



EXPANSÃO ANALÍTICA DO SEGUNDO COEFICIENTE DO VIRIAL PARA POTENCIAIS GENERALIZADOS E SUA APLICAÇÃO PARA OS POTENCIAIS DE LONGO ALCANCE EM D DIMENSÕES

Luiz Pedro Silva¹, Apiano Ferreira Morais²

Resumo: O segundo coeficiente do virial $B_2(T)$ constitui o primeiro termo de correção para o comportamento de um gás ideal e descreve as interações entre pares de moléculas. Para potenciais intermoleculares do tipo $U(r) = k/r^n$ a integral que define $B_2(T)$ pode divergir dependendo dos parâmetros do sistema. Este trabalho teve como objetivo desenvolver uma expressão analítica geral para o segundo coeficiente do virial aplicável a este tipo de potencial, incluindo o tratamento adequado de termos singulares, permitindo a análise sistemática de gases com interações de longo alcance. Inicialmente, utilizamos o potencial intermolecular na função de Mayer, $\Phi(r) = \exp[-\beta U(r)] - 1$, responsável por descrever as correlações entre pares de partículas, com $\beta = 1/k_B T$. Expandimos $\Phi(r)$ em séries de Taylor, resultando em $\Phi(r) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1k\beta)^m}{m!} r^{-mn}$. Em seguida, substituímos essa expansão na integral do segundo coeficiente do virial $B_2(T) = -\Omega \int_{\sigma}^{\infty} \Phi(r) r^{D-1} dr$, onde $\Omega = 2\pi^{D/2}/\Gamma(D/2)$, é a área da superfície esférica unitária em D dimensões. Além disso, para tratar os casos em que a integral diverge, aplicamos a regularização por séries de Laurent, permitindo extrair a contribuição finita do termo singular. Ao aplicar a função de Mayer expandida em séries de Taylor na integral do segundo coeficiente do virial, consideramos a solução finita apenas para o caso em que $mn > D$, incorporando a regularização via séries de Laurent para tratar possíveis divergências. Assim, obtemos uma expressão geral definida por uma sentença condicional, adotando $\delta = 1$ se $D/n \in \mathbb{N}^+$ e $\delta = 0$ caso contrário. Dessa forma, a expressão final assume a forma: $B_2(T) = -\Omega \left[\sum_{m=1}^{+\infty} \frac{(-1k\beta)^m}{m!} \frac{\sigma^{D-mn}}{mn-D} - \delta_{d/n} \cdot \frac{(-1k\beta)^{D/n}}{(D/n)!} \ln \sigma \right]$. A soma no primeiro termo dos parênteses estende-se de $m = 1$ até $+\infty$, excluindo o termo singular correspondente a $m_0 = D/n$. Para potenciais de longo alcance em 3 dimensões, obtemos para $U_1 = k/r$ $B_2(T) = -\Omega_3 \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1k\beta)^m}{m!} \frac{\sigma^{3-m}}{m-3} + \right.$

¹ Universidade Regional do Cariri, email: luiz.pedro28@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: apiano.morais@urca.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVENBRO de 2025

Tema: “UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030”



$\frac{(k\beta)^3}{3!} \ln \sigma \Big] \text{ e para } U_2 = k/r^3 \text{ encontramos a expressão: } B_2(T) = -\Omega_3 \left[\sum_{m=2}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} (k\beta)^m \frac{\sigma^{3-3m}}{3m-3} + k\beta \ln \sigma \right].$ Os resultados obtidos fornecem uma formulação analítica geral para o segundo coeficiente do virial em potenciais do tipo $U(r) = k/r^n$, válida em qualquer dimensão espacial. Essa expressão permite identificar e tratar rigorosamente as singularidades associadas a interações de longo alcance e potenciais generalizados, fornecendo um arcabouço teórico consistente para a descrição do comportamento não ideal de gases sob diferentes regimes de interação.

Palavras-chave: Física Matemática. Função de Mayer. Regularização Dimensional. Segundo Coeficiente do Virial.

Agradecimentos:

L.P.S. agradece à Universidade Regional do Cariri pela bolsa de Iniciação Científica. A.F.M. agradece o apoio financeiro do CNPq (Processo nº 104550/2025-2).