamente satisfeita.

(ii) **Segundo conjunto de interações:** Para $20 \text{ MeV} < kT \lesssim 100 \text{ MeV}$, o espectro de corpo negro garante a existência de uma grande quantidade de fótons com energias muito menores do que a massa do pión. Neste caso, o processo de espalhamento dos mesons $\pi^\pm$ e $K^\pm$ com estes fótons pode ser tratado através da teoria clássica de partículas carregadas espalhadas por ondas eletromagnéticas. Portanto, a seção de choque deste processo é a conhecida seção de choque de Thomson,

$$\sigma_T = \frac{8\pi\alpha^2}{3m_j}, \quad (1.39)$$

onde $j = \pi^\pm$ ou $K^\pm$.

Utilizando a aproximação não-relativística para a densidade numérica dos mesons (1.12), podemos obter as taxas de reação deste espalhamento:

$$\Gamma_{j\gamma} \simeq n_j \sigma_T = \left(\frac{m_j kT}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-m_j/kT} \times \frac{8\pi\alpha^2}{3m_j^2}. \quad (1.40)$$

Comparando $\Gamma_{j\gamma}$ com a função de Hubble (1.26) temos:

$$\frac{\Gamma_{j\gamma}}{H} \simeq 0,1 \sqrt{\left(\frac{1}{m_j kT} \right)} e^{-m_j/kT} \times \alpha^2 m_{Pl} \simeq (6,9 \times 10^{16} \text{ MeV}) \sqrt{\left(\frac{1}{m_j kT} \right)} e^{-m_j/kT}. \quad (1.41)$$

O termo exponencial na equação anterior faz com que a razão $\Gamma_{j\gamma}/H$ seja bastante sensível a variações de kT . Analizando estas variações, percebe-se que mesmo para o pior dos casos ($kT = 20 \text{ MeV}$ e $j = K^\pm$),

$$\left. \frac{\Gamma_{K^\pm\gamma}}{H} \right|_{kT=20 \text{ MeV}} \simeq 10^4. \quad (1.42)$$

Portanto, os mésons carregados encontram-se em equilíbrio termodinâmico com a radiação.

(iii) Terceiro conjunto de interações: A seção de choque para o espalhamento Compton a altas energias é

$$\sigma_{\gamma e^\pm} \simeq \frac{2\pi\alpha^2}{m_e^2(1+2q)} \ln(1+2q), \quad (1.43)$$

onde $q = E_\gamma/m_e$, sendo E_γ a energia do fóton incidente. Por altas energias entende-se que $E_\gamma \gg m_e$.

A energia média por fóton pode ser estimada com o auxílio de (1.9) e (1.10),

$$E_\gamma = \frac{\rho_\gamma}{n_\gamma} = \frac{\pi^4}{30 \times 1,202} (kT). \quad (1.44)$$

Substituindo este resultado em (1.43) obtemos a dependência de $\sigma_{\gamma e^\pm}$ com kT .

Agora, conhecendo a densidade numérica de $e^\pm$ (1.9), podemos derivar a taxa de reação para este processo:

$$\Gamma_{\gamma e^\pm} \simeq n_{e^\pm} \sigma_{\gamma e^\pm} = \frac{3,606}{\pi} \frac{\alpha^2 (kT)^3}{m_e^2 (1 + 0,0555 \frac{\pi^4 (kT)}{m_e})} \ln \left[1 + 0,0555 \frac{\pi^4 (kT)}{m_e} \right]. \quad (1.45)$$

Comparando esta taxa com a função de Hubble (1.26), temos:

$$\frac{\Gamma_{\gamma e^\pm}}{H} \simeq \frac{(1,5 \times 10^{17} \text{ MeV})}{m_e \left(\frac{m_e}{(kT)} + 5,4 \right)} \ln \left[1 + 5,4 \frac{(kT)}{m_e} \right]. \quad (1.46)$$

Uma análise numérica de (1.46) mostra que durante o período Pns de interesse, a razão $\Gamma_{\gamma e^\pm}/H$ é da ordem de 10^{17} , variando muito pouco com a energia kT . Portanto, nesta faixa de energia o espalhamento Compton é extremamente eficiente na termalização de $e^\pm$.

(iv) Quarto conjunto de interações: A seção de choque das interações fracas referente aos processos envolvendo ν_e , $\bar{\nu}_e$, e^+ e e^- é:

$$\sigma_{e\nu_e} \simeq G_F^2 (kT)^2, \quad (1.47)$$

onde $G_F \simeq 1,2 \times 10^{-11} \text{ MeV}^{-2}$ é a constante de Fermi.

Substituindo (1.9) e (1.47) em (1.31), segue:

$$\Gamma_{e\nu_e} \simeq n_{e^\pm} \sigma_{e\nu_e} \simeq \frac{3}{2} \frac{1,202}{\pi^2} G_F^2 (kT)^5. \quad (1.48)$$

Agora, comparando a taxa de reação $\Gamma_{e\nu_e}$ com a função de Hubble temos:

$$\frac{\Gamma_{e\nu_e}}{H} \simeq 3.6679 \times 10^{-2} G_F^2 m_{Pl} (kT)^3 \simeq \left(\frac{kT}{2.54 \text{ MeV}} \right)^3. \quad (1.49)$$

Portanto, durante todo o período Pns, a condição de termalização entre os léptons eletrônicos é satisfeita.

(v) **Quinto conjunto de interações:** Como no conjunto anterior, a seção de choque das interações fracas entre os léptons eletrônicos e muônicos é:

$$\sigma_{e\mu} \simeq G_F^2 (kT)^2. \quad (1.50)$$

Reestringindo a análise em $20 \text{ MeV} < kT \lesssim 100 \text{ MeV}$, podemos tratar os muons como sendo não relativísticos. Neste caso, o taxa de reação é obtida com o auxílio (1.9) e (1.50):

$$\Gamma_{e\mu} \simeq n_\mu \sigma_{e\mu} \simeq 2G_F^2 (kT)^{7/2} \left(\frac{m_\mu}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-m_\mu/kT}. \quad (1.51)$$

Procedendo da forma padrão, construímos a razão

$$\frac{\Gamma_{e\mu}}{H} \simeq 0.4 G_F^2 m_{Pl} \left(\frac{m_\mu kT}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-m_\mu/kT} \simeq \left(\frac{m_\mu kT}{8.25 \text{ MeV}^2} \right)^{3/2} e^{-m_\mu/kT}. \quad (1.52)$$

Novamente, o termo exponencial de (1.52) faz com que a razão $\Gamma_{e\mu}/H$ seja bastante sensível a variações de kT . Analizando o pior dos casos ($kT = 20 \text{ MeV}$), temos que

$$\left. \frac{\Gamma_{e\mu}}{H} \right|_{kT=20 \text{ MeV}} \simeq 21. \quad (1.53)$$

Apesar de $\Gamma_{e\mu}$ não ser muito maior que H , ainda assim podemos assumir equilíbrio termodinâmico entre léptons muônicos e eletrônicos.

(vi) **Sexto conjunto de interações:** Neste último conjunto, o cálculo da taxa de reação por nucleon para a interação $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$ é um pouco diferente. Segundo [9], para $kT \gg 1 \text{ MeV}$, temos o seguinte valor para $\Gamma_{pe^- \rightarrow n\nu}$:

$$\Gamma_{pe^- \rightarrow n\nu} \simeq \frac{7}{60} \pi (1 + 3g_A^2) G_F^2 (kT)^5, \quad (1.54)$$

onde $g_A \simeq 1.26$.

Procedendo da forma padrão, construímos a razão

$$\frac{\Gamma_{pe^- \rightarrow n\nu}}{H} \simeq 0.4241 G_F^2 m_{Pl} (kT)^3 \simeq \left(\frac{kT}{1.12 \text{ MeV}} \right)^3. \quad (1.55)$$

Da equação acima é imediato perceber que durante todo o período Pns, prótons e nêutrons encontram-se em equilíbrio termodinâmico com os elétrons e seus neutrinos.

Antes de encerrarmos esta seção é importante fazer algumas considerações.

Não foi feito nenhum cálculo que mostre a condição de equilíbrio para os mesons nêutros (π^0 , K^0 e $\bar{K}^0$). Porém, devido as reações $\pi^0 \leftrightarrow \gamma + \gamma$ e $K^0, \bar{K}^0 \leftrightarrow \pi^0 + \pi^0$ é bastante razoável supor que estes mesons atinjam o equilíbrio termodinâmico por volta de poucas dezenas de MeV .

Para os cálculos explícitos das seis taxas de reação feitos anteriormente, usamos as densidade numéricas de equilíbrio (equações (1.9) e (1.12)). Portanto, as comparações entre Γ e H realizadas “demonstram” o equilíbrio através de um critério de consistência.

A condição (1.30) é bastante vaga pois ela não quantifica o quão grande tem de ser Γ em relação à H . Análises mais detalhadas, através da equação de Boltzmann, mostram que em geral o equilíbrio é alcançado com Γ/H sendo da ordem de algumas unidades. É por esta razão que podemos considerar (1.53) como condição suficiente de equilíbrio.

1.4 Introdução à teoria geral da inflação

1.4.1 Motivação dos modelos inflacionários

De um modo geral, a motivação para a inflação está ligada à necessidade de termos certas condições iniciais no universo primordial. De fato, se supusermos que o universo primordial é descrito somente por uma expansão tipo era da radiação (equação (1.28)), fica difícil reproduzir as características do universo atual, sem a imposição arbitrária de certas condições iniciais.

Vejamos a seguir algumas destas imposições que motivaram a idéia de inflação.

Problema da planura

A primeira das equações de Friedmann (1.5) pode ser reescrita através da introdução do parâmetros de densidade $\bar{\Omega}$, como segue:

$$\bar{\Omega}_T - 1 = \frac{k}{a^2 H^2} = -\bar{\Omega}_k, \quad (1.56)$$

onde os $\bar{\Omega}$'s são obtidos trocando H_0 por H em (1.4b). A função $1/aH$ é conhecida como *raio de Hubble comóvel*.

Segundo dados recentes da cosmologia $\bar{\Omega}_{T0} \simeq 1,003$ o que implica que nos dias de hoje o lado esquerdo de (1.56) é da ordem de grandeza de 10^{-3} . Agora, se

expansão do universo é do tipo era de matéria* ou era da radiação (casos usuais do modelo cosmológico padrão), aH diminui com o passar do tempo, e portanto $|\bar{\Omega}_T - 1|$ aumenta. Neste caso, para o universo primordial $|\bar{\Omega}_T - 1| \ll 10^{-3}$, o que nos leva à seguinte pergunta. Por que nos instantes iniciais do universo a densidade total ρ_T era tão próxima da densidade crítica $\bar{\rho}_c = \frac{3c^2 H^2}{8\pi G}$? Este problema de ajuste fino na condição inicial de ρ_T é conhecido pelo nome de *problema da planura*.

Para termos uma idéia de quão grande é este ajuste fino, vamos supor que dos dias de hoje ($T_0 \simeq 2,75 \text{ K}$) até o final do período Pns ($kT_{Pns0} = 20 \text{ MeV}$), o universo tenha sido sempre dominado pela radiação. Neste caso, (1.56) pode ser reescrita com o auxílio das equações (1.26) a (1.29), e dos dados $\bar{\Omega}_{T0}$ e $kT_0 \simeq 2 \times 10^{-10} \text{ MeV}$:

$$|\bar{\Omega}_T - 1| = \frac{B}{(kT)^2} \quad \text{com } B \simeq 1,2 \times 10^{-22}. \quad (1.57)$$

Portanto, no final do período Pns,

$$|\bar{\Omega}_T^{Pns0} - 1| = \frac{B}{(kT_{Pns0})^2} \simeq 3 \times 10^{-25}. \quad (1.58)$$

Um cálculo um pouco mais preciso, levando em conta o domínio da matéria a partir de 1 eV , resulta em

$$|\bar{\Omega}_T^{Pns0} - 1| \simeq 1,5 \times 10^{-21}. \quad (1.59)$$

Ou seja, ρ_T deve ser próximo de $\bar{\rho}_c$ com aproximadamente 21 casas decimais de precisão em T_{Pns0} !

Problema do horizonte

Uma distância comóvel, bastante importante para a cosmologia, é a distância na qual a luz pode viajar (na ausência de interação) desde um $t = 0$. Segundo a métrica de FRW, esta distância é definida como:

$$\eta \equiv \int_0^t \frac{d\bar{t}}{a(\bar{t})}. \quad (1.60)$$

Uma vez que a informação não pode se propagar mais rápido do que a velocidade da luz, a distância comóvel η determina a máxima distância de separação entre duas regiões casualmente conectadas. Podemos pensar em η como sendo o *horizonte comóvel*.

*Equação de estado dada por $p = 0$.

Para entender o problema de horizonte é interessante reescrever η em termos do raio de Hubble comóvel $1/aH$.

$$\eta = \int_0^a \frac{1}{\bar{a}H(\bar{a})} \frac{d\bar{a}}{\bar{a}} = \int_0^a \frac{1}{\bar{a}H(\bar{a})} d(\ln \bar{a}). \quad (1.61)$$

Da equação acima vemos que o raio de Hubble é a distância máxima na qual partículas podem viajar durante um tempo de expansão, i.e., grosseiramente o tempo em que o fator de escala aumenta por um fator $e \simeq 2,78$. Assim, o raio de Hubble é um outro meio de medir se partículas estão causalmente conectadas umas com as outras: se elas estão separadas por uma distância maior do que $(aH)^{-1}$, então elas não podem se comunicar.

Existe uma diferença sutil entre o raio de Hubble $(aH)^{-1}$ e o horizonte comóvel η . Se partículas estão separadas por distâncias maiores que η , elas nunca poderão se comunicar umas com as outras; e se elas estão separadas por uma distância maior que $(aH)^{-1}$, então elas não se comunicam *agora*. Portanto, é possível que η seja muito maior do que $(aH)^{-1}$, fazendo com que partículas separadas causalmente hoje estejam em contato em épocas remotas. Para que isso ocorra, em algum momento no passado o raio de Hubble deve ser bem maior do que o atual. Isto é possível, mas não em épocas dominadas pela radiação ou matéria, quando $(aH)^{-1}$ aumenta com o passar do tempo.

Por outro lado, quando se analisa a radiação cósmica de fundo (CMB), vemos que ela é extremamente isotrópica. A pergunta que se faz então é como a CMB pode ser isotrópica se as maiores escalas observadas entraram no horizonte causal recentemente, muito tempo depois do desacoplamento? Ou em outras palavras, como é possível que a CMB vinda de toda a esfera celeste tenha a mesma temperatura, se na recombinação apenas regiões de poucos graus estavam em contato causal? Portanto, dentro do modelo padrão usual, o universo “surge” ou sempre foi de princípio, extremamente isotrópico em larga escala. Esta imposição ad hoc é conhecida como o *problema do horizonte*.

Procedendo de forma análoga ao problema da planura, vamos quantificar o aumento do raio de Hubble desde o final do período Pns até os dias de hoje:

$$\frac{R_0}{R_{Pns0}} = \frac{(aH)_{Pns0}}{(aH)_0} \simeq 1,4 \times 10^9. \quad (1.62)$$

Portanto, a distância comóvel máxima entre duas regiões casualmente conectadas aumentou em 9 ordens de grandeza desde o final do período Pns.

Outros problemas

Além da planura e do horizonte, existem outros problemas que motivaram a criação de modelos inflacionários.

- *Origem das inomogenidades:* Dentro do modelo padrão usual (ora dominado pela matéria ora dominado pela radiação), é muito difícil, se não impossível, gerar condições iniciais casualmente ligadas capazes de produzir as várias estruturas (estrelas, galáxias, etc.) vistas em pequenas escalas. Este problema está intimamente ligado com o problema do horizonte.
- *Relíquias indesejáveis:* No contexto de teorias de Gauge unificadas, existe uma variedade de partículas estáveis supermassivas que devem ter sido produzidas no universo primordial. Muitas dessas partículas sobrevivem aos vários processos de aniquilação e hoje em dia deveriam contribuir e muito com a densidade de matéria, i.e., $\Omega_{m0} \gg 1$. O modelo padrão usual não possui nenhum mecanismo capaz de livrar o universo atual da superabundância de relíquias indesejáveis.

Durante o decorrer desta tese, vamos nos focar somente nos problemas de planura e de horizonte, por serem eles os de mais fácil análise. Isto porém, não quer dizer que os outros problemas tenham menos importância.

1.4.2 Características gerais da inflação

Os modelos de inflação não são substitutos do modelo cosmológico primordial padrão, mas sim uma adição a este. A inflação ocorre em algum momento do período Pns, e não deve afetar nenhum dos sucessos do modelo padrão.

A definição precisa de inflação é qualquer época do período Pns, onde o fator de escala está acelerando.

$$\text{Inflação} \Leftrightarrow \ddot{a} > 0 \quad (\text{Pns}). \quad (1.63)$$

Uma expressão equivalente à condição de inflação, com um maior apelo físico, é:

$$\begin{aligned} \text{Inflação} &\Leftrightarrow -\frac{\ddot{a}}{\dot{a}^2} < 0 \quad (\text{Pns}) \quad \Rightarrow \\ \text{Inflação} &\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\dot{a}} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{aH} \right) < 0 \quad (\text{Pns}). \end{aligned} \quad (1.64)$$

Da equação acima vemos que a condição necessária e suficiente para que ocorra a inflação, é que o raio de Hubble comóvel decresça com o tempo. Visto das coordenadas fixas com relação à expansão, o universo observável se torna menor durante a inflação.

Utilizando a segunda equação de Friedmann (1.18), podemos reescrever a condição (1.63) em termos do conteúdo de energia do universo:

$$\text{Inflação} \Leftrightarrow \rho + 3p < 0. \quad (1.65)$$

Assumindo que a densidade de energia seja sempre positiva, é necessário que a pressão torne-se negativa para satisfazer esta relação.

É bastante comum na literatura parametrizar a equação de estado cosmológica da seguinte forma:

$$p = \omega\rho, \quad (1.66)$$

onde, em geral ω , depende do tempo (ou temperatura).

Substituindo esta última relação em (1.65), obtemos:

$$\text{Inflação} \Leftrightarrow 1 + 3\omega < 0 \Rightarrow \omega < -\frac{1}{3}. \quad (1.67)$$

Um período de expansão acelerada conveniente pode resolver todos os problemas mencionados na seção anterior. Os mais simples de se ver são os problemas de horizonte e planura que estão diretamente relacionados com o raio de Hubble $(aH)^{-1}$.

Uma rápida inspeção no problema da planura (1.56) mostra que, se raio de Hubble diminuir com o tempo, é possível eliminar o ajuste fino indesejado. Agora, segundo (1.64), é exatamente isso que ocorre durante o período inflacionário. Visto de outra forma, a expansão acelerada planifica a parte espacial do universo.

No problema do horizonte, a diminuição de $(aH)^{-1}$ possibilita que o universo observável atual tenha se originado de uma pequena região dentro do raio de Hubble, anterior à inflação. Portanto, antes do período de aceleração, todo o fluido do universo observável estava em contato causal, resolvendo assim o problema de horizonte.

Capítulo 2

Sistemas Estatísticos Interagentes

Neste capítulo pretende-se construir, via formalismo de ensembles, a teoria geral perturbativa de sistemas estatísticos interagentes em equilíbrio. Iremos apresentar os dois principais tipos de expansão perturbativa para estes sistemas: expansão na fugacidade z e expansão na constante de acoplamento g . Porém, como em cada um desses casos o assunto é muito vasto, o estudo será aprofundado apenas para expansão em termos de z . Seguindo esta abordagem, mostraremos como associar as grandezas termodinâmicas ($p(z, T)$, $\rho(z, T)$, etc.) com a matriz S do sistema em questão. Apresentaremos também um estudo sobre a construção de equações de estado (EoS) e suas aplicabilidades. O formalismo desenvolvido aqui fornecerá a base teórica necessária para a montagem de uma EoS realista para o universo Pns.

2.1 Sistemas estatísticos com uma componente

Como se sabe, a mecânica estatística na abordagem de ensemble é a principal teoria capaz de fornecer métodos para a construção de EoS de sistemas hamiltonianos em equilíbrio termodinâmico. Nesta abordagem, todas as características termodinâmicas são obtidas através das funções de partição.

Por outro lado, para sistemas interagentes tridimensionais é muito difícil obter uma forma exata para as funções de partição, o que nos remete ao estudo perturbativo (em série) destes sistemas.

Suponha um sistema estatístico no equilíbrio, descrito pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = H_0 + gH_I, \quad (2.1)$$

onde H_0 é a Hamiltoniana do sistema livre e H_I representa todos os termos de interação regulados pelo parâmetro g .

De forma geral, pode-se tentar expressar a função de partição macrocanônica Θ em termos de uma série. Normalmente, os dois parâmetros usados são g e z , ou seja:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \tilde{G}_{l,N}(V, T) g^l z^N, \quad (2.2)$$

onde $\tilde{G}_{l,N}$ são funções dependentes apenas do volume V e da temperatura T . Na representação acima estamos supondo uma única componente (um único tipo de partícula ou número quântico conservado), com um único termo de interação.

A principal exigência para que Θ na forma de (2.2) represente corretamente a função de partição é que as séries em g e z sejam *convergentes*. Ao utilizar uma abordagem perturbativa, é essencial que esta condição seja satisfeita.

Somando parcialmente as séries em (2.2), pode-se obter

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{l=0}^{\infty} G_l(V, T, z) g^l \quad (2.3)$$

ou

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} Q_N(V, T) z^N. \quad (2.4)$$

Usualmente, as equações (2.3) e (2.4) são as séries que de fato são utilizadas na obtenção da função de partição. A primeira delas (em g) é conhecida como expansão na *constante de acoplamento* e a segunda (em z) como expansão na *fugacidade*. A utilização de uma em detrimento da outra depende das características do sistema em questão.

2.1.1 Expansão em termos da constante de acoplamento

Usualmente, a expansão em termos da constante de acoplamento é conveniente quando estamos tratando com os chamados *sistemas fracamente acoplados*, i.e., sistemas na qual a contribuição da Hamiltoniana de interação gH_I para as quantidades termodinâmicas é pequena em comparação com H_0 .

Este tipo de expansão pode ser realizado tanto para o caso clássico quanto para o quântico (relativísticos ou não). Começaremos o estudo com o sistema clássico não-relativístico.

A função de partição macrocanônica deste sistema é dada por:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N e^{-N\beta m}}{(2\pi)^{3N} N!} \int \int e^{-\beta H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)} d^{3N} r d^{3N} p, \quad (2.5)$$

onde

$$z \equiv e^{\beta\mu} = e^{\beta(\mu_{NR}+m)} \quad (2.6)$$

e

$$H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N) = H_0(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N) + gH_I(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + g \sum_{i<j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad (2.7)$$

sendo m a massa e $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ o potencial de interação entre as partículas i e j .

A integração nos momentos em (2.5) é feita de forma trivial, dando

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N e^{-N\beta m}}{\lambda^{3N} N!} \int \exp \left[-\beta g \sum_{i<j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] d^{3N}r, \quad (2.8)$$

onde

$$\lambda = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} d^3p = \sqrt{\frac{2\pi\beta}{m}}, \quad (2.9)$$

é conhecido como *comprimento de onda térmico* (não relativístico).

Agora, expandindo a exponencial de (2.8), obtemos:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^N e^{-N\beta m} (-\beta g)^l}{\lambda^{3N} N! l!} \int \left[\sum_{i<j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right]^l d^{3N}r. \quad (2.10)$$

Comparando (2.10) com (2.2) identificamos as funções $\tilde{G}_{l,N}$:

$$\tilde{G}_{l,N}(V, T) = \frac{(-\beta)^l e^{-N\beta m}}{\lambda^{3N} N! l!} \int \left[\sum_{i<j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right]^l d^{3N}r. \quad (2.11)$$

A função de partição dada em (2.10) é a equação fundamental no tratamento estatísticos de sistemas clássicos não-relativísticos fracamente acoplados. Dois pontos importantes referentes a esta equação devem ser observados:

- (i) Devido ao integrando de $d^{3N}x$, a determinação $\tilde{G}_{l,N}$ é relativamente complicada. O procedimento padrão de análise envolve ferramentas de matemática combinatória e teoria dos gráficos [5].
- (ii) Não é possível realizar a soma parcial em z e obter a função $G_l(V, T, z)$ de (2.3). Este fato faz com que, na expansão em termos de g , o ensemble macrocanônico não seja o ensemble mais conveniente [5].

A seguir, vamos estudar o mesmo tipo de expansão para sistemas quânticos [26].

A função de partição macrocanônica destes sistemas é dada por:

$$\Theta(z, V, T) = Tr \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{Q})} \right], \quad (2.12)$$

onde $\hat{Q}$ é o operador referente a uma quantidade conservada.

Através da definição

$$\hat{K} \equiv \hat{K}_0 + g\hat{H}_I \quad \text{com} \quad \hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu\hat{Q}, \quad (2.13)$$

reescrevemos (2.12) como:

$$\Theta(z, V, T) = Tr \left[e^{-\beta\hat{K}} \right]. \quad (2.14)$$

Procedendo da forma usual para a teoria de perturbação, definimos o operador de “evolução de temperatura”, análogo ao operador de evolução temporal [25],

$$\hat{U}(\tau, \bar{\tau}) \equiv e^{\tau\hat{K}_0} e^{-(\tau-\bar{\tau})\hat{K}} e^{-\bar{\tau}\hat{K}_0}. \quad (2.15)$$

Diferenciando $\hat{U}(\tau, \bar{\tau})$ com relação a τ obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{U}(\tau, \bar{\tau})}{\partial \tau} &= -e^{\tau\hat{K}_0} \left(g\hat{H}_I \right) e^{-(\tau-\bar{\tau})\hat{K}} e^{-\bar{\tau}\hat{K}_0} \Rightarrow \\ \frac{\partial \hat{U}(\tau, \bar{\tau})}{\partial \tau} &= -g\hat{H}_I(\tau)_0 \hat{U}(\tau, \bar{\tau}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde

$$\hat{H}_I(\tau)_0 \equiv e^{\tau\hat{K}_0} \hat{H}_I e^{-\tau\hat{K}_0}. \quad (2.17)$$

A partir da definição de $\hat{U}(\tau, \bar{\tau})$ podemos escrever a função de partição como:

$$\Theta(z, V, T) = Tr \left[e^{-\beta\hat{K}_0} \hat{U}(\beta, 0) \right]. \quad (2.18)$$

Utilizando a condição $\hat{U}(\tau, \tau) = 1$, podemos integrar a equação diferencial (2.16), segue:

$$\hat{U}(\tau, \bar{\tau}) = 1 - g \int_{\bar{\tau}}^{\tau} \hat{H}_I(\tau_1)_0 \hat{U}(\tau_1, \bar{\tau}) d\tau_1. \quad (2.19)$$

Agora, iterando a equação acima, determinamos a expansão perturbativa em g :

$$\hat{U}(\tau, \bar{\tau}) = \sum_{l=0}^{\infty} (-g)^l \int_{\bar{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \int_{\bar{\tau}}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{\bar{\tau}}^{\tau_{l-1}} d\tau_l \left[\hat{H}_I(\tau_1)_0 \hat{H}_I(\tau_2)_0 \dots \hat{H}_I(\tau_l)_0 \right], \quad (2.20)$$

onde $\tau > \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_n > 0$.

Substituindo este resultado em (2.18), obtemos:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{l=0}^{\infty} (-g)^l \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau_{l-1}} d\tau_l \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}_0} \hat{H}_I(\tau_1)_0 \dots \hat{H}_I(\tau_l)_0 \right]. \quad (2.21)$$

Através da introdução de distribuições de Heaviside,

$$\theta(x - x_0) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > x_0 \\ 0 & \text{se } x < x_0 \end{cases},$$

é possível escrever (2.21) como:

$$\Theta(z, V, T) = \sum_{l=0}^{\infty} G_l(V, T, z) g^l, \quad (2.22)$$

onde

$$G_l(V, T, z) = \frac{(-1)^l}{l!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau_{l-1}} d\tau_l \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{K}_0} T \left[\hat{H}_I(\tau_1)_0 \dots \hat{H}_I(\tau_l)_0 \right] \right\}. \quad (2.23)$$

Observação: na equação acima T denota a instrução de ordenação de temperatura [26], através das distribuições de Heaviside.

Diferentemente do caso clássico, a função de partição quântica pode ser expressa exclusivamente como uma série na constante de acoplamento. Isto faz com que, formalmente, (2.3) seja muito mais interessante a nível quântico.

Para sistemas quânticos não relativísticos, podemos expressar $\hat{K}_0$ e $\hat{H}_I$ na representação de número de ocupação:

$$\hat{K}_0 = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu \right) \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}} \quad (2.24)$$

e

$$\hat{H}_I = \frac{1}{4} \sum_{k_1, \dots, k_4} \langle k_1, k_2 | V \hat{A} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^{\dagger} \hat{a}_{k_2}^{\dagger} \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}, \quad (2.25)$$

onde V é o potencial de interação no espaço dos momentos, k_i é o conjunto de variáveis de momento e spin $k_i = (\vec{k}_i, \sigma_i)$, $\hat{a}_k^{\dagger}$ e $\hat{a}_k$ são os operadores de criação e aniquilação e $\hat{A}$ é o operador de simetrização, ou seja

$$\hat{A} |k_3, k_4\rangle = \frac{1}{2} (|k_3, k_4\rangle + |k_4, k_3\rangle), \quad \text{p/ bósons}, \quad (2.26a)$$

$$\hat{A} |k_3, k_4\rangle = \frac{1}{2} (|k_3, k_4\rangle - |k_4, k_3\rangle), \quad \text{p/ férmions}. \quad (2.26b)$$

No caso não relativístico, a quantidade conservada $\hat{Q}$ nada mais é do que o número de partículas representado pelo operador $\hat{N}$.

Agora, para sistemas quânticos relativísticos, é interessante escrevermos $\hat{K}_0$ e $\hat{H}_I$ na abordagem da segunda quantização. Vejamos um exemplo.

Suponha a seguinte densidade Lagrangeana de um campo escalar complexo *,

$$\mathcal{L} = \left(\partial_\mu \hat{\phi}(\tilde{x}) \right) \left(\partial^\mu \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right) - m^2 \hat{\phi}(\tilde{x}) \hat{\phi}^*(\tilde{x}) - \frac{g}{4} \left(\hat{\phi}(\tilde{x}) \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right)^2. \quad (2.27)$$

Esta densidade Lagrangeana é invariante sob a transformação de gauge global $\phi \rightarrow \phi' = e^{-i\alpha} \phi$. Portanto, utilizando o teorema de Noether, determinamos a quantidade conservada deste sistema:

$$\hat{Q} = i \int d^3x \left(\hat{\phi}^*(\tilde{x}) \partial_0 \hat{\phi}(\tilde{x}) - \hat{\phi}(\tilde{x}) \partial_0 \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right). \quad (2.28)$$

Com base nestas duas últimas equações escrevemos $\hat{K}_0$ e $\hat{H}_I$:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 = & \int d^3x \left[\hat{\pi}(\tilde{x}) \hat{\pi}^*(\tilde{x}) + \nabla \hat{\phi}(\tilde{x}) \cdot \nabla \hat{\phi}^*(\tilde{x}) + m^2 \hat{\phi}(\tilde{x}) \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right. \\ & \left. - \mu \left(\hat{\phi}^*(\tilde{x}) \partial_0 \hat{\phi}(\tilde{x}) - \hat{\phi}(\tilde{x}) \partial_0 \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right) \right] \end{aligned} \quad (2.29)$$

e

$$\hat{H}_I = \frac{g}{4} \left[\hat{\phi}(\tilde{x}) \hat{\phi}^*(\tilde{x}) \right]^2. \quad (2.30)$$

A interpretação de $\hat{Q}$ fica clara quando definimos os operadores de criação e aniquilação para $\hat{\phi}$ e $\hat{\phi}^*$:

$$\hat{\phi}(x) = \int d^3\tilde{k} \left[f_{\tilde{k}}(\tilde{x}) a_{\tilde{k}} + f_{\tilde{k}}^*(\tilde{x}) b_{\tilde{k}}^\dagger \right], \quad (2.31a)$$

$$\hat{\phi}^*(x) = \int d^3\tilde{k} \left[f_{\tilde{k}}(\tilde{x}) b_{\tilde{k}} + f_{\tilde{k}}^*(\tilde{x}) a_{\tilde{k}}^\dagger \right], \quad (2.31b)$$

onde $f_{\tilde{k}}(\tilde{x}) = (2\pi)^{-3/2} e^{-i\tilde{k}\tilde{x}}$, $a_{\tilde{k}}^\dagger$ e $b_{\tilde{k}}^\dagger$ são operadores de criação e $a_{\tilde{k}}$ e $b_{\tilde{k}}$ são operadores de aniquilação.

Fazendo algumas manipulações algébricas [25], obtemos:

$$\hat{K}_0 = \int d^3\tilde{k} \left[\sqrt{\tilde{k}^2 + m^2} \left(a_{\tilde{k}}^\dagger a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}^\dagger b_{\tilde{k}} \right) - \mu \left(a_{\tilde{k}}^\dagger a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}^\dagger b_{\tilde{k}} \right) \right]. \quad (2.32)$$

*Notação usada: $\tilde{u} = (u_0, \vec{u})$ é um quadrivetor, e $\int d^3u$ é uma integração tridimensional.

Portanto, do segundo termo de (2.32), vemos que no caso relativístico, a quantidade conservada $\hat{Q}$ é a carga, dada pela número de partículas N_a menos o número de antipartículas N_b .

O formalismo do operador evolução temperatura utilizado na determinação de (2.22) e (2.23), juntamente com a abordagem da segunda quantização, dá origem à chamada *teoria de campos a temperatura finita* [27, 28].

2.1.2 Expansão em termos da fugacidade

O estudo de sistemas estatísticos a partir de uma série perturbativa na fugacidade começou por volta do final dos anos 30. Mayer e colaboradores desenvolveram em 1937 um método sistemático de expansão em cluster para um sistema clássico não-relativístico [29]. Logo em seguida (1938), Kahn e Uhlenbeck começaram a generalização do método para estatística quântica [30], [31] e, em 1960, Lee e Yang aperfeiçoaram este tratamento para descrever em princípio todas as ordens de perturbação de um sistema quântico não-relativístico [32]. Por fim, em 1969, Dashen, Ma e Bernstein estenderam este método para um sistema quântico relativístico, onde as interações são computadas via *matriz S* [33]. Cada um destes métodos aplica-se a um sistema estatístico diferente, todavia, todos eles foram desenvolvidos em um espaço euclidiano estático.

A função de partição macrocanônica, expandida na fugacidade, é dada pela série (2.4), onde cada termo depende das funções de partição canônicas $Q_N(V, T)$.

Para o estudo dos sistemas estatísticos clássico e quântico é interessante escrevermos Q_N em termos de funções $W_N^X(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$, como segue:

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!} \int_{\Omega} W_N^X(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^{3N}r, \quad (2.33)$$

onde $X = C$ representa o sistema clássico e $X = Q$ o sistema quântico.

No sistema clássico (não-relativístico), a função W_N^C expressa o fator de Boltzmann do termo de interação da Hamiltoniana convenientemente normalizado, ou seja

$$W_N^C(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \equiv \frac{e^{-N\beta m}}{\lambda^{3N}} \exp \left[-\beta \sum_{i < j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right], \quad (2.34)$$

onde $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ é o potencial entre as partículas, supostas interagindo duas a duas, e λ é o comprimento de onda térmico.

Substituindo (2.34) em (2.33), e o resultado em (2.4),

$$\Theta(V, T, z) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N e^{-N\beta m}}{N! \lambda^{3N}} \int_{\Omega} \exp \left[-\beta \sum_{i < j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] d^{3N} r, \quad (2.35)$$

recuperamos a expressão usual da função de partição macrocanônica de um sistema clássico (2.8). Note que, classicamente $N!$ é o fator introduzido por Gibbs.

Já para um sistema quântico, a função W_N^Q é definida como:

$$\begin{aligned} W_N^Q(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &\equiv N! \sum_a \langle \Psi_a^N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \tilde{\Psi}_a^N \rangle e^{-\beta E_a^N} \\ &= N! \sum_a \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} | \Psi_a^N \rangle \langle \Psi_a^N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \\ &= N! \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{W}_N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle, \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde $\hat{H}_N$ é o Hamiltoniano completo do sistema de N partículas,

$$\hat{H}_N | \Psi_a^N \rangle = E_a^N | \Psi_a^N \rangle, \quad (2.37)$$

com Ψ_a^N sendo um elemento de um conjunto completo de auto-estados, e $\tilde{\Psi}_a^N \equiv \hat{A} \Psi_a^N$ o mesmo elemento devidamente simetrizado.

O operador

$$\hat{W}_N \equiv \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \quad (2.38)$$

que aparece em (2.36) é conhecido como operador de *densidade de probabilidade simetrizado*, onde $\hat{A}$ simetriza (antisimetriza) os estados de um sistema bosônico (fermiônico). Usualmente $\hat{A}$ pode ser construído a partir do operador de permutações $\hat{P}$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_p \delta_p \hat{P}, \quad (2.39)$$

com $\delta_p = 1$ para bósons, $\delta_p = \pm 1$ para férmions (+1 permutações pares e -1 permutações ímpares) e a soma em p se estende para todas as $N!$ permutações com $\frac{1}{N!}$ normalizando o sistema. Para maiores informações ver apêndice A.

Utilizando a relação de completeza não simetrizada,

$$\int_{\Omega} | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle d^{3N} r \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | = 1, \quad (2.40)$$

e as equações (2.33) e (2.36), é fácil de verificar que

$$\begin{aligned}
Q_N(V, T) &= \int_{\Omega} \sum_a \langle \Psi_a^N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \tilde{\Psi}_a^N \rangle e^{-\beta E_a^N} d^{3N} r \\
&= \sum_a \langle \Psi_a^N | \tilde{\Psi}_a^N \rangle e^{-\beta E_a^N} = \sum_a \langle \Psi_a^N | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} | \Psi_a^N \rangle = \text{Tr} \hat{W}_N, \quad (2.41)
\end{aligned}$$

ou seja, o traço do operador densidade de probabilidade devidamente simetrizado determina a função de partição canônica.

Aplicando N transformadas de Fourier tridimensionais em (2.36), podemos escrever W_N^Q no espaço dos momentos:

$$W_N^Q(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N) = N! \langle \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N | \hat{W}_N | \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N \rangle. \quad (2.42)$$

Então, analogamente à (2.33), obtemos:

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!} \int_{\Omega} W_N^Q(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N) d^{3N} k. \quad (2.43)$$

Substituindo (2.42) em (2.43) e comparando o resultado com (2.41) vemos que

$$\text{Tr} \hat{W}_N = \int_{\Omega} \langle \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N | \hat{W}_N | \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N \rangle d^{3N} k. \quad (2.44)$$

A função de partição macrocanônica pode ser determinada fazendo $\hat{H}_N \rightarrow \hat{H}_N - \mu \hat{N}$, e lembrando que

$$\hat{N} | \Psi_a^N \rangle = N | \Psi_a^N \rangle, \quad (2.45)$$

segue-se que

$$\begin{aligned}
\Theta(V, T, z) &= \sum_N Q_N z^N = \sum_{a, N} \langle \Psi_a^N | \tilde{\Psi}_a^N \rangle e^{-\beta(E_a^N - \mu N)} \\
&= \sum_{a, N} \langle \Psi_a^N | \hat{A} e^{-\beta(\hat{H}_N - \mu \hat{N})} | \Psi_a^N \rangle = \text{Tr} [\hat{A} e^{-\beta \hat{K}}]. \quad (2.46)
\end{aligned}$$

O operador $\hat{N}$ é equivalente ao operador $\hat{Q}$ presente em (2.12).

Funções de Ursell

No ensemble macrocanônico as quantidades termodinâmicas estão associadas ao potencial macrocanônico

$$\Omega \equiv \frac{1}{V} \ln \Theta(z, V, T), \quad (2.47)$$

e, como $\Theta(z, V, T)$ é dado em termos de uma série na fugacidade, é conveniente expandirmos o $\ln \Theta(z, V, T)$ em z . Na ausência de partículas, as grandezas termodinâmicas são zero i.e., $Q_0 = 1$, portanto Ω pode ser expandido como segue:

$$\begin{aligned}
 \Omega &= \frac{1}{V} \ln \{1 + Q_1 z + Q_2 z^2 + Q_3 z^3 + Q_4 z^4 + \dots\} \\
 &= \frac{1}{V} (Q_1 z + Q_2 z^2 + Q_3 z^3 + Q_4 z^4 + \dots) - \frac{1}{2V} (Q_1 z + Q_2 z^2 + Q_3 z^3 + \dots)^2 + \\
 &\quad + \frac{1}{3V} (Q_1 z + Q_2 z^2 + \dots)^3 - \frac{1}{4V} (Q_1 z + \dots)^4 + \dots \\
 \Omega &= \frac{Q_1 z}{1!V} + \frac{(2!Q_2 - Q_1^2) z^2}{2!V} + \frac{(3!Q_3 - 3!Q_2 Q_1 + 2Q_1^3) z^3}{3!V} + \\
 &\quad + \frac{(4!Q_4 - 4!Q_3 Q_1 - 12Q_2^2 + 4!Q_2 Q_1^2 - 6Q_1^4) z^4}{4!V} + \dots
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

É interessante definir coeficientes da fugacidade b_N , ou seja

$$\Omega(z, T) = \sum_{N=1}^{\infty} b_N z^N. \tag{2.49}$$

Portanto, a partir de (2.48) e (2.49) os quatro primeiros b_N 's são dados por:

$$b_1 = \frac{Q_1}{1!V}, \tag{2.50a}$$

$$b_2 = \frac{(2!Q_2 - Q_1^2)}{2!V}, \tag{2.50b}$$

$$b_3 = \frac{(3!Q_3 - 3!Q_2 Q_1 + 2Q_1^3)}{3!V}, \tag{2.50c}$$

$$b_4 = \frac{(4!Q_4 - 4!Q_3 Q_1 - 12Q_2^2 + 4!Q_2 Q_1^2 - 6Q_1^4)}{4!V}. \tag{2.50d}$$

Existe uma expressão fechada para o N -ésimo coeficiente da fugacidade [34],

$$b_N = \frac{1}{N!V} \sum_{k=1}^N (-1)^{k-1} (k-1)! B_{Nk} [1!Q_1, 2!Q_2, \dots, (N-k+1)!Q_{N-k+1}], \tag{2.51}$$

onde B_{Nk} são os *polinômios de Bell*. Estes polinômios estão relacionados com os coeficientes que aparecem no teorema multinomial, e podem ser determinados através da seguinte relação:

$$B_{Nk} [s_1, s_2, \dots, s_{N-k+1}] = \frac{1}{k!} \left[\frac{d^N}{dx^N} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{s_j}{j!} x^j \right)^k \right]_{x=0}. \tag{2.52}$$

Outra forma de se determinar o b_N é com o auxílio das *funções de Ursell* U_N^X ,

$$b_N = \frac{g_N}{N!V} \int_{\Omega} U_N^X(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^3r_1 \dots d^3r_N, \quad (2.53)$$

onde g_N leva em conta a degenerescência devido a graus de liberdade internos[†].

Esta segunda forma é interessante, pois U_N^X se relaciona diretamente com W_N^X . Por exemplo, as quatro primeiras funções U_N^X são obtidas em termos de W_N^X comparando (2.53) com (2.33), e utilizando as equações (2.50a), (2.50b), (2.50c) e (2.50d):

$$U_1^X(\vec{r}_1) = W_1^X(\vec{r}_1), \quad (2.54)$$

$$U_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - W_1^X(\vec{r}_1)W_1^X(\vec{r}_2), \quad (2.55)$$

$$U_3^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = W_3^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) - 3W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3) + 2W_1^X(\vec{r}_1)W_1^X(\vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3), \quad (2.56)$$

$$U_4^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = W_4^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) - 4W_3^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)W_1^X(\vec{r}_4) - 3W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2)W_2^X(\vec{r}_3, \vec{r}_4) + 12W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3)W_1^X(\vec{r}_4) - 6W_1^X(\vec{r}_1)W_1^X(\vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3)W_1^X(\vec{r}_4). \quad (2.57)$$

As funções de Ursell[‡] e os coeficientes da fugacidade são conhecidas também como *funções de cluster* e *integrais de cluster* respectivamente. Estes nomes vêm do fato de que estas duas quantidades estão diretamente relacionadas com a idéia de *diagramas conexos*.

Definição de diagrama conexo: Diagrama conexo de N partículas é um diagrama onde todas as N partículas estão correlacionadas através de interações ou efeitos estatísticos, direta ou indiretamente.

Em princípio todos os possíveis estados de um sistema estatístico podem ser decompostos em diagramas genéricos que levam em conta os vários processos de correlações. Os termos Q_N , determinados pelas funções densidades de probabilidade W_N^X , são obtidos pela soma de todos os diagramas distintos de N partículas. Já as

[†]A contagem do número de estados degenerados depende crucialmente do tratamento dado ao sistema. Por exemplo, para um sistema quântico esta contagem deve respeitar a condição de simetria da função de onda completa.

[‡]Normalmente, termos como $3W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3)$ aparecem devidamente simetrizados: $W_2^X(\vec{r}_1, \vec{r}_2)W_1^X(\vec{r}_3) + W_2^X(\vec{r}_3, \vec{r}_1)W_1^X(\vec{r}_2) + W_2^X(\vec{r}_2, \vec{r}_3)W_1^X(\vec{r}_1)$, pois a integração em $d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3$ permite a troca de índices mudos.

integrais de clusters b_N , determinadas pelas funções de Ursell U_N^X , são obtidas pelas somas de todos os diagramas conexos, ou seja:

$$b_N = \frac{g_N}{V} \times (\text{Soma de todos os diagramas conexos de } N \text{ partículas}). \quad (2.58)$$

O procedimento de rearranjar os vários diagramas distintos em diagramas conexos não é trivial. Apresentaremos a seguir, o procedimento para sistemas quânticos [33]. O leitor interessado em ver o caso clássico pode procurar em [21].

Baseado na expansão (2.22) e na equação (2.46) podemos mostrar que

$$e^{-\beta\hat{K}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-g)^l}{l!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_l \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{K}_0} T \left[\hat{H}_I(\tau_1)_0 \dots \hat{H}_I(\tau_l)_0 \right] \right\}, \quad (2.59)$$

com

$$\hat{H}_I(\tau)_0 = e^{\tau\hat{K}_0} \left(\sum_{i<j}^N \hat{H}_{ij} \right) e^{-\tau\hat{K}_0}, \quad (2.60)$$

ou seja, a interação entre partículas é supostamente duas a duas.

A função de partição macrocanônica é obtida através de (2.59),

$$\Theta(z, V, T) = \text{Tr} \left[\hat{A} e^{-\beta\hat{K}} \right]. \quad (2.61)$$

Cada termo em (2.59) possui uma representação diagramática. Um elemento diagonal,

$$\langle \kappa | \hat{A} e^{-\beta\hat{K}} | \kappa \rangle \quad \text{com} \quad \kappa \equiv \left\{ \vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_N \right\}, \quad (2.62)$$

é caracterizado pela soma de vários diagramas, na qual cada partícula retorna ao estado inicial em β , i.e., $|\Psi\rangle_0 = |\Psi\rangle_{\beta}$. A figura 2.1 mostra um diagrama típico.

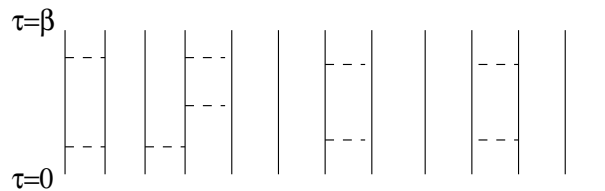


Figura 2.1: Um diagrama específico de um elemento diagonal de $l = 9$ em (2.59) e $N = 13$ em (2.62). A integração corre de baixo para cima. As linhas pontilhadas representam a interação entre duas partículas. As linhas cheias representam as partículas.

Um diagrama genérico é constituído de uma série de partes mutuamente desconexas, cuja a amplitude é dada por

$$[C_1(\kappa_1^1)C_1(\kappa_1^2)\dots C_1(\kappa_1^{m_1})] [C_2(\kappa_2^1)C_2(\kappa_2^2)\dots C_2(\kappa_2^{m_2})] \dots [C_n(\kappa_n^1)C_n(\kappa_n^2)\dots C_n(\kappa_n^{m_n})], \quad (2.63)$$

onde o diagrama conexo C_i aparece m_i vezes. Por exemplo, na figura 2.1 temos dois tipos de diagramas conexos: um com três interações que aparece uma vez, e outro com duas interações que aparece três vezes.

Procedendo com a soma nos κ 's e lembrando que $m_i!$ permutações de C_i levam à mesma configuração (estados idênticos), obtemos:

$$\frac{(Tr C_1)^{m_1}}{m_1!} \frac{(Tr C_2)^{m_2}}{m_2!} \dots \frac{(Tr C_n)^{m_n}}{m_n!}. \quad (2.64)$$

Agora, como o número de interações l e o número de partículas N variam de 0 à ∞ , a soma de todas as configurações distintas é determinada pela soma de n e de todos os m_i independentemente.

$$\begin{aligned} Tr [e^{-\beta \hat{K}}] &= \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{(Tr C_1)^{m_1}}{m_1!} \sum_{m_2=0}^{\infty} \frac{(Tr C_2)^{m_2}}{m_2!} \dots \sum_{m_n=0}^{\infty} \frac{(Tr C_n)^{m_n}}{m_n!} \dots \\ &= \exp (Tr C_1) \dots \exp (Tr C_n) \dots = \exp Tr (C_1 + C_2 + \dots). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Os processos de correlação estatística, determinados pelo operador de simetrização $\hat{A}$ (2.39), também possuem uma representação diagramática, e.g.:

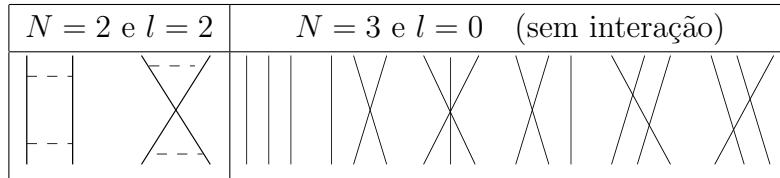


Figura 2.2: Representações diagramáticas de dois elementos de matriz dados por termos de (2.62).

Este tipo de representação sugere que as permutações sejam tratadas como tipos especiais de interação, chamadas de *interação de troca*. De fato, do ponto de vista de partículas representadas por “pacotes de onda”, os efeitos estatísticos aparecem devido à possibilidade de sobreposição entre os “pacotes” das várias partículas. São estas sobreposições que caracterizam as interações de troca.

Dentro deste contexto, a interação de troca contribui na determinação dos diagramas conexos. Por exemplo, para o sistema sem interação os diagramas conexos

de $N = 3$ são somente os dois últimos diagramas da figura 2.2. No apêndice A calculamos o potencial macrocanônico ideal Ω_0 através da contagem de diagramas conexos de interação de troca.

Uma vez feitas estas considerações, percebe-se de imediato que a inclusão da interação de troca na definição dos C_i 's, altera (2.65) da seguinte maneira:

$$\Theta(z, V, T) = Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{K}} \right] = \exp Tr (C_1 + C_2 + \dots). \quad (2.66)$$

Note que os C_i 's desta última equação não são os mesmo apresentados em (2.65).

A dependência na fugacidade pode ser explicitada lembrando que o traço de cada um dos C_i contém uma soma no número de partículas, i.e.,

$$\begin{aligned} Tr (C_1 + C_2 + \dots) &= Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{K}} \right]_{c_N} = \sum_{a, N} \langle \Psi_a^N | \hat{A} e^{-\beta (\hat{H}_N - \mu \hat{N})} | \Psi_a^N \rangle_{c_N} \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_a \langle \Psi_a^N | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} | \Psi_a^N \rangle_{c_N} z^N \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} Tr \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right)_{c_N} z^N, \end{aligned} \quad (2.67)$$

onde o subscrito c_N representa todos os diagramas conexos de N partículas.

A degenerescência associada aos graus de liberdade internos pode ser incluída fazendo

$$Tr \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right)_{c_N} z^N \rightarrow \left[Tr \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right)_{c_N} z^N \right]^{g_N}. \quad (2.68)$$

Observação: em geral a degenerescência depende do número de partículas.

Utilizando (2.66), (2.67) e (2.68), escrevemos o potencial macrocanônico como:

$$\Omega(z, T) = \frac{1}{V} Tr (C_1 + C_2 + \dots) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{g_N}{V} Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right]_{c_N} z^N. \quad (2.69)$$

E comparando esta última equação com (2.49), obtemos

$$b_N = \frac{g_N}{V} Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right]_{c_N}. \quad (2.70)$$

Este resultado comprova a equação (2.58) para sistemas quânticos.

O fato de b_N ser constituído apenas de diagramas conexos é importante para explicitar a existência do limite termodinâmico. As interações referentes a um diagrama de N partículas dependem das posições de $N - 1$ partículas. Ou seja, uma vez fixado um referencial não devemos ter uma direção preferencial para a

interação (hipótese de não localidade). Supondo interações de curto alcance, a integração de $N - 1$ coordenadas em (2.53) deve se estender a uma região limitada, sendo esta região independente do volume V do sistema. Neste caso, devido à integração da coordenada restante, todos os diagramas conexos serão proporcionais a V , e conseqüentemente b_N independe do volume do sistema. Portanto, no limite termodinâmico $b_N(T, V)$ tende a um valor finito $b_N(T)$.

Sistema clássico não relativístico

Segundo (2.34) temos:

$$U_1^C(\vec{r}_1) = W_1^C(\vec{r}_1) = \frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3}, \quad (2.71)$$

$$U_2^C(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3} \right)^2 f(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.72)$$

onde

$$f_{ij} \equiv e^{-\beta V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)} - 1 \quad (2.73)$$

é chamada de *função de Mayer*.

Com o auxilio de (2.34), é possível mostrar que as funções de clusters clássicas podem ser decompostas em produtos de funções de Mayer [37], por exemplo:

$$\begin{aligned} U_3^C(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) &= \left(\frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3} \right)^3 (e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} \\ &\quad - e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} - e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} - e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} + 2) \\ &= \left(\frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3} \right)^3 [(e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} - 1)(e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} - 1)(e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} - 1) \\ &\quad + e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} + e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} + e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} \\ &\quad - 2e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} - 2e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} - 2e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} + 3] \\ &= \left(\frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3} \right)^3 [f_{12}f_{13}f_{23} + (e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} - 1)(e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} - 1) + \\ &\quad + (e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} - 1)(e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} - 1) + (e^{-\beta V(\vec{r}_1, \vec{r}_3)} - 1)(e^{-\beta V(\vec{r}_2, \vec{r}_3)} - 1)] , \end{aligned}$$

$$U_3^C(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \left(\frac{e^{-\beta m}}{\lambda^3} \right)^3 [f_{12}f_{13}f_{23} + f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23}]. \quad (2.74)$$

Esta decomposição pode ser feita em todas as ordens, onde as funções de Mayer serão sempre os entes fundamentais na determinação dos $U_N^C(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$.

Baseados nas funções de Ursell em termos de $f(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$, podemos escrever as três primeiras integrais de cluster na forma de diagramas conexos:

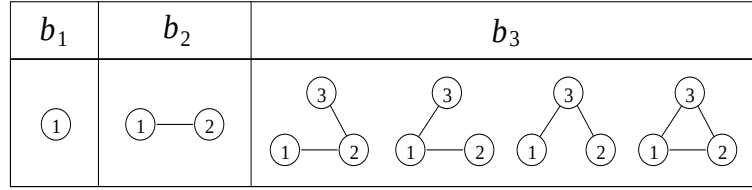


Figura 2.3: Diagramas clássicos que determinam os três primeiras integrais de cluster. Cada linha representa uma função de Mayer. Note que, a rigor, b_1 não é um diagrama conexo.

O número de diagramas conexos cresce muito rápido conforme N aumenta. Por exemplo, para $N = 2$ temos um diagrama, para $N = 3$ temos quatro diagramas e para $N = 4$ temos trinta e oito diagramas.

Sistema quântico relativístico

Por uma série de motivos, o caso quântico relativístico é bem mais complicado do que o sistema clássico não-relativístico:

- Um sistema relativístico não possui uma função de interação como os potenciais. De fato, a determinação de uma hamiltoniana de interação H_I é muito mais complicada.
- Existem efeitos de correlação devido à estatística quântica. Estes efeitos aparecem misturados com os efeitos dinâmicos (interações).
- Sistemas quânticos podem possuir estados ligados discretos.

Apesar disto, existe um formalismo bastante geral que possibilita escrever as funções de Ursell em termos da matriz S [33].

Assim como existe um operador $\hat{W}_N$ (2.38) associado a uma função $W_N^Q(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$, podemos definir um operador $\hat{U}_N$ tal que

$$U_N^Q(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \equiv N! \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{U}_N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle. \quad (2.75)$$

Substituindo (2.75) em (2.53) obtemos:

$$b_N = \frac{g_N}{V} \int_{\Omega} \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{U}_N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle d^{3N}r = \frac{g_N}{V} \text{Tr} \hat{U}_N. \quad (2.76)$$

Por comparação direta com (2.70) vemos que

$$Tr \hat{U}_N = Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N} \right]_{c_N}. \quad (2.77)$$

Para poder escrever os b_N em termos da matriz S é necessário separar os efeitos estatísticos dos efeitos dinâmicos, pois são somente estes últimos que influenciam a matriz S . O procedimento padrão de realizar esta separação é construir

$$b_N^{(0)} = \frac{g_N}{V} Tr \hat{U}_N^{(0)}, \quad (2.78)$$

onde o índice 0 representa o sistema livre (sem interação).

Como $\hat{U}_N^{(0)}$ é livre, ele contém apenas efeitos estatísticos. Portanto, basta subtrair (2.78) de (2.76) para ficarmos apenas com efeitos dinâmicos:

$$b_N - b_N^{(0)} = \frac{g_N}{V} Tr \left(\hat{U}_N - \hat{U}_N^{(0)} \right). \quad (2.79)$$

Com o auxílio de (2.79) e (2.49), obtem-se:

$$\Omega - \Omega_0 = \sum_{N=1}^{\infty} \left(b_N - b_N^{(0)} \right) z^N. \quad (2.80)$$

O próximo passo é mostrar que $Tr \left(\hat{U}_N - \hat{U}_N^{(0)} \right)$ pode ser escrito em termos de um operador $\hat{S}$ associado à matriz S (ver capítulo 3). Utilizando (2.36), (2.54), (2.55), (2.56) e (2.75) determina-se os três primeiros termos:

Primeiro termo:

$$Tr \left(\hat{U}_1 - \hat{U}_1^{(0)} \right) = Tr \hat{W}_1 - Tr \hat{W}_1^{(0)} = Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_1} - Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_1^{(0)}} = 0, \quad (2.81)$$

onde a última igualdade ocorre pois $\hat{H}_1 = \hat{H}_1^{(0)}$ (partícula livre).

Segundo termo:

$$\begin{aligned} Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right) &= Tr \hat{W}_2 - Tr \left(\hat{W}_1 \hat{W}_1 \right) - \left[Tr \hat{W}_2^{(0)} - Tr \left(\hat{W}_1^{(0)} \hat{W}_1^{(0)} \right) \right] \\ &= Tr \hat{W}_2 - Tr \hat{W}_2^{(0)} = Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_2} - Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_2^{(0)}}, \end{aligned} \quad (2.82)$$

sendo $\hat{H}_2$ o operador hamiltoniano de duas partículas.

Terceiro termo:

$$\begin{aligned}
Tr \left(\hat{U}_3 - \hat{U}_3^{(0)} \right) &= Tr \hat{W}_3 - \sum_{i < j=1 \text{ e } k \neq i,j}^3 Tr \left(\hat{W}_2^{ij} \hat{W}_1^k \right) + 2Tr \left(\hat{W}_1 \hat{W}_1 \hat{W}_1 \right) + \\
&\quad - \left[Tr \hat{W}_3^{(0)} - \sum_{i < j=1 \text{ e } k \neq i,j}^3 Tr \left(\hat{W}_2^{ij(0)} \hat{W}_1^{k(0)} \right) + 2Tr \left(\hat{W}_1^{(0)} \hat{W}_1^{(0)} \hat{W}_1^{(0)} \right) \right] \\
&= Tr \hat{W}_3 - Tr \hat{W}_3^{(0)} - \sum_{i < j=1 \text{ e } k \neq i,j}^3 \left[Tr \left(\hat{W}_2^{ij} \hat{W}_1^k \right) - Tr \left(\hat{W}_2^{ij(0)} \hat{W}_1^{k(0)} \right) \right] \\
&= Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_3} - Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_3^{(0)}} \\
&\quad - Tr \left[\hat{A} \left(\sum_{i < j=1 \text{ e } k \neq i,j}^3 e^{-\beta (\hat{H}_{ij} + \hat{H}_k)} - e^{-\beta (\hat{H}_{ij}^{(0)} + \hat{H}_k^{(0)})} \right) \right], \quad (2.83)
\end{aligned}$$

onde $\hat{H}_3$ é o operador Hamiltoniano de três partículas. Já $\hat{H}_{ij}$ é o Hamiltoniano de dois corpos e $\hat{H}_k$ o Hamiltoniano de um único corpo com a soma gerando três termos ($\hat{H}_{12} + \hat{H}_3$; $\hat{H}_{13} + \hat{H}_2$; $\hat{H}_{23} + \hat{H}_1$). Note que a junção dos operadores $\hat{H}_{ij}$ com $\hat{H}_k$ pode ser realizada, pois eles atuam em sub-espacos distintos e portanto comutam entre si.

Uma análise mais detalhada dos termos superiores revela que o traço de $(\hat{U}_N - \hat{U}_N^{(0)})$ é composto de combinações lineares do tipo

$$Tr \left(\hat{A}' e^{-\beta \hat{H}'} \right) - Tr \left(\hat{A}' e^{-\beta \hat{H}'^{(0)}} \right). \quad (2.84)$$

Por exemplo, (2.83) possui quatro termos deste tipo: no primeiro $\hat{H}' = \hat{H}_3$ e nos outros três $\hat{H}' = \hat{H}_{ij} + \hat{H}_k$.

O procedimento de relacionar o operador densidade de probabilidade $\hat{W}'$ com a matriz S começa na definição de operadores de Green, como segue:

$$\hat{G}'(\varsigma) \equiv (\varsigma - \hat{H}')^{-1} \quad \text{e} \quad \hat{G}'^{(0)}(\varsigma) \equiv (\varsigma - \hat{H}'^{(0)})^{-1}, \quad (2.85)$$

sendo ς é uma variável complexa, que quando identificada com o espectro de $\hat{H}'$ e $\hat{H}'^{(0)}$ gera pólos. O fato de estarmos usando o mesmo ς para ambos os operadores $\hat{G}'$ e $\hat{G}'^{(0)}$ têm implicações sobre o processo de espalhamento e será discutido no próximo capítulo.

Para escrever o traço de $\hat{W}'$ em termos de $\hat{G}'(\varsigma)$ devemos realizar uma extensão analítica na região de integração de ς . Sabendo que o Hamiltoniano $\hat{H}'$ obedece a uma equação de autovalores tipo (2.37), procedemos com todos os cálculos e

obtemos:

$$Tr \hat{W}' = Tr \left(\hat{A}' e^{-\beta \hat{H}'} \right) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varsigma}{\pi} e^{-\beta \varsigma} Im Tr \left[\hat{A}' \hat{G}'(\varsigma) \right] d\varsigma. \quad (2.86)$$

Os detalhes são apresentados no apêndice B.

Portanto, partindo de (2.86) podemos reescrever (2.82) e (2.83) como:

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varsigma}{\pi} e^{-\beta \varsigma} Im Tr \left[\hat{A} \left(\hat{G}_2 - \hat{G}_2^{(0)} \right) \right] d\varsigma, \quad (2.87)$$

com $\hat{G}_2$ sendo o operador de Green de $\hat{H}_2$, e

$$Tr \left(\hat{U}_3 - \hat{U}_3^{(0)} \right) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varsigma}{\pi} e^{-\beta \varsigma} Im Tr \left[\hat{A} \left(\hat{G}_3 - \hat{G}_3^{(0)} \right) - \sum_{i < j=1}^3 \hat{A}_{ij} \left(\hat{G}_{ij} - \hat{G}_{ij}^{(0)} \right) \right] d\varsigma, \quad (2.88)$$

onde $\hat{G}_3$ é dado por $\hat{H}_3$ e $\hat{G}_{ij} \equiv (\varsigma - \hat{H}_{ij} - \hat{H}_k)^{-1}$.

O próximo passo é definir os operadores $\hat{T}$, $\hat{\Omega}$, e $\hat{S}$, todos funções da variável complexa ς :

$$\hat{T}(\varsigma) \equiv \hat{V} + \hat{V} \hat{G}(\varsigma) \hat{V}; \quad \hat{\Omega}(\varsigma) \equiv \hat{G}(\varsigma) \left[\hat{G}^{(0)}(\varsigma) \right]^{-1} \quad (2.89)$$

$$\hat{S}(\varsigma) \equiv \hat{\Omega}^{-1}(\varsigma^*) \hat{\Omega}(\varsigma), \quad \text{com} \quad \hat{V} \equiv g \hat{H}_I = \hat{H} - \hat{H}^{(0)}. \quad (2.90)$$

Observação: por economia de notação, suprimimos o “linha” nos operadores Hamiltonianos e de Green.

A partir destas definições, pode-se provar as seguintes identidades (ver apêndice B):

$$\hat{\Omega} = 1 + \hat{G}^{(0)} \hat{T}; \quad \hat{T} = \hat{V} \hat{\Omega}; \quad (2.91a)$$

$$\hat{G} = \hat{G}^{(0)} + \hat{G}^{(0)} \hat{T} \hat{G}^{(0)}; \quad \hat{\Omega}^{-1} = 1 - \hat{G}^{(0)} \hat{V}; \quad (2.91b)$$

$$\hat{G}^{(0)\dagger} = \hat{G}^{(0)*}; \quad \hat{G}^\dagger = \hat{G}^* \quad \text{e} \quad \hat{T}^\dagger = \hat{T}^*, \quad (2.91c)$$

onde o “dagger” representa a conjugação hermitiana e o asterisco a operação de conjugação complexa.

Agora, munidos das definições (2.89) e (2.90) e das quatro identidades (2.91a) e (2.91b), vamos estabelecer a importante relação

$$-4i\text{Im}Tr \left[\hat{G}(\varsigma) - \hat{G}^{(0)}(\varsigma) \right] = Tr \left[\hat{S}^{-1} \frac{\partial \hat{S}}{\partial \varsigma} - \frac{\partial \hat{S}^{-1}}{\partial \varsigma} \hat{S} \right] \equiv Tr \left[\hat{S}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{S} \right]. \quad (2.92)$$

Para proceder com esta verificação substituímos (2.90) em (2.92) e usamos a propriedade cíclica do traço:

$$\begin{aligned} Tr \left[\hat{S}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{S} \right] &= Tr \left[\left(\left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} \right)^{-1} \frac{\partial \left(\left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} \right)}{\partial \varsigma} - \frac{\partial \left(\left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} \right)^{-1}}{\partial \varsigma} \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} \right] \\ &= Tr \left[\hat{\Omega}^{-1} \hat{\Omega}^* \frac{\partial \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1}}{\partial \varsigma} \hat{\Omega} + \hat{\Omega}^{-1} \hat{\Omega}^* \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \varsigma} + \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial \hat{\Omega}^{-1}}{\partial \varsigma} \hat{\Omega}^* \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} + \hat{\Omega}^{-1} \frac{\partial \hat{\Omega}^*}{\partial \varsigma} \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} \right) \right] \\ &= Tr \left[\hat{\Omega}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{\Omega} + \hat{\Omega}^* \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Utilizando (2.91b) no primeiro termo de (2.93) e lembrando que $\hat{V}$ não depende de ς ($\frac{\partial \hat{V}}{\partial \varsigma} = 0$), temos:

$$\hat{\Omega}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{\Omega} = \left(1 - \hat{G}^{(0)} \hat{V} \right) \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{\Omega} = \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \varsigma} - \hat{G}^{(0)} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \left(\hat{V} \hat{\Omega} \right). \quad (2.94)$$

A seguir, substituímos (2.91a) em (2.94):

$$\hat{\Omega}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{\Omega} = \frac{\partial \left(1 + \hat{G}^{(0)} \hat{T} \right)}{\partial \varsigma} - \hat{G}^{(0)} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{T} = \frac{\partial}{\partial \varsigma} \left(\hat{G}^{(0)} \hat{T} \right) - \hat{G}^{(0)} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{T} = 2 \frac{\partial \hat{G}^{(0)}}{\partial \varsigma} \hat{T}. \quad (2.95)$$

Agora, lembrando da definição (2.85) de $\hat{G}^{(0)}$, segue:

$$\frac{\partial \hat{G}^{(0)}}{\partial \varsigma} = \frac{\partial (\varsigma - \hat{H}^{(0)})^{-1}}{\partial \varsigma} = -(\varsigma - \hat{H}^{(0)})^{-2} = -\left(\hat{G}^{(0)} \right)^2. \quad (2.96)$$

Então, substituindo (2.96) em (2.95) obtemos,

$$\hat{\Omega}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{\Omega} = -2 \left(\hat{G}^{(0)} \right)^2 \hat{T}. \quad (2.97)$$

Para o caso do complexo conjugado de (2.93), podemos usar a propriedade cíclica do traço e obter uma fórmula análoga ao caso anterior,

$$Tr \left[\hat{\Omega}^* \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \right] = Tr \left[\frac{\partial \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1}}{\partial \varsigma} \hat{\Omega}^* - \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \frac{\partial \hat{\Omega}^*}{\partial \varsigma} \right] = -Tr \left[\left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \hat{\Omega}^* \right]. \quad (2.98)$$

Como o complexo conjugado atua somente na variável ς , concluímos que

$$\left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \hat{\Omega}^* = -2 \left(\left(\hat{G}^{(0)} \right)^2 \hat{T} \right)^*. \quad (2.99)$$

Com o auxílio de (2.97), (2.98), (2.99), (2.93) e (2.91b) e usando novamente a ciclicidade do traço, provamos finalmente a relação (2.92):

$$Tr \left[\hat{S}^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \hat{S} \right] = -Tr \left[2 \left(\hat{G}^{(0)} \right)^2 \hat{T} - 2 \left(\left(\hat{G}^{(0)} \right)^2 \hat{T} \right)^* \right] = -4i Im Tr \left[\hat{G} - \hat{G}^{(0)} \right]. \quad (2.100)$$

Portanto, através desta relação, a equação (2.86) pode ser reescrita em termos do operador $\hat{S}$:

$$Tr \left[\hat{A}' \left(e^{-\beta \hat{H}'} - e^{-\beta \hat{H}'^{(0)}} \right) \right] = \int \frac{d\varsigma}{4\pi i} e^{-\beta \varsigma} Tr \left[\hat{A}' \left(\hat{S}' \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \left(\hat{S}' \right) \right]. \quad (2.101)$$

Note que a introdução de $\hat{A}'$ é trivial uma vez que ele comuta com todos os outros operadores.

Partindo deste último resultado é possível reescrever (2.87) e (2.88) da seguinte forma:

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta \varsigma}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A} \hat{S}_2^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \hat{S}_2 \right) d\varsigma, \quad (2.102)$$

$$Tr \left(\hat{U}_3 - \hat{U}_3^{(0)} \right) = \int dE \frac{e^{-\beta E}}{4\pi i} \left[Tr \left(\hat{A} \hat{S}_3^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_3 \right) - Tr \left[\left(\sum_{i < j=1}^3 \hat{A}_{ij} \hat{S}_{ij}^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_{ij} \right) \right] \right], \quad (2.103)$$

com $\hat{S}_2$ associado a $\hat{H}_2$, $\hat{S}_3$ associado a $\hat{H}_3$ e S_{ij} associado a $\hat{H}_{ij} + \hat{H}_k$.

De um modo geral, a estrutura de (2.101) determina a forma das integrais de cluster:

$$b_N - b_N^{(0)} = \frac{g_N}{V} \int \frac{e^{-\beta \varsigma}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A} \hat{S}^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \varsigma} \hat{S} \right)_{\tilde{c}_N} d\varsigma. \quad (2.104)$$

O subescrito $\tilde{c}_N$ representa todos os diagramas conexos de N partículas, em que a interação atua ao menos uma vez.

Esta última equação é uma das equações fundamentais para o tratamento estatístico quântico relativístico no equilíbrio. No próximo capítulo mostraremos que $\hat{S}$ representa de fato o operador associado à matriz S física[§] da teoria usual do espalhamento. Uma vez que $\hat{S}$ encontra-se na camada de massa, pode-se mostrar que o traço do operador $\hat{A}\hat{S}^{-1}\overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}}\hat{S}$ também o está [33].

2.2 Equações de estado

Do ponto de vista termodinâmico, equações de estado (EoS) são um conjunto de equações ligadas à primeira lei da termodinâmica capazes de descrever o comportamento global do sistema. Por exemplo, se a primeira lei é expressa na representação da entropia*,

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN, \quad (2.105)$$

então as EoS deste sistema são dadas por:

$$\frac{1}{T}(U, V, N) \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, N}, \quad (2.106a)$$

$$\frac{p}{T}(U, V, N) \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{U, N}, \quad (2.106b)$$

$$\frac{\mu}{T}(U, V, N) \equiv - \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{U, V}. \quad (2.106c)$$

Por outro lado, a ligação da termodinâmica com a mecânica estatística (desenvolvida previamente) se dá através do limite termodinâmico. De um modo geral, este limite consiste em fazermos as grandezas extensivas (S , U , V , N etc) tenderem ao infinito, mantendo as razões entre elas finitas. O papel deste limite vai além da conexão entre a mecânica estatística e a termodinâmica. É através dele que a ME desenvolvida previamente se torna uma teoria física. Veremos no capítulo seguinte que o traço da matriz S só apresenta elementos na camada de massa quando tomamos o limite termodinâmico. Portanto, é de suma importância que este limite exista.

Dito isso, é interessante expressarmos a primeira lei em termos da densidade numérica n e da densidade de energia ρ ,

[§]Todos os seus elementos estão na camada de massa, i.e., ς faz parte do espectro de $H^{(0)}$.

*Por simplicidade, continuamos com um sistema de uma componente.

$$n \equiv \frac{N}{V} \quad \text{e} \quad \rho \equiv \frac{U}{V}. \quad (2.107)$$

Depois de algumas manipulações obtemos:

$$dS = \frac{V}{T} d\rho + \frac{\rho + p - \mu n}{T} dV - \frac{\mu V}{T} dn. \quad (2.108)$$

A primeira lei na forma de (2.108) implica que a entropia S é função de ρ , V e n . Agora como S , U , N e V são grandezas extensivas podemos escrever a seguinte relação:

$$S(\rho, \lambda V, n) = \lambda S(\rho, V, n). \quad (2.109)$$

Derivando esta relação em termos de λ e depois pondo $\lambda = 1$, segue:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} [S(\rho, \lambda V, n)] &= \frac{d}{d\lambda} [\lambda S(\rho, V, n)] \Rightarrow \left(\frac{\partial S(\rho, \lambda V, n)}{\partial(\lambda V)} \right)_{\rho, n} \frac{\partial(\lambda V)}{\partial \lambda} = S(\rho, V, n) \stackrel{\lambda=1}{\Rightarrow} \\ \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{\rho, n} V &= S(\rho, V, n) \quad \Rightarrow \quad S = \frac{(\rho + p - \mu n) V}{T}. \end{aligned} \quad (2.110)$$

A equação (2.110) é a versão da relação de Euler para as densidades numérica e de energia. Diferenciando esta relação obtemos:

$$dS = \frac{(\rho + p - \mu n)}{T} dV + \frac{V}{T} d\rho + \frac{V}{T} dp - \frac{V\mu}{T} dn - \frac{Vn}{T} d\mu - \frac{(\rho + p - \mu n) V}{T^2} dT. \quad (2.111)$$

Agora, comparando esta última equação com a 1ª lei, segue a equação de Gibbs-Duhem:

$$dp - n d\mu - \frac{(\rho + p - \mu n)}{T} dT = 0. \quad (2.112)$$

De (2.112) podemos então inferir que

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\mu} = \frac{(\rho + p - \mu n)}{T} \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_T = n. \quad (2.113)$$

Uma importante consequência da equação de Gibbs-Duhem é que, das três equações de estado associadas à (2.108)

$$\frac{V}{T}(\rho, V, n) \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_{V, n}, \quad (2.114a)$$

$$\frac{S}{V} = s(\rho, V, n) \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{\rho, n}, \quad (2.114b)$$

$$-\frac{\mu V}{T}(\rho, V, n) \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial n} \right)_{\rho, V}, \quad (2.114c)$$

apenas duas são independentes.

Em um sistema termodinâmico constituído de uma entropia extensiva dependente de M variáveis, é necessário conhecermos $M - 1$ equações de estado para descrever o sistema completamente.

Como se sabe, além da representação da entropia, existe uma série de representações distintas e equivalentes capazes de descrever um sistema termodinâmico. Cada uma destas representações está associada a funções especiais conhecidas como *potenciais termodinâmicos*. Apesar destes potenciais apresentarem características distintas, a descrição do sistema independe da representação escolhida. Portanto, o que dita a utilização de um determinado potencial é a conveniência.

O potencial termodinâmico que surge naturalmente da mecânica estatística é o potencial macrocanônico Ω definido em (2.47). O conceito probabilístico inerente à mecânica estatística [21] nos permite escrever

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{\Theta(V, T, z)} \sum_{a,r} \frac{N_r}{V} e^{-\beta E_a} z^{N_r}, \quad (2.115)$$

$$\rho = \frac{E}{V} = \frac{1}{\Theta(V, T, z)} \sum_{a,r} \frac{E_a}{V} e^{-\beta E_a} z^{N_r}, \quad (2.116)$$

onde

$$\Theta(V, T, z) = \sum_{a,r} e^{-\beta E_a} z^{N_r}. \quad (2.117)$$

Utilizando (2.47) podemos reescrever n e ρ em termos de Ω :

$$n(z, \beta) = z \frac{\partial}{\partial z} \left[\ln \frac{\Theta(V, T, z)}{V} \right]_{\beta} = z \left(\frac{\partial \Omega}{\partial z} \right)_{\beta}, \quad (2.118)$$

$$\rho(z, \beta) = - \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \frac{\Theta(V, T, z)}{V} \right]_z = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \beta} \right)_z. \quad (2.119)$$

As duas equações acima sugerem que

$$d\Omega = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \beta} \right)_z d\beta + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial z} \right)_{\beta} dz = -\rho d\beta + \frac{n}{z} dz. \quad (2.120)$$

Agora, lembrando que $\beta = 1/kT$ e $z = e^{-\beta\mu}$, reescremos (2.120) como:

$$d\Omega = - \frac{(\rho + \mu n)}{(kT)^2} d(kT) + \frac{n}{kT} d\mu. \quad (2.121)$$

O próximo passo é introduzir em (2.121) a primeira lei da termodinâmica sob a forma de (2.108):

$$d\Omega = \frac{dS}{kV} - \frac{1}{kT}d\rho + \frac{1}{V} \frac{\rho + p - \mu n}{kT}dV - \frac{\mu}{kT}dn - \frac{(\rho + \mu n)}{(kT)^2}d(kT) + \frac{n}{kT}d\mu. \quad (2.122)$$

Observe que, por questões dimensionais, dividimos (2.108) por kV .

Rearranjando os termos desta última equação e utilizando (2.110) vemos que

$$d\Omega = d\left(\frac{S}{kV} - \frac{\rho}{kT} + \frac{\mu n}{kT}\right) \Rightarrow \Omega = \frac{S}{kV} - \frac{(\rho - \mu n)}{kT}. \quad (2.123)$$

Por fim, comparando este último resultado com (2.110) obtemos:

$$\frac{p(z, \beta)}{kT} = \Omega. \quad (2.124)$$

As equações (2.118), (2.119) e (2.124) nos permitem determinar a pressão p , a densidade numérica n e a densidade de energia ρ de um sistema estatístico descrito pelo ensemble macrocanônico. Estas equações são a base das EoS cosmológicas construídas no capítulo 5.

Na seção 2.1.2 vimos que o potencial macrocanônico pode ser escrito como uma série na fugacidade, (2.49). Neste caso, p , n e ρ são dados por:

$$\frac{p(z, T)}{kT} = \Omega(z, \beta) = \sum_{N=1}^{\infty} b_N z^N, \quad (2.125a)$$

$$n(z, T) = z \left(\frac{\partial \Omega(z, \beta)}{\partial z} \right)_{\beta} = \sum_{N=1}^{\infty} N b_N z^N, \quad (2.125b)$$

$$\rho(z, T) = - \left(\frac{\partial \Omega(z, \beta)}{\partial \beta} \right)_z = - \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\partial b_N}{\partial \beta} z^N, \quad (2.125c)$$

onde já supomos tomado o limite termodinâmico das integrais de cluster b_N dadas em (2.53).

As funções $p(z, T)$, $n(z, T)$ e $\rho(z, T)$ formarão o conjunto A de equações de estado.

Uma alternativa para a descrição do sistema de uma componente é construir equações para a pressão $p(n, T)$ e para a densidade de energia $\rho(n, T)$ através da “inversão” de $n(z, T)$. Este tipo de expansão é conhecida como *expansão do virial*:

$$\frac{p(n, T)}{kT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l(T) n^l, \quad (2.126a)$$

$$\frac{\rho(n, T)}{(kT)^2} = \sum_{l=1}^{\infty} c_l(T) n^l, \quad (2.126b)$$

onde a_l e c_l são os coeficientes do virial para a pressão e a densidade de energia, respectivamente. Estes coeficientes são completamente determinados pelos b_N 's. No apêndice C apresentamos as formas explícitas dos primeiros coeficientes de a_l e c_l .

As funções $p(n, T)$, $\rho(n, T)$ e $n(z, T)$ formarão o conjunto B de equações de estado.

Baseados nestas cinco últimas equações, podemos obter também outros dois conjuntos de EoS distintos: $p(n, T)$, $\rho(z, T)$ e $n(z, T)$ que chamaremos de conjunto C ; $p(z, T)$, $\rho(n, T)$ e $n(z, T)$ que chamaremos de conjunto D . É possível ainda construir outros conjuntos de equações de estado, como por exemplo EoS baseadas na expansão em termos da constante de acoplamento, eq. (2.3), porém este tipo de estudo foge ao escopo desta tese.

Na sua forma completa os quatro conjuntos A , B , C e D são equivalentes, porém eles diferem quando truncamos as respectivas séries em uma determinada ordem. Como para fins práticos não é possível somar estas séries, devemos então realizar um estudo comparando as características perturbativas destes quatro conjuntos.

Esta análise pode ser feito através de diversos procedimentos, envolvendo desde critérios formais (termodinâmicos e estatísticos), a até critérios fenomenológicos ligados a considerações físicas e resultados experimentais. Apresentaremos a seguir, alguns critérios que ajudarão a decidir qual é o conjunto mais conveniente para aplicarmos na cosmologia pré-nucleossíntese.

2.2.1 O significado físico das quantidades p , ρ e n

Dentro do escopo da mecânica estatística no equilíbrio, as densidades numérica n e de energia ρ têm um significado físico bastante preciso. Estas duas quantidades são médias ponderadas pelo fator de Boltzmann, que no caso do ensemble macrocanônico são expressas pelas equações (2.115) e (2.116). Comparando (2.117) com (2.4), é imediato perceber que (2.115) e (2.116) estão associadas a séries na fugacidade, ou seja $n(z, T)$, (2.118) e $\rho(z, T)$, (2.119).

Por outro lado, se utilizarmos a série do virial $\rho(n, T)$, a noção estatística associada à densidade de energia se perde, podendo inclusive, no caso do truncamento em uma dada ordem, levar a resultados físicos estranhos.

Para entender melhor estas idéias, vamos estudar um sistema específico, onde a Hamiltoniana de dois corpos é constituída de B estados discretos. Podemos idealizar este sistema como sendo um sistema quântico não relativístico onde os únicos estados interagentes relevantes sejam os estados ligados. Então, baseado em (2.79) e (2.82) temos:

$$b_2 \simeq \sum_B e^{-\beta E_B}. \quad (2.127)$$

Note que estamos ignorando os efeitos da estatística quântica.

Neste caso, o segundo coeficiente da série de $\rho(z, T)$, eq. (2.125c), resulta em

$$-\frac{\partial b_2}{\partial \beta} = \sum_B E_B e^{-\beta E_B}. \quad (2.128)$$

A equação acima apresenta claramente a idéia de média estatística sobre as energias dos estados discretos.

Por outro lado, o segundo coeficiente do virial c_2 (C.4b), presente na série de $\rho(n, T)$, eq. (2.126b), é dado por:

$$c_2 = \frac{1}{b_1^2} \left[\sum_B \left(E_B + \frac{2}{b_1} \frac{\partial b_1}{\partial \beta} \right) e^{-\beta E_B} \right], \quad (2.129)$$

com $b_1 > 0$ e $\frac{\partial b_1}{\partial \beta} < 0$, devido a imposição de positividade de n e ρ no caso ideal.

O coeficiente c_2 , além de não possuir a forma usual de média estatística dos estados discretos, apresenta também um comportamento estranho em alguns casos de E_B positivo. De fato, é possível termos c_2 negativo com todos os E_B positivos.

Este tipo de argumento privilegia a equação $\rho(z, T)$ em detrimento da equação $\rho(n, T)$.

Diferentemente de n e ρ , a pressão p não possui uma interpretação ligada a médias estatísticas. No contexto da mecânica estatística usual, a idéia de pressão só aparece quando tomamos o limite termodinâmico.

Um outro meio de atribuir um significado físico ao conceito de pressão é através do tensor de *stress* Π_{ij} . Este meio é bastante interessante, pois Π_{ij} nada mais é do que a parte espacial do tensor energia-momento de um fluido $T_{\mu\nu}$. Ou seja, a pressão que aparece no modelo do Big-Bang está diretamente relacionada com Π_{ij} .

Por questão de simplicidade, vamos restringir o estudo do tensor de stress a sistemas clássicos não relativísticos. Segundo a abordagem padrão [35], Π_{ij} é definido através da *pressão interna* p , que é diferente da *pressão superficial* $\tilde{p}$ de um sistema.

Definimos pressão superficial, considerando $\tilde{p} dS dn$ como sendo 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 à 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 pelas partículas 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 partículas 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 obedeçam à terceira lei de Newton.

O stress Π_{ij} é definido, em geral, como um tensor simétrico de segunda ordem, com seis componentes independentes: $p_{xx}, p_{yy}, p_{zz}, p_{xy}, p_{xz}, p_{yz}$. No caso de termos um fluido perfeito, o stress medido por um observador comóvel se reduz necessariamente à forma $p_{xx} = p_{yy} = p_{zz} = p$, $p_{xy} = p_{xz} = p_{yz} = 0$, devido à isotropia do fluido neste referencial. A componente p deste tensor é chamada de pressão interna.

A forma simplificada das componentes de Π_{ij} e o cálculo explícito de p através de qualquer superfície interna são imediatos para fluidos ideais (sem interação). Neste caso a força entre as partículas é desprezível, e portanto a componente p_{xx} é tão somente a taxa de transferência de x -momento através da unidade de superfície unitária normal ao eixo x .

Partículas com velocidade entre u e $u + du$ carregam momento mu através da superfície interna, e a quantidade de partículas que cruzam uma unidade de área no tempo dt , nada mais é do que o número de partículas $\tilde{n}$ presente no volume udt . Portanto, pela lei de distribuição de Maxwell, $\tilde{n}$ é dado por:

$$\tilde{n}(u) = \frac{N}{V} u dt \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{mu^2}{2kT}} du, \quad (2.130)$$

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

$$p_{xx} = \int \tilde{n}(u) m u du = \frac{Nm}{V} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-\frac{mu^2}{2kT}} du = \frac{N}{V} kT. \quad (2.131)$$

Resultados idênticos são obtidos para p_{yy} e p_{zz} .

Com um cálculo similar a (2.131), é fácil de verificar que a 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 $p_{xz} = p_{yz} = 0$.

Portanto, podemos escrever

$$p_{ideal} = nkT. \quad (2.132)$$

A equação (2.132) representa a pressão interna de um fluido sem interação. Note que através de modelos simples de teoria cinética dos gases, obtemos a mesma equação de estado para um gás ideal [36]. Porém, a pressão calculada via teoria cinética é uma pressão exercida pelas partículas sobre a superfície do recipiente. O que ocorre é que *na ausência de campos externos, a pressão interna é constante em toda parte do fluido, e é igual à pressão na fronteira.*

Vamos supor agora que estamos tratando não mais com um fluido ideal e sim com um fluido de partículas interagentes. Então, para o cálculo da pressão interna, além do termo de fluido ideal (2.132), obtido através da transferência de momento, temos também um termo extra baseado na interação 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[†] igual à pressão de fronteira.

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

Considerando uma fatia de um plano infinito de espessura df , vamos 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 .

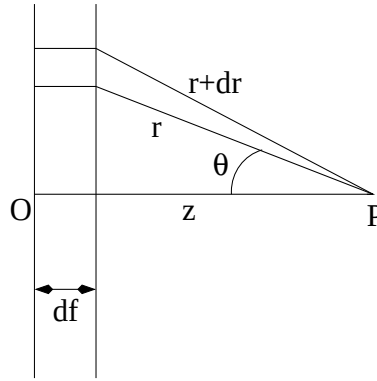


Figura 2.4 - Geometria do sistema de interesse.

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

$$n(r) = 2\pi r dr \frac{N}{V} df \exp[-V(r)/kT], \quad (2.133)$$

onde $V(r)$ é o potencial entre pares de partículas.

Esta equação é conhecida como lei de distribuição de Boltzmann para pares de partículas, válida somente para sistemas em equilíbrio termodinâmico.

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

$$dF_{PO} = n(r) \cos \theta \left(-\frac{\partial V}{\partial r} \right) = 2\pi \frac{N}{V} z df \left(-\frac{\partial V}{\partial r} \right) \exp[-V(r)/kT] dr. \quad (2.134)$$

[†]Esta afirmação é válida apenas no caso de potenciais centrais.

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

$$dF = \frac{2\pi N}{V} z df \int_z^\infty \left(-\frac{\partial V}{\partial r} \right) \exp[-V(r)/kT] dr = \frac{-2\pi N kT}{V} z df \{ \exp[-V(z)/kT] - 1 \}. \quad (2.135)$$

Observe que, por simetria, 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:

$$dp_{int} = \frac{dF}{dS} = -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} z dz df \{ \exp[-V(z)/kT] - 1 \}. \quad (2.136)$$

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 $V(r)$:

$$\begin{aligned} p_{int} &= -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} \int_0^\infty \int_0^\infty (z + f) dz df \{ \exp[-V(z + f)/kT] - 1 \} \Rightarrow \\ p_{int} &= -2\pi \frac{N^2 kT}{V^2} \int_0^\infty x dx \{ \exp[-V(x)/kT] - 1 \} \int_0^x dy \Rightarrow \\ p_{int} &= -2\pi kT \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int_0^\infty (e^{-V(r)/kT} - 1) r^2 dr = a_2(T) n^2 kT, \end{aligned} \quad (2.137)$$

sendo $a_2(T)$ o segundo coeficiente do virial para sistemas clássicos não degenerados dados por (C.2b) e (2.53).

Se juntarmos as equações (2.132), (2.137) e (C.2a) obtemos

$$\frac{p(n, T)}{kT} = a_1(T) n + a_2(T) n^2, \quad (2.138)$$

que é exatamente a mesma equação (2.126a) truncada em segunda ordem.

Portanto, para sistemas clássicos não relativísticos a pressão $p(n, T)$ possui um significado físico bastante claro, diferentemente de $p(z, T)$.

[‡]A fatia de espessura df foi colocada na origem, mas de modo geral ela está a uma distância f da origem.

2.2.2 Comparação explícita entre as série z e n para a pressão

Como dito no começo do capítulo, a expansão em série da função de partição (ou das equações de estado) só representará de fato as quantidades termodinâmicas desejadas se a série for convergente. Esta condição é essencial também para podermos utilizar a teoria de perturbação e deixar o sistema bem mais tratável.

Até o presente momento desenvolvemos três tipos de expansões distintas: a primeira em termos da constante de acoplamento g , conveniente para sistemas fracamente acoplados; a segunda em termos da fugacidade z , conveniente quando z é razoavelmente menor do que um; e a terceira em termos da densidade numérica n , conveniente para sistema de baixa densidade.

Nesta seção, estamos interessados em analisar os vários conjuntos de equações de estado dados como funções de z ou n . A utilização de um deste conjunto em detrimento dos outros depende muito das características do sistema em questão. Contudo, as séries da pressão em termos de z e n podem ser parcialmente comparadas sem especificarmos o sistema.

Do ponto de vista teórico, uma característica importante a favor da convergência da série completa de $p(n, T)$, para o sistema clássico não relativístico, é que os coeficientes do virial a 's são determinados por uma subclasse dos diagramas conexos conhecidos por diagramas *irredutíveis* [21]. Estes diagramas são facilmente detectados, pois eles são multiplamente conexos (uma partícula interage com pelo menos duas outras partículas). Da figura 2.3, seção 2.1.2, vemos que para $N = 3$ apenas um dos quatro diagramas é irredutível. Já para $N = 4$ temos trinta e oito diagramas conexos, dos quais apenas dez são irredutíveis. Este corte nos diagramas faz com que o tratamento perturbativo seja mais eficaz na série de $p(n, T)$ do que na série de $p(z, T)$.

Já do ponto de vista experimental, a expansão do virial $p(n, T)$ descreve muito bem a *fase gasosa* de sistemas não relativístico. Podemos estudar, por exemplo, o comportamento de uma série de gases através do potencial fenomenológico de Lennard-Jones,

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

onde σ e ϵ são parâmetros arbitrários positivos.

Como mostrado na figura a seguir, os dados experimentais concordam com as curvas teóricas do segundo coeficiente do virial para a pressão (a_2).

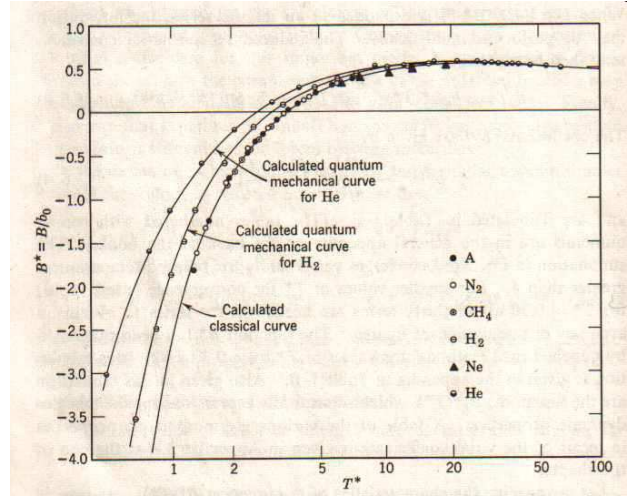


Figura 2.5 - Esta figura mostra a concordância entre os dados experimentais e as curvas teóricas do segundo coeficiente do virial. Note que B na nossa notação representa o termo a_2 , $T^* = kT/\varepsilon$ e $r_0 = 2^{1/6}\sigma$ é o mínimo do potencial de Lennard-Jonnes. A curva clássica foi calculada através do método de Mayer, enquanto que para as curvas de H_2 e He foi utilizado o método de Beth-Uhlenbeck. Figura tirada da página 164 de [37].

O principal ponto desta figura é que os dados experimentais são ajustados por uma série expandida em termos de n e não da fugacidade z [39] e, como veremos a seguir, as séries em z e n truncadas no segundo termo *não são equivalentes*.

Em primeira ordem de correção, as séries de $p(z, T)$, eq. (2.125a), e $n(z, T)$, eq. (2.125b), podem ser escritas como:

$$p(z, T) \simeq kT(b_1 z + b_2 z^2), \quad (2.139a)$$

$$n(z, T) \simeq (b_1 z + 2b_2 z^2). \quad (2.139b)$$

Agora, segundo (2.126a) e a equação (C.2b) do apêndice C, a pressão em termos de n e T é dada por:

$$p(n, T) \simeq nkT[a_1 + a_2 n] = nkT \left[1 - \frac{b_2}{b_1^2} n \right]. \quad (2.140)$$

A equação (2.140) é diferente de invertermos (2.139b) através de Báskara, e substituírmos o resultado em (2.139a):

$$\begin{aligned} n &= b_1 z + 2b_2 z^2 \Rightarrow b_1 z + 2b_2 z^2 - n = 0 \Rightarrow \\ z &= \frac{-b_1 + \sqrt{b_1^2 + 8b_2 n}}{4b_2}, \end{aligned} \quad (2.141)$$

onde o sinal positivo foi escolhido para garantir a positividade da fugacidade.

Substituindo esta última equação em (2.139a), obtemos:

$$\begin{aligned} p'(n, T) &= kT \left[b_1 \left(\frac{-b_1 + \sqrt{b_1^2 + 8b_2n}}{4b_2} \right) + b_2 \left(\frac{-b_1 + \sqrt{b_1^2 + 8b_2n}}{4b_2} \right)^2 \right] \Rightarrow \\ p'(n, T) &= kT \left[\frac{1 - \sqrt{1 - 8na_2 + 4a_2n}}{8a_2} \right]. \end{aligned} \quad (2.142)$$

Por construção sabemos que $p'(n(z, T), T) = p(z, T)$. Portanto, comparando (2.140) com (2.142) fica nítido (pelo menos até segunda ordem) que $p(n, T)$ é diferente $p(z, T)$.

Veja que, formalmente falando, a equação $p'(n, T)$ não representa uma série na densidade numérica. Contudo, a série do virial usual pode ser recuperada, aproximando a raiz de (2.142) pelos primeiros termos (hipótese de baixa densidade):

$$\begin{aligned} p'(n, T) &\simeq kT \left[\frac{1 - 1 + 4a_2n + 8(a_2n)^2 + 4a_2n}{8a_2} \right] \Rightarrow \\ p'(n, T) &\simeq kT \left[\frac{a_2n + (a_2n)^2}{a_2} \right] = kT [n + a_2n^2] = p(n, T). \end{aligned} \quad (2.143)$$

2.2.3 Estabilidade termodinâmica

A idéia de estabilidade termodinâmica está ligada ao princípio de extremo da entropia (ou energia). Segundo, este princípio devemos ter $dS = 0$ e $d^2S < 0$. A primeira destas condições determina que a entropia seja um extremo e a segunda implica que este extremo seja um máximo. Enquanto que $dS = 0$ implica em um sistema em equilíbrio, $d^2S < 0$ determina que este equilíbrio é estável.

Considere dois subsistemas idênticos, cada qual descrito por uma equação fundamental do tipo $S(U, V, N)$, separados por uma parede totalmente restritiva. Se removermos uma quantidade ΔU de um dos sistemas e repassarmos para o outro sistema, a segunda lei da termodinâmica implica que

$$S(U + \Delta U, V, N) + S(U - \Delta U, V, N) \leq 2S(U, V, N) \quad \text{para qualquer } \Delta. \quad (2.144)$$

Uma análise gráfica mostra através da concavidade da entropia que (2.144) representa a condição de estabilidade para uma variação de ΔU . Se passarmos para $\Delta U \rightarrow 0$, então (2.144) se reduz a forma diferencial

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}\right)_{V,N} \leq 0. \quad (2.145)$$

Contudo, esta condição é menos restritiva do que a condição de concavidade (2.144), que deve valer para todos os ΔU ao invés de somente para $\Delta U \rightarrow 0$.

O objetivo desta seção é determinar quais são as restrições necessárias para que as EoS cosmológicas sejam estáveis. Para isso, é interessante reformularmos o critério de estabilidade para a representação de energia U . A transcrição para esta representação é simples: da condição $d^2 S < 0$ passamos para $d^2 U > 0$, condição de mínima energia.

Agora, supondo um sistema descrito por[§],

$$dU = TdS - pdV, \quad (2.146)$$

a condição de mínima energia implica que

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V \geq 0, \quad \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_S \geq 0 \quad (2.147)$$

e

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_S - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}\right)^2 \geq 0. \quad (2.148)$$

Enquanto as equações em (2.147) levam em conta as variações da entropia e do volume separadamente, (2.148) representa a condição de estabilidade para uma variação em conjunto de S e V .

Utilizando (2.146) na primeira condição (2.147) obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V &= \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V = \left(\frac{\partial T}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial S}\right)_V = T \left(\frac{\partial T}{\partial U}\right)_V \geq 0 \Rightarrow \\ &\frac{V}{T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_V \geq 0, \end{aligned} \quad (2.149)$$

onde ρ é a densidade de energia.

Por outro lado, pode-se mostrar que na representação da energia livre de Helmholtz ($F = U - TS$), temos [38]

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = \frac{\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_S - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}\right)^2}{\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V}. \quad (2.150)$$

[§]O fato de fazermos $\mu_i = 0$ simplifica a análise, e é uma ótima aproximação para o universo primordial (veja capítulo 1).

Sabendo que nesta representação

$$dF = -pdV - SdT, \quad (2.151)$$

e utilizando as condições (2.147) e (2.148), obtemos:

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_T \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \leq 0. \quad (2.152)$$

É importante ressaltar que as condições (2.149) e (2.152) são condições necessárias e suficientes para termos estabilidade local no sistema descrito por $U(S, V)$. São essas as duas condições que serão aplicadas nas equações de estados cosmológicas construídas no capítulo 5.

Salvo raras exceções, as condições de estabilidade são imprescindíveis para podermos utilizar as EoS sob a forma de séries, pois, instabilidades estão ligadas a fenômenos de transição de fase, e estes fenômenos são indicativos de não convergência dessas séries.

2.3 Sistemas multicomponentes

Um sistema multicomponente pode ser entendido como um sistema que tenha mais de um tipo de partícula ou número quântico conservado. Este tipo de sistema costuma também ter mais de um termo de interação. Levando em conta estes dois fatos, podemos generalizar a expressão (2.2) da seguinte forma:

$$\Theta(z_1, \dots, z_B, V, T) = \sum_{l_1=0}^{\infty} \dots \sum_{l_A=0}^{\infty} \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} \tilde{G}_{l_1, \dots, l_A, N_1, \dots, N_B}(V, T) g_1^{l_1} \dots g_A^{l_A} z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.153)$$

onde temos B componentes com A termos de interação distintos.

A Hamiltoniana deste sistema é dada por:

$$H = \sum_{N=1}^B H_0^N + \sum_{l=1}^A g_l H_l^l. \quad (2.154)$$

Veja que a forma de H é suficientemente geral para representar os casos clássico não-relativístico e quântico relativístico. Por exemplo, seja um gás de duas componentes X e Y ; classicamente a Hamiltoniana poderia ter a seguinte forma:

$$H = \sum_i \left(\frac{p_{iX}^2}{2m_X} + \frac{p_{iY}^2}{2m_Y} \right) + g_{XX} \sum_{i < j} V_{ij}^{XX} + g_{YX} \sum_{i < j} V_{ij}^{XY} + g_{YY} \sum_{i < j} V_{ij}^{YY},$$

onde V_{ij} são os potenciais de interação; agora, para o sistema quântico relativístico na abordagem da segunda quantização [27], poderíamos ter:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d^3x \left[\hat{\pi}_X^2 + \hat{\pi}_Y^2 + \left(\nabla \hat{\phi}_X \right)^2 + \left(\nabla \hat{\phi}_Y \right)^2 + \left(m_X \hat{\phi}_X \right)^2 + \left(m_Y \hat{\phi}_Y \right)^2 + g_{XX} \frac{\hat{\phi}_X^4}{8} + g_{XY} \frac{\hat{\phi}_X^2 \hat{\phi}_Y^2}{4} + g_{YY} \frac{\hat{\phi}_Y^4}{8} \right],$$

sendo $\hat{\phi}_X$ e $\hat{\phi}_Y$ os campos quantizados das componentes X e Y com os respectivos momentos conjugados $\hat{\pi}_X$ e $\hat{\pi}_Y$.

Fazendo somas parciais em (2.153), podemos obter equações análogas a (2.3) e (2.4),

$$\Theta(z_1, \dots, z_B, V, T) = \sum_{l_1=0}^{\infty} \dots \sum_{l_A=0}^{\infty} G_{l_1, \dots, l_A}(V, T, z_1, \dots, z_B) g_1^{l_1} \dots g_A^{l_A}, \quad (2.155)$$

ou

$$\Theta(z_1, \dots, z_B, V, T) = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} Q_{N_1, \dots, N_B}(V, T) z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.156)$$

referentes às expansões nas constantes de acoplamentos g 's e nas fugacidades z 's.

2.3.1 Sistema multicomponente em termos das fugacidades

O tratamento de um sistema multicomponente em termos das fugacidades (2.156) é completamente análogo ao tratamento para uma única componente, desenvolvido na seção 2.1.2, e já foi abordado diversas vezes na literatura [40, 41].

Em linhas gerais, temos a função $W_{N_1, \dots, N_B}^X$ como

$$Q_{N_1, \dots, N_B}(V, T) = \frac{1}{N_1!} \dots \frac{1}{N_B!} \int_{\Omega_{N_1}} \dots \int_{\Omega_{N_B}} W_{N_1, \dots, N_B}^X(\{\vec{r}_{N_1}\}, \dots, \{\vec{r}_{N_B}\}) d^{3N_1} r_{N_1} \dots d^{3N_B} r_{N_B}, \quad (2.157)$$

onde $\{\vec{r}_{N_i}\}$ é o conjunto de N_i vetores referente à i -ésima componente.

Em seguida, expandimos o potencial macrocanônico Ω nas fugacidades,

$$\Omega(z_1, \dots, z_B, T) = \frac{1}{V} \ln \Theta(z_1, \dots, z_B, V, T) = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} b_{N_1, \dots, N_B} z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.158)$$

com $b_{0,\dots,0} \equiv 0$ ($N_1 = N_2 = \dots = N_B = 0$) e os restantes $b_{N_1,\dots,N_B}$'s dados pelas funções de Ursell $U_{N_1,\dots,N_B}^X$,

$$b_{N_1,\dots,N_B} = \frac{g_{N_1,\dots,N_B}}{V(N_1! \dots N_B!)} \int_{\Omega_{N_1}} \dots \int_{\Omega_{N_B}} U_{N_1,\dots,N_B}^X(\{\vec{r}_{N_1}\}, \dots, \{\vec{r}_{N_B}\}) d^{3N_1} r_{N_1} \dots d^{3N_B} r_{N_B}. \quad (2.159)$$

Novamente $g_{N_1,\dots,N_B}$ leva em conta a degenerescência e $U_{N_1,\dots,N_B}^X$ é determinado pela soma de todos os diagramas conexos, lembrando que agora interações entre componentes distintas ajudam na conexão. É fácil de mostrar (porém trabalhoso) que as funções de Ursell são dadas pelas funções $W_{N_1,\dots,N_B}^X$ analogamente a (2.54), (2.55), (2.56) e (2.57).

A seguir vamos particularizar o estudo para o caso relativístico de duas componentes.

Sistema quântico relativístico com duas componentes

As integrais de clusters de duas componentes podem ser escritas em termos de operadores de Ursell tipo $\hat{U}_{N_1,N_2}$:

$$b_{N_1,N_2} - b_{N_1,N_2}^{(0)} = \frac{g_{N_1,N_2}}{V} Tr \left(\hat{U}_{N_1,N_2} - \hat{U}_{N_1,N_2}^{(0)} \right), \quad (2.160)$$

lembrando que a diferença entre b_{N_1,N_2} e $b_{N_1,N_2}^{(0)}$ (sistema livre) separa os efeitos dinâmicos dos efeitos estatísticos.

Com o auxílio de (2.158), determinamos o potencial macrocanônico Ω :

$$\Omega - \Omega_0 = \sum_{N_1=1}^{\infty} \sum_{N_2=1}^{\infty} \left(b_{N_1,N_2} - b_{N_1,N_2}^{(0)} \right) z_1^{N_1} z_2^{N_2}, \quad (2.161)$$

onde Ω_0 é o potencial termodinâmico do sistema livre dado por:

$$\Omega_0(z_1, z_2, T) = \Omega_0(z_1, T) + \Omega_0(z_2, T). \quad (2.162)$$

Desta última equação inferimos que os coeficientes $b_{N_1,N_2}^{(0)}$ são diferentes de zero somente se $N_1 \neq 0$ e $N_2 = 0$ ou se $N_2 \neq 0$ e $N_1 = 0$.

Seguindo os mesmos passos desenvolvidos na seção 2.1.2, pode-se escrever o traço de $\hat{U}_{N_1,N_2} - \hat{U}_{N_1,N_2}^{(0)}$ em termos do operador $\hat{S}$:

$$Tr \left(\hat{U}_{N_1,N_2} - \hat{U}_{N_1,N_2}^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta\varsigma}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A} \hat{S}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \varsigma}} \hat{S} \right)_{\tilde{c}_{N_1,N_2}} d\varsigma. \quad (2.163)$$

O subescrito $\tilde{c}_{N_1, N_2}$ representa todos os diagramas conexos de $N_1 + N_2$ partículas onde a interação atua ao menos uma vez.

No caso particular onde temos apenas duas partículas, a complicada equação (2.163) se reduz a três casos relativamente simples:

$$Tr \left(\hat{U}_{2,0} - \hat{U}_{2,0}^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta\zeta}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A}_{2,0} \hat{S}_{2,0}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \zeta}} \hat{S}_{2,0} \right) d\zeta, \quad (2.164a)$$

$$Tr \left(\hat{U}_{0,2} - \hat{U}_{0,2}^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta\zeta}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A}_{0,2} \hat{S}_{0,2}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \zeta}} \hat{S}_{0,2} \right) d\zeta, \quad (2.164b)$$

$$Tr \left(\hat{U}_{1,1} - \hat{U}_{1,1}^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta\zeta}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A}_{1,1} \hat{S}_{1,1}^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \zeta}} \hat{S}_{1,1} \right) d\zeta, \quad (2.164c)$$

onde os $\hat{S}_{2,0}$, $\hat{S}_{0,2}$ e $\hat{S}_{1,1}$ estão relacionados com os três operadores Hamiltonianos de dois corpos. Note que $\hat{A}_{1,1} = \hat{1}$, pois as partículas não são idênticas, e $Tr \left(\hat{U}_{1,1}^{(0)} \right) = 0$.

2.3.2 Equações de estado multicomponentes

A construção das equações de estado, pressão $p(z_1, \dots, z_B, T)$, densidade de energia $\rho(z_1, \dots, z_B, T)$ e densidades numéricas $n_1(z_1, \dots, z_B, T)$, $n_2(z_1, \dots, z_B, T)$, ..., $n_B(z_1, \dots, z_B, T)$ são feitas através da relação usual entre termodinâmica e mecânica estatística:

$$\frac{p(z_1, \dots, z_B, T)}{kT} \equiv \Omega(z_1, \dots, z_B, T) = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} b_{N_1, \dots, N_B} z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.165a)$$

$$n_i(z_1, \dots, z_B, T) \equiv z_i \left(\frac{\partial \Omega(z_1, \dots, z_B, T)}{\partial z_i} \right)_{V, T, \{z_B\} \neq z_i} = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} N_i b_{N_1, \dots, N_B} z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.165b)$$

$$\frac{\rho(z_1, \dots, z_B, T)}{(kT)^2} \equiv \left(\frac{\partial \Omega(z_1, \dots, z_B, T)}{\partial kT} \right)_{V, \{z_B\}} = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_B=0}^{\infty} \frac{\partial b_{N_1, \dots, N_B}}{\partial (kT)} z_1^{N_1} \dots z_B^{N_B}, \quad (2.165c)$$

onde $\{z_B\}$ é o conjunto das fugacidades de z_1 à z_B .

Estas equações são completamente análogas ao conjunto A de EoS apresentadas na seção 2.2.

Como no sistema de uma componente, podemos obter um outro conjunto de EoS (conjunto B) escrevendo a pressão e a densidade de energia em termos das densidades numéricas,

$$\frac{p(n_1, \dots, n_B, T)}{kT} = \sum_{l_1=0}^{\infty} \dots \sum_{l_B=0}^{\infty} a_{l_1, \dots, l_B}(T) n_1^{l_1} \dots n_B^{l_B}, \quad (2.166a)$$

$$\frac{\rho(n_1, \dots, n_B, T)}{(kT)^2} = \sum_{l_1=0}^{\infty} \dots \sum_{l_B=0}^{\infty} c_{l_1, \dots, l_B}(T) n_1^{l_1} \dots n_B^{l_B}. \quad (2.166b)$$

As duas equações acima nada mais são do que a expansão do virial para um sistema multicomponente, sendo os coeficientes do virial $a_{l_1, \dots, l_B}$ e $c_{l_1, \dots, l_B}$ determinados pelos $b_{N_1, \dots, N_B}$'s. No apêndice C apresentamos as formas explícitas dos primeiros coeficientes a 's e c 's para um sistema de duas componentes. Os casos de mais de duas componentes são facilmente generalizados a partir deste sistema.

Toda a discussão sobre convergência e perturbação feita na seção 2.2.2, estende-se trivialmente ao caso multicomponente.

Capítulo 3

Teoria do Espalhamento e o Problema de Dois Corpos

No capítulo anterior mostramos que os coeficientes da fugacidade b_N 's podem ser escritos em termos de um operador $\hat{S}$ definido em (2.90). O objetivo da primeira parte deste capítulo é mostrar que $\hat{S}$ representa de fato o operador associado à matriz S de espalhamento física. Já o restante do capítulo é dedicado ao problema de dois corpos. Mostraremos que a matriz S_2 referente ao espalhamento de dois corpos pode ser associada às funções defasagens, e escreveremos a forma explícita do segundo coeficiente da fugacidade b_2 em termos destas funções.

3.1 Relação da matriz S com o operador $\hat{S}$

A matriz S de um dado sistema é definida como a matriz que conecta o estado inicial $\Psi_s^{(-)}$ com o estado final $\Psi_s^{(+)}$ deste sistema. Estes estados podem ser entendidos como estados assintoticamente espalhados *de entrada* ($\Psi_s^{(-)}$) e *de saída* ($\Psi_s^{(+)}$).

Uma outra forma de entender o conceito de matriz S é idealizar o processo de espalhamento como descrito por estados estacionários da Hamiltoniana completa. Neste caso a matriz S conecta o estado “estacionário” de entrada $\Psi_s^{(-)}$ com o estado “estacionário” de saída $\Psi_s^{(+)}$. Portanto, podemos expressar $\Psi_s^{(+)}$ como combinação linear de $\Psi_k^{(-)}$:

$$|\Psi_s^{(+)}\rangle = \sum_k S_{ks} |\Psi_k^{(-)}\rangle, \quad (3.1)$$

onde S_{ks} são os elementos da matriz S . Nota-se que S_{ks} contém *toda a informação dinâmica* sobre o sistema em questão.

Dentro da abordagem de estados estacionários, a matriz S de um sistema de N partículas está relacionada diretamente com a equação de autovalores (2.37). Por economia de notação vamos suprimir o índice N e escrever esta equação como:

$$\hat{H} |\Psi_s\rangle = E_s |\Psi_s\rangle \Rightarrow (E_s - \hat{H}^{(0)}) |\Psi_s\rangle = \hat{V} |\Psi_s\rangle, \quad (3.2)$$

onde Ψ_s são auto-estados da Hamiltoniana completa de N partículas, E_s é a auto-energia destes estados e $\hat{V}$ é definido em (2.90).

Agora, supondo que E_s seja *auto-valor de* $\hat{H}^{(0)}$ e $\hat{H}$, podemos então resolver a equação (3.2) de forma implícita,

$$|\Psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + \frac{1}{(E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)} \hat{V} |\Psi_s^{(+)}\rangle, \quad (3.3)$$

com $\eta \rightarrow 0$ de forma apropriada. O estado ψ_s é autoestado de $\hat{H}^{(0)}$,

$$\hat{H}^{(0)} |\psi_s\rangle = E_s |\psi_s\rangle. \quad (3.4)$$

A equação (3.3) é uma das equações fundamentais na teoria formal do espalhamento e é conhecida como equação de *Lippmann-Schwinger*.

De fato, é fácil de ver que (3.3) se reduz a (3.2): basta aplicar o operador $(E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)^{-1}$ de ambos os lados de (3.3) e em seguida tomar o limite de $\eta \rightarrow 0$.

Nota-se que (3.3) é uma solução de (3.2) se e somente se E_s for autovalor de $\hat{H}$ e $\hat{H}^{(0)}$. Em sistemas simples de espalhamento onde $\hat{V} \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$ podemos assumir que ambos os Hamiltonianos têm o mesmo espectro contínuo $E_s \in [0, \infty]$ e a presença da interação não altera este fato. Lembremos, porém que $\hat{H}$ pode ter autoestados discretos correspondentes a estados ligados que não tem contrapartida em $\hat{H}^{(0)}$.

Na verdade, condições assintóticas definidas em um cubo de lado L tornam os espectros de energia de $\hat{H}$ e $\hat{H}^{(0)}$ discretos. Mesmo para os níveis de energia quase contínuos, os valores de $\hat{H}$ e $\hat{H}^{(0)}$ tendem a não coincidirem por causa do operador de interação $\hat{V}$. Porém, esta diferença, ΔE , tende a zero quando $L \rightarrow \infty$ o que corrobora a solução (3.3). É bastante importante que os limites sejam tomados na ordem correta: primeiro fazemos a sistema tender a infinito $L \rightarrow \infty$, e só depois fazemos $\eta \rightarrow 0$. Isto é necessário para que a função de onda associada ao sistema esteja contida dentro do volume L^3 [42].

Uma outra possível solução de (3.2) é dada por

$$|\Psi_s^{(-)}\rangle = |\psi_s\rangle + \frac{1}{(E_s - \hat{H}^{(0)} - i\eta)} \hat{V} |\Psi_s^{(-)}\rangle. \quad (3.5)$$

A diferença entre os estados $\Psi_k^{(-)}$ e $\Psi_k^{(+)}$ reside somente no sinal do termo $i\eta$. No apêndice D mostramos explicitamente que, para o caso não relativístico do espalhamento de dois corpos, esta diferença de sinal faz com que as funções de onda

$\Psi_s^{(-)}(\vec{r})$ e $\Psi_s^{(+)}(\vec{r})$ associadas aos estados $\Psi_s^{(-)}$ e $\Psi_s^{(+)}$, sejam de fato as funções de onda assintoticamente espalhadas *de entrada e de saída*.

Agora, partindo da segunda equação de (2.85), observa-se que quando o operador de Green está na camada de massa, ou seja $\zeta = E_s$, obtemos $\hat{G}_0$ como

$$\hat{G}^{(0)}(E_s) \equiv \frac{1}{(E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)} \quad \text{e} \quad \hat{G}^{(0)*}(E_s) \equiv \frac{1}{(E_s - \hat{H}^{(0)} - i\eta)}. \quad (3.6)$$

Comparando este resultado com as equações (3.3) e (3.5), vemos que os operadores $\hat{G}^{(0)}(E_s)$ e $\hat{G}^{(0)*}(E_s)$ definidos no capítulo anterior determinam as duas soluções implícitas de $\Psi_s^{(+)}$ e $\Psi_s^{(-)}$, como:

$$|\Psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + \hat{G}^{(0)}\hat{V}|\Psi_s^{(+)}\rangle \quad \text{e} \quad |\Psi_s^{(-)}\rangle = |\psi_s\rangle + \hat{G}^{(0)*}\hat{V}|\Psi_s^{(-)}\rangle. \quad (3.7)$$

De forma inteiramente análoga a (3.6), podemos definir também o operador $\hat{G}$ na camada de massa:

$$\hat{G}(E_s) \equiv \frac{1}{(E_s - \hat{H} + i\eta)} \quad \text{e} \quad \hat{G}^*(E_s) \equiv \frac{1}{(E_s - \hat{H} - i\eta)}. \quad (3.8)$$

O próximo passo é mostrar que, se o auto-estado ψ_s da Hamiltoniana $\hat{H}^{(0)}$ é ortonormalizado, então $\Psi_s^{(+)}$ e $\Psi_s^{(-)}$ também o são. Primeiramente, multiplicamos (3.3) pelo operador $(E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)$ e adicionamos e subtraímos neste resultado um termo tipo $\hat{V}|\psi_s\rangle$, ou seja:

$$\begin{aligned} (E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)|\Psi_s^{(+)}\rangle &= (E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)|\psi_s\rangle + \hat{V}|\Psi_s^{(+)}\rangle \Rightarrow \\ (E_s - \hat{H} + i\eta)|\Psi_s^{(+)}\rangle &= (E_s - \hat{H}^{(0)} + i\eta)|\psi_s\rangle + \hat{V}|\psi_s\rangle - \hat{V}|\psi_s\rangle \\ &= (E_s - \hat{H} + i\eta)|\psi_s\rangle + \hat{V}|\psi_s\rangle \Rightarrow \\ |\Psi_s^{(+)}\rangle &= |\psi_s\rangle + (E_s - \hat{H} + i\eta)^{-1}\hat{V}|\psi_s\rangle = |\psi_s\rangle + \hat{G}\hat{V}|\psi_s\rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

De forma totalmente análoga obtemos também

$$|\Psi_s^{(-)}\rangle = |\psi_s\rangle + (E_s - \hat{H} - i\eta)^{-1}\hat{V}|\psi_s\rangle = |\psi_s\rangle + \hat{G}^*\hat{V}|\psi_s\rangle. \quad (3.10)$$

Agora, utilizando estas duas últimas equações mostremos a ortonormalização de $\Psi_s^{(-)}$ e $\Psi_s^{(+)}$:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_s^{(\pm)} | \Psi_k^{(\pm)} \rangle &= \langle \psi_s + (E_s - \hat{H} \pm i\eta)^{-1} \hat{V} \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} \rangle \\
&= \langle [1 + (E_s - \hat{H} \pm i\eta)^{-1} \hat{V}] \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} \rangle \\
&= \langle \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} + \hat{V} (E_s - \hat{H} \mp i\eta)^{-1} \Psi_k^{(\pm)} \rangle \\
&= \langle \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} + \hat{V} (E_s - E_k \mp i\eta)^{-1} \Psi_k^{(\pm)} \rangle \\
&= \langle \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} - (E_k - E_s \pm i\eta)^{-1} \hat{V} \Psi_k^{(\pm)} \rangle \\
&= \langle \psi_s | \Psi_k^{(\pm)} - (E_k - \hat{H}^{(0)} \pm i\eta)^{-1} \hat{V} \Psi_k^{(\pm)} \rangle. \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Substituindo (3.3) e (3.5) temos então:

$$\langle \Psi_s^{(\pm)} | \Psi_k^{(\pm)} \rangle = \langle \psi_s | \psi_k \rangle = \delta_{ks}. \tag{3.12}$$

Voltando a (3.1) e utilizando a ortonormalização de $\Psi_k^{(-)}$, obtemos que o elemento de matriz S é escrito como:

$$S_{sk} = \langle \Psi_s^{(-)} | \Psi_k^{(+)} \rangle. \tag{3.13}$$

A seguir, vamos mostrar que, se $\hat{G}$ e $\hat{G}^{(0)}$ estão na camada de massa, o operador $\hat{S}$ definido no capítulo anterior representa de fato a matriz S .

Utilizando as equações (3.6) e (3.8), e as definições de $\hat{\Omega}^*$ e $\hat{\Omega}$, eq. (2.89), vemos que:

$$\begin{aligned}
\left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} |\psi_s\rangle &= \hat{G}^{-1} |\Psi_s^{(+)}\rangle \stackrel{\lim \eta \rightarrow 0}{=} 0 \Rightarrow \\
\hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} |\psi_s\rangle &= |\Psi_s^{(+)}\rangle \Rightarrow \hat{\Omega} |\psi_s\rangle = |\Psi_s^{(+)}\rangle, \tag{3.14}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\left(\hat{G}^{(0)*} \right)^{-1} |\psi_s\rangle &= \left(\hat{G}^* \right)^{-1} |\Psi_s^{(-)}\rangle \stackrel{\lim \eta \rightarrow 0}{=} 0 \Rightarrow \\
\hat{G}^* \left(\hat{G}^{(0)*} \right)^{-1} |\psi_s\rangle &= |\Psi_s^{(-)}\rangle \Rightarrow \hat{\Omega}^* |\psi_s\rangle = |\Psi_s^{(-)}\rangle. \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Segue de (3.14), outra relação importante para a nossa demonstração:

$$\begin{aligned}
\delta_{sk} = \langle \Psi_s^{(+)} | \Psi_k^{(+)} \rangle &= \langle \hat{\Omega} \psi_s | \hat{\Omega} \psi_k \rangle = \langle \psi_s | \hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} | \psi_k \rangle \Rightarrow \\
\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega} &= 1 = \hat{\Omega}^{-1} \hat{\Omega}. \tag{3.16}
\end{aligned}$$

Observação: $\hat{\Omega}\hat{\Omega}^\dagger = 1$ não é necessariamente verdade, portanto dizemos que os $\hat{\Omega}$'s são somente *isométricos*, não unitários.

Por fim, construímos o elemento de matriz do operador $\hat{S}$, eq. (2.90), com dois estados da Hamiltoniana livre, e manipulamos este elemento utilizando os resultados (3.14), (3.15) e (3.16):

$$\begin{aligned}\langle \psi_k | \hat{S} | \psi_s \rangle &= \langle \psi_k | \left(\hat{\Omega}^* \right)^{-1} \hat{\Omega} | \psi_s \rangle = \langle \psi_k | \left(\hat{\Omega}^* \right)^\dagger \hat{\Omega} | \psi_s \rangle \\ &= \langle \Omega^* \psi_k | \Omega \psi_s \rangle = \left\langle \Psi_k^{(-)} | \Psi_s^{(+)} \right\rangle = S_{ks}.\end{aligned}\quad (3.17)$$

O último passo é mostrar que o elemento de matriz $\langle \psi_k | \hat{S} | \psi_s \rangle$, quando escrito na representação de momento angular, está sempre na camada de massa. Da definição de $\hat{S}$ (2.90) e das relações (2.91a) e (2.91b), temos:

$$\hat{S} = \left(1 - \hat{G}^{(0)*} \hat{V} \right) \hat{\Omega} = 1 + \hat{G}^{(0)} \hat{T} - \hat{G}^{(0)*} \hat{T} = 1 + \left(\hat{G}^{(0)} - \hat{G}^{(0)*} \right) \hat{T}. \quad (3.18)$$

Agora, escrevendo o elemento de matriz de (3.18) e utilizando as formas explicitas de $\hat{G}^{(0)}$ e $\hat{G}^{(0)*}$, eq. (2.85), obtemos:

$$\begin{aligned}\langle \psi_k | \hat{S} | \psi_s \rangle &= \langle \psi_k | 1 + \left[\frac{1}{\varsigma - \hat{H}^{(0)} + i\eta} - \frac{1}{\varsigma^* - \hat{H}^{(0)} - i\eta} \right] \hat{T} | \psi_s \rangle \\ &= \delta_{ks} + \left[\frac{1}{\varsigma - E_k + i\eta} - \frac{1}{\varsigma^* - E_k - i\eta} \right] \langle \psi_k | \hat{T} | \psi_s \rangle,\end{aligned}\quad (3.19)$$

onde a parte complexa $i\eta$ é introduzida para deslocar o espectro de $\hat{H}^{(0)}$ do eixo real.

Lembrando que ς é uma variável de integração real (ver capítulo 2) e usando a seguinte representação da distribuição δ ,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{\omega - i\eta} - \frac{1}{\omega + i\eta} \right] = 2\pi i \delta(\omega),$$

reescrevemos (3.19) como:

$$S_{ks} = \delta_{ks} - 2\pi i \delta(\varsigma - E_k) T_{ks}, \quad (3.20)$$

onde T_{ks} é conhecida como matriz de transição. Observe que pela ordem dos limites, esta equação só é válida no limite termodinâmico ($V \rightarrow \infty$).

De (3.20) é fácil de ver que, se T_{ks} é não singular, o elemento de matriz S_{ks} está necessariamente na camada de massa, pois $\varsigma = E_k$. O problema surge quando a matriz de transição apresenta polos. Existem dois fatores que geram polos em T_{ks} .

O primeiro desses fatores ocorre devido à existência de estados ligados no sistema. O que acontece é que a matriz S na camada de massa não possui estados ligados, pois, como dito anteriormente, o espectro de $\hat{H}^{(0)}$ não contém estes estados. Isto faz com os estados ligados apareçam através polos na matriz de transição. Para evitar este tipo de problema é necessário reformular todo o desenvolvimento apresentado na seção 2.1.2, fazendo com que os polos apareçam explicitamente. Uma vez identificado todos estes polos, eles podem ser reintroduzidos no sistema através da classificação dos estados assintóticos em *canais*. Por exemplo, para o caso de três partículas com um único estado ligado existem quatro canais: 1 e 2 ligados e 3 livre; 1 e 3 ligados e 2 livre; 2 e 3 ligados e 1 livre; 1, 2 e 3 livres. O procedimento de separação em canais permite introduzir todos os estados ligados do sistema sem o aparecimento de polos em T_{ks} . Maiores detalhes podem ser encontrados em [33].

O segundo fator capaz de gerar polos na matriz de transição ocorre devido à existência de diagramas de espalhamento múltiplos. Este tipo de diagrama aparece para $N > 2$ e envolve sempre momentos de estados intermediários (veja figura 3.1).

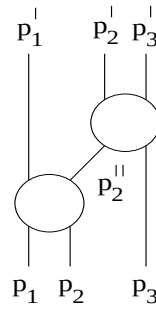


Figura 3.1: Diagrama conexo de espalhamento duplo representando um elemento de matriz de transição T_{ks} de três corpos.

Se o elemento de matriz de transição T_{ks} de um diagrama de espalhamento múltiplo está na representação dos momentos, então, devido à presença de momentos intermediários, T_{ks} se torna singular. Estas singularidades dependem fortemente da representação escolhida. Dashen e Ma mostraram no começo dos anos 70 que, se os elementos de matriz T encontram-se na representação de momento angular, estas singularidades são evitadas [43].

Feitas estas considerações, podemos concluir que na representação de momento angular e utilizando a abordagem dos canais, o operador $\hat{S}$ representa de fato o operador associado à matriz S de espalhamento física para qualquer sistema de N partículas.

3.2 O problema de dois corpos

Até o presente momento, o modelo estatístico desenvolvido para o sistema quântico relativístico é bastante geral, porém as suas equações são demasiadamente complicadas para serem úteis na construção de uma EoS cosmológica. Com o intuito de obter equações mais tratáveis, vamos nos restringir a processos de interação elástica contendo apenas duas partículas. Isto significa que trabalharemos somente com o operador $\hat{S}_2$, obtendo portanto, apenas o segundo coeficiente da fugacidade.

3.2.1 Relação da matriz S_2 com as defasagens δ_l

De forma relativamente geral, o processo de interação elástica entre duas partículas pode ser decomposto em várias partes invariantes sob rotação. Ou seja, cada uma destas partes depende apenas da distância r entre as partículas (interação central),

$$\hat{V}^a(r) \equiv \hat{H}^a - \hat{H}^{(0)a}, \quad (3.21)$$

onde a representa partículas de um determinado tipo de spin, isospin, etc.. Este tipo de decomposição está de acordo com a hipótese de não localidade, que diz que um diagrama conexo de N partículas depende das posições de $N - 1$ partículas.

Uma vez tendo invariância sobre rotação, o momento angular total do sistema se conserva.

Adendo: Usualmente, para a interação nuclear, cada par específico de hádrons é determinado por uma interação central, por exemplo: a interação proton-neutron (pn) de spin total S , momento angular total J e momento angular orbital L pode ser representada por um operador de interação central tipo $V_{2S+1LJ}^{pn}(r)$.

Neste caso, a matriz de espalhamento S_2 deve depender somente da energia e do ângulo entre os momentos iniciais e finais. Supondo partículas sem spin (por simplicidade), a relação de completeza dos polinômios de Legendre nos permite escrever a matriz S_2 na representação dos momentos como

$$\langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle = \delta(k' - k) \sum_{l=0}^{\infty} F_l^a(k) P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}), \quad (3.22)$$

onde $\hat{k}' \cdot \hat{k} = \cos \theta$, $k \equiv |\vec{k}|$ e F_l^a são coeficientes a serem determinados. Note que o índice a especifica as características internas das partículas em questão.

Agora, de (3.12) e (3.13) é fácil de ver que a matriz S é unitária,

$$\sum_k S_{ks}^* S_{ky} = \sum_k \langle \Psi_s^{(+)} | \Psi_k^{(-)} \rangle \langle \Psi_k^{(-)} | \Psi_y^{(+)} \rangle = \langle \Psi_s^{(+)} | \Psi_y^{(+)} \rangle = \delta_{sy}. \quad (3.23)$$

Portanto, na representação dos momentos podemos escrever:

$$\int \langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k}'' \rangle \langle \vec{k} | \hat{S}_2^a | \vec{k}'' \rangle^* d^3 k'' = \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (3.24)$$

Substituindo (3.22) em (3.24) temos:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} F_l^a(k') (F_j^a(k))^* k^2 \delta(k' - k) \int P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}'') P_j(\hat{k} \cdot \hat{k}'') d\Omega = \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (3.25)$$

Por outro lado, os polinômios de Legendre podem ser expressos em termos dos harmônicos esféricos pelo chamado teorema da adição,

$$P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_l^m(\hat{k}'). \quad (3.26)$$

Sabe-se também que os harmônicos esféricos formam uma base completa para funções da direção do vetor $\vec{k}$, e este fato pode ser expressado pela relação de fechamento,

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_l^m(\hat{k}') = \delta(\hat{k}, \hat{k}'). \quad (3.27)$$

Substituindo, então, (3.26) em um dos polinômios de (3.25),

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} F_l^a(k') (F_j^a(k))^* k^2 \delta(k' - k) \times \\ & \times \int P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}'') \frac{4\pi}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left[Y_j^m(\hat{k}) \right]^* Y_j^m(\hat{k}'') d\Omega = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \Rightarrow \\ & \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} F_l^a(k') (F_j^a(k))^* \delta_{l,j} k^2 \delta(k' - k) \int P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}'') \delta(\hat{k}, \hat{k}'') d\Omega = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \Rightarrow \\ & \delta(\vec{k} - \vec{k}') = k^2 \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} |F_l^a(k)|^2 \frac{4\pi}{2l+1} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}'). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Agora, se somarmos em l a equação (3.26) e utilizarmos (3.27), obtemos

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_l^m(\hat{k}') = 4\pi \delta(\hat{k}, \hat{k}'). \quad (3.29)$$

Através da distribuição delta na representação de coordenadas esféricas,

$$\delta(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{\delta(k - k')}{k^2} \delta(\hat{k}, \hat{k}'), \quad (3.30)$$

reescrevemos (3.29) como:

$$\frac{\delta(k - k')}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') = \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (3.31)$$

Comparando (3.31) com (3.28),

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') &= \sum_{l=0}^{\infty} |F_l^a(k)|^2 \frac{4\pi k^2}{2l+1} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') \Rightarrow \\ |F_l^a(k)|^2 &= \left[\frac{(2l+1)}{4\pi k^2} \right]^2 \Rightarrow F_l^a(k) = \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} e^{2i\delta_l^a(k)}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde $\delta^a(k)$ são funções reais da energia conhecidas pelo nome de *defasagens*.

Uma vez obtido o valor dos coeficientes $F_l^a(k)$ podemos voltar para a expressão (3.22) e reescreve-la como

$$\langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle = \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} e^{2i\delta_l^a(k)} P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}), \quad (3.33)$$

ou com auxílio de (3.26)

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle &= \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{2i\delta_l^a(k)} \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_l^m(\hat{k}') \\ &= \sum_p \langle k' | p \rangle \langle p | k \rangle \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{2i\delta_l^a(k)} \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_l^m(\hat{k}'). \end{aligned} \quad (3.34)$$

O próximo passo é expressar o elemento de matriz S_2^a na representação orbital de momento angular,

$$\langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle = \sum_{p,p'} \sum_{l,l'} \sum_{m,m'} \langle \vec{k}' | p'l'm' \rangle \langle p'l'm' | \hat{S}_2^a | plm \rangle \langle plm | \vec{k} \rangle, \quad (3.35)$$

com p representando a parte radial de coordenadas esféricas.

Separando $\vec{k}$ em uma direção angular $\hat{k}$ e em uma parte modular $|\vec{k}| = k$, podemos reescrever (3.35) como:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle &= \sum_{p,p'} \sum_{l,l'} \sum_{m,m'} \langle k' | p' \rangle \langle \hat{k}' | l' m' \rangle \langle p' l' m' | \hat{S}_2^a | p l m \rangle \langle p | k \rangle \langle l m | \hat{k} \rangle \Rightarrow \\ &= \sum_{p,p'} \sum_{l,l'} \sum_{m,m'} \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* Y_{l'}^{m'}(\hat{k}') \langle k' | p' \rangle \langle p' l' m' | \hat{S}_2^a | p l m \rangle \langle p | k \rangle, \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde usamos o fato de que estados “direcionais”^{*} na representação de momento angular podem ser expressos pelas autofunções de momento angular orbital, os harmônicos esféricos, i.e., $\langle \hat{k}' | l' m' \rangle = Y_{l'}^{m'}(\hat{k}')$.

Finalmente, comparamos (3.34) com (3.36) e concluímos que

$$\langle p' l' m' | \hat{S}_2^a | p l m \rangle = e^{2i\delta_l^a(k)} \delta_{p',p} \delta_{l',l} \delta_{m',m}. \quad (3.37)$$

Esta última equação mostra que $e^{2i\delta_l^a(k)}$ é um auto-valor da matriz S na representação de momento angular orbital. No apêndice *D* veremos que, para o caso não relativístico, as funções $\delta_l^a(k)$ são de fato as defasagens como conhecidas usualmente.

3.2.2 Relação do segundo coeficiente da fugacidade com δ_l

Com base no desenvolvimento prévio, sabemos que os processos de interação entre duas partículas contribuem estatisticamente com um termo do tipo

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right) = \int \frac{e^{-\beta E}}{4\pi i} Tr \left(\hat{A} \hat{S}_2^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial E}} \hat{S}_2 \right) dE, \quad (3.38)$$

equação (2.102) na camada de massa.

Para fins práticos, é interessante decompor a parte elástica da interação em vários pedaços, sendo cada um deles dependentes apenas da distância $r = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$. Neste caso, devido à invariância rotacional de cada um destes pedaços, a equação (3.38) na representação de momento angular se divide em termos distintos e independentes, rotulados pelo índice a (ver seção anterior)[†]. Usualmente, estes termos dependem dos possíveis estados internos (spin, isospin, etc.).

^{*}Estados determinados apenas pela direção dos vetores.

[†]Em sistemas contendo duas ou mais componentes, equações tipo (3.38) contém também termos inelásticos.

A simetrização feita pelo operador $\hat{A}$ deve considerar o estado total[‡] do termo a . Por este motivo, é interessante passarmos à instrução de simetrização para o índice a .

Portanto, um termo simetrizado do sistema de duas partículas é dado por

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right)^a = \int \frac{dE}{4\pi i} e^{-\beta E} Tr \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_2^a \right]. \quad (3.39)$$

Outra característica importante deste tipo de decomposição é que, se realizarmos uma transformação de coordenadas para o sistema do centro de massa (c.m.), o estado referente ao c.m. comporta-se como um estado livre (onda plana), ou seja, obedece a $H^{(0)}$. Para explorar este fato, é interessante estudar algumas propriedades do invariante relativístico s :

$$\begin{aligned} \omega^2 &\equiv s = (p_{1\mu} + p_{2\mu})^2 = m_1^2 + m_2^2 + 2p_{1\mu}p_2^\mu \\ \omega^2 &= m_1^2 + m_2^2 + 2E_1E_2 - 2\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 \\ \omega^2 &= m_1^2 + m_2^2 + 2E_1E_2 - 2\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 + (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2) - (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2) \\ \omega^2 &= E_1^2 + E_2^2 + 2E_1E_2 - (\vec{p}_1 + \vec{p}_2)^2 = E^2 - \vec{P}^2 \Rightarrow \\ E^2 &= \vec{P}^2 + \omega^2, \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde m_1 e m_2 são as massas das duas partículas e

$$\vec{P} \equiv \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{e} \quad E = E_1 + E_2. \quad (3.41)$$

Agora, se passarmos para um referencial[§] “linha” correspondente ao centro de massa, vemos que ω é de fato a energia do sistema,

$$\omega = E' = E'_1 + E'_2, \quad (3.42)$$

pois neste referencial $\vec{P} = 0$. Este último resultado é bastante conhecido na física de partículas.

[‡]Estado de momento angular mais estados internos.

[§]É importante ressaltar a *diferença* de uma transformação de *coordenadas* para o sistema do c.m. e uma mudança para *referencial* do c.m.. No primeiro caso, mudamos as coordenadas mas continuamos a fazer as medidas do referencial usual (normalmente o ref. do laboratório). Já no segundo caso, as medidas são feitas no referencial do c.m. e portanto $\vec{P} = 0$ sempre. O bom referencial para a mecânica estatística é o referencial usual do laboratório, pois quando procedemos a soma sobre todos os estados, devemos levar em conta a soma (integral) referente ao espaço de fase do c.m. $d^3R d^3P$.

Outra interpretação interessante para ω vem da equação (3.40). Segundo esta equação, E e $\vec{P}$ representam a energia e o momento do cluster de duas partículas e portanto ω é a *massa* deste cluster. Neste caso, toda a informação sobre a interação está presente na massa do cluster.

Como a interação não depende das variáveis do c.m., a integração na energia E e o operador derivada de $\hat{S}_2$, ambos em (3.39), são repassados para

$$\int dE \rightarrow \int d^3R \int \frac{d^3P}{(2\pi)^3} d\omega \quad \text{e} \quad \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \rightarrow \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \omega}, \quad (3.43)$$

onde $d^3R d^3P$ representa o espaço de fase do centro de massa.

Com o auxílio de (3.40) e (3.43), reescrevemos (3.39) como:

$$\text{Tr} \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right)^a = V \int \frac{d^3P}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{4\pi i} e^{-\beta \sqrt{\vec{P}^2 + \omega^2}} \text{Tr} \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial \omega} \hat{S}_2^a \right], \quad (3.44)$$

onde V é o volume.

O próximo passo é proceder com a integração em d^3P :

$$\int \frac{d^3P}{(2\pi)^3} e^{-\beta \sqrt{\vec{P}^2 + \omega^2}} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty P^2 e^{-\beta \sqrt{P^2 + \omega^2}} dP \equiv \frac{1}{2\pi^2} f(\beta, \omega). \quad (3.45)$$

Para determinar $f(\beta, \omega)$, é importante conhecer a representação integral da função de Bessel modificada, dada por

$$K_\nu(\beta\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{\beta}{2\omega} \right)^\nu \int_0^\infty \frac{e^{-\beta \sqrt{t^2 + \omega^2}}}{\sqrt{t^2 + \omega^2}} t^{2\nu} dt. \quad (3.46)$$

Derivando $K_\nu(\beta\omega)$ em relação ao parâmetro β , obtemos

$$\frac{dK_\nu(\beta\omega)}{d(\beta\omega)} \frac{d(\beta\omega)}{d\beta} = \frac{\nu}{\beta} K_\nu(\beta\omega) - \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{\beta}{2\omega} \right)^\nu \int_0^\infty e^{-\beta \sqrt{t^2 + \omega^2}} t^{2\nu} dt. \quad (3.47)$$

Portanto, a equação (3.47) com $\nu = 1$ pode ser reescrita em termos de $f(\beta, \omega)$:

$$\omega \frac{dK_1(\beta\omega)}{d(\beta\omega)} = \frac{1}{\beta} K_1(\beta\omega) - \left(\frac{\beta}{\omega} \right) f(\beta, \omega). \quad (3.48)$$

Usando duas relações funcionais entre funções de Bessel modificadas [44], obtemos o resultado desejado:

$$\begin{aligned}
 \beta\omega K_0(\beta\omega) &= 2K_1(\beta\omega) - \left(\frac{\beta^2}{\omega}\right) f(\beta, \omega) \quad \Rightarrow \\
 2K_1(\beta\omega) &= \beta\omega K_0(\beta\omega) + \left(\frac{\beta^2}{\omega}\right) f(\beta, \omega) \quad \Rightarrow \\
 K_2(\beta\omega) &= \left(\frac{\beta}{\omega^2}\right) f(\beta, \omega) \quad \Rightarrow \quad f(\beta, \omega) = \frac{\omega^2}{\beta} K_2(\beta\omega). \quad (3.49)
 \end{aligned}$$

Substituindo (3.49) em (3.45) e este resultado em (3.44), temos:

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right)^a = \frac{V}{2\beta\pi^2} \int_M^\infty \omega^2 K_2(\beta\omega) \frac{1}{4\pi i} Tr \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \omega}} \hat{S}_2^a \right] d\omega, \quad (3.50)$$

onde $M = m_1 + m_2$ é o menor valor assumido por ω .

Como a interação de cada um destes a termos possui invariância rotacional, a matriz S na representação de momento angular apresenta auto-valores $e^{2i\delta_l^a(\omega)}$, eq. (3.37). Portanto,

$$\begin{aligned}
 Tr \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \omega}} \hat{S}_2^a \right] &= \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \left[\langle plm | \left((S^a)^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \omega}} S^a \right) | plm \rangle \right] \\
 &= \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \left[\langle plm | \left((S^a)^{-1} \frac{\partial S^a}{\partial \omega} - \frac{\partial (S^a)^{-1}}{\partial \omega} S^a \right) | plm \rangle \right] \\
 &= \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l 2 \frac{\partial}{\partial \omega} [\langle plm | \ln(S^a) | plm \rangle] \\
 &= \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l 2 \left[\langle plm | | plm \rangle \left(2i \frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} \right) \right] = 4i \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega}. \\
 Tr \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \overleftrightarrow{\frac{\partial}{\partial \omega}} \hat{S}_2^a \right] &= 4i \sum_{l=0}^\infty (2l+1) \frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega}. \quad (3.51)
 \end{aligned}$$

Note que a soma em p não foi feita na equação anterior, pois p representa a energia do cluster de duas partículas e esta “soma” já é feita na integração de ω .

Substituindo (3.51) em (3.50) obtemos:

$$Tr \left(\hat{U}_2 - \hat{U}_2^{(0)} \right)^a = \frac{V}{2\beta\pi^3} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) \int_M^\infty \omega^2 K_2(\beta\omega) \frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} d\omega. \quad (3.52)$$

Esta última equação nos permitirá calcular o termo de interação dois a dois de um sistema relativístico de B componentes.

Por fim, vamos explicitar a forma dos segundos coeficientes das fugacidades para um sistema de duas componentes. Somando (3.52) em a e substituindo o resultado em (2.160) temos:

$$b_{2,0} - b_{2,0}^{(0)} = \frac{1}{2\beta\pi^3} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{2,0}^a (2l+1) \int_{2m_1}^{\infty} \omega^2 K_2(\beta\omega) \left[\frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} \right]_{2,0} d\omega, \quad (3.53a)$$

$$b_{0,2} - b_{0,2}^{(0)} = \frac{1}{2\beta\pi^3} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{0,2}^a (2l+1) \int_{2m_2}^{\infty} \omega^2 K_2(\beta\omega) \left[\frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} \right]_{0,2} d\omega, \quad (3.53b)$$

$$b_{1,1} - b_{1,1}^{(0)} = \frac{1}{2\beta\pi^3} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{1,1}^a (2l+1) \int_{m_1+m_2}^{\infty} \omega^2 K_2(\beta\omega) \left[\frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} \right]_{1,1} d\omega. \quad (3.53c)$$

Observação: a inclusão do índice a nos g 's é necessária pois as degenerescências dependem da simetrização e dos estados internos.

No apêndice D mostramos que, no limite não relativístico, (3.53c) se reduz ao caso usual calculado por Beth e Uhlenbeck [30, 31].

Capítulo 4

Interação Hadrônica

Nos dois capítulos anteriores desenvolveu-se um método estatístico formal, através da matriz S , para incluir interações na construção de equações de estado. Por outro lado, argumentaremos no capítulo seguinte que as interações relevantes para a EoS do universo pré-nucleossíntese são as interações Hadrônicas. Então, o próximo passo no desenvolvimento desta tese é apresentar e estudar este tipo de interação.

4.1 Características gerais dos sistemas hadrônicos

Sistemas hadrônicos são sistemas de partículas que estão sob a influencia da força nuclear forte.

A interação nuclear forte, ou simplesmente interação forte, é uma das quatro forças fundamentais na natureza. Esta força é de curto alcance, bastante intensa e atua em escalas de tempo muito curtas. A tabela 4.1 compara as suas características com as interações fracas e eletromagnéticas [45].

Força	Intensidade	Escalas de tempo	Mediador
Forte	1	10^{-23} s	Gluon
Eletromagnética	10^{-2}	10^{-16} s	Fóton
Fraca	10^{-13}	10^{-8} s	W e Z

Tabela 4.1: Comparação entre as interações forte, fraca e eletromagnética. Os valores de intensidade, normalizados pela interação forte, devem ser entendidos com parcimônia, pois eles dependem de uma série de fatores tais como distância e escalas de energia envolvidas.

Do ponto de vista fundamental, a interação forte é descrita pela cromodinâmica quântica (QCD), e neste nível os entes fundamentais são os quarks e os gluons. A altas energias a constante de acoplamento da QCD é pequena (liberdade assintótica), e portanto é possível utilizar a teoria de perturbação na descrição de fenômenos

tipo espalhamento. São nestas escalas de energia que a QCD possui seus maiores sucessos. Porém, o mesmo não ocorre em escalas de mais baixa energia, onde o tratamento perturbativo falha. Neste caso, é necessário utilizar modelos efetivos como a Teoria de Pertubação Quiral (ChPT), ou descrições fenomenológicas experimentais baseadas, por exemplo, nas defasagens. De qualquer forma, seja nos modelos teóricos ou nos modelos fenomenológicos, os entes fundamentais de sistemas hadrônicos a baixas energias deixam de ser os quarks e os gluons para serem os bárions e os mésons.

Outra característica importante da interação forte é que mesmo a altas energias, os quarks não aparecem livres, ou seja, eles estão sempre confinados dentro dos hádrons. Esta propriedade, conhecida como confinamento, é consequência do alto valor da constante de acoplamento a grandes distâncias* (baixas energias), e está intimamente ligada com a liberdade assintótica. Em princípio, a QCD sendo a teoria correta das interações fortes, deve ser capaz de prever o confinamento. Porém, até o presente momento isto não foi demonstrado.

Por outro lado, segundo as idéias que envolvem o grupo de renormalização da QCD, a sua constante de acoplamento diminui conforme a energia do sistema aumenta[†] [46]. Portanto, é possível que em uma certa escala de temperatura, a matéria hadrônica desconfinem em um plasma de quarks e gluons. Cálculos teóricos não perturbativos (QCD na rede [47]) indicam que esta temperatura está situada aproximadamente entre 150 e 180 *MeV*. Porém, resultados recentes do acelerador RHIC no laboratório de Brookhaven (Estados Unidos) não acharam este plasma na forma de gás livre [18], mas sim como um estado líquido tipo CGC (*Color Glass Condensate*) [19].

4.1.1 Hádrons relevantes para o universo Pns

Os hádrons podem ser subdivididos em duas categorias: bárions, constituídos de três quarks, e mésons, constituídos de um quark e um antiquark. Exemplos de bárions são prótons (p), neutrons (n), lambdas (Λ), deltas (Δ) etc.; e exemplos de mésons são píons (π), káons (K), rhos (ρ), omegas (ω), etc..

Os dois critérios adotados para determinar a relevância cosmológica destes hádrons são a massa e a estabilidade dos mesmos.

Vamos restringir o estudo do universo pré-nucleossíntese a escalas de energia de poucas centenas de *MeV*. Portanto, a densidade numérica de hádrons com massa

*Distâncias da ordem do tamanho de um nucleon.

[†]A energia da partícula é diferente da energia do sistema. A primeira pode ser associada com a energia do feixe de um acelerador. Já a segunda está ligada com a temperatura do sistema.

acima de 1 GeV deve ser relativamente pequena quando comparada com os hádrons mais leves. Note que este mesmo critério faz com que seja mais conveniente utilizar bárions e mésons como entes fundamentais ao invés de quarks e gluons.

A idéia de estabilidade está ligada a hádrons que não decaem via interação forte. Ou seja, sob o ponto de vista desta interação, podemos atribuir um conteúdo de partícula para os hádrons estáveis, e encarar o restante dos hádrons como ressonâncias. Por exemplo, se considerarmos apenas mésons compostos pelos dois quarks mais leves (π , ρ , ω , etc.), somente os píons são estáveis.

Então, baseados nestes dois critérios elegemos os píons, os káons, os nucleons (p e n) e suas respectivas antipartículas como os únicos hádrons relevantes do período Pns.

Píons (π)

Os píons são os mésons existentes mais leves, com massa de aproximadamente 140 MeV . Eles têm spin zero e, portanto, seguem a estatística de Bose-Einstein.

Existem três tipos de píons [22]: π^+ formado pelos quarks $u\bar{d}$, π^- formado pelos quarks $d\bar{u}$ e π^0 formado pela combinação $(u\bar{u} - d\bar{d})/\sqrt{2}$. $\pi^\pm$ possuem uma massa de $139,57\text{ MeV}$ e uma vida média de $2,6 \times 10^{-8}\text{ s}$. Já o π^0 possui uma massa de $134,98\text{ MeV}$ e uma vida média de $8,4 \times 10^{-17}\text{ s}$. Note que, apesar de $\pi^\pm$ serem estáveis pela interação eletromagnética, o mesmo não ocorre para o π^0 , caso em que o principal modo de decaimento é a reação $\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$.

A pequena diferença de massa entre píons[‡], sugere um tipo de classificação que permite agrupar este píons em um estado tripleto

$$|\chi^{I_\pi}\rangle = \begin{pmatrix} \pi^+ \\ \pi^0 \\ \pi^- \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Com base neste tipo de classificação é interessante introduzir o conceito de *isospin* (I_π). Dizemos então, que o méson π possui isospin 1, onde as projeções $+1$, 0 e -1 correspondem a π^+ , π^0 e π^- respectivamente. Até aqui esta classificação é uma mera notação. Porém, uma série de experimentos ao longo dos anos mostrou que a interação forte é invariante sobre rotações no espaço de isospin. Ou seja, *o isospin total se conserva sob qualquer processo envolvendo apenas a força forte*[§]. Existe

[‡]Esta pequena diferença está associada à existência das cargas elétricas.

[§]A idéia original de isospin foi introduzida por Heisenberg [45] para tratar da “equivalência” entre prótons e nêutrons, e depois foi estendida para os outros hádrons.

uma estreita analogia entre o spin e o isospin, o que inclui entre outras coisas, as regras de soma tipo momento angular.

Devido à simetria de isospin podemos escrever o estado completo do pión como o seguinte produto direto:

$$|\pi\rangle = |\psi_{lm}^\pi\rangle \otimes |\chi^{I_\pi}\rangle, \quad (4.2)$$

onde $|\psi_{lm}^\pi\rangle$ e $|\chi^{I_\pi}\rangle$ estão associadas com os estados de momento angular orbital e de isospin respectivamente.

Káons (K)

Os káons são os mésons estranhos existentes mais leves com massa aproximadamente de 495 MeV e vida média de $\approx 10^{-8} \text{ s}$. Eles possuem spin zero e portanto seguem a estatística de Bose-Einstein.

Existem quatro tipos de káons [22]: K^+ formado pelos quarks $u\bar{s}$, K^0 formado pelos quarks $d\bar{s}$, $\bar{K}^0$ formado pelos quarks $s\bar{d}$ e K^- formado pelos quarks $s\bar{u}$. K^+ e K^- possuem uma massa de $493,68 \text{ MeV}$. Já K^0 e $\bar{K}^0$ possuem uma massa de $497,65 \text{ MeV}$.

Assim como os píons, os káons também possuem uma simetria de isospin (I_K), que possibilita agrupá-los em dois dubletos distintos:

$$|\chi^{I_K}\rangle = \begin{pmatrix} K^+ \\ K^0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |\chi^{I_{\bar{K}}}\rangle = \begin{pmatrix} K^- \\ \bar{K}^0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

Segundo esta simetria, os mésons K e $\bar{K}$ possuem isospin $1/2$, onde as projeções $+1/2$ e $-1/2$ correspondem a K^+ e K^0 para o primeiro dubleto, e K^- e $\bar{K}^0$ para o segundo dubleto.

Além da simetria de isospin, os káons possuem também uma simetria de conjugação de carga C_K . Então, os estados K e $\bar{K}$ podem ser agrupados em um dubleto análogo à (4.3):

$$|\chi^{C_K}\rangle = \begin{pmatrix} K \\ \bar{K} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

onde o estado de conjugação de carga tem valor $1/2$, com projeções $+1/2$ para K e $-1/2$ para $\bar{K}$. O estado $|\chi^{C_K}\rangle$ obedece às regras de soma tipo momento angular.

Analogamente ao isospin, uma série de experiências mostrou que a simetria de conjugação de carga se estende à todos os hádrons, e pode ser enunciada da seguinte maneira: *a carga total se conserva sob qualquer processo envolvendo apenas as interações forte e eletromagnética.*

Com o auxílio destas duas simetrias, pode-se escrever o estado completo do káon como:

$$|K\rangle = |\psi_{lm}^K\rangle \otimes |\chi^{I_K}\rangle \otimes |\chi^{C_K}\rangle, \quad (4.5)$$

onde $|\psi_{lm}^\pi\rangle$, $|\chi^{I_\pi}\rangle$ e $|\chi^{C_K}\rangle$ estão associadas às partes de momento angular orbital, de isospin e de conjugação de carga respectivamente.

Nucleons (N)

Os nucleons são os bárions existentes mais leves com massa aproximadamente de 940 MeV . Eles possuem spin $1/2$, e portanto seguem a estatística de Fermi-Dirac.

Existem quatro tipos de nucleons [22]: prótons (p) e nêutrons (n) formados pelos quarks uud e ddu respectivamente, e suas anti-partículas $\bar{p}(\bar{u}\bar{u}\bar{d})$ e $\bar{n}(\bar{d}\bar{d}\bar{u})$. p e $\bar{p}$ possuem uma massa de $938,27 \text{ MeV}$ com uma vida média superior à 10^{32} anos. Já o n e $\bar{n}$ possuem uma massa de $939,57 \text{ MeV}$ e uma vida média de 885 s .

Como nos casos anteriores, existe uma simetria de isospin (I_N) que permite agrupar p e n , e $\bar{p}$ e $\bar{n}$ em dois dubletos distintos:

$$|\chi^{I_N}\rangle = \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |\chi^{I_{\bar{N}}}\rangle = \begin{pmatrix} \bar{p} \\ \bar{n} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

onde o isospin do (anti)nucleon é $1/2$ com a projeção $+1/2$ representando o (anti)próton e projeção $-1/2$ representado o (anti)nêutron.

Obviamente, os nucleons apresentam também a simetria de conjugação de carga (C_N). Ou seja, podemos agrupar N e $\bar{N}$ em um dubleto equivalente à (4.4),

$$|\chi^{C_N}\rangle = \begin{pmatrix} N \\ \bar{N} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

onde $|\chi^{C_N}\rangle$ tem valor $1/2$, com projeções $+1/2$ para N e $-1/2$ para $\bar{N}$.

Utilizando estas duas simetrias podemos escrever o estado completo do nucleon da seguinte maneira:

$$|N\rangle = |\psi_{lm}^N\rangle \otimes |\chi^{S_N}\rangle \otimes |\chi^{I_N}\rangle \otimes |\chi^{C_N}\rangle, \quad (4.8)$$

onde $|\psi_{lm}^\pi\rangle$, $|\chi^{S_N}\rangle$, $|\chi^{I_\pi}\rangle$ e $|\chi^{C_K}\rangle$ estão associadas com as partes momento angular orbital, de spin, de isospin e de conjugação de carga respectivamente.

4.2 Abordagem fenomenológica da interação hadrônica

A abordagem fenomenológica consiste em estudar os processos de interação hadrônica através de certas parametrizações, que são realizadas por funções arbitrárias reais

dependentes da energia. Dentro do procedimento de análise de ondas parciais, estas funções são as defasagens δ , introduzidas no capítulo 3, e os parâmetros de inelasticidade η . Utilizando a classificação espectroscópica, o conjunto de funções δ 's e η 's representam de forma simplificada alguns dos vários processos de interação entre hádrons, sendo particularmente interessante na descrição das interações envolvendo píons, káons e nucleons. É este tipo de procedimento que usaremos na montagem da equação de estado do universo pré-nucleossíntese.

A seguir, apresentaremos de forma sucinta como relacionar os δ 's e η 's com os dados experimentais obtidos através de seções de choque.

O formalismo usual de teoria de espalhamento nos diz que a seção de choque diferencial de um determinado processo é escrita como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N |F^{(a)}|^2, \quad (4.9)$$

sendo N a normalização e $F^{(a)}$ a amplitude de espalhamento deste processo. O índice a refere-se aos possíveis estados internos como spin, isospin etc..

Usaremos as variáveis de Mandelstam s , t , u que estão relacionadas no canal s do c.m., à energia ω , ao ângulo de espalhamento θ , e ao tri-momento q da seguinte forma:

$$s = \omega^2, \quad t = -2q^2(1 - \cos \theta) \quad \text{e} \quad u = -2q^2(1 + \cos \theta). \quad (4.10)$$

A expansão em ondas parciais no canal s é dada por

$$F^{(a)}(\omega, \theta) = \sum_l (2l+1) f_l^{(a)}(w) P_l(\cos \theta), \quad (4.11)$$

onde P_l são os polinômios de Legendre e

$$f_l^{(a)} = \sqrt{\frac{s}{s - 4\mu^2}} T_l^{(a)}, \quad (4.12)$$

com μ sendo a massa* e

$$T_l^{(a)} = \frac{(S_l^{(a)} - 1)}{2i} \quad \text{e} \quad S_l^{(a)} = \eta_l^{(a)} e^{2i\delta_l^{(a)}}. \quad (4.13)$$

Note-se que, na última equação, a matriz $S_l^{(a)}$ é parametrizada pela defasagem $\delta_l^{(a)}$ e pela inelasticidade $\eta_l^{(a)}$.

*Supondo que o processo de espalhamento é realizado com partículas idênticas.

Este tipo de parametrização é interessante para expressar os dados de espalhamento, porém apresenta uma patologia devido a unitariedade de $S_l^{(a)}$. De fato,

$$S_l^{(a)} \left(S_l^{(a)} \right)^\dagger = 1 \quad (4.14)$$

exige que

$$\eta_l^{(a)} \left(\eta_l^{(a)} \right)^\dagger = \left(\eta_l^{(a)} \right)^2 = 1, \quad (4.15)$$

e isto nem sempre é satisfeito.

O que ocorre é que para $\eta_l^{(a)} \neq 1$, $S_l^{(a)}$ de (4.13) não representa a matriz S completa do sistema, ou seja, existem outros processos de espalhamento que compensam a falta de unitariedade. Formalmente falando, no estudo de um único canal de interação (um processo), a parametrização correta da matriz S deve ser:

$$S_l^{(a)} = e^{2i\delta_l^{(a)}}. \quad (4.16)$$

Veja que, esta equação nada mais é do que o principal resultado da seção 3.2.1, que relaciona as defasagens com a matriz S .

A inclusão do parâmetro η de forma coerente exige que tratemos de um sistema com pelo menos dois canais. Suponha que existam duas espécies distintas de partículas x e y , e que cada uma dessas partículas interaja somente através de dois processos:

$$x + x \rightarrow x + x; \quad y + y \rightarrow y + y; \quad (4.17a)$$

$$x + x \rightarrow y + y; \quad y + y \rightarrow x + x. \quad (4.17b)$$

Neste caso, a matriz S de $l = 0$ pode ser parametrizada por três funções (η , δ_{xx} e δ_{yy}) da seguinte forma:

$$S = \begin{pmatrix} \eta e^{2i\delta_{xx}} & i\sqrt{1-\eta^2}e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} \\ i\sqrt{1-\eta^2}e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} & \eta e^{2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Em (4.18) S_{11} e S_{22} são as amplitudes de espalhamento elásticas (4.17a), e S_{12} e S_{21} são as transições (4.17b). É fácil de verificar de (4.18) respeita a condição $SS^\dagger = I$, e portanto S é unitária.

Este tipo de parametrização é amplamente utilizada com o formalismo de potenciais separáveis [48, 49, 50] (apêndice E), sendo particularmente importante na descrição de onda S do espalhamento káon-káon.

4.2.1 Interação entre píons, káons e nucleons

De acordo com as simetrias de isospin e conjugação de carga, podemos dividir genericamente em seis os processos “elásticos”[†] de interação envolvendo píons, káons e nucleons. São eles: $\pi\pi$, πK , πN , KK , KN e NN . Com o auxílio dos dados experimentais de defasagens, ou de modelos fenomenológicos, vamos descrever os seis processos de espalhamento através de *funções defasagens ajustadas*. As especificações técnicas destes ajustes, incluindo as próprias funções e suas representações gráficas, são apresentadas no apêndice *F*.

Utilizando a notação espectroscópica, (onda $S \rightarrow L = 0$, onda $P \rightarrow L = 1$, onda $D \rightarrow L = 2$, etc)[‡], apresentaremos a seguir, as características dos seis processos de espalhamento em questão.

Espalhamento $\pi\pi$

De forma simplificada, o espalhamento “elástico” pión-pión é representado por

$$\pi + \pi \rightarrow \pi + \pi, \quad (4.19)$$

onde, devido a simetria de isospin, π mimetiza qualquer um dos três píons conhecidos (π^+ , π^- ou π^0).

Segundo a abordagem de ondas parciais, o espalhamento $\pi\pi$ depende do momento angular orbital total L e do isospin total I . Consequentemente, as defasagens deste espalhamento também dependem destas duas quantidades. Introduziremos, então, a notação $\delta_{L,I}$ para representar cada uma dessas defasagens.

Por ser um espalhamento de partículas idênticas com spin inteiro, o estado de dois píons deve obedecer a estatística de Bose-Einstein, e portanto, o estado total (momento angular orbital mais isospin) deve ser simétrico.

O estado de momento angular pode ser expresso pelos harmônicos esféricos, e uma rápida inspeção nessas autofunções revela que a paridade da parte orbital depende exclusivamente da paridade de L . Se L for par o estado orbital é simétrico, e se L for ímpar o estado orbital é antisimétrico.

A parte de isospin depende das regras de soma de momento angular, portanto $I = 0, 1$ ou 2 . A (anti)simetria do estado de isospin total $|I, M_I\rangle$ é determinada escrevendo-se este estado na base de isospin de cada um dos píons $|m_{I_1}, m_{I_2}\rangle$. M_I é

[†]As aspas foram colocadas para indicar que além dos processos verdadeiramente elásticos ($\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$), estamos considerando também os processo de troca de carga ($\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n$).

[‡] L é o momento angular total.

a projeção do isospin total, e m_{I_1} e m_{I_2} são as projeções dos isospins I_1 e I_2 de cada um dos píons. Utilizando os coeficientes de Clebsch-Gordan temos:

Para $I = 0$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{3} | +1, -1\rangle - \frac{1}{3} |0, 0\rangle + \frac{1}{3} | -1, +1\rangle. \quad (4.20)$$

Para $I = 1$:

$$|1, +1\rangle = \frac{1}{2} | +1, 0\rangle - \frac{1}{2} |0, +1\rangle, \quad (4.21a)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{2} | +1, -1\rangle - \frac{1}{2} | -1, +1\rangle, \quad (4.21b)$$

$$|1, -1\rangle = \frac{1}{2} |0, -1\rangle - \frac{1}{2} | -1, 0\rangle. \quad (4.21c)$$

Para $I = 2$:

$$|2, +2\rangle = | +1, +1\rangle, \quad (4.22a)$$

$$|2, +1\rangle = \frac{1}{2} | +1, 0\rangle + \frac{1}{2} |0, +1\rangle, \quad (4.22b)$$

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{6} | +1, -1\rangle + \frac{2}{3} |0, 0\rangle + \frac{1}{6} | -1, +1\rangle, \quad (4.22c)$$

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{2} |0, -1\rangle + \frac{1}{2} | -1, 0\rangle, \quad (4.22d)$$

$$|2, -2\rangle = | -1, -1\rangle. \quad (4.22e)$$

Analisando as equações acima é fácil de perceber que o estado de isospin total é simétrico se $I = 2$ ou 0 e antisimétrico se $I = 1$. É interessante notar também que a degenerescência destes estados é dada por $2I + 1$, como no caso do momento angular usual.

Vamos restringir a análise do espalhamento pión-pión em $L = 0, 1$ ou 2 , ou seja ondas S , P e D . Neste caso, devido a imposição de simetria temos as seguintes defasagens:

Onda S	$\delta_{0,0} \Rightarrow$	degenerescência (1)
	$\delta_{0,2} \Rightarrow$	degenerescência (5)
Onda P	$\delta_{1,1} \Rightarrow$	degenerescência (9)
Onda D	$\delta_{2,0} \Rightarrow$	degenerescência (5)
	$\delta_{2,2} \Rightarrow$	degenerescência (25)

Tabela 4.2: Defasagens $\delta_{L,I}$ do espalhamento $\pi\pi$. O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta as projeções de momento angular orbital ($2L + 1$) e de isospin ($2I + 1$).

Os ajustes das funções $\delta_{0,0}$ e $\delta_{1,1}$ são feitos com os dados experimentais de defasagens presentes nas referências [51, 52]. Já os ajustes de $\delta_{0,2}$, $\delta_{2,0}$ e $\delta_{2,2}$ são realizados através de dados de defasagens [51, 53] baseados em modelagens fenomenológicas [54]. As formas explícitas destes ajustes juntamente com suas representações gráficas são encontradas no apêndice *F*.

Espalhamento πK

O espalhamento “elástico” píon-káon pode ser escrito genericamente por

$$\pi + K \rightarrow \pi + K, \quad (4.23a)$$

$$\pi + \bar{K} \rightarrow \pi + \bar{K}, \quad (4.23b)$$

onde, devido as simetrias de isospin, π representa π^+ , π^- ou π^0 , e K representa K^+ ou K^0 .

Porém, como dito anteriormente, qualquer processo de interação forte é invariante pela operação de conjugação de carga $\hat{C}$. Portanto, se aplicarmos $\hat{C}$ em (4.23b) obtemos:

$$\bar{\pi} + K \rightarrow \bar{\pi} + K. \quad (4.24)$$

Por outro lado, considerando a simetria de isospin, $\bar{\pi} = \pi$. Ou seja, as equações (4.23a) e (4.23b) representam os mesmos processos, e portanto não precisamos nos preocupar em descrevê-los separadamente.

Analogamente ao caso $\pi\pi$, o espalhamento πK depende somente do momento angular orbital L e do isospin I . Portanto, as defasagens deste espalhamento podem ser representadas pela notação $\delta_{L,2I}$. Segundo as regras de soma para isospin, $I = 1/2$ ou $3/2$.

Devido à falta de dados experimentais, vamos restringir o estudo do espalhamento píon-káon a $L = 0$ ou 1 , ou seja ondas S e P . Neste caso, temos as seguintes defasagens:

Onda S	$\delta_{0,1} \Rightarrow$ degenerescência (4)
	$\delta_{0,3} \Rightarrow$ degenerescência (8)
Onda P	$\delta_{1,1} \Rightarrow$ degenerescência (12)
	$\delta_{1,3} \Rightarrow$ degenerescência (24)

Tabela 4.3: Defasagens $\delta_{L,2I}$ do espalhamento πK . O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta a existência de K e $\bar{K}$, e as projeções de momento angular orbital $(2L + 1)$ e de isospin $(2I + 1)$.

Os ajustes das quatro funções $\delta_{0,1}$, $\delta_{0,3}$, $\delta_{1,1}$ e $\delta_{1,3}$ são feitos com os dados experimentais de defasagens presentes na referência [55]. As formas explícitas destes ajustes juntamente com suas representações gráficas são também encontradas no apêndice *F*.

Espalhamento πN

De forma genérica, o espalhamento “elástico” pión-nucleon é representado por

$$\pi + N \rightarrow \pi + N, \quad (4.25a)$$

$$\pi + \bar{N} \rightarrow \pi + \bar{N}, \quad (4.25b)$$

onde π e N mimetizam o tripleto (π^+, π^0, π^-) e o dubleto (p, n) de isospins respectivamente.

Assim como no caso do espalhamento πK , podemos aplicar $\hat{C}$ em uma das equações acima e concluir que (4.25a) e (4.25b) representam processos equivalentes.

O espalhamento πN depende do momento angular orbital L , do spin S e do isospin I . Porém, nos processos de interação usuais existe um acoplamento entre L e S tipo $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, onde J é o momento angular total. Então, como os píons possuem spin zero, podemos escrever o estado πN em termos de L , J e I . Neste caso, as defasagens são representadas pela notação $\delta_{L,2I,2J}$.

Vamos restringir a análise do espalhamento pión-nucleon em $L = 0, 1$ ou 2 , ou seja ondas S , P e D . Sabendo que $I = 1/2$ ou $3/2$, obtemos as seguintes defasagens:

Onda S	$\delta_{S,1,1} \Rightarrow$ degenerescência (8)
	$\delta_{S,3,1} \Rightarrow$ degenerescência (16)
Onda P	$\delta_{P,1,1} \Rightarrow$ degenerescência (8)
	$\delta_{P,3,1} \Rightarrow$ degenerescência (16)
	$\delta_{P,1,3} \Rightarrow$ degenerescência (16)
	$\delta_{P,3,3} \Rightarrow$ degenerescência (32)
Onda D	$\delta_{D,1,3} \Rightarrow$ degenerescência (16)
	$\delta_{D,1,5} \Rightarrow$ degenerescência (24)
	$\delta_{D,3,3} \Rightarrow$ degenerescência (32)
	$\delta_{D,3,5} \Rightarrow$ degenerescência (48)

Tabela 4.4: Defasagens $\delta_{L,2I,2J}$ do espalhamento πN . O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta a existência de N e $\bar{N}$, e as projeções de momento angular total $(2J + 1)$ e de isospin $(2I + 1)$.

Os ajustes das dez funções apresentadas na tabela 4.4 são feitos com os dados experimentais de defasagens presentes em [56]. Tais ajustes constam no apêndice *F* onde se encontram os gráficos relevantes.

Espalhamento KK

O espalhamento “elástico” káon-káon é representado por

$$K + K \rightarrow K + K, \quad (4.26a)$$

$$\bar{K} + \bar{K} \rightarrow \bar{K} + \bar{K}, \quad (4.26b)$$

$$K + \bar{K} \rightarrow K + \bar{K}, \quad (4.26c)$$

onde K mimetiza o dubleto de isospin (K^+, K^0) .

Novamente, se aplicarmos o operador $\hat{C}$ em (4.26a) mostramos que este processo é equivalente a (4.26b). Portanto, devemos nos preocupar apenas com a existência de dois processos distintos.

Káons são bósons, por conseguinte o estado deste sistema, composto por momento angular orbital L , isospin I e conjugação de carga C , deve ser completamente simetrizado.

A simetria da parte de momento angular acompanha a paridade de L , ou seja se L for par o estado orbital é simétrico, e se L for ímpar o estado orbital é antisimétrico.

A simetria do estado de isospin é determinada escrevendo-se o estado de isospin total $|I, M_I\rangle$ na base de isospin de cada um dos káons $|m_{I_1}, m_{I_2}\rangle$. M_I é a projeção do isospin total, e m_{I_1} e m_{I_2} são as projeções dos isospins I_1 e I_2 de cada um dos káons. Usando os coeficientes de Clebsch-Gordan temos:

Para $I = 0$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{2} \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{2} \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (4.27)$$

Para $I = 1$:

$$|1, +1\rangle = \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (4.28a)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{2} \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (4.28b)$$

$$|1, -1\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (4.28c)$$

Do conjunto de equações anterior percebe-se que $I = 0$ e $I = 1$ representam estados antissimétrico e simétricos respectivamente. Novamente, a degenerescência destes estados é dada por $2I + 1$.

Por último, a simetria do estado de conjugação de carga segue o mesmo procedimento do isospin fazendo-se as seguintes identificações: $I \rightarrow C$, $M_I \rightarrow M_C$, $I_1 \rightarrow C_1$, $I_2 \rightarrow C_2$, $m_{I_1} \rightarrow m_{C_1}$ e $m_{I_2} \rightarrow m_{C_2}$. Portanto, $C = 0$ e $C = 1$ representam estados antisimétrico e simétricos respectivamente, e a degenerescência é dada por $2C + 1$.

Os dados existentes de espalhamento KK são muito pobres e se resumem apenas a onda S ($L = 0$). De fato, estes dados são obtidos sempre indiretamente, utilizando o formalismo de potenciais separáveis [49, 50] (apêndice E). Outro problema que enfrentamos é que os dados existentes dizem respeito apenas a processos do tipo $K\bar{K}$, eq. (4.26c). Então, por falta de opção, vamos supor que os processos $K\bar{K}$ e KK são idênticos. Esta simplificação, no contexto da conjugação de carga, é equivalente a dizermos que o espalhamento káon-káon não depende de C .

Dito isto, podemos escrever as defasagens desse espalhamento através da notação $\delta_{L,I}$. Portanto, considerando a simetria, temos as seguintes defasagens para onda S :

Onda S	$\delta_{0,0} \Rightarrow$	degenerescência (1)
	$\delta_{0,1} \Rightarrow$	degenerescência (9)

Tabela 4.5: Defasagens $\delta_{L,I}$ dos espalhamentos KK e $K\bar{K}$. O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta a simetria bosônica e as projeções de momento angular orbital ($2L + 1$), de isospin ($2I + 1$) e de conjugação de carga ($2C + 1$).

O ajuste das funções $\delta_{0,0}$ e $\delta_{0,1}$ são feitos com os dados de defasagens [53, 57] e [58] respectivamente, sendo ambos baseado em modelagens fenomenológicas envolvendo a abordagem de potenciais separáveis. No apêndice F apresentamos graficamente esses ajustes.

Espalhamento KN

O espalhamento “elástico” káon-nucleon pode ser escrito genericamente por

$$K + N \rightarrow K + N, \quad (4.29a)$$

$$\bar{K} + \bar{N} \rightarrow \bar{K} + \bar{N}, \quad (4.29b)$$

$$K + \bar{N} \rightarrow K + \bar{N}, \quad (4.29c)$$

$$\bar{K} + N \rightarrow \bar{K} + N, \quad (4.29d)$$

onde K e N representam os dubletos de isospin (K^+, K^0) e (p, n) respectivamente.

A aplicação do operador $\hat{C}$ aos processos acima mostra que (4.29a) é equivalente a (4.29b), e que (4.29c) é equivalente a (4.29d). Portanto, devemos nos preocupar apenas com a existência de dois processos distintos.

A representação do estado káon-núcleon é completamente análoga ao caso do espalhamento πN . Ou seja, os estados podem ser escritos em termos do momento angular orbital L , do momento angular total J e do isospin I . Portanto, é conveniente adotar a notação $\delta_{L,I,2J}$ para as defasagens.

Devido à falta de dados de espalhamento de partícula-antipartícula (eq. (4.29c) ou (4.29d)), vamos supor novamente que os dois processos distintos envolvendo káons e núcleons apresentam a mesma amplitude de espalhamento. Neste caso, restringindo a análise a $L = 0, 1$ ou 2 , e sabendo que $I = 0$ ou 1 , obtemos as seguintes defasagens:

Onda S	$\delta_{S,0,1} \Rightarrow$	degenerescência (8)
	$\delta_{S,1,1} \Rightarrow$	degenerescência (24)
Onda P	$\delta_{P,0,1} \Rightarrow$	degenerescência (8)
	$\delta_{P,0,3} \Rightarrow$	degenerescência (16)
	$\delta_{P,1,1} \Rightarrow$	degenerescência (24)
	$\delta_{P,1,3} \Rightarrow$	degenerescência (48)
Onda D	$\delta_{D,0,3} \Rightarrow$	degenerescência (16)
	$\delta_{D,0,5} \Rightarrow$	degenerescência (24)
	$\delta_{D,1,3} \Rightarrow$	degenerescência (48)
	$\delta_{D,1,5} \Rightarrow$	degenerescência (72)

Tabela 4.6: Defasagens $\delta_{L,I,2J}$ do espalhamento KN . O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta a existência de K , $\bar{K}$, N e $\bar{N}$, e as projeções de momento angular total $(2J + 1)$ e de isospin $(2I + 1)$.

Os ajustes das dez funções apresentadas na tabela 4.6 são feitos com os dados experimentais de defasagens presentes em [56]. As formas explícitas destes ajustes, juntamente com suas representações gráficas, são encontradas no apêndice F .

Espalhamento NN

O espalhamento “elástico” nucleon-núcleon é escrito como

$$N + N \rightarrow N + N, \quad (4.30a)$$

$$\bar{N} + \bar{N} \rightarrow \bar{N} + \bar{N}, \quad (4.30b)$$

$$N + \bar{N} \rightarrow N + \bar{N}, \quad (4.30c)$$

onde N representa o dubleto de isospin (p, n) . Note que, devido à simetria de conjugação de carga, apenas dois destes três espalhamentos são distintos.

Núcleons são férmions, portanto o estado deste sistema, composto por momento angular orbital L , spin S , isospin I e conjugação de carga C , deve ser completamente antisimetrizado.

De um modo geral, a simetrização dos estados internos do espalhamento NN é análoga ao caso KK . De fato, estes estados são construídos de acordo com as equações (4.27), (4.28a), (4.28b) e (4.28c). Ou seja, para o estado de spin total $|S, M_S\rangle$ temos $S = 1$ (simétrico) ou $S = 0$ (antisimétrico), e para os estados de isospin e conjugação de carga basta trocar S por I ou C .

Antes de classificar as defasagens nucleon-nucleon, vamos elencar algumas simplificações que serão feitas:

- As defasagens dos espalhamentos próton-próton e próton-nêutron são bastante parecidas. Então, vamos supor que elas não dependem do isospin I .
- Em analogia com a independência do isospin, vamos supor também que as defasagens não dependem da conjugação de carga C .
- Restringiremos o estudo a $L = 0, 1$ e 2 .

Feitas essas considerações e lembrando da antisimetrização do estado completo, podemos classificar as defasagens $\delta_{2S+1,L,J}$ e suas degenerescências da seguinte maneira:

Onda S	$\delta_{1,S,0} \Rightarrow$ degenerescência (10)
	$\delta_{3,S,1} \Rightarrow$ degenerescência (18)
Onda P	$\delta_{1,P,1} \Rightarrow$ degenerescência (18)
	$\delta_{3,P,0} \Rightarrow$ degenerescência (10)
	$\delta_{3,P,1} \Rightarrow$ degenerescência (30)
	$\delta_{3,P,2} \Rightarrow$ degenerescência (50)
Onda D	$\delta_{1,D,2} \Rightarrow$ degenerescência (50)
	$\delta_{3,D,1} \Rightarrow$ degenerescência (18)
	$\delta_{3,D,2} \Rightarrow$ degenerescência (30)
	$\delta_{3,D,3} \Rightarrow$ degenerescência (42)

Tabela 4.7: Defasagens $\delta_{2S+1,L,J}$ do espalhamento NN . O número entre parênteses representa a degenerescência completa que leva em conta a simetria fermiônica e as projeções de momento angular total $(2J + 1)$, de isospin $(2I + 1)$ e de conjugação de carga $(2C + 1)$.

Os ajustes das dez funções apresentadas na tabela 4.7 são feitos com os dados experimentais de defasagens presentes em [56]. As formas explícitas destes ajustes, juntamente com suas representações gráficas, são encontradas no apêndice *F*.

Capítulo 5

Universo Primordial Real

O objetivo deste capítulo é construir equações de estados (EoS) realistas para o universo pré-nucleossíntese (Pns), utilizando para tanto todo o desenvolvimento dos capítulos anteriores. Uma vez construídas estas EoS, vamos estudar as várias aproximações envolvidas e o seus regimes de validade. Pretendemos também avaliar as consequências cosmológicas mais imediatas, incluindo um possível efeito de expansão acelerada (era inflacionária).

5.1 Considerações gerais para o universo Pns real

Com o advento do processo de criação de pares, o universo PnS apresenta uma pluralidade de partículas que depende da energia considerada e da massa de repouso de cada espécie. Por simplicidade, restringiremos o estudo da era primordial a poucas centenas de MeV ($20 MeV \leq kT \lesssim 300 MeV$), limitando assim razoavelmente a quantidade de partículas do período. Assim, conforme dito no capítulo 1,

- Bósons fundamentais: fóton (γ).
- Léptons: elétrons (e^-), pósitrons (e^+), muons (μ^-), antimuons (μ^+), neutrinos do elétron e do muon (ν_e, ν_μ) e antineutrinos do elétron e do muon ($\bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu$).
- Hádrons: píons (π^+, π^-, π^0), káons ($K^+, K^-, K^0, \bar{K}^0$), nucleons (p, n) e anti-nucleons ($\bar{p}, \bar{n}$).

Note que, na discriminação dos hádrons relevantes usou-se, além da massa, o critério de estabilidade sob interações fortes. Maiores detalhes são dados na seção 4.1.1.

Um ponto importante a ser ressaltado é que não levaremos em conta a assimetria matéria-antimatéria, ou seja, desprezaremos a matéria do universo atual. Esta

aproximação é totalmente lícita para o período Pns no estágio de expansão tipo era da radiação (seção 1.2).

A palavra “real”, presente no título da seção (e do capítulo), se refere justamente à relevância dos processos de interação para as EoS cosmológicas. Então, em uma primeira análise, devemos discutir quais das quatro interações fundamentais devem estar presentes nas EoS do período Pns.

A interação gravitacional, como a mais fraca das quatro interações, é inserida na cosmologia somente através da equação de Einstein, ou mais especificamente, através das equações de Friedmann. Nas escalas de energia de poucas centenas de MeV , esta interação não deve influenciar a construção das equações de estado cosmológicas*.

A segunda interação a ser considerada é a eletromagnética. Apesar desta interação ser responsável pela termalização das partículas carregadas (ver capítulo 1), ela não produzirá nenhum efeito relevante para as EoS primordiais. Esta afirmação é baseada em duas importantes características:

- (i) A carga elétrica possui dois sinais distintos, sendo que partículas de sinais iguais se repelem e partículas de sinais opostos se atraem. Isto faz com que um fluido globalmente neutro sofra o fenômeno de blindagem (princípio de Debye), e conseqüentemente a interação efetiva entre seus constituintes seja de curto alcance.
- (ii) A constante de acoplamento da interação eletromagnética é relativamente pequena ($e^2 \sim 1/137$).

Usando estas duas características, podemos estimar a eficácia da interação eletromagnética para um fluido a dezenas de MeV composto apenas por elétrons e pósitrons. Neste caso, a energia de interação média $\bar{U}$ por elétron/pósitron [1] é da ordem de

$$\bar{U} \sim \frac{e^2}{r}, \quad (5.1)$$

onde r é a distância intereletrônica média dada por:

$$r \simeq (n_e)^{-1/3} \sim \frac{1}{kT}. \quad (5.2)$$

Veja a equação (1.9).

*Pode ocorrer uma mudança na descrição da mecânica estatística, devido a variedade curva da Relatividade geral. Nesta tese, não consideraremos qualquer efeito desta natureza.

Já a energia cinética média E_{cin} por elétron/pósitron é $E_{cin} \sim kT$. Portanto, E_{cin} é aproximadamente duas ordens de grandeza maior que $\bar{U}$. Estimativas análogas a esta, envolvendo as outras partículas carregadas, justificam a aproximação de desprezar a interação eletromagnética na construção das EoS.

A terceira interação a considerar é a interação forte. Apesar de ser uma interação de curto alcance, esta interação, por possuir uma constante de acoplamento relativamente alta, pode ser importante para cosmologia Pns. De fato, a força forte é a única interação que consideraremos na construção das EoS cosmológicas. Maiores informações sobre esta interação foram dadas no capítulo 4.

A quarta e última interação é a interação fraca. Esta interação é de curto alcance como a força forte, porém de intensidade muito menor (ver tabela 4.1). Neste sentido, a interação fraca não deve ser uma fonte de gravitação importante para a cosmologia Pns, e portanto é lícito desprezá-la na montagem das EoS primordiais. Contudo, é importante ressaltar que esta interação é responsável pela termalização das partículas neutras (ver capítulo 1), e pode ter um papel fundamental na resolução do problema de assimetria matéria-antimatéria.

Feitas estas considerações, dividimos as partículas relevantes no período Pns em três categorias:

1. $\gamma, e^-, e^+, \nu_e, \nu_\mu, \bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu$ – partículas quânticas ultrarelativísticas ideais;
2. μ^-, μ^+ – partículas quânticas relativísticas ideais;
3. $\pi^+, \pi^-, \pi^0, K^+, K^-, K^0, \bar{K}^0, p, \bar{p}, n, \bar{n}$ – partículas quânticas relativísticas interagentes.

Na próxima seção aplicaremos boa parte dos resultados dos capítulos anteriores para montar explicitamente as equações de estado cosmológicas.

5.2 Equações de estado primordiais

Quando falamos em equações de estado primordiais estamos nos referindo a duas equações distintas presentes no modelo padrão do Big Bang. A primeira destas EoS é aquela para a pressão p , e a segunda é uma equação para a densidade de energia ρ . Ambas equações são necessárias na descrição da evolução do universo.

Porém, a construção destas EoS pode ser feita de diferentes maneiras. De fato, na seção 2.2 mostramos que tanto p quanto ρ podem ser escritos convenientemente de duas formas distintas, perfazendo assim um total de quatro possíveis conjuntos

de equações de estado *. Estes quatro conjuntos são dados pelas combinações de $\{p(z, T), p(n, T)\}$ com $\{\rho(z, T), \rho(n, T)\}$ onde z é a fugacidade e n é a densidade numérica.

No caso da pressão existem fortes argumentos teóricos e experimentais (seção 2.2.2), indicando a equação $p(n, T)$ (série do virial) como sendo a forma mais correta de construir a EoS da pressão. Já para a densidade de energia a escolha entre $\rho(z, T)$ e $\rho(n, T)$ não é tão óbvia. Porém, uma argumentação baseada no significado físico de ρ (seção 2.2) fornece um bom indício de que $\rho(z, T)$ é a forma mais conveniente para expressar a densidade de energia. Voltaremos a discutir o caso de ρ na seção 5.3.1, quando falarmos de estabilidade termodinâmica da EoS cosmológicas.

Portanto, a construção das equações de estado das partículas relativísticas (interagentes ou não) será feita com a série do virial para a pressão, e com a série da fugacidade para a densidade de energia. A forma geral (multicomponente) para p e ρ destas séries são dadas pelas equações (2.166a) e (2.165c) respectivamente. Outro ponto importante é que devido a complexidade do sistema, consideraremos apenas os primeiros termos de interação (interação duas a duas) nas montagens das EoS de partículas relativísticas. Neste caso, os processos elásticos da interação podem ser descritos corretamente pelas defasagens (seção 3.2.2).

De acordo com a classificação da seção anterior, podemos dividir as equações para a pressão e para a densidade de energia em três partes distintas:

$$p = p_{Had} + p_R + p_{UR}, \quad (5.3)$$

$$\rho = \rho_{Had} + \rho_R + \rho_{UR}, \quad (5.4)$$

onde os índices Had , R e UR representam os hádrons, as partículas relativísticas ideais e as partículas ultrarelativísticas também ideais.

Procederemos a seguir, com a construção explícita de cada uma destas três partes.

5.2.1 EoS para hádrons

Tendo em vista as várias simetrias apresentadas no capítulo anterior, o sistema de hádrons pode ser tratado como um sistema interagente de três componentes (píons π , káons K e nucleons N), cujas equações de estado são derivadas de (2.165c) e (2.166a).

Para a densidade de energia temos:

*Existem outras maneiras de construir EoS, porém elas não serão abordadas nesta tese.

$$\begin{aligned} \rho_{Had}(z_\pi, z_K, z_N, kT) = & (kT)^2 \left[\frac{\partial b_{1\pi}}{\partial(kT)} z_\pi + \frac{\partial b_{1K}}{\partial(kT)} z_K + \frac{\partial b_{1N}}{\partial(kT)} z_N + \right. \\ & + \frac{\partial b_{2\pi\pi}}{\partial(kT)} z_\pi^2 + \frac{\partial b_{2KK}}{\partial(kT)} z_K^2 + \frac{\partial b_{2NN}}{\partial(kT)} z_N^2 + \\ & \left. + \frac{\partial b_{2\pi K}}{\partial(kT)} z_\pi z_K + \frac{\partial b_{2\pi N}}{\partial(kT)} z_\pi z_N + \frac{\partial b_{2KN}}{\partial(kT)} z_K z_N \right], \quad (5.5) \end{aligned}$$

onde b_1 's são os termos ideais dados em (A.34); b_2 's são os termos de interação dois a dois determinados em (2.160); e z 's são as fugacidades. É importante lembrar que no universo Pns $\mu_\pi \simeq \mu_K \simeq \mu_N \simeq 0$ (ver capítulo 1), ou seja

$$z_\pi \simeq z_K \simeq z_N \simeq 1. \quad (5.6)$$

Agora, para a pressão,

$$\begin{aligned} p_{Had}(n_\pi, n_K, n_N, kT) = & kT \left(a_{1\pi} n_\pi + a_{1K} n_K + a_{1N} n_N + a_{2\pi\pi} n_\pi^2 + a_{2KK} n_K^2 + \right. \\ & \left. + a_{2NN} n_N^2 + a_{2\pi K} n_\pi n_K + a_{2\pi N} n_\pi n_N + a_{2KN} n_K n_N \right), \quad (5.7) \end{aligned}$$

onde $a_{1\pi} = a_{1K} = a_{1N} = 1$ (termos ideais); a_2 's são os termos de interação dois a dois obtidos como função dos b_1 's e b_2 's (equações (C.8b) e (C.8c)); e n 's são as densidades numéricas, dadas por

$$n_\pi(z_\pi, z_K, z_N, kT) = b_{1\pi} z_\pi + 2b_{2\pi\pi} z_\pi^2 + b_{2\pi K} z_\pi z_K + b_{2\pi N} z_\pi z_N, \quad (5.8)$$

$$n_K(z_\pi, z_K, z_N, kT) = b_{1K} z_K + 2b_{2KK} z_K^2 + b_{2\pi K} z_\pi z_K + b_{2KN} z_K z_N, \quad (5.9)$$

$$n_N(z_\pi, z_K, z_N, kT) = b_{1N} z_N + 2b_{2NN} z_N^2 + b_{2\pi N} z_\pi z_N + b_{2KN} z_K z_N. \quad (5.10)$$

Veja equação(2.165b).

Uma característica importante envolvendo a pressão e a densidade de energia é que, devido as equações (5.6), (5.8), (5.9) e (5.10), ρ_{Had} e p_{Had} são funções apenas da energia kT .

Os termos ideais b_1 's são escritos como:

$$b_{1i} = \frac{g_i}{\Lambda_i^3(1/kT)}, \quad \text{com } i = \pi, K \text{ ou } N. \quad (5.11)$$

Os coeficientes g 's correspondem aos valores assumidos pelos graus de liberdade, com $g_\pi = 3$, $g_K = 4$ e $g_N = 8$. Já Λ_i é o comprimento de onda térmico relativístico dado por (ver apêndice A),

$$\frac{1}{\Lambda_i^3(1/kT)} = \frac{4\pi m_i^2 kT}{(2\pi)^3} K_2\left(\frac{m_i}{kT}\right), \quad (5.12)$$

onde $m_\pi = 0.1396 \text{ GeV}$, $m_K = 0.4957 \text{ GeV}$ e $m_N = 0.93826 \text{ GeV}$.

Em princípio, um termo b_2 deve conter todos os processos de interação envolvendo as duas partículas às quais ele se refere. Ou seja, devemos ter os processos de espalhamento (elástico e inelástico) bem como os estados ligados. Porém, vamos argumentar que os únicos processos relevantes na determinação dos b_2 's são os processos de espalhamento elástico:

As energias típicas dos estados ligados entre π , K e N são da ordem de poucos $\text{MeV}^\dagger$ [59]. Então, em escalas de energia de dezenas ou centenas de MeV (universo Pns), os processos envolvendo estados ligados são desprezíveis quando comparados com processos de espalhamento. De fato, nessas escalas é muito mais provável que um hádron ao encontrar outro seja espalhado, ao invés de formar um estado ligado.

O argumento em favor de negligenciar os processos de espalhamento inelásticos vem do sistema de dois canais de onda S (ver seção 4.2 equações (4.17a) e (4.17b)). Nesta caso, a matriz S pode ser parametrizado da seguinte forma,

$$\hat{S}_2 = \begin{pmatrix} \eta e^{2i\delta_{xx}} & i\sqrt{1-\eta^2}e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} \\ i\sqrt{1-\eta^2}e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} & \eta e^{2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

onde η é o parâmetro de inelasticidade que mede a eficiência de transformarmos partículas x em partículas y , e δ_{xx} e δ_{yy} são as defasagens relacionadas com as interações x com x e y com y respectivamente.

POr outro lado, a equação mestra (3.39) determina que os b_2 's possuem sempre um termo tipo

$$\text{Tr} \left[\left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_2^a \right] = \text{Tr} \left[2 \left(\hat{S}_2^a \right)^{-1} \frac{\partial \hat{S}_2^a}{\partial E} \right]. \quad (5.14)$$

Restringindo a análise ao espalhamento de onda S e supondo que não temos estados internos, podemos determinar (5.14) para o sistema de dois canais parametrizado por (5.13), como segue:

$$\left(\hat{S}_2 \right)^{-1} = \begin{pmatrix} \eta e^{-2i\delta_{xx}} & -i\sqrt{1-\eta^2}e^{-i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} \\ -i\sqrt{1-\eta^2}e^{-i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} & \eta e^{-2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

e

$$\frac{\partial \hat{S}_2}{\partial E} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \eta}{\partial E} + 2i\eta \frac{\partial \delta_{xx}}{\partial E} \right) e^{2i\delta_{xx}} & S_{12} \\ S_{21} & \left(\frac{\partial \eta}{\partial E} + 2i\eta \frac{\partial \delta_{yy}}{\partial E} \right) e^{2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

com

[†]Por exemplo, o dêuteron possui uma energia de ligação de $2,2 \text{ MeV}$.

$$S_{12} = S_{21} = \left(-\frac{\partial \eta}{\partial E} \frac{\eta i}{\sqrt{1-\eta^2}} - \sqrt{1-\eta^2} \left(\frac{\partial \delta_{xx}}{\partial E} + \frac{\partial \delta_{yy}}{\partial E} \right) \right) e^{i(\delta_{xx} + \delta_{yy})}. \quad (5.17)$$

Então, substituindo (5.15) e (5.16) em (5.14), temos:

$$Tr \left[\left(\hat{S}_2 \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_2 \right] = 4i \left(\frac{\partial \delta_{xx}}{\partial E} + \frac{\partial \delta_{yy}}{\partial E} \right). \quad (5.18)$$

Por outro lado, pode-se obter a parte puramente elástica do sistema de dois canais fazendo $\eta = 1$ em (5.13), ou seja:

$$\hat{S}_2^{el} = \begin{pmatrix} e^{2i\delta_{xx}} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Neste caso, o termo (5.14) resulta em

$$\begin{aligned} Tr \left[\left(\hat{S}_2^{el} \right)^{-1} \frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial E} \hat{S}_2^{el} \right] &= Tr \left[2 \begin{pmatrix} 2i \frac{\partial \delta_{xx}}{\partial E} & 0 \\ 0 & 2i \frac{\partial \delta_{yy}}{\partial E} \end{pmatrix} \right] \\ &= 4i \left(\frac{\partial \delta_{xx}}{\partial E} + \frac{\partial \delta_{yy}}{\partial E} \right), \end{aligned} \quad (5.20)$$

idêntico à equação (5.18). Ou seja, neste sistema os processos inelásticos não afetam o cálculo de (5.14).

Este tipo de análise sugere fortemente que somente a parte elástica das interações contribua na determinação dos b_2 's.

Considerando apenas os processos elásticos, os seis termos de interação são dados por equações do tipo (3.53a) e (3.53c). Portanto, com o auxílio dos vários conjuntos de defasagens apresentados na seção 4.2.1, podemos escrever a forma explícita dos seis b_2 's.

No cálculo de cada um destes b_2 's é necessário realizar uma integração envolvendo a função de Bessel modificada K_2 e várias derivadas de defasagens. Todas as seis integrações foram feitas numericamente com o auxílio do software *Mathematica 5.0*. No procedimento de integração reintroduzimos c e $\hbar$ de tal forma que as unidades de comprimento e de energia são dadas em fm e em GeV respectivamente[†]. Os limites superiores de integração variam para cada b_2 , porém, via de regra, eles estão na faixa de $1 GeV$ à $2,5 GeV$. Como a temperatura varia entre $20 MeV \leq kT \lesssim 300 MeV$,

[†]Estas unidades são utilizadas nos gráficos de quase todo o capítulo 5.

os limites superiores escolhidos são suficientes para incluir toda a parte relevante dos integrandos[§].

A seguir, vamos determinar cada um destes seis termos de interação.

Píon-Píon:

$$b_{2\pi\pi}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{2m_\pi}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[\frac{\partial\delta_{0,0}}{\partial\omega} + 5\frac{\partial\delta_{0,2}}{\partial\omega} + 9\frac{\partial\delta_{1,1}}{\partial\omega} + 5\frac{\partial\delta_{2,0}}{\partial\omega} + 25\frac{\partial\delta_{2,2}}{\partial\omega} \right]_{\pi\pi} d\omega. \quad (5.21)$$

Os números que multiplicam as defasagens representam a degenerescência de cada estado e são dados na tabela 4.2.

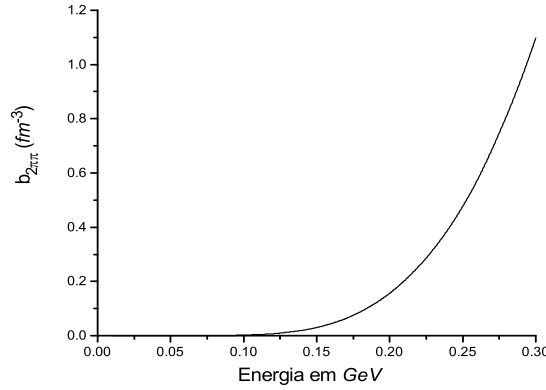


Figura 5.1: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações píon-píon $b_{2\pi\pi}$ em função da energia kT . Na integração numérica de (5.21) utilizamos $2m_\pi = 0,2792 \text{ GeV}$ com um limite superior em $0,91 \text{ GeV}$.

Píon-káon:

$$b_{2\pi K}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{m_\pi+m_K}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[4\frac{\partial\delta_{0,1}}{\partial\omega} + 8\frac{\partial\delta_{0,3}}{\partial\omega} + 12\frac{\partial\delta_{1,1}}{\partial\omega} + 24\frac{\partial\delta_{1,3}}{\partial\omega} \right]_{\pi K} d\omega. \quad (5.22)$$

A degenerescência de cada estado é dada na tabela 4.3.

[§]A presença da função de Bessel K_2 faz com que os integrandos decaiam rapidamente.

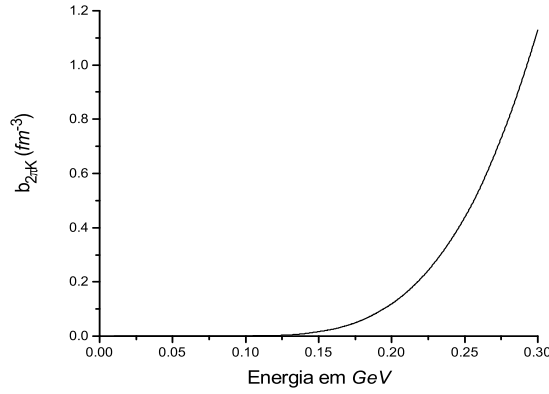


Figura 5.2: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações píon-káon $b_{2\pi K}$ em função da energia kT . Na integração numérica de (5.22) utilizamos $m_\pi + m_K = 0,635 \text{ GeV}$ com um limite superior em $1,3 \text{ GeV}$.

Píon-nucleon:

$$b_{2\pi N}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{m_\pi+m_N}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[8 \frac{\partial \delta_{S,1,1}}{\partial \omega} + 16 \frac{\partial \delta_{S,3,1}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 8 \frac{\partial \delta_{P,1,1}}{\partial \omega} + 16 \frac{\partial \delta_{P,3,1}}{\partial \omega} + 16 \frac{\partial \delta_{P,1,3}}{\partial \omega} + 32 \frac{\partial \delta_{P,3,3}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 16 \frac{\partial \delta_{D,1,3}}{\partial \omega} + 24 \frac{\partial \delta_{D,1,5}}{\partial \omega} + 32 \frac{\partial \delta_{D,3,3}}{\partial \omega} + 48 \frac{\partial \delta_{D,3,5}}{\partial \omega} \right]_{\pi N} d\omega. \quad (5.23)$$

A degenerescência de cada estado é dada na tabela 4.4.

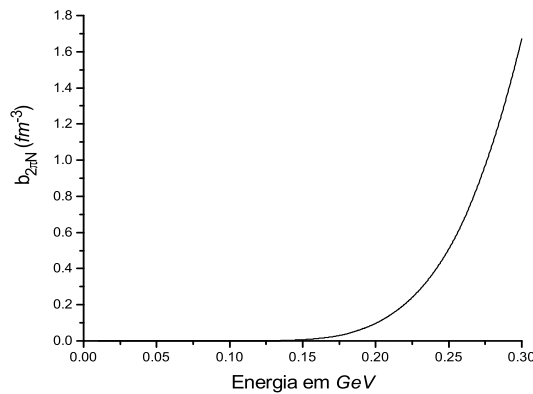


Figura 5.3: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações píon-nucleon $b_{2\pi N}$ em função da energia kT . Na integração numérica de (5.23) utilizamos $m_\pi + m_N = 1,078 \text{ GeV}$ com um limite superior em $1,6 \text{ GeV}$.

Káon-káon:

$$b_{2KK}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{2m_K}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[\frac{\partial \delta_{0,0}}{\partial \omega} + 9 \frac{\partial \delta_{0,1}}{\partial \omega} \right]_{KK} d\omega. \quad (5.24)$$

A degenerescência de cada estado é dada na tabela 4.5.

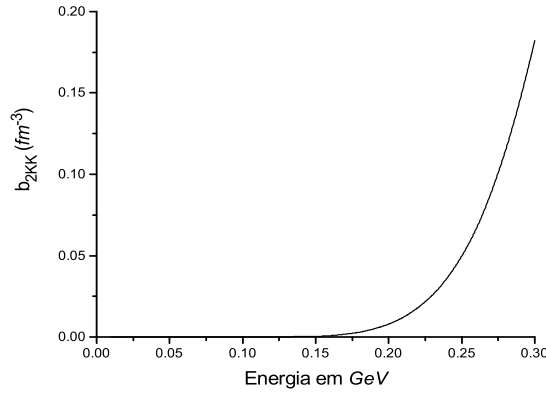


Figura 5.4: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações káon-káon b_{2KK} em função da energia kT . Na integração numérica de (5.24) utilizamos $2m_K = 0,99 \text{ GeV}$ com um limite superior em $1,6 \text{ GeV}$.

Káon-nucleon:

$$b_{2KN}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{m_K+m_N}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[8 \frac{\partial \delta_{S,0,1}}{\partial \omega} + 24 \frac{\partial \delta_{S,1,1}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 8 \frac{\partial \delta_{P,0,1}}{\partial \omega} + 16 \frac{\partial \delta_{P,0,3}}{\partial \omega} + 24 \frac{\partial \delta_{P,1,1}}{\partial \omega} + 48 \frac{\partial \delta_{P,1,3}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 16 \frac{\partial \delta_{D,0,3}}{\partial \omega} + 24 \frac{\partial \delta_{D,0,5}}{\partial \omega} + 48 \frac{\partial \delta_{D,1,3}}{\partial \omega} + 72 \frac{\partial \delta_{D,1,5}}{\partial \omega} \right]_{KN} d\omega. \quad (5.25)$$

A degenerescência de cada estado é dada na tabela 4.6.

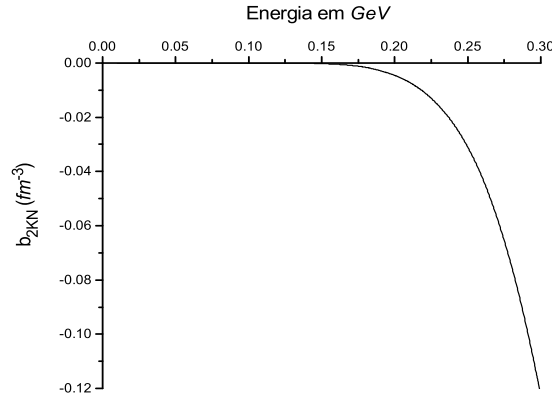


Figura 5.5: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações káon-nucleon b_{2KN} em função da energia kT . Na integração numérica de (5.25) utilizamos $m_K + m_N = 1,434 \text{ GeV}$ com um limite superior em $1,99 \text{ GeV}$.

Nucleon-nucleon:

$$b_{2NN}(kT) = \frac{kT}{2\pi^3} \int_{2m_N}^{\infty} \omega^2 K_2\left(\frac{\omega}{kT}\right) \left[10 \frac{\partial \delta_{1,S,0}}{\partial \omega} + 18 \frac{\partial \delta_{3,S,1}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 18 \frac{\partial \delta_{1,P,1}}{\partial \omega} + 10 \frac{\partial \delta_{3,P,0}}{\partial \omega} + 30 \frac{\partial \delta_{3,P,1}}{\partial \omega} + 50 \frac{\partial \delta_{3,P,2}}{\partial \omega} + \right. \\ \left. + 50 \frac{\partial \delta_{1,D,2}}{\partial \omega} + 18 \frac{\partial \delta_{3,D,1}}{\partial \omega} + 30 \frac{\partial \delta_{3,D,2}}{\partial \omega} + 42 \frac{\partial \delta_{3,D,3}}{\partial \omega} \right]_{NN} d\omega. \quad (5.26)$$

A degenerescência de cada estado é dada na tabela 4.7.

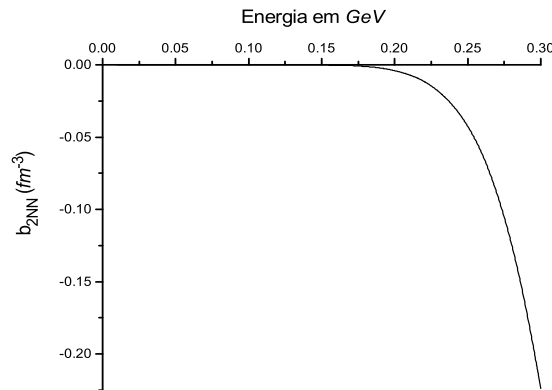


Figura 5.6: Gráfico do segundo coeficiente da fugacidade referente às interações nucleon-nucleon b_{2NN} em função da energia kT . Na integração numérica de (5.26) utilizamos $2m_N = 1,877 \text{ GeV}$ com um limite superior em $2,363 \text{ GeV}$.

De um modo geral, os seis coeficientes b_2 's podem ser positivos crescentes (figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4) ou negativos decrescentes (figuras 5.5 e 5.6). Agora, se fizermos uma comparação grosseira com o caso clássico não relativístico (2.72), vemos que os b_2 's positivos (negativos) estão associados com um potencial preponderantemente negativo (positivo). Neste sentido, podemos identificar os espalhamentos $\pi\pi$, πK , πN e KK como predominantemente atrativos e os espalhamentos KN e NN como predominantemente repulsivos.

Uma vez calculados os coeficientes b_1 's e b_2 's, é bastante simples obter as densidades numéricas (5.8), (5.9) e (5.10), e as equações de estado para os hádrons (5.5) e (5.7).

5.2.2 EoS de partículas ideais

As partículas ideais (sem interação) se dividem em duas categorias: ultrarelativísticas ($\gamma, e^-, e^+, \nu_e, \nu_\mu, \bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu$) e relativísticas (μ^-, μ^+).

A construção das equações de estado da parte ultrarelativística é relativamente simples, e já foi feita no capítulo 1. Por completeza, repetiremos aqui os principais resultados.

Para a densidade de energia ρ_{UR} , eq. (1.25), temos:

$$\rho_{UR} = \rho_\gamma + \rho_{e^-} + \rho_{e^+} + \rho_{\nu_e} + \rho_{\nu_\mu} + \rho_{\bar{\nu}_e} + \rho_{\bar{\nu}_\mu} = \frac{9}{2}\rho_\gamma = \frac{9\pi^2}{30}(kT)^4. \quad (5.27)$$

E para a pressão p_{UR} , eq. (1.11), temos:

$$p_{UR} = \frac{\rho_{UR}}{3}. \quad (5.28)$$

É interessante também apresentar as várias densidades numéricas (1.9):

$$n_{e^-} = n_{e^+} = \frac{3}{4}n_\gamma \quad \text{e} \quad n_{\nu_e} = n_{\nu_\mu} = n_{\bar{\nu}_e} = n_{\bar{\nu}_\mu} = \frac{3}{8}n_\gamma \quad (5.29)$$

com

$$n_\gamma(kT) = \frac{2,404}{\pi^2}(kT)^3. \quad (5.30)$$

Agora, a montagem das equações de estado da parte relativística é análoga à que foi feita para o caso dos hádrons, lembrando é claro que μ^- e μ^+ são partículas ideais (ver apêndice A).

Para a densidade de energia ρ_R , eq. (2.165c), temos:

$$\rho_R(z_\mu, kT) = (kT)^2 \left[\frac{\partial b_{1\mu}^{(0)}}{\partial (kT)} z_\mu + \frac{\partial b_{2\mu}^{(0)}}{\partial (kT)} z_\mu^2 \right], \quad (5.31)$$

onde $b_{1\mu}^{(0)}$ e $b_{2\mu}^{(0)}$ são os termos ideais, eq. (A.34), dados por

$$b_{N\mu}^{(0)} = 4 \frac{(-1)^{N-1}}{N} \frac{4\pi m_\mu^2 kT}{(2\pi)^3 N} K_2 \left(N \frac{m_\mu}{kT} \right), \quad (5.32)$$

com $m_\mu = 0.10566 \text{ GeV}$. Como no caso dos hádrons, podemos fazer $z_\mu \simeq 1$ durante todo o período Pns.

Já para a pressão p_R , eq. (2.166a),

$$p_R(n_\mu, kT) = kT [a_{1\mu} n_\mu + a_{2\mu} n_\mu^2], \quad (5.33)$$

onde $a_{1\mu}$ e $a_{2\mu}$ são os coeficientes do virial obtidos como função dos $b_{1\mu}^{(0)}$ e $b_{2\mu}^{(0)}$ (equações (C.8b) e (C.8c)); e n_μ é a densidade numérica muônica (2.165b) dada por,

$$n_\mu(z_\mu, kT) = b_{1\mu}^{(0)} z_\mu + 2b_{2\mu}^{(0)} z_\mu^2. \quad (5.34)$$

Observa-se que as pressões p_{UR} e p_R e as densidades de energia ρ_{UR} e ρ_R são funções apenas da energia kT .

O próximo passo é obter e estudar as equações de estado cosmológicas completas.

5.2.3 EoS completas

Substituindo as equações (5.5), (5.27) e (5.31) em (5.4) obtemos a EoS completa para a densidade de energia ρ . O gráfico de ρ em função de kT é mostrado na figura 5.7.

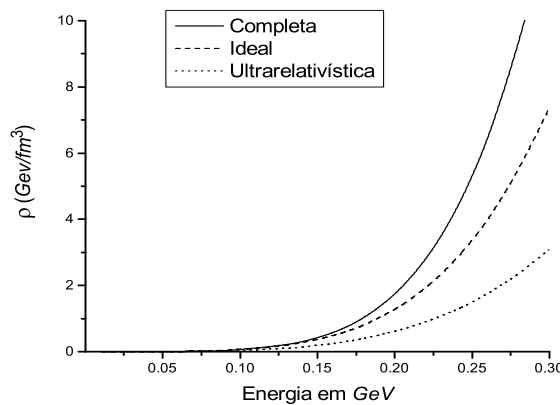


Figura 5.7: Gráfico da densidade de energia ρ em GeV/fm^3 como função da energia kT em GeV . São apresentadas nesta figura três curvas: densidade de energia completa, que inclui todas as partículas e interações relevantes (linha cheia);

densidade de energia ideal, que inclui todas as partículas sem considerar suas interações (linha tracejada); densidade de energia ultrarelativística, que inclui somente as partículas ultrarelativísticas (linha pontilhada).

De um modo geral, as três curvas de densidade de energia apresentam características semelhantes, sendo todas elas positivas e crescentes. Da figura 5.7 vemos que as componentes ultrarelativísticas dominam até por volta de $0,12 \text{ GeV}$. Entre $0,12 \text{ GeV}$ e $0,16 \text{ GeV}$ as outras partículas se tornam importantes (principalmente π e μ), porém as interações ainda são irrelevantes. E acima de $0,16 \text{ GeV}$, os termos de interação entre hádrons começam a ser importantes. Em $0,275 \text{ GeV}$ as partes ultrarelativística, relativística ideal e de interação hadrônica correspondem respectivamente a 25%, 33% e 42% da densidade de energia total.

A EoS completa referente a pressão p é obtida substituindo (5.7), (5.28) e (5.33) em (5.3). O gráfico de p em função de kT é mostrado na figura 5.8.

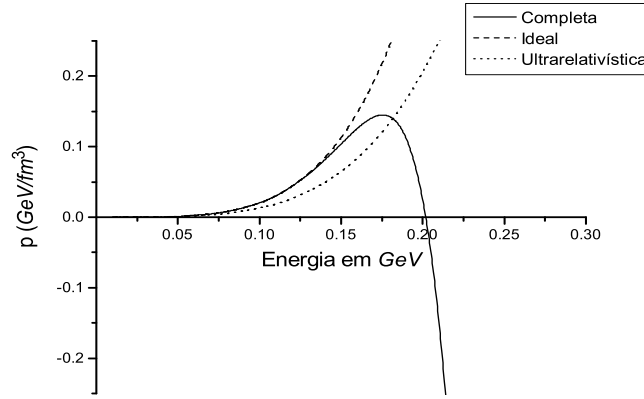


Figura 5.8: Gráfico da pressão p em GeV/fm^3 como função da energia kT em GeV . São apresentadas nesta figura três curvas: pressão completa, que inclui todas as partículas e interações relevantes (linha cheia); pressão ideal, que inclui todas as partículas sem considerar suas interações (linha tracejada); pressão ultrarelativística, que inclui somente as partículas ultrarelativísticas (linha pontilhada).

Segundo a figura 5.8, até $0,14 \text{ GeV}$ as três curvas para a pressão apresentam um comportamento similar, sendo todas positivas e crescentes. A partir deste valor, os termos de interação começam a se fazer sentir e uma súbita mudança ocorre na equação da pressão completa. Ela abrandando o seu crescimento, atinge um valor máximo em $0,175 \text{ GeV}$ e logo em seguida decresce rapidamente. Por volta de $0,2 \text{ GeV}$, a curva da pressão completa torna-se negativa e prossegue em sua descendência com uma taxa de decrescimento bastante elevada. Uma análise mais aprofundada

sobre os processos de interação revela que os espalhamentos $\pi\pi$, πK , πN e KK são os responsáveis pelo decrescimento e pelo surgimento da pressão negativa. Ou seja, interações do tipo atrativa tendem a diminuir o valor da pressão[¶].

Vamos a seguir estudar a influência de certas aproximações na densidade de energia (5.4) e na pressão (5.3).

Na construção das equações ρ_{Had} e p_{Had} fez-se uso de algumas aproximações, duas das quais não foram devidamente justificadas. A primeira diz respeito ao truncamento da soma em l nas equações (3.53a) e (3.53c). Se compararmos estas equações com as formas explícitas (5.21), (5.22), (5.23), (5.24), (5.25) e (5.26) dos b_2 's, vemos que utilizamos apenas momentos angulares de $l = 0, 1$ e 2 , ou seja, onda S , P e D . Já a segunda aproximação envolve a extrapolação dos dados de defasagens dos processos de espalhamento KK , KN e NN (seção 4.2.1). De fato, sem dar nenhuma justificativa adequada, consideramos que estes três processos não dependem da carga total C .

Contudo, vamos mostrar de forma gráfica que, nas escalas de energia consideradas, estas duas aproximações não afetam significativamente as EoS cosmológicas.

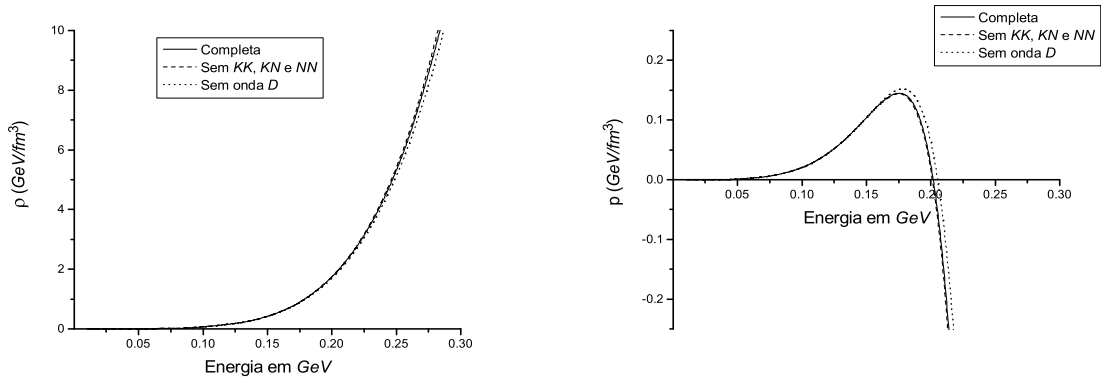


Figura 5.9: Gráficos da densidade de energia e da pressão em função de kT . Nesta figura apresentamos três curvas: equações de estado completas (linhas cheias); EoS construídas sem os processos de espalhamento KK , KN e NN (linhas tracejadas); equações de estado cujos processos de espalhamento se limitam às ondas S e P (linhas pontilhadas).

Na figura 5.9, vemos que ρ e p dependem muito fracamente de momentos angulares maiores que um. Isto ocorre porque as ondas parciais de maior momento angular são importantes apenas em escalas de alta energia. Para $kT \leq 0,3 \text{ GeV}$ podemos nos restringir às ondas S e P . Já os espalhamentos KK , KN e NN

[¶] Discutiremos sobre a validade desta equação na próxima seção.

são completamente irrelevantes^{||} devido à ineficiência das interações e/ou devido à grande diferença entre a massa do sistema e as escalas de kT .

Portanto, pelo menos a baixas energias, é bastante razoável utilizar as equações de estado completas (5.3) e (5.4) para tentar descrever a evolução do universo Pns.

5.3 Validade das equações de estado na cosmologia

Uma primeira aplicação das EoS na cosmologia pode ser feita através da seguinte parametrização:

$$p(kT) = \omega(kT)\rho(kT). \quad (5.35)$$

Substituindo (5.35) na segunda equação de Friedmann, eq. (1.18), obtemos:

$$\left(\frac{\ddot{a}}{a}\right) = -\frac{4\pi G}{3} [1 + 3\omega(kT)] \rho(kT). \quad (5.36)$$

Agora, como a densidade de energia é sempre positiva crescente, a informação sobre a taxa de aceleração depende somente da função paramétrica $\omega(kT)$. Invertendo (5.35) e utilizando as formas explícitas de $\rho(kT)$ e $p(kT)$, construímos o gráfico de $\omega(kT)$.

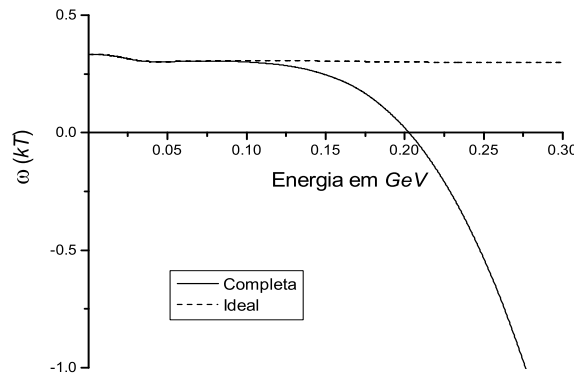


Figura 5.10: Gráfico de ω em função de kT . Nesta figura apresentamos duas curvas: função ω completa, que inclui todas as partículas e interações relevantes (linha cheia); função ω ideal, que inclui todas as partículas sem considerar suas interações (linha tracejada).

^{||}A falta de dados experimentais para o espalhamento KK torna a veracidade desta afirmação um pouco discutível.

Na figura 5.10 vemos que até $0,11 \text{ GeV}$ as duas curvas praticamente se sobrepõem. A partir deste valor, ω completo começa a decrescer, tornando-se negativo por volta de $0,2 \text{ GeV}$, enquanto que ω ideal permanece positivo e aproximadamente constante em $0,3$.

Se transportarmos o efeito da função ω para a equação (5.36), vemos que a taxa de expansão do universo sofre uma profunda mudança entre $0,1 \text{ GeV} < kT < 0,3 \text{ GeV}$. Ou seja, o universo sai de um período de expansão desacelerada muito próximo de uma era tipo radiação, e transita continuamente para um período de expansão acelerada. A comparação direta entre as duas curvas da figura 5.10 mostra claramente que esta aceleração ocorre devido aos processos de interação hadrônicas.

Como visto no capítulo 1, uma expansão acelerada primordial é bastante desejável para a cosmologia. Porém, antes de começarmos a analisar as consequências cosmológicas desta aceleração, devemos nos perguntar se as EoS propostas são realmente válidas até $0,3 \text{ GeV}$. Esta questão é bastante complexa, porém crucial para as aplicações cosmológicas futuras, e dedicaremos o restante da seção a analisar este problema.

A validade das funções $\rho(kT)$ e $p(kT)$ pode ser ameaçada por três fatores distintos: uma possível transição de fase gás-líquido devido a instabilidades na função $p(kT)$; a possibilidade de ocorrer o desconfinamento de hádrons em quarks e glúons; a não convergência das séries da pressão e da densidade de energia, que impossibilitaria o tratamento perturbativo. Analisaremos cada um dos três fatores separadamente.

5.3.1 Instabilidade nas EoS cosmológicas

Na seção 2.2.3 mostramos que, para sistemas termodinâmicos usuais, existem duas condições necessárias e suficientes para que o sistema seja estável, equações (2.149) e (2.152):

$$\frac{V}{T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_V \geq 0 \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \leq 0. \quad (5.37)$$

Porém, as equações da pressão e da densidade de energia foram obtidas respectivamente através de séries nas densidades numéricas e nas fugacidades com o limite termodinâmico já tomado. Nesse sentido, as condições presentes em (5.37) devem ser repassadas para:

$$\frac{1}{T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{v_i} \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{n_i} \geq 0, \quad (5.38)$$

$$v_i \left(\frac{\partial p}{\partial v_i} \right)_T = -n_i \left(\frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_T \leq 0 \quad \Rightarrow \quad n_i \left(\frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_T \geq 0, \quad (5.39)$$

onde $n_i = \frac{1}{v_i}$ é a densidade numérica com $i = \pi, K, N$ ou μ .

A função ρ só depende de kT ($z_i = 1$ para qualquer i), enquanto p depende de kT e das densidades numéricas das quatro espécies. Portanto, a condição (5.39) se desmembra em quatro, sendo todas necessárias para garantir a estabilidade do sistema.

Da figura 5.7 é fácil de ver que $\rho(kT, \{z_i\})^*$ sempre satisfaz a condição (5.38). Contudo, o mesmo não ocorre para $p(kT, \{n_i\})$. De fato, sabendo que todas as densidades numéricas são funções positivas e crescentes de kT , vemos da figura 5.8 que a pressão não respeita as condições (5.39). Uma análise mais detalhada da função completa de p revela que são os termos de interação hadrônica os responsáveis por violar a condição de estabilidade. Então, da figura 5.8, podemos concluir que as EoS cosmológicas completas se tornam instáveis em algum ponto acima de 0,14 GeV.

Em princípio, esta instabilidade é um forte indício de uma transição de fase do tipo gás-líquido e evidencia a perda de validade das EoS cosmológicas contruídas. Porém, toda esta análise está baseada em um sistema termodinâmico usual como um gás contido em um recipiente, e devido a duas características especiais, o universo não pode ser encarado como um sistema deste tipo.

A primeira destas características diz que o *universo não tem fronteiras*. Neste caso, a pressão superficial, diferente da pressão interna (ver seção 2.2.1), não existe. Por outro lado, em um sistema termodinâmico usual, são muitas vezes os efeitos de fronteira que geram as transições de fase, por exemplo: um sistema que possui uma pressão superficial com termos de interação atrativos relevantes tende a sair da condição de equilíbrio, pois as partículas na superfície do sistema são atraídas pelas suas companheiras internas. Para o universo este efeito não existe, e o único tipo de pressão existente é a pressão interna.

A segunda característica diz que na cosmologia *a pressão (interna) entra como fonte direta de gravitação*. Esta particularidade da pressão cosmológica gera efeitos bastante diversos da pressão usual de sistemas termodinâmicos.

Em sistemas usuais estáveis espera-se que conforme o volume diminua a pressão interna aumente. Esta condição, expressa por (5.39), é bastante importante, pois ela evita o “desaparecimento” do sistema. De fato, se $\partial p / \partial V$ fosse positivo nada impediria que o sistema colapsasse[†]. Por outro lado, na cosmologia um aumento da pressão aumenta o efeito atrativo da gravitação, e nesse sentido, um sistema cosmológico com $\partial p / \partial V < 0$ é instável, ou seja, se o universo não estiver se expandindo

* $\{z_i\}$ representa o conjunto das quatro fugacidades todas iguais a um.

[†] A estabilidade da matéria está intimamente ligada a este efeito.

ele tende a colapsar. Voltaremos a essa discussão na seção 5.4.3. É interessante ressaltar a distinção entre os efeitos da pressão interna na termodinâmica usual e na cosmologia: na termodinâmica um aumento de p propicia um aumento do volume, e na cosmologia o efeito é o contrário.

Feitas todas estas considerações, é bastante razoável afirmar que o critério de estabilidade (5.39) não pode ser aplicado na cosmologia.

Um outro ponto a se observar diz respeito à escolha de $\rho(z_i, T)$ ao invés de $\rho(n_i, T)$ (começo da seção 5.2). Se tivéssemos construído a função densidade de energia em termos dos n_i , ela apresentaria um comportamento similar à pressão completa (figura 5.9), e portanto, segundo a condição (5.38), $\rho(n_i, T)$ seria instável. Agora, diferentemente da pressão, a densidade de energia não apresenta nenhum comportamento diferenciado entre sistemas termodinâmicos e cosmológicos. Portanto, a escolha de $\rho(z_i, T)$ em detrimento de $\rho(n_i, T)$ é corroborada pela condição de estabilidade (5.38).

5.3.2 Desconfinamento

Como dito no começo do capítulo 4, a constante de acoplamento da QCD diminui conforme a energia kT do sistema aumenta. Então, é de se esperar que em uma certa temperatura crítica kT_c , esta constante de acoplamento seja suficientemente baixa para permitir que a matéria hadrônica se desconfinem, formando um sistema composto por quarks e glúons livres. Este tipo de fenômeno é muitas vezes chamado de transição de fase de hádrons em quarks e glúons, porém esta transição é completamente distinta da transição de fase discutida na seção 5.3.1. Caso esta transição ocorra durante o período Pns, o nosso modelo de equações de estado perde validade acima de kT_c . As EoS cosmológicas foram construídas assumindo que as partículas fundamentais são hádrons e não quarks e glúons; a contagem de estados dos dois sistemas são totalmente diferentes.

Segundo cálculos teóricos da QCD na rede [47], a temperatura crítica está situada aproximadamente entre 150 e 180 MeV . Estas simulações são bastante complicadas de se fazer e seus resultados dependem crucialmente do número de sabores de quarks considerados.

Entretanto, do ponto de vista experimental, resultados recentes do acelerador RHIC [18] indicam que o desconfinamento não ocorre nas temperaturas previstas pelos cálculos de rede, pelo menos não o desconfinamento em um plasma de quarks e glúons [60]. Ao invés disto, nesta escala de temperatura, os experimentos do RHIC acharam um novo estado para a matéria nuclear. Este estado corresponde a um fluido perfeito (sem viscosidade) muitas vezes identificado como sendo um CGC

(*Color Glass Condensate*) [19]. Diferentemente do plasma de quarks e glúons, as correlações deste fluido não são desprezíveis, ou seja os processos de interação nuclear são relevantes. A modelagem fenomenológica experimental deste novo estado da matéria é bastante complicada e ainda gera muita discussão dentro da comunidade [61].

Outro ponto importante é a diferença entre os sistemas físicos dos aceleradores e o universo Pns. Como dito na seção anterior, a ausência de fronteiras e o papel da pressão como fonte de gravitação pode gerar muitas diferenças entre estes dois sistemas. Muitos trabalhos experimentais sobre desconfinamento fazem alusão ao universo primordial, como se ele estivesse sendo criado em laboratório. Este tipo de afirmação está longe de ser óbvia e deveria ser feita com extrema cautela!

Seja do ponto de vista teórico ou do ponto de vista experimental, o assunto sobre desconfinamento no universo Pns é extremamente complicado[‡], e no estágio atual em que se encontram estas pesquisas é muito difícil de utiliza-las para determinar a validade das equações de estado cosmológicas propostas nesta tese.

5.3.3 Convergência das séries de ρ e p

O primeiro passo no estudo sobre a convergência da parte interagente[§] das séries de ρ e p é analisar a evolução dos parâmetros de expansão z 's e n 's.

Para a função de densidade de energia, a expansão é feita em termos das fugacidades (parâmetros adimensionais), e como visto em (5.6) todos os z 's são iguais a um. Neste sentido, a convergência de ρ depende diretamente dos coeficientes da fugacidade b 's, e portanto das características dos processos de interação. Uma condição necessária (mas não suficiente) é que estas interações sejam de curto alcance. Esta condição é plenamente satisfeita, uma vez que na construção dos b 's utilizamos apenas processos hadrônicos.

Já para a função da pressão a expansão é feita em termos das densidades numéricas dadas em (5.8), (5.9) e (5.10). Os gráfico destas três densidades são mostrados na figura 5.11.

[‡]O autor deve confessar que entende pouco dos trabalhos teóricos e experimentais sobre desconfinamento.

[§]As partes ideais dessas equações se comportam muito bem e não precisam ser estudadas.

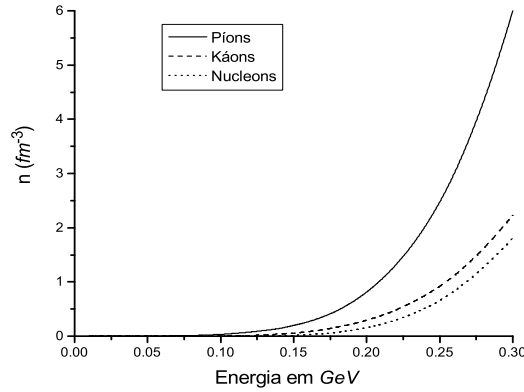


Figura 5.11: Gráfico da densidade numérica n em função de kT . Nesta figura apresentamos três curvas: n_π (linha cheia); n_K (linha tracejada); n_N (linha pontilhada).

As densidades numéricas apresentadas na figura 5.11 não são muito úteis para o estudo de convergência, pois elas não são parâmetros adimensionais. Um procedimento grosseiro para obter parâmetros adimensionais seria conhecer os alcances efetivos d 's das várias interações, e utilizar produtos tipo nd^3 como parâmetros de convergência. Segundo, as referencias [59, 10] as interações hadrônicas tratadas via equação de Schrödinger possuem alcances efetivos que variam em média entre 0,25 fm (píon-píon) e 1,7 fm (nucleon-nucleon). Então, através do critério anterior, vemos que para $kT = 0,3 \text{ GeV}$ o parâmetro nd^3 é 0,1 para a interação tipo píon-píon e 8,9 para a interação nucleon-nucleon. Em princípio, este critério nos diz que a série da pressão em termos de n_N é não convergente, porém ele é extremamente grosseiro e não leva em conta uma série de fatores, como por exemplo a dependência dos coeficientes do virial a 's em termos da temperatura.

Um procedimento bem mais interessante no estudo da convergência da função pressão seria o de comparar os termos de interação dois a dois (a_2 's) com os próximos termos da série, os (a_3 's). Porém, como dito no começo deste capítulo, o sistema hadrônico real envolvendo píons, káons e nucleons é demasiadamente complicado e permite somente a construção dos termos de interação dois a dois. Por outro lado, existe um modelo de brinquedo proposto em [10], que segue as mesmas linhas gerais desta tese, e por ser bastante simples permite o cálculo analítico dos coeficientes do virial a_2 e a_3 . Neste modelo, o fluido cósmico do período Pns é constituído apenas de *fótons* e *nucleons*, onde os fótons γ são tratados da maneira padrão, e os nucleons N como partículas clássicas interagentes não relativísticas. A interação entre nucleons

é descrita grosseiramente através de um potencial tipo poço quadrado+esfera dura:

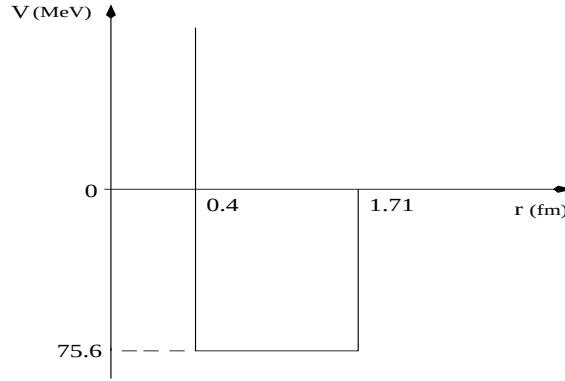


Figura 5.12: Potencial nuclear para o modelo de brinquedo. Os parâmetros deste potencial são determinados através da energia de ligação do deuteron, dos raios quadráticos médios do próton e do deuteron e de dados de espalhamento de nucleons a altas energias (*cf.* referência [62]).

A escolha deste potencial é justificada por dois fatos: (i) ele apresenta um comportamento qualitativo similar a alguns potenciais nucleares fenomenológicos de sucesso, *e.g.*, aqueles obtidos em [63, 64]; (ii) com este potencial é possível calcularmos analiticamente as integrais de clusters até terceira ordem (a_2 e a_3).

A equação para a pressão neste modelo é representada por $\tilde{p}$ dada explicitamente por

$$\tilde{p}(kT, \tilde{n}_N) \simeq \frac{\pi^2 (kT)^4}{45} + (kT) [\tilde{n}_N + a_2 \tilde{n}_N^2 + a_3 \tilde{n}_N^3], \quad (5.40)$$

com

$$\tilde{n}_N(kT) \simeq b_1 + 2b_2 + 3b_3, \quad (5.41)$$

onde b_1 , b_2 , b_3 , a_2 e a_3 são calculados analiticamente com o auxílio do apêndice C e das equações (2.53), (2.72) e (2.74).

O comportamento de $\tilde{p}$ é qualitativamente equivalente à pressão completa p (figura 5.8), com a diferença de $\tilde{p}$ se tornar negativo somente por volta de 0,42 GeV. Maiores informações são dadas na referência [10].

O mais interessante deste modelo simplificado é que ele permite estudar a convergência da série de $\tilde{p}$ através da comparação entre o segundo e o terceiro termo de interação. Para isso definiremos a seguinte função:

$$\tilde{F}(kT) \equiv 1 - \left| \frac{a_3 \tilde{n}_N^3}{a_2 \tilde{n}_N^2} \right|. \quad (5.42)$$

Segundo esta definição, quanto mais próximo de 1 a função $\tilde{F}(kT)$ estiver, maior é a possibilidade de convergência da série de $\tilde{p}(kT, \tilde{n}_N)$. Os comportamentos de

$\tilde{F}(kT)$ e da densidade numérica $\tilde{n}_N(kT)$ em função de kT são mostrados na figura 5.13:

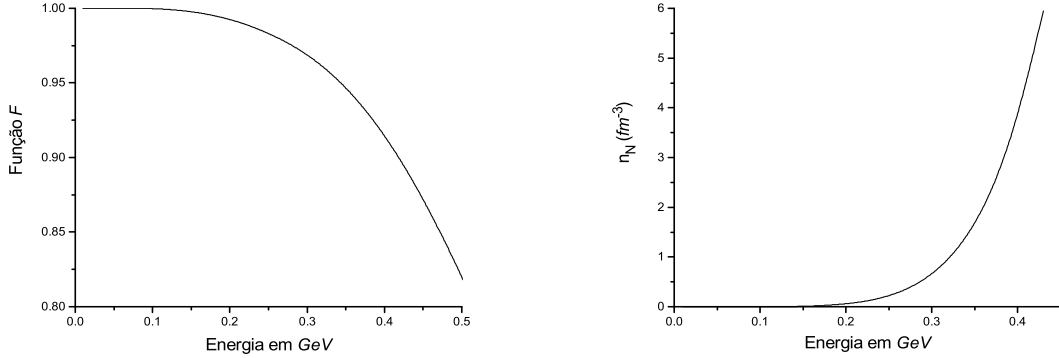


Figura 5.13: Gráficos das funções $\tilde{F}(kT)$ e $\tilde{n}_N(kT)$.

O primeiro gráfico da figura 5.13 indica que até $0,5 \text{ GeV}$ o terceiro termo de interação é relativamente desprezível em comparação com o segundo. Este tipo de análise, utilizando apenas os primeiros termos, não prova a convergência da série $\tilde{p}(kT, \tilde{n}_N)$, porém é um bom indício de que ela existe. Outro ponto importante, mostrado na figura 5.13, é que esta convergência parece persistir mesmo para valores altos de $\tilde{n}_N$.

Apesar deste modelo simplificado não corresponder à realidade do universo Pns, ele mostra que, mesmo para sistemas simples, o estudo da convergência da função pressão (e da densidade de energia) está longe de ser trivial. Isto ocorre porque os coeficientes de interação (a 's ou b 's), cruciais para a convergência de p e ρ , dependem diretamente da soma dos diagramas conexos (ver capítulo 2), e é extremamente difícil avaliar o comportamento destes diagramas no caso geral de N partículas interagindo.

Baseado nos indícios favoráveis do modelo de brinquedo, vamos admitir que as equações de estado completas são convergentes, e que elas representam, com boa aproximação, as EoS cosmológicas do período Pns até $0,3 \text{ GeV}$.

5.4 Consequências cosmológicas

Nesta seção, vamos assumir que as EoS propostas (5.3) e (5.4) são válidas durante todo o período Pns de interesse ($20 \text{ MeV} \leq kT \lesssim 300 \text{ MeV}$), e explorar suas várias consequências para a cosmologia primordial.

5.4.1 O fator de escala $a(kT)$ e o tempo $t(kT)$ para curvatura nula

Primeiramente, devemos determinar a fator de escala $a(kT)$, e a função tempo $t(kT)$ que permite associar o tempo cosmológico com a temperatura. Partindo então da equação de conservação covariante do tensor energia momento, eq. (1.3), e da primeira equação de Friedmann, eq. (1.17), temos:

$$\frac{d\rho}{da} = -\frac{3}{a}(p + \rho), \quad (5.43a)$$

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi G}{3c^2}\rho. \quad (5.43b)$$

Reintroduzimos c nas equações de Friedmann.

Para obtermos $a(kT)$ basta integrarmos (5.43a) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{d(kT)} \frac{d(kT)}{da} &= -\frac{3}{a}(p + \rho) \Rightarrow \frac{d(kT)}{da} = -\frac{3}{a} \frac{(p + \rho)}{\frac{d\rho}{d(kT)}} \Rightarrow \\ \int_{a_{Pns0}}^a \frac{da'}{a'} &= - \int_{kT_{Pns0}}^{kT} \frac{\frac{d\rho}{d(kT')}}{3(p + \rho)} d(kT') \Rightarrow \ln\left(\frac{a}{a_{Pns0}}\right) = - \int_{kT_{Pns0}}^{kT} \frac{\frac{d\rho}{d(kT')}}{3(p + \rho)} d(kT'). \\ a(kT) &= a_{Pns0} \exp \left[- \int_{kT_{Pns0}}^{kT} \frac{\frac{d\rho}{d(kT')}}{3(p + \rho)} d(kT') \right], \end{aligned} \quad (5.44)$$

onde o índice $Pns0$ indica o final do período pré-nucleossíntese, ou seja $kT_{Pns0} = 20MeV$.

Já a função tempo $t(kT)$ é obtida através de uma combinação entre (5.43a) e (5.43b):

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} \frac{dt}{da} &= -\frac{3}{a}(p + \rho) \Rightarrow \frac{d\rho}{d(kT)} \frac{d(kT)}{dt} = -3\frac{\dot{a}}{a}(p + \rho) \Rightarrow \\ \frac{d(kT)}{dt} &= -3\sqrt{\frac{8\pi G}{3c^2}\rho} \frac{(p + \rho)}{\frac{d\rho}{d(kT)}} \Rightarrow \\ \int_{t_{Pns0}}^t dt &= - \int_{kT_{Pns0}}^{kT} \frac{\frac{d\rho}{d(kT')}}{3(p + \rho)\sqrt{\frac{8\pi G}{3c^2}\rho}} d(kT') \Rightarrow \\ t_{Pns0} - t &= \int_{kT_{Pns0}}^{kT} \frac{\frac{d\rho}{d(kT')}}{3(p + \rho)\sqrt{\frac{8\pi G}{3c^2}\rho}} d(kT'). \end{aligned} \quad (5.45)$$

Como a pressão e a densidade de energia estão em unidades de GeV/fm^3 é conveniente expressar a constante $\frac{8\pi G}{3c^2}$ nestas unidades:

$$\frac{8\pi G}{3c^2} = \frac{9,96 \times 10^2}{(ms)^2 GeV/fm^3}; \quad (5.46)$$

neste caso, o intervalo de tempo $t - t_{P_{ns0}}$ é dado em milissegundos.

Um ponto importante que deve ser analisado é a existência das funções $a(kT)$ e $t(kT)$. Por exemplo, quando escrevemos

$$\frac{d\rho}{d(kT)} \frac{d(kT)}{da} = -\frac{3}{a}(p + \rho) \neq 0 \quad (5.47)$$

estamos supondo que existe a função inversa $kT(a)$ durante todo o intervalo em que $\frac{3}{a}(p + \rho) \neq 0$. Veja que isto é verdade, se e somente se, $\frac{d\rho}{d(kT)}$ é univocamente crescente ou decrescente. Caso contrário, a função $a(kT)$ possui máximos ou mínimos e, consequentemente, a sua inversa não existe.

Da figura 5.7 vemos que $\frac{d\rho}{d(kT)} > 0$, e portanto as funções $a(kT)$, $t(kT)$ e suas inversas estão bem definidas durante todo o intervalo de interesse.

As equações (5.44) e (5.45) descrevem a evolução do universo pré-nucleossíntese para curvatura nula ($k = 0$). Neste caso, uma análise um pouco mais cuidadosa destas duas equações revela que suas integrais divergem quando $p = -\rho$, e segundo as EoS completas, isto ocorre quando a temperatura $kT_c \simeq 0,2767 GeV$ (temperatura crítica). Devido a esta divergência, o cálculo numérico de $a(kT)$ e $t(kT)$ próximo de kT_c é relativamente complicado. Por isso optamos por fazer uma parametrização linear das funções pressão (5.3) e densidade de energia (5.4) no intervalo $0,276 \leq kT \leq 0,277$, e a partir destas parametrizações resolver analiticamente as equações $a(kT)$ e $t(kT)$ *. O erro máximo introduzido em p e ρ devido estas parametrizações é de aproximadamente 7/50000. Estas parametrizações serão necessárias para estudar o regime inflacionário descrito na próxima seção.

O gráfico do fator de escala em função de kT é mostrado na figura 5.14.

*Foi feito também uma parametrização polinomial quadrática e todos os resultados se mantiveram.

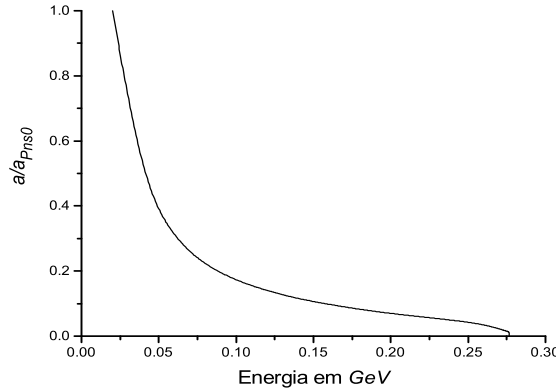


Figura 5.14: Gráfico do fator de escala $a(kT)$ em unidades de a_{Pns0} para um universo com curvatura nula ($k = 0$). No intervalo de $0,02 \leq kT \leq 0,276$ realizamos uma integração numérica com o auxílio do software Mathematica 5.0 utilizando as equações (5.4) para a densidade de energia e (5.3) para a pressão. Entre $0,276 \leq kT \leq kT_c$ utilizamos uma parametrização linear de p e ρ , e integramos $a(kT)$ analiticamente.

Segundo a figura 5.14, o fator de escala sempre decresce conforme kT aumenta. Já a taxa de decréscimo $\frac{da}{d(kT)}$ varia bastante, e conforme kT se aproxima de kT_c , $\frac{da}{d(kT)} \rightarrow -\infty$. Ou seja, o fator de escala tende a zero quando $kT \rightarrow kT_c$.

Para determinarmos o intervalo de tempo necessário para que $a(kT_c) \rightarrow 0$, basta observar (5.45). Como $\rho(kT)$ e $\frac{d\rho}{d(kT)}$ são maiores que zero então, quando $kT \rightarrow kT_c$, o intervalo de tempo $(t_{Pns0} - t) \rightarrow \infty$. Ou seja, no nosso modelo com $k = 0$ não tem sentido falar em singularidade inicial, pois o intervalo de tempo necessário para chegar em t_{Pns0} é infinito. Note, porém, que o universo apresenta uma temperatura máxima dada por kT_c . Discutiremos um pouco mais estes fenômenos na seção 5.4.3.

5.4.2 O regime inflacionário

Uma das consequências mais interessantes da inclusão de processos de interação hadrônica nas EoS cosmológicas é o surgimento de um período de expansão acelerada perfeitamente conectado com o período desacelerado tipo era da radiação, que ocorre durante a nucleossíntese primordial (figura 5.10). Em termos da parametrização (5.35), a função $\omega(kT)$ evolui continuamente de $1/3$ (era da radiação – $kT \leq 0,02$ GeV) e tende a -1 ($kT \rightarrow kT_c$).

A equação (1.67) determina que a inflação (período de expansão acelerada durante o universo primordial) ocorre quando $\omega(kT) < -1/3$. Como restrições físicas

impõem $\omega(kT) > -1$, definimos a era inflacionária do nosso modelo dentro do seguinte intervalo [†]:

$$-1 < \omega(kT) < -\frac{1}{3}. \quad (5.48)$$

Com o auxílio da figura 5.10, vemos que a inflação está na faixa

$$0,2356 \text{ GeV} \simeq kT_{\text{acel}} < kT < kT_c \simeq 0,2767 \text{ GeV}. \quad (5.49)$$

Segundo a última seção do capítulo 1, a existência de um período de aceleração primordial é bastante importante, pois resolve uma série de problemas cosmológicos (planura, horizonte, origem de inomogenidades, etc.), sem termos de impor arbitrariamente certas condições iniciais. Porém, para que esta aceleração resolva os vários problemas cosmológicos, ela deve possuir certas características específicas.

Estudaremos a seguir os problemas de planura e horizonte, e mostraremos que o regime inflacionário gerado pela nosso modelo é capaz de resolvê-los.

O problema de planura caracterizado por (1.56) mostra que a densidade de energia no final do período Pns ρ_{Pns0} deve ser próxima da densidade crítica $\bar{\rho}_c$ com aproximadamente 21 casas decimais de precisão (1.59). Para ver como o período inflacionário é capaz de resolver este problema, basta utilizarmos (1.56) com a condição de contorno dado por (1.59).

$$|\bar{\Omega}_T - 1| = \frac{1,5 \times 10^{-21} a_{Pns0}^2 H_{Pns0}^2}{a^2(kT) H^2(kT)} = \frac{1,5 \times 10^{-21} a_{Pns0}^2 \rho_{Pns0}}{a^2(kT) \rho(kT)}, \quad (5.50)$$

onde $\bar{\Omega}_T$ foi definido no começo da seção 1.4.1.

Desta última equação e da figura 5.14, é fácil de perceber que existe um valor de kT onde $\bar{\Omega}_T$ retorna para o valor observacional 1,003 atual, resolvendo assim o problema de planura. Para determinar o quão próximo kT deve estar da temperatura crítica kT_c utilizamos as equações (5.4) para $\rho(kT)$ e (5.44) para $a(kT)$. O valor encontrado é de

$$|kT_{\text{planura}} - kT_c| \simeq 10^{-35}. \quad (5.51)$$

Neste caso, $a(kT)$ aumentou 12 ordens de grandeza desde kT_{planura} até o final do período pré-nucleossíntese. Porém, segundo (5.45), esta grande variação no fator de escala ocorre em um intervalo de tempo de 2,25 ms, sendo que o intervalo de expansão acelerada é de apenas 0,26 ms. Este resultado mostra que a alta taxa inflacionária, redução de aproximadamente 10 ordens de grandeza em 0,26 ms, planifica rapidamente o universo.

[†]Por restrições físicas entendemos as patologias existentes nos modelos cosmológicos tipo phantom.

O problema de horizonte nos diz que, desde o $t_{P_{ns0}}$ até os dias de hoje, o raio de Hubble $R = (aH)^{-1}$ aumentou por um fator de $1,4 \times 10^9$, eq. (1.62), ou seja, a distância comóvel máxima entre duas regiões casualmente conectadas aumentou em 9 ordens de grandeza desde o final do período Pns. Então, para ver como este problema é resolvido, devemos mostrar que desde próximo de kT_c até $kT_{P_{ns0}}$ o raio de Hubble diminui 9 ordens de grandeza, ou seja,

$$\frac{R_{P_{ns0}}}{R} = \frac{a(kT) H(kT)}{a_{P_{ns0}} H_{P_{ns0}}} = \frac{a(kT) \sqrt{\rho(kT)}}{a_{P_{ns0}} \sqrt{\rho_{P_{ns0}}}}. \quad (5.52)$$

Analogamente ao caso da planura, pode-se determinar o quão próximo kT deve estar da temperatura crítica kT_c , utilizando as equações (5.4) para $\rho(kT)$ e (5.44) para $a(kT)$. Novamente, o valor encontrado é de

$$|kT_{horizonte} - kT_c| \simeq 10^{-35}. \quad (5.53)$$

Uma análise mais cuidadosa do raio de Hubble mostra que, desde o começo da desaceleração ($kT_{acel} \simeq 0,2356 \text{ GeV}$) até os dias de hoje, R aumentou $1,75 \times 10^{10}$. Porém, de $kT_{horizonte}$ até kT_{acel} o raio de Hubble diminuiu $1,8 \times 10^{10}$. Portanto, anterior a $kT_{horizonte}$ todo o universo observável atual estava em contato causal, permitindo assim a termalização do fluido cósmico.

Note que até $kT_{planura}$ e $kT_{horizonte}$ o termo de curvatura presente em (1.1) é completamente desprezível. Portanto, a análise realizada nesta subseção vale para qualquer valor de curvatura ($k = -1, 0$ ou 1).

Apresentaremos a seguir um resumo em forma de tabela das principais características analisadas para o universo Pns durante o regime inflacionário. Utilizando a convenção $kT_{P_{ns0}} = 0,020 \text{ GeV}$ e $a_{P_{ns0}} = 1$ temos:

	$\Delta t(ms)$	$\frac{a}{a_{PN}}$	$\frac{R}{R_{P_{ns0}}}$	$ \bar{\Omega}_T - 1 $	$ T - T_c (GeV)$
$kT_{P_{ns0}}$	0	1	1	$1,5 \times 10^{-21}$	$\simeq 0,2567$
kT_{acel}	1,99	$5 \cdot 10^{-2}$	8×10^{-2}	$9,55 \times 10^{-24}$	$\simeq 0,0411$
$kT_{horizonte}$	2,25	$1,9 \times 10^{-12}$	$1,44 \times 10^9$	1,003	10^{-35}
$kT_{planura}$	2,25	$1,9 \times 10^{-12}$	$1,44 \times 10^9$	1,003	10^{-35}

Tabela 5.1: Resumo das principais características do universo Pns referente ao regime inflacionário. Aqui $kT_{P_{ns0}}$ é a temperatura do final do período Pns, kT_{acel} é a temperatura de expansão com aceleração nula, $kT_{horizonte}$ é a temperatura que resolve o problema de horizonte e $kT_{planura}$ é a temperatura que resolve o problema de planura. O intervalo $\Delta t = t_{P_{ns0}} - t$ e $R = (aH)^{-1}$.

Reavaliações sobre o equilíbrio termodinâmico e a assimetria matéria-antimatéria

No capítulo 1 mostrou-se que, para um universo tipo era da radiação, pode-se assumir equilíbrio termodinâmico e químico, e desprezar a assimetria matéria-antimatéria. Será que estas afirmações continuam válidas quando o universo transita de uma era da radiação para um regime de expansão acelerada, situação em que $a(kT)$ decresce cada vez mais rápido?

(A) Equilíbrio termodinâmico e químico: Na seção 1.3 argumentamos que a condição necessária e suficiente para que uma dada componente esteja em equilíbrio com o resto do fluido cósmico é

$$\Gamma_i(kT) \gg H(kT), \quad (5.54)$$

onde $\Gamma_i = n_i \sigma |\vec{v}|$ representa as taxas de reação desta componente com as outras partículas e $H(kT)$ representa a taxa de expansão do universo (função de Hubble). Nessa mesma seção utilizamos seis conjuntos de reações para verificar que, em uma era da radiação, todo o fluido cósmico encontra-se de fato em equilíbrio.

A seguir, repetiremos estes cálculos para os mesmo cinco primeiros conjuntos de reações,[‡] lembrando que no regime inflacionário $H(kT) \sim \sqrt{\rho(kT)}$ é dado por (5.4), e que as densidades numéricas dos hádrons e dos muons são dadas por (5.8), (5.9), (5.10) e (5.34). Para maiores detalhes ver seção 1.3.

(i) Interações eletromagnéticas entre léptons eletrônicos ultrarelativísticos:

A seção de choque com alto momento transferido para o espalhamento $e^\pm + e^\pm \leftrightarrow e^\pm + e^\pm$ é $\sigma_{e^\pm e^\pm} \simeq \frac{\alpha^2}{(kT)^2}$, onde $\alpha = 1/137$ é a constante de estrutura fina. Portanto, a taxa de reação deste espalhamento é:

$$\Gamma_{e^\pm e^\pm} \simeq n_{e^\pm} \sigma_{e^\pm e^\pm} = \frac{3}{2} \frac{1,202}{\pi^2} \alpha^2 (kT), \quad (5.55)$$

onde $n_{e^\pm}$ é dado por (1.9).

Construindo a razão entre $\Gamma_{e^\pm e^\pm}$ e a função de Hubble obtemos a figura 5.15.

[‡]Por coerência ao capítulo 1, voltaremos a utilizar as unidades de $c = \hbar = 1$. Neste caso $1 fm = 5,067 GeV^{-1}$ e $m_{Pl} \equiv G^{-1/2} = 1,221 \times 10^{19} GeV$.

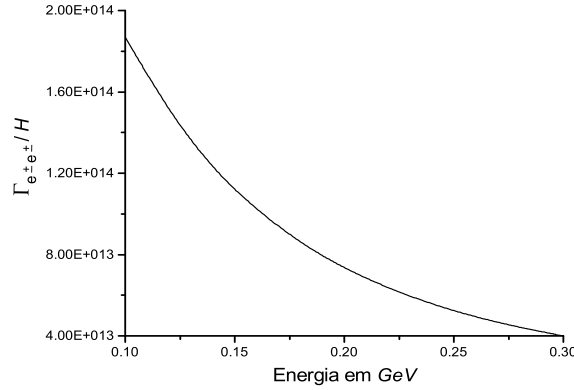


Figura 5.15: Evolução de $\Gamma_{e^±e^±}/H$ em função da energia kT . Veja que para $0,1 \leq kT \leq 0,3$, a condição (5.54) é completamente satisfeita.

(ii) Interação eletromagnética entre hádrons carregados e fótons de baixas energias: O espectro de corpo negro garante que existe uma porcentagem de fótons com energias muito menores do que a massa m_j ($j = \pi^\pm, K^\pm, p$ ou $\bar{p}$)[§]. Neste caso, o processo de espalhamento dos hádrons com estes fótons ($\gamma + j \leftrightarrow \gamma + j$) pode ser tratado através da teoria clássica de partículas carregadas espalhadas por ondas eletromagnéticas. Portanto, a seção de choque deste processo é a conhecida seção de choque de Thomson $\sigma_T = \frac{8\pi\alpha^2}{3m_j^2}$.

As taxas de reação destes espalhamentos são:

$$\Gamma_{j\gamma} \simeq n_j \sigma_T = n_j \times \frac{8\pi\alpha^2}{3m_j^2}, \quad (5.56)$$

onde n_j é dada em (5.8), (5.9) ou (5.10).

Graficando a razão $\frac{\Gamma_{j\gamma}}{H}$ obtemos a figura 5.16.

[§]Quanto menor a massa e maior kT , pior é esta porcentagem. Por exemplo, a porcentagem de fótons de energia $h\nu$ que satisfaz a condição $h\nu \leq \frac{m_j c^2}{10}$ com $kT = 0,2 \text{ GeV}$ é 0,1 % para píons, 1,1 % para káons e 5 % para nucleons.

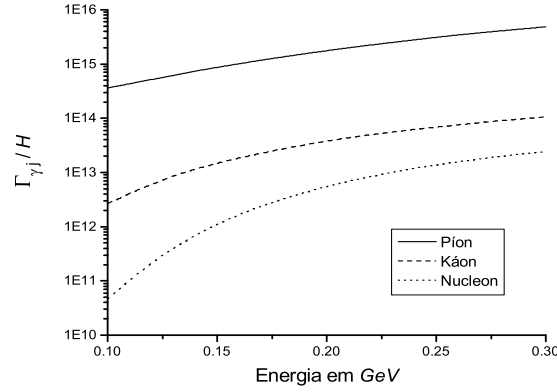


Figura 5.16: Evolução de $\Gamma_{j\gamma}/H$ em função da energia kT . Veja que para $0,1 \leq kT \leq 0,3$, a condição (5.54) é completamente satisfeita nos três casos.

(iii) Espalhamento Compton: A taxa de reação para o espalhamento Compton ($e^\pm + \gamma \leftrightarrow e^\pm + \gamma$) a altas energias,

$$\Gamma_{\gamma e^\pm} \simeq \frac{3,606}{\pi} \frac{\alpha^2 (kT)^3}{m_e^2 (1 + 0,0555 \frac{\pi^4 (kT)}{m_e})} \ln \left[1 + 0,0555 \frac{\pi^4 (kT)}{m_e} \right], \quad (5.57)$$

foi calculada em (1.45).

Comparando esta taxa com a função de Hubble obtemos a figura 5.17.

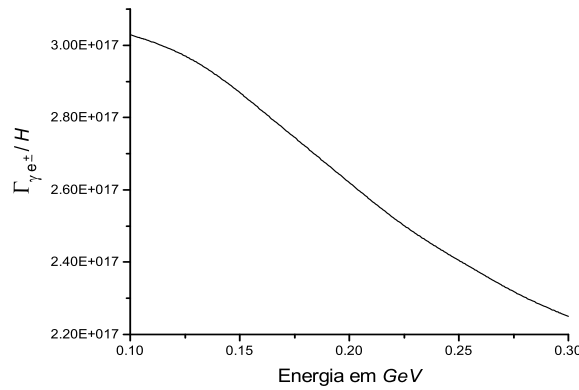


Figura 5.17: Evolução de $\Gamma_{\gamma e^\pm}/H$ em função da energia kT . Veja que para $0,1 \leq kT \leq 0,3$, a condição (5.54) é completamente satisfeita.

(iv) Interações fracas entre léptons eletrônicos: A taxa de reação das interações fracas referente aos processos envolvendo ν_e , $\bar{\nu}_e$, e^+ e e^- ,

$$\Gamma_{e\nu_e} \simeq \frac{3}{2} \frac{1,202}{\pi^2} G_F^2 (kT)^5, \quad (5.58)$$

foi determinada em (1.48), com $G_F \simeq 1,2 \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$ sendo a constante de Fermi.

Construindo a razão entre $\Gamma_{e\nu_e}$ e H obtemos a figura 5.18.

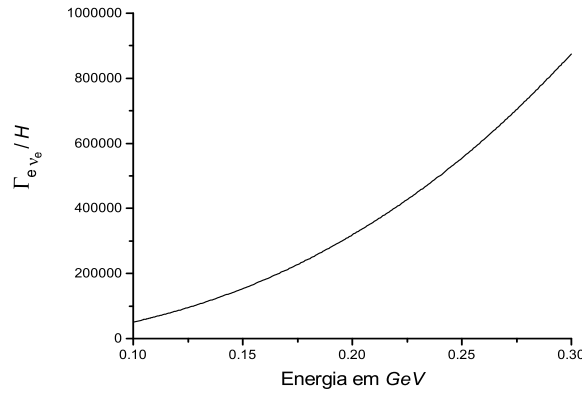


Figura 5.18: Evolução de $\Gamma_{e\nu_e}/H$ em função da energia kT . Veja que para $0,1 \leq kT \leq 0,3$, a condição (5.54) é satisfeita.

(v) Interações fracas entre léptons muônicos e eletrônicos: A seção de choque das interações fracas entre os léptons eletrônicos e muônicos, e.g. $\nu_e + \mu^- \leftrightarrow \nu_\mu + e^-$, é dada por $\sigma_{e\mu} \simeq G_F^2 (kT)^2$. Portanto, a taxa de reação deste espalhamento é:

$$\Gamma_{e\mu} \simeq n_\mu \sigma_{e\mu} \simeq n_\mu G_F^2 (kT)^2, \quad (5.59)$$

com n_μ determinado em (5.34).

Procedendo da forma padrão, construímos o gráfico da razão $\frac{\Gamma_{e\mu}}{H}$. Veja a figura 5.19.

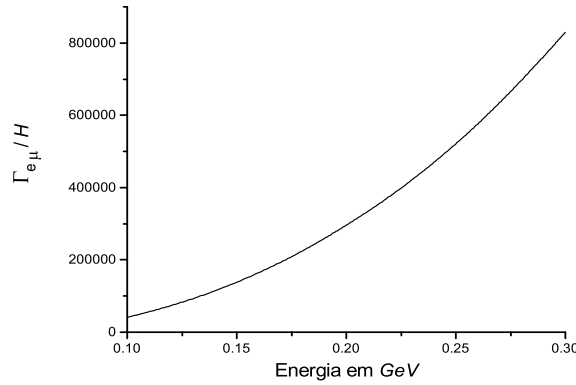


Figura 5.19: Evolução de $\Gamma_{e\mu}/H$ em função da energia kT . Veja que para $0,1 \leq kT \leq 0,3$, a condição (5.54) é satisfeita.

As cinco figuras anteriores mostram que, mesmo durante o regime de expansão acelerada, o fluido cósmico encontra-se em equilíbrio termodinâmico e químico. O que ocorre é que apesar do fator de escala diminuir drasticamente o mesmo não ocorre com a função de Hubble, e consequentemente a condição (5.54), válida durante a era da radiação, permanece válida na era inflacionária.

Outro ponto em favor da existência do equilíbrio é que, mesmo próximo de $kT_{horizonte}$, o tamanho do universo é muitas ordens de grandeza maior do que o “tamanho” das partículas do fluido cósmico. De fato, dos dias de hoje até kT_{Pns0} o universo diminuiu[¶] por um fator 3×10^{-9} , e de kT_{Pns0} até $kT_{horizonte}$ a redução foi de $1,5 \times 10^{-13}$ (tabela 5.1). Por outro lado, o universo observável atual tem um tamanho de $3000 \text{ Mpc} \simeq 9 \times 10^{24} \text{ m}$. Ou seja, em $kT_{horizonte}$ o fator de escala é da ordem 10^2 m . Já o “tamanho” de uma partícula pode ser estimado através do seu comprimento de onda térmico^{||} $\Lambda(kT)$. Para as várias partículas do fluido cósmico, $\Lambda_i(kT_{horizonte})$ é da ordem de um ou dois fm .

(B) Assimetria matéria-antimatéria: Na seção 1.2 mostramos que durante o período Pns tipo era da radiação, a pequena quantidade extra de matéria em relação a antimatéria é completamente desprezível na determinação do fator de escala. Porém, a situação muda de figura quando passamos para o regime inflacionário. O que ocorre é que a densidade numérica de partículas advindas da produção de

[¶]Estamos assumindo que dos dias de hoje ($T_0 = 2,75 \text{ K}$) até $kT = 1 \text{ eV}$, o universo é dominado por matéria não relativística, e a partir deste ponto até kT_{Pns0} o universo é dominado pela radiação.

^{||}O comprimento de onda térmico representa grosseiramente o pacote de onda da partícula.

pares n_i depende somente de kT , e a densidade numérica da parte extra de matéria $\tilde{n}_i$ depende em princípio de a^{-3} . Ou seja, no limite em que $p \rightarrow -\rho$, n_i permanece aproximadamente constante dado por kT_c , e $\tilde{n}_i$ diverge pois $a(kT_c) \rightarrow 0$.

Este tipo de dificuldade também existe nos regimes inflacionários convencionais realizados por campos escalares e ele está intimamente ligado ao problema da *bariogênese*. Nos modelos de campos escalares, é comum supor que durante a época inflacionária esta assimetria não existia. Para tanto, utiliza-se uma série de extrapolações do modelo padrão de partículas que normalmente envolvem violação do número bariônico, violação CP e processos fora do equilíbrio [9]. Recentemente foram propostos outros modelos que conseguem resolver este problema se valendo apenas de violação CP^{**} . Um interessante resumo de dez anos atrás sobre o assunto pode ser encontrado em [66].

Poderíamos pensar também que a assimetria de matéria-antimatéria não existe de princípio, e portanto o nosso universo seria constituído de “ilhas” separadas de matéria e antimatéria em igual quantidade. Porém, esta idéia foi excluída [67] devido a restrições nos dados observacionais de radiação cósmica de fundo (microondas e raios gama).

A discussão sobre a possibilidade de gerar um regime inflacionário totalmente simétrico para o nosso modelo é bastante complicada e não será abordada nesta tese. Contudo, gostaríamos de comentar algumas mudanças que ocorreriam caso fosse incluído o excesso de matéria nas equações de estado. As funções pressão e densidade de energia seriam dependentes do fator de escala, ou seja $p(kT, a)$ e $\rho(kT, a)$. Neste caso, (5.44) seria uma equação diferencial não linear e a análise sobre o regime acelerado não poderia ser feito através da forma paramétrica (5.35). Provavelmente não existiria uma temperatura crítica, porém, devido as características das interações, fica difícil de saber se teríamos um regime inflacionário capaz de resolver os problemas de planura e horizonte sem determinar de fato o fator de escala.

5.4.3 Origem e evolução do universo para $k = 0$

O estudo do período Pns feito nesta tese parte do conhecimento atual sobre o universo, e através deste, “evoluímos” as equações de Friedmann no sentido contrário do tempo. Esta abordagem é bastante interessante pois, além de estar mais próxima aos dados, evita a delicada discussão sobre a origem do universo (se é que houve uma).

Por outro lado, se quisermos especular sobre a origem do universo no contexto

**De um modo geral, estes modelos supõem que os processos de violação CP eram mais eficientes durante um determinado período da era inflacionária.

do modelo proposto, a densidade de energia e a pressão iniciais (ρ_{ini} e p_{ini}) devem respeitar as condições:

$$\rho_{ini} < \rho(kT_c) \quad \text{e} \quad p_{ini} > p(kT_c). \quad (5.60)$$

Vamos admitir então que o universo (espaço-tempo mais fluido cósmico) surge respeitando (5.60), e que, devido as altas taxas de interação, este fluido inicial rapidamente atinge o estado de equilíbrio termodinâmico. Sendo assim, ele é descrito pelas equações (5.3) e (5.4). A relação entre o fator de escala a e a temperatura kT depende de (5.44), e de uma condição de contorno normalmente determinada pelos valores atuais $a_0(kT_{\gamma 0})$.

Usualmente imagina-se que a origem do universo esteja associada a algum tipo de fenômeno quântico, então é razoável supor que o tamanho do fator de escala esteja na escala do mundo quântico ($a \leq 10^{-9} m$). Por outro lado, vimos anteriormente que, quando $kT \simeq kT_{horizonte}$, o fator de escala é da ordem $10^2 m$. Portanto, espera-se que o surgimento do universo seja anterior ao tempo $t_{horizonte}$.

Feito estas considerações, podemos especular sobre as várias etapas da evolução do universo durante o período Pns:

1. Surgimento do universo no tempo t_{ini} . O fluido cósmico rapidamente entra em equilíbrio com uma temperatura kT_{ini} , onde $kT_{horizonte} < kT_{ini} < kT_c$.
2. O universo começa a se expandir aceleradamente com uma equação paramétrica $\omega(kT) \simeq -1$, eq. (5.35). Neste contexto, *a expansão do universo é consequência natural das equações de estado*.
3. Durante o período inflacionário onde $\omega(kT) \simeq -1$ aparecem as pequenas inomogeneidades que estarão ligadas futuramente com a formação de estrutura. Estas inomogeneidades surgem provavelmente devido a flutuações estatísticas^{††}.
4. O universo sai do estágio inflacionário tipo $\omega(kT) \simeq -1$ e entra em um regime de expansão acelerada mais moderado. Em seguida, ele transita continuamente para um regime desacelerado até atingir uma expansão tipo era radiação, quando kT está próximo de kT_{Pns0} . É durante este período que, em algum momento, deve ser gerada a assimetria entre a matéria e a antimatéria (possivelmente devido as violações de simetria da interação fraca).
5. A ligação entre o final do período Pns e a nucleossíntese é feita de modo contínuo e suave.

^{††}Este tipo de questão não foi abordada nesta tese.

Esses cinco passos apresentam uma idéia geral sobre a evolução do universo primordial. Contudo, nem todos eles foram analisados nesta tese. Talvez alguns dos fenômenos desejáveis não sejam possíveis no contexto do nosso modelo.

De fato, o principal objetivo desta seção não é determinar a origem e a evolução do universo, mas sim mostrar que a sua expansão é uma consequência direta do modelo. Se o universo surge com uma equação de estado tipo era da radiação, a sua tendência natural é colapsar, pois neste caso a gravitação é atrativa. Por outro lado, no modelo proposto a gravitação é inicialmente repulsiva ($p \simeq -\rho$), e é justamente esta característica que desencadeia o processo de expansão.

Capítulo 6

Considerações Finais

O principal objetivo desta tese foi explorar o papel das interações nucleares durante o universo primordial. Para tanto, importamos para a cosmologia todo um formalismo da mecânica estatística de equilíbrio. A partir deste formalismo, desenvolvemos métodos de construção de equações de estado capazes de representar as várias partículas do fluido cósmico e suas respectivas interações. Por outro lado, através de considerações sobre as quatro interações fundamentais, argumentamos que os processos de interação relevantes para o período pré-nucleossíntese são aqueles envolvendo apenas a força forte. Então, utilizando uma abordagem fenomenológica da interação hadrônica, construímos equações de estado cosmológicas constituídas de fótons, léptons e hádrons interagentes, e aplicamos estas equações ao modelo padrão da cosmologia.

No nosso desenvolvimento, estudamos os vários efeitos das EoS cosmológicas em um intervalo de energia de $0,02 \text{ GeV} < kT < 0,3 \text{ GeV}$. Não podemos afirmar de forma contundente que as EoS propostas sejam válidas durante todo este intervalo, porém se assumirmos a sua validade, estas equações produzem uma série de resultados interessantes para o universo primordial. Segundo a análise realizada, o nosso modelo é capaz de gerar um regime de expansão acelerada (inflação) conectado suavemente com a era da radiação existente na nucleossíntese primordial. Este período inflacionário é suficientemente intenso para resolver os problemas de planura e horizonte, e fornece também uma explicação natural de porque o universo está se expandindo. Outra característica importante do nosso modelo é a existência de uma temperatura máxima kT_c para o fluido cósmico. Contudo, devemos ressaltar que todos estes resultados foram obtidos para um universo simétrico de matéria e antimatéria.

As conseqüências apontadas no parágrafo anterior são mais gerais do que o modelo de interação do capítulo 5. De fato, para que elas sejam sempre válidas, basta termos em FRW um parâmetro contínuo λ (relacionado ou não com interações) que

descreva a evolução de uma equação de estado conhecida tipo $p(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{3}$, para uma equação de estado exótica tipo $p(\lambda) = -\rho(\lambda)$, e que $\frac{d\rho}{d\lambda}$ seja maior que zero durante todo o tempo.

A validade das EoS propostas foram discutidas sob três aspectos distintos: estabilidade, desconfinamento e convergência. Destes três critérios, talvez o mais restritivo para o nosso modelo seja o desconfinamento pois, diferentemente dos outros dois, não demos nenhum bom argumento em favor da preservação dos hádrons durante o intervalo de $kT > 0,175 \text{ GeV}$. Por outro lado, mesmo que o desconfinamento ocorra nessas escalas de energia, os dados experimentais do RHIC [18] indicam que um fluido constituído de quarks e glúons estará fortemente correlacionado. Portanto, espera-se que o papel da interação forte continue sendo cosmológicamente relevante. Nesse sentido, os resultados obtidos com nosso modelo devem ser qualitativamente preservados.

Os outros dois critérios (estabilidade e convergência) estão relacionados diretamente com a validade do formalismo estatístico desenvolvido.

Em sistemas termodinâmicos, o critério de estabilidade é usualmente utilizado para análise de transição de fase. Porém, na cosmologia, a ausência de fronteiras e o papel da pressão como fonte de gravitação, torna esta análise muito mais complexa. Devemos inclusive nos perguntar até que ponto o conceito termodinâmico de expansão quasi-estática para o fluido cósmico é a única condição necessária para que os procedimentos usuais da mecânica estatística possam ser aplicados.

Já o critério de convergência está relacionado com o aspecto formal de validade da série e com o procedimento perturbativo da mesma. Como foi apontado na seção 5.3.3, este tipo de análise é extremamente complicada para sistemas termodinâmicos bem simples, e conseqüentemente completamente inviável para o universo Pns.

De uma perspectiva mais ampla, podemos considerar esta tese como uma tentativa de estabelecer um procedimento formal capaz de incluir termos de interação como fonte explícita de gravitação no modelo padrão. O papel das interações na cosmologia abre novas portas para o estudo da evolução do universo, e mesmo que as equações de estado do nosso modelo não forem estritamente válidas durante todo período Pns, podemos utilizar este formalismo para modelar outras épocas cosmológicas. Talvez a inclusão das interações como fonte de gravitação seja um mecanismo mais apropriado do que campos escalares para gerar o regime de expansão acelerada durante o universo primordial.

Apêndice A

Sistema Estatístico Relativístico Ideal

Suponhamos um fluido ideal de uma componente com N partículas, dado pela Hamiltoniana não degenerada

$$\hat{H}_N^{(0)} |\Psi_a^N\rangle = E_a^N |\Psi_a^N\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Neste caso, a função de partição canônica devidamente simetrizada é dada por

$$Q_N^{(0)}(V, T) = \sum_a \langle \Psi_a^N | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}_N^{(0)}} | \Psi_a^N \rangle = \sum_a \langle \Psi_a^N | \hat{A} | \Psi_a^N \rangle e^{-\beta E_a^N}, \quad (\text{A.2})$$

onde $\hat{A}$ é o operador de simetrização definido em (2.39).

Como estamos tratando de um sistema ideal, E_a^N pode ser decomposta em

$$E_a^N = \sum_j n_j \varepsilon_j, \quad (\text{A.3})$$

sendo n_j o número de partículas que estão no estado de energia ε_j (energia de uma partícula). Nota-se que n_j deve satisfazer a seguinte condição:

$$\sum_j n_j = N. \quad (\text{A.4})$$

Utilizando (A.3), vemos que a soma em a pode ser repassada para uma soma em todos os conjuntos n_j . Neste caso, (A.2) pode ser reescrita como:

$$Q_N^{(0)}(V, T) = \sum_{\{n_j\}}' g(\{n_j\}, \hat{A}) e^{-\beta \sum_j n_j \varepsilon_j}, \quad (\text{A.5})$$

onde $\sum'$ respeita a condição (A.4) e $g(\{n_j\}, \hat{A})$ é um fator estatístico que depende do conjunto $\{n_\varepsilon\}$ e do operador simetrização $\hat{A}$.

A seguir, vamos separar a análise em dois casos distintos: estatística clássica dada pela distribuição Maxwell-Boltzmann e estatística quântica dada pelas distribuições de Bose-Einstein e Fermi-Dirac.

A.1 Estatística clássica

Nesta estatística, as partículas são tratadas como *distintas* e, portanto, não há necessidade do operador de simetrização, ou seja $\hat{A} = 1$ e $\langle \Psi_a^N | \Psi_a^N \rangle = 1$.

Como as partículas são distintas, o número total de permutações que distribuem N partículas em $\{n_j\}$ conjuntos é dado por

$$\frac{N!}{n_1!n_2!\dots}$$

Agora, incluindo o fator de correção de Gibbs* $1/N!$, obtemos o seguinte fator estatístico para uma distribuição tipo Maxwell-Boltzmann:

$$g_{M.B.} = \prod_j \frac{1}{n_j!}. \quad (\text{A.6})$$

Substituindo (A.6) em (A.5) temos:

$$Q_N^{(0)}(V, T) = \sum'_{\{n_j\}} \prod_j \frac{1}{n_j!} e^{-\beta \sum_j n_j \varepsilon_j} = \frac{1}{N!} \sum'_{\{n_j\}} \left[\frac{N!}{\prod_j n_j!} \prod_j (e^{-\beta \varepsilon_j})^{n_j} \right].$$

Utilizando o teorema multinomial podemos realizar a soma $\sum'$, como segue:

$$Q_N^{(0)}(V, T) = \frac{1}{N!} \left[\sum_j e^{-\beta \varepsilon_j} \right]^N. \quad (\text{A.7})$$

Adendo: Do binômio de Newton pode-se determinar a expressão multinomial, veja:

*Normalmente, o fator de Gibbs é interpretado como um fenômeno da *indistingüibilidade* das partículas, porém isto só é verdadeiro para um *sistema clássico*. A diferença é que em um sistema quântico as partículas não devem ser “rotuladas”, ou seja só interessa quantas partículas estão em um determinado estado, mas não quais são estas partículas.

$$\begin{aligned}
 (x_1 + x_2)^N &= \sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} x_1^n x_2^{N-n} \Rightarrow \\
 (x_1 + x_2)^N &= \sum_{n_1=0}^N \sum_{n_2=0}^N \frac{N!}{n_1!n_2!} x_1^{n_1} x_2^{n_2} \delta_{n_2, N-n_1} \Rightarrow \\
 (x_1 + x_2)^N &= \sum_{\{n_1, n_2\}}' \frac{N!}{n_1!n_2!} x_1^{n_1} x_2^{n_2}.
 \end{aligned}$$

onde $\sum_{\{n_1, n_2\}}'$ deve respeitar a condição $n_1 + n_2 = N$. Portanto, generalizando a última expressão, obtemos a conhecida expansão multinomial:

$$(x_1 + x_2 + \dots + x_j + \dots)^N = \sum_{\{n_j\}}' \left[\prod_j \frac{N!}{n_j!} (x_j)^{n_j} \right] \quad \text{com} \quad \sum_j n_j = N. \quad (\text{A.8})$$

Partindo de (A.7) e levando em conta a degenerescência de possíveis graus de liberdade internos, podemos escrever a função de partição macrocanônica Θ_0 como:

$$\Theta_0(z, V, T) \equiv \left[\sum_{N=0}^{\infty} Q_N^{(0)}(V, T) z^N \right]^g = \left[\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\sum_j e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)} \right]^N \right]^g, \quad (\text{A.9})$$

onde g conta a degenerescência do sistema (projeção de spin, isospin, etc.) e $\mu = \mu_{NR} + m$.

Logo, o potencial macrocanônico Ω_0 é dado por:

$$\begin{aligned}
 \Omega_0(z, T) &\equiv \frac{\ln \Theta_0(z, V, T)}{V} = \frac{g}{V} \ln \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\sum_j e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)} \right]^N \Rightarrow \\
 \Omega_0(z, T) &= \frac{g}{V} \ln \left[\exp \left(\sum_j e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)} \right) \right] = \frac{g}{V} \sum_j e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}. \quad (\text{A.10})
 \end{aligned}$$

O próximo passo é passarmos do limite discreto para o contínuo através da prescrição $\sum_{\epsilon} \rightarrow (2\pi)^{-3} \iint d^3x d^3p$, segue:

$$\Omega_0(z, T) = \frac{g}{(2\pi)^3 V} \int \int e^{-\beta[\varepsilon(\vec{p}) - \mu]} d^3x d^3p = g \frac{z}{(2\pi)^3} \int e^{-\beta\varepsilon(\vec{p})} d^3p. \quad (\text{A.11})$$

Utilizando a relação de dispersão relativística

$$\varepsilon(\vec{p}) = \sqrt{p^2 + m^2}, \quad (\text{A.12})$$

reescrevemos Ω_0 da seguinte maneira:

$$\Omega_0(z, T) = g \frac{z}{\Lambda^3(\beta)}, \quad (\text{A.13})$$

onde Λ é o comprimento de onda térmico relativístico definido como:

$$\frac{1}{\Lambda^3(\beta)} \equiv \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 e^{-\beta\sqrt{p^2+m^2}} dp = \frac{4\pi m^2}{(2\pi)^3 \beta} K_2(\beta m), \quad (\text{A.14})$$

com K_2 sendo a função de Bessel modificada de segunda ordem. A integração acima é feita explicitamente no capítulo 3.

A pressão p , a densidade numérica n e a densidade de energia ρ são determinadas da forma usual:

$$p(z, T) \equiv \frac{\Omega_0}{\beta} = g \frac{z}{\beta \Lambda^3}, \quad (\text{A.15a})$$

$$n(z, T) \equiv z \frac{\partial}{\partial z} (\Omega_0)_{V,T} = g \frac{z}{\Lambda^3}, \quad (\text{A.15b})$$

$$\rho(z, T) \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} (\Omega_0)_{V,z} = -zg \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\Lambda^3} \right). \quad (\text{A.15c})$$

Através das três últimas equações, podemos escrever a pressão e a densidade de energia em termos da densidade numérica:

$$p(n, T) = nkT, \quad (\text{A.16a})$$

$$\rho(n, T) = -n\Lambda^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\Lambda^3} \right). \quad (\text{A.16b})$$

Diferentemente de $\rho(n, T)$, a equação de $p(n, T)$ é exatamente a mesma do caso não relativístico. Usando a forma explícita de Λ pode-se calcular a derivada em (A.16b):

$$\begin{aligned} \rho(n, T) &= -n\Lambda^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{4\pi m^2}{(2\pi)^3 \beta} K_2(\beta m) \right) \Rightarrow \\ \rho(n, T) &= nkT - n\Lambda^3 \frac{4\pi m^2}{(2\pi)^3 \beta} \frac{\partial}{\partial \beta} [K_2(\beta m)]. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Utilizando as fórmulas de recursão para as funções de Bessel modificadas [44],

$$\frac{dK_2(z)}{dz} = -K_1(z) - \frac{2}{z}K_2(z),$$

desenvolvemos (A.17) explicitamente:

$$\begin{aligned}\rho(n, T) &= nkT - n\Lambda^3 \frac{4\pi m^3}{(2\pi)^3 \beta} \frac{\partial}{\partial(\beta m)} [K_2(\beta m)] \Rightarrow \\ \rho(n, T) &= nkT + n\Lambda^3 \frac{4\pi m^3}{(2\pi)^3 \beta} \left[\frac{2}{\beta m} K_2(\beta m) + K_1(\beta m) \right] \Rightarrow \\ \rho(n, T) &= 3nkT + n\Lambda^3 \frac{4\pi m^3}{(2\pi)^3 \beta} K_1(\beta m) = 3nkT + nm \frac{K_1(\beta m)}{K_2(\beta m)}. \quad (\text{A.18})\end{aligned}$$

No limite não relativístico $m \gg kT \Rightarrow \beta m \gg 1$, podemos usar as formas assintóticas de $K_2(x)$ e $K_1(x)$ dadas por:

$$\begin{aligned}K_1(x) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left(1 + \frac{3}{8x} + \dots \right), \\ K_2(x) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left(1 + \frac{15}{8x} + \dots \right),\end{aligned}$$

sendo $x \gg 1$.

Neste caso (A.18) é aproximado por

$$\begin{aligned}\rho(n, T) &\simeq 3nkT + nm \frac{\left(1 + \frac{3}{8\beta m}\right)}{\left(1 + \frac{15}{8\beta m}\right)} \simeq 3nkT + nm \left(1 + \frac{3}{8\beta m}\right) \left(1 + \frac{15}{8\beta m}\right)^{-1} \Rightarrow \\ \rho(n, T) &\simeq 3nkT + nm \left(1 + \frac{3}{8\beta m} - \frac{15}{8\beta m}\right) = 3nkT + nm \left(1 - \frac{3}{2\beta m}\right) \Rightarrow \\ \rho(n, T) &\simeq nm + \frac{3nkT}{2} = n \left(m + \frac{3kT}{2}\right). \quad (\text{A.19})\end{aligned}$$

Ou seja, no limite não relativístico obtemos a massa de repouso m mais o termo usual da energia de partículas monoatômicas $\frac{3kT}{2}$.

A.2 Estatística quântica

No caso da estatística quântica, as partículas devem ser tratadas como completamente *indistintas*, e o único jeito de fazermos isso, respeitando a conservação de probabilidade

$$|P\Psi_a^N|^2 = |\Psi_a^N|^2 \quad (P \text{ é uma permutação qualquer}),$$

é simetrizando (estatística de Bose-Einstein) ou antissimetrizando (estatística de Fermi-Dirac) os estados Ψ_a^N . O operador $\hat{A}$, definido em (2.39), é justamente o operador que faz este papel.

Baseado na separação feita em (A.5) vemos que para cada energia ε_j existem n_j estados $|\phi_j\rangle$ de tal forma que

$$|\Psi_a^N\rangle = \sum_j n_j |\phi_j\rangle. \quad (\text{A.20})$$

Como o operador $\hat{A}$ simetriza ou antissimetriza estados idênticos, ele deve ser desmembrado como segue:

$$\hat{A} = \sum_j \frac{\hat{A}_j}{n_j!}, \quad (\text{A.21})$$

onde cada $\hat{A}_j$ só atua no sub-espço composto por estados $|\phi_j\rangle$.

Então, aplicando $\hat{A}$ ao estado de N partículas Ψ_a^N , temos:

$$|\tilde{\Psi}_a^N\rangle \equiv \hat{A} |\Psi_a^N\rangle = \sum_j \frac{\hat{A}_j}{n_j!} \sum_i n_i |\phi_i\rangle = \sum_j \sum_i n_i \frac{\hat{A}_j |\phi_i\rangle}{n_j!} \delta_{ij} \Rightarrow |\tilde{\Psi}_a^N\rangle = \sum_j n_j \frac{\hat{A}_j |\phi_j\rangle}{n_j!}. \quad (\text{A.22})$$

A simetrização (S) ou antisimetização (A) dos n_j estados $|\phi_j\rangle$ pode ser representada por:

$$|\tilde{\phi}_j\rangle_{S,A} = \begin{vmatrix} |\phi_j^1\rangle_1 & |\phi_j^2\rangle_1 & \dots & |\phi_j^{\bar{n}}\rangle_1 \\ |\phi_j^1\rangle_2 & |\phi_j^2\rangle_2 & \dots & |\phi_j^{\bar{n}}\rangle_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |\phi_j^{\bar{n}}\rangle_1 & |\phi_j^{\bar{n}}\rangle_2 & \dots & |\phi_j^{\bar{n}}\rangle_{\bar{n}} \end{vmatrix}, \quad (\text{A.23})$$

onde os números internos rotulam a degenerescência $\bar{n}$ do estado $|\phi_j\rangle$ e os externos indicam a posição, da esquerda para direita, de cada ket simples. Note também que para $|\tilde{\phi}_j\rangle_A$ temos de fato um determinante, mas para $|\tilde{\phi}_j\rangle_S$ a simbologia em (A.23) representa um permanente*.

Para o caso da estatística de Bose-Einstein (simétrico), não existe nenhuma restrição quanto aos estados $|\phi_j\rangle$. De fato, como

$$|\phi_j^1\rangle = |\phi_j^2\rangle = \dots = |\phi_j^{\bar{n}}\rangle, \quad (\text{A.24})$$

a quantidade

*Permanente é um determinante com todos os sinais positivos na expansão de Laplace.

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_a^N | \hat{A} | \Psi_a^N \rangle_{B.E.} &= \langle \Psi_a^N | \tilde{\Psi}_a^N \rangle_{B.E.} = \left(\langle \Psi_a^N | \sum_j n_j \frac{\hat{A}_j |\phi_j\rangle}{n_j!} \right)_{B.E.} \Rightarrow \\
 \langle \Psi_a^N | \hat{A} | \Psi_a^N \rangle_{B.E.} &= \left(\langle \Psi_a^N | \sum_j n_j |\phi_j\rangle \right)_{B.E.} = \langle \Psi_a^N | \Psi_a^N \rangle_{B.E.} = 1. \quad (A.25)
 \end{aligned}$$

Portanto, comparando (A.2) e (A.5), vemos que

$$g_{B.E.} = 1. \quad (A.26)$$

Note que, como as partículas são indistinguíveis, não existe fator extra de contagem (diferentemente do caso clássico).

Já para a estatística de Fermi-Dirac (antisimétrico), percebe-se por (A.23) que, se tivermos dois ou mais kets simples idênticos $|\phi_j\rangle$, então $|\tilde{\phi}_j\rangle_A = 0$. Então, devido a (A.24), vemos que $|\tilde{\phi}_j\rangle_A \neq 0$ implica em $n_j = 0$ ou 1 somente. Neste caso, uma construção análoga a (A.25) e (A.26) nos leva à seguinte equação:

$$g_{F.D.} = \begin{cases} 1 & \text{para } n_j = 0 \text{ ou } 1, \\ 0 & \text{para } n_j \geq 2. \end{cases} \quad (A.27)$$

Então, com o auxílio das equações (A.5), (A.26) e (A.27), a função de partição macrocanônica pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 \Theta_0(z, V, T) &= \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_j\}}' e^{-\beta \sum_j n_j \varepsilon_j} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_j\}}' z^{\sum_j n_j} \prod_j (e^{-\beta \varepsilon_j})^{n_j} \Rightarrow \\
 \Theta_0(z, V, T) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_j\}}' \prod_j (ze^{-\beta \varepsilon_j})^{n_j} = \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots} \prod_j (ze^{-\beta \varepsilon_j})^{n_j}. \quad (A.28)
 \end{aligned}$$

Obs: Veja que somar sobre todos os conjuntos $\{n_j\}$ sob a condição (A.4), e depois somar sobre todos os valores de N , é equivalente à somar sobre todos os valores possíveis de n_j independentemente.

A diferença entre os sistemas $B.E.$ e $F.D.$ é que no primeiro caso as somas de n_j são feitas para o intervalo $[0, \infty]$ e no segundo caso elas são feitas entre $[0, 1]$, como ditam as equações (A.26) e (A.27). Reescrevendo (A.28) segue:

$$\begin{aligned}
 \Theta_0(z, V, T) &= \left[\sum_{n_0} (ze^{-\beta \varepsilon_0})^{n_0} \right] \left[\sum_{n_1} (ze^{-\beta \varepsilon_1})^{n_1} \right] \left[\sum_{n_2} (ze^{-\beta \varepsilon_2})^{n_2} \right] \dots \Rightarrow \\
 \Theta_0(z, V, T) &= \prod_j \sum_{n_j} (ze^{-\beta \varepsilon_j})^{n_j}. \quad (A.29)
 \end{aligned}$$

Se o sistema tiver graus de liberdade internos que assumam g valores distintos (projeção de spin, isospin, etc.), a função de partição é reescrita como:

$$\Theta_0(z, V, T) = \prod_j \left[\sum_{n_j} (ze^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j} \right]^g. \quad (\text{A.30})$$

Supondo $\varepsilon_j > \mu$ para o caso de Bose-Einstein, podemos realizar a soma em (A.30) e determinar o potencial macrocanônico:

$$\Omega_0(z, T) = \frac{\mp g}{V} \sum_j \ln(1 \mp ze^{-\beta\varepsilon_j}), \quad (\text{A.31})$$

onde o sinal superior (inferior) é referente a estatística de Bose-Einstein (Fermi-Dirac).

Utilizando a prescrição $\sum_\epsilon \rightarrow (2\pi)^{-3} \iint d^3x d^3p$ e a relação de dispersão relativística, reescrevemos (A.31) como:

$$\Omega_0(z, T) = \frac{\mp g}{(2\pi)^3} \int \ln[1 \mp ze^{-\beta\sqrt{p^2+m^2}}] d^3p. \quad (\text{A.32})$$

Expandindo o logarítmo em série, Ω_0 adquire a seguinte forma:

$$\Omega_0(z, T) = \frac{g}{(2\pi)^3} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} z^N \int e^{-N\beta[\sqrt{p^2+m^2}]} d^3p = \sum_{N=1}^{\infty} b_N^{(0)} z^N, \quad (\text{A.33})$$

onde

$$b_N^{(0)} = g \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N \Lambda^3(N\beta)}, \quad (\text{A.34})$$

com $\Lambda^3(N\beta)$ definido a partir de (A.14) fazendo $\beta \rightarrow N\beta$.

Com o auxílio de (A.33) é possível determinar a pressão, a densidade numérica e a densidade de energia,

$$p(z, T) \equiv \frac{\Omega_0}{\beta} = kT \sum_{N=1}^{\infty} b_N^{(0)} z^N, \quad (\text{A.35a})$$

$$n(z, T) \equiv z \frac{\partial}{\partial z} (\Omega_0)_{V,T} = \sum_{N=1}^{\infty} N b_N^{(0)} z^N, \quad (\text{A.35b})$$

$$\rho(z, T) \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} (\Omega_0)_{V,z} = -\sum_{N=1}^{\infty} \frac{\partial b_N^{(0)}}{\partial \beta} z^N. \quad (\text{A.35c})$$

Estas três grandezas termodinâmicas também podem ser escritas em termos da função de distribuição de partículas ideais $f(\vec{p})$. Utilizando (A.32) e as definições de p , n e ρ obtemos:

$$n = \frac{g}{(2\pi)^3} \int f(\vec{p}) d^3 p, \quad (\text{A.36a})$$

$$\rho = \frac{g}{(2\pi)^3} \int E(\vec{p}) f(\vec{p}) d^3 p, \quad (\text{A.36b})$$

$$p = \frac{g}{(2\pi)^3} \int \frac{|\vec{p}|^2}{3E(\vec{p})} f(\vec{p}) d^3 p, \quad (\text{A.36c})$$

onde

$$f(\vec{p}) = \frac{1}{[z^{-1} e^{\beta E(\vec{p})} \mp 1]} \quad \text{e} \quad E(\vec{p}) = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}. \quad (\text{A.37})$$

Por fim, é interessante analisar o limite não relativístico ($\beta m \gg 1$) de (A.33). Substituindo (A.14) e (A.34) em (A.33), e utilizando a expansão assintótica de K_2 temos:

$$\begin{aligned} \Omega_0^{NR}(z, T) &= \sum_{j=1}^{\infty} g \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} \frac{4\pi m^2}{(2\pi)^3 N\beta} K_2(N\beta m) z^N \Rightarrow \\ \Omega_0^{NR}(z, T) &\simeq \sum_{j=1}^{\infty} g \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} \frac{4\pi m^2}{(2\pi)^3 N\beta} \sqrt{\frac{\pi}{2N\beta m}} e^{-N\beta m} e^{N\beta(\mu_{NR}+m)} \Rightarrow \\ \Omega_0^{NR}(z_{NR}, T) &\simeq \sum_{j=1}^{\infty} g \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N^{5/2}} \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} e^{N\beta\mu_{NR}} = \frac{g}{\lambda^3} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N^{5/2}} z_{NR}^N. \quad (\text{A.38}) \end{aligned}$$

Este último resultado é usualmente encontrado nos livros textos de ME [21].

A.3 Contagem de diagramas conexos

Este é um método alternativo para obtenção da função de partição de um sistema quântico ideal. Neste método, a influência do operador de simetrização $\hat{A}$ ocorre através da contagem dos diagramas conexos referentes às correlações estatísticas (interação de troca). Vejamos a seguir alguns exemplos de diagramas:

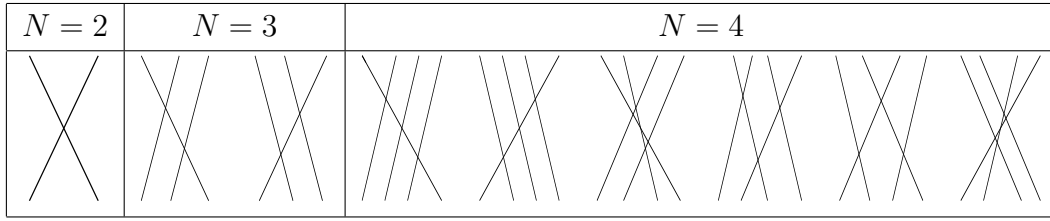


Figura A.1: Os diagramas de interação de troca para $N = 2, 3$ e 4 .

Precisamos, então, analisar quais são as contribuições de todos estes gráficos.

Como visto em 2.1.2,

$$\Omega_0(z, T) = \sum_{N=1}^{\infty} b_N^{(0)} z^N \quad \text{com} \quad b_N^{(0)} = \frac{1}{V} \text{Tr} \hat{U}_N^{(0)}, \quad (\text{A.39})$$

lembrando que $\hat{U}_N^{(0)}$ é a soma de todos os diagramas conexos de N partículas livres.

Na representação dos momentos, um particular diagrama contribui da seguinte forma:

$$e^{-\beta H_N^{(0)}} |k_1, \dots, k_N\rangle = e^{-\beta(\varepsilon_{k_1} + \dots + \varepsilon_{k_N})} |k_1, \dots, k_N\rangle. \quad (\text{A.40})$$

Uma vez que queremos calcular o traço do sistema ideal, podemos escrever

$$\text{Tr} e^{-\beta H_N^{(0)}} = \sum_{k_1, \dots, k_N} \langle k_1, \dots, k_N | e^{-\beta H_N^{(0)}} | k_1, \dots, k_N \rangle. \quad (\text{A.41})$$

O próximo passo é incluir os efeitos do operador de simetrização.

- Em um sistema de N partículas ideais o número de diagramas conexos relacionados com a interação de troca é $(N - 1)!$. *Exemplo:* suponha um sistema com 6 partículas. Para ser um diagrama conexo de troca a partícula na posição 1 pode ser colocada nas posições 2, 3, 4, 5 ou 6, ou seja, temos cinco possibilidades. Imaginemos agora que esta partícula seja colocada na posição 4, neste caso a partícula que ocupava esta última posição deve ir para uma das posições 2, 3, 5 ou 6, portanto temos quatro possibilidades. Veja que se fizermos 1 indo para 4 e 4 indo para 1 não formamos um diagrama conexo. Procedendo de forma análoga para as trocas das partículas restantes obtemos 5! diagramas conexos.
- As partículas são indistinguíveis. Portanto, devemos dividir o sistema de N partículas por $N!$ evitando assim contar uma mesma amplitude mais de uma vez.

- O número de permutações P de um diagrama conexo de N partículas é $N - 1$.
Exemplo: em um sistema de 4 partículas uma possível permutação é 1 indo em 2, 2 indo em 3 e 3 indo em 4, com 4 indo em 1 já estando determinado. Portanto, o sinal $\delta_p = (\pm 1)$ de bósons e férmions contribui com um fator $(\pm 1)^{N-1}$.

Levando em conta estes três efeitos, e lembrando que os diagramas conexos de troca só existem quando as energias são idênticas ($E_{k_1} = E_{k_2} = \dots = E_{k_N} \rightarrow$ partículas idênticas), podemos obter a soma de todos os diagramas conexos como:

$$Tr \hat{U}_N^{(0)} = \frac{(\pm 1)^{N-1} (N-1)!}{N!} \sum_k e^{-\beta N \varepsilon_k} = \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} \sum_k e^{-\beta N \varepsilon_k}. \quad (\text{A.42})$$

Finalmente, utilizando as conhecidas séries do $\ln$,

$$\begin{aligned} \ln(1+x) &= x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots \\ -\ln(1-x) &= x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4} + \dots \end{aligned}$$

e substituído (A.42) em (A.39), obtem-se:

$$\begin{aligned} \Omega_0(z, T) &= \frac{1}{V} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} \sum_k e^{-\beta N \varepsilon_k} z^N = \frac{1}{V} \sum_k \sum_{N=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{N-1}}{N} (ze^{-\beta \varepsilon_k})^N \Rightarrow \\ \Omega_0(z, T) &= \mp \frac{1}{V} \sum_k \ln(1 \mp ze^{-\beta \varepsilon_k}), \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

ou seja, obtemos novamente o conhecido resultado (A.31) sem o fator de degenerescência.

Apêndice B

Cálculo do Traço de $\hat{W}$ e Relações entre $\hat{T}$, $\hat{\Omega}$ e $\hat{S}$.

B.1 Extensão analítica

Vejamos a seguir como escrever o traço do operador densidade de probabilidade

$$Tr\hat{W} = Tr\hat{A}e^{-\beta\hat{H}} \quad (B.1)$$

em termos de

$$\hat{G}(\varsigma) \equiv (\varsigma - \hat{H})^{-1}, \quad (B.2)$$

sendo ς é uma variável complexa.

Do cálculo de variáveis complexas sabemos que

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\varsigma)}{(\varsigma - \varsigma_0)} d\varsigma = \begin{cases} f(\varsigma_0) & \text{se } \varsigma_0 \text{ é um ponto interno ao contorno } C, \\ 0 & \text{se } \varsigma_0 \text{ é um ponto externo ao contorno } C. \end{cases} \quad (B.3)$$

Sabemos também que o Hamiltoniano obedece à equação de autovalores

$$\hat{H} |\Psi_s\rangle = E_s |\Psi_s\rangle, \quad (B.4)$$

com Ψ_s sendo os respectivos autoestados.

Portanto, supondo uma representação em série para (B.2) é fácil de mostrar que

$$\hat{G}(\varsigma) |\Psi_s\rangle = (\varsigma - \hat{H} + i\eta)^{-1} |\Psi_s\rangle, \quad (B.5a)$$

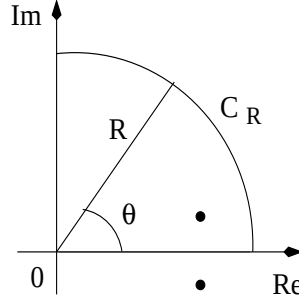
$$\hat{G}^*(\varsigma) |\Psi_s\rangle = (\varsigma^* - \hat{H} - i\eta)^{-1} |\Psi_s\rangle, \quad (B.5b)$$

onde a parte complexa $i\eta$ é introduzida para deslocar o espectro de $\hat{H}$ do eixo real.

Por outro lado, utilizando (B.3) e (B.4) escrevemos:

$$Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} = \left[\sum_s e^{-\beta E_s} \right]_A = \frac{1}{2\pi i} \left[\sum_s \oint \frac{(2i\eta) e^{-\beta \varsigma}}{(\varsigma - E_s + i\eta)(\varsigma - E_s - i\eta)} d\varsigma \right]_A, \quad (B.6)$$

com o contorno de integração dado por:



O subscrito A indica que a soma em s é devidamente simetrizada.

O polo superior é dado por $-i\eta$ e o polo inferior por $+i\eta$. Para que a última passagem em (B.6) seja válida devemos fazer o volume do sistema ir para infinito e logo em seguida $\eta \rightarrow 0^+$ (maiores detalhes são dados na seção 3.1).

Comentário A extensão analítica feita em (B.6) acima não é a única possível. De fato, outras extensões levariam a resultados futuros diferentes. Porém, esta extensão é uma das mais convenientes para a resolução deste problema, uma vez que ela leva ao resultado que possui o bom limite não relativístico para o coeficiente b_2 (ver seção 3.2.2). A utilização de diferentes extensões analíticas para gerar diferentes resultados não é novidade na física. Por exemplo, em teoria de espalhamento usa-se de diferentes contornos de integração para produzir efeitos distintos (ver capítulo 13 de [42]).

O próximo passo é escrever explicitamente as três integrais de contorno em (B.6):

$$\begin{aligned} Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{2\pi i} \sum_s \left\{ \int_{C_R} \frac{(2i\eta) e^{-\beta \varsigma_\theta}}{(\varsigma_\theta - E_s + i\eta)(\varsigma_\theta - E_s - i\eta)} d\varsigma_\theta + \right. \\ \left. + \int_{iR}^0 \frac{(2i\eta) e^{-\beta \varsigma_{Im}}}{(\varsigma_{Im} - E_s + i\eta)(\varsigma_{Im} - E_s - i\eta)} d\varsigma_{Im} + \right. \\ \left. + \int_0^R \frac{(2i\eta) e^{-\beta \varsigma_{Re}}}{(\varsigma_{Re} - E_s + i\eta)(\varsigma_{Re} - E_s - i\eta)} d\varsigma_{Re} \right\}_A, \quad (B.7) \end{aligned}$$

onde R é o raio do quarto de círculo.

Sabendo que $\zeta = Re^{i\theta} = x + iy$, vamos trabalhar separadamente com cada uma das três integrais:

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{C_R} \frac{(2i\eta) e^{-\beta\zeta_\theta}}{(\zeta_\theta - E_s + i\eta)(\zeta_\theta - E_s - i\eta)} d\zeta_\theta = \int_0^{\pi/2} \frac{iRe^{i\theta} (2i\eta) e^{-\beta Re^{i\theta}}}{(Re^{i\theta} - E_s + i\eta)(Re^{i\theta} - E_s - i\eta)} d\theta \\
 I_1 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\pi/2} \frac{iRe^{i\theta} (2i\eta) e^{-\beta R[\cos(\theta) + i\sin(\theta)]}}{(Re^{i\theta} - E_s + i\eta)(Re^{i\theta} - E_s - i\eta)} d\theta = 0.
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

Também temos:

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int_{iR}^0 \frac{(2i\eta) e^{-\beta\zeta_{Im}}}{(\zeta_{Im} - E_s + i\eta)(\zeta_{Im} - E_s - i\eta)} = \int_{iR}^0 \frac{(2i\eta) e^{-\beta iy}}{(iy - E_s + i\eta)(iy - E_s - i\eta)} idy \\
 I_2 &= \int_{-R}^0 \frac{(2i\eta) e^{-\beta x}}{(x - E_s + i\eta)(x - E_s - i\eta)} dx,
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

onde na última passagens fizemos a mudança de variável $x = iy$.

$$I_3 = \int_0^R \frac{(2i\eta) e^{-\beta\zeta_{Re}}}{(\zeta_{Re} - E_s + i\eta)(\zeta_{Re} - E_s - i\eta)} d\zeta_{Re} = \int_0^R \frac{(2i\eta) e^{-\beta x}}{(x - E_s + i\eta)(x - E_s - i\eta)} dx. \tag{B.10}$$

Substituindo estes três últimos resultados em (B.7) com $R \rightarrow \infty$ obtemos:

$$Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{2\pi i} \left[\sum_s \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(2i\eta) e^{-\beta\zeta}}{(\zeta - E_s + i\eta)(\zeta - E_s - i\eta)} d\zeta \right]_A, \tag{B.11}$$

com ζ integrado no eixo real.

Por fim, separamos (B.11) em duas integrais e utilizamos (B.2), (B.5a) e (B.5b):

$$\begin{aligned}
 Tr \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} &= \frac{1}{2\pi i} \sum_s \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta\zeta}}{(\zeta - E_s - i\eta)} d\zeta - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta\zeta}}{(\zeta - E_s + i\eta)} d\zeta \right]_A \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\zeta} \left\{ Tr \left[\hat{A} (\zeta - \hat{H} - i\eta)^{-1} \right] - Tr \left[\hat{A} (\zeta - \hat{H} + i\eta)^{-1} \right] \right\} d\zeta \\
 &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\zeta} Tr \left[\hat{A} \hat{G}(\zeta) - \hat{A} \hat{G}^*(\zeta) \right] d\zeta = \frac{-2i}{2i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\zeta} Im Tr \left[\hat{A} \hat{G}(\zeta) \right] d\zeta.
 \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\text{Tr} \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varsigma}{\pi} e^{-\beta \varsigma} \text{Im} \text{Tr} [\hat{A} \hat{G}(\varsigma)] d\varsigma,$$

como em (2.86).

B.2 Identidades entre operadores

A partir das definições,

$$\hat{T}(\varsigma) \equiv \hat{V} + \hat{V} \hat{G}(\varsigma) \hat{V}; \quad \hat{\Omega}(\varsigma) \equiv \hat{G}(\varsigma) [\hat{G}^{(0)}(\varsigma)]^{-1} \quad (\text{B.12})$$

$$\hat{S}(\varsigma) \equiv \hat{\Omega}^{-1}(\varsigma^*) \hat{\Omega}(\varsigma), \quad \text{com} \quad \hat{V} \equiv \hat{H} - \hat{H}^{(0)}, \quad (\text{B.13})$$

vamos provar as identidades (2.91a) e (2.91b) utilizadas no capítulo 2.

Através das definições (B.2) e (B.13) obtemos a seguinte relação fundamental:

$$\left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - \hat{G}^{-1} = \left(\varsigma - \hat{H}^{(0)}\right) - \left(\varsigma - \hat{H}\right) = \hat{H} - \hat{H}^{(0)} = \hat{V}. \quad (\text{B.14})$$

Substituindo (B.14) na primeira equação de (B.12), temos:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \hat{V} + \hat{V} \hat{G} \hat{V} = \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - \hat{G}^{-1} + \left(\left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - \hat{G}^{-1}\right) \hat{G} \left(\left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - \hat{G}^{-1}\right) \Rightarrow \\ \hat{T} &= \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - \hat{G}^{-1} + \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} - 2 \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} + \hat{G}^{-1} \\ &= - \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} + \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{-1} \Rightarrow \hat{G} = \hat{G}^{(0)} + \hat{G}^{(0)} \hat{T} \hat{G}^{(0)}, \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

conforme (2.91b).

Outro resultado importante é que, como $\hat{H}$ e $\hat{H}^{(0)}$ são hermitianos,

$$\left(\hat{G}^{(0)}\right)^{\dagger} = \left(\hat{G}^{(0)}\right)^{*}; \quad \hat{G}^{\dagger} = \hat{G}^{*} \quad \text{e} \quad \hat{T}^{\dagger} = \hat{T}^{*}, \quad (\text{B.16})$$

onde o dagger representa a conjugação hermitiana e o asterisco a operação de conjugação complexa. As relações entre os operadores $\hat{G}$'s são imediatas da definição (B.2) e a relação do operador $\hat{T}$ é mostrada com auxílio de (B.15).

Da segunda equação em (B.12) é possível obter $\hat{G} = \hat{\Omega} \hat{G}^{(0)}$, que, quando comparada com (B.15), resulta em:

$$\hat{\Omega} = 1 + \hat{G}^{(0)} \hat{T}, \quad (\text{B.17})$$

equação (2.91a).

Por outro lado, temos

$$\begin{aligned}\hat{\Omega} &= \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} = 1 + \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} - 1 = 1 + \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} - \hat{G} \hat{G}^{-1} \Rightarrow \\ \hat{\Omega} &= 1 + \hat{G} \left(\left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} - \hat{G}^{-1} \right) = 1 + \hat{G} \hat{V}.\end{aligned}\quad (\text{B.18})$$

Comparando (B.17) com esta última identidade e utilizando o fato de os transpostos dos operadores $\hat{G}$, $\hat{G}^{(0)}$, $\hat{V}$ e $\hat{T}$ serem eles mesmos (B.16), obtemos o seguinte resultado:

$$\hat{G} \hat{V} = \hat{G}^{(0)} \hat{T} \Rightarrow \left(\hat{G} \hat{V} \right)^T = \left(\hat{G}^{(0)} \hat{T} \right)^T \Rightarrow \hat{T} \hat{G}^{(0)} = \hat{V} \hat{G} \Rightarrow \hat{T} = \hat{V} \hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} = \hat{V} \hat{\Omega}, \quad (\text{B.19})$$

como em (2.91a).

Por fim, vamos mostrar uma última identidade:

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}^{-1} &= \left(\hat{G} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} \right)^{-1} = \hat{G}^{(0)} \hat{G}^{-1} = 1 + \hat{G}^{(0)} \hat{G}^{-1} - 1 = 1 + \hat{G}^{(0)} \hat{G}^{-1} - \hat{G}^{(0)} \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} \\ \hat{\Omega}^{-1} &= 1 + \hat{G}^{(0)} \left(\hat{G}^{-1} - \left(\hat{G}^{(0)} \right)^{-1} \right) = 1 - \hat{G}^{(0)} \hat{V},\end{aligned}\quad (\text{B.20})$$

segundo (2.91b).

Apêndice C

Cálculo Explícito dos Coeficientes do Virial

C.1 Sistema de uma componente

Para a pressão, vale (2.126a):

$$\frac{p}{kT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l(T) n^l. \quad (\text{C.1})$$

Substituindo (2.125a) e (2.125b) na equação anterior obtemos:

$$b_1 z + b_2 z^2 + b_3 z^3 + b_4 z^4 + \dots = a_1 (b_1 z + 2b_2 z^2 + 3b_3 z^3 + 4b_4 z^4 + \dots) + \\ + a_2 (b_1 z + 2b_2 z^2 + 3b_3 z^3 + \dots)^2 + a_3 (b_1 z + 2b_2 z^2 + \dots)^3 + a_4 (b_1 z + \dots)^4 + \dots$$

Comparando os termos de mesma ordem na fugacidade, segue:

$$b_1 = a_1 b_1 \Rightarrow a_1 = 1, \quad (\text{C.2a})$$

$$b_2 = a_1 2b_2 + a_2 b_1^2 \Rightarrow a_2 = -\frac{b_2}{b_1^2}, \quad (\text{C.2b})$$

$$b_3 = a_1 3b_3 + 4b_2 b_1 a_2 + a_3 b_1^3 \Rightarrow a_3 = \frac{4b_2^2}{b_1^4} - \frac{2b_3}{b_1^3}, \quad (\text{C.2c})$$

$$b_4 = a_1 4b_4 + 4b_2^2 a_2 + 6b_3 b_1 a_2 + a_3 b_1^2 6b_2 + a_4 b_1^4 \Rightarrow \\ a_4 = \frac{-3b_4 + 4b_2^2 \frac{b_2}{b_1^2} + 6b_3 \frac{b_2}{b_1} - \left(\frac{4b_2^2}{b_1^4} - \frac{2b_3}{b_1^3} \right) b_1^2 6b_2}{b_1^4} = \frac{-3b_4}{b_1^4} - \frac{20b_2^3}{b_1^6} + \frac{18b_3 b_2}{b_1^5}. \quad (\text{C.2d})$$

Procedendo de forma análoga para a densidade de energia, eq. (2.126b),

$$\frac{\rho}{(kT)^2} = \sum_{l=1}^{\infty} c_l(T) n^l, \quad (\text{C.3})$$

obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_1}{\partial(kT)}z + \frac{\partial b_2}{\partial(kT)}z^2 + \frac{\partial b_3}{\partial(kT)}z^3 + \dots = c_1 (b_1z + 2b_2z^2 + 3b_3z^3) \\ + c_2 (b_1z + 2b_2z^2 + \dots)^2 + c_3 (b_1z + \dots)^3 + \dots \end{aligned}$$

Definindo $\dot{b}_N \equiv \frac{\partial b_N}{\partial(kT)}$, e comparando os termos de mesma potência em z , segue:

$$\dot{b}_1 = c_1 b_1 \quad \Rightarrow \quad c_1 = \frac{\dot{b}_1}{b_1}, \quad (\text{C.4a})$$

$$\dot{b}_2 = c_1 2b_2 + c_2 b_1^2 \quad \Rightarrow \quad c_2 = \frac{\dot{b}_2}{b_1^2} - \frac{2b_2 \dot{b}_1}{b_1^3}, \quad (\text{C.4b})$$

$$\dot{b}_3 = c_1 3b_3 + 4b_2 b_1 c_2 + c_3 b_1^3 \quad \Rightarrow \quad c_3 = \frac{\dot{b}_3}{b_1^3} - \frac{3b_3 \dot{b}_1}{b_1^4} - \frac{4b_2 \dot{b}_2}{b_1^4} + \frac{8b_2^2 \dot{b}_1}{b_1^5}. \quad (\text{C.4c})$$

É interessante notar que c_2 e c_3 podem ser obtidos diretamente de a_2 e a_3 , ou seja:

$$\dot{a}_2 = -\frac{\partial}{\partial(kT)} \left(\frac{b_2}{b_1^2} \right) = -\frac{\dot{b}_2}{b_1^2} + \frac{2b_2 \dot{b}_1}{b_1^3} = -c_2, \quad (\text{C.5})$$

e

$$\dot{a}_3 = \frac{\partial}{\partial(kT)} \left(\frac{4b_2^2}{b_1^4} - \frac{2b_3}{b_1^3} \right) = \frac{8b_2 \dot{b}_2}{b_1^4} - \frac{16b_2^2 \dot{b}_1}{b_1^5} - \frac{2\dot{b}_3}{b_1^3} + \frac{6b_3 \dot{b}_1}{b_1^4} = -2c_3. \quad (\text{C.6})$$

C.2 Sistema de duas componentes

Para a pressão, vale (2.166a):

$$\frac{p}{kT} = \sum_{l_1=1}^{\infty} \sum_{l_2=1}^{\infty} a_{l_1, l_2}(T) n_1^{l_1} n_2^{l_2}. \quad (\text{C.7})$$

Substituindo (2.165a) e (2.165b) na equação anterior obtemos:

$$\begin{aligned} b_{1,0}z_1 + b_{0,1}z_2 + b_{2,0}z_1^2 + b_{0,2}z_2^2 + b_{1,1}z_1z_2 + b_{3,0}z_1^3 + b_{0,3}z_2^3 + b_{2,1}z_1^2z_2 + b_{1,2}z_1z_2^2 + \dots = \\ = a_{0,0} + a_{1,0} (b_{1,0}z_1 + 2b_{2,0}z_1^2 + b_{1,1}z_1z_2 + 3b_{3,0}z_1^3 + 2b_{2,1}z_1^2z_2 + b_{1,2}z_1z_2^2 + \dots) + \\ a_{0,1} (b_{0,1}z_2 + 2b_{0,2}z_2^2 + b_{1,1}z_1z_2 + 3b_{0,3}z_2^3 + b_{2,1}z_1^2z_2 + 2b_{1,2}z_1z_2^2 + \dots) + \\ + a_{1,1} (b_{1,0}z_1 + 2b_{2,0}z_1^2 + b_{1,1}z_1z_2 \dots) (b_{0,1}z_2 + 2b_{0,2}z_2^2 + b_{1,1}z_1z_2 \dots) + \\ + a_{2,0} (b_{1,0}z_1 + 2b_{2,0}z_1^2 + b_{1,1}z_1z_2 \dots)^2 + a_{0,2} (b_{0,1}z_2 + 2b_{0,2}z_2^2 + b_{1,1}z_1z_2 \dots)^2 + \\ + a_{3,0} (b_{1,0}z_1 + \dots)^3 + a_{0,3} (b_{0,1}z_2 + \dots)^3 + a_{2,1} (b_{1,0}z_1 + \dots)^2 (b_{0,1}z_2 + \dots) + \\ + a_{2,1} (b_{1,0}z_1 + \dots) (b_{0,1}z_2 + \dots)^2 + \dots \end{aligned}$$

Comparando os termos de mesma ordem na fugacidade, segue:

$$a_{0,0} = 0, \quad a_{1,0}b_{1,0} = b_{1,0} \Rightarrow a_{1,0} = 1, \quad a_{0,1}b_{0,1} = b_{0,1} \Rightarrow a_{0,1} = 1, \quad (\text{C.8a})$$

$$a_{1,0}2b_{2,0} + a_{2,0}b_{1,0}^2 = b_{2,0} \Rightarrow a_{2,0} = \frac{-b_{2,0}}{b_{1,0}^2}, \quad a_{0,1}2b_{0,2} + a_{0,2}b_{0,1}^2 = b_{0,2} \Rightarrow a_{0,2} = \frac{-b_{0,2}}{b_{0,1}^2}, \quad (\text{C.8b})$$

$$(a_{1,0} + a_{0,1})b_{1,1} + a_{1,1}b_{1,0}b_{0,1} = b_{1,1} \Rightarrow a_{1,1} = \frac{-b_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}}, \quad (\text{C.8c})$$

$$a_{1,0}3b_{3,0} + a_{2,0}4b_{2,0}b_{1,0} + a_{3,0}b_{1,0}^3 = b_{3,0} \Rightarrow a_{3,0} = \frac{4b_{2,0}^2}{b_{1,0}^4} - \frac{2b_{3,0}}{b_{1,0}^3}, \quad (\text{C.9})$$

$$a_{0,1}3b_{0,3} + a_{0,2}4b_{0,2}b_{0,1} + a_{0,3}b_{0,1}^3 = b_{0,3} \Rightarrow a_{0,3} = \frac{4b_{0,2}^2}{b_{0,1}^4} - \frac{2b_{0,3}}{b_{0,1}^3}, \quad (\text{C.10})$$

$$a_{1,0}2b_{2,1} + a_{0,1}b_{2,1} + a_{1,1}(2b_{2,0}b_{0,1} + b_{1,0}b_{1,1}) + a_{2,0}2b_{1,1}b_{1,0} + a_{2,1}b_{1,0}^2b_{0,1} = b_{2,1} \Rightarrow$$

$$a_{2,1} = \frac{-2b_{2,1}}{b_{1,0}^2b_{0,1}} + \frac{4b_{2,0}b_{1,1}}{b_{1,0}^3b_{0,1}} + \frac{b_{1,1}^2}{b_{1,0}^2b_{0,1}^2}, \quad (\text{C.11})$$

$$a_{0,1}2b_{1,2} + a_{1,0}b_{1,2} + a_{1,1}(2b_{0,2}b_{1,0} + b_{0,1}b_{1,1}) + a_{0,2}2b_{1,1}b_{0,1} + a_{1,2}b_{0,1}^2b_{1,0} = b_{1,2} \Rightarrow$$

$$a_{1,2} = \frac{-2b_{1,2}}{b_{0,1}^2b_{1,0}} + \frac{4b_{0,2}b_{1,1}}{b_{0,1}^3b_{1,0}} + \frac{b_{1,1}^2}{b_{0,1}^2b_{1,0}^2}. \quad (\text{C.12})$$

Procedendo de forma análoga para a densidade de energia, eq. (2.166b),

$$\frac{\rho(n_1, n_2, T)}{(kT)^2} = \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{l_2=0}^{\infty} c_{l_1, l_2}(T) n_1^{l_1} n_2^{l_2}, \quad (\text{C.13})$$

obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial b_{1,0}}{\partial(kT)} z_1 + \frac{\partial b_{0,1}}{\partial(kT)} z_2 + \frac{\partial b_{2,0}}{\partial(kT)} z_1^2 + \frac{\partial b_{0,2}}{\partial(kT)} z_2^2 + \frac{\partial b_{1,1}}{\partial(kT)} z_1 z_2 + \dots = \\ & = c_{0,0} + c_{1,0} (b_{1,0} z_1 + 2b_{2,0} z_1^2 + b_{1,1} z_1 z_2 + \dots) + c_{0,1} (b_{0,1} z_2 + 2b_{0,2} z_2^2 + b_{1,1} z_1 z_2 + \dots) + \\ & \quad + c_{1,1} (b_{1,0} z_1 + \dots) (b_{0,1} z_2 + \dots) + \dots \end{aligned}$$

Definindo $\dot{b}_{N_1, N_2} \equiv \frac{\partial b_{N_1, N_2}}{\partial(kT)}$, e comparando os termos de mesma potencia em z_1 e z_2 , segue:

$$c_{0,0} = 0, \quad c_{1,0}b_{1,0} = \dot{b}_{1,0} \Rightarrow c_{1,0} = \frac{\dot{b}_{1,0}}{b_{1,0}}, \quad c_{0,1}b_{0,1} = \dot{b}_{0,1} \Rightarrow c_{0,1} = \frac{\dot{b}_{0,1}}{b_{0,1}}, \quad (\text{C.14})$$

$$c_{1,0}2b_{2,0} + c_{2,0}b_{1,0}^2 = \dot{b}_{2,0} \Rightarrow c_{2,0} = \frac{\dot{b}_{2,0}}{b_{1,0}^2} - \frac{2b_{2,0}\dot{b}_{1,0}}{b_{1,0}^3}, \quad (\text{C.15})$$

$$c_{0,1}2b_{0,2} + c_{0,2}b_{0,1}^2 = \dot{b}_{0,2} \Rightarrow c_{0,2} = \frac{\dot{b}_{0,2}}{b_{0,1}^2} - \frac{2b_{0,2}\dot{b}_{0,1}}{b_{0,1}^3}, \quad (\text{C.16})$$

$$(c_{1,0} + c_{0,1})b_{1,1} + c_{1,1}b_{1,0}b_{0,1} = \dot{b}_{1,1} \Rightarrow c_{1,1} = \frac{\dot{b}_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}} - \frac{\dot{b}_{1,0}b_{1,1}}{b_{1,0}^2b_{0,1}} - \frac{\dot{b}_{0,1}b_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}^2}. \quad (\text{C.17})$$

Analogamente ao caso de uma componente, é interessante notar que $c_{2,0}$, $c_{0,2}$ e $c_{1,1}$ podem ser obtidos diretamente de $a_{2,0}$, $a_{0,2}$ e $a_{1,1}$, ou seja:

$$\dot{a}_{2,0} = -\frac{\partial}{\partial(kT)} \left(\frac{b_{2,0}}{b_{1,0}^2} \right) = -\frac{\dot{b}_{2,0}}{b_{1,0}^2} + \frac{2b_{2,0}\dot{b}_{1,0}}{b_{1,0}^3} = -c_{2,0}, \quad (\text{C.18})$$

$$\dot{a}_{0,2} = -\frac{\partial}{\partial(kT)} \left(\frac{b_{0,2}}{b_{0,1}^2} \right) = -\frac{\dot{b}_{0,2}}{b_{0,1}^2} + \frac{2b_{0,2}\dot{b}_{0,1}}{b_{0,1}^3} = -c_{0,2} \quad (\text{C.19})$$

e

$$\dot{a}_{1,1} = -\frac{\partial}{\partial(kT)} \left(\frac{b_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}} \right) = -\frac{\dot{b}_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}} + \frac{\dot{b}_{1,0}b_{1,1}}{b_{1,0}^2b_{0,1}} + \frac{\dot{b}_{0,1}b_{1,1}}{b_{1,0}b_{0,1}^2} = -c_{1,1}. \quad (\text{C.20})$$

Apêndice D

Limites Não Relativísticos

D.1 O espalhamento não relativístico

O espalhamento não relativístico entre dois corpos pode ser mimetizado em um sistema de uma partícula espalhada por um potencial $V(\vec{r})$, onde $\vec{r}$ é a distância relativa entre os dois corpos. A Hamiltoniana deste sistema é dada por

$$\hat{H}_2 = \hat{H}^{(0)} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}), \quad (\text{D.1})$$

onde μ é a massa reduzida. Observe que a Hamiltoniana completa contém também a parte do centro de massa, mas esta não influencia no processo de espalhamento.

Primeiramente, vamos explicitar que, para este sistema, os estados $\Psi_s^{(-)}$ e $\Psi_s^{(+)}$ representam funções de onda assintoticamente espalhadas *de entrada e de saída* respectivamente. Partindo da equação de Lippmann-Schwinger e sua análoga em (3.7), temos

$$\begin{aligned} |\Psi_k^{(\pm)}\rangle &= |\psi_k\rangle + \hat{G}_0^\pm \hat{V} |\Psi_k^{(\pm)}\rangle \Rightarrow \\ \langle \vec{r}, \Psi_k^{(\pm)} \rangle &= \langle \vec{r}, \psi_k \rangle + \int d^3 r' \int d^3 k' \int d^3 r'' \int d^3 k'' \left\{ \langle \vec{r} | \vec{k}' \rangle \right. \\ &\quad \left. \langle \vec{k}' | \hat{G}_0^\pm | \vec{k}'' \rangle \langle \vec{k}'' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \Psi_k^{(\pm)} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

com as seguintes identificações:

$$\hat{G}_0^+ = \hat{G}^{(0)} \quad \text{e} \quad \hat{G}_0^- = \hat{G}^{(0)*} \quad (\text{D.3a})$$

$$\langle \vec{r}, \Psi_k^{(\pm)} \rangle = \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}); \quad (\text{D.3b})$$

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \langle \vec{r}, \psi_k \rangle = \psi_k(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (\text{D.3c})$$

A equação de Schrödinger deste sistema é:

$$-\frac{1}{2\mu}\nabla^2\Psi_k + V(|\vec{r}|)\Psi_k = E_k\Psi_k = \frac{k^2}{2\mu}\Psi_k \Rightarrow \quad (\text{D.4a})$$

$$-\nabla^2\Psi_k + 2\mu V(|\vec{r}|)\Psi_k = k^2\Psi_k, \quad (\text{D.4b})$$

com $E_k > 0$. Note-se que a interação é suposta como sendo dependente apenas da distância interpartículas.

Utilizando o método de separação de variáveis, temos

$$\Psi_k = R_{l,k}(r)Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_{l,k}(r)}{r}Y_l^m(\theta, \phi), \quad (\text{D.5})$$

onde $Y_l^m(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos e $u_{l,k}(r)$ é solução da equação de onda radial,

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2\mu V(r) - k^2 \right] u_{l,k}(r) = 0. \quad (\text{D.6})$$

Usando a equação de auto-valores sob a forma (D.4b),

$$\hat{H}\Psi_k = k^2\Psi_k \quad \text{e} \quad \hat{H}^{(0)}\Psi_k = k^2\Psi_k, \quad (\text{D.7})$$

é fácil de ver que o operador $\hat{G}_0^\pm$ (3.6), na representação dos momentos, é escrito como

$$\langle \vec{k}' | \hat{G}_0^\pm | \vec{k}'' \rangle = \frac{\delta(\vec{k}' - \vec{k}'')}{(k^2 - k'^2 \pm i\eta)}, \quad (\text{D.8})$$

e o operador de interação $\hat{V}$ na representação das coordenadas é dado por

$$\langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle = 2\mu V(\vec{r}') \delta(\vec{r}'' - \vec{r}'). \quad (\text{D.9})$$

Substituindo (D.3b), (D.3c), (D.8) e (D.9) em (D.2) obtemos:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) &= \psi_k(\vec{r}) + \int d^3r' \int d^3k' \int d^3r'' \int d^3k'' \left\{ \frac{e^{i\vec{k}'\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right. \\ &\quad \left. \frac{\delta(\vec{k}' - \vec{k}'')}{(k^2 - k'^2 \pm i\eta)} \frac{e^{-i\vec{k}''\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} 2\mu V(\vec{r}') \delta(\vec{r}'' - \vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}') \right\} \Rightarrow \\ \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) &= \psi_k(\vec{r}) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int d^3r' d^3k' \frac{e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} 2\mu V(\vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}'), \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

lembrando que η é uma quantidade “pequena” positiva e real.

A seguir, vamos proceder com a integração em $\vec{k}'$. Em coordenadas esféricas, temos:

$$\begin{aligned} \int d^3k' \frac{e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} &= 2\pi \int_0^\infty k'^2 dk' \int_0^\pi \frac{e^{ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)\cos\theta}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} \sin\theta d\theta \Rightarrow \\ \int d^3k' \frac{e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} &= 2\pi \int_0^\infty k' \frac{(e^{ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)} - e^{-ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)})}{i(|\vec{r}-\vec{r}'|)(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} dk' \Rightarrow \\ \int d^3k' \frac{e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} &= \frac{2\pi}{i(|\vec{r}-\vec{r}'|)} \int_{-\infty}^\infty \frac{k' e^{ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} dk'. \end{aligned} \quad (D.11)$$

A integração em k' é feita através da extensão analítica por um contorno fechado de meio círculo superior de raio R no plano complexo, mais o eixo real. Quando tomamos $R \rightarrow \infty$ a integral no semi-círculo tende a zero devido à exponencial, e a integral no eixo real se reduz a (D.11). Então, aplicando o teorema dos resíduos, segue:

$$\frac{2\pi}{i(|\vec{r}-\vec{r}'|)} \int_{-\infty}^\infty \frac{k' e^{ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} dk' = \frac{2\pi}{i(|\vec{r}-\vec{r}'|)} 2\pi i [\text{Resíduos internos ao contorno}]. \quad (D.12)$$

Para cada sinal de η o integrando de (D.12) possui 2 polos simples:

$$k' = \pm \sqrt{k^2 \pm i\eta} \simeq \pm \left(k \pm \frac{i\eta}{2k} \right). \quad (D.13)$$

Os polos internos ao contorno estão contidos no semi-plano superior

$$\begin{aligned} k' &= +k + \frac{i\eta}{2k} \rightarrow \hat{G}_0^+, \\ k' &= -k + \frac{i\eta}{2k} \rightarrow \hat{G}_0^-. \end{aligned}$$

Portanto, (D.12) resulta em

$$\frac{2\pi}{i(|\vec{r}-\vec{r}'|)} \int_{-\infty}^\infty \frac{k' e^{ik'(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{(k'^2 - (k^2 \pm i\eta))} dk' = 4\pi^2 \frac{(\pm k + \frac{i\eta}{2k}) e^{\pm ik(|\vec{r}-\vec{r}'|)} e^{-\frac{\eta}{2k}(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{2(\pm k + \frac{i\eta}{2k})(|\vec{r}-\vec{r}'|)}, \quad (D.14)$$

e substituindo este resultado em (D.10) obtemos:

$$\Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{\pm ik(|\vec{r}-\vec{r}'|)} e^{-\frac{\eta}{2k}(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{(|\vec{r}-\vec{r}'|)} 2\mu V(\vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}'). \quad (\text{D.15})$$

É importante notar que a largura do pacote de onda é proporcional $1/\eta$, o que condiz com a necessidade de tomarmos os limites de L (tamanho do sistema) e η (parâmetro de deslocamento do polo) na ordem correta, como dito na seção 3.1.

Tomando o limite de $\eta \rightarrow 0^+$, a equação (D.15) é reescrita como:

$$\Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{\pm ik(|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{(|\vec{r}-\vec{r}'|)} 2\mu V(\vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}'). \quad (\text{D.16})$$

Esta última relação é uma das equações fundamentais do espalhamento puramente elástico não relativístico.

Vejamos a seguir a forma assintótica desta equação, ou seja, quando $\vec{r} \rightarrow \infty$. Como o potencial só é diferente de zero para $\vec{r}' < a$, onde a é o alcance máximo do potencial, podemos aproximar a parte modular de (D.16):

$$k|\vec{r}-\vec{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}' + r'^2} = kr - k\hat{r}\cdot\vec{r}' + \dots \quad (\text{D.17})$$

Agora, assintoticamente, é razoável supor que $r \gg ka^2$ e portanto podemos desprezar os termos de ordem superior em (D.17), ou seja:

$$\Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) \simeq \psi_k(\vec{r}) - \frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} \int e^{\mp i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} 2\mu V(\vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}') d^3r', \quad (\text{D.18})$$

com $\vec{k}' \equiv k\hat{r}$.

Observe que (D.18) tem a seguinte forma:

$$\Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}) = \Psi_k^{(\pm)}(r, \theta) = N \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} f_k^{\pm}(\vec{r}) \right], \quad (\text{D.19})$$

onde

$$f_k^{\pm}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi N} \int e^{\mp i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} 2\mu V(\vec{r}') \Psi_k^{(\pm)}(\vec{r}') d^3r', \quad (\text{D.20})$$

com $N = (2\pi)^{-3/2}$.

Analizando a equação (D.19) concluímos que $\Psi_s^{(-)}$ e $\Psi_s^{(+)}$ representam de fato funções de onda (esféricas) assintoticamente espalhadas de entrada e de saída, respectivamente.

O termo $f_k^{(+)}(\vec{r})$ é conhecido como *amplitude de espalhamento*, e veremos logo a seguir que este termo é proporcional à matriz de transição $T_{k'k}$ de um sistema não

relativístico. Da definição (2.89) na camada de massa temos:

$$T_{k'k} \equiv \langle \psi_{k'} | \hat{T} | \psi_k \rangle = \langle \psi_{k'} | \hat{V} (1 + \hat{G}\hat{V}) | \psi_k \rangle. \quad (\text{D.21})$$

Utilizando (3.9) nesta última equação, segue:

$$\begin{aligned} T_{k'k} &= \langle \psi_{k'} | \hat{V} | \Psi_k^{(+)} \rangle \\ &= \int d^3 r' \int d^3 r \langle \psi_{k'} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi_k^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

Substituindo (D.3b), (D.3c) e (D.9) em (D.22) obtemos:

$$\begin{aligned} T_{k'k} &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 r' \int d^3 r e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Psi_k^{(+)}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}} V(\vec{r}) \Psi_k^{(+)}(\vec{r}) d^3 r. \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Note que o termo de 2μ de (D.9) foi suprimido, pois o operador de interação $\hat{V}$ que entra na definição da matriz de transição (D.21) é tão somente o potencial contido na equação de Schrödinger usual (D.4a).

Comparando (D.20) com (D.23) temos:

$$T_{k'k} = -\frac{2\pi}{(2\pi)^3 \mu} f_k^{(+)}(\vec{r}). \quad (\text{D.24})$$

Por fim, vamos mostrar a equivalência entre a noção usual de defasagem de um sistema não relativístico com aquela defasagem definida em termos da matriz S (ver seção 3.2.1).

Partindo da equação de Schrödinger radial (D.6) e lembrando que o potencial espalhador $V(r)$ é zero para $r > a$, temos a seguinte solução:

$$R_{l,k}(r) = \frac{u_{l,k}(r)}{r} = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \quad r > a, \quad (\text{D.25})$$

onde j_l e n_l são as funções de Bessel esféricas de primeiro e segundo tipo.

Usando a aproximação assintótica para as funções de Bessel esféricas, a equação anterior é reescrita como:

$$R_{l,k}(r) = \frac{u_{l,k}(r)}{r} \simeq A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \Rightarrow \quad (\text{D.26})$$

$$\begin{aligned}
 \frac{u_{l,k}(r)}{r} &\simeq A_l \left[\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - \frac{B_l \cos(kr - l\pi/2)}{A_l kr} \right] \\
 &= A_l \left[\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \tan \delta_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \right] \\
 &= \frac{A_l}{\cos \delta_l} \left[\cos \delta_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \sin \delta_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \right] \\
 &= C_l \left[\frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l(k))}{kr} \right], \tag{D.27}
 \end{aligned}$$

onde C_l é a normalização e $\delta_l(k)$ é a defasagem definida como

$$\frac{B_l}{A_l} \equiv -\tan \delta_l. \tag{D.28}$$

Usualmente a condição de contorno na origem requer que a função de onda $R_{l,k}(r=0)$ seja finita, o que na quase totalidade dos casos* implica

$$u_{l,k}(0) = 0. \tag{D.29}$$

Agora, da teoria das funções de Bessel esféricas, sabemos que n_l não é regular na origem. Portanto, na ausência de interação ($V(r) = 0$ para qualquer r), o coeficiente B_l deve se anular devido a condição (D.29). Com esta informação podemos inferir que a razão entre B_l e A_l , dada pela defasagem, mede a *intensidade do espalhamento*. Esta razão é obtida resolvendo-se a equação de Schrödinger completa (região $r < a$), com condições de contorno suaves em $r = a$, que ligam esta solução com a solução externa dada em (D.25).

O próximo passo é escrever a solução assintótica $\Psi_k^{(+)}(r, \theta)$, dada em (D.19), em termos da solução assintótica $\frac{u_{l,k}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi)$. Usando (D.27) e sabendo que $\Psi_k^{(+)}$ não depende de ϕ , escrevemos:

$$\begin{aligned}
 \Psi_k^{(+)}(r, \theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \frac{u_{l,k}(r)}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l(k) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l(k))}{kr} \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} C_l(k) P_l(\cos \theta) \left[\frac{e^{i[kr - l\pi/2 + \delta_l(k)]} - e^{-i[kr - l\pi/2 + \delta_l(k)]}}{2ikr} \right] \\
 &= \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l(k) P_l(\cos \theta) (-i)^l e^{i\delta_l(k)} - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l(k) P_l(\cos \theta) (i)^l e^{-i\delta_l(k)}. \tag{D.30}
 \end{aligned}$$

*Em princípio existe a possibilidade de $u(r)$ ser proporcional r .

Adendo: As ondas planas podem ser expandidas e termos dos polinômios de Legendre:

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (i^l) j_l(kr) P_l(\cos \theta),$$

onde $\cos \theta = \hat{k} \cdot \hat{r}$.

Utilizando a aproximação assintótica para $j_l(kr)$ dada em (D.26) reescrevemos a equação anterior como:

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k}\vec{r}} &\simeq \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (i^l) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos \theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (i^l) \left[\frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (D.31)$$

Os coeficientes C_l podem ser determinados comparando (D.30) com (D.19). Substituindo (D.31) em (D.19) obtemos:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(+)}(r, \theta) &= N \left[\frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta) + \frac{e^{+ikr}}{r} f_k^{(+)}(\vec{r}) \right] \Rightarrow \\ \Psi_k^{(+)}(r, \theta) &= N \left[\frac{e^{ikr}}{r} \left(\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) + f_k^{(+)}(\vec{r}) \right) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta) \right]. \end{aligned} \quad (D.32)$$

Comparando as ondas de entrada (D.30) com (D.32) segue que

$$\begin{aligned} C_l(k) (i)^l e^{-i\delta_l(k)} &= N (2l+1) (-1)^l \Rightarrow \\ C_l(k) &= N (2l+1) i^l e^{i\delta_l(k)}. \end{aligned} \quad (D.33)$$

E comparando as ondas de saída de (D.30) com (D.32), temos:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} C_l(k) P_l(\cos \theta) (-i)^l e^{i\delta_l(k)} &= N \left(\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) + f_k^{(+)}(\vec{r}) \right) \Rightarrow \\
 \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{2i\delta_l(k)} P_l(\cos \theta) &= \left(\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) + f_k^{(+)}(\vec{r}) \right) \Rightarrow \\
 f_k^{(+)}(\vec{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} \right] P_l(\cos \theta). \tag{D.34}
 \end{aligned}$$

Substituindo este último resultado em (D.24) obtemos:

$$T_{k'k} = -\frac{2\pi}{(2\pi)^3 \mu} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} \right] P_l(\cos \theta). \tag{D.35}$$

A equação (D.35) expressa a matriz de transição $T_{k'k}$ em termos das defasagens.

Como se sabe, a matriz S pode ser escrita em termos da matriz de transição $T_{k'k}$. Este procedimento é completamente análogo à dedução de (3.20), lembrando somente que os operadores estão na camada de massa. Seguindo os mesmos passos, escrevemos o elemento de matriz S_2^a como:

$$\langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}') - 2\pi i \delta(E_k - E_{k'}) T_{k'k} \tag{D.36}$$

Agora, substituindo (3.31) em (D.36), segue:

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') - 2\pi i \delta(E_k - E_{k'}) T_{k'k}^a \\
 &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') - 2\pi i \delta \left(\frac{k^2}{2\mu} - \frac{k'^2}{2\mu} \right) T_{k'k}^a \\
 &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') - 4\mu\pi i \delta(k^2 - k'^2) T_{k'k}^a \\
 &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') - \frac{2\mu\pi i}{k} [\delta(k - k') + \delta(k + k')] T_{k'k}^a, \tag{D.37}
 \end{aligned}$$

onde utilizamos a relação de dispersão não relativística e as seguintes propriedades da função delta:

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad \text{e} \quad \delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} [\delta(x - a) + \delta(x + a)].$$

Como k e k' são sempre positivos ($k = |\vec{k}|$ e $k' = |\vec{k}'|$), o termo $\delta(k + k') T_{k'k}^a$ é sempre zero.

Finalmente, substituindo (D.35) em (D.37), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | \hat{S}_2^a | \vec{k} \rangle &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') \\ &\quad + \frac{1}{4\pi k} \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{2i\delta_l^a(k)} - 1}{k} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= \delta(k - k') \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi k^2} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') e^{2i\delta_l^a(k)}. \end{aligned} \quad (D.38)$$

Comparando este último resultado com (3.33), vemos que as defasagens usuais de um sistema não relativístico correspondem de fato com as funções reais $\delta_l^a(k)$ obtidas na seção 3.2.1.

D.2 O segundo coeficiente da fugacidade

Vamos mostrar que, no limite não relativístico, a equação (3.53c),

$$b_{1,1} - b_{1,1}^{(0)} = \frac{1}{2\beta\pi^3} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{1,1}^a (2l+1) \int_{m_1+m_2}^{\infty} \omega^2 K_2(\beta\omega) \left[\frac{\partial \delta_l^a(\omega)}{\partial \omega} \right]_{1,1} d\omega, \quad (D.39)$$

se reduz ao caso usual calculado por Beth e Uhlenbeck [30, 31].

No limite não relativístico (NR), podemos fazer as seguintes aproximações para ω em coordenadas do c.m.:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= E_1^2 + E_2^2 + 2E_1E_2 = m_1^2 + p^2 + m_2^2 + p^2 + 2\sqrt{m_1^2 + p^2}\sqrt{m_2^2 + p^2} \Rightarrow \\ (\omega^2)_{NR} &\simeq m_1^2 + p^2 + m_2^2 + p^2 + 2 \left(m_1 + \frac{p^2}{2m_1} \right) \left(m_2 + \frac{p^2}{2m_2} \right) \\ &\simeq (m_1 + m_2)^2 + p^2 + p^2 + \frac{m_2 p^2}{m_1} + \frac{m_1 p^2}{m_2} = M^2 + p^2 \left(\frac{2m_1 m_2 + m_2^2 + m_1^2}{m_1 m_2} \right) \\ &= M^2 + p^2 \left(\frac{M^2}{m_1 m_2} \right) = M^2 + \frac{M}{\mu} p^2, \end{aligned} \quad (D.40)$$

onde a massa reduzida μ é dada por:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M}. \quad (D.41)$$

Assim como $p \ll (m_1 \text{ ou } m_2)$, temos também $kT \ll M$ e portanto $\beta\omega \gg 1$. Neste caso, a função de Bessel modificada $K_2(\beta\omega)$ pode ser aproximada por sua forma assintótica [44] como:

$$K_2(\beta\omega) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2\beta\omega}} e^{-\beta\omega} \quad \text{com} \quad \beta\omega \gg 1. \quad (\text{D.42})$$

Substituindo (D.42) e (D.40) em (D.39), e utilizando a relação

$$d\omega \frac{\partial}{\partial \omega} = dp \frac{\partial}{\partial p},$$

temos:

$$\begin{aligned} \left(b_{1,1} - b_{1,1}^{(0)}\right)_{NR} &\simeq \frac{1}{2\beta\pi^3} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{1,1}^a (2l+1) M^2 \times \\ &\int_0^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{2\beta\sqrt{M^2 + \frac{M}{\mu}p^2}}} e^{-\beta\sqrt{M^2 + \frac{M}{\mu}p^2}} \left[\frac{\partial \delta_l^a(p)}{\partial p}\right]_{1,1} dp. \end{aligned} \quad (\text{D.43})$$

O argumento da exponencial de (D.43) pode ser aproximado por

$$\sqrt{M^2 + \frac{M}{\mu}p^2} = M \sqrt{1 + \frac{p^2}{\mu M}} \simeq M + \frac{p^2}{2\mu}, \quad (\text{D.44})$$

e, no restante desta equação, faremos $\sqrt{M^2 + \frac{M}{\mu}p^2} \simeq M$. Com estas mudanças, (D.43) é reescrita como:

$$\begin{aligned} \left(b_{1,1} - b_{1,1}^{(0)}\right)_{NR} &\simeq \frac{M^2}{2\beta\pi^3} \sqrt{\frac{\pi}{2\beta M}} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g_{1,1}^a (2l+1) \int_0^{\infty} e^{-\beta\left(M + \frac{p^2}{2\mu}\right)} \left[\frac{\partial \delta_l^a(p)}{\partial p}\right]_{1,1} dp \\ &= \frac{e^{-\beta M}}{\pi} \left(\frac{M}{2\pi\beta}\right)^{3/2} \sum_{l;a} g_{1,1}^a (2l+1) \int_0^{\infty} e^{-\beta \frac{p^2}{2\mu}} \left[\frac{\partial \delta_l^a(p)}{\partial p}\right]_{1,1} dp. \end{aligned} \quad (\text{D.45})$$

Finalmente, fazendo $M = 2m$, $\mu = \frac{m}{2}$ (sistema com uma componente) e lembrando a definição do comprimento de onda térmico (2.9), obtemos:

$$\left(b_2 - b_2^{(0)}\right)_{NR} \simeq \frac{e^{-2\beta m}}{\lambda^3} \frac{\sqrt{8}}{\pi} \sum_a \sum_{l=0}^{\infty} g^a (2l+1) \int_0^{\infty} e^{-\beta \frac{p^2}{m}} \left[\frac{\partial \delta_l^a(p)}{\partial p}\right] dp. \quad (\text{D.46})$$

A menos do fator $\frac{e^{-2\beta m}}{\lambda^3}$, esta última expressão é idêntica a equação obtida por Beth e Uhlenbeck em unidades naturais [21]. Este fator aparece pois algumas de nossas definições são diferentes daquelas contidas em [21]. De qualquer forma, os resultados físicos são equivalentes.

Apêndice E

Formalismo de Potenciais Separáveis

O formalismo de potenciais separáveis é um formalismo fenomenológico que permite tratar coerentemente o espalhamento de canais acoplados de onda S . Este formalismo é usualmente utilizado em sistemas envolvendo hádrons [48], sendo particularmente interessante no estudo da espectroscopia mesônica [49, 50, 57]. Considerando um sistema bastante simplificado, mostraremos como é possível utilizar a metodologia de potenciais separáveis para obter informações sobre defasagens.

Suponha um sistema composto por duas espécies distintas de partículas x e y , e que cada uma dessas interaja somente através de dois processos:

$$x + x \rightarrow x + x; \quad y + y \rightarrow y + y; \quad (\text{E.1a})$$

$$x + x \rightarrow y + y; \quad y + y \rightarrow x + x. \quad (\text{E.1b})$$

Este sistema é acoplado e composto por dois canais (dois processos distintos para cada tipo de partícula). Assim sendo, os operadores de espalhamento $\hat{T}$, $\hat{S}$, $\hat{V}$ etc são representados por matrizes 2×2 , e os estados por vetores de duas componentes. A equação de Lippmann-Schwinger, eq. (3.3),

$$|\Psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + \hat{G}^{(0)}\hat{V}|\Psi_s^{(+)}\rangle$$

pode ser reescrita com o auxílio de (D.22), como se segue:

$$\begin{aligned} \langle\psi_p|\hat{V}|\Psi_q^{(+)}\rangle &= \langle\psi_p|\hat{V}|\psi_q\rangle + \langle\psi_p|\hat{V}\hat{G}^{(0)}\hat{V}|\Psi_q^{(+)}\rangle \Rightarrow \\ \langle\psi_p|\hat{T}|\psi_q\rangle &= \langle\psi_p|\hat{V}|\psi_q\rangle + \sum_{r,s} \langle\psi_p|\hat{V}|\psi_r\rangle \langle\psi_r|\hat{G}^{(0)}|\psi_s\rangle \langle\psi_s|\hat{T}|\psi_q\rangle \\ &= \langle\psi_p|\hat{V}|\psi_q\rangle + \sum_s \langle\psi_p|\hat{V}|\psi_s\rangle \langle\psi_s|\hat{G}^{(0)}|\psi_s\rangle \langle\psi_s|\hat{T}|\psi_q\rangle, \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

onde na última passagem usamos o fato de $|\psi_s\rangle$ ser um auto-estado de $\hat{G}^{(0)}$.

Agora, passando para o espaço dos momentos, temos:

$$\langle \vec{p} | \hat{T} | \vec{q} \rangle = \langle \vec{p} | \hat{V} | \vec{q} \rangle + \int \frac{d^3 s}{(2\pi)^3} \langle \vec{p} | \hat{V} | \vec{s} \rangle \langle \vec{s} | \hat{G}^{(0)} | \vec{s} \rangle \langle \vec{s} | \hat{T} | \vec{q} \rangle, \quad (\text{E.3})$$

sendo $\vec{s}$ o momento relativo interno, e $\vec{q}$ e $\vec{p}$ os momentos relativos iniciais e finais respectivamente.

O propagador $\hat{G}^{(0)}$ escrito no referencial do c.m. é representado por uma matriz diagonal,

$$\langle \vec{s} | \hat{G}_{ij}^{(0)} | \vec{s} \rangle = \hat{G}_i^{(0)} \delta_{ij} \quad \text{com} \quad i, j = 1, 2, \quad (\text{E.4})$$

onde

$$\hat{G}_1^{(0)} = \frac{1}{\zeta - 2E_x(s) + i\eta} \quad \text{e} \quad \hat{G}_2^{(0)} = \frac{1}{\zeta - 2E_y(s) + i\eta}, \quad (\text{E.5})$$

com

$$E_x(s) = \sqrt{s^2 + m_x^2} \quad \text{e} \quad E_y(s) = \sqrt{s^2 + m_y^2}. \quad (\text{E.6})$$

A matriz de interação $\hat{V}$ é convenientemente parametrizada através de um forma tipo potencial separável. Utilizando um potencial de rank um no espaço dos momentos temos:

$$V_{ij} \equiv \langle \vec{p} | \hat{V}_{ij} | \vec{q} \rangle = \lambda_{ij} g_i(|\vec{p}|) g_j(|\vec{q}|) \quad \text{com} \quad i, j = 1, 2, \quad (\text{E.7})$$

onde λ_{ij} são as constantes de acoplamento e g são os fatores de forma. V_{ii} é a interação elástica do canal i , e $V_{1,2}$ e $V_{2,1}$ são os processos de transição satisfazendo a seguinte simetria:

$$\langle \vec{p} | \hat{V}_{12} | \vec{q} \rangle = \langle \vec{q} | \hat{V}_{21} | \vec{p} \rangle \quad \text{com} \quad \lambda_{12} = \lambda_{21}. \quad (\text{E.8})$$

Os fatores de forma são escritos na forma de Yamaguchi [68]:

$$g_i(|\vec{p}|) = \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_i}} \frac{1}{\vec{p}^2 + \beta_i^2}, \quad (\text{E.9})$$

sendo μ_i a massa reduzida ($\mu_1 = \frac{m_x}{2}$ e $\mu_2 = \frac{m_y}{2}$) e β_i os parâmetros de escala.

A matriz de interação possui cinco parâmetros livres (dois β 's e três λ 's) que devem ser fixados pelas amplitudes de espalhamento T_{ij} experimentais. Vamos adotar a seguinte forma para as amplitudes de espalhamento:

$$T_{ij} \equiv \langle \vec{p} | \hat{T}_{ij} | \vec{q} \rangle = g_i(|\vec{p}|) t_{ij} g_j(|\vec{q}|), \quad (\text{E.10})$$

onde t_{ij} são as amplitudes reduzidas de espalhamento.

Em (E.10) T_{11} e T_{22} são as amplitudes de espalhamento elásticas (E.1a), e T_{12} e T_{21} são as amplitudes de transição (E.1b).

Agora, substituindo (E.4), (E.7) e (E.10) em (E.3), obtemos

$$t_{ij} = \lambda_{ij} + \lambda_{in} \int \frac{d^3 s}{(2\pi)^3} \left[g_n(|\vec{s}|) \hat{G}_n^{(0)} \delta_{nm} g_m(|\vec{s}|) \right] t_{mj},$$

ou na forma matricial,

$$t = \lambda + \lambda D t. \quad (\text{E.11})$$

Nesta equação, t é a matriz formada pelas componentes t_{ij} , λ é a matriz simétrica das constantes de acoplamento

$$\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.12})$$

e D é a matriz diagonal 2×2 das integrais,

$$D_{ii} = \int \frac{d^3 s}{(2\pi)^3} g_i(|\vec{s}|) \hat{G}_i^{(0)} g_i(|\vec{s}|). \quad (\text{E.13})$$

Veja que o problema original, resolver a equação integral acoplada (E.3), foi repassado para um problema de equações algébricas (E.11), cuja a solução é:

$$t = (1 - \lambda D)^{-1} \lambda. \quad (\text{E.14})$$

Substituindo (E.14) em (E.10), obtemos a solução formal do problema de espalhamento. A conexão entre as componentes da matriz T_{ij} e a matriz S são dadas da forma usual:

$$S_{ij} = \delta_{ij} - 2\pi i \delta(\zeta - E) T_{ij}, \quad (\text{E.15})$$

onde

$$E = 2\sqrt{k_x^2 + m_x^2} = 2\sqrt{k_y^2 + m_y^2}, \quad (\text{E.16})$$

com k 's sendo os momentos dos respectivos canais.

Portanto, uma vez determinadas as componentes S_{ij} , podemos utilizar a parametrização (4.18),

$$S = \begin{pmatrix} \eta e^{2i\delta_{xx}} & i\sqrt{1-\eta^2} e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} \\ i\sqrt{1-\eta^2} e^{i(\delta_{xx}+\delta_{yy})} & \eta e^{2i\delta_{yy}} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.17})$$

para determinar as defasagens δ_{xx} e δ_{yy} e o parâmetro de inelasticidade.

Apêndice F

Ajuste e Gráficos das Funções Defasagens

Os dados de defasagens são parâmetros adimensionais dependentes da energia. Por conveniência, apresentaremos esse dados nas coordenadas do centro de massa, com a energia ω em GeV e as defasagens em radianos. Essas escolhas são compatíveis com as equações da seção 3.2.2.

Todos os 41 ajustes foram feitos com o auxílio do programa *Origin* 6.1 através dos métodos de regressão polinomial ou do ajuste de mínimos quadrados não linear (NLSF). O primeiro desses métodos é baseado em uma generalização direta do procedimento de mínimos quadrados linear, já o segundo (NLSF) é baseado no algoritmo de Levenberg-Marquardt. Ambos os métodos levam em conta as incertezas dos dados experimentais.

Na grande maioria dos ajustes, os dados de defasagens são determinados diretamente, através do procedimento descrito no começo da seção 4.2. Porém, em alguns ajustes, principalmente para as ondas D , é necessário utilizar algum tipo de modelagem fenomenológica. Nestes casos, os dados de defasagens não apresentam incerteza. Indicaremos estes ajustes por um asterisco.

F.1 Espalhamento $\pi\pi$

Os dados de defasagens de $\delta_{0,0}$ e $\delta_{1,1}$ [51, 52] foram obtidos diretamente da alta estatística de dados envolvendo o processo $\pi^- p \rightarrow \pi^- \pi^+ n$. Já os dados de $\delta_{0,2}^*$, $\delta_{2,0}^*$ e $\delta_{2,2}^*$ [51, 53] foram determinados através de modelos baseados na equação de Roy [69, 54].

F.1.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\delta_{0,0}(\omega) = -1.132858 + 4.358887\omega - 0.112062\omega^2 - 4.515628\omega^3 + 3.76166\omega^4, \quad (\text{F.1})$$

$$\delta_{0,2}^*(\omega) = -0.029702 + 1.229285\omega - 6.672552\omega^2 + 12.624014\omega^3 - 13.389099\omega^4 + 8.571587\omega^5 - 3.111867\omega^6 + 0.483548\omega^7. \quad (\text{F.2})$$

Gráficos:

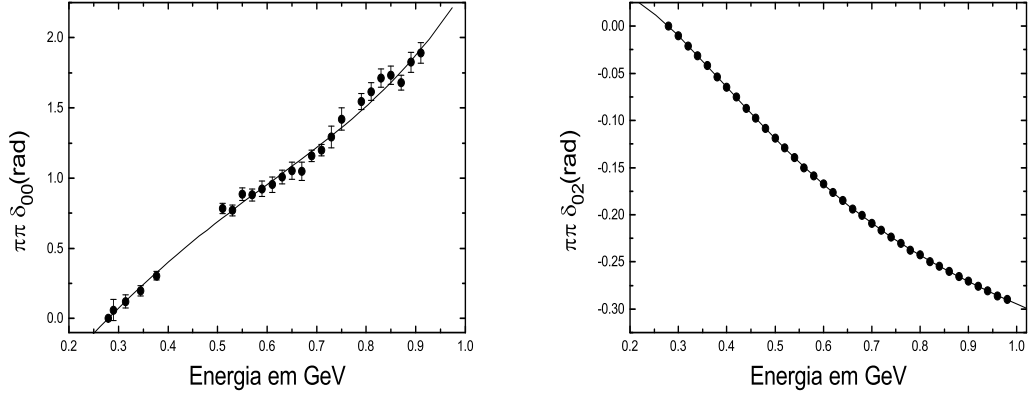


Figura F.1: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento $\pi\pi$.

F.1.2 Onda P

Defasagem ajustada:

$$\delta_{1,1}(\omega) = \frac{0.07042 - 2.79827}{1 + \exp[(\omega - 0.75768)/0.05678]} + 2.79827. \quad (\text{F.3})$$

Gráfico:

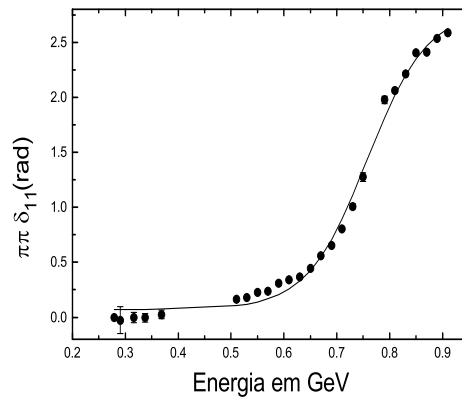


Figura F.2: Gráficos das defasagens de onda P para o espalhamento $\pi\pi$.

F.1.3 Onda D

Defasagens ajustadas:

$$\delta_{2,0}^*(\omega) = -0.016565 + 0.14846\omega - 0.45934\omega^2 + 0.497882\omega^3, \quad (\text{F.4})$$

$$\delta_{2,2}^*(\omega) = 0.008252 - 0.057238\omega + 0.129435\omega^2 - 0.104496\omega^3. \quad (\text{F.5})$$

Gráficos:

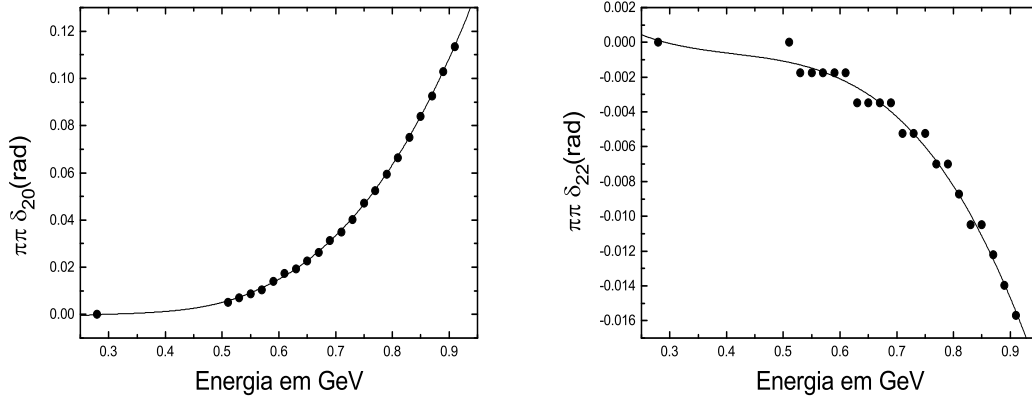


Figura F.3: Gráficos das defasagens de onda D para o espalhamento $\pi\pi$.

F.2 Espalhamento πK

Os dados das defasagens $\delta_{0,1}$, $\delta_{0,3}$, $\delta_{1,1}$ e $\delta_{1,3}$ [55] foram obtidos diretamente da alta estatística de dados envolvendo os processos $K^\pm p \rightarrow K^\pm \pi^+ n$ e $K^\pm p \rightarrow K^\pm \pi^- \Delta^{++}$.

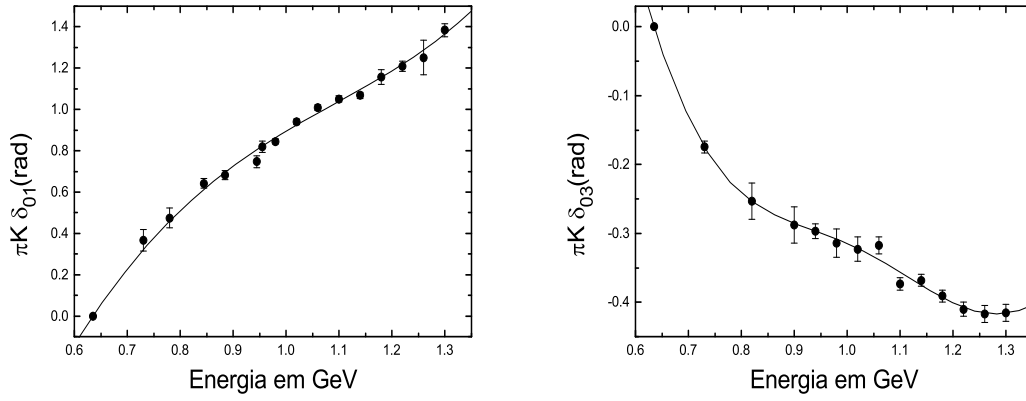
F.2.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\delta_{0,1}(\omega) = -5.010247 + 12.653939\omega - 8.279988\omega^2 + 0.683122\omega^3 + 0.846503\omega^4, \quad (\text{F.6})$$

$$\begin{aligned} \delta_{0,3}(\omega) = & -13.930392 + 119.285105\omega - 372.666628\omega^2 + 571.767394\omega^3 \\ & -466.993773\omega^4 + 194.961483\omega^5 - 32.738034\omega^6. \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

Gráficos:


 Figura F.4: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento πK .

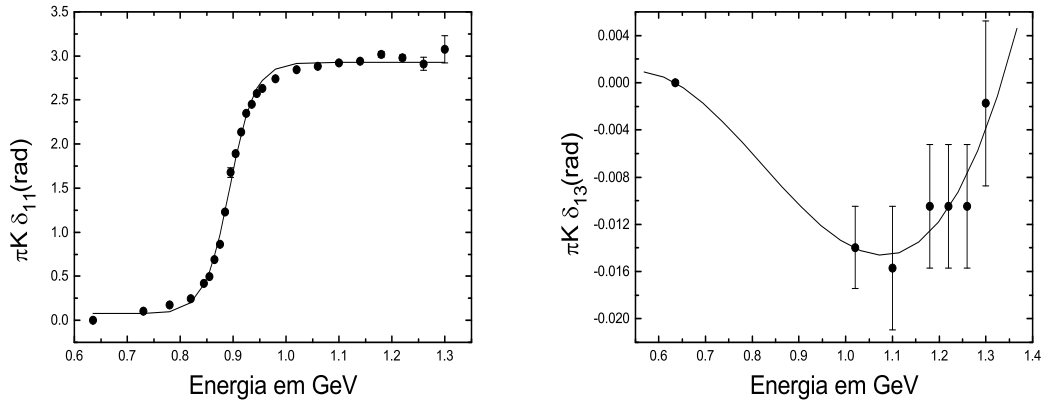
F.2.2 Onda P

Defasagens ajustadas:

$$\delta_{1,1}(\omega) = \frac{0.07488 - 2.92577}{1 + \exp[(\omega - 0.89358)/0.02386]} + 2.92577, \quad (\text{F.8})$$

$$\delta_{1,3}(\omega) = -0.090561 + 0.395993\omega - 0.538057\omega^2 + 0.218985\omega^3. \quad (\text{F.9})$$

Gráficos:


 Figura F.5: Gráficos das defasagens de onda P para o espalhamento πK .

F.3 Espalhamento πN

Todas as dez defasagens [56] foram obtidas da alta estatística de dados envolvendo os processos $\pi^\pm p \rightarrow \pi^\pm p$ e $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$. Dessas dez, apenas uma defasagem $\delta_{D,3,5}^*$ necessitou de extrapolação numérica.

F.3.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\begin{aligned}\delta_{S,1,1}(\omega) = & -19891.64 + 93084.73\omega - 181040.1\omega^2 + 187292\omega^3 \\ & -108688.2\omega^4 + 33541.75\omega^5 - 4299.919\omega^6,\end{aligned}\quad (\text{F.10})$$

$$\begin{aligned}\delta_{S,3,1}(\omega) = & 673.417002 - 2583.61\omega + 3953.457\omega^2 \\ & -3013.391\omega^3 + 1143.012\omega^4 - 172.518152\omega^5.\end{aligned}\quad (\text{F.11})$$

Gráficos:

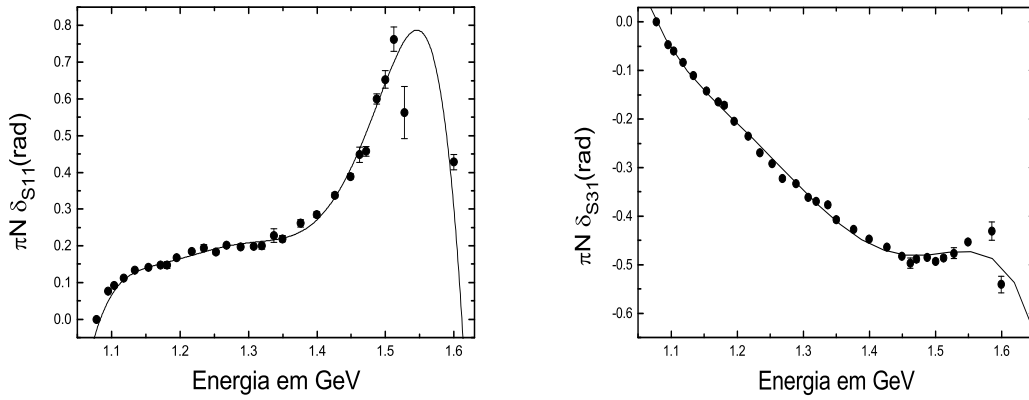


Figura F.6: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento πN .

F.3.2 Onda P

Defasagens ajustadas:

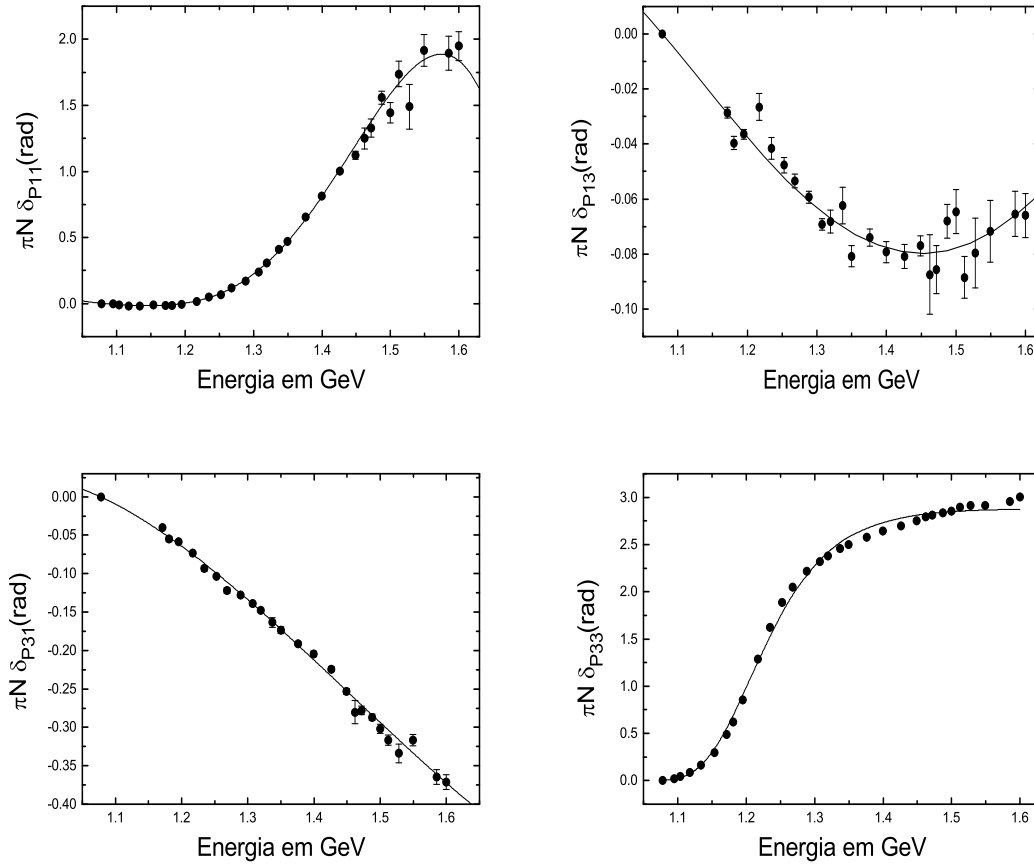
$$\begin{aligned}\delta_{P,1,1}(\omega) = & 1669.987 - 7609.227\omega + 14234.2\omega^2 - 13947\omega^3 \\ & + 7517.832\omega^4 - 2102.275\omega^5 + 236.577322\omega^6,\end{aligned}\quad (\text{F.12})$$

$$\delta_{P,3,1}(\omega) = -2.128929 + 5.523651\omega - 4.378075\omega^2 + 1.007458\omega^3, \quad (\text{F.13})$$

$$\delta_{P,1,3}(\omega) = -3.554699 + 11.546912\omega - 13.204036\omega^2 + 6.296532\omega^3 - 1.063763\omega^4, \quad (\text{F.14})$$

$$\delta_{P,3,3}(\omega) = 2.87771 \exp[-\exp[-15.26877(\omega - 1.20441)]]. \quad (\text{F.15})$$

Gráficos:


 Figura F.7: Gráficos das defasagens de onda P para o espalhamento πN .

F.3.3 Onda D

Defasagens ajustadas:

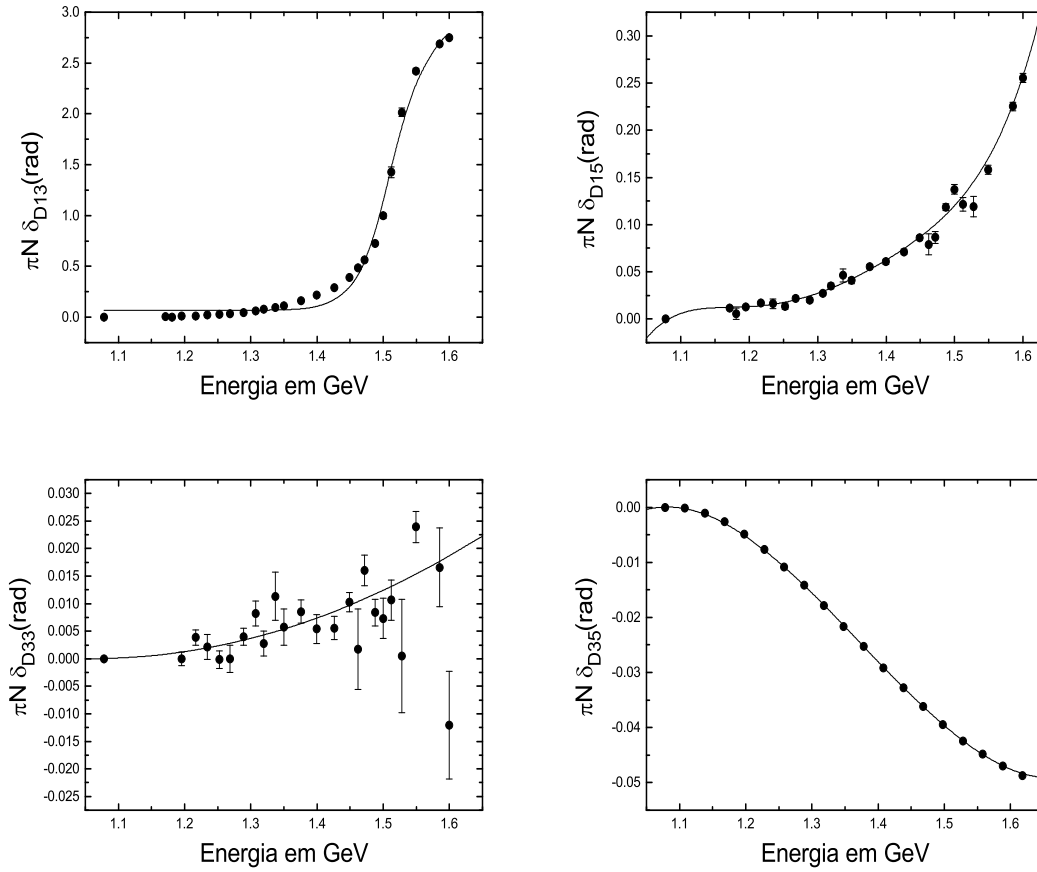
$$\delta_{D,1,3}(\omega) = \frac{0.06791 - 2.87854}{1 + \exp[(\omega - 1.51256)/0.02554]} + 2.87854, \quad (\text{F.16})$$

$$\begin{aligned} \delta_{D,1,5}(\omega) = & -219.422866 + 841.266327\omega - 1285.647\omega^2 \\ & + 979.249716\omega^3 - 371.927398\omega^4 + 56.396786\omega^5, \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

$$\delta_{D,3,3}(\omega) = 0.072127 - 0.136091\omega + 0.064177\omega^2, \quad (\text{F.18})$$

$$\delta_{D,3,5}^*(\omega) = -1.132955 + 2.676234\omega - 2.041967\omega^2 + 0.495786\omega^3. \quad (\text{F.19})$$

Gráficos:


 Figura F.8: Gráficos das defasagens de onda D para o espalhamento πN .

F.4 Espalhamento KK

Os dados de $\delta_{0,0}^*$ foram determinados através do modelo de potenciais separáveis de três canais acoplados ($\pi\pi$, $K\bar{K}$ e um sistema efetivo $2\pi 2\pi$). Para tanto, utilizamos o modelo “down-flat” (ajuste B)* presente na referência [57], e os dados de defasagens experimentais do espalhamento pión-pión [53]. Já os dados $\delta_{0,1}^*$ foram determinados com o auxílio do modelo de potenciais separáveis (apêndice E) de dois canais acoplados ($\pi\eta$ e $K\bar{K}$). Utilizamos os resultados presentes no diagrama de Argand das amplitudes de espalhamento do processo $K\bar{K}$ (figura 3 da referência [58]).

*Segundo a referência citada, este é o modelo que apresenta o menor χ^2 .

F.4.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\begin{aligned} \delta_{0,0}^*(\omega) = & 12014.5 - 56132.47\omega + 108662.5\omega^2 - 111524.1\omega^3 \\ & + 63983.09\omega^4 - 19451.61\omega^5 + 2447.86\omega^6, \end{aligned} \quad (\text{F.20})$$

$$\delta_{0,1}^*(\omega) = \frac{0.00278 - 2.54757}{1 + \exp[(\omega - 1.45946)/0.02376]} + 2.54757. \quad (\text{F.21})$$

Gráficos:

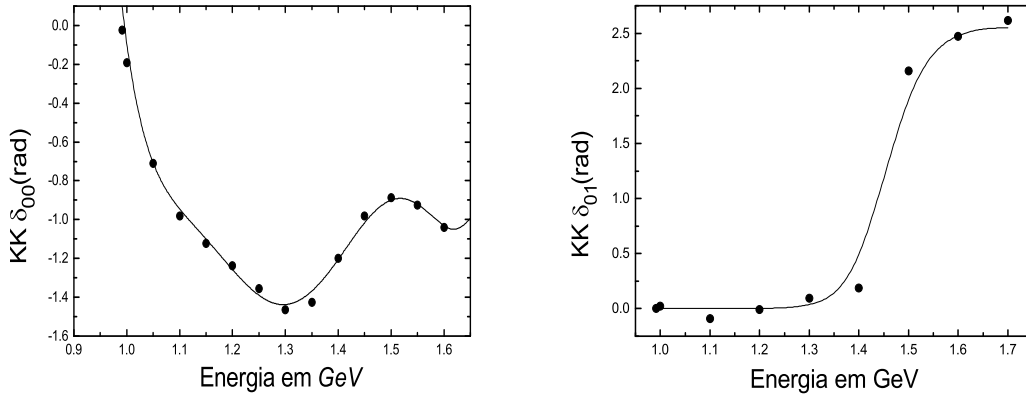


Figura F.9: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento KK .

F.5 Espalhamento KN

Todas as dez defasagens [56] foram obtidas da alta estatística de dados envolvendo os processos $K^+p \rightarrow K^+p$ e $KN \rightarrow KN$ para $I = 0$. Dessas dez, apenas duas defasagens $\delta_{D,0,5}^*$ e $\delta_{D,1,5}^*$ necessitaram de extrapolação numérica.

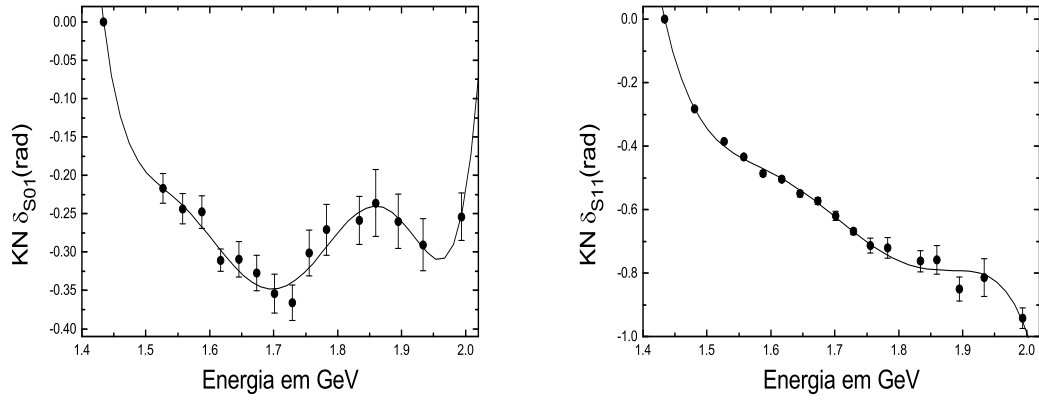
F.5.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\begin{aligned} \delta_{S,0,1}(\omega) = & 50267.64 - 178690.3\omega + 264013.5\omega^2 - 207513.2\omega^3 \\ & + 91508.23\omega^4 - 21464.9\omega^5 + 2092.334\omega^6, \end{aligned} \quad (\text{F.22})$$

$$\begin{aligned} \delta_{S,1,1}(\omega) = & 6004.093 - 17599.4\omega + 20587.44\omega^2 \\ & - 12012.36\omega^3 + 3495.58\omega^4 - 405.826999\omega^5. \end{aligned} \quad (\text{F.23})$$

Gráficos:


 Figura F.10: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento KN .

F.5.2 Onda P

Defasagens ajustadas:

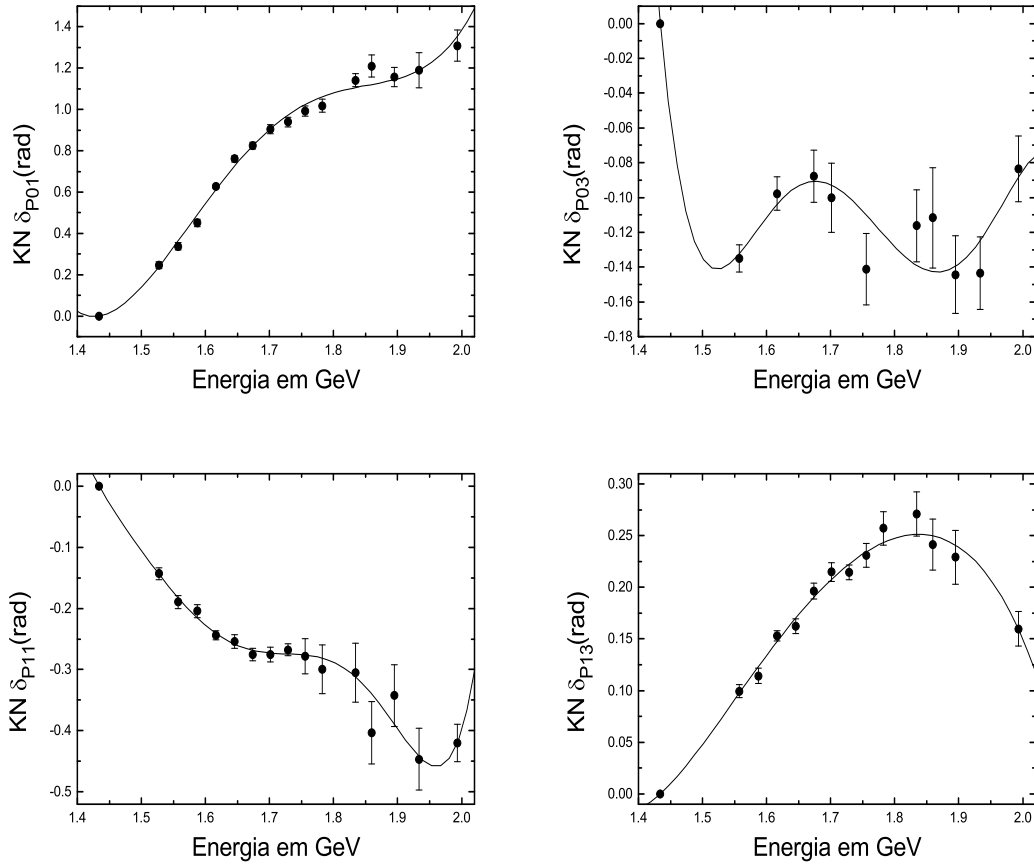
$$\delta_{P,0,1}(\omega) = 703.681387 - 1680.615\omega + 1492.044\omega^2 - 583.885909\omega^3 + 85.115229\omega^4, \quad (\text{F.24})$$

$$\begin{aligned} \delta_{P,0,3}(\omega) = & 2430.09 - 6953.847\omega + 7927.335\omega^2 \\ & - 4500.485\omega^3 + 1272.411\omega^4 - 143.328512\omega^5, \end{aligned} \quad (\text{F.25})$$

$$\begin{aligned} \delta_{P,1,1}(\omega) = & 11068.27 - 40800.07\omega + 62502.72\omega^2 - 50919.19\omega^3 \\ & + 23261.34\omega^4 - 5648.875\omega^5 + 569.634896\omega^6, \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

$$\begin{aligned} \delta_{P,1,3}(\omega) = & 208.051732 - 605.068347\omega + 701.39975\omega^2 \\ & - 406.388106\omega^3 + 118.086597\omega^4 - 13.801404\omega^5. \end{aligned} \quad (\text{F.27})$$

Gráficos:


 Figura F.11: Gráficos das defasagens de onda P para o espalhamento KN .

F.5.3 Onda D

Defasagens ajustadas:

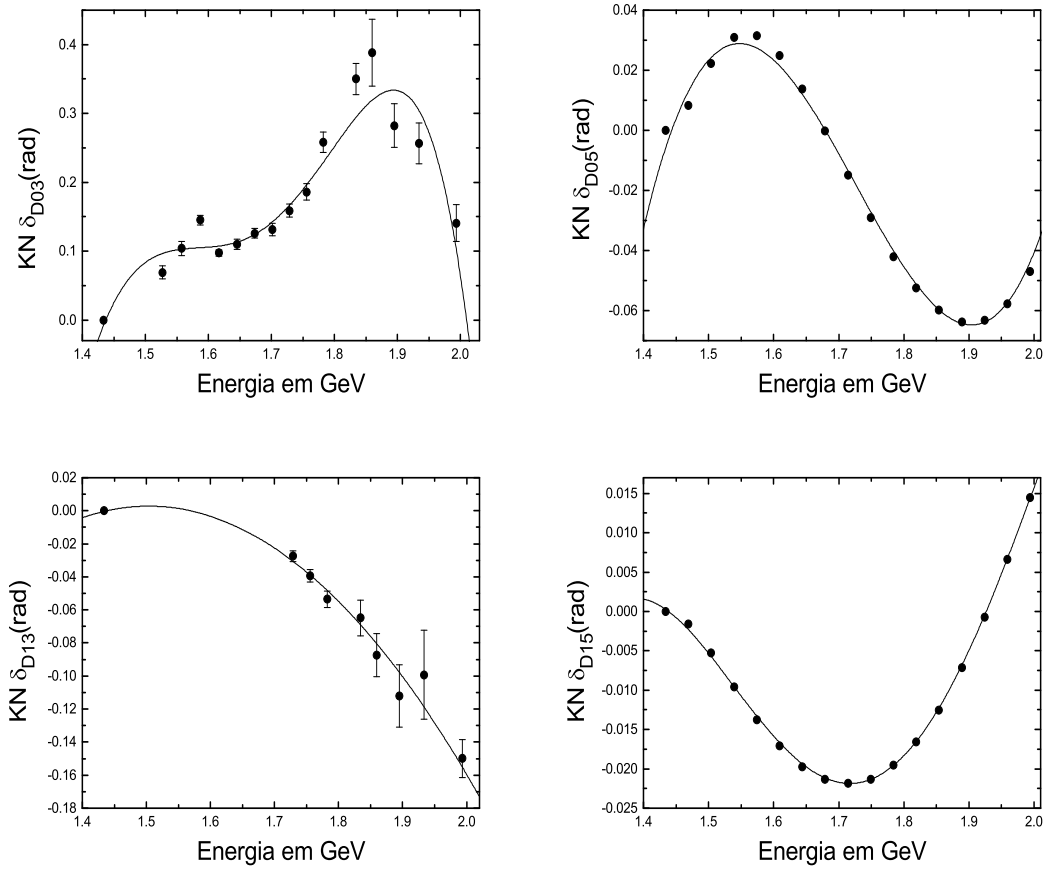
$$\begin{aligned} \delta_{D,0,3}(\omega) = & 26.159145 - 387.62811\omega + 835.631703\omega^2 \\ & - 721.176219\omega^3 + 280.868146\omega^4 - 41.182139\omega^5, \end{aligned} \quad (\text{F.28})$$

$$\delta_{D,0,5}^*(\omega) = -20.612684 + 36.598027\omega - 21.437223\omega^2 + 4.140426\omega^3, \quad (\text{F.29})$$

$$\delta_{D,1,3}(\omega) = -1.484074 + 1.978638\omega - 0.6581\omega^2, \quad (\text{F.30})$$

$$\delta_{D,1,5}^*(\omega) = -13.719111 + 32.614659\omega - 28.60751\omega^2 + 10.957694\omega^3 - 1.545377\omega^4. \quad (\text{F.31})$$

Gráficos:


 Figura F.12: Gráficos das defasagens de onda D para o espalhamento KN .

F.6 Espalhamento NN

Todas as dez defasagens [56] foram obtidas diretamente da alta estatística de dados envolvendo o espalhamento elástico $p + n \rightarrow p + n$.

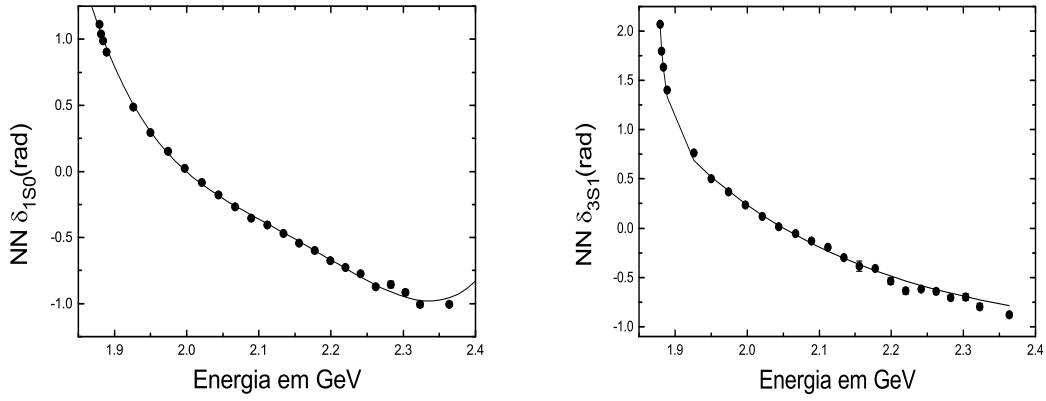
F.6.1 Onda S

Defasagens ajustadas:

$$\delta_{1,S,0}(\omega) = 3366.417 - 6250.75\omega + 4354.125\omega^2 - 1348.071\omega^3 + 156.44657\omega^4, \quad (\text{F.32})$$

$$\begin{aligned} \delta_{3,S,1}(\omega) = & -1.1293 + 3.42101 \exp[-(\omega - 1.75742)/0.26432] \\ & + 195476.02507 \exp[-(\omega - 1.75742)/0.01001]. \end{aligned} \quad (\text{F.33})$$

Gráficos:


 Figura F.13: Gráficos das defasagens de onda S para o espalhamento NN .

F.6.2 Onda P

Defasagens ajustadas:

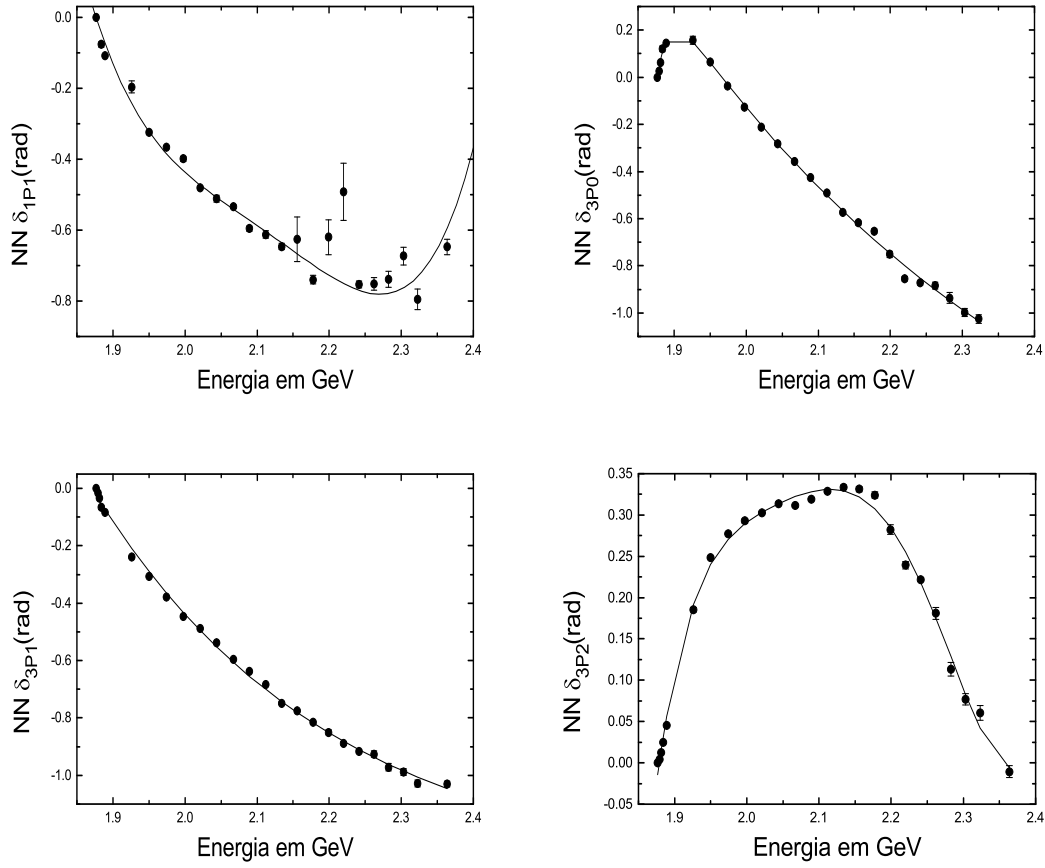
$$\delta_{1,P,1}(\omega) = 1992.727 - 3774.991\omega + 2682.298\omega^2 - 847.179203\omega^3 + 100.316207\omega^4, \quad (\text{F.34})$$

$$\delta_{3,P,0}(\omega) = -2.196938 + 2.73697((1 - \exp[-(\omega - 1.84376)/0.01611])^{1.17758}) \times \exp[-(\omega - 1.84376)/0.55931], \quad (\text{F.35})$$

$$\delta_{3,P,1}(\omega) = -1.34464 + 2.56031 \exp[-(\omega - 1.4321)/0.32573] + 2.56031 \exp[-(\omega - 1.4321)/0.33007], \quad (\text{F.36})$$

$$\delta_{3,P,2}(\omega) = -19679.81714 + 44006.08475\omega - 36357.3577\omega^2 + 11232.4462\omega^3 + 1435.90917\omega^4 - 1897.27921\omega^5 + 467.14906\omega^6 - 38.44806\omega^7. \quad (\text{F.37})$$

Gráficos:


 Figura F.14: Gráficos das defasagens de onda P para o espalhamento NN .

F.6.3 Onda D

Defasagens ajustadas:

$$\begin{aligned} \delta_{1,D,2}(\omega) = & -79416.6831 + 19484.7716\omega - 177685.8749\omega^2 + 60871.9257\omega^3 \\ & + 9096.5973\omega^4 - 13396.5589\omega^5 + 3817.5819\omega^6 - 372.5589\omega^7, \quad (\text{F.38}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{3,D,1}(\omega) = & 51383.5211 - 116892.7245\omega + 89283.036\omega^2 - 9263.4498\omega^3 \\ & - 24833.0348\omega^4 + 15408.6021\omega^5 - 3755.7247\omega^6 + 343.724\omega^7, \quad (\text{F.39}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{3,D,2}(\omega) = & -53145.2014 + 129641.9637\omega - 119060.8609\omega^2 + 43320.916\omega^3 \\ & + 3117.2286\omega^4 - 7495.7043\omega^5 + 2208.7647\omega^6 - 217.4704\omega^7, \quad (\text{F.40}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{3,D,3}(\omega) = & -44261.827 + 107432.1624\omega - 93338.8443\omega^2 + 24268.4340\omega^3 \\ & + 13061.758\omega^4 - 10992.9672\omega^5 + 2928.417\omega^6 - 281.4561\omega^7. \quad (\text{F.41}) \end{aligned}$$

Gráficos:

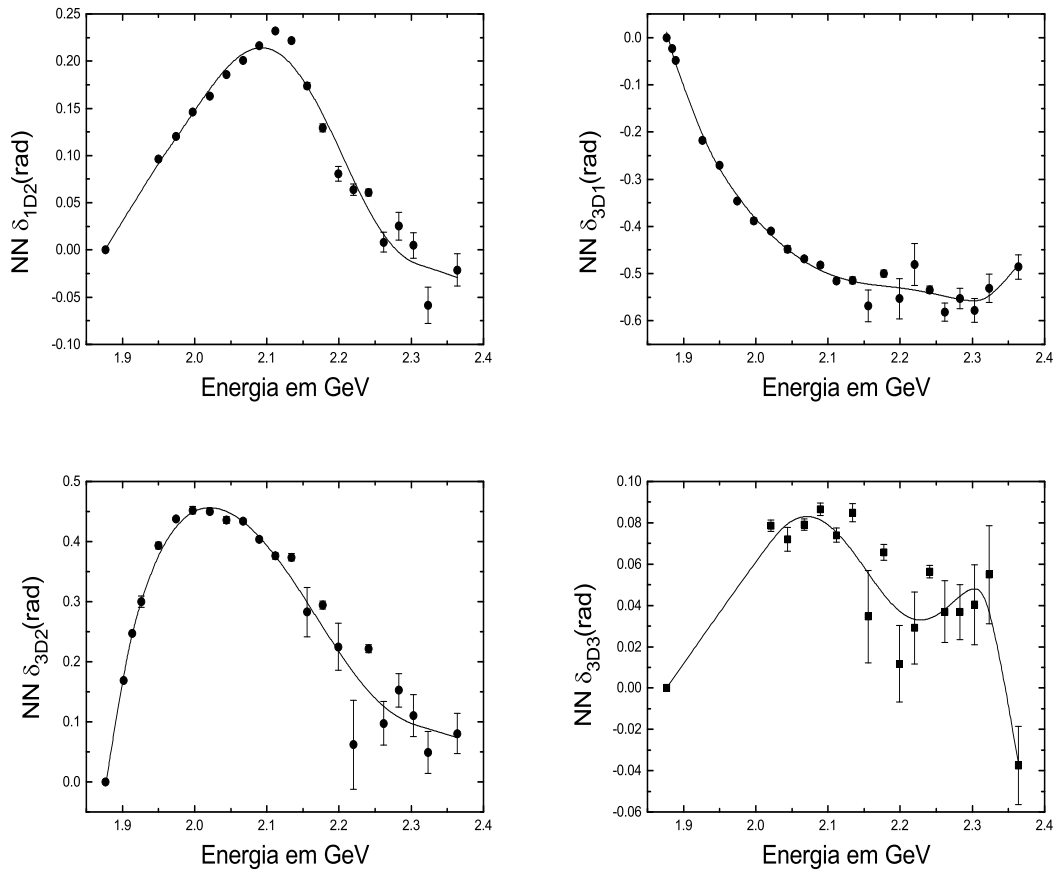


Figura F.15: Gráficos das defasagens de onda D para o espalhamento NN .

Referências

- [1] V. Narlikar, *Introduction to Cosmology*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [2] P. A. M. Dirac, *The theory of gravitation in Hamiltonian form*, Proceeding of Royal Society **A246**, 333 (1958) – P. A. M. Dirac, *Fixation of Coordinates in the Hamiltonian Theory of Gravitation*, Physical Review **114**, 924 (1959).
- [3] A. Friedmann, *Über die krummung des reumes*, Zeitschrift für Physikalische Chemie **10**, 377 (1924) e Zeitschrift für Physikalische Chemie **21**, 326 (1924) – A. G. Lemaître, *A homogeneous universe of a constant mass and increasing radius accounting for the radial velocity of extragalactic nebulae*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **91**, 483 (1931).
- [4] H. P. Robertson, *Kinematics and world structure*, The Astrophysical Journal **82**, 248 (1935) – A. G. Walker, *On Milne's theory of world-structure*, Proceedings of the London Mathematical Society **42**, 90 (1936).
- [5] R. Balescu, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, New York, 1975.
- [6] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology. Principles and Applications of The General Theory of Relativity*, John Wiley and Sons, New York, 1972.
- [7] R. Aldrovandi, R. R. Cuzinatto and L. G. Medeiros, *Analytic solutions for the Λ -FRW model*, Foundations of Physics **36**, 1736 (2006); [gr-qc/0508073].
- [8] S. Dodelson, *Modern Cosmology: Anisotropies and Inhomogeneities in the Universe*, Academic Press, United States of America, 2003.
- [9] E. W. Kolb and M. S. Turner, *The Early Universe*, Perseus Books, United States of America, 1994.
- [10] R. Aldrovandi, R. R. Cuzinatto, L. G. Medeiros, *Interacting Constituents in Cosmology*, 2007; [gr-qc/0705.1369].

- [11] J. Bernstein, *Kinetic Theory in the Expanding Universe*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [12] R. Aldrovandi, J. Gariel & G. Marçilhac, *On the pre-nucleosynthesis cosmological period*, (2002); [gr-qc/0203079].
- [13] A. Díez-Tejedor and A. Feinstein, *Accelerating Universes from Short-Range Interactions*, Physics Letters **A350**, 315 (2006); [gr-qc/0505105].
- [14] E. L. Schücking & E. A. Spiegel, *Comments on Astrophysics and Space Physics* **2**, 1970.
- [15] D. N. Spergel et al, *First year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) observations: determination of cosmological parameters*, The Astrophysical Journal Supplement **148**, 175 (2003); [astro-ph/0302209].
- [16] D. Rapetti, S. W. Allen, M. A. Amin, R. D. Blandford, *A kinematical approach to dark energy studies*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **375**, 1510 (2007); [astro-ph/0605683] – S. Permuter et al, *Discovery of a supernova explosion at half the age of the universe*, Nature **391**, 51 (1998); [astro-ph/ 9712212] – A. G. Riess et al., *Observational Evidence from Supernovae for an accelerating universe and cosmological constant*, The Astronomical Journal **116**, 1009 (1998); [astro-ph/9805201].
- [17] W. L. Freedman et al., *Final Results from the Hubble Space Telescope Key Project to Measure the Hubble Constant*, The Astrophysics Journal **553**, 47 (2001).
- [18] Relativistic Heavy Ion Collider, site - <http://www.bnl.gov/rhic/>.
- [19] E. Iancu & R. Venugopalan, *The Color Glass Condensate and High Energy Scattering in QCD*, review for QGP3; [hep-ph/0303204].
- [20] A. R. Liddle e D. H. Lyth, *Cosmological Inflation and Large-Scale Structure*, University Press, Cambridge, 2000.
- [21] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2nd. ed., Butterworth Heinemann, Oxford, 1996.
- [22] Particle Data Group, site - <http://pdg.lbl.gov/>.
- [23] W. L. Freedman e M. S. Turner, *Measuring and Understanding the Universe*, Reviews of Modern Physics **75**, 1433 (2003); [astro-ph/0308418].

- [24] D. J. Fixsen et al., *The Cosmic Microwave Background Spectrum from the full COBE FIRAS data set*, The Astrophysical Journal **473**, 576 (1996).
- [25] S. Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1966.
- [26] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, University of Texas Press, Austin, 1980.
- [27] M. L. Bellac, *Thermal Field Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [28] J. I. Kapusta, *Finite Temperature Field Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 1989.
- [29] J. E. Mayer et al, *The Statistical Mechanics of Condensing Systems*, Journal of Chemical Physics **5**, 67, 74, (1937).
- [30] E. Beth & G. E. Uhlenbeck, *The Quantum Theory of the Non-Ideal Gas I: Deviations from the classical theory*, Physica **3**, 729 (1936).
- [31] E. Beth & G. E. Uhlenbeck, *The Quantum Theory of the Non-Ideal Gas II: Behaviour at Low Temperatures*, Physica **4**, 915 (1937).
- [32] T. D. Lee & C. N. Yang, *Many-Body Problem in Quantum Statistical Mechanics*, Physical Review **113**, 1165; **116**, 25, (1959).
- [33] R. Dashen, S-K. Ma & J. Bernstein, *S-Matrix Formulation of Statistical Mechanics*, Physical Review **187**, 345, (1969). Errata – Physical Review **A6**, 851 (1972).
- [34] R. Aldrovandi, *Special Matrices of Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, 2001.
- [35] R. H. Fowler, *Statistical Mechanics*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1955.
- [36] H. M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 2*, 3rd ed., Edgard Blücher, São Paulo, 1996.
- [37] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley and Sons, New York, 1954.

- [38] H.B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2d ed., John Wiley and Sons, New York, 1985.
- [39] Para o H_2 , A. Michels & H. Goudeket, *Physica* **8**, 347 (1941) – para He , A. Michels & H. Wouters, *Physica* **8**, 923 (1941) – para Ne , L. Holborn & J. Otto, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* **33**, 1 (1925) – para A , A. Michels, Hub. Wijker & Hk. Wijker, *Physica* **15**, 627 (1949) – para N_2 A. Michels, H. Wouters & J. de Boer, *Physica* **1**, 587 (1934) – para CH_4 , A. Michels & G. W. Nederbragt, *Physica* **3**, 569 (1936).
- [40] C. R. Smith, R. Inguva & K. D. Lain, *S-Matrix Theory of Reacting Plasmas*, *Physical Review* **A23**, 3285, (1981).
- [41] T. A. Osborn, *Multispecies Cluster Expansion for the Grand Partion Function*, *Physical Review* **A16**, 334, (1977).
- [42] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd. ed., John Wiley and Sons, New York, 1998.
- [43] R. Dashen & S-K. Ma, *Singular Three-Body Amplitudes in the Third Virial Coefficient*, *Journal of Mathematical Physics* **11**, 1136 (1970) – R. Dashen & S-K. Ma, *Singularities in Forward Multiparticle Scattering Amplitudes and the S-Matrix Interpretation of Higher Virial Coefficients*, *Journal of Mathematical Physics* **12**, 689 (1971).
- [44] I. S. Gradshteyn & I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products*, 4th ed., Academic Press, New York, 1965.
- [45] D. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*, John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [46] P. Becher, M. Böhm e H. Joos, *Gauge Theories of strong and Electroweak interactions*, ed. John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [47] A. Tawfik, *The QCD phase diagram: A comparison of lattice and hadron resonance gas model calculations*, *Physical Review* **D71**, 54502 (2005); [hep-ph/0412336] – F. Karsch, *Lattice Results on QCD Thermodynamics*, *Nuclear Physics* **A698**, 199 (2002).
- [48] J. T. Londergan et al., *Off-Shell πN Amplitudes via a Multichannel Separable Potential*, *Annals of Physics* **86**, 147 (1974).

- [49] L. Leśniak, *Meson Spectroscopy and Separable Potentials*, Acta Physica Polonica **B8**, 1835 (1996).
- [50] R. Kamiński & L. Leśniak, *Relativistic effects in scalar meson dynamics*, Physical Review **D50**, 3145 (1994).
- [51] P. Estabrooks & A. D. Martin, *$\pi\pi$ Phase-Shift Analysis Below the $K\bar{K}$ Threshold*, Nuclear Physics **B79**, 301 (1974).
- [52] L. Rosselet et al, *Experimental study of 30 000 $Ke4$ decays*, Physical Review **D15**, 574 (1977) .
- [53] C. D. Froggatt & J. L. Petersen, *Phase-Shift Analysis of $\pi^+\pi^-$ Scattering Between 1.0 and 1.8 GeV Based on Fixed Momentum Transfer Analyticity (II)*, Nuclear Physics **B129**, 89 (1977).
- [54] J. L. Basdevant, C. D. Froggatt & J. L. Petersen, *Construction of Phenomenological $\pi\pi$ Amplitudes*, Nuclear Physics **B72**, 413 (1974).
- [55] P. Estabrooks et al, *Study of $K\pi$ Scattering Using the Reactions $K^\pm p \rightarrow K^\pm \pi^+ n$ and $K^\pm p \rightarrow K^\pm \pi^- \Delta^{++}$ at 13 GeV/c*, Nuclear Physics **B133**, 490 (1978).
- [56] Center for Nuclear Studies (Said Program), site: <http://gwdac.phys.gwu.edu/>, dados on line.
- [57] R. Kamiński, L. Leśniak & B. Loiseau, *Three channel model of meson-meson scattering and scalar meson spectroscopy*, Physics Letters **B413**, 130 (1997).
- [58] A. Furman & L. Leśniak, *Coupled channel study of a_0 resonances*, Physics Letters **B538**, 266 (2002).
- [59] M. Sander & H. V. von Geramb, *$\pi\pi$, $K\pi$, and πN potential scattering and a prediction of a narrow σ meson resonance*, Physical Review **C56**, 1218 (1997).
- [60] D. H. Rischke, *The Quark-Gluon Plasma in Equilibrium*, Progress in Particle and Nuclear Physics **52**, 197 (2004); [nucl-th/0305030].
- [61] A. Tawfik, *Black Box QGP*, (2006); [hep-ph/0604037].
- [62] H. Enge, *Introduction to Nuclear Physics*, Addison-Wesley, Massachusetts, 1966.

- [63] R. Reid, *Local Phenomenological Nucleon-Nucleon Potentials*, Annals of Physics **50**, 411 (1968).
- [64] T. Hamada & I. D. Johnston, *A Potential Model Representation of Two-Nucleon Data Below 315 MeV*, Nuclear Physics **34**, 382 (1962).
- [65] K.R.S. Balaji et al., *Dynamical CP Violation in the Early Universe*, Physics Letters **B595**, 22 (2004); [hep-ph/040314] – K.R.S. Balaji et al., *Dynamical CP Violation in the Early Universe and Leptogenesis*, Physical Review **D72**, 56005 (2005); [hep-ph/050613].
- [66] A.D. Dolgov, *Baryogenesis, 30 Years after*, (1997); [hep-ph/9707419].
- [67] A.G. Cohen, A. De Rujula & S.L. Glashow, *A Matter-Antimatter Universe?*, The Astrophysics Journal **495**, 539 (1998); [astro-ph/9707087].
- [68] Y. Yamaguchi & Y. Yamaguchi, *Two-Nucleon Problem When the Potential Is Nonlocal but Separable*, Physical Review **95**, 1635 (1954).
- [69] S. M. Roy, *Exact Integral Equation for Pion-Pion Scattering Involving only Physical Region Partial Waves*, Physics Letters **B36**, 353 (1971).