

TRANSIÇÃO DE FASE NA MATÉRIA NUCLEAR ASSIMÉTRICA



INSTITUTO DE FÍSICA

Universidade Federal Fluminense

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre em Física

Autora: Mariana Dutra da Rosa

Orientador: Dr. Antônio Delfino Jr.

Niterói - Rio de Janeiro

2007

“O valor das coisas não está no tempo que elas duram, mas na intensidade com que acontecem. Por isso existem momentos inesquecíveis, coisas inexplicáveis e pessoas incomparáveis.”

Fernando Pessoa.

Agradecimentos

A Deus por ter me guiado até aqui. Ao meu orientador Antônio Delfino, por toda a dedicação, paciência e estímulo. A Odilon Lourenço pela enorme ajuda, compreensão, amor e carinho. À minha família por todo o apoio: à minha irmã Fernanda, pelas perguntas que me faziam pensar dias e dias, ao meu pai José Dutra e à minha mãe Rosely. Ao professor Jorge Sá Martins por toda assistência. Aos meus amigos Bárbara Kelly, Carlos Eduardo e Marisa Makler. Às funcionárias da biblioteca do instituto de Física Ana Maria, Lúcia Regia, Irani e Léia; à secretaria de pós-graduação. À agência CAPES pelo suporte financeiro. Por fim, agradeço a todos que de alguma maneira me ajudaram a concluir esse trabalho.

Resumo

Nesse trabalho estudamos as propriedades termodinâmicas de sistemas nucleares assimétricos para uma fração de prótons arbitrária. Usamos o modelo de Skyrme onde os efeitos de superfície e coulombiano são incluídos, fenomenologicamente, para tratar núcleos finitos. A inclusão desses efeitos também é discutida. Analisamos as instabilidades química e mecânica como função do parâmetro de assimetria. Calculamos as incompressibilidades isotérmica e adiabática, assim como os calores específicos por nucleon à pressão e volume constante como função da fração de prótons. As superfícies de coexistência (binodais) são construídas para diferentes temperaturas e uma discussão sobre a ordem da transição de fase é realizada. Aplicações para um conjunto de núcleos finitos, levando em conta seus parâmetros críticos são apresentadas.

Abstract

In this work the thermodynamic properties of an asymmetric nuclear system with arbitrary proton fraction are studied. We employ a Skyrme model in which surface and Coulombian effects are phenomenologically included to treat finite nuclei. The effect of including surface and Coulomb terms is also discussed. We analyze the chemical and mechanical instabilities as a function of the asymmetry parameter. The isothermal and adiabatic incompressibilities as well as the specific heat at constant pressure and volume per nucleon as a function of the proton fraction are calculated. The coexistence surfaces (binodals) for different temperatures are constructed and the discussion about the order of the phase transition is made. Applications for a set of finite nuclei taking their critical parameters into account are presented.

Sumário

Introdução	1
1 Equações de Estado da Matéria Nuclear Assimétrica	7
1.1 Potenciais Químicos e Energia Livre de Gibbs	15
1.2 Entropia	18
1.3 Energia por Partícula e Energia Livre de Helmholtz	19
1.3.1 Energia por Partícula	19
1.3.2 Energia Livre de Helmholtz	19
2 Regiões de Instabilidade	28
2.1 Spinodal Mecânica	28
2.2 Spinodal Química	30
2.3 Ponto Pseudo-crítico	32
2.4 Energia Livre de Gibbs-Landau	35
3 Incompressibilidade e Calor Específico	38
3.1 Incompressibilidade Isotérmica	39
3.2 Incompressibilidade Adiabática	42
3.3 Relação entre Incompressibilidade e Calor Específico por Partícula . .	46
4 Coexistência de Fases	48
4.1 Critério de Gibbs para Sistemas Binários	48
4.2 Obtenção dos Pontos de Coexistência: Binodal	50
4.3 Regiões de Metaestabilidade	54

4.4	Visualização da Coexistência de Fases na Construção de Maxwell . . .	56
4.5	Linhas de Pontos Críticos e de Igual Concentração	64
4.6	Superfície Binodal	67
5	Ordem da Transição de Fase	69
5.1	Comportamento da Transição em Sistemas Simétricos	71
5.2	Comportamento da Transição em Sistemas Assimétricos	74
6	Aplicações	84
	Conclusões	87
A	Expansão do Virial para a EOS	92
A.1	Potencial de Lennard-Jones	93
B	Equação de van der Waals	95
B.1	Equação de Estado	95
B.2	Parâmetros Críticos	96
B.3	Lei dos Estados Correspondentes	97
C	Equação da Matéria Nuclear Simétrica	98
C.1	EOS de Skyrme Simétrica	98
C.2	Pontos Críticos	99
C.3	Pontos Flashes	100
C.4	Pontos Spinodais	101
D	Equivalência entre Expressões da Incompressibilidade	104
	Referências Bibliográficas	106

Lista de Figuras

1.1	Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	13
1.2	Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C = 0$ e $C_s = 0$	13
1.3	Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C = 0$ e $C_s \neq 0$	14
1.4	Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C \neq 0$ e $C_s = 0$	14
1.5	Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,5$ em $T = 0$	20
1.6	Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,5$ em $T = 0$. A linha tracejada representa a energia com os termos C_s e C . Na linha cheia $C_s = C = 0$	21
1.7	Gráfico da energia livre por nucleon para $y = 0,5$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s = C = 0$	22
1.8	Gráfico da energia livre por nucleon para $y = 0,5$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s \neq 0$ e $C \neq 0$	22
1.9	Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,3$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s = C = 0$	22
1.10	Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,3$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s \neq 0$ e $C \neq 0$	23
1.11	Energia livre de Helmholtz por partícula e potencial químico para $y = 0,5$ como funções da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$	24
1.12	Energia livre de Helmholtz por partícula e potencial químico para $y = 0,5$ como funções da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 4 \text{ MeV}$	25
1.13	Construção de Maxwell para $y = 0,5$, $C_s = C = 0$ e $T = 4 \text{ MeV}$	25

1.14	Energia livre de Helmholtz por volume para $y = 0,5$ como função da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$. A linha tracejada indica a tangente comum.	26
1.15	Construção de Maxwell para $y = 0,5$, $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$. . .	27
2.1	Spinodais mecânicas.	29
2.2	Spinodais químicas.	31
2.3	Temperatura pseudo-crítica do sistema versus fração de prótons com C_s nulo e não nulo. O termo coulombiano foi feito diferente de zero. .	33
2.4	Temperatura pseudo-crítica do sistema versus fração de prótons. O termo coulombiano foi feito diferente de zero.	34
3.1	Incompressibilidade isotérmica versus temperatura para diferentes valores de y com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	41
3.2	Incompressibilidade isotérmica versus temperatura para diferentes valores de y e $C = C_s = 0$	41
3.3	Incompressibilidade adiabática versus temperatura para y constante com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	43
3.4	Incompressibilidade adiabática versus temperatura para y constante e $C = C_s = 0$	44
3.5	Incompressibilidade adiabática e isotérmica versus temperatura para $y = 0,5$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	45
3.6	Incompressibilidade adiabática e isotérmica versus temperatura para $y = 0,3$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	45
4.1	Potencial químico para prótons e nêutrons versus fração de prótons para $C = 0$. Aqui temos que $T = 10 \text{ MeV}$ e $P = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$	49
4.2	Construção geométrica usando a fração de prótons e o potencial químico obtido pela coexistência de fases com $C = 0$	50
4.3	Pressão versus fração de prótons para $T = 10 \text{ MeV}$	52
4.4	Pressão versus fração de prótons para $T = 8 \text{ MeV}$	52
4.5	Gráfico $P \times y$ para diferentes temperaturas com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	53

4.6	Pressão versus fração de prótons para $T = 10 \text{ MeV}$	54
4.7	Pressão versus densidade para $T = 10 \text{ MeV}$	55
4.8	Pressão versus fração de prótons para $T = 12 \text{ MeV}$	55
4.9	Pressão versus fração de prótons para $T = 14 \text{ MeV}$	56
4.10	Superfície binodal, com $T = 10 \text{ MeV}$, montada para exemplificar o ponto crítico (PC), o ponto de igual concentração (IC) e o ponto de máxima assimetria (MA) para $y > y_c$. Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	57
4.11	Isotermas com $T = 10 \text{ MeV}$ para um sistema preparado com $y = 0, 2$. A nova construção de Maxwell produz a linha AC . Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	58
4.12	Curva $y \times \rho_{tot}$ para $T = 10 \text{ MeV}$. Os pontos em vermelho reproduzem as densidades para $y = 0, 2$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	60
4.13	Superfície binodal, com $T = 10 \text{ MeV}$, montada para exemplificar o ponto crítico (PC), o ponto de igual concentração (IC) e o ponto de máxima assimetria (MA) para $y < y_c$. Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	60
4.14	Isotermas com $T = 10 \text{ MeV}$ para um sistema preparado com $y = 0, 1$. A nova construção de Maxwell produz a linha AC . Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	61
4.15	Curva $y \times \rho_{tot}$ para $T = 10 \text{ MeV}$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$. Os pontos em vermelho reproduzem as densidades para $y = 0, 1$	63
4.16	Construção de Maxwell em $T = 10 \text{ MeV}$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$ para $y = 0, 2; 0, 3$ e $0, 5$	63
4.17	Temperatura crítica do sistema em função de y . A condição 1 é dada por $\left(\frac{\partial \mu}{\partial y}\right)_{P,T} = \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial y^2}\right)_{P,T} = 0$ e a condição 2 por $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{y,T} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{y,T} = 0$	66
4.18	Potencial químico versus fração de prótons para $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	67
4.19	Superfície binodal indicando a coexistência de fases. As fatias contidas no plano $x \times y$ representam as binodais vistas anteriormente. Este gráfico foi feito com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	68
5.1	$s \times T$ para diferentes valores de y e $P = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	70

5.2	$s \times T$ para diferentes valores de y e $P = 0.15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$	70
5.3	Binodal com $C = C_s = 0$ para $T = 10 \text{ MeV}$. A linha pontilhada nos indica a pressão de coexistência, $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, para $y = 0,5$	72
5.4	Construção de Maxwell na isoterma $T = 10 \text{ MeV}$ com $C = C_s = 0$. Aqui a fração é $y = 0,5$	72
5.5	$s \times T$ para $y = 0,5$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	73
5.6	$g \times T$ para $y = 0,5$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	73
5.7	Isotermas $T = 10 \text{ MeV}$, $T_A = 6,7 \text{ MeV}$ e $T_B = 15,4 \text{ MeV}$ com $C = C_s = 0$. Em todas as isotermas $y = 0,5$	74
5.8	$s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	75
5.9	$g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	75
5.10	$s \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	75
5.11	$g \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	75
5.12	$s \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	76
5.13	$g \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	76
5.14	$s \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	76
5.15	$g \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$	76

5.16	Curva $T \times y$ representando os limites das regiões spinodais química (curva vermelha) e mecânica (curva preta). Nessas curvas $C = C_s = 0$.	77
5.17	$s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.	78
5.18	$g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.	78
5.19	Energia livre de Gibbs como função da temperatura, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.	80
5.20	Figura sem laços da energia livre de Gibbs como função da temperatura, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.	80
5.21	$s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.	81
5.22	$g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.	81
5.23	$s \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.	82
5.24	$g \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.	82
5.25	$s \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.	82
5.26	$g \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.	82
5.27	$s \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.	83
5.28	$g \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.	83
6.1	As curvas calóricas são mostradas para $^{166}_{62}\text{Sm}$ ($y = 0,37$, linha grossa de traços longos), $^{150}_{62}\text{Sm}$ ($y = 0,41$, linha grossa cheia); para $6V_0$ (linha grossa pontilhada-tracejada) e $9V_0$ (linha grossa de traços curtos) com volumes fixados para ^{166}Sm e para o gás de Fermi [31] ($k = 10,0$, linha pontilhada fina e $k = 13,0$, linha fina cheia). Resultados experimentais de [32] (quadrado), [33] (triângulos) e [31] (estrelas grandes) também são mostrados. Os pontos vermelhos correspondem ao $^{150}_{62}\text{Sm}$ do nosso modelo.	86
C.1	Curvas de isotermas de pressão em função da razão de densidades, retirada de [19]. A linha tracejada representa a construção de Maxwell.	101

Lista de Tabelas

1.1	Parâmetros da interação do tipo Skyrme, extraídos de [15]	11
4.1	Valores das grandezas utilizadas no exemplo $y > y_C$	59
4.2	Valores das grandezas utilizadas no exemplo de $y < y_c$	62
6.1	Parâmetros dos núcleos finitos.	84
6.2	Valores críticos dos núcleos.	85
6.3	Valores dos termos de superfície e coulombiano retirados da expressão para a energia por partícula, dada em (1.43).	85

Introdução

O estudo de transições de fase é de grande importância na física atual e envolve praticamente todos os seus ramos [1]. Na grande maioria dos casos, o estudo termodinâmico de tais transições é feito em regime de temperatura finita. Em temperatura nula, associa-se cruzamento de níveis quânticos como assinatura de uma transição de fase quântica [2]. Nesse trabalho, discutiremos transições de fase clássicas, em temperatura finita e suas respectivas ordens de transição. Apesar de sua grande generalidade, trataremos de sistemas nucleares, cuja interação básica se dá entre nucleons. Já no início dos anos 50 tornou-se conhecido experimentalmente que espalhamentos próton-próton indicavam uma mudança de sinal no deslocamento de fase para energias um pouco acima de 200 MeV . Este fato indicou que para reproduzir tais dados, a interação nucleon-nucleon teria que ser dependente da energia ou local, mas neste caso, desde que contivesse tanto parte repulsiva quanto parte atrativa. Hoje, a grande maioria das interações nucleon-nucleon, ditas realistas, é local fora da parte de muito curto alcance, como, por exemplo, os potenciais de Bonn, Paris, Nijmegen e Argonne [3]. O fato da força nuclear ser de curto alcance e além disso conter parte repulsiva e parte atrativa, leva à saturação da energia por nucleon na matéria nuclear.

Esses potenciais, quando colocados nas equações tipo Brueckner-Hartree-Fock reproduzem razoavelmente bem as propriedades de saturação da matéria nuclear infinita e alguns núcleos finitos [4]. Alternativamente, as propriedades da matéria nuclear podem também ser obtidas através de modelos hadrônicos baseados em teoria quântica de campos [5]. Em ambos os casos, o estudo de propriedades termodinâmicas da matéria nuclear e núcleos finitos foi bastante investigado, principalmente

no caso em que o número de prótons é igual ao número de nêutrons e o sistema é tornado infinito, hipoteticamente, simulando uma matéria nuclear infinita simétrica [6]. Diferentes modelos que simulam tal sistema indicam uma transição de fase para temperaturas em torno de $14 - 18 \text{ MeV}$ em densidades menores do que 0.15 fm^{-3} [7]. Além disso, o ingrediente mencionado da interação nuclear conter atração e repulsão, quando incluído em equações de estado descritas no formalismo de campo médio, revela um comportamento semelhante àquele encontrado nas equações de van der Waals.

Tais estudos teóricos de uma transição de fase para um modelo hipotético, motivaram a investigação de equações de estado mais realistas e também a busca para indicadores experimentais de tais transições. Assim, as equações de estado para a matéria nuclear passaram a incorporar mais ingredientes, presentes, em função da finitude do núcleo, tais como termos de superfície e assimetria entre prótons e nêutrons. Hoje, emissão de Fragmentos de Massa Intermediários [8], curvas calóricas [9], expoentes críticos [10] e fracionização de isospin [11] são considerados assinaturas importantes na evidência de uma transição de fase para núcleos quentes.

O presente trabalho apresentará um estudo termodinâmico para a matéria nuclear assimétrica no regime de baixas temperaturas ($T \leq 20 \text{ MeV}$). Nesse caso, as propriedades da matéria nuclear serão função da densidade, temperatura e fração de prótons. Com esta abordagem, haverá o número bariônico e a carga elétrica como sendo as cargas conservadas de um sistema binário. Propriedades termodinâmicas de sistemas binários, ou como usualmente ditos de dois componentes, são de interesse em muitas áreas da física e da química. Em física nuclear, como já frisado, tais sistemas podem ser considerados quando prótons e nêutrons se apresentam em frações distintas nos núcleos.

A estrutura de um sistema binário é bem mais complexa do que a de apenas um componente. Por exemplo, se considerarmos o ar atmosférico que é constituído de aproximadamente 79% de nitrogênio (temperatura de liquefação $77,4 \text{ K}$) e 21% de oxigênio (temperatura de liquefação $90,2 \text{ K}$) notaremos que a temperatura de transição de fase do sistema (nitrogênio + oxigênio) será diferente da temperatura

de cada um deles separadamente devido à interação existente entre eles.

Nosso estudo consistirá na interpretação do núcleo como sendo constituído de nucleons, onde prótons e nêutrons serão considerados como partículas distintas. Assim, cada grupamento poderá existir em fases (líquida e gasosa) diferentes. O critério de definição de cada fase será o ponto crítico que variará a medida que se mude a temperatura. Nesse aspecto, há uma grande diferença com sistemas de um componente ou homogêneos, onde há apenas uma temperatura crítica, uma densidade crítica, uma pressão crítica e portanto a separação de fases se dá de forma muito mais óbvia.

Na equação de estado (EOS) que usaremos, basicamente o modelo supõe interações tipo Skyrme. Isto é, os nucleons interagem apenas quando estão em contato. Uma vez em contato, eles contribuirão com uma interação de dois corpos e outra interação de três corpos. Para descrever o núcleo finito haverá também uma parametrização que levará em conta os efeitos tanto de superfície como da interação de Coulomb. Para isso, o raio do núcleo será um parâmetro. No nosso estudo, escolhemos um núcleo com raio igual a $6 fm$. O tratamento, tanto para a matéria nuclear infinita, quanto para núcleos finitos será não relativístico e baseado em uma abordagem de campo médio.

Na descrição de um sistema nuclear, tratamos o núcleo como um fluido. Suas propriedades gerais refletem-se na equação de estado que o descreve através da densidade, termo de superfície, energia de simetria, termo coulombiano e termo de assimetria.

Nesse trabalho nos concentraremos na discussão dos processos termodinâmicos associados com separações de fase (binodal) e instabilidades por flutuações de densidade bariônica (spinodal mecânica) e instabilidades por flutuações de concentração de prótons (spinodal química). Através de nosso estudo, veremos como o sistema evolui das fronteiras de separação de fase e adquire regiões de metaestabilidade antes ainda de se tornarem instáveis na região interior das spinodais.

Em síntese, analisaremos a termodinâmica de sistemas nucleares e suas propriedades em função da temperatura, densidade e fração de prótons. Com relação a

essa fração podemos ter núcleos esféricos ($N_n = N_p$), núcleos pesados ($N_n < N_p$) e por último, um sistema com excesso de nêutrons (estrela de nêutrons). Como dito, isso não é tão simples no caso de sistemas binários, pois teremos que considerar simultaneamente seus potenciais químicos que são diferentes para cada componente.

O trabalho está dividido em seis capítulos e mais conclusão. No capítulo 1 apresentaremos uma breve discussão sobre a termodinâmica envolvida (escolha das variáveis independentes e potenciais termodinâmicos associados) na descrição da matéria nuclear. Será mostrado também a equação de estado em sua forma assimétrica, isto é, com um parâmetro de assimetria y representando a razão entre prótons e o número total de nucleons, de tal forma que poderemos descrever o sistema como composto por mais do que uma espécie de componente. Com relação ao caso simétrico, em que o número de prótons e o número de nêutrons são iguais, a maior modificação diz respeito a introdução de uma interação coulombiana, assim como o termo de assimetria e superfície.

O potencial químico do sistema será deduzido neste capítulo, assim como as expressões analíticas para a energia livre de Gibbs e entropia. Trataremos também da energia livre de Helmholtz do sistema misto.

No capítulo 2 serão apresentadas as equações que nos fornecem os limites das regiões de instabilidade mecânica e química (pontos spinodais). Em seguida introduziremos os pontos pseudo-críticos e analisaremos o comportamento da temperatura crítica, gerada a partir de tais pontos, em função da fração de prótons. Mostraremos como os efeitos coulombiano e de superfície afetam tal temperatura. No fim do capítulo será apresentada uma breve discussão sobre a energia livre de Gibbs-Landau.

O comportamento das incompressibilidades isotérmica e isentrópica (ambas calculadas com as densidades do equilíbrio hidrostático) em função da temperatura, será apresentado no capítulo 3. Informações sobre a temperatura flash do sistema, assim como a relação termodinâmica dessas grandezas com os calores específicos (a pressão e volume constantes) também serão mostradas.

No capítulo 4, começaremos a tratar da coexistência de fases. A complexidade do sistema será bem maior pois todos os cálculos terão que levar em conta o parâmetro

de assimetria. Assim, aquilo que podia ser bem entendido em um gráfico bidimensional tal como uma curva de coexistência de fases, terá que ser vista com um grau de liberdade adicional. Por exemplo, para a matéria nuclear simétrica ($y = 0,5$) a uma temperatura fixa, pode-se analisar o diagrama de equilíbrio de fases com o estudo de isothermas, obtido através da equação de estado e da construção de Maxwell, num plano de pressão (P) versus densidade (ρ). Nesse caso há um único ponto crítico, onde a transição de fase é contínua.

Quando tratamos da matéria nuclear assimétrica, as isothermas não serão mais uma curva em um plano, mas sim uma superfície no espaço tridimensional, sendo então a transição contínua em uma linha e não mais em um ponto. Ou seja, para cada temperatura finita abaixo da temperatura crítica, as frações de prótons no estado líquido serão diferentes das frações no estado gasoso, ao manter-se a relação $N = N_p + N_n$ constante.

Este novo grau de liberdade adiciona uma instabilidade química ao sistema, causada por flutuações da concentração de prótons. Usando um modelo simples conseguimos derivar, para valores arbitrários de y , as regiões de estabilidade e metaestabilidade através dos diagramas binodal e spinodal. Ilustramos também de forma clara como se faz uma construção de Maxwell para sistemas binários. Verifica-se, por exemplo, que uma vez preparado o sistema com uma certa fração de prótons fixa, a coexistência de fases se dá para diferentes valores de pressão. Ao se variar o valor da fração de prótons na direção do caso simétrico, $y = 0,5$, a diferença entre tais pressões diminui, até que no caso particular da matéria nuclear simétrica, $y = 0,5$, as pressões tornam-se iguais, como já largamente conhecido para sistemas que possuem o mesmo número de prótons e nêutrons.

Analisaremos a ordem da transição de fase para sistemas binários no capítulo 5. Antes porém trataremos o caso simétrico a fim de generalizar os mesmos procedimentos. Para tal, construiremos gráficos da energia livre de Gibbs e da entropia por partícula, em função da temperatura com o propósito de encontrar sinais da ordem da transição. Usaremos a regra da alavanca para tratar a região de transição do sistema. Analisaremos também a ligação entre os extremos dos “laços” existentes

nos gráficos da energia livre de Gibbs versus temperatura e as temperaturas limite spinodal.

Por fim, no capítulo 6, aplicaremos os estudos de sistemas binários em alguns núcleos reais ($^{238}_{92}\text{U}$, $^{208}_{82}\text{Pb}$, $^{152}_{68}\text{Er}$ e $^{90}_{40}\text{Zr}$). Determinaremos os valores críticos de temperatura, pressão e densidade de cada núcleo. Calcularemos também o fator de compressibilidade, definido pela divisão da pressão crítica do sistema pelo produto da temperatura com a densidade crítica. Compararemos todos esses dados com os da matéria nuclear infinita. Ao final do capítulo, apresentaremos a curva calórica para o $^{166}_{62}\text{Sm}$, que será comparada com outros modelos teóricos e dados experimentais.

No primeiro apêndice apresentaremos como obter as equações de estado de van der Waals através da expansão do virial (apêndice A). Nos dois apêndices seguintes usaremos a equação de estado de van der Waals, discutiremos sua criticalidade e chegaremos em sua forma escalonada (apêndice B) e analisaremos as propriedades da matéria nuclear simétrica através da equação de estado de Skyrme (apêndice C).

Capítulo 1

Equações de Estado da Matéria

Nuclear Assimétrica

É bem conhecido da tabela de nuclídeos que, em sua grande maioria, há mais nêutrons do que prótons nos núcleos. Recentemente, muitos núcleos chamados exóticos, com o número de prótons maior do que o de nêutrons são produzidos artificialmente em laboratórios através de feixes radioativos [12]. Assim, equações de estado termodinâmicas que pretendam descrever a maioria dos núcleos devem levar em conta frações distintas de prótons e nêutrons, introduzindo um grau de liberdade adicional ao sistema. Usualmente, em física nuclear, o que controla essa distinção dos constituintes é o fator de assimetria (y), chamado fração de prótons que é definido por:

$$y = \frac{N_p}{N_p + N_n}, \quad (1.1)$$

onde N_p é o número de prótons e N_n o número de nêutrons do núcleo.

Em algumas outras áreas da física, e largamente na química, a assimetria é definida pela diferença das frações dos dois tipos de constituintes, chamado parâmetro de concentração que, no nosso caso seria $c = 2y - 1$.

Visualizando o núcleo finito no modelo da gota líquida, as contribuições principais para a energia de ligação por nucleon são os termos de volume, superfície, coulombiano, assimetria e emparelhamento [13]. Os termos de superfície e coulombiano são competitivos e podem explicar de forma simples a fissão nuclear através de

uma relação limite entre N_p e $N = N_p + N_n$ para que haja estabilidade no sistema. Vista neste modelo, a hipotética matéria nuclear infinita, por exemplo, considera $N_p = N_n$, logo não há termo de assimetria. Além disso, despreza-se o termo coulombiano e o termo de superfície não se faz presente. Assim, a saturação da energia de ligação por nucleon é dada basicamente pelo coeficiente do termo de volume.

Ao se estudar as propriedades termodinâmicas do núcleo, considera-se que o mesmo seja um fluido e que haja grandezas como pressão P , volume V , número de nucleons N , potencial químico μ , energia interna E e entropia S a caracterizá-lo. Essas grandezas não são todas independentes. A escolha que se pode fazer de quais grandezas se prefere independentes guarda uma relação direta com o potencial termodinâmico usado. Quando se quer, por exemplo, que as grandezas independentes sejam S , V e N , o potencial termodinâmico apropriado é $E(S, V, N)$ e as demais quantidades, T , P e μ serão obtidas a partir de derivadas parciais de $E(S, V, N)$ com relação a S , $-V$ e N respectivamente, de forma que a diferencial total da energia interna seja representada por $dE = TdS - PdV + \mu dN$. Por outro lado, desejando-se que T , V e N sejam independentes, o potencial termodinâmico a ser usado é a energia livre de Helmholtz $F(T, V, N) = E(S, V, N) - TS$. Já se, S , P e N , consideradas independentes, forem melhores para descrever o sistema em estudo, o potencial termodinâmico deverá ser a entalpia $H(S, P, N) = E(S, V, N) + PV$. Em situações onde seja preferível a independência das variáveis T , V e μ , a escolha natural será o potencial termodinâmico representado pela energia livre de Gibbs (ou entalpia livre) $G(T, P, N) = F(T, V, N) + PV$. No caso de sistemas de dois componentes em que $G = G(T, P, N_1, N_2)$, podemos escrever $dG = -SdT + VdP + \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2$ e como G é uma grandeza extensiva, temos $G = \mu_1 N_1 + \mu_2 N_2$. A partir disso temos a equação de Gibbs-Duhem dada por $-SdT + VdP - N_1 d\mu_1 - N_2 d\mu_2 = 0$, que em um processo isotérmico nos possibilita encontrar o potencial químico do sistema.

Enfim, todos os potenciais termodinâmicos podem ser obtidos uns dos outros via transformações de Legendre e são equivalentes. Em qualquer escolha, as grandezas não independentes serão sempre obtidas por derivadas parciais do potencial termodinâmico escolhido.

Ao se estudar a matéria nuclear, torna-se conveniente a escolha do que se chama o grande potencial termodinâmico, dado por $\Phi(T, V, \mu) = -PV = F(T, V, N) - \mu N$. Neste caso, S , P e N são obtidos por derivadas parciais de $\Phi(T, V, \mu)$ como veremos adiante. Este conjunto de equações, então, será chamado de equações de estado do sistema.

Como descrito acima, uma vez definido o potencial termodinâmico praticamente toda a informação termodinâmica do sistema estará disponível. Há várias abordagens na construção de equações de estado para a matéria nuclear. A mais tradicional baseia-se em potenciais nucleon-nucleon construídos a partir da hipótese da troca de mésons com parâmetros ajustados para reproduzir os dados de espalhamento nucleon-nucleon em baixas energias. Nesse caso, cada um destes potenciais nucleon-nucleon gera uma equação de estado com parametrização diferente. No entanto, há modelos nos quais as equações de estado são construídas sem o uso de interações que reproduzam os observáveis em baixas energias do espalhamento nucleon-nucleon. Este é o caso da hadrodinâmica quântica [14], baseada na teoria de campos relativística, onde os parâmetros livres (constantes de acoplamento méson-nucleon e méson-méson) são ajustados diretamente de observáveis da matéria nuclear.

Nesse trabalho, usaremos uma equação de estado não relativística, obtida a partir de interações de contato entre os nucleons. Nesse modelo, chamado de Skyrme, os nucleons são livres em todo o espaço de fase a menos que dois ou três deles estejam em contato. Nessa hipótese, há então a contribuição de forças de dois e de três corpos. Nessas forças, as constantes de acoplamento nucleon-nucleon e nucleon-nucleon-nucleon são ajustados de forma a reproduzir observáveis da matéria nuclear, tais como energia de ligação e densidade de saturação. A EOS utilizada foi proposta em [15] e permite estudar a transição de fase líquido-gás em sistemas binários. A razão pela qual um modelo tão simples reproduz razoavelmente bem as propriedades da matéria nuclear deve-se ao fato de que sistemas fracamente ligados dependem muito pouco dos detalhes da interação na parte de curto alcance. Na verdade, a razão é a mesma pela qual uma expansão de alcance efetivo para baixas energias, descreve razoavelmente bem o espalhamento de dois nucleons, tendo como

parâmetros ajustados apenas o comprimento de espalhamento e o alcance efetivo da interação. Para tratar de núcleos finitos essa equação de estado, apresentada abaixo (equação 1.2), incorporará fenomenologicamente os termos coulombiano, de superfície e de assimetria à semelhança do modelo da gota líquida, anteriormente mencionado. Além disso, em temperaturas finitas, usa-se a expansão de um gás de Fermi quase degenerado [16].

$$P = T\rho - a_0(y)\rho^2 + 2a_3\rho^3 + Cy^2\rho^2 + \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma}[1 + (2y - 1)^2]\rho^2 - \frac{1}{3}C_s\rho^{2/3}, \quad (1.2)$$

onde

$$a_0(y) = a_0 \left[1 - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) (2y - 1)^2 \right] \quad e \quad (1.3)$$

$$\lambda = \left[\frac{2\pi(\hbar c)^2}{mT} \right]^{1/2}. \quad (1.4)$$

Com $m = 939 \text{ MeV}$ sendo a massa do nucleon. Nessa equação, λ representa o comprimento de onda térmico e os termos em T surgem através de uma expansão do virial¹. As constantes C e C_s são parâmetros dependentes do raio nuclear e associados à interação de Coulomb entre os prótons e à superfície do núcleo como veremos posteriormente. Para temperaturas muito baixas ($T < 4 \text{ MeV}$), o termo em λ (termo de degenerescência), que corrige o termo de primeira ordem ρT (gás ideal) não funciona bem.

Vamos ainda esclarecer que essa equação de estado, em $T = 0$, não possui o termo que representa a pressão cinética apresentada em sistemas fermiônicos. Esse termo pode ser calculado através da seguinte relação termodinâmica:

$$P_{cin} = \rho \frac{\partial \varepsilon_{cin}}{\partial \rho} - \varepsilon_{cin} \quad (1.5)$$

com $\varepsilon_{cin} = \frac{E_{cin}}{V} = \frac{E_{cin}}{N} \rho$ sendo a densidade de energia cinética.

A energia cinética por partícula de um sistema fermiônico livre é dada pela

¹Essa expansão é feita para o modelo de van der Waals no apêndice A.

seguinte expressão:

$$\frac{E_{cin}}{N} = \frac{3\hbar^2}{10m} k_f^2 \quad \text{com} \quad (1.6)$$

$$k_f = \left(\frac{6\pi^2}{\gamma} \rho \right)^{1/3}. \quad (1.7)$$

onde γ representa o número de partículas em cada nível de energia. No caso da matéria nuclear $\gamma = 4$.

Com isso temos que

$$\varepsilon_{cin} = \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{5/3}, \quad (1.8)$$

logo o termo de pressão é dado por

$$P_{cin} = \frac{\hbar^2}{5m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{5/3}. \quad (1.9)$$

Assim, sempre que precisarmos considerar $T = 0$ estes termos devem ser incluídos e a expansão em T , correspondente ao termos cinéticos, desprezada.

Os valores dos parâmetros dessa interação e suas respectivas dimensões são mostrados na tabela 1.1.

Constantes	Valores	Dimensões
t_0	-1089,00	$MeV \cdot fm^3$
t_3	17480,40	$MeV \cdot fm^6$
x_0	$\frac{1}{2}$	adimensional
a_0	$-\frac{3}{8}t_0$	$MeV \cdot fm^3$
a_3	$\frac{1}{16}t_3$	$MeV \cdot fm^6$

Tabela 1.1: Parâmetros da interação do tipo Skyrme, extraídos de [15]

Em $T = 0$, esses valores para t_0 , t_3 e x_0 fornecem as seguintes grandezas para a matéria nuclear infinita : densidade de saturação dada por $\rho_0 = 0,14 fm^{-3}$, energia por partícula $\varepsilon = -15,58 MeV$ e energia de simetria $J = 38,96 MeV$.

Uma breve compreensão dos termos presentes na equação de estado que contemplam os efeitos de superfície e coulombiano será apresentada a seguir. Para isso

consideraremos o núcleo como uma esfera uniforme e finita de raio R expresso por:

$$R = r_0 N^{1/3}, \quad (1.10)$$

com $N = N_p + N_n$ e $r_0 = 1,16 \text{ fm}$.

E volume dado por:

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3. \quad (1.11)$$

- Termo de Superfície (\mathcal{E}_s):

O termo que descreve os efeitos de superfície do núcleo, $C_s \rho^{2/3}$, é encontrado ao se dividir a energia de superfície (área vezes a constante de superfície σ), da esfera considerada, pelo seu volume total. Temos então:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_s &= \frac{\text{área} \times \sigma}{\text{Volume}} \\ &= \frac{4\pi R^2 \sigma}{V}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

onde o volume utilizado foi o dado pela equação (1.11).

Substituindo a equação (1.10) em (1.12) e fazendo $\rho = \frac{N}{V}$, encontramos:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_s &= \left(\frac{4\pi r_0^2 \sigma}{V^{1/3}} \right) \rho^{2/3} \\ &= \frac{E_s}{V^{1/3}} \rho^{2/3} \\ &= C_s \rho^{2/3}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

onde \mathcal{E}_s possui dimensão $\text{MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$.

Nesse trabalho, usamos a interação de Skyrme [15] que fornece uma energia de superfície $E_s = 20,00 \text{ MeV}$ implicando em $\sigma = 1,10 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-2}$.

- Termo Coulombiano (\mathcal{E}_c):

O efeito coulombiano é descrito por $C_y^2 \rho^2$. Para gerá-lo, consideramos que a esfera uniforme possui uma carga total $N_p e$. Esse termo aparece através da aproximação da média do potencial coulombiano por prótons, que é dada por:

$$\mathcal{E}_c = \frac{3}{5} \frac{e^2 N_p^2}{RV}. \quad (1.14)$$

Escrevendo o número de prótons como $N_p = Ny$ e substituindo-o em (1.14), com $N = \rho V$, encontramos:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_c &= \frac{3e^2 N^2 y^2}{5RV} = \frac{3e^2 \rho^2 V^2 y^2}{5RV} \\ &= \frac{4\pi}{5} e^2 R^2 \rho^2 y^2,\end{aligned}\quad (1.15)$$

onde o volume utilizado foi o dado pela equação (1.11).

Definindo $C = \frac{4\pi}{5} e^2 R^2$ temos,

$$\mathcal{E}_c = C \rho^2 y^2. \quad (1.16)$$

Note que o termo coulombiano dado acima é proporcional ao quadrado da densidade de prótons do sistema, já que essa é definida por $\rho_p = \rho y$, onde $\rho = \rho_p + \rho_n$ é a densidade total de nucleons.

Em nossos cálculos, quando não mencionarmos explicitamente o raio R , usamos $R = 6 \text{ fm}$ e com isso, os parâmetros de superfície e coulombiano são dados, respectivamente, por $C_s = 2,07 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-1}$ e $C = 130,29 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$.

Para visualizar o efeito da assimetria, representada por y , na EOS (1.2), apresentamos isotermas da pressão em função da densidade para diferentes frações de prótons.

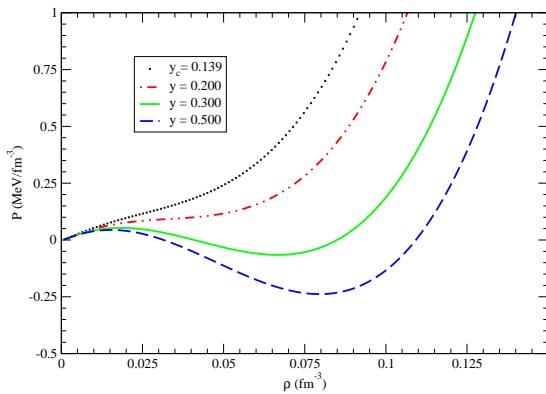


Figura 1.1: Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

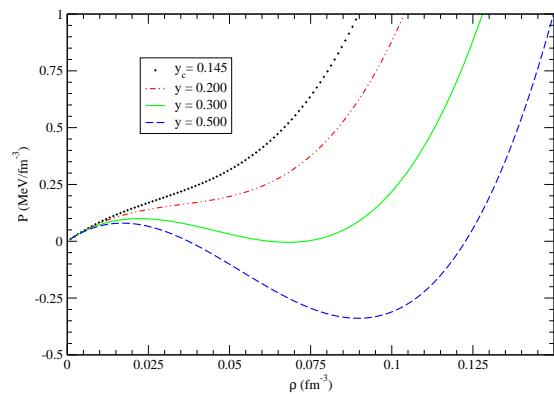


Figura 1.2: Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C = 0$ e $C_s = 0$.

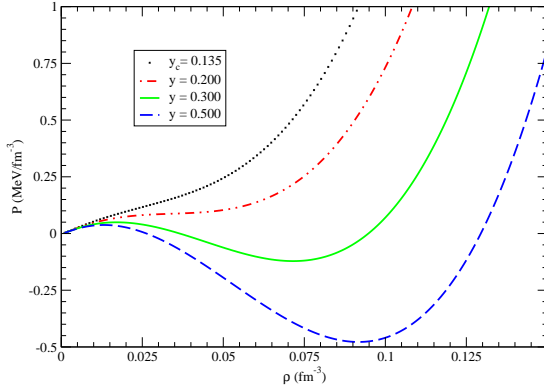


Figura 1.3: Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C = 0$ e $C_s \neq 0$.

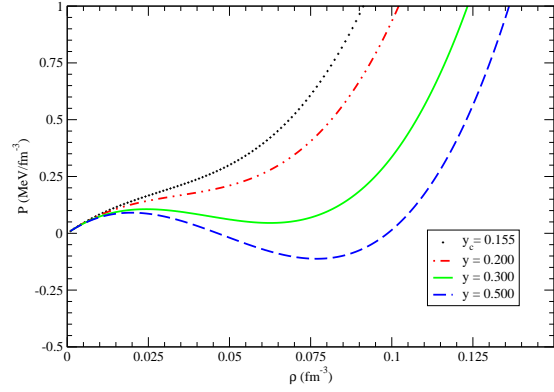


Figura 1.4: Isotermas para $T = 10 \text{ MeV}$ onde $C \neq 0$ e $C_s = 0$.

Algumas considerações podem ser feitas sobre as isothermas mostradas acima. De um modo geral, as curvas apresentam um comportamento já conhecido da equação de van der Waals, mas variando sua compressibilidade em função de y . No modelo que usamos, a repulsão está simulada pela força de três nucleons e a atração pela força de dois nucleons. Essa é a razão da semelhança das isothermas das figuras apresentadas com aquelas do modelo de van der Waals. Esse mesmo comportamento é também encontrado em muitos outros modelos mais realistas da matéria nuclear em temperatura finita [6]. De novo, a razão do mesmo comportamento qualitativo das isothermas de praticamente todos os modelos nucleares em temperatura finita, deve-se à repulsão em muito curtas distâncias e atração em distâncias maiores como imposição da fenomenologia nucleon-nucleon observada e reproduzida por estes.

Percebe-se também que a região de instabilidade mecânica do sistema cresce conforme y aumenta, independente dos efeitos coulombiano e de superfície. Essa região é delimitada pelos pontos onde a derivada da pressão com relação a densidade é nula. Além disso, observamos que o efeito de superfície modifica substancialmente o valor mínimo da pressão, conquanto o efeito coulombiano apesar de afetá-lo, o faz em menor intensidade mas em direção oposta, evidenciando o caráter competitivo dessas contribuições. Verifica-se também que o efeito coulombiano faz crescer mais rapidamente, de forma assintótica, a pressão para menores valores da densidade,

condizente com seu caráter repulsivo.

A discussão acima diz respeito à EOS onde y funcionou como um parâmetro e é, na verdade, apenas uma ilustração. De fato, o entendimento de instabilidade, coexistência de fases e criticalidade é algo muito mais amplo do que simplesmente imaginar que y seja apenas um parâmetro. Mesmo assim é útil ver y dessa forma, já que não se perde o contato com a representação bidimensional das grandezas termodinâmicas, característica bem estabelecida para sistemas homogêneos. É nesse sentido que prosseguimos nessas ilustrações, analisando a criticalidade do sistema ainda mantendo y como uma grandeza fixa em algumas partes de nosso estudo.

1.1 Potenciais Químicos e Energia Livre de Gibbs

Essa seção tem como objetivo principal apresentar o potencial químico de ambos os componentes do sistema (prótons e nêutrons) e a partir deles chegar à equação para a energia livre de Gibbs.

A análise do potencial químico se faz necessária, em sistemas de mais de um componente, pois este também é uma função da fração de prótons, e a partir dele podemos calcular as regiões de instabilidade química que se faz presente no sistema. Podemos obtê-lo a partir da EOS utilizando a relação termodinâmica:

$$Nd\mu = -SdT + VdP \quad (1.17)$$

e como $N = N_p + N_n$, pode-se escrever

$$Nd\mu = N_p d\mu_p + N_n d\mu_n. \quad (1.18)$$

Igualando as equações acima e fazendo $dT = 0$ (processo isotérmico), encontra-se

$$Vdp = N_p d\mu_p + N_n d\mu_n, \quad (1.19)$$

dividindo por $(N_p + N_n)$ temos

$$yd\mu_p + (1 - y)d\mu_n = \frac{1}{\rho}dP. \quad (1.20)$$

Agora, vamos dividir a equação (1.20) por $\Delta\rho$ e tomar $\lim_{\Delta\rho \rightarrow 0}$, logo

$$y \left(\frac{\partial \mu_p}{\partial \rho} \right)_{y,T} + (1-y) \left(\frac{\partial \mu_n}{\partial \rho} \right)_{y,T} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{y,T}. \quad (1.21)$$

Fazendo o processo análogo para Δy , obtemos:

$$y \left(\frac{\partial \mu_p}{\partial y} \right)_{\rho,T} + (1-y) \left(\frac{\partial \mu_n}{\partial y} \right)_{\rho,T} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_{\rho,T}. \quad (1.22)$$

Derivando, agora, (1.21) com relação a y e (1.22) com relação a ρ , encontramos:

$$\left(\frac{\partial \mu_n}{\partial \rho} \right)_{y,T} = \left(\frac{\partial \mu_p}{\partial \rho} \right)_{y,T} - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_{\rho,T}. \quad (1.23)$$

Substituindo (1.23) em (1.22), temos:

$$\left(\frac{\partial \mu_p}{\partial \rho} \right)_{y,T} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{y,T} + \frac{1-y}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_{\rho,T} \quad (1.24)$$

e substituindo (1.24) em (1.23) encontramos:

$$\left(\frac{\partial \mu_n}{\partial \rho} \right)_{y,T} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{y,T} - \frac{y}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_{\rho,T}. \quad (1.25)$$

As equações (1.24) e (1.25) apresentam agora as derivadas de μ_p e μ_n desacopladas. Efetuando os cálculos encontram-se as equações para o potencial químico do próton e do nêutron, definidas a menos de uma função que depende da temperatura e fração de prótons. Tais equações desacopladas são dadas por:

$$\begin{aligned} \mu_p &= T \ln \rho - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 + \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 (2y - 1) \rho + 2C_y \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3} \\ &+ \frac{T \lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} y \rho + A(T, y) \end{aligned} \quad (1.26)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_n &= T \ln \rho - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 - \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 (2y - 1) \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3} \\ &+ \frac{T \lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} (1-y) \rho + B(T, y). \end{aligned} \quad (1.27)$$

Para obter as funções $A(T, y)$ e $B(T, y)$, substitui-se as equações (1.26), (1.27) e (1.2) em (1.22), resultando na seguinte equação diferencial

$$yA'(T, y) + (1-y)B'(T, y) = 0. \quad (1.28)$$

Com essa expressão em mãos, atribui-se valores para $A(T, y)$ e $B(T, y)$ que a satisfaça. Nesse caso, os valores atribuídos foram

$$\begin{aligned} A(T, y) &= T \ln \left(\frac{\lambda^3}{\gamma} y \right) \quad \text{e} \\ B(T, y) &= T \ln \left(\frac{\lambda^3}{\gamma} (1 - y) \right). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Portanto, o potencial químico de ambos os componentes do sistema pode ser escrito da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mu_p &= T \ln \left(\frac{\lambda^3}{\gamma} y \rho \right) - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 + \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 (2y - 1) \rho + 2C y \rho \\ &+ \frac{T \lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} y \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3} \end{aligned} \quad (1.30)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_n &= T \ln \left(\frac{\lambda^3}{\gamma} (1 - y) \rho \right) - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 - \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 (2y - 1) \rho \\ &+ \frac{T \lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} (1 - y) \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

A equação para μ_q , onde o subíndice q pode ser utilizado tanto para prótons quanto para nêutrons, depende explicitamente da densidade, temperatura e do parâmetro de assimetria y .

Note que para o caso simétrico ($y = 0,5$ com $C = 0$), o potencial químico de prótons e nêutrons se igualam ($\mu_p = \mu_n$). Esse fato pode ser visto nas equações (1.32) e (1.33).

$$\mu_p = T \ln \left(\frac{\lambda^3}{2\gamma} \rho \right) - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 + \frac{T \lambda^3}{4\sqrt{2}\gamma} \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3} \quad (1.32)$$

e

$$\mu_n = T \ln \left(\frac{\lambda^3}{2\gamma} \rho \right) - 2a_0 \rho + 3a_3 \rho^2 + \frac{T \lambda^3}{4\sqrt{2}\gamma} \rho + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3}. \quad (1.33)$$

Através dos potenciais químicos calculados anteriormente, pode-se obter a expressão para a energia livre de Gibbs da seguinte maneira:

$$\frac{G(T, P, N_p, N_n)}{N_p + N_n} = g(T, P, y) = y \mu_p + (1 - y) \mu_n. \quad (1.34)$$

Substituindo as equações (1.30) e (1.31) em (1.34), encontramos:

$$\begin{aligned}
 g(T, P, y) &= T \ln \left(\frac{\lambda^3 (1-y)\rho}{\gamma} \right) - T y \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) - 2(a_0(y) - C y^2)\rho \\
 &+ \frac{T \lambda^3}{4\gamma\sqrt{2}} [1 + (2y-1)^2] \rho + 3a_3 \rho^2 + \frac{2}{3} C_s \rho^{-1/3}.
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

1.2 Entropia

A entropia por nucleon do sistema (s) pode ser obtida da energia livre de Gibbs através da relação:

$$\begin{aligned}
 s &= \frac{\mathcal{S}}{\rho} = \frac{S}{\rho} \\
 &= \frac{S}{N} = - \left(\frac{\partial g(T, P, y)}{\partial T} \right)_{P, y}.
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

Como já possuímos a equação para $g(T, \rho, y)$, dada pela equação (1.35), precisamos então achar a expressão para $\frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{P, y}$ que pode ser obtida da equação (1.2). Obtemos então:

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{P, y} = \frac{\frac{\lambda^3 \rho}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] - 1}{\frac{T}{\rho} - 2a_0(y) + 6a_3 \rho + 2C y^2 - \frac{2}{9} C_s \rho^{-4/3} + \frac{T \lambda^3}{4\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2]}. \tag{1.37}$$

Utilizando a equação (1.36), encontramos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g}{\partial T} \Big|_{P, y} &= \ln \left(\frac{\lambda^3 (1-y)\rho}{\gamma} \right) - y \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) \\
 &- \frac{\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \rho + \left(\frac{T}{\rho} - 2a_0(y) + 6a_3 \rho + 2C y^2 \right. \\
 &\left. - \frac{2}{9} C_s \rho^{-4/3} + \frac{T \lambda^3}{4\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \right) \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{P, y}.
 \end{aligned} \tag{1.38}$$

então, substituindo (1.37) em (1.38)

$$s = y \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) - \ln \left(\frac{\lambda^3 (1-y)\rho}{\gamma} \right) + \frac{\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \rho + \frac{5}{2}. \tag{1.39}$$

1.3 Energia por Partícula e Energia Livre de Helmholtz

1.3.1 Energia por Partícula

Uma vez que já conhecemos P , s e μ , podemos obter a energia por partícula, ε/ρ , a partir da relação do *Grande Potencial Termodinâmico*:

$$-PV = E - TS - \mu N, \quad (1.40)$$

onde μ representa o potencial químico total dado pela equação (1.35).

Dividindo os termos da equação acima por ρV e sabendo que $\rho = \frac{N}{V}$ e $\varepsilon = \frac{E}{V}$, encontramos

$$e = \frac{\varepsilon}{\rho} = Ts - P + \mu. \quad (1.41)$$

Substituindo as equações (1.2), (1.39) e (1.35) na equação (1.41), obtemos:

$$\begin{aligned} e &= yT \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) - T \ln \left(\frac{\lambda^3(1-y)\rho}{\gamma} \right) + \frac{T\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \rho + \frac{5T}{2} \\ &\quad - T + a_0(y)\rho - 2a_3\rho^2 - Cy^2\rho - \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \rho + \frac{1}{3}C_s\rho^{-1/3} \\ &\quad + T \ln \left(\frac{\lambda^3(1-y)\rho}{\gamma} \right) - Ty \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) + \frac{T\lambda^3}{4\gamma\sqrt{2}} [1 + (2y-1)^2] \rho. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Organizando os termos do lado direito da equação (1.42), encontramos,

$$e = \frac{3T}{2} - a_0(y)\rho + a_3\rho^2 + Cy^2\rho + \frac{3T\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2] \rho + C_s\rho^{-1/3}. \quad (1.43)$$

Assim como na equação de estado, a expressão acima não apresenta o limite correto para temperatura nula. Ao tratar desse caso particular, deve-se como já ressaltado, adicionar o termo de energia cinética por partícula dado pela equação (1.6).

1.3.2 Energia Livre de Helmholtz

A energia livre de Helmholtz é definida por

$$F = E - TS. \quad (1.44)$$

A densidade de energia livre de Helmholtz ou, equivalentemente, a energia livre de Helmholtz por volume pode ser obtida ao se dividir a equação acima por V ,

$$\mathcal{F} = \varepsilon - TS. \quad (1.45)$$

E a energia livre de Helmholtz por nucleon é assim definida,

$$f = \frac{\mathcal{F}}{\rho} = \frac{\varepsilon}{\rho} - Ts \quad (1.46)$$

que, com o uso da energia por nucleon e da entropia por nucleon obtidos nas seções anteriores, permite escrever

$$\begin{aligned} f = & T \ln \left(\frac{\lambda^3 (1-y)\rho}{\gamma} \right) - Ty \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) - T - a_0(y)\rho + a_3\rho^2 + C_s\rho^{-1/3} + Cy^2\rho \\ & + \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2]\rho. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Como era de se esperar, fazendo $T = 0$ e considerando o termo de energia cinética de Fermi, citado anteriormente e que deve ser adicionado neste caso, a equação da energia livre de Helmholtz (1.47) iguala-se à equação (1.43).

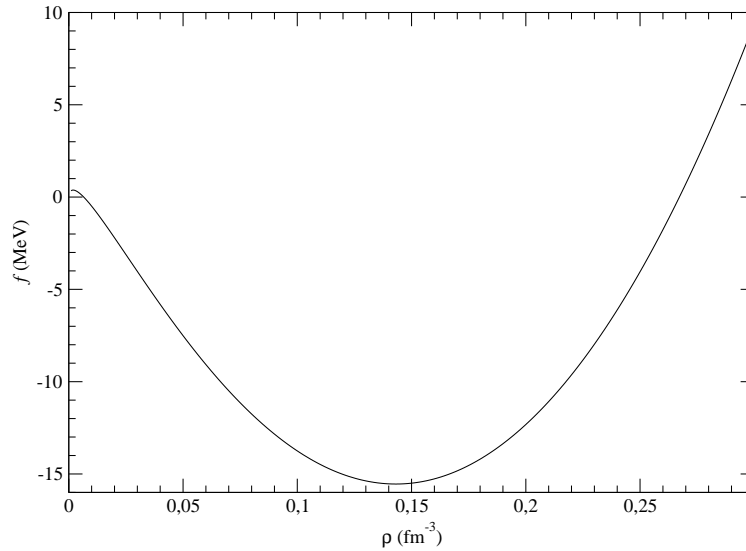


Figura 1.5: Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,5$ em $T = 0$.

A Fig.1.5 mostra a curva de $f \times \rho$ para temperatura nula e fração de prótons fixa em 0,5. Esse gráfico foi gerado sem os termos de superfície e coulombiano, ou seja,

descreve nesse caso a matéria nuclear infinita. O mínimo do gráfico possui aproximadamente densidade $0,14 \text{ fm}^{-3}$ e energia $-15,58 \text{ MeV}$ reproduzindo os valores conhecidos da matéria nuclear a $T = 0$.

Vamos agora considerar o núcleo sendo finito ainda em $T = 0$ e incluindo os termos de superfície e coulombiano. Nesse caso, a energia do sistema aumenta, tornando-se assim menos ligado, o que pode ser visualizado na Fig.1.6. No ponto mínimo do gráfico, o valor da densidade e energia valem aproximadamente $0,13 \text{ fm}^{-3}$ e $-7,2 \text{ MeV}$. Este valor não se distancia muito de -8 MeV que é aproximadamente o que se obtém em cálculos realistas para um núcleo com $N_p = N_n = 50$ e raio em torno de 6 fm , utilizado em nosso cálculo.

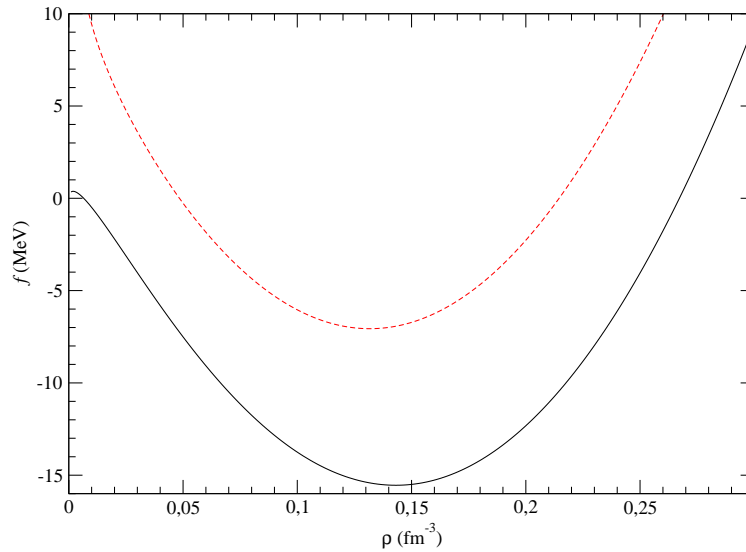


Figura 1.6: Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,5$ em $T = 0$. A linha tracejada representa a energia com os termos C_s e C . Na linha cheia $C_s = C = 0$.

A análise de gráficos com temperaturas diferentes de zero será feita nesse ponto. Essas figuras, assim como as anteriores, são muito úteis para tirarmos informações sobre a energia de ligação do sistema ou construir curvas calóricas. Para $y = 0,5$ as figuras Fig.1.7 e Fig.1.8 mostram que o mínimo da energia diminui com o aumento da temperatura. O mesmo ocorre para a fração de prótons igual à $0,3$ e pode ser visualizada nas Fig.1.9 e Fig.1.10.

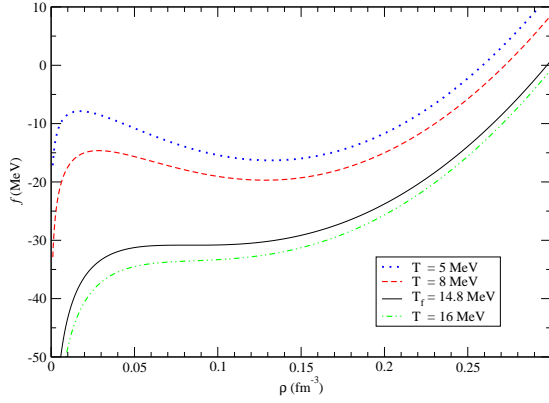


Figura 1.7: Gráfico da energia livre por nucleon para $y = 0, 5$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s = C = 0$.

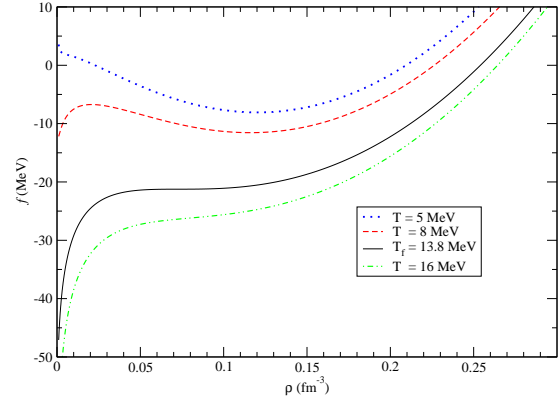


Figura 1.8: Gráfico da energia livre por nucleon para $y = 0, 5$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s \neq 0$ e $C \neq 0$.

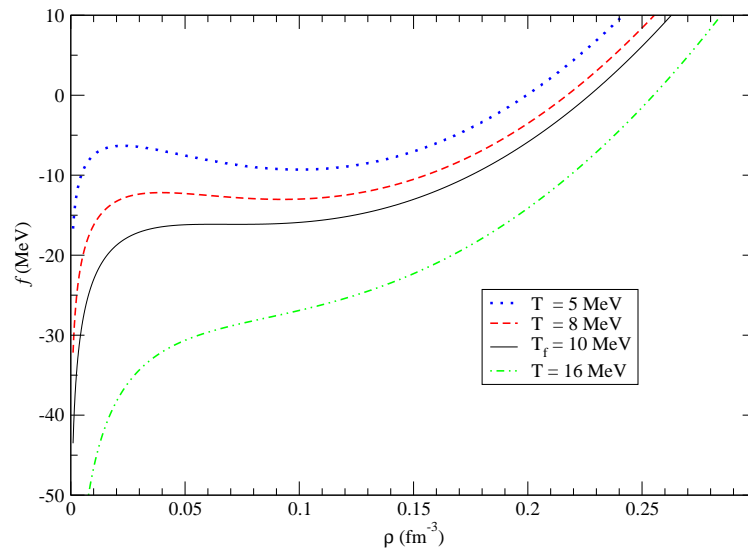


Figura 1.9: Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0, 3$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s = C = 0$.

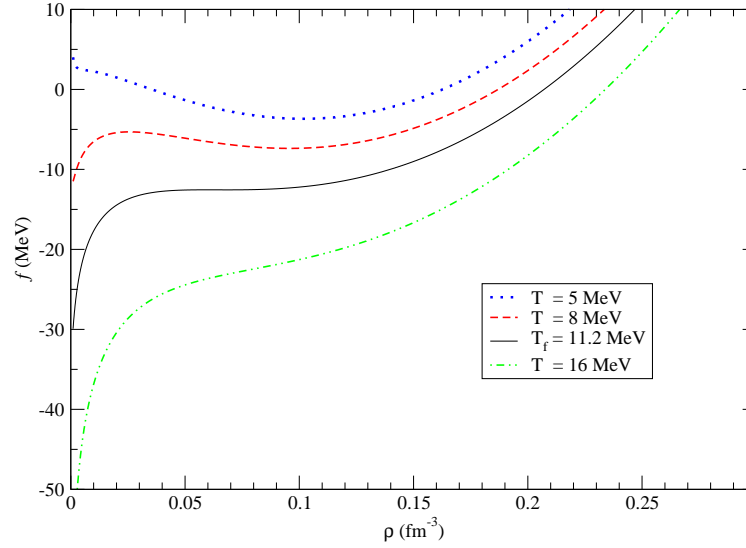


Figura 1.10: Energia livre de Helmholtz por partícula para $y = 0,3$ e diferentes valores de temperatura, com $C_s \neq 0$ e $C \neq 0$.

Gráficos desse tipo podem nos fornecer a *Temperatura Flash* do sistema, definida como sendo a temperatura a partir da qual não existe mais o equilíbrio hidrostático². Isso pode ser notado nos gráficos de $f \times \rho$, pois a curva que representa a temperatura flash apresenta um ponto de inflexão, ou seja, deixa de apresentar um mínimo.

As figuras mostradas anteriormente apresentam, aproximadamente, para o caso em que $C = C_s = 0$ as temperaturas flash $T_f = 10 \text{ MeV}$ e $T_f = 14,8 \text{ MeV}$ para $y = 0,3$ e $y = 0,5$ respectivamente. Ao considerarmos os efeitos coulombiano e de superfície, esses valores alteram-se para $T_f = 11,2 \text{ MeV}$ e $T_f = 13,8 \text{ MeV}$. Na verdade a temperatura flash possui uma ligação direta com a incompressibilidade do sistema, que pode ser escrita em termos da energia livre. Isso será melhor explicado no capítulo 3.

Há uma relação entre a energia livre por partícula e o potencial químico do sistema (energia livre de Gibbs por partícula) quando tratamos sistemas no equilíbrio hidrostático ($P = 0$).

²O cálculo da temperatura flash para o caso da matéria nuclear infinita é feito no apêndice C.

Demonstraremos essa relação primeiramente lembrando que

$$\mu = g = \frac{\partial F}{\partial N} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho}. \quad (1.48)$$

Com isso temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} &= \frac{\partial(F/V)}{\partial(N/V)} = \frac{\partial(F/V)}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial(N/V)} \\ &= - \left(\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial V} - \frac{F}{V^2} \right) \frac{V^2}{N} \\ &= \frac{V}{N} \left(- \frac{\partial F}{\partial V} \right) + \frac{F}{N} \\ &= \frac{P + \mathcal{F}}{\rho}, \end{aligned} \quad (1.49)$$

já que $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$. No equilíbrio hidrostático, ou seja, em $P(\rho_0) = 0$, temos então que

$$g(\rho_0) = \frac{\mathcal{F}(\rho_0)}{\rho_0}. \quad (1.50)$$

Tal relação pode ser visualizada na figura abaixo onde exemplificamos o caso da matéria nuclear infinita.

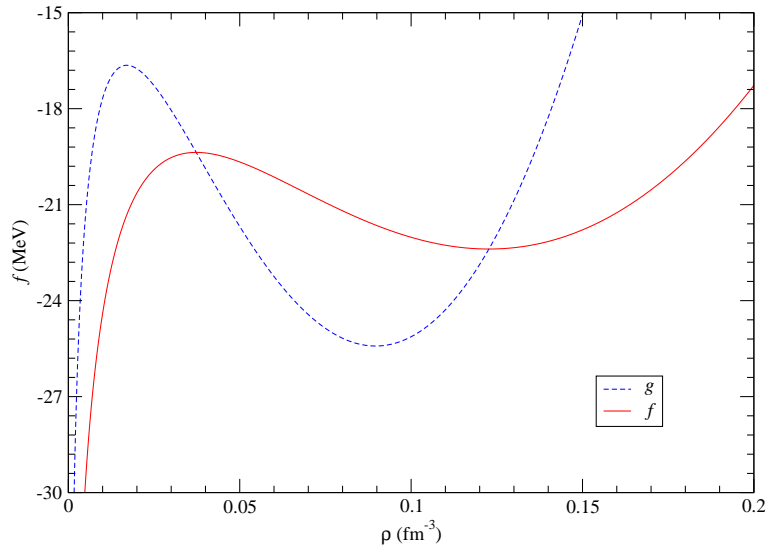


Figura 1.11: Energia livre de Helmholtz por partícula e potencial químico para $y = 0,5$ como funções da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$.

Essa relação é útil para descrever uma construção de Maxwell para a situação particular de sistemas simétricos em que $P = 0$. Para isso é necessário procurar os pontos de interseção das curvas, mostradas anteriormente, que têm o mesmo valor de energia. Isso só ocorre em uma temperatura específica, correspondendo à isoterma (gráfico $P \times \rho$) na qual será traçada a construção de Maxwell propriamente dita. As próximas duas figuras ilustram esse caso.

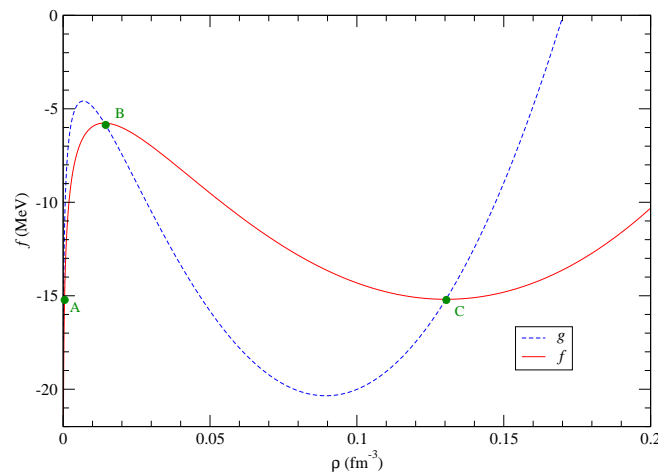


Figura 1.12: Energia livre de Helmholtz por partícula e potencial químico para $y = 0,5$ como funções da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 4 \text{ MeV}$.

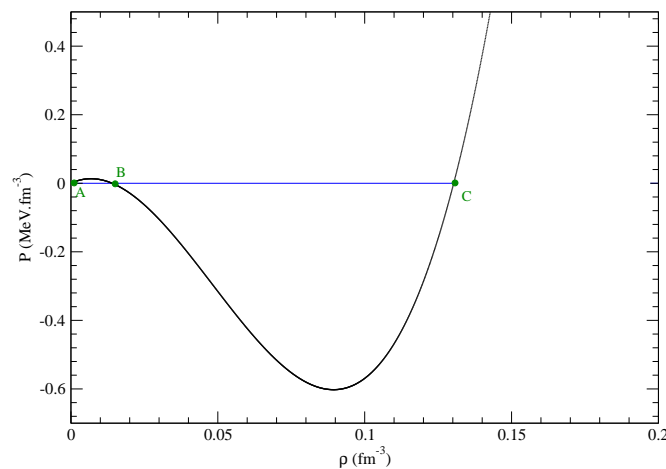


Figura 1.13: Construção de Maxwell para $y = 0,5$, $C_s = C = 0$ e $T = 4 \text{ MeV}$.

Uma forma mais geral de se fazer a construção de Maxwell é através da curva $\mathcal{F} \times \rho$, onde $\mathcal{F} = \frac{E}{V}$. O critério de Gibbs para coexistência de fases exige que nas duas fases potenciais químicos e pressões sejam iguais. Com essa imposição,

$$\mu = \frac{\mathcal{F}(\rho_2) - \mathcal{F}(\rho_1)}{\rho_2 - \rho_1} \quad (1.51)$$

que nada mais é que a tangente comum do gráfico citado para uma dada temperatura. É importante frisar que nesse caso não há restrição quanto à pressão, mas apenas que essa seja a mesma nas duas fases. O caso em que $y = 0,5$ é mostrado na figura seguinte.

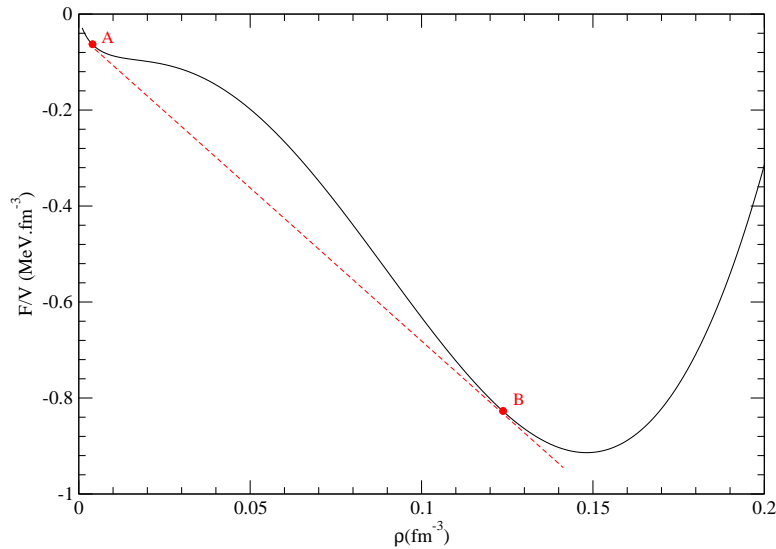


Figura 1.14: Energia livre de Helmholtz por volume para $y = 0,5$ como função da densidade para $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$. A linha tracejada indica a tangente comum.

Para melhor ressaltar aspectos importantes do gráfico, adicionamos o termo $15.58\rho \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. Com os pontos A e B marcados na figura acima e através de (1.51), calculamos o potencial químico $\mu \cong -22,1 \text{ MeV}$. Com este valor e usando, por exemplo,

$$\frac{P(\rho_1)}{\rho_1} = \mu - f(\rho_1) \quad (1.52)$$

obtivemos aproximadamente $0,0386 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$ para a pressão, que permite a apresentação da construção de Maxwell, em um diagrama $P \times \rho$, mostrado abaixo.

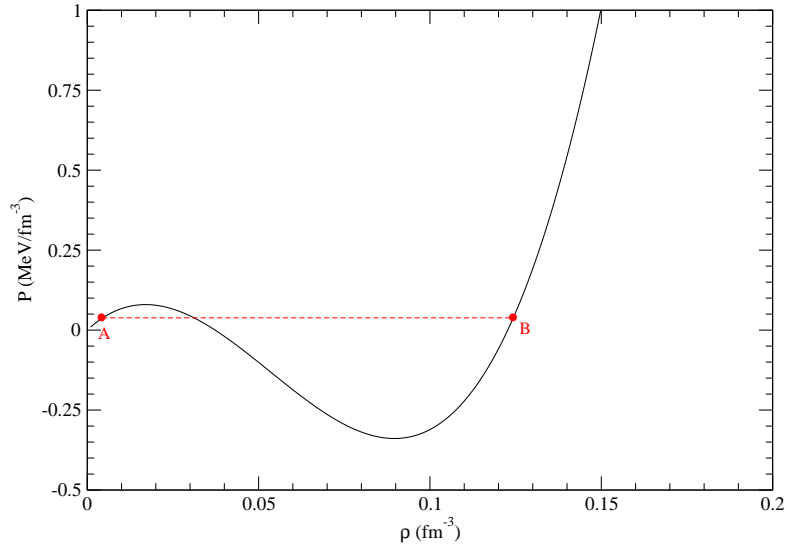


Figura 1.15: Construção de Maxwell para $y = 0,5$, $C_s = C = 0$ e $T = 10 \text{ MeV}$.

Para sistemas binários, esse tipo de construção deve ser feita com cuidado pois como será mostrado no capítulo 4, para cada fração fixa existem duas pressões distintas em uma mesma isoterma na coexistência de fases. Esse procedimento é extremamente trabalhoso e no caso de sistemas de duas componentes não o utilizaremos.

Capítulo 2

Regiões de Instabilidade

Devido à introdução da assimetria no sistema temos que levar em conta não só a instabilidade mecânica, mas também a instabilidade química. As regiões de instabilidade são definidas pelas seguintes condições

$$\left(\frac{\partial\mu_p}{\partial y}\right)_{T,\rho} < 0, \quad \left(\frac{\partial\mu_n}{\partial y}\right)_{T,\rho} > 0 \quad \text{e} \quad (2.1)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T,y} < 0. \quad (2.2)$$

Pode-se encontrar as densidades que delimitam tais regiões pelas condições de fronteira para as instabilidades mecânica e química. Essas condições são fornecidas respectivamente por

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{y,T} = 0 \quad (2.3)$$

e

$$\left(\frac{\partial\mu_q}{\partial y}\right)_{P,T} = 0 \quad (2.4)$$

onde como mencionado no capítulo 1, o subíndice q pode ser utilizado tanto para prótons quanto para nêutrons.

2.1 Spinodal Mecânica

Os pontos spinodais delimitam as regiões de instabilidade mecânica do sistema, representados pelos pontos D e E da Fig.C.1 (apêndice C), que ocorrem para um

valor $T = T_s \leq T_c$. Esses pontos são obtidos através da definição dada pela equação abaixo.

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{\rho=\rho_s} = 0 \quad (2.5)$$

e

$$P(\rho_s) = P_s \quad (2.6)$$

Aplicando essas definições na EOS, obtemos:

$$\begin{aligned} T_s - 2a_0(y)\rho_s + 6a_3\rho_s^2 + 2Cy^2\rho_s - \frac{2}{9}C_s\rho_s^{-1/3} + \\ + 2T_s^{-1/2} \left[\frac{2\pi(\hbar c)^2}{m} \right]^{3/2} \frac{1}{8\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y - 1)^2]\rho_s = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

No caso em que desconsideramos C_s e a degenerescência, temos

$$\rho_s = \frac{a_0(y) - Cy^2 \pm \sqrt{(a_0(y) - Cy^2)^2 - 6a_3T_s}}{6a_3} \quad (2.8)$$

onde essas representam as densidades que delimitam a região de instabilidade mecânica do sistema e recebem o nome de densidades spinodais.

A Fig.2.1 representa tal região de instabilidade e foi gerada pela equação (2.7) com $C_s = 0$ e sem o termo de degenerescência. O gráfico foi construído utilizando diferentes valores para y .

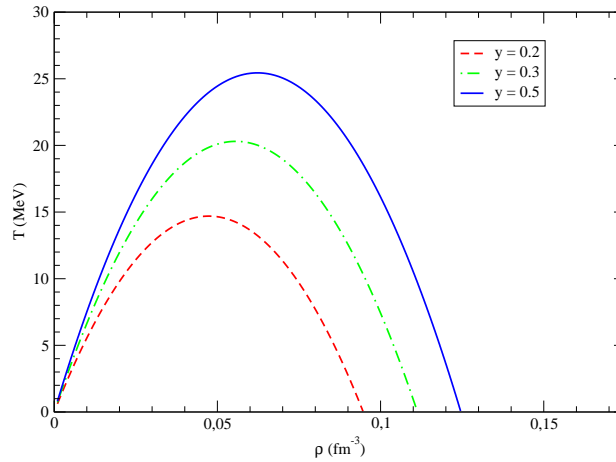


Figura 2.1: Spinodais mecânicas.

2.2 Spinodal Química

A equação que nos fornece as densidades que delimitam a região de instabilidade química é retirada de (2.4). Note que o potencial químico não possui uma dependência explícita com relação à pressão, por isso temos que utilizar a relação termodinâmica envolvendo derivadas citada abaixo, para resolvê-lo.

$$\left(\frac{\partial X}{\partial U}\right)_W = \left(\frac{\partial X}{\partial Y}\right)_Z + \left(\frac{\partial X}{\partial Z}\right)_Y \left(\frac{\partial Z}{\partial Y}\right)_W. \quad (2.9)$$

Neste caso, $X = \mu_q$, $U = Y = y$, $Z = \rho$ e $W = P$. A temperatura foi feita constante para todas as derivadas. Fazendo essas alterações em (2.9), encontramos:

$$\left(\frac{\partial \mu_q}{\partial y}\right)_{P,T} = \left(\frac{\partial \mu_q}{\partial y}\right)_{\rho,T} + \left(\frac{\partial \mu_q}{\partial \rho}\right)_{y,T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_{P,T}, \quad (2.10)$$

com o termo $\left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_{P,T}$ podendo ser escrito como:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_{P,T} = -\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_{\rho,T}}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{y,T}}. \quad (2.11)$$

Substituindo a equação (2.11) em (2.10) e utilizando a condição dada pela equação (2.4) obtemos:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{y,T} = \frac{\left(\frac{\partial \mu_q}{\partial \rho}\right)_{y,T} \left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_{\rho,T}}{\left(\frac{\partial \mu_q}{\partial y}\right)_{\rho,T}}. \quad (2.12)$$

A equação acima pode ser resolvida sem problemas e nos fornece a expressão abaixo, que encontra os limites da região de instabilidade química.

$$c_3\rho^3 + c_2\rho^2 + c_1\rho + c_{2/3}\rho^{2/3} + c_{-1/3}\rho^{-1/3} + c_0 = 0 \quad (2.13)$$

onde

$$c_0 = T^2, \quad (2.14)$$

$$c_{-1/3} = -\frac{2}{9}C_sT, \quad (2.15)$$

$$c_{2/3} = \left[-\frac{2T\lambda^3}{9\sqrt{2}\gamma} - \frac{32}{27} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 - \frac{4}{9}C \right] C_s y(1-y), \quad (2.16)$$

$$c_1 = \left[-\frac{4}{3}(1-x_0)a_0 + 2Cy \right] T + \frac{T^2\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma}, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} c_2 = & 6a_3T - \left[\frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0^2 + \frac{8}{3}(1-x_0)a_0C \right] y(1-y) + \\ & + \left[\frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 - 16a_0 + 8C + \frac{2T\lambda^3}{\sqrt{2}\gamma} \right] \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma} y(1-y) \end{aligned} \quad (2.18)$$

e

$$c_3 = \left[32 \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 + 12C \right] a_3 y(1-y) + \frac{6T\lambda^3}{\sqrt{2}\gamma} a_3 y(1-y). \quad (2.19)$$

Traçamos a spinodal química (Fig.2.2) para diferentes frações de prótons, com $C_s = 0$ e sem o termo de degenerescência, como no caso anterior. A instabilidade química aumenta a região metaestável do sistema e isso faz com que a curva spinodal (gráfico $T \times \rho$) para o caso assimétrico seja mais “difusa” com relação à curva do caso simétrico. Entenda-se aqui como região de metaestabilidade, tanto mecânica quanto química, a região de interseção entre a spinodal com a curva de coexistência de fases, ainda não apresentada.

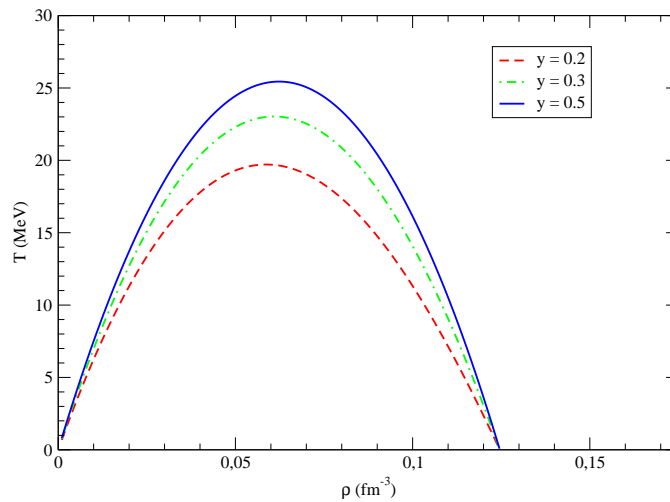


Figura 2.2: Spinodais químicas.

Perceba que para a matéria simétrica, as curvas de instabilidade mecânica e química (figuras 2.1 e 2.2 respectivamente) são idênticas. Isso não ocorre para a matéria assimétrica que possui uma região de instabilidade química diferente da região de instabilidade mecânica.

2.3 Ponto Pseudo-crítico

Nessa seção vamos desconsiderar a instabilidade química. Assim, o ponto crítico definido por $(P_c, \rho_c$ e $T_c)$ ocorrerá quando as densidades dos pontos spinodais colapsarem em uma única densidade ρ_c quando $T = T_c$. Nessa análise, estando ausente a instabilidade química, chamaremos este ponto de pseudo-crítico.

Para determinar esses parâmetros pseudo-críticos devemos então analisar gráficos semelhantes ao da Fig.1.1. O ponto P da isoterma com $T = T_c$ (apêndice C, Fig.C.1) é o ponto de inflexão no qual os pontos spinodais coincidem e que portanto deve obedecer as seguintes condições na equação (1.2) :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T,y} = 0 \quad (2.20)$$

e

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{T,y} = 0. \quad (2.21)$$

O que resulta nas seguintes equações acopladas:

$$T_c - 2a_0(y)\rho_c + 6a_3\rho_c^2 + 2Cy^2\rho_c + 2\frac{T_c\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma}[1 + (2y - 1)^2]\rho_c - \frac{2}{9}C_s\rho_c^{-1/3} = 0, \quad (2.22)$$

$$2a_0(y) + 12a_3\rho_c + 2Cy^2 + 2\frac{T_c\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma}[1 + (2y - 1)^2] + \frac{2}{27}C_s\rho_c^{-4/3} = 0. \quad (2.23)$$

Multiplicando (2.23) por ρ_c , temos:

$$-2a_0(y)\rho_c + 12a_3\rho_c^2 + 2Cy^2\rho_c + 2\frac{T_c\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma}[1 + (2y - 1)^2]\rho_c + \frac{2}{27}C_s\rho_c^{-1/3} = 0. \quad (2.24)$$

Subtraindo (2.24) de (2.22), encontramos os parâmetros críticos, que agora estão modificados pelo termo de assimetria da seguinte forma:

$$T_c = 6a_3\rho_c^2 + \frac{8}{27}C_s\rho_c^{-1/3} \quad (2.25)$$

onde ρ_c é retirado da expressão abaixo, que é calculado substituindo a equação (2.25) em (2.24).

$$12a_3\rho_c^2 - 2a_0(y)\rho_c + 2Cy^2\rho_c + \frac{2}{27}C_s\rho_c^{-1/3} + 2\left(6a_3\rho_c^2 + \frac{8}{27}C_s\rho_c^{-1/3}\right)^{-1/2} \left[\frac{2\pi(\hbar c)^2}{939}\right]^{3/2} \frac{1}{8\sqrt{2}\gamma}[1 + (2y - 1)^2]\rho_c = 0 \quad (2.26)$$

As densidades pseudo-críticas são encontradas resolvendo-se numericamente a equação (2.26). Com esses valores, obtemos a temperatura pseudo-crítica do sistema através de (2.25) e a pressão crítica através da EOS (1.2).

O fator de assimetria afeta os valores pseudo-críticos das variáveis termodinâmicas. Por exemplo, o gráfico abaixo mostra como a temperatura pseudo-crítica, equação (2.25), varia com y . É curioso notar que, embora o parâmetro de superfície influa no valor da temperatura em função de y , como pode ser observado nas curvas abaixo, seu valor máximo para cada caso ocorre para um mesmo valor de y .

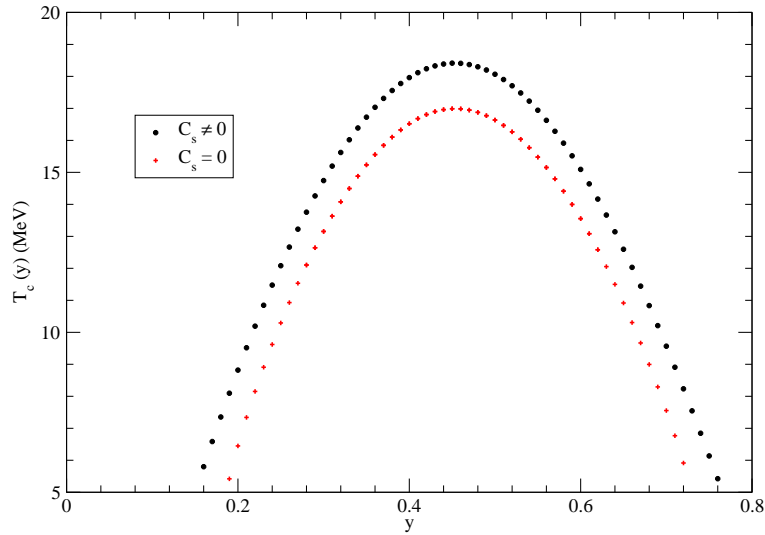


Figura 2.3: Temperatura pseudo-crítica do sistema versus fração de prótons com C_s nulo e não nulo. O termo coulombiano foi feito diferente de zero.

Ainda com o objetivo de ter algo mais palpável, analítico, para prosseguir em nossa aproximação, desprezamos agora tanto o termo de superfície quanto a correção de degenerescência para a temperatura. Nesse caso, pode-se calcular os parâmetros

pseudo-críticos de maneira analítica, como pode ser observado nas equações (2.27)-(2.29),

$$P_c(y) = \frac{(a_0(y) - Cy^2)^3}{108a_3^2}, \quad (2.27)$$

$$T_c(y) = \frac{(a_0(y) - Cy^2)^2}{6a_3} \quad (2.28)$$

e

$$\rho_c(y) = \frac{a_0(y) - Cy^2}{6a_3}. \quad (2.29)$$

Recaímos nos valores críticos para a matéria nuclear simétrica, fazendo $y = 0,5$ e $C = 0$, com isso recuperamos os valores mostrados no apêndice C.

O gráfico $T_c(y) \times y$ da expressão dada pela equação (2.28) nos fornece a curva representada abaixo pela Fig.2.4, com $C_s = 0$.

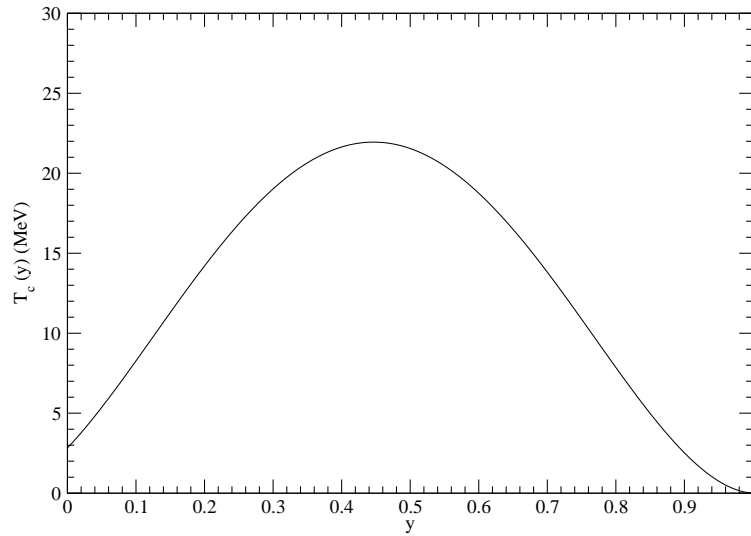


Figura 2.4: Temperatura pseudo-crítica do sistema versus fração de prótons. O termo coulombiano foi feito diferente de zero.

Nos gráficos anteriores, a posição de máximo da temperatura pseudo-crítica é distinta daquela da matéria puramente simétrica, $y = 0,5$. No caso assimétrico,

a posição de máxima temperatura surge em $y = 0,45$. Isso ocorre devido a repulsão coulombiana que se junta ao parâmetro $a_0(y)$, redefinindo-o, como pode ser observado dos valores para P_c , ρ_c e T_c , acima apresentados.

Aqui, é importante chamar a atenção que, como veremos no capítulo 4, teremos um novo gráfico para a temperatura crítica do sistema, onde a instabilidade química será incorporada. Ver-se-á então que, apenas os pontos de máximo da temperatura crítica e da pseudo-crítica, dispostos em função de y , coincidem.

2.4 Energia Livre de Gibbs-Landau

Esta seção tem uma estreita relação com a anterior. Pretendíamos no início de nosso trabalho construir uma expansão para a energia livre de Gibbs-Landau, envolvendo também a equação de estado com relação às suas instabilidades químicas, mas isso não foi possível. Assim, a apresentamos de forma aproximada, desconsiderando o termo de superfície e a correção de degenerescência na expansão da temperatura. Por que tal expansão de Gibbs-Landau é importante? Porque através dela é possível tratar das flutuações de um sistema que coexiste em fases líquido-gás, como é o nosso caso. Usualmente, ao se fazer a construção de Maxwell, obtém-se os pontos de equilíbrio do sistema (as fases que coexistem) e qualquer flutuação é desprezada.

Obtidas as densidades de equilíbrio, (veja os pontos A e B da Fig.C.1), todo o ramo da curva $P(\rho)$ entre A e B é substituído por uma reta que sai de A e vai até B . No entanto, ainda analisando a Fig.C.1, há pontos metaestáveis (ramos entre A e D e entre B e C) onde o sistema, em princípio, poderia existir durante um certo tempo, antes de seu decaimento para a região de instabilidade (ramo entre D e E). Infelizmente, os pontos entre A e B não são acessíveis via uma construção de Maxwell. Em sistemas infinitos, as flutuações mais importantes se dão em torno do ponto crítico mas em sistemas finitos estas flutuações podem ser importantes também em pontos distantes, para uma certa isoterma $T < T_c$. Para um sistema mantido sob temperatura T e pressão P constantes, a probabilidade de flutuação de um estado para outro é dada por $e^{-\Delta G/T}$, onde G é a energia livre de Gibbs. Mas, para

isso, precisa-se de $G(\rho)$ em qualquer ponto onde P e T sejam fixados. No entanto, pela construção de Maxwell, para cada isoterma haverá apenas uma pressão igual para todos os pontos entre aqueles nos quais as fases coexistem. A expansão para a energia livre de Gibbs-Landau, permite que todos os pontos, de qualquer isoterma, sejam acessíveis [17]. Para tal, define-se um parâmetro de ordem, no caso líquido-gás para sistemas simétricos é usual $\eta = \rho - \rho_c$, e constrói-se a função $G(P, T, \eta)$, para T e P fixos, como uma expansão em η . Para o caso pseudo-crítico da seção anterior é possível obter analiticamente a energia livre de Gibbs-Landau, que apresentamos abaixo.

A equação (1.2) pode ser reescrita em termos do parâmetro de ordem η e das variáveis reduzidas t e P' , como mostra a equação (2.30), que foi devidamente calculada no apêndice C (Eq.C.42).

$$\frac{P'}{3} = \left(\frac{1}{3} - t\right) - t\eta + \frac{1}{3}\eta^3. \quad (2.30)$$

Agora tanto o parâmetro de ordem quanto as variáveis reduzidas dependem da fração de prótons y como mostram as equações (2.31), (2.32) e (2.33).

$$\eta = \frac{\rho - \rho_c(y)}{\rho_c(y)}, \quad (2.31)$$

$$t = \frac{T - T_c(y)}{T_c(y)}, \quad (2.32)$$

$$P' = \frac{P}{P_c(y)}. \quad (2.33)$$

Para obter a expansão de Landau, basta integrar a equação para P' , equação (2.30), com o vínculo

$$\left. \frac{\partial G}{\partial \eta} \right|_{t, P'} = 0 \quad (2.34)$$

feito isso, obtemos

$$G = G_0 + NT_c(y) \left[- \left(P' - \frac{1}{3} + t \right) \eta - \frac{1}{2} t \eta^2 + \frac{1}{12} \eta^4 \right]. \quad (2.35)$$

Para o caso simétrico, o estudo desta função encontra-se muito bem apresentado por Goodman, Kapusta e Mekjian [18]. Uma generalização deste estudo para uma

expansão da energia livre de Gibbs-Landau com parâmetros de ordem definidos como flutuações de pontos spinodais pode ser encontrada em [19]. Aqui, o que fizemos foi mostrar que mesmo com a introdução do termo coulombiano, sua forma permanece a mesma, mas com um novo valor para a temperatura crítica, aliás, no caso, pseudo-crítica.

Capítulo 3

Incompressibilidade e Calor

Específico

Nas seções anteriores e em conexão com o apêndice C, discutimos criticalidade de sistemas de um componente e dois componentes para y fixo. Nessa abordagem, a idéia de criticalidade foi apresentada desprezando-se a instabilidade química que não coincide com a instabilidade mecânica, a menos de casos particulares ($y = 0, 5$, núcleos mágicos, por exemplo, ou matéria nuclear infinita). Ainda continuando na idéia de pseudocriticalidade, a visão que se teve foi a de que o ponto crítico surge à medida que as densidades líquido-gás se aproximam na curva de coexistência de fases. Nessa visão, núcleos são excitados através da temperatura e fases coexistem até que uma única fase defina-se a partir de uma temperatura crítica. No entanto, algum tempo atrás, Stocker [20] propôs que a criticalidade dos núcleos também pudesse ser vista, alternativamente, de estados metaestáveis. Segundo sua proposta, haveria já uma criticalidade nos núcleos, na densidade em que a incompressibilidade fosse nula em uma temperatura a partir da qual já não existisse mais equilíbrio hidrostático ($P = 0$). No ponto crítico usual, a incompressibilidade é nula e há divergência do calor específico à pressão constante. No que Stocker sugeriu como uma outra criticalidade, acima exposta, também. Assim, outras investigações nesse sentido foram feitas [21]. Um estudo rigoroso da dinâmica de pontos metaestáveis, com certeza, pertence a uma termodinâmica de não equilíbrio, o que não será feito em

nosso estudo. Usaremos a termodinâmica de equilíbrio, supondo que o tempo das flutuações de densidade (flutuações mecânicas) seja muito curto quando comparado à termalização do sistema. Nessa seção, e na perspectiva da termodinâmica de equilíbrio, estudaremos esse outro tipo de criticalidade sugerida.

A incompressibilidade da matéria nuclear é medida através da energia de ressonância gigante de monopolo isoscalar (modo de compressão, chamado de “*breathing mode*”). Seu valor experimental originalmente obtido foi $210 \pm 30 \text{ MeV}$ [22] mas, recentemente, outros estudos indicam que este valor, com uma margem de incerteza menor, seja $230 \pm 5 \text{ MeV}$ [23]. Utilizando-se vários modelos teóricos, verificou-se que a incompressibilidade decresce com o aumento da temperatura. Seu estudo torna-se também importante ao se estudar explosões de supernovas [24].

Em núcleos finitos e à luz do modelo da gota líquida, a incompressibilidade pode também ser expressa como uma expansão leptodérmica envolvendo os termos de volume, assimetria, coulombiano e de superfície [25, 26]. O resultado experimental acima corresponderia nessa expansão ao termo de volume. Experimentalmente, a incerteza quanto às demais contribuições é enorme.

3.1 Incompressibilidade Isotérmica

Há diferentes maneiras de se obter a incompressibilidade de forma termodinamicamente consistente. Uma expressão muito geral e conhecida é dada por

$$\begin{aligned} K_T &= 9 \left[\rho^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} + 2\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right] \\ &= 9 \left[\rho^2 \frac{\partial^2 (\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho^2} + 2\rho \frac{\partial (\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho} \right]. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Não é difícil mostrar que uma outra, equivalentemente geral, veja apêndice D, é

$$K_T(T, y) = 9 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{\rho=\rho', T}. \quad (3.2)$$

Ambas, calculam igualmente a incompressibilidade para qualquer isoterma, uma vez especificada a densidade ρ' de interesse. Abaixo, tratamos de particularidades para quando $\rho' = \rho_0$, seja a densidade de saturação do sistema ou, equivalentemente,

$P(\rho_0) = 0$. Note que o segundo termo da expressão (3.1) pode ser escrito da seguinte maneira

$$\frac{\partial(\mathcal{F}/\rho)}{\partial\rho} = \frac{1}{\rho'} \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\rho} - \frac{\mathcal{F}}{\rho^2} \quad (3.3)$$

e por (1.50) temos

$$\left. \frac{\partial(\mathcal{F}/\rho)}{\partial\rho} \right|_{\rho=\rho_0} = 0 \quad (3.4)$$

onde ρ_0 é tal que $P(\rho_0) = 0$. Logo a equação da incompressibilidade torna-se

$$K_T(T, y) = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2(\mathcal{F}/\rho)}{\partial\rho^2} \right|_{\rho_0} = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial\rho^2} \right|_{\rho_0}, \quad (3.5)$$

mostrando assim que quando a incompressibilidade é nula, a função f apresenta um ponto de inflexão.

Em nosso trabalho calcularemos a incompressibilidade isotérmica apenas para as densidades correspondentes ao equilíbrio hidrostático. Para isso, usaremos a equação (3.2) com $\rho' = \rho_0$.

Note então que quando $K_T = 0$, temos configurado o ambiente em que

$$\left. \frac{\partial P}{\partial\rho} \right|_{\rho_0} = P(\rho_0) = 0, \quad (3.6)$$

condições suficientes para nos fornecer a temperatura flash do sistema.

A partir de agora analisaremos o comportamento da incompressibilidade em função da temperatura e fração de prótons, dada por:

$$K_T(T, y) = 9T - 18a_0(y)\rho_0 + 54a_3\rho_0^2 + 18Cy^2\rho_0 + \frac{18T\lambda^3}{8\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y-1)^2]\rho_0 - 2C_s\rho_0^{-1/3}. \quad (3.7)$$

Essa expressão não é válida para temperatura nula. De novo, como já mencionado, para corrigir esse limite é preciso acrescentar o termo de derivada da pressão cinética, ou seja, somar

$$9 \left. \frac{\partial P_{cin}}{\partial\rho} \right|_{\rho_0} = \frac{3\hbar^2}{m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \rho_0^{2/3} \quad (3.8)$$

à equação (3.7) para $T = 0$. No caso da matéria nuclear infinita, o valor encontrado de $K_T(T = 0, y = 0, 5)$ em nosso modelo é de aproximadamente 362 MeV .

Geramos dois gráficos representados pelas Fig.3.1 e Fig.3.2 para alguns valores de y .

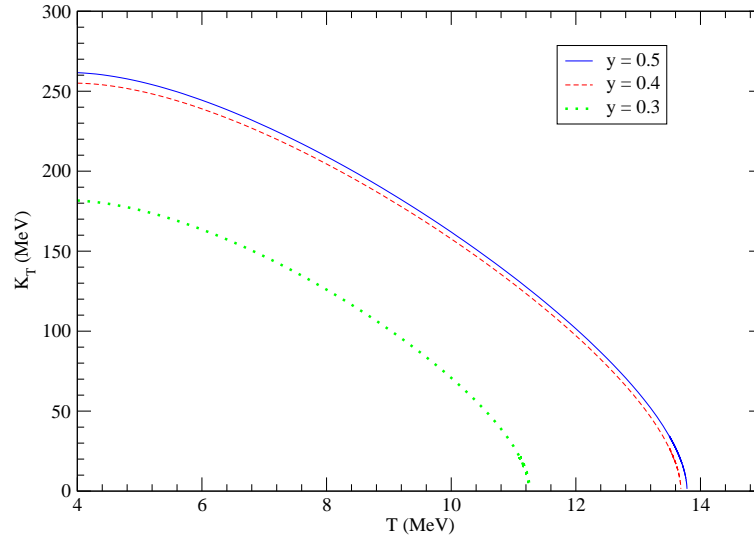


Figura 3.1: Incompressibilidade isotérmica versus temperatura para diferentes valores de y com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

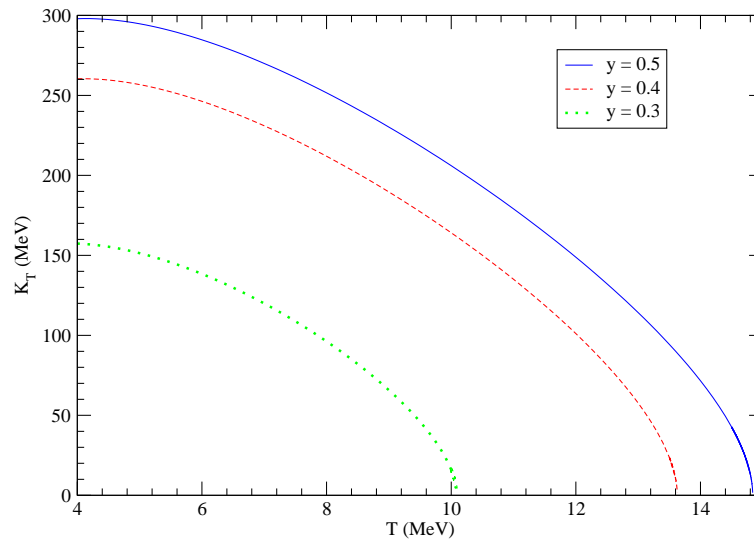


Figura 3.2: Incompressibilidade isotérmica versus temperatura para diferentes valores de y e $C = C_s = 0$.

As figuras mostram que o valor de K_T diminui tanto com o aumento da temperatura (considerando a fração fixa) quanto com o decréscimo da fração de prótons do sistema. Perceba também que as temperaturas que anulam a incompressibilidade

(temperaturas flash) para as frações distintas estão de acordo com as encontradas a partir do gráfico da energia livre por partícula, mostrado no capítulo 1.

3.2 Incompressibilidade Adiabática

Podemos encontrar a incompressibilidade adiabática (K_s) através da equação (3.1). Como estão envolvidas derivadas da energia livre com relação a densidade, e neste caso à entropia constante, podemos escrever

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)_s &= \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s - T \left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_s \\ &= \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s \end{aligned} \quad (3.9)$$

logo,

$$K_s(T, y) = 9 \left[\rho^2 \left(\frac{\partial^2 e}{\partial \rho^2}\right)_s + 2\rho \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s \right]. \quad (3.10)$$

Para resolvermos essa equação devemos relembrar a identidade termodinâmica envolvendo derivadas dada pela equação (2.9):

No nosso caso $X = \frac{\epsilon}{\rho} = e$, $U = Y = \rho$, $W = s$ e $Z = T$. Logo fazendo essas alterações em (2.9), encontramos:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s = \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T + \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_s, \quad (3.11)$$

com o termo $\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_s$ podendo ser escrito como:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_s = -\frac{\left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_T}{\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_\rho}. \quad (3.12)$$

Substituindo a equação (3.12) em (3.11) e utilizando as equações (1.43) e (1.39), obtemos a seguinte forma para a equação (3.10):

$$\begin{aligned} K_s(T, y) &= -18a_0(y)\rho + 54a_3\rho^2 + 18Cy^2\rho - 2C_s\rho^{-1/3} + \frac{45T\lambda^3}{16\sqrt{2\gamma}}[1 + (2y - 1)^2]\rho \\ &+ \frac{15T + \frac{15T}{4} \left(\frac{\lambda^3}{8\sqrt{2\gamma}}\right)^2 [1 + (2y - 1)^2]^2 \rho^2 - \frac{15T\lambda^3}{8\sqrt{2\gamma}}[1 + (2y - 1)^2]\rho}{\left(1 - \frac{\lambda^3}{16\sqrt{2\gamma}}\rho\right)}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Ao desconsiderarmos a degenerescência do sistema, ou seja, descartando os termos que contém λ em (3.13) temos que a expressão para K_s torna-se

$$K_s(T, y) = 15T - 18a_0(y)\rho_0 + 54a_3\rho_0^2 + 18Cy^2\rho_0 - 2C_s\rho_0^{-1/3}. \quad (3.14)$$

Essa equação no limite em que a temperatura tende à zero fornece o mesmo resultado que a incompressibilidade isotérmica. Para isso, basta que ao se tomar o limite $T = 0$, também se acrescente o termo (3.8), como fizemos anteriormente para K_T .

A partir da expressão da incompressibilidade adiabática, geramos os gráficos mostrados nas figuras (3.3) e (3.4). Todas essas curvas foram geradas a partir de $T = 5 \text{ MeV}$, pois para temperaturas menores, K_s , a exemplo de outras grandezas termodinâmicas, como já discutido, apresenta um comportamento errôneo nessa região, provocado pela expansão da pressão cinética de um gás quase degenerado que não funciona bem em temperaturas muito baixas.

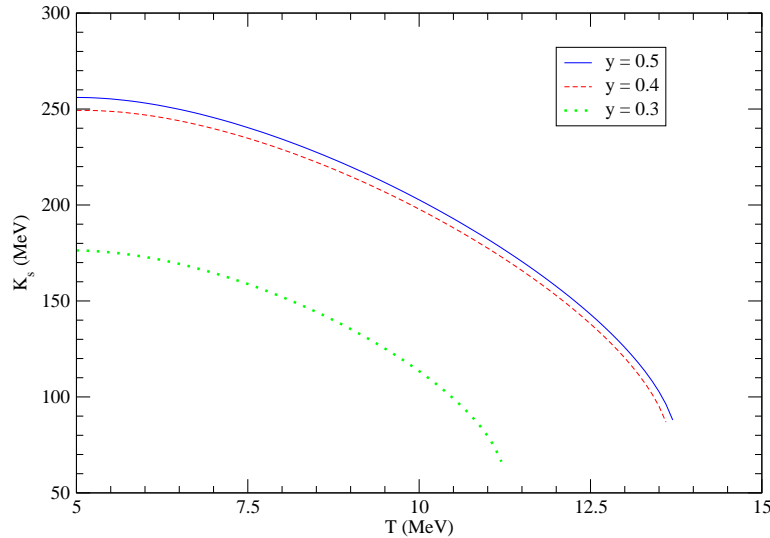


Figura 3.3: Incompressibilidade adiabática versus temperatura para y constante com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

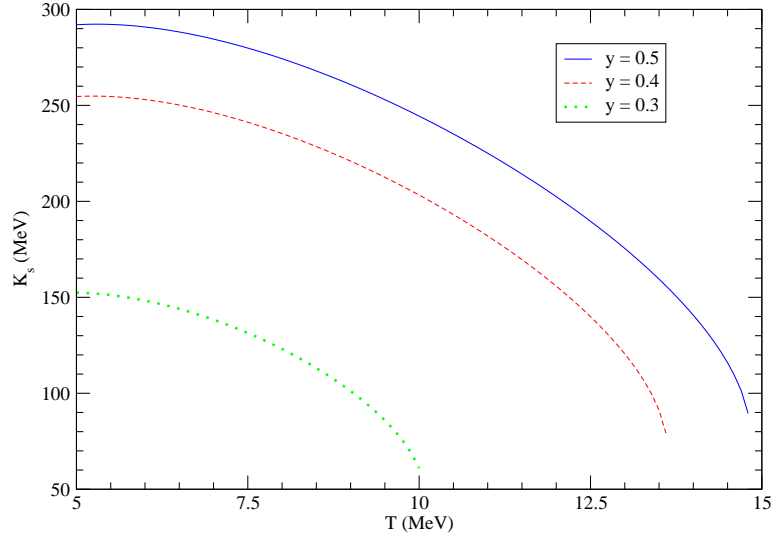


Figura 3.4: Incompressibilidade adiabática versus temperatura para y constante e $C = C_s = 0$.

Outro ponto importante a ser destacado é a influência dos termos coulombiano e de superfície. Nos casos em que $y = 0,5$ e $y = 0,4$ vemos que o valor da incompressibilidade adiabática diminui com a inclusão desses termos. Já quando fixamos a fração em $y = 0,3$ percebe-se que a mesma sofre o processo inverso, isto é, sofre um aumento com a inclusão desses termos. Tal comportamento já foi exibido pela incompressibilidade isotérmica (Fig.3.1 e Fig.3.2).

As próximas duas figuras mostram uma comparação entre as curvas de K_T e K_s para frações de prótons fixas em $y = 0,5$ e $y = 0,3$ respectivamente. Ambas apresentam os termos de superfície e coulombiano não-nulos. Nota-se que a incompressibilidade isotérmica cai mais rapidamente e apresenta valores menores que a incompressibilidade adiabática. Note também que K_s não atinge o eixo das temperaturas, portanto não podemos tirar informações sobre a temperatura flash a partir do gráfico $K_s \times T$.

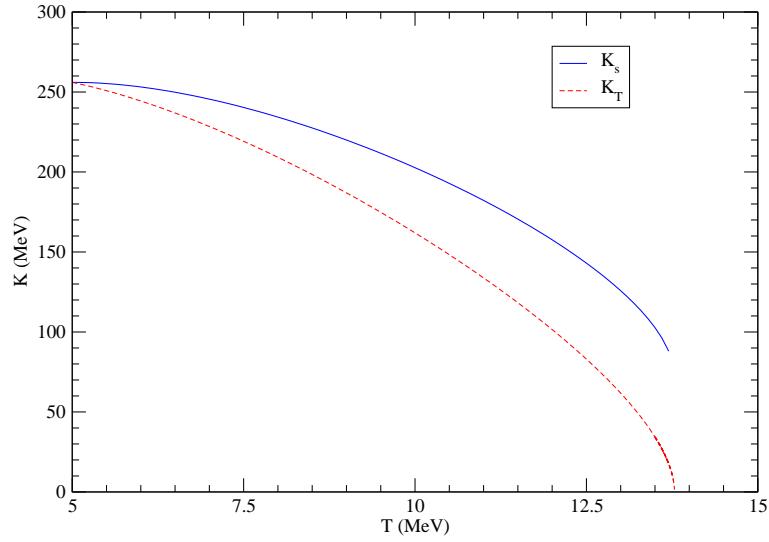


Figura 3.5: Incompressibilidade adiabática e isotérmica versus temperatura para $y = 0,5$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

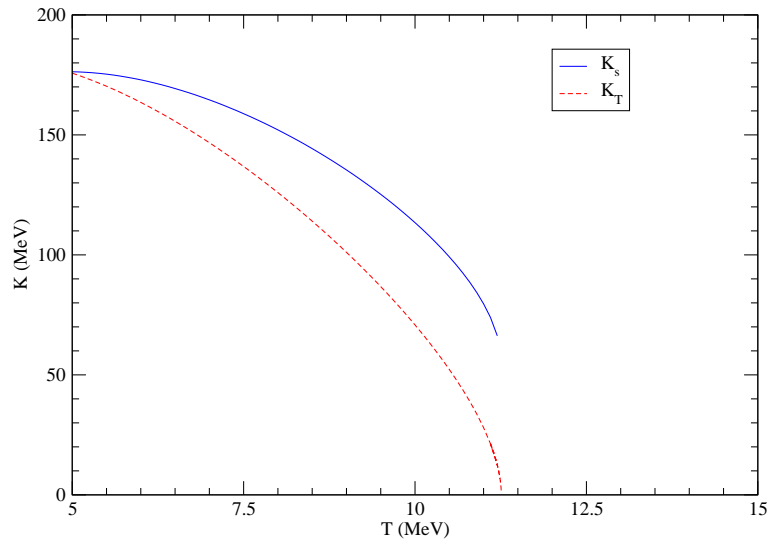


Figura 3.6: Incompressibilidade adiabática e isotérmica versus temperatura para $y = 0,3$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

3.3 Relação entre Incompressibilidade e Calor Específico por Partícula

Essa seção tem como objetivo verificar a relação termodinâmica entre os calores específicos por partícula (a pressão e volume constantes) e as incompressibilidades calculadas anteriormente, dada por:

$$\frac{c_V}{c_P} = \frac{K_T}{K_s}. \quad (3.15)$$

Primeiramente, pode-se obter o calor específico por partícula, a volume constante, através da seguinte definição

$$c_V(\rho, T) = T \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{y, \rho}, \quad (3.16)$$

que nos fornece a expressão

$$c_V(\rho, T) = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y - 1)^2] \rho \right). \quad (3.17)$$

O cálculo de c_P pode ser feito através de outra importante relação termodinâmica dada por

$$c_P - c_V = T \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T} \quad (3.18)$$

onde por (3.2) podemos reescrevê-la como

$$c_P - c_V = 9T \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)^2}{\rho^2 K_T}. \quad (3.19)$$

Com

$$\frac{\partial P}{\partial T} = \rho - \frac{\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y - 1)^2] \rho^2 \quad (3.20)$$

e K_T por (3.7), temos que

$$\begin{aligned} c_P(\rho, T) &= c_V(\rho, T) + \frac{9T(1 - \frac{\lambda^3}{16\sqrt{2}\gamma} [1 + (2y - 1)^2] \rho)^2}{K_T} \\ &= c_V + \frac{4Tc_V^2}{K_T} \\ &= c_V \left(1 + \frac{4Tc_V}{K_T} \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Interessante notar que na temperatura flash do sistema, ou seja quando $K_T = 0$, o calor específico a pressão constante é divergente embora o calor específico a volume constante seja finito assim como no gás de van der Waals.

Outra forma de se obter c_P é pela definição

$$c_P(\rho, T) = T \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{y,P} \quad (3.22)$$

onde por (2.9) temos

$$c_P(\rho, T) = T \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{y,\rho} + T \left. \frac{\partial s}{\partial \rho} \right|_{y,T} \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{y,P} \quad (3.23)$$

com $\left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{y,P}$ já calculado anteriormente em (1.37).

Com os valores específicos já obtidos, pode-se então calcular a razão $\frac{c_V}{c_P}$. Para simplificar os cálculos desprezaremos a degenerescência do sistema. Assim a partir de (3.21), temos

$$\frac{c_V}{c_P} = \frac{9T - 18a_0(y)\rho^2 + 54a_3\rho^3 + 18Cy^2 - 2C_s\rho^{-1/3}}{15T - 18a_0(y)\rho^2 + 54a_3\rho^3 + 18Cy^2 - 2C_s\rho^{-1/3}}. \quad (3.24)$$

Das equações (3.7) e (3.14) achamos a razão entre K_T e K_s dada por

$$\frac{K_T}{K_s} = \frac{9T - 18a_0(y)\rho^2 + 54a_3\rho^3 + 18Cy^2 - 2C_s\rho^{-1/3}}{15T - 18a_0(y)\rho^2 + 54a_3\rho^3 + 18Cy^2 - 2C_s\rho^{-1/3}}. \quad (3.25)$$

Comparando as equações (3.24) e (3.25), confirmamos a relação termodinâmica dada pela equação (3.15).

Antes de finalizar esta discussão, é importante ressaltar que a divergência de c_P , que ocorre para $K_T = 0$, de acordo com a equação (3.23), não é uma propriedade específica da temperatura flash, mas de qualquer ponto spinodal de qualquer isoterma, incluindo-se aí o próprio ponto crítico do sistema.

Capítulo 4

Coexistência de Fases

O estudo da transição de fases em sistemas mistos é muito mais complexo que em sistemas de um componente pela introdução da assimetria (y).

Neste caso como diferenciamos prótons de nêutrons, temos um sistema heterogêneo. Esse por sua vez se diferencia de um sistema homogêneo pelo fato de exibir simultaneamente mais de uma fase termodinâmica. Quando essas fases entram em equilíbrio termodinâmico, ou seja, para um sistema de dois componentes essa condição de equilíbrio significa que a temperatura, a pressão e o potencial químico de ambos os componentes sejam iguais em qualquer parte do sistema, estamos diante de uma coexistência de fases.

4.1 Critério de Gibbs para Sistemas Binários

A coexistência de fases de um sistema de dois componentes pode ser estudada com o auxílio do *Critério de Gibbs*. Esse critério nos diz que para cada valor de temperatura e pressão fixos, o potencial químico de cada componente deve possuir o mesmo valor.

No caso de sistemas binários essa coexistência é dada por uma superfície no diagrama P, y, T . Isso pode ser mostrado através da *Regra das Fases de Gibbs* que é dada por $f = c + 2 - m$, onde f representa os graus de liberdade do sistema, c corresponde ao número de componentes que o sistema possui e m é o número de

fases que o mesmo pode assumir, que no nosso estudo vale 2.

Pode-se dizer então que, ao tratarmos de sistemas de um componente temos $c = 1$ e logo, $f = 1$ indicando um grau de liberdade, representando uma linha no diagrama de fases. Quando tratamos de dois componentes, $c = 2$, temos dois graus de liberdade ($f = 2$) indicando a superfície de coexistência de fases citada anteriormente.

A análise dessa superfície de coexistência deve ser feita encontrando os valores de y , ρ , P que a delimitam para um determinado T . Esses valores são encontrados através do critério de Gibbs, isto é, para cada valor de pressão, densidade e temperatura, na EOS que é quadrática em y , temos um par de valores onde somente os valores que igualam a pressão e o potencial químico devem ser escolhidos. O critério de Gibbs pode ser descrito analiticamente como

$$P(\rho_a, y_a, T) = P(\rho_b, y_b, T), \quad (4.1)$$

$$\mu_p(\rho_a, y_a, T) = \mu_p(\rho_b, y_b, T) \quad \text{e} \quad (4.2)$$

$$\mu_n(\rho_a, y_a, T) = \mu_n(\rho_b, y_b, T). \quad (4.3)$$

Os subíndices a e b referem-se às diferentes fases do sistema. Na verdade, no sistema misto, temos um conjunto de três equações que devem ser satisfeitas já que os potenciais químicos dos componentes são distintos como podemos ver na figura seguinte.

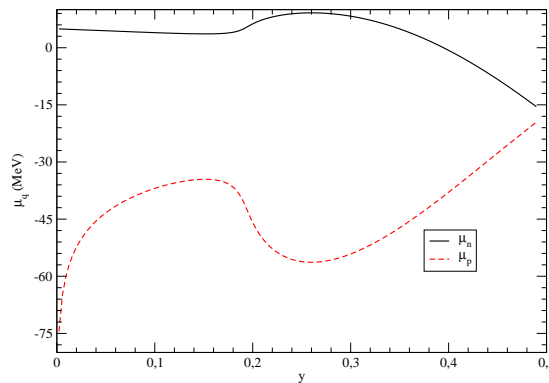


Figura 4.1: Potencial químico para prótons e nêutrons versus fração de prótons para $C = 0$. Aqui temos que $T = 10 \text{ MeV}$ e $P = 0.1 \text{ MeV.fm}^{-3}$.

4.2 Obtenção dos Pontos de Coexistência: Binodal

Para resolver o conjunto de equações (4.1)-(4.3) é preciso encontrar valores de y_a e y_b , por exemplo, a partir da análise dos gráficos do potencial químico. Geometricamente isso pode ser traduzido por encontrar um retângulo tal que o critério de Gibbs seja satisfeito. A figura abaixo ilustra esse método.

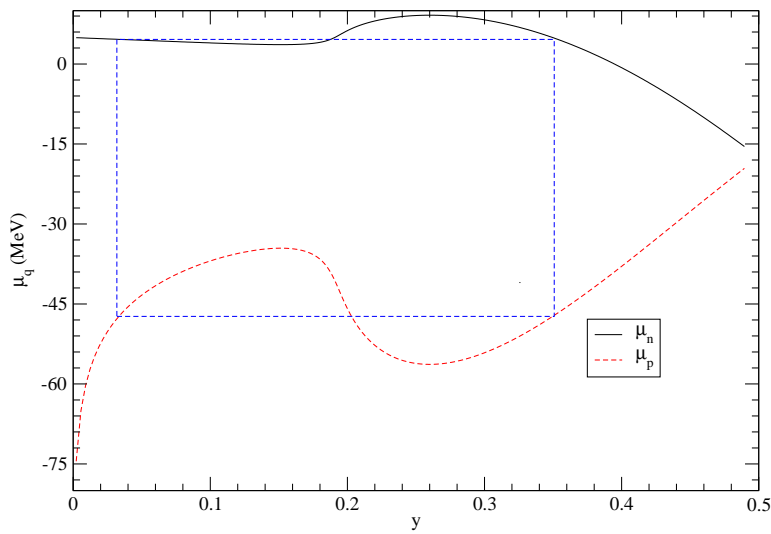


Figura 4.2: Construção geométrica usando a fração de prótons e o potencial químico obtido pela coexistência de fases com $C = 0$.

Assim, para cada temperatura devemos traçar os gráficos dos potenciais químicos e procurar o retângulo de interesse. Tal método é extremamente trabalhoso. Para contornar essa dificuldade, desenvolvemos um procedimento numérico que automatiza tal procura. O método adotado foi o seguinte. Primeiro fixamos um valor de temperatura, um valor de pressão e entramos com diversos valores de densidade incrementados por um valor fixo (no nosso caso $d\rho = 0.0001 \text{ fm}^{-3}$). A partir daí, recorreremos à equação de estado para encontrar os valores de y correspondentes aos dados de entrada. Para cada valor de densidade, encontramos dois valores para a fração. Tais valores são dados por

$$y_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ad}}{2a} \quad (4.4)$$

onde

$$a = - \left[\frac{8a_0}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) + \frac{T\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} + C \right] \rho^2, \quad (4.5)$$

$$b = \left[\frac{8a_0}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) + \frac{T\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} \right] \rho^2 \quad e \quad (4.6)$$

$$d = P - T\rho + \left[a_0 - \frac{2a_0}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) - \frac{T\lambda^3}{4\sqrt{2}\gamma} \right] \rho^2 - 2a_3\rho^3 + \frac{1}{3}C_s\rho^{2/3}. \quad (4.7)$$

Veja que a soma das duas soluções de y dadas em (4.4) é dada por¹

$$y_1 + y_2 = -\frac{b}{a} = \frac{\frac{8a_0}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) + \frac{T\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma}}{\frac{8a_0}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) + \frac{T\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma} + C}. \quad (4.8)$$

Dos valores encontrados para a fração de prótons, descartamos aqueles em que $y > 0,5$, já que a informação do outro intervalo pode ser obtida pela equação (4.8). Com isso calculamos os potenciais químicos para ambos os componentes.

A partir daí impomos as condições de estabilidade química e mecânica do sistema, dadas pelas equações (4.10) e (4.9) abaixo

$$\left(\frac{\partial \mu_p}{\partial y} \right)_{T,\rho} > 0, \quad \left(\frac{\partial \mu_n}{\partial y} \right)_{T,\rho} < 0 \quad e \quad (4.9)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T,y} > 0. \quad (4.10)$$

Quaisquer valores que não estejam dentro dessas condições são descartados imediatamente.

Com isso, o algoritmo então passa a procurar os valores de y_a e y_b , que satisfazem o critério de Gibbs, da seguinte forma: para cada par y, μ_q são calculados os módulos das diferenças $D_1 = \mu_p(y_a) - \mu_n(y_a)$ e $D_2 = \mu_p(y_b) - \mu_n(y_b)$. Quando $|D_1 - D_2|$ for menor que um certo valor pré-determinado, encontramos o valor correspondente à altura do retângulo da Fig.4.2. Simultaneamente, o mesmo processo é feito para achar o valor da largura desse retângulo, ou seja, são feitos os módulos das diferenças $D_3 = \mu_p(y_a) - \mu_p(y_b)$ e $D_4 = \mu_n(y_a) - \mu_n(y_b)$ e novamente quando temos a quantidade $|D_3 - D_4|$ menor que a mesma tolerância anterior encontramos seu valor. Ao fim desse processo temos y_a e y_b determinados.

¹Note que quando o termo coulombiano é nulo, a soma das raízes é igual 1.

Esse procedimento é repetido para diversos valores de pressão sempre a uma dada temperatura fixa. A partir daí geramos as curvas de coexistência de fases² dadas pelas Fig.4.3 e Fig.4.4. Esses gráficos foram traçados para $T = 10 \text{ MeV}$ e $T = 8 \text{ MeV}$.

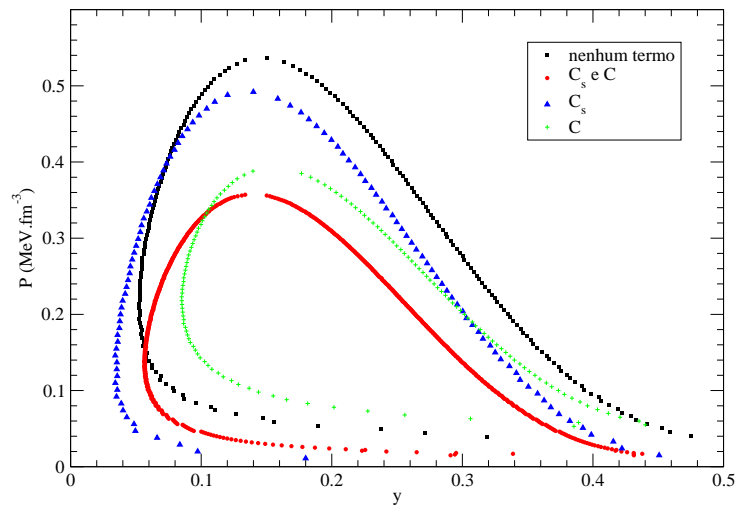


Figura 4.3: Pressão versus fração de prótons para $T = 10 \text{ MeV}$.

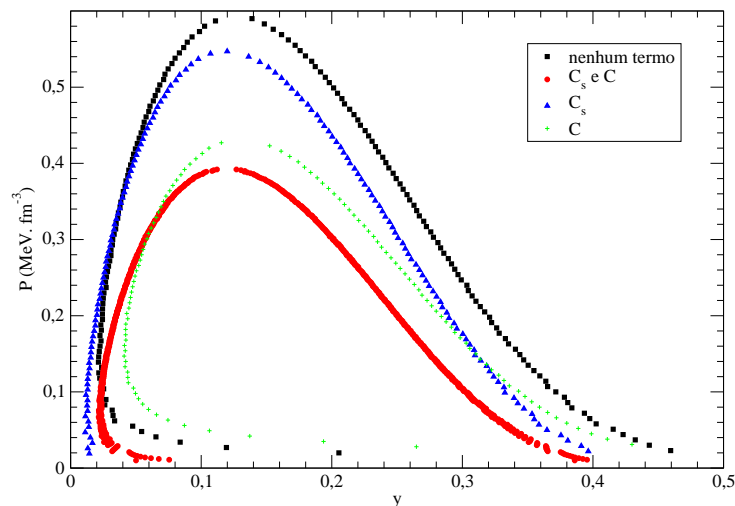


Figura 4.4: Pressão versus fração de prótons para $T = 8 \text{ MeV}$.

Analisando as figuras acima, podemos notar que o maior efeito causado pela

²A coexistência de fases representada no diagrama $P \times y$ é chamada de *binodal*.

introdução do termo de superfície é a diminuição do ponto máximo de pressão na curva de coexistência. O efeito coulombiano causa uma diminuição na região de coexistência. Perceba ainda que para uma mesma pressão possuímos dois valores distintos para y , isso nos leva a pensar que agora além de uma pressão, temperatura e densidade crítica, teremos uma fração de prótons crítica (y_c).

Mostraremos agora como a temperatura influencia na região de coexistência através da visualização dos gráficos $P \times y$ para diferentes valores de temperatura. A próxima figura (4.5) ilustra essa situação.

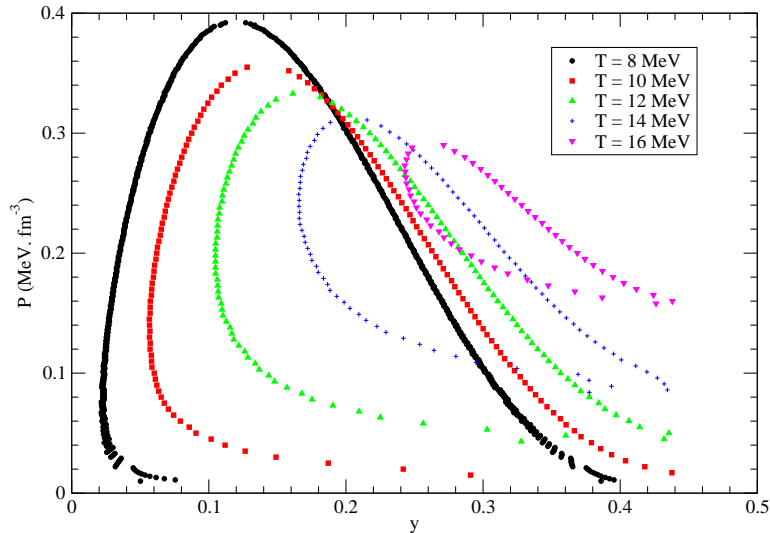


Figura 4.5: Gráfico $P \times y$ para diferentes temperaturas com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Note que o aumento da temperatura está relacionado com uma diminuição da região de coexistência de fases. Aumentando a temperatura indefinidamente, chegaremos ao caso em que a coexistência deixa de ser dada por uma curva e passa a ser apenas um ponto. Nessa situação extrema dizemos que o sistema atingiu sua temperatura crítica máxima para um valor $y = y_c$. Assim, os gráficos das binodais exibidos sugerem que o parâmetro de ordem do sistema seja $\eta = y - y_c$, anulando-se quando a fração de prótons atinge seu valor crítico.

4.3 Regiões de Metaestabilidade

Com base nas equações³ (2.7) e (2.13) do capítulo 2, pode-se traçar as curvas spinodais que delimitam a região de metaestabilidade do sistema, que é definida como a região existente entre a curva de coexistência e a spinodal química, representando os estados metaestáveis, ou seja, estados que estão num mínimo local de energia. Como está mostrado na Fig.4.6, a spinodal mecânica está quase toda dentro da spinodal química e por isso a contribuição dominante nessa limitação de estados vem da spinodal química.

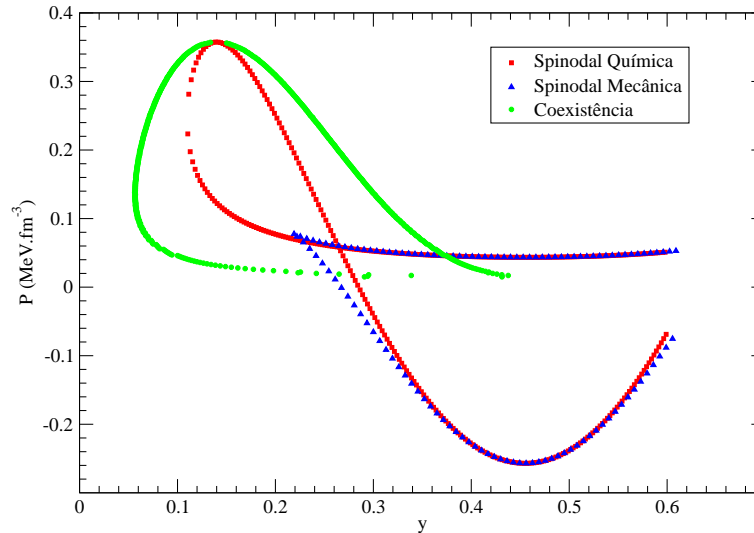


Figura 4.6: Pressão versus fração de prótons para $T = 10 \text{ MeV}$.

Essa mesma análise pode ser feita na Fig.4.7, representando a mesma situação da Fig.4.6, a única diferença é que no gráfico abaixo em vez da fração de prótons y temos as densidades que gerou tal fração.

³Agora estamos considerando os efeitos coulombiano e de superfície.

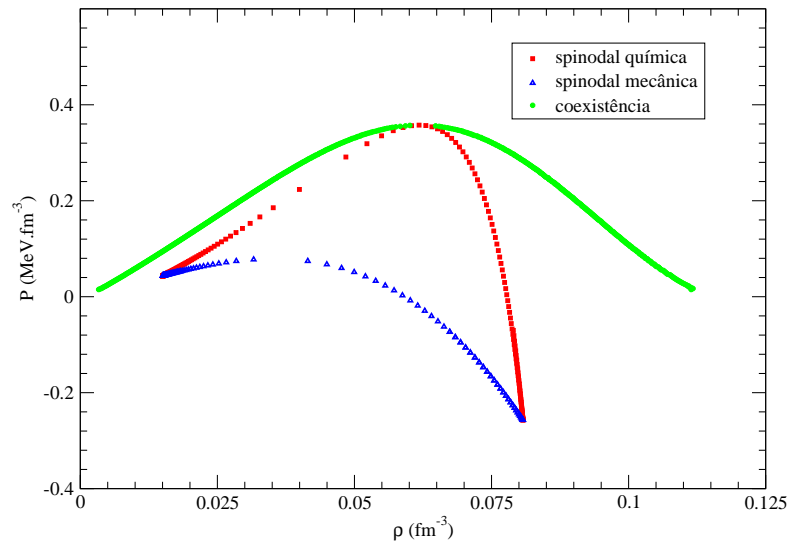


Figura 4.7: Pressão versus densidade para $T = 10 \text{ MeV}$.

Veremos agora como a temperatura influencia nas regiões de metaestabilidade do sistema. Para isso geramos os mesmos gráficos anteriores ($P \times y$) para diferentes valores de temperatura. Tais curvas estão dispostas nas figuras (4.8) e (4.9).

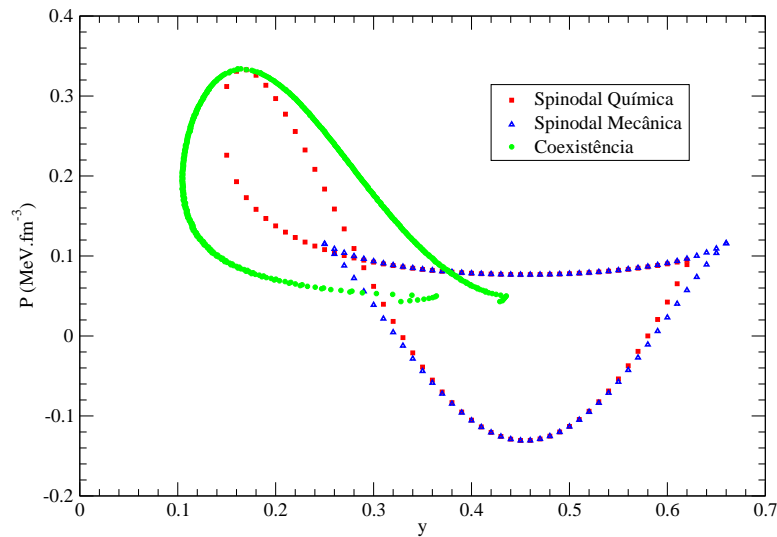


Figura 4.8: Pressão versus fração de prótons para $T = 12 \text{ MeV}$

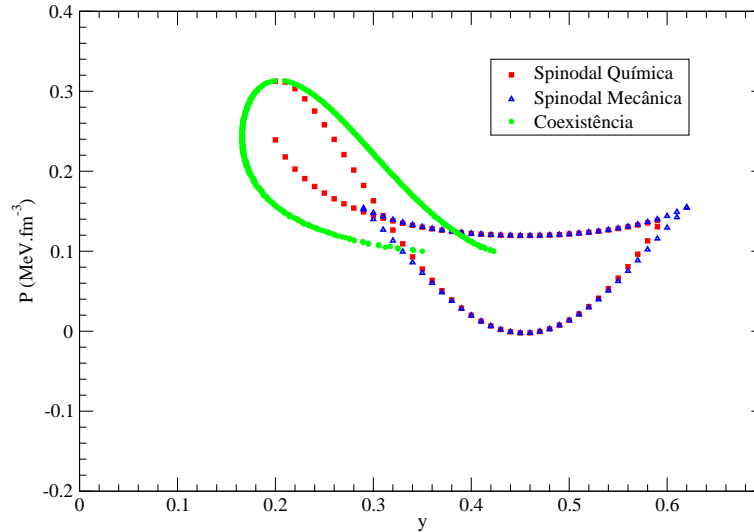


Figura 4.9: Pressão versus fração de prótons para $T = 14 \text{ MeV}$.

Assim, como no caso da curva de coexistência, as regiões spinodais também são reduzidas com o aumento da temperatura, fazendo então com que a região de metaestabilidade do sistema também diminua.

4.4 Visualização da Coexistência de Fases na Construção de Maxwell

Neste ponto do capítulo vamos analisar com mais cuidado a superfície de coexistência de fases. A binodal nos mostra que para uma dada temperatura sua linha é dividida em dois “lados” delimitados pelo ponto crítico e pelo ponto de igual concentração. Um, descreve o sistema de alta densidade, que podemos considerar como sendo a fase líquida e o outro descreve o sistema de baixa densidade, fase gasosa.

Para facilitar o entendimento da coexistência de fases a partir da binodal, montamos duas figuras auxiliares (Fig.4.10 e Fig.4.13), que também podem ser vistas em [27]. Nelas podemos notar alguns elementos. Primeiro, temos o ponto crítico (PC) que se caracteriza por apresentar a mesma densidade em ambas as fases (líquida e gasosa). Segundo, o ponto de máxima assimetria (MA) que possui a menor fração

de prótons que o sistema pode atingir para uma dada temperatura. Por último, temos o ponto de igual concentração (IC) que possui o mesmo valor para a fração de prótons em ambas as fases, mas com diferentes densidades em cada uma delas para uma mesma pressão.

Essas figuras mostram duas situações diferentes, porém possuem a mesma interpretação. A primeira situação é quando preparamos o sistema para uma fração de prótons superior a fração crítica, Fig.4.10. Preparando o sistema com uma fração de prótons inferior à fração crítica, teremos a situação representada na Fig.4.13.

Vamos então explicar essas duas situações:

1. Caso em que $y > y_c$

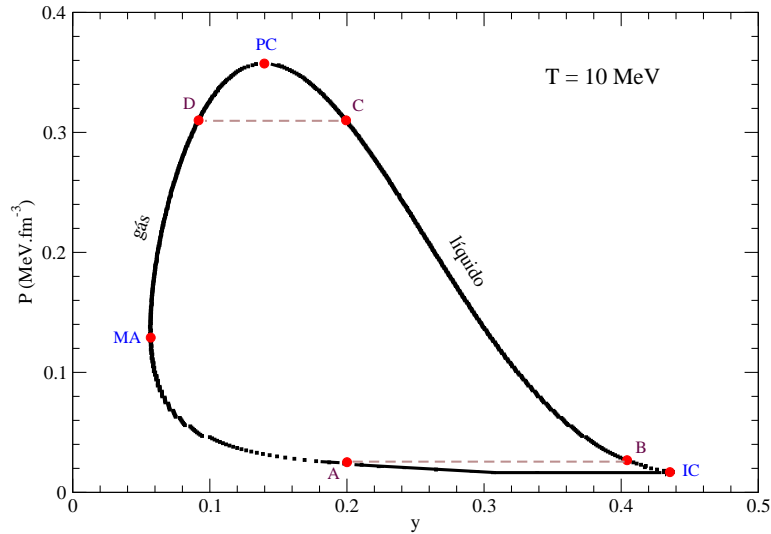


Figura 4.10: Superfície binodal, com $T = 10 \text{ MeV}$, montada para exemplificar o ponto crítico (PC), o ponto de igual concentração (IC) e o ponto de máxima assimetria (MA) para $y > y_c$. Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Nesse primeiro caso vamos assumir que o sistema esteja inicialmente preparado em uma fase gasosa, de baixa densidade, com $y = 0,2$. Iniciamos o processo de compressão isotérmica até chegarmos ao ponto A . Neste momento o sistema possui duas fases, pois começa a aparecer uma região de maior densidade, dada pelo ponto B , com uma nova fração de prótons y_B . Pela lei de conservação, a fração de prótons

total do sistema neste processo deve permanecer constante, ou seja, neste modelo não ocorre criação nem aniquilação de nucleons. Por isso, a redução de volume continua até que a fase gasosa evolua de $A \rightarrow D$ e a fase líquida evolua de $B \rightarrow C$. No ponto C , o sistema deixa a região instável e a fase inicial quase desaparece, existindo apenas em um volume infinitesimal com uma densidade correspondente a y_D .

É interessante perceber que neste caso ocorre uma transição entre os dois “lados” da linha binodal. Começamos em uma fase de baixa densidade e terminamos em outra com alta densidade.

Toda essa análise acarreta numa generalização da construção de Maxwell que pode ser vista no gráfico abaixo.

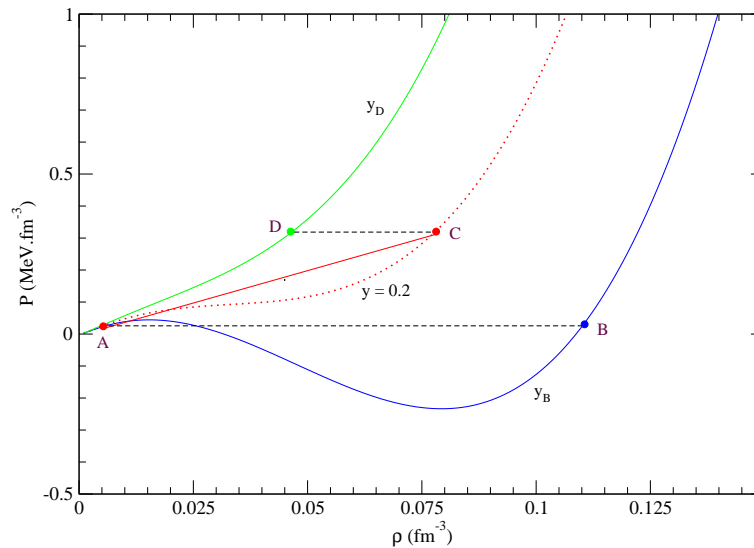


Figura 4.11: Isothermas com $T = 10 \text{ MeV}$ para um sistema preparado com $y = 0,2$. A nova construção de Maxwell produz a linha AC . Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Esse gráfico nos mostra que a nova construção de Maxwell não ocorre para pressões iguais, quando se mantém y fixo, pois no caso de um sistema binário, temos que respeitar a lei de conservação para a fração de prótons. Note que entre os pontos A e C temos uma região não física. Pode-se acrescentar também que esses pontos coexistem e possuem densidades de prótons e nêutrons na fase gasosa e densidades

de prótons e nêutrons na fase líquida respectivamente.

Essas densidades podem ser escritas como:

$$\begin{aligned}\rho_p^i &= y\rho^i \\ \rho_n^i &= (1 - y)\rho^i,\end{aligned}\tag{4.11}$$

sendo ρ_p a densidade de prótons, ρ_n a densidade de nêutrons e o sobre índice i representa as fases líquida e gasosa que as densidades podem assumir.

Os valores de y e suas respectivas pressões e densidades correspondentes ao gráfico representado pela Fig.4.10, se encontram na tabela seguinte:

y	$\rho(fm^{-3})$	$P(MeV.fm^{-3})$
$y = 0,200$	0,006	0,023
	0,078	0,31
$y_D = 0,009$	0,046	0,31
$y_B = 0,405$	0.110	0,023

Tabela 4.1: Valores das grandezas utilizadas no exemplo $y > y_C$.

Explicação equivalente pode ser encontrada no diagrama $y \times \rho$. Na Fig.4.12, vê-se que uma vez fixado o valor de y (0,2 por exemplo) haverá duas densidades distintas, correspondendo a duas fases (líquida e gasosa) que podem ser encontradas pelas equações (4.11). Assim, para um dado valor de y , acima de y_c , a densidade de prótons coexiste em duas fases, sendo igualmente válido o mesmo para a densidade de nêutrons. No entanto, ressaltamos novamente que tais coexistências se dão para valores diferentes de pressão, como visto na figura de $P \times y$.

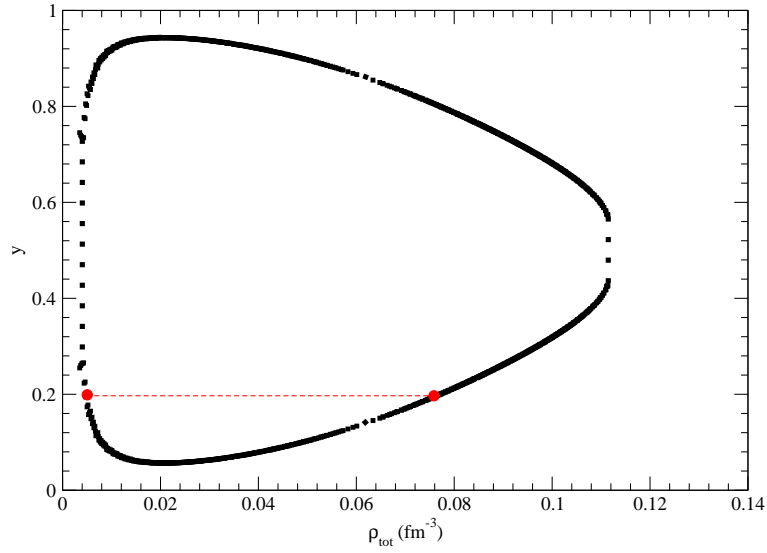


Figura 4.12: Curva $y \times \rho_{tot}$ para $T = 10 \text{ MeV}$. Os pontos em vermelho reproduzem as densidades para $y = 0,2$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

2. Caso em que $y < y_c$

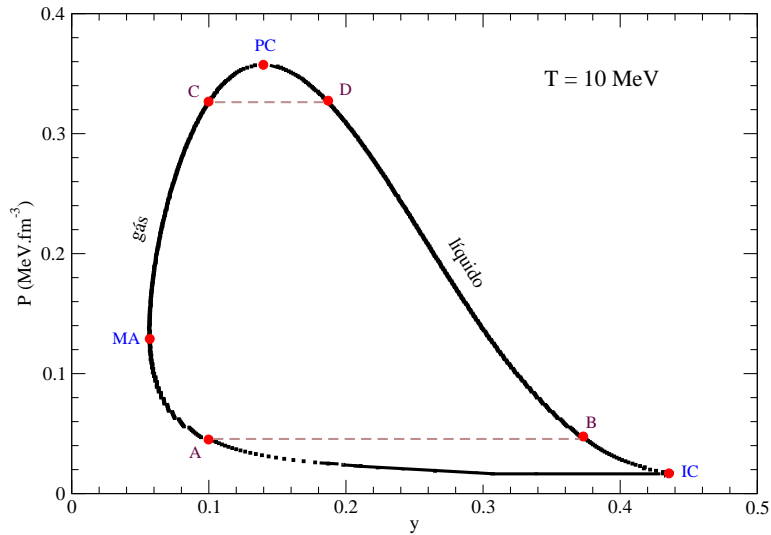


Figura 4.13: Superfície binodal, com $T = 10 \text{ MeV}$, montada para exemplificar o ponto crítico (PC), o ponto de igual concentração (IC) e o ponto de máxima assimetria (MA) para $y < y_c$. Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Nesse próximo caso vamos preparar o sistema com uma fração de prótons inicial de 0,1 no estado gasoso. Do mesmo modo que no caso anterior, o sistema é comprimido isotermicamente até chegar ao ponto A . Neste ponto começa a surgir uma fase de maior densidade no ponto B . Surge então uma instabilidade no sistema pois não temos a conservação do y original, ou seja, temos a coexistência de duas fases, mas com frações distintas. Logo, o sistema é comprimido até o ponto C onde a fração se iguala à definida inicialmente. Isso tudo pode ser visualizado na Fig.4.13.

Perceba que agora a fase gasosa evolui de $A \rightarrow C$ e a fase líquida de $B \rightarrow D$, isto é, a binodal é cortada novamente, mas desta vez do mesmo “lado”. Diferentemente do caso anterior, temos o sistema terminando o seu processo na mesma fase inicial (gás) enquanto que a fase líquida desaparece neste estágio.

Como no exemplo anterior, podemos visualizar uma nova construção de Maxwell pelo gráfico $P \times \rho$:

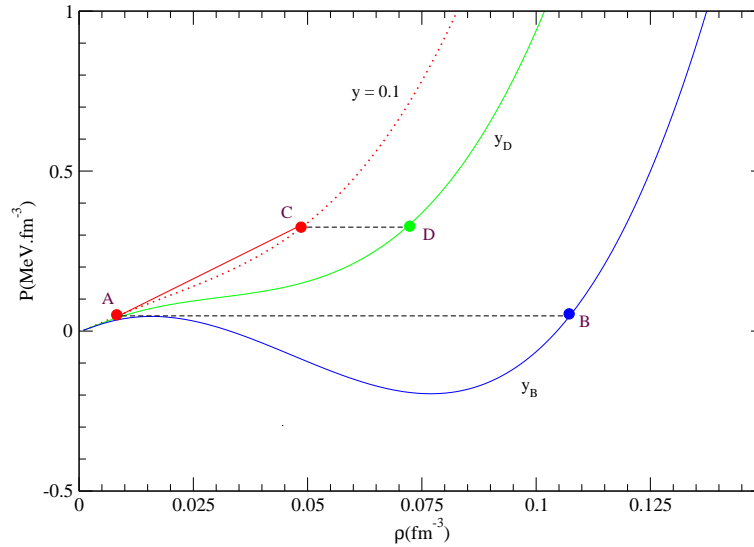


Figura 4.14: Isotermas com $T = 10 \text{ MeV}$ para um sistema preparado com $y = 0,1$. A nova construção de Maxwell produz a linha AC . Aqui $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Podemos notar pela linha que liga o ponto A ao ponto C , na figura acima, que o sistema é mecanicamente estável e possui apenas a instabilidade química. Essa instabilidade é fornecida pela equação (4.9). Nesse processo, começamos a

compressão isotérmica em uma fase de baixa densidade e terminamos nesta mesma fase, porém com pressão diferente.

Para o sistema é mais favorável se dividir em duas fases com frações de prótons distintas, pois mantém os potenciais químicos iguais. Entretanto o sistema não chega a ficar totalmente na fase líquida, pois essa quando alcança o seu volume máximo desaparece ficando apenas a fase gasosa no ponto estável C .

Os valores de y e suas respectivas pressões e densidades relativas a Fig.4.13, se encontram na tabela seguinte:

y	$\rho(fm^{-3})$	$P(MeV.fm^{-3})$
$y = 0,100$	0,009	0,045
	0,048	0,320
$y_D = 0,180$	0,073	0,320
$y_B = 0,373$	0.108	0,045

Tabela 4.2: Valores das grandezas utilizadas no exemplo de $y < y_c$.

Outro método que podemos utilizar para comprovar o que foi feito anteriormente é a análise do gráfico abaixo (Fig.4.15). Esta figura mostra claramente que para um determinado y temos duas densidades e ambas, neste caso, representam o estado gasoso. Portanto, a linha pontilhada na figura indica a baixa densidade que se inicia e termina o processo, comprovando que a matéria encontra-se no fim do ciclo em forma de gás.

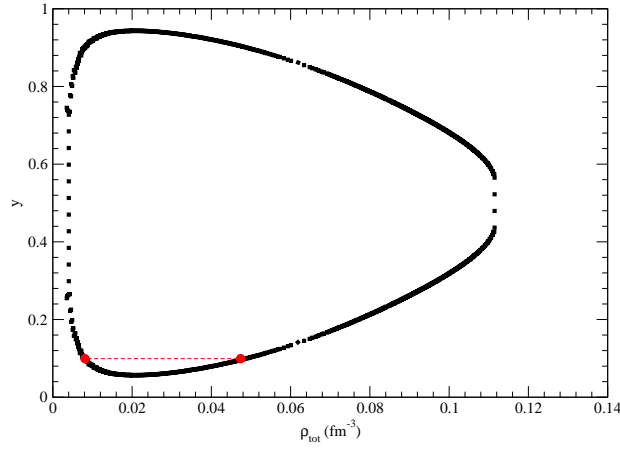


Figura 4.15: Curva $y \times \rho_{tot}$ para $T = 10 \text{ MeV}$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$. Os pontos em vermelho reproduzem as densidades para $y = 0, 1$.

Podemos ter uma melhor visualização de como funciona a construção de Maxwell na Fig.4.16, onde variamos a fração de prótons, mantendo a temperatura fixa em $T = 10 \text{ MeV}$. Notamos que pra $y \neq 0,5$ (caso da matéria simétrica) a construção não é uma reta horizontal, ou seja, as densidades que delimitam as regiões de instabilidade e metaestabilidade estão à pressões diferentes. Quando chegamos a fração correspondente ao caso simétrico, temos então a construção de Maxwell usual.

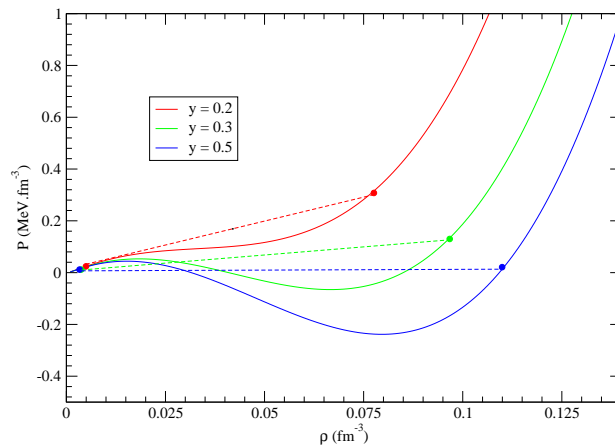


Figura 4.16: Construção de Maxwell em $T = 10 \text{ MeV}$ com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$ para $y = 0, 2; 0, 3$ e $0, 5$.

4.5 Linhas de Pontos Críticos e de Igual Concentração

Iremos, a partir de agora, especificar o método para encontrar as linhas correspondentes aos pontos críticos (PC) e de igual concentração (IC). O ponto onde essas se interceptam nos dá a temperatura crítica máxima que o sistema pode assumir.

- *Linha de Pontos Críticos:*

Em sistemas de um componente, encontramos o ponto crítico através das condições dadas por (2.20) e (2.21). Em sistemas binários, a generalização desse procedimento nos fornece agora uma linha de pontos críticos que é encontrada pelas condições

$$\left(\frac{\partial\mu_q}{\partial y}\right)_{T,P} = 0 \quad (4.12)$$

e

$$\left(\frac{\partial^2\mu_q}{\partial y^2}\right)_{T,P} = 0. \quad (4.13)$$

Para a obtenção dos pontos da linha crítica, pode-se optar por μ_n ou μ_p , pois estes nos dão o mesmo resultado. No nosso trabalho utilizamos o potencial químico dos prótons.

Como estas equações não possuem uma dependência explícita com a pressão usaremos a relação termodinâmica dada pela equação (2.9). Os resultados são os seguintes: para a primeira condição (4.12), obtemos a equação cúbica que delimita a região de estabilidade química dada em (2.13). Para a segunda condição, obtemos a expressão da equação abaixo

$$\left(\frac{\partial^2\mu_p}{\partial y^2}\right)_{T,P} = \left(\frac{\partial^2\mu_p}{\partial y^2}\right)_{\rho,T} - \frac{\left(\frac{\partial^2\mu_p}{\partial\rho\partial y}\right)_{y,T} \left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_{\rho,T}}{\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_{y,T}} = 0. \quad (4.14)$$

Após calculada a expressão para (4.14), que possui uma dependência em relação à densidade, fração de prótons e temperatura, substituímos o valor de

y extraído da primeira condição é dado por

$$y = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AD}}{2A} \quad (4.15)$$

com

$$\begin{aligned} A = & - \left[32 \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 + 12C + \frac{6T\lambda^3}{\sqrt{2\gamma}} \right] a_3 \rho^3 + \frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0^2 \rho^2 \\ & - \left[\frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 - 16a_0 + 8C + \frac{2T\lambda^3}{\sqrt{2\gamma}} \right] \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2\gamma}} \rho^2 + \frac{8}{3} (1 - x_0) a_0 C \rho^2 \\ & + \left[\frac{2T\lambda^3}{9\sqrt{2\gamma}} + \frac{32}{27} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 + \frac{4C}{9} \right] C_s \rho^{2/3}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} B = & \left[32 \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 + 12C + \frac{6T\lambda^3}{\sqrt{2\gamma}} \right] a_3 \rho^3 - \frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0^2 \rho^2 \\ & + \left[\frac{32}{3} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 - 16a_0 + 8C + \frac{2T\lambda^3}{\sqrt{2\gamma}} \right] \frac{T\lambda^3}{8\sqrt{2\gamma}} \rho^2 - \frac{8}{3} (1 - x_0) a_0 C \rho^2 \\ & - \left[\frac{2T\lambda^3}{9\sqrt{2\gamma}} + \frac{32}{27} \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) a_0 + \frac{4C}{9} \right] C_s \rho^{2/3} + 2CT\rho \end{aligned} \quad (4.17)$$

e

$$D = 6a_3 T \rho^2 + \left[-\frac{4}{3} (1 - x_0) a_0 T + \frac{T^2 \lambda^3}{2\sqrt{2\gamma}} \right] \rho - \frac{2}{9} C_s T \rho^{-1/3} + T^2. \quad (4.18)$$

Com todas essas equações em mãos, o procedimento utilizado para o cálculo da *LPC* é feito da seguinte maneira: para uma temperatura fixa encontramos as raízes da equação dada em (4.14), ou seja, encontramos os valores de ρ para um y dado pela equação (4.15). Os valores críticos são encontrados quando esta densidade é uma raiz, logo, a temperatura na qual temos solução para ρ é a temperatura crítica e conseqüentemente, o valor ρ é a densidade crítica e o valor da fração é o y_c . A pressão crítica é obtida através da equação de estado com os valores dados por $\rho = \rho_c$, $y = y_c$ e $T = T_c$.

Ao calcularmos a temperatura crítica dessa forma, nota-se que sua dependência com a fração é diferente daquela apresentada no capítulo 1, onde calculamos os pontos pseudo-críticos. A comparação pode ser vista no gráfico seguinte, onde estão dispostas as duas curvas.

As duas curvas só se tocam quando o valor da temperatura crítica é máximo, isto é, em apenas um valor de y . Quando consideramos o efeito coulombiano temos que essa fração é $y = 0,45$.

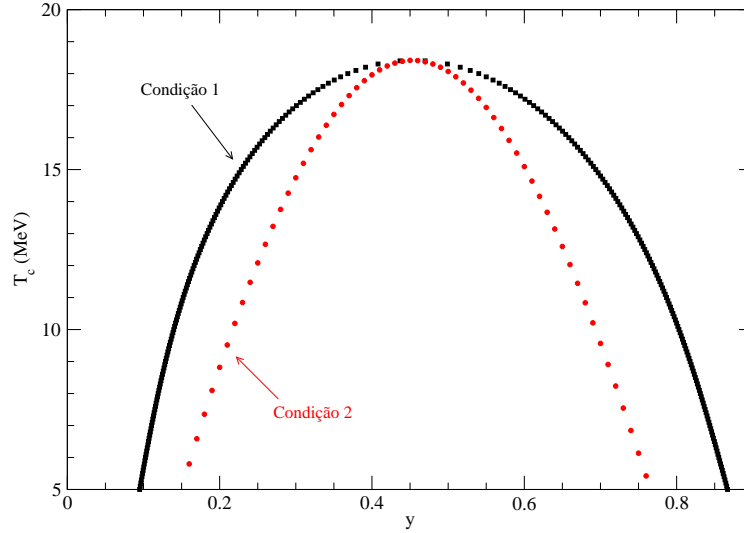


Figura 4.17: Temperatura crítica do sistema em função de y . A condição 1 é dada por $\left(\frac{\partial\mu}{\partial y}\right)_{P,T} = \left(\frac{\partial^2\mu}{\partial y^2}\right)_{P,T} = 0$ e a condição 2 por $\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_{y,T} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial\rho^2}\right)_{y,T} = 0$.

- *Linha de Igual Concentração:*

O procedimento para encontrar essa linha é semelhante ao anterior, porém o valor para a fração de prótons utilizada é diferente. Essa equação é calculada da seguinte maneira:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_{\rho,T} = 0 \quad (4.19)$$

que nos fornece

$$y_E(T) = \frac{0,5}{\left[1 + \frac{C}{\frac{8}{3}\left(\frac{1}{2} + x_0\right) + \frac{T\lambda^3}{2\sqrt{2}\gamma}}\right]}. \quad (4.20)$$

A interpretação deste ponto em sistemas binários é a mesma que para sistemas de um componente, isto é, teremos a mesma razão de prótons e nêutrons

em ambas as fases. Quando incluímos o efeito coulombiano, temos que o ponto de igual concentração ocorre em $y = 0,45$ para o valor de C que utilizamos. Se desconsiderarmos esse efeito, o IC se dará com $y = 0,5$.

Podemos dizer que neste ponto o sistema possui apenas a instabilidade mecânica, deixando de possuir a instabilidade química devido à igualdade do potencial químico de prótons e nêutrons. Isso pode ser visualizado no gráfico abaixo (Fig.4.18).

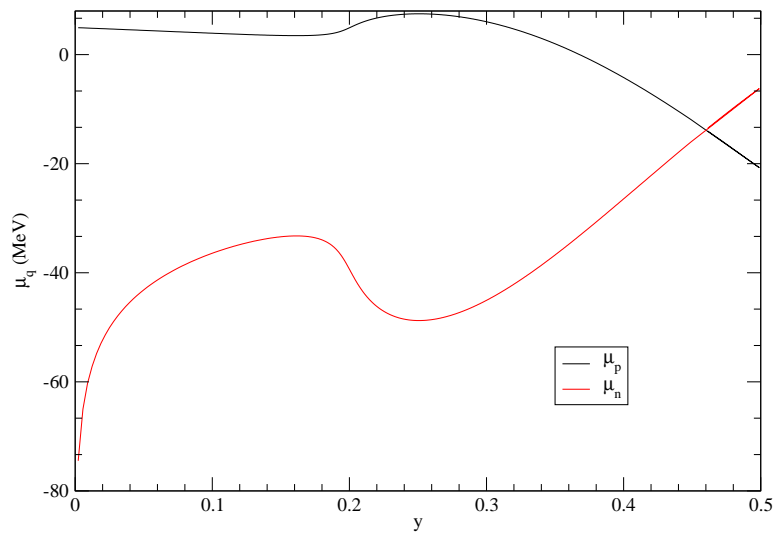


Figura 4.18: Potencial químico versus fração de prótons para $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

4.6 Superfície Binodal

Para sistemas de dois componentes, como dito anteriormente, temos uma linha de coexistência de fases, com certos valores para P e y , com T constante e não mais pontos de coexistência como no caso simétrico. Se não mantivermos mais a temperatura constante vamos conseguir construir um gráfico em três dimensões (Fig.4.19). Como era de se esperar temos o aparecimento de uma superfície de coexistência devido ao grau de liberdade a mais que o sistema possui. Fazendo um corte no plano $x \times y$ desta figura, teremos os gráficos mostrados anteriormente.

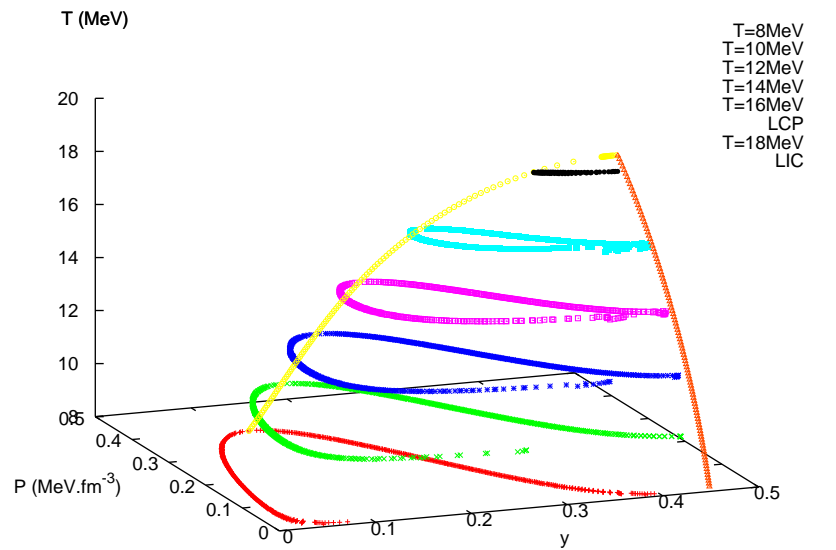


Figura 4.19: Superfície binodal indicando a coexistência de fases. As fatias contidas no plano $x \times y$ representam as binodais vistas anteriormente. Este gráfico foi feito com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Essa figura em três dimensões possui alguns novos elementos. Estes por sua vez, surgem devido aos pontos críticos e de igual concentração explicados anteriormente. Temos então a linha de pontos críticos (LPC) e a linha de igual concentração (LIC). O gráfico acima contém toda a informação para a coexistência de fases em sistemas binários.

Capítulo 5

Ordem da Transição de Fase

Nesse capítulo discutiremos a ordem da transição de fase em sistemas binários. Começaremos com o estudo do caso de sistemas de um componente e a partir daí tentaremos visualizar sua generalização. De um modo geral, o entendimento de transições de fase torna-se mais simples a partir do conhecimento do parâmetro de ordem do sistema em estudo, que deve descrever bem, qualitativamente, as diferentes fases do sistema. Em torno do ponto crítico, a partir do qual o sistema descreverá uma única fase, esse parâmetro, usualmente uma diferença entre uma grandeza termodinâmica entre as duas fases, deve ser pequeno. Sua grande utilidade está no fato de que outras grandezas termodinâmicas possam ser expandidas em torno do ponto crítico. Nem sempre, no entanto, esse parâmetro de ordem é simples de se descobrir. Para sistemas com um componente, onde se pretende estudar a coexistência de fases líquido-gás, pode-se usar a diferença das densidades em cada fase como sendo o parâmetro de ordem, $\eta = \rho_{liq} - \rho_{gas}$. Igualmente válida seria a escolha de η como sendo a diferença de volume (ou mesmo como sendo a diferença de entropia) entre as duas fases. Já em sistemas binários, um parâmetro de ordem aceito e utilizado é a fração de um dos componentes em cada fase. No caso estudado até então nessa tese, $\eta = y_{liq} - y_{gas}$. Em capítulos anteriores, apresentamos a evolução de várias grandezas termodinâmicas, em função da temperatura, mantendo y como um parâmetro fixado. Assim, por exemplo, nesse capítulo a entropia por partícula, em função da temperatura, foi visualizada (Fig.5.1 e Fig.5.2) para distintos valores

de y fixados. Seu comportamento em forma de S sugere algum tipo de transição de fase em uma certa região de temperatura, que apenas nesse capítulo passaremos a investigar.

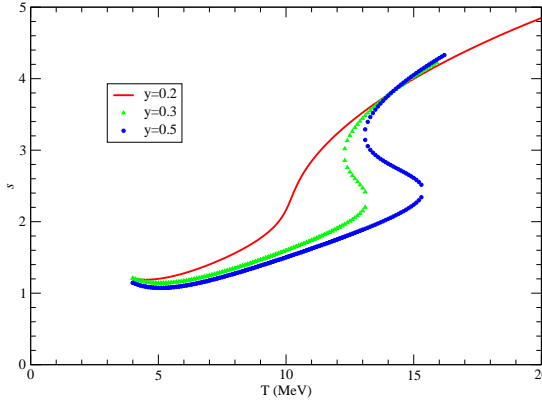


Figura 5.1: $s \times T$ para diferentes valores de y e $P = 0.1 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

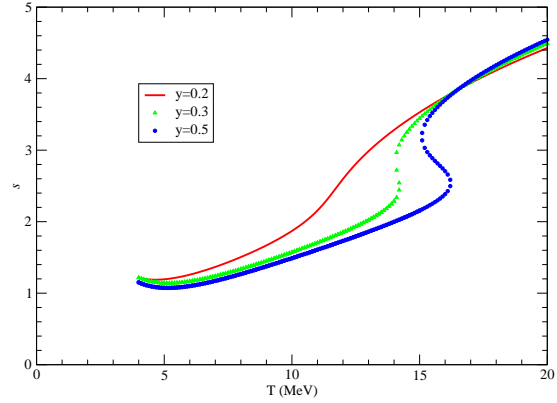


Figura 5.2: $s \times T$ para diferentes valores de y e $P = 0.15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Como veremos, a escolha desse parâmetro de ordem y para sistemas binários, conjuntamente com sua fixação, como imposição da conservação do número de prótons, gera muita controvérsia, principalmente no que diz respeito à definição da ordem da transição de fase.

Um grupo de autores [27, 28] defende que a matéria nuclear assimétrica exibe assinaturas de uma transição de fase contínua, enquanto, em trabalhos recentes, Chomaz et al [29] afirmam que a transição de fase na matéria nuclear assimétrica seria de primeira ordem. Chomaz et al argumentam que ao se fixar o parâmetro de ordem numa transição, perde-se muita informação sobre a ordem da transição de fase em si e que portanto, apesar de parecer uma transição de fase contínua, a transição de fase da matéria nuclear assimétrica seria, a exemplo, da matéria nuclear simétrica, também de primeira ordem. A fixação de y , como já vimos e explicamos no capítulo anterior, mostra que, para uma isoterma, em um gráfico $P \times y$, havendo coexistência de fases, essas terão que compartilhar para diferentes densidades, diferentes pressões

e também diferentes potenciais químicos. Em outras palavras, para que se tenha em densidades diferentes, pressões e potenciais químicos iguais, é necessário que haja diferentes valores de y . Essa afirmação pode ser verificada em qualquer curva binodal isotérmica que apresentamos até então.

Uma vez colocadas as observações acima, passaremos a investigar a ordem da transição, tentando no que for possível, agregar mais informações para o entendimento dessa questão.

Para analisar a ordem da transição, a partir das equações de estado que já apresentamos, poderíamos usar tanto o grande potencial quanto a energia livre de Gibbs (entalpia livre). Usaremos essa última e note, pela equação (1.35) que a mesma depende explicitamente de y , ρ e T .

No nosso sistema termodinâmico, uma transição de primeira ordem é caracterizada quando a entropia, equação (1.39), apresenta uma descontinuidade para algum valor da temperatura. Por sua vez, essa descontinuidade provoca uma divergência em derivadas superiores de g , necessárias para obtenção da calor específico à pressão constante, assim como a incompressibilidade, por exemplo.

$$c_P = -T \frac{\partial^2 g}{\partial T^2}. \quad (5.1)$$

Quando a descontinuidade na entropia não se apresenta, no sistema que ainda coexiste nas duas fases, mas surge um comportamento em que haja “bico” em $s(T)$, fala-se em uma transição de fase contínua. Nesse caso, a capacidade térmica e a incompressibilidade apresentam descontinuidade.

Nesse capítulo, trataremos basicamente de gráficos $g(T) \times T$ e $s(T) \times T$ na busca pela assinatura da ordem da transição.

5.1 Comportamento da Transição em Sistemas Simétricos

O ponto de partida foi traçar a construção de Maxwell para a matéria nuclear infinita (sistema homogêneo, $y = 0, 5$) em uma temperatura fixa $T = 10 \text{ MeV}$. Para

isso utilizamos a binodal mostrada na figura seguinte com o objetivo de obter o valor da pressão que nos fornece a exata construção de Maxwell nesse caso.

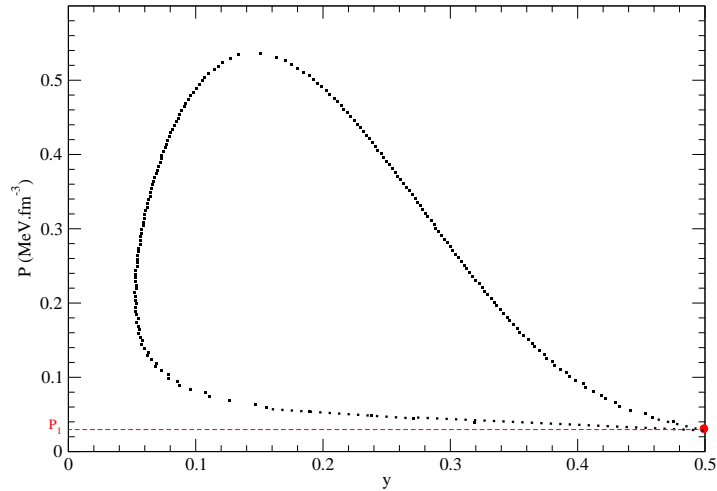


Figura 5.3: Binodal com $C = C_s = 0$ para $T = 10 \text{ MeV}$. A linha pontilhada nos indica a pressão de coexistência, $P = 0,0350914 \text{ MeV.fm}^{-3}$, para $y = 0,5$.

A partir daí obtemos a seguinte construção:

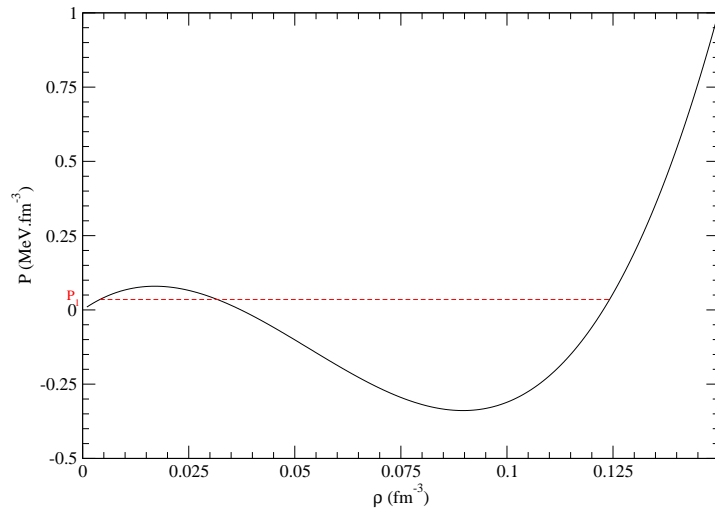


Figura 5.4: Construção de Maxwell na isoterma $T = 10 \text{ MeV}$ com $C = C_s = 0$. Aqui a fração é $y = 0,5$.

A ordem da transição de fase desse sistema é determinada a partir da análise de gráficos da energia livre de Gibbs por partícula (feito a partir de 1.35) e da da entropia (feito a partir de 1.39). Observe que nesse caso há apenas um potencial químico e que deve ser igual nas duas fases. Assim, no gráfico mostrado na Fig(5.6), vê-se que $g \times T$ conecta as duas fases, líquida e gasosa, em $T = 10 \text{ MeV}$. Ao se analisar o gráfico da entropia por partícula, portanto, vemos que em $T = 10 \text{ MeV}$ as entropias das duas fases terão que se conectar descontinuamente, exibindo uma transição de fase de primeira ordem, Fig.(5.5).

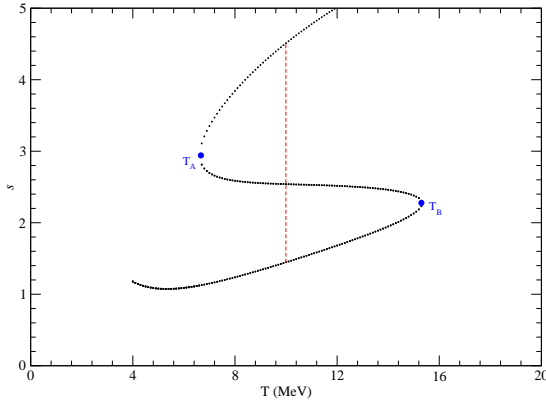


Figura 5.5: $s \times T$ para $y = 0,5$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

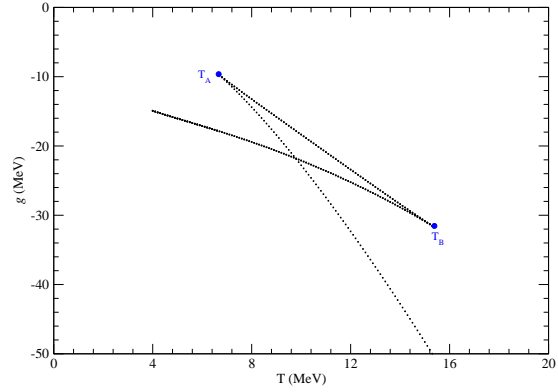


Figura 5.6: $g \times T$ para $y = 0,5$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

Repetimos e chamamos atenção aqui que, a temperatura na qual a energia livre de Gibbs é igual em ambas as fases é exatamente $T = 10 \text{ MeV}$ (temperatura de coexistência da binodal para $y = 0,5$ e $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$), que também é a temperatura na qual a entropia apresenta a descontinuidade mostrada.

Note ainda que ao se construir o gráfico $g \times T$ nenhuma exclusão a priori foi feita com relação às regiões de metaestabilidade e mesmo de instabilidade do sistema. Essas regiões, no entanto, surgem justamente no laço que compõe a curva $g \times T$. As temperaturas que delimitam essas regiões do sistema, excluídas pela construção de Maxwell, estão representadas nas curvas anteriores pelos pontos A e B . Na verdade

essas são as temperaturas limites, que em um gráfico $P \times \rho$ são tais que apresentam um ponto spinodal ($\frac{\partial P}{\partial \rho} = 0$) exatamente na pressão de coexistência do sistema na temperatura $T = 10 \text{ MeV}$. Isso pode ser visto na Fig(5.7).

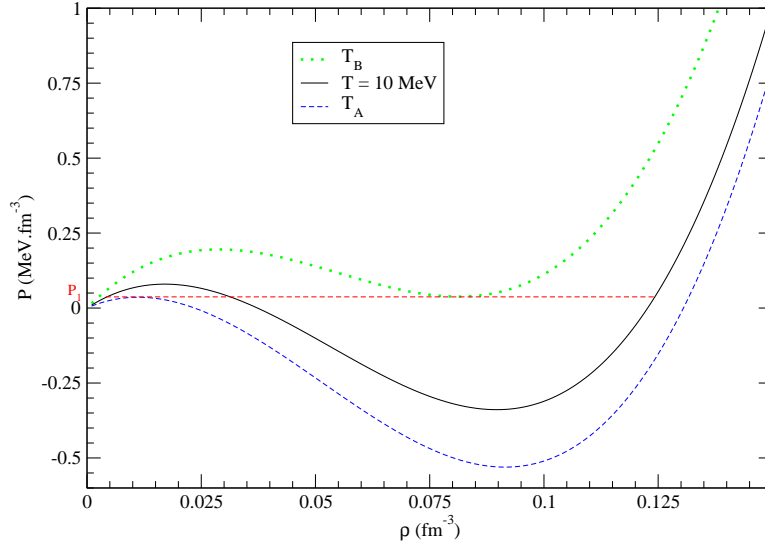


Figura 5.7: Isotermas $T = 10 \text{ MeV}$, $T_A = 6,7 \text{ MeV}$ e $T_B = 15,4 \text{ MeV}$ com $C = C_s = 0$. Em todas as isotermas $y = 0,5$.

5.2 Comportamento da Transição em Sistemas Assimétricos

Agora discutiremos como a assimetria pode ou não alterar a ordem da transição de fase. Para fazer essa análise vamos variar a fração de prótons do sistema para a mesma pressão da construção de Maxwell do caso da matéria nuclear infinita, citada anteriormente, a fim de comparar os resultados como feito em [27]. Isso nos fornece os seguintes gráficos:

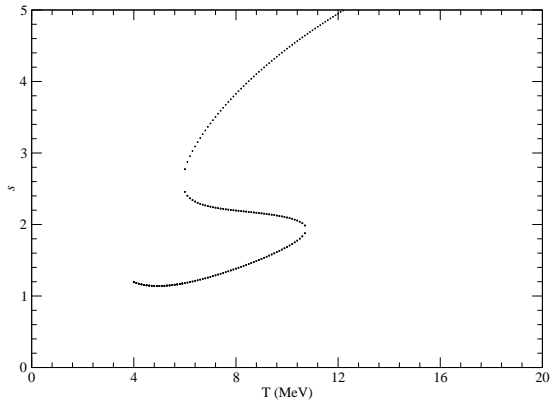


Figura 5.8: $s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

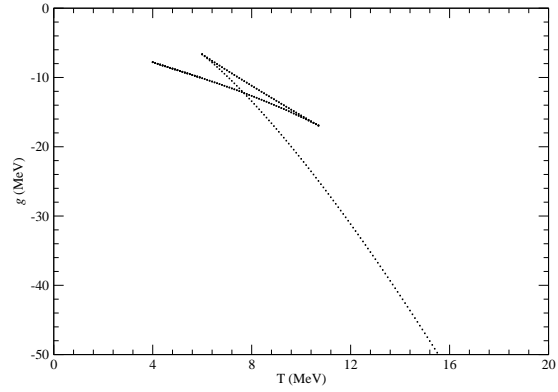


Figura 5.9: $g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

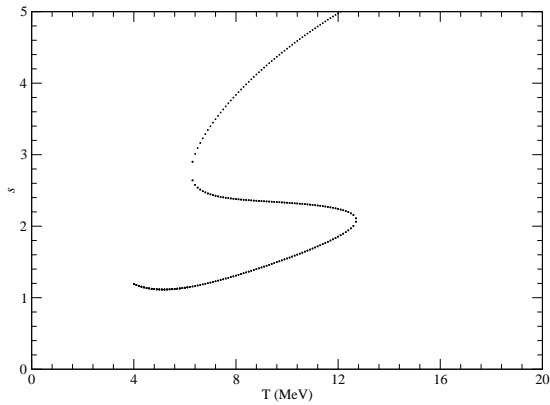


Figura 5.10: $s \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

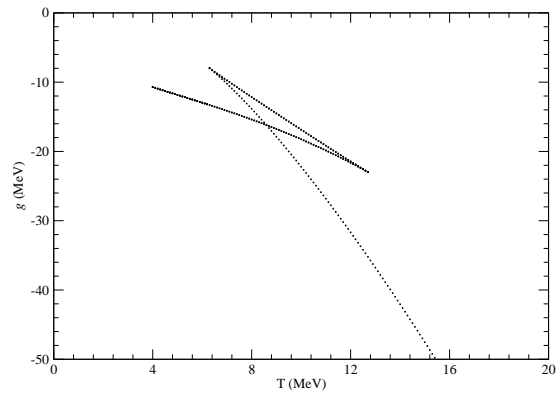


Figura 5.11: $g \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

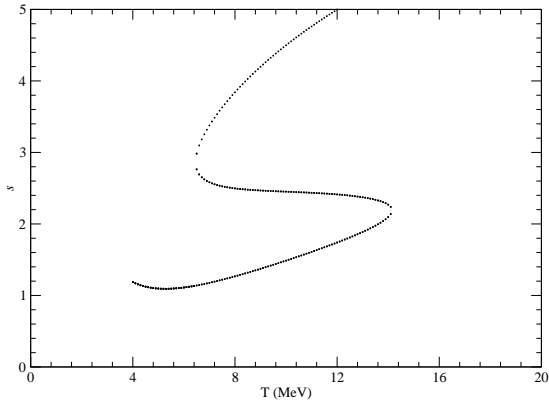


Figura 5.12: $s \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

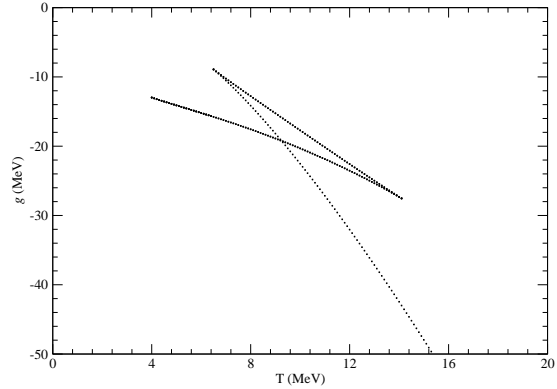


Figura 5.13: $g \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

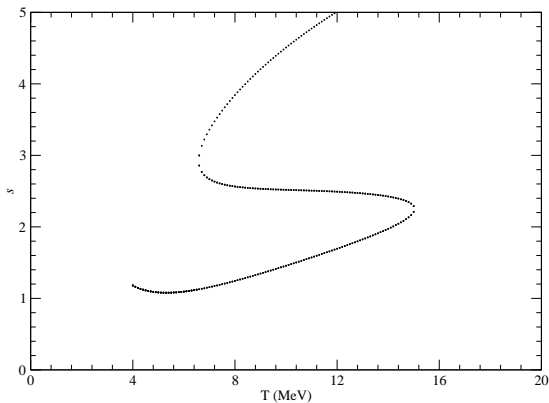


Figura 5.14: $s \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

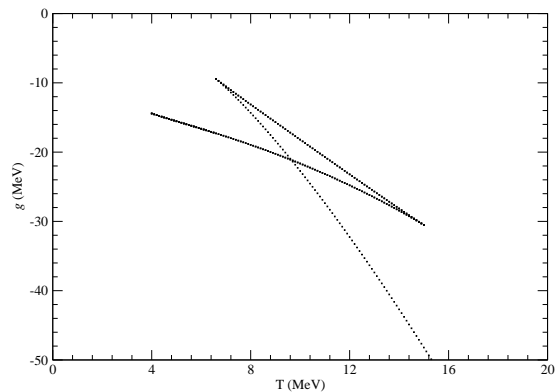


Figura 5.15: $g \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

Verifica-se nos gráficos acima a existência de uma sinalização para uma transição de fase. Mas de que ordem? Aqui é muito importante assinalar que as fases líquida e gasosa que seriam conectadas via $g \times T$, não se encontram em $T = 10 \text{ MeV}$, seu ponto de intersecção. Esse caso particular, já é algo distinto do caso simétrico inicialmente mostrado. Veja, nas curvas, que a variação de y na direção de $y = 0,5$ faz com que essa intersecção se aproxime de $T = 10 \text{ MeV}$.

Como no caso simétrico, os gráficos da entropia por partícula e energia livre de Gibbs por partícula, também apresentam temperaturas limites para as regiões de metaestabilidade, que não foram excluídas na construção de $g \times T$ e que dão origem aos laços nessas curvas e aos limites das curvas em S da entropia. Esses limites, para cada valor de y , envolvem a região de metaestabilidade química e mecânica, como pode ser visto no gráfico $T \times y$, Fig.(5.16) abaixo.

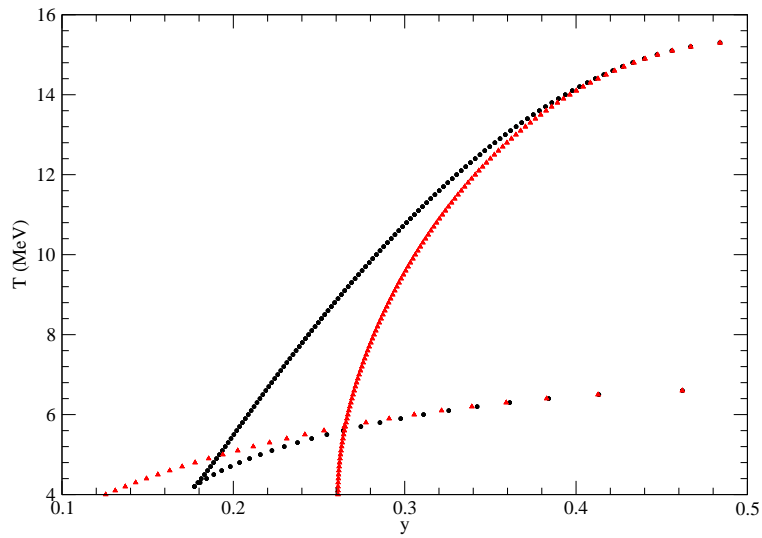


Figura 5.16: Curva $T \times y$ representando os limites das regiões spinodais química (curva vermelha) e mecânica (curva preta). Nessas curvas $C = C_s = 0$.

Para construir as curvas acima, impusemos que todo e qualquer ponto de metaestabilidade química e mecânica, necessariamente tivesse a pressão fixada em $P = 0.0350914 \text{ MeV fm}^{-3}$ como nos gráficos apresentados nas figuras (5.8)-(5.15). No caso particular em que $y = 0,5$, os valores limites dessas temperaturas, onde as metaestabilidades mecânica e química coincidem, são os mesmos apresentados na primeira seção desse capítulo e mostrados no gráfico $P \times \rho$ para $T = 10 \text{ MeV}$. Veja ainda no gráfico $T \times y$, Fig.(5.16), como a região de metaestabilidade química se insere dentro da região de metaestabilidade mecânica.

Analisando essa situação quando $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$, essa configuração não muda, qualitativamente, no que diz respeito à presença dos laços e S' s nas curvas de g e s

respectivamente. Como exemplo desse caso, observe os gráficos abaixo.

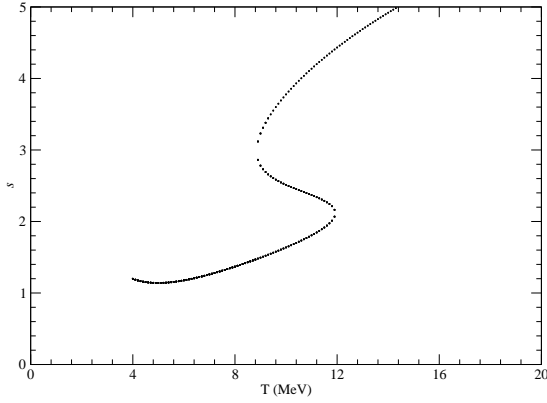


Figura 5.17: $s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

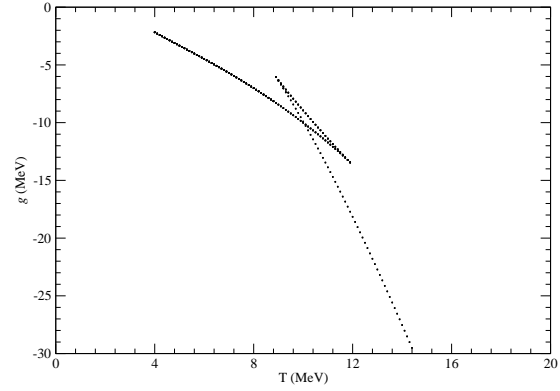


Figura 5.18: $g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,0350914 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Para sair do impasse quanto à ordem da transição de fase, já que a energia livre de Gibbs não apresenta qualquer sinal especial de transição no valor da temperatura da isoterma da binodal, Serot e Müller, propuseram que essa se desse de forma contínua [27] entre as temperaturas limites das regiões de metaestabilidade exibidas anteriormente para cada valor de y fixado. Nesse caso, a energia livre de Gibbs teria que ser calculada dentro de uma região de coexistência de fases, para uma pressão fixa e evolutivamente com a temperatura.

Na região de coexistência, a energia livre de Gibbs deve levar em conta as frações de prótons y' e y'' de cada fase. Assim, para um certo valor fixo de y temos

$$\bar{g}(T, P, y) = (1 - \bar{\lambda})g(T, P, y') + \bar{\lambda}g(T, P, y'') \quad (5.2)$$

onde

$$\bar{\lambda} = \frac{N_p'' + N_n''}{N_p + N_n}, \quad (5.3)$$

veja, por exemplo, [27, 30].

Vamos agora traduzir $\bar{\lambda} \equiv f(y, y', y'')$. Definimos inicialmente y' e y'' para cada fase. Seja

$$y' = \frac{N'_p}{N'_p + N'_n} \quad \text{e} \quad y'' = \frac{N''_p}{N''_p + N''_n} \quad (5.4)$$

e considerando que

$$N_p = N'_p + N''_p \quad \text{e} \quad N_n = N'_n + N''_n \quad (5.5)$$

chega-se em

$$\begin{aligned} y &= \frac{N_p}{N_p + N_n} \\ &= (1 - \bar{\lambda})y' + \bar{\lambda}y'' \end{aligned} \quad (5.6)$$

que nos fornece

$$\bar{\lambda} = \frac{y' - y}{y' - y''}. \quad (5.7)$$

Da mesma maneira comporta-se a entropia na região de transição. Por isso sua expressão é dada pela seguinte equação

$$\bar{s}(T, P, y) = (1 - \bar{\lambda})s(T, P, y') + \bar{\lambda}s(T, P, y''). \quad (5.8)$$

Isso é o que se chama de regra da alavanca e descreve a energia livre de Gibbs e a entropia por partícula na região de coexistência de fases.

Ilustramos a seguir para $y = 0.3$ e $P = 0,05 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, que faz corresponder na binodal para $T = 10 \text{ MeV}$, com os termos coulombiano e de superfície não-nulos, as frações $y' = 0,0899709$ e $y'' = 0,369401$ os gráficos para \bar{g} (regra da alavanca) e g (sem regra da alavanca) em função da temperatura.

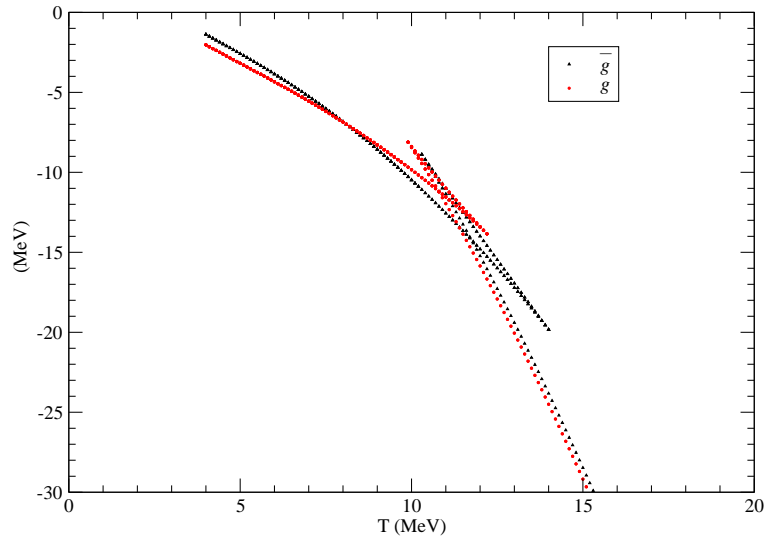


Figura 5.19: Energia livre de Gibbs como função da temperatura, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

Para uma melhor visualização e comparação removemos os laços das figuras acima,

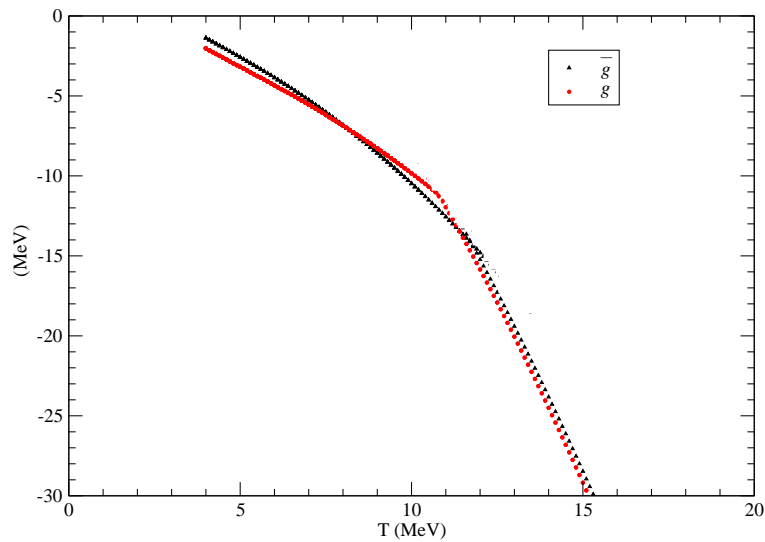


Figura 5.20: Figura sem laços da energia livre de Gibbs como função da temperatura, com $C \neq 0$ e $C_s \neq 0$.

O que se percebe é uma sutil suavização de \bar{g} comparativamente a g em função da temperatura. Tal “suavização” passou a ser interpretada [28] como uma transição de fase contínua. Assim, a ligação entre a entropia de uma fase e a entropia de outra, é feita continuamente por uma curva que vai desde $s(T_A)$ até $s(T_B)$, onde T_A e T_B são as temperaturas limites do início ao fim da transição de fase. Chomaz et al [29] contestam tal interpretação, como já mencionado anteriormente, dizendo ser tal transição contínua apenas uma mímica, pela imposição de que y tenha que ser constante.

Antes de finalizar essa seção e a partir da equação (5.2) apresentamos mais gráficos da entropia e da energia livre de Gibbs por partícula para um valor de pressão maior e mais nitidamente distante do caso simétrico $y = 0,5$. Com o valor da pressão definida, os valores de fração de cada fase foi determinado a partir da binodal $T = 10 \text{ MeV}$. Para a pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$ obtemos $y' = 0,0579942$ e $y'' = 0,361773$.

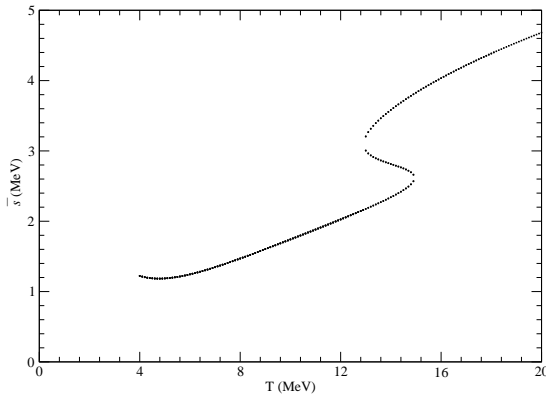


Figura 5.21: $s \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

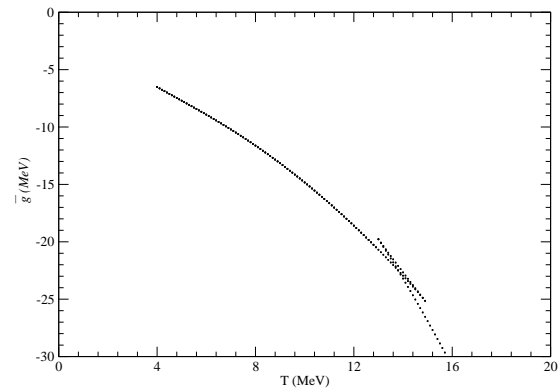


Figura 5.22: $g \times T$ para $y = 0,3$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

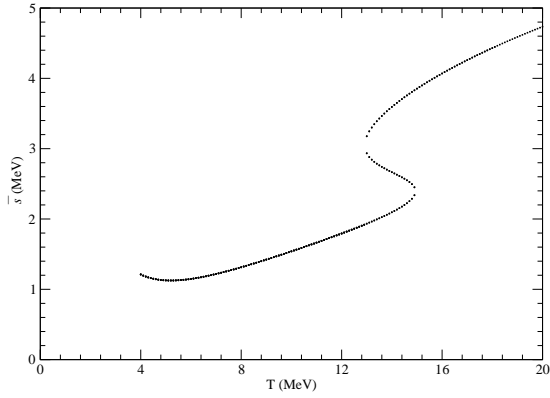


Figura 5.23: $\bar{s} \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.

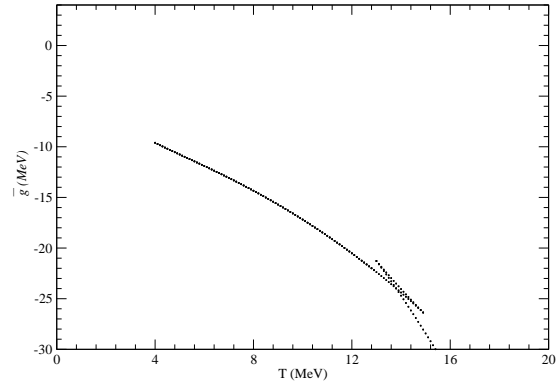


Figura 5.24: $\bar{g} \times T$ para $y = 0,35$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.

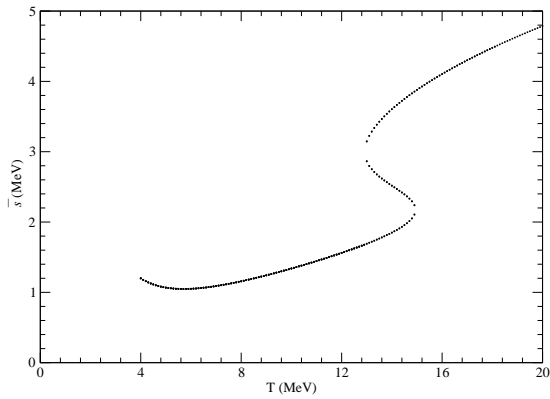


Figura 5.25: $\bar{s} \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

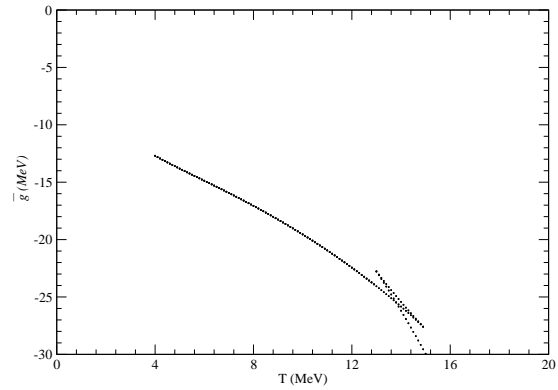


Figura 5.26: $\bar{g} \times T$ para $y = 0,4$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$, com $C = C_s = 0$.

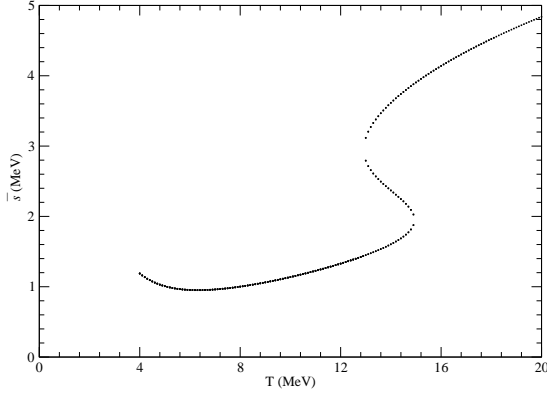


Figura 5.27: $\bar{s} \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.

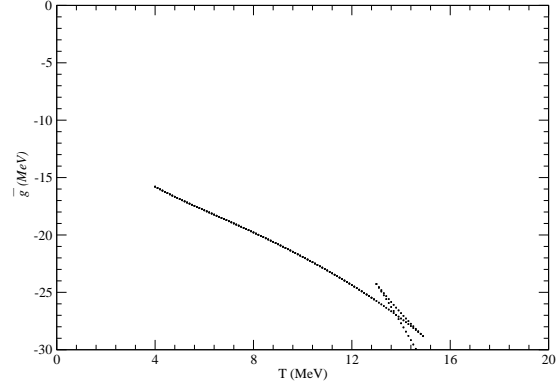


Figura 5.28: $\bar{g} \times T$ para $y = 0,45$ e pressão $P = 0,15 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^{-3}$. $C = C_s = 0$.

Achamos que a questão da ordem da transição de fase para matéria nuclear assimétrica está ainda longe de ser algo bem estabelecido de forma clara. A defesa de que seja uma transição de fase contínua tenta responder à falta de assinatura nítida para que se defina uma transição de primeira ordem. Por outro lado, a argumentação de que seja, a exemplo do caso da matéria nuclear simétrica, uma transição de fase de primeira ordem, não consegue também exibir tal manifestação, uma vez que se sente tolhida pela imposição de que y , o parâmetro de ordem, seja constante. Aliás, como deve ser, já que tanto na coexistência quanto na transição de fase, o núcleo tem o número de prótons e o número de nêutrons constantes. Para fugir de tais dubiedades, talvez tivesse que se pensar em um parâmetro de ordem alternativo, o que também não é uma tarefa muito simples.

Capítulo 6

Aplicações

A partir de agora todo o estudo desenvolvido nos capítulos anteriores será aplicado em núcleos finitos reais. Para isso escolhemos quatro núcleos com diferentes frações de prótons. São eles: ${}^{238}_{92}\text{U}$ (urânio), ${}^{208}_{82}\text{Pb}$ (chumbo), ${}^{152}_{68}\text{Er}$ (érbio) e ${}^{90}_{40}\text{Zr}$ (zircônio).

Como cada núcleo mencionado possui um raio diferente, devido ao número de partículas, os parâmetros da equação de estado dada em (1.2), dependentes do raio, alteram-se para cada núcleo. Isso pode ser visto na tabela 6.1.

Núcleo	y	R (fm)	$C(MeV.fm^{-1})$	$C_s(MeV.fm^3)$
${}^{238}_{92}\text{U}$	0,386	7,19	187,03	1,73
${}^{208}_{82}\text{Pb}$	0,394	6,87	170,96	1,81
${}^{90}_{40}\text{Zr}$	0,444	5,20	97,20	2,39
${}^{152}_{68}\text{Er}$	0,447	6,19	138,70	2,00

Tabela 6.1: Parâmetros dos núcleos finitos.

Com os dados mostrados anteriormente, calculamos os parâmetros críticos para cada um desses elementos, através da linha crítica que nos fornece os gráficos $T_c \times y$, $P_c \times y$ e $\rho_c \times y$. O procedimento adotado foi de gerar tais gráficos para cada núcleo, ou seja, para cada conjunto de valores (R , C e C_s) e a partir daí extrair as informações da fração de prótons correspondente. A tabela 6.2 apresenta os valores de T_c , P_c , ρ_c

e a razão $\frac{P_c}{\rho_c T_c}$.

Núcleo	$T_c(MeV)$	$P_c(MeV \cdot fm^{-3})$	$\rho_c(fm^{-3})$	$\frac{P_c}{\rho_c T_c}$
${}^{238}_{92}\text{U}$	16,681	0,236	0,048	0,289
${}^{208}_{82}\text{Pb}$	17,180	0,243	0,049	0,286
${}^{90}_{40}\text{Zr}$	19,423	0,277	0,051	0,275
${}^{152}_{68}\text{Er}$	18,052	0,256	0,050	0,283

Tabela 6.2: Valores críticos dos núcleos.

Comparativamente, para a matéria nuclear infinita ($C = C_s = 0$ e $y = 0,5$), temos os seguintes valores críticos: $T_c = 20,593 MeV$, $P_c = 0,385 MeV \cdot fm^{-3}$, $\rho_c = 0,056 fm^{-3}$ e $\frac{P_c}{\rho_c T_c} = 0,33$.

A contribuição dos termos correspondentes ao efeito de superfície e ao efeito coulombiano na equação da energia por partícula para as densidades críticas mencionadas, encontram-se na próxima tabela.

Núcleo	$e_C = Cy^2 \rho_c (MeV)$	$e_S = C_s \rho_c^{-1/3} (MeV)$
${}^{238}_{92}\text{U}$	1,360	4,723
${}^{208}_{82}\text{Pb}$	1,309	4,922
${}^{90}_{40}\text{Zr}$	0,996	6,405
${}^{152}_{68}\text{Er}$	1,391	5,434

Tabela 6.3: Valores dos termos de superfície e coulombiano retirados da expressão para a energia por partícula, dada em (1.43).

Outro aspecto interessante a ser analisado em núcleos finitos é a chamada curva calórica, gráfico $T \times \varepsilon^*(T)$, onde $\varepsilon^*(T)$ é a diferença entre o mínimo de energia, retirado do gráfico $e(T, \rho, y) \times \rho$ em uma dada temperatura fixa e o mínimo de energia retirado do mesmo gráfico, mas com $T = 0$.

Este aspecto se tornou muito importante quando se observou em colisões de íons pesados em baixas temperaturas a possibilidade de se extrair o calor específico a

partir de curvas calóricas em diferentes regiões de massas nucleares [31, 32, 33]. Alguns dados experimentais sugerem fortemente a existência de um plateau nessas curvas, como exibiremos adiante. Este fato, passou então a ser considerado como uma assinatura importante para a existência de transições de fase em núcleos quentes.

Assim, mostraremos pontos na curva calórica que geramos para o $^{150}_{62}\text{Sm}$, juntamente com os gráficos retirados de [9].

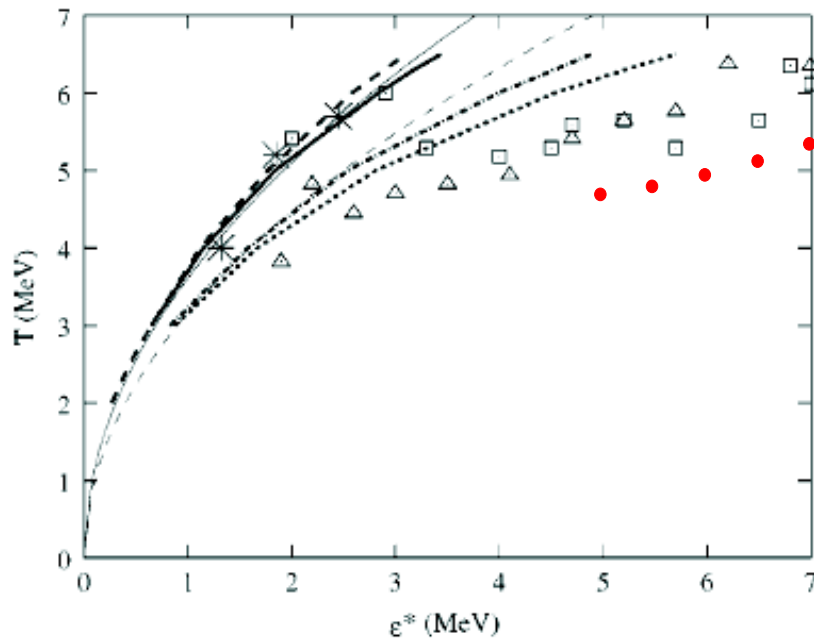


Figura 6.1: As curvas calóricas são mostradas para $^{166}_{62}\text{Sm}$ ($y = 0,37$, linha grossa de traços longos), $^{150}_{62}\text{Sm}$ ($y = 0,41$, linha grossa cheia); para $6V_0$ (linha grossa pontilhada-tracejada) e $9V_0$ (linha grossa de traços curtos) com volumes fixados para ^{166}Sm e para o gás de Fermi [31] ($k = 10,0$, linha pontilhada fina e $k = 13,0$, linha fina cheia). Resultados experimentais de [32] (quadrado), [33] (triângulos) e [31] (estrelas grandes) também são mostrados. Os pontos vermelhos correspondem ao $^{150}_{62}\text{Sm}$ do nosso modelo.

Curiosamente, apesar de um modelo muito simples, nossos pontos estão próximos dos valores experimentais.

Conclusões

Neste trabalho discutimos vários aspectos relevantes da termodinâmica de sistemas de dois componentes, aplicadas a matéria nuclear assimétrica. A equação de estado que utilizamos, do tipo Skyrme, possibilitou a obtenção de várias expressões analíticas para algumas grandezas termodinâmicas. Os termos de superfície assim como devido à interação coulombiana foram inspirados fenomenologicamente pelo modelo da gota líquida. Assim, com esta simplificação, os efeitos da superfície não dependem estruturalmente da densidade e por conseqüência da temperatura, como é o caso, por exemplo, de modelos para a matéria nuclear semi-infinita, usualmente, calculados na aproximação de Thomas-Fermi [34]. Mesmo assim e com suas limitações, o modelo que utilizamos permite extrair informações qualitativamente corretas no cenário de temperatura finita para a matéria nuclear assimétrica; bem como, resultados quantitativos aproximados.

Agora, relacionaremos pontos que julgamos importantes dos resultados obtidos ao longo do trabalho, algumas digressões e também algumas perspectivas para trabalhos futuros.

- No modelo utilizado, em temperatura nula, a matéria nuclear infinita satura em $\rho = 0.14 \text{ fm}^{-3}$ com energia de ligação -15.6 MeV . Para um núcleo finito de raio $R = 6 \text{ fm}$ e $y = 0,5$ o modelo prevê saturação em $\rho = 0.13 \text{ fm}^{-3}$ com energia de ligação por nucleon igual a -7.2 MeV , veja Fig.1.6.
- Vimos então, que este modelo relativamente simples, descreve bem os dados relativos à matéria nuclear infinita em temperatura nula. No regime de temperatura finita analisamos, através dos gráficos da energia livre de Helmholtz,

como a temperatura e a assimetria influenciam na energia de ligação do sistema.

- A variação da fração de prótons y , que controla a distinção entre os constituintes da matéria nuclear, altera substancialmente as spinodais mecânica e química, modificando assim suas regiões de instabilidade e de metaestabilidade no sistema. Em um diagrama $T \times \rho$, a spinodal química envolve a spinodal mecânica fazendo com que, em termos práticos, a região de metaestabilidade a ser considerada seja dominada pela spinodal química. À medida que a assimetria decresce, ambas as spinodais se aproximam e colapsam em $y = 0,5$.
- Desprezando-se a instabilidade química, ainda na matéria nuclear assimétrica, definimos pontos pseudo-críticos, dependentes da assimetria do sistema, a partir dos quais foi possível a construção analítica da energia livre de Gibbs-Landau. Nos gráficos de $T_c \times y$, observamos que o máximo não se dá para $y = 0,5$ (caso simétrico) e sim para $y = 0,45$. Isso se deve basicamente ao efeito coulombiano. O efeito de superfície causa apenas um aumento na temperatura pseudo-crítica. Voltaremos adiante a este ponto quando discutirmos a ordem da transição de fase.
- A incompressibilidade isotérmica e adiabática foram analisadas como função da temperatura para as densidades correspondentes ao equilíbrio hidrostático (pressão nula). O aumento da assimetria, que corresponde à diminuição de y , diminui o valor de ambas incompressibilidades. A temperatura flash do sistema é definida quando a incompressibilidade isotérmica se anula. Assim, essa temperatura também tem seu valor afetado pela assimetria, veja figuras (3.1) e (3.2). Os termos de superfície e coulombiano quando presentes, reduzem o valor das incompressibilidades. No entanto, para $y = 0,3$ esse efeito se inverte, possivelmente por causa da competição entre os termos coulombiano e de superfície. Observe-se que para $0.4 < y < 0.5$, região onde se situa muitos núcleos finitos, a temperatura flash está em torno de 14 MeV , conquanto a temperatura crítica propriamente dita, proveniente da curva de coexistência,

está em torno de 16 MeV , veja o capítulo 6. Segundo Stocker [20], é muito difícil experimentalmente a distinção entre estas duas criticalidades.

- Os calores específicos (à pressão e a volume constantes) também foram obtidos. Analiticamente, verificamos a validade da relação termodinâmica que envolve essas grandezas com as incompressibilidades térmica e adiabática. Foi verificado também que o calor específico à pressão constante diverge em qualquer ponto spinodal, onde o ponto flash é apenas um caso particular. No entanto, o calor específico a volume constante, não diverge. Este mesmo comportamento ocorre em um gás de van der Waals.
- A coexistência de fases foi detalhadamente estudada para os sistemas assimétricos. Primeiramente, vimos que o critério de Gibbs deve, naturalmente, levar em consideração os potenciais químicos de cada componente do sistema, para que se possa encontrar a região de coexistência, que para o caso de sistemas binários, é uma superfície no espaço P, y, T . A metodologia de obtenção da curva de coexistência foi, achamos, bem explicada. Cortes nessa superfície em planos de temperatura fixa, geraram as binodais (gráficos $P \times y$), permitindo-nos analisar processos de transição de fases no sistema. Vimos também pelas figuras apresentadas (gráfico $P \times \rho$) que a região de metaestabilidade do sistema é delimitada pela instabilidade química.
- Para facilitar o entendimento da coexistência de fases nas binodais, quando se fixa a fração de prótons, decodificamos seu entendimento via isotermas em planos bidimensionais $P \times \rho$, onde uma construção de Maxwell pôde ser visualizada, capítulo 4. Naquele exemplo, fica claro que impondo-se y fixo, apenas na situação em que $y = 0,5$ as pressões das fases líquida e gasosa são iguais.
- A temperatura pseudo-crítica, introduzida no capítulo 2, a partir da qual gerou-se a energia livre de Gibbs, foi também confrontada com a verdadeira temperatura crítica, veja Fig.4.17. Observa-se que para $0.35 < y < 0.55$ a discrepância entre ambas não é tão grande.

- A ordem da transição de fase foi investigada e mostramos os limites de temperaturas entre os quais as regiões de metaestabilidade, sinalizadas pelos laços de $g \times T$, surgiram. Para uma pressão fixada, veja Fig.5.16. Mostramos também como se realiza a proposta [27] de se entender a transição de fase como sendo contínua, ao se construir a energia livre de Gibbs na região de coexistência, que no texto chamamos de \bar{g} . A construção de $g \times T$ e $\bar{g} \times T$ foram exibidos nas figuras (5.19) e (5.20). Observa-se uma ligeira suavização de $\bar{g} \times T$ com relação a $g \times T$ que se interpreta como uma transição contínua. Como já mencionamos no capítulo 5, Chomaz et al discordam de tal interpretação, argumentando que a fixação do parâmetro de ordem, no caso y , distorce esse entendimento. Para nós, este ponto ainda não está bem esclarecido.
- Aqui, relacionado ao item acima, colocamos uma questão que pretendemos investigar. Será que ao se impor a fixação de y , não se poderia transferir o papel de parâmetro de ordem para a densidade? Note-se que ao construirmos a energia livre de Gibbs-Landau e com y fixado, o parâmetro de ordem escolhido foi $\eta = \frac{\rho(y) - \rho_c(y)}{\rho_c(y)}$. Na aproximação que fizemos ao definir $T_c(y)$, $\rho_c(y)$ e $P_c(y)$, a ordem da transição de fase estava muito clara: seria de primeira ordem para qualquer valor de y . Mas lembramos que instabilidade química foi desprezada neste caso. Um caminho, achamos, para investigação seria tentar manter $\eta = \frac{\rho(y) - \rho_c(y)}{\rho_c(y)}$ como parâmetro de ordem, mesmo quando a instabilidade química for incorporada.
- Nas aplicações que fizemos, consideramos alguns núcleos finitos com diferentes valores da fração de prótons e obtivemos seus parâmetros críticos. Pode-se notar, pela tabela 6.2, que as temperaturas críticas obtidas ainda são bem elevadas. Mesmo o caso do urânio, cuja temperatura crítica decresce cerca de 4 MeV com relação à temperatura crítica calculada para a matéria nuclear infinita, ainda é alta. Isto muito se deve a deficiências na construção do próprio modelo, com alta incompressibilidade, por exemplo, $K = 362 \text{ MeV}$. Também calculamos e apresentamos o fator de compressibilidade na última coluna da

tabela 6.2. Este fator é usualmente associado à “dureza” da *EOS*. Pelo que se observa, os termos de superfície contribuem para “amolecer” a mesma.

- Para algumas temperaturas, calculamos alguns pontos para a energia de excitação no caso do ${}^{150}_{62}\text{Sm}$ ($y = 0.41$). Curiosamente, estes pontos não distam tanto dos valores experimentais. Ressalta-se aqui que não houve qualquer pretensão de se reproduzir qualquer tipo de “plateau”, uma vez que no modelo utilizado, o calor específico a volume constante não diverge, como já mencionado anteriormente.

Apêndice A

Expansão do Virial para a EOS

A *Expansão do Virial* pode ser utilizada em um sistema físico para tentar descrever o comportamento de um gás real, pois leva em consideração a correção nos termos da equação de estado ligados à temperatura. Se considerarmos apenas o primeiro termo desta expansão teremos o comportamento de um gás ideal.

Nesse apêndice vamos encontrar através da *Expansão do Virial* a EOS para o potencial que descreve a equação de van der Waals, conhecido como potencial de *Lennard-Jones*.

A Expansão do Virial pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{Pv}{kT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l(T) \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1}, \quad (\text{A.1})$$

onde k representa a constante de Boltzmann.

Os termos $a_l(T)$ representam os coeficientes da Expansão do Virial e λ o comprimento de onda térmico dado por:

$$\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT} \right)^{1/2}, \quad (\text{A.2})$$

onde m é a massa do nucleon.

Esses coeficientes se encontram calculados na literatura e para $l = 1, 2$ são escritos da seguinte forma:

- $l = 1$

$$a_1(T) = 1. \quad (\text{A.3})$$

- $l = 2$

$$a_2(T) = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \int_0^\infty \left(e^{-\frac{u(r)}{kT}} - 1 \right) r^2 dr, \quad (\text{A.4})$$

onde $u(r)$ representa o potencial de interação entre as partículas.

Em nosso trabalho vamos utilizar apenas os coeficientes até ordem $l = 2$ da expansão, pois esses são os termos que nos interessam para o cálculo da equação de estado.

A.1 Potencial de Lennard-Jones

Em 1924, Lennard-Jones escreveu uma fórmula semi-empírica para o potencial que descreve muito bem o comportamento do gás de van der Waals, dada por:

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (\text{A.5})$$

Algumas considerações sobre esta equação devem ser feitas. Por exemplo, essa função para o potencial apresenta um mínimo de valor $-\varepsilon$ a uma distância $r_0 = 2^{1/6}\sigma$ e tende ao infinito (positivo) para valores de $r < \sigma$ e vai para zero (negativo) lentamente com $r \gg \sigma$. O termo a esquerda do “mínimo” é denominado atrativo e o termo a direita repulsivo.

Na equação A.5 o termo com potência em r^{-12} é considerado repulsivo e o de potência r^{-6} é o atrativo. Vamos aproximar a parte repulsiva para:

$$u(r) = +\infty, \quad \text{para } r < r_0 \quad (\text{A.6})$$

e a parte atrativa como:

$$u(r) = -u_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6, \quad \text{para } r \geq r_0, \quad (\text{A.7})$$

Logo,

$$u(r) = \begin{cases} +\infty, & \text{para } r < r_0 \\ -u_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6, & \text{para } r \geq r_0. \end{cases}$$

Substituído o potencial na equação A.4, temos:

$$a_2(T) = -\frac{2\pi}{\lambda^3} \int_{r_0}^{\infty} \left(e^{-\frac{u_0}{kT} \left(\frac{r_0}{r}\right)^6} - 1 \right) r^2 dr. \quad (\text{A.8})$$

Assumindo que $\frac{u_0}{kT} \ll 1$, obtemos:

$$e^{-\frac{u_0}{kT} \left(\frac{r_0}{r}\right)^6} \approx 1 - \left(\frac{r_0}{r}\right)^6, \quad (\text{A.9})$$

substituindo (A.9) em (A.8) e resolvendo a integral, chegamos a seguinte expressão para $a_2(T)$:

$$a_2(T) = \frac{2\pi r_0}{3\lambda^3} \left[1 - \frac{u_0}{kT} \right]. \quad (\text{A.10})$$

Podemos reescrever a equação A.1 da seguinte maneira:

$$\frac{Pv}{kT} = a_1(T) + \frac{\lambda^3}{v} a_2(T) + \mathcal{O}(\lambda^6), \quad (\text{A.11})$$

Substituindo as expressões de $a_1(T)$ e $a_2(T)$ em (A.11), encontramos:

$$\frac{Pv}{kT} \cong 1 + \frac{\lambda^3}{v} \left(\frac{2\pi r_0}{3\lambda^3} \right) \left[1 - \frac{u_0}{kT} \right] \quad (\text{A.12})$$

$$P \cong \frac{kT}{v} \left\{ 1 + \frac{2\pi r_0}{3v} \left[1 - \frac{u_0}{kT} \right] \right\} \quad (\text{A.13})$$

$$\left(P + \frac{2\pi r_0^3}{3v^2} u_0 \right) \cong \frac{kT}{v} \left(1 - \frac{2\pi r_0^3}{3v} \right) \quad (\text{A.14})$$

Definindo $a = \frac{2\pi r_0^3}{3} u_0$ e $b = \frac{2\pi r_0^3}{3}$ e arrumando a equação, temos:

$$\left(P + \frac{a}{v^2} \right) \cong \frac{kT}{v} \left(1 - \frac{v-b}{v} \right) \quad (\text{A.15})$$

Logo,

$$\left(P + \frac{a}{v^2} \right) (v-b) \cong kT \quad (\text{A.16})$$

que é a chamada *Equação de van der Waals*.

Apêndice B

Equação de van der Waals

Neste apêndice vamos apresentar a equação de van der Waals, muito bem conhecida na descrição de gases reais quando se usa a aproximação de campo médio. Discutiremos sua criticalidade e a reescrevemos em sua forma escalonada. Esta equação escalonada é conhecida como a manifestação da lei dos estados correspondentes, onde as constantes da equação original que devem ser ajustadas para cada tipo de gás, são absorvidas e não mais aparecem em sua forma final. Assim a equação de estado é apresentada exibindo seu caráter de universalidade.

B.1 Equação de Estado

As equações do tipo van der Waals são equações de estado que descrevem mais precisamente as relações $P - v - T$, para gases reais clássicos. Os efeitos de componentes repulsivas e atrativas das forças intermoleculares são levados em conta neste modelo. Transições de fase são também previstas por tais modelos.

Em 1873, van der Waals, derivou a seguinte equação:

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT, \quad v = \frac{V}{N}. \quad (\text{B.1})$$

A pressão expressa em uma equação de estado é pressão que força as moléculas a ficarem confinadas em um recipiente de volume V . Para um gás ideal, cujas interações entre as moléculas são desprezadas, essa pressão é a própria pressão externa.

Para modelos que tratam de gases reais, como o de van der Waals, essas interações são equivalentes a uma pressão interna cujo efeito é reduzir a pressão total. O termo a/v^2 representa esta pressão interna.

O volume não nulo das moléculas também é relevante neste modelo. Um gás não pode ocupar todo o volume do recipiente em que está encerrado pois suas moléculas apresentam volume e por conta disso existe no recipiente um volume excluído (co-volume), não disponível para o deslocamento das moléculas. Tal efeito é representado no modelo de van der Waals pelo termo $v - b$. A solução da equação (B.1) exibe três raízes.

A transição de fase ocorre em uma temperatura crítica T_c , onde essas três raízes coincidem.

B.2 Parâmetros Críticos

Podemos expressar as constantes a e b em função dos parâmetros críticos, aplicando a condição de criticalidade quando $T \rightarrow T_c$.

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_T = 0. \quad (\text{B.2})$$

Logo,

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = -\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3}, \quad (\text{B.3})$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_T = \frac{2RT}{(v-b)^3} - \frac{6a}{v^4}. \quad (\text{B.4})$$

No ponto crítico cada equação acima é nula, o que nos leva a

$$P_c = \frac{a}{27b^2}, \quad (\text{B.5})$$

$$v_c = 3b \quad \text{e} \quad (\text{B.6})$$

$$T_c = \frac{8a}{27Rb}. \quad (\text{B.7})$$

B.3 Lei dos Estados Correspondentes

Podemos expressar a equação (B.1) de uma forma universal, ou seja, definindo

$$P' = \frac{P}{P_c}, \quad (\text{B.8})$$

$$v' = \frac{v}{v_c}, \quad (\text{B.9})$$

$$T' = \frac{T}{T_c} \quad (\text{B.10})$$

e combinando (B.1) com os dois conjunto de equações (B.5-B.7) e (B.8-B.10) encontramos a chamada *Lei dos Estados Correspondentes*:

$$\left(P' + \frac{3}{v'^2}\right)(3v' - 1) = 8T' \quad (\text{B.11})$$

que é a equação de estado de van der Waals em uma forma adimensional, escalonada nos parâmetros críticos e sem a dependência das constantes a e b .

O mesmo procedimento será adotado na análise das equações de estado da matéria nuclear simétrica e assimétrica com o objetivo de analisar a estrutura de suas transições de fase.

Apêndice C

Equação da Matéria Nuclear Simétrica

Podemos analisar algumas propriedades da matéria nuclear, como transições de fase, através de sua equação de estado. O modelo a ser analisado é derivado de uma interação de alcance zero do tipo Skyrme que trata da matéria nuclear simétrica, ou seja, onde o número de prótons é igual ao número de nêutrons, e sem interações coulombianas e termo de superfície. Para efetuarmos os cálculos dos parâmetros críticos, utilizamos os cálculos apresentados no Apêndice B. Vamos mais além quando a escalonamos em termos de pontos spinodais, mais gerais do que o ponto crítico usual.

C.1 EOS de Skyrme Simétrica

A equação de estado simétrica tem a seguinte forma analítica:

$$P = 2a_3\rho^3 - a_0\rho^2 + \rho k_B T. \quad (\text{C.1})$$

Esta equação é do tipo van der Waals, ou seja, ρ possui três raízes e portanto podemos adotar as mesmas técnicas usadas anteriormente para o estudo deste modelo.

C.2 Pontos Críticos

Vamos encontrar a Lei dos Estados Correspondentes para a equação de Skyrme, escalonando a equação C.1 com os seus valores críticos como no caso da equação de van der Waals. A condição a ser aplicada neste caso é

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\rho=\rho_c} = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{\rho=\rho_c} = 0 \quad (\text{C.3})$$

que nos fornece

$$\rho_c = \frac{a_0}{6a_3}, \quad (\text{C.4})$$

$$k_B T_c = \frac{a_0^2}{6a_3}, \quad (\text{C.5})$$

$$P_c = \frac{a_0^3}{108a_3^2}. \quad (\text{C.6})$$

Substituindo as equações (C.4-C.6) em (C.1) e definindo

$$P' = \frac{P}{P_c}, \quad (\text{C.7})$$

$$\rho' = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad (\text{C.8})$$

$$T' = \frac{T}{T_c}, \quad (\text{C.9})$$

obtemos então:

$$P' = \rho'^3 - 3\rho'^2 + 3\rho'T'. \quad (\text{C.10})$$

Podemos reescrever a equação (C.10) de outra maneira, ou seja, através de outra normalização utilizando o parâmetro de ordem η e a variável reduzida t , mostrada abaixo:

$$\eta = \frac{\rho}{\rho_c} - 1, \quad (\text{C.11})$$

$$t = 1 - \frac{T}{T_c}. \quad (\text{C.12})$$

Essa outra normalização nos fornece:

$$P' = 1 - 3t - 3t\eta + \eta^3. \quad (\text{C.13})$$

Trabalhando agora com a equação escalonada (C.10), podemos analisar as regiões de metaestabilidade a partir de uma expressão de T' x ρ' . Tal expressão é obtida impondo a seguinte condição:

$$\left(\frac{\partial P'}{\partial \rho'}\right) = 0, \quad (\text{C.14})$$

encontramos então:

$$T' = \rho'(2 - \rho'). \quad (\text{C.15})$$

C.3 Pontos Flashes

Agora vamos encontrar a equação escalonado para os pontos flashes, que seria uma forma de Lei dos Estados Correspondentes para estes pontos.

Condições dos pontos flashes:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\rho=\rho_f} = 0, \quad (\text{C.16})$$

$$P(\rho_f) = 0. \quad (\text{C.17})$$

As constantes a_0 e a_3 possuema a seguinte relação com T_f :

$$a_0 = \frac{2k_B T_f}{\rho_f}, \quad a_3 = \frac{k_B T_f}{2\rho_f^2}, \quad (\text{C.18})$$

onde

$$k_B T_f = \frac{a_0^2}{8a_3}, \quad \rho_f = \frac{a_0}{4a_3}. \quad (\text{C.19})$$

Quando substituimos (C.18) em (C.1) nos resulta na seguinte equação de estado escalonada

$$P^* = \rho^{*3} - 2\rho^{*2} + \rho^* T^* \quad (\text{C.20})$$

com

$$P^* = \frac{P}{k_B \rho_f T_f}, \quad (\text{C.21})$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_f}, \quad (\text{C.22})$$

$$T^* = \frac{T}{T_f}. \quad (\text{C.23})$$

Combinando T_c e T_f das equações (C.5) e (C.23), encontramos $T_c = \frac{4T_f}{3}$.

C.4 Pontos Spinodais

Vamos fazer agora uma generalização da Lei dos Estados Correspondentes, da equação de estado da matéria nuclear, escalonando-a com os valores dos pontos spinodais. Definamos então o que são esses pontos.

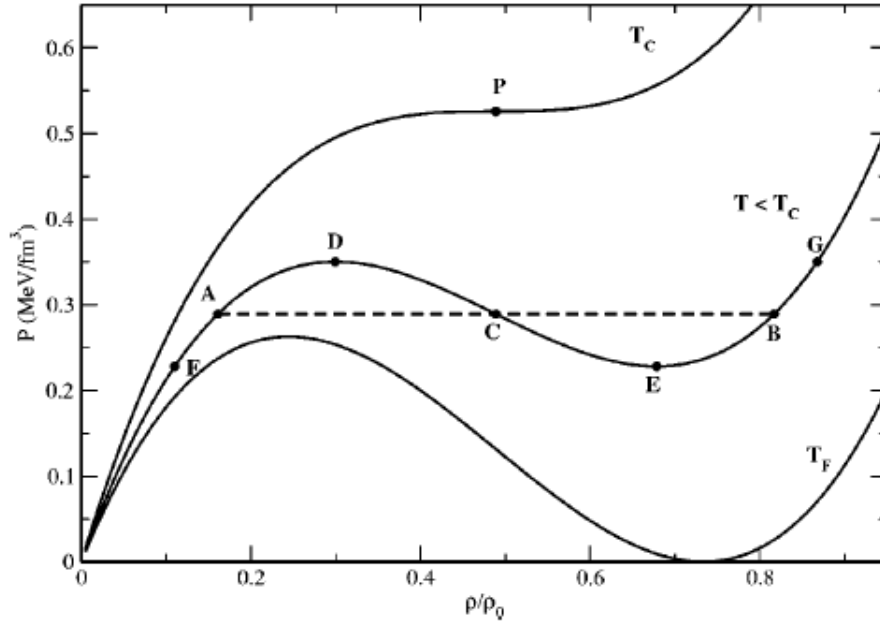


Figura C.1: Curvas de isoterma de pressão em função da razão de densidades, retirada de [19]. A linha tracejada representa a construção de Maxwell.

Podemos ver pela Fig.C.1 que a região delimitada pelos pontos D e E apresenta a condição $\frac{\partial P}{\partial \rho} < 0$, esta região é fisicamente não permitida pois indica um aumento de volume para cada aumento de pressão e portanto é dita instável. Já as regiões delimitadas pelos pontos A e D , E e B são fisicamente permitidas pois $\frac{\partial P}{\partial \rho} > 0$, tais regiões são ditas metaestáveis. Os pontos spinodais são definidos pela condição $\frac{\partial P}{\partial \rho} = 0$. Notemos que quando $T \rightarrow T_c$ os pontos spinodais colapsam para o ponto crítico P indicado na figura.

Então, aplicando as condições para os pontos spinodais

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{\rho=\rho_s} = 0, \quad (\text{C.24})$$

$$P(\rho_s) = P_s, \quad (\text{C.25})$$

determinamos

$$a_0 = \frac{2k_B\rho_s T_s - 3P_s}{\rho_s^2}, \quad a_3 = -\frac{P_s}{\rho_s^3} + \frac{k_B T_s}{2\rho_s^2}. \quad (\text{C.26})$$

Essa equações quando substituída em (C.1) nos resulta na seguinte equação de estado escalonada

$$P^* = (1 - 2A_s)\rho^{*3} + (3A_s - 2)\rho^{*2} + \rho^* T^*, \quad (\text{C.27})$$

onde

$$P^* = \frac{P}{k_B\rho_s T_s}, \quad (\text{C.28})$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_s}, \quad (\text{C.29})$$

$$T^* = \frac{T}{T_s}, \quad (\text{C.30})$$

$$A_s = \frac{P_s}{k_B\rho_s T_s}. \quad (\text{C.31})$$

A equação de estado escalonada para o ponto crítico é recuperada fazendo $A_s \rightarrow \frac{1}{3}$, como é de se esperar, pois o ponto crítico é um ponto spinodal. E a equação escalonada para o ponto flash é recuperada fazendo $A_s \rightarrow 0$

Para uma dada isoterma T , podemos obter de forma analítica as densidades spinodais ρ_s , que são os limites da região de instabilidade mecânica do sistema, fazendo

$$\left(\frac{\partial P'}{\partial \rho'} \right)_{\rho=\rho_s} = 0, \quad (\text{C.32})$$

o que nos resulta

$$\rho_s = \rho_c(1 \pm \sqrt{t}) \quad (\text{C.33})$$

e

$$P_s = P_c \left[1 - 3t \left(1 \pm \frac{2}{3}\sqrt{t} \right) \right], \quad (\text{C.34})$$

com t dado pela equação (C.12)

Por definição:

$$\bar{\eta} = \frac{\rho - \rho_s}{\rho_s}, \quad (\text{C.35})$$

$$\bar{t} = \frac{T - T_s}{T_s}. \quad (\text{C.36})$$

Podemos relacionar esse parâmetro de ordem $\bar{\eta}$ e a variável reduzida \bar{t} com os definidos pelas equações C.11 e C.12. Encontramos então:

$$\bar{\eta} = \frac{\rho_c}{\rho_s}(\eta + 1) - 1, \quad (\text{C.37})$$

$$\bar{t} = \frac{T_c}{T_s}(1 - t) - 1. \quad (\text{C.38})$$

Substituindo as equações (C.35) e (C.36) na equação escalonada para o ponto spinodal (C.27), temos

$$\bar{P} = (A_s + \bar{t}) + \bar{t}\bar{\eta} + (1 - 3A_s)\bar{\eta}^2 + (1 - 2A_s)\bar{\eta}^3. \quad (\text{C.39})$$

Se fizermos $A_s \rightarrow 1/3$ temos que $T \rightarrow T_c$, então pela equação (C.33) $\rho_s \rightarrow \rho_c$. Portanto pode-se escrever, nesse limite, as seguintes relações:

$$\bar{\eta} = \eta, \quad (\text{C.40})$$

$$\bar{t} = -t, \quad (\text{C.41})$$

logo pode-se reescrever a equação (C.39) em termos de η e t como:

$$\frac{P'}{3} = \left(\frac{1}{3} - t\right) - t\eta + \frac{1}{3}\eta^3. \quad (\text{C.42})$$

Temos então uma equação escalonada em termos do parâmetro de ordem η . Perceba que essa equação é idêntica à equação (C.13), mostrada anteriormente.

Apêndice D

Equivalência entre Expressões da Incompressibilidade

A incompressibilidade isotérmica de sistemas termodinâmicos, dada por

$$K_T = 9 \left[\rho^2 \frac{\partial^2(\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho^2} + 2\rho \frac{\partial(\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho} \right], \quad (\text{D.1})$$

onde $\mathcal{F} = \frac{F}{V}$ e $F = E - TS$, pode ser escrita de formas diferentes¹. Demonstraremos agora algumas dessas expressões.

Temos que

$$\frac{\partial(\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} - \frac{\mathcal{F}}{\rho^2} \quad (\text{D.2})$$

e

$$\frac{\partial^2(\mathcal{F}/\rho)}{\partial \rho^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} + \frac{2\mathcal{F}}{\rho^3}, \quad (\text{D.3})$$

logo, multiplicando (D.2) por 2ρ e (D.3) por ρ^2 temos, por (D.1), que a incompressibilidade também pode ser escrita como

$$K_T = 9\rho \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2}. \quad (\text{D.4})$$

¹Neste caso, todas as derivadas são feitas a temperatura constante.

Porém

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} &= \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{P + \mathcal{F}}{\rho} \right)\end{aligned}\quad (\text{D.5})$$

$$= \frac{1}{\rho} \frac{\partial(P + \mathcal{F})}{\partial \rho} - \frac{P + \mathcal{F}}{\rho^2}, \quad (\text{D.6})$$

onde fizemos uso da seguinte relação

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} = \frac{P + \mathcal{F}}{\rho}. \quad (\text{D.7})$$

Sendo assim, por (D.4), chegamos em outra expressão bastante útil para a incompressibilidade dada por

$$K_T = 9 \left[\frac{\partial(P + \mathcal{F})}{\partial \rho} - \frac{P + \mathcal{F}}{\rho} \right]. \quad (\text{D.8})$$

Note que a partir de (D.5) temos

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} &= \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{P + \mathcal{F}}{\rho} \right) \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho} - \frac{P}{\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} - \frac{\mathcal{F}}{\rho^2} \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \left(\frac{P + \mathcal{F}}{\rho} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \right).\end{aligned}\quad (\text{D.9})$$

Mas por (D.7),

$$\frac{P + \mathcal{F}}{\rho} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} = 0, \quad (\text{D.10})$$

resultando em

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho}. \quad (\text{D.11})$$

Assim chegamos, por (D.4), em uma quarta expressão para a incompressibilidade dada por

$$K_T = 9 \frac{\partial P}{\partial \rho}. \quad (\text{D.12})$$

Em sistemas a temperatura nula, as expressões dadas por (D.1), (D.4) e (D.8) têm o mesmo formato porém agora com $\mathcal{F} = \mathcal{E}$. No entanto, (D.12) não necessita de nenhuma modificação, mostrando assim que esta é a expressão mais geral possível para o cálculo da incompressibilidade isotérmica.

Referências Bibliográficas

- [1] L. Landau e E. Lifshitz, *Statistical Physics*, 3a ed., Washington (2000);
Ph. Chomaz e F. Gulminelli, *Dynamics and Thermodynamics of systems with long range interactions*, Lecture Notes in Physics **vol.62**, Springer (2002);
H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford Univ. Press, New York, (1971);
H. Stocker e W. Greiner, *Phys. Rep.* **137**, 277 (1986) e suas referências;
E.V. Shuryak, *The QCD Vacuum, Hadrons and the Superdense Matter*, Lecture Notes in Physics **vol.8**, Singapore, World Scientific (1998);
- [2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press, U.K. (2001);
- [3] W. Glöckle, *The Quantum Mechanical Few-Body Problem*, Springer-Verlag, Berlin (1983);
R. Machleidt, K. Holinde e Ch. Elster, *Phys. Rep.* **149**, 1 (1987);
R. Machleidt, *Adv. Nucl. Phys.* **19**, 189 (1989);
M. Lacombe et al., *Phys. Rev.* **C21**, 861 (1980);
V.G.J Stoks, R.A.M Klomp, C.P.F. Terheggen e J.J. de Swart, *Phys. Rev.* **C49**, 2950 (1954);
- [4] R. Machleidt, *Advances in Nuclear Physics*, editado por J.W. Negele e E. Vogt, **vol.16**, Plenum, New York (1986);
- [5] B.D. Serot e J.D. Walecka, *Int. J. Mod. Phys.* **E6**, 515 (1997).
- [6] J. Zimanyi e S.A. Moszkowski, *Phys. Rev.* **C42**, 1416 (1990);
A. Delfino, C.T. Coelho e M. Malheiro, *Phys. Rev.* **C51**, 2188 (1995);

- A. Delfino, C.T. Coelho e M. Malheiro, *Phys. Lett.* **B345**, 361 (1995);
R.J. Furnstahl e B.D. Serot, *Phys. Rev.* **C41**, 262 (1990);
- [7] J.B. Natowitz, K. Hagel, Y. Ma, M. Murray, L. Qin, R. Wada e J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 212701 (2002);
- [8] S. Das Gupta, A.Z. Mekjian e M.B. Tsang, *Adv. Nucl. Phys.* **26**, 89 (2001);
- [9] D.P. Menezes e C. Providência, *Phys. Rev.* **C64**, 044306 (2001).
- [10] M.E. Fisher, *Physics*, **3**, 225, Long Island City, New York, (1967);
J.S. Sá Martins e P.M.C de Oliveira, *Nucl. Phys.* **A643**, 433 (1998);
- [11] Ph. Chomaz e F. Gulminelli, *Phys. Lett.* **B447**, 221 (1999);
S.K. Samaddar e S. Das Gupta, *Phys. Rev.* **C61**, 034610 (2000);
P. Bhattacharyya, S. Das Gupta e A.Z. Mekjian, *Phys. Rev.* **C60**, 054616 (1999);
S.J. Lee e A.Z. Mekjian, *ibid* **63**, F 044605 (2001); **68**, 014608 (2003).
- [12] Takaharu Otsuka, Rintaro Fujimoto, Yutaka Utsuno, B. Alex Brown, Michio Homma e Takahiro Mizusaki, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 082502 (2001);
A.E.A. Amorim, L. Tomio, T. Frederico, *Phys. Rev.* **C56**, R2378 (1997);
- [13] K.C. Chung, *Introdução à Física Nuclear*, EdUERJ, Rio de Janeiro (2001).
- [14] J.D. Walecka, *Theoretical Nuclear and Subnuclear Physics*, Oxford Univ. Press, New York (1995).
- [15] S.J. Lee e A. Z. Mekjian, *Phys. Rev.* **C45**, 1284 (1992).
- [16] Huang, K., *Statistical Mechanics*, Wiley (1963).
- [17] L.D. Landau e E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pergamon Press, Oxford (1969).
- [18] A.L. Goodman, J.I. Kapusta e A.Z. Mekjian, *Phys. Rev.* **C30**, 851 (1984).
- [19] J.B. Silva, A. Delfino, J.S. Sá Martins, S. Moss de Oliveira e C.E. Cordeiro *Phys. Rev* **C69**, 024606 (2004).

- [20] W. Stocker, *Phys. Lett.* **B142**, 319 (1984).
- [21] I. Bombaci, T.T.S. Kuo e U. Lombardo, *Phys. Lett.* **B311**, 9 (1993).
- [22] J.P. Blaizot, *Phys. Rep.* **64**, 171 (1980).
- [23] J.P. Blaizot et al., *Nucl. Phys.* **A591**, 435 (1995).
- [24] G.E Brown e Mannque Rho, *Phys. Rep.* **363**, 85 (2002).
- [25] K.C. Chung et al., *Eur. Phys. J.* **A10**, 27 (2001).
- [26] Hiroaki Kouno, Kazuharu Koide, Tomohiro Mitsumori, Nobuo Noda, Akira Hasegawa e Masahiro Nakano, *Progress of Theoretical Physics* **vol.96**, 191 (1996).
- [27] H. Müller e B.D. Serot, *Phys. Rev.* **C52**, 2072 (1995).
- [28] J.E. Finn et al., *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1321 (1982);
G. Bertsch, P.J. Siemens, *Phys. Lett.* **B**, 126 (1983);
C.B. Das et al., *Phys. Rep.* **406**, 1 (2005);
J.M. Lattimer e M. Prakash, *Phys. Rep.* **333**, 121 (2000);
N.K. Glendenning, *Phys. Rep.* **342**, 393 (2001);
Li Yang, Shaoyu Yin, Weiliang Qian e Ru-Keng Su *Phys. Rev.* **C73**, 025203 (2006);
- [29] C. Ducoin, Ph. Chomaz e F. Gulminelli, nucl-th/0512029 (2006).
- [30] M.J. de Oliveira, *Termodinâmica*, Editora Livraria da Física, São Paulo (2005).
- [31] H. Hagedorn et al., *Nucl. Phys.* **A486**, 429 (1988).
- [32] J. Phochodzalla et al., *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1040 (1995).
- [33] J.A. Hauger et al., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 235 (1996).
- [34] P. Bonche et al., *Nucl. Phys.* **A436**, 265 (1985);
S. Levit e P. Bonche, *Nucl. Phys.* **A437**, 426 (1985);
J. Besprovaný e S. Levit, *Phys. Lett.* **B217**, 1 (1989);

- H.Q. Song e R.K. Su, *Phys. Rev.* **C44**, 2505 (1991);
Y.J. Zhang et al., *Phys. Rev.* **C54**, 1137 (1996);
A. Das et al., *J. Phys.* **G18**, 869 (1992);
H.Q. Song et al., *Phys. Rev.* **C47**, 2001 (1993);
H.Q. Song et al., *Phys. Rev.* **C49**, 2924 (1994);
M. Baldo e L.S. Ferreira, *Phys. Rev.* **C59**, 682 (1999);
L.L. Zhang et al., *Phys. Rev.* **C59**, 3292 (1999);
D.P Menezes e C. Providência, *Nucl. Phys.* **A650**, 283 (1999);
D.P Menezes e C. Providência, *Phys. Rev.* **C60**, 024313 (1999);