Biblioteca Digital
F C E N - U B A

BIBLIOTECA CENTRAL LUIS F LELOIR
BIBLIOTECA CENTRAL LELOIR
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UBA

Tesis de Posgrado

Criticalidad y No-linealidad en fragmentación

Balenzuela, Pablo

2002

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:
Balenzuela, Pablo. (2002). Criticalidad y No-linealidad en fragmentación. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_3494_Balenzuela.pdf

Cita tipo Chicago:
Balenzuela, Pablo. "Criticalidad y No-linealidad en fragmentación". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2002.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_3494_Balenzuela.pdf

EXACTAS UBA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

UBA
Universidad de Buenos Aires

Dirección: Biblioteca Central Dr. Luis F. Leloir, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA - Tel. (++54 +11) 4789-9293

Contacto: digital@bl.fcen.uba.ar

Universidad de Buenos Aires

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Criticalidad y No-linealidad en Fragmentación

Autor: Lic. Pablo Balenzuela

Director de Tesis: Dr. C. O. Dorso

Lugar de Trabajo: Dpto. de Física, FCEyN, UBA.

Trabajo de Tesis para optar por el título de Doctor en Ciencias Físicas

Spicyland, somewhere in 2002

Al faro que aun me sigue guiando.

Resumen:

En esta tesis estudiamos el comportamiento crítico y las propiedades no lineales en la evolución de sistemas de 147 partículas que interactúan mediante un potencial de Lennard-Jones. Analizamos dos tipos distintos de procesos: el de gotas que se expanden libremente y se fragmentan, y el de sistemas confinados a volumenes esféricos de distintos radios. Mediante la técnica de dinámica molecular resolvimos las ecuaciones de movimiento clásicas de manera de tener las posiciones y velocidades de las partículas a todo instante.

El comportamiento crítico de los sistemas lo estudiamos a partir de analizar las distribuciones de fragmentos. En el caso de las gotas que se expanden libremente, encontramos que tanto las distribuciones calculadas a tiempo de fragmentación (definidas en el espacio de fases) como las obtenidas a tiempos asintóticos (accesibles experimentalmente) pueden ser descriptas en términos de la ley de escala que describe el comportamiento crítico en el problema de percolación. Esta ley de escalas nos permitió obtener el punto crítico como aquel en el cual se máximizan ciertas fluctuaciones y aparecen distribuciones tipo ley de potencias, así como también los exponentes críticos que la caracterizan. Encontramos que tanto las señales de criticalidad como los exponentes obtenidos de las distribuciones asintóticas reflejan apropiadamente el comportamiento crítico a tiempo de fragmentación, lo que da un sustento a los esfuerzos experimentales en este sentido.

En el caso de los sistemas confinados, encontramos evidencia de una transición de fase de primer orden a muy bajas densidades. Por otra parte, mediante el análisis de las distribuciones de fragmentos definidos en el espacio de fases encontramos exponentes críticos compatibles con una transición de segundo orden líquido-gas para un dado rango de densidades.

Las propiedades no-lineales del sistema las estudiamos mediante el análisis del máximo exponente de Lyapunov (MLE). Para la gota libre, definimos los exponentes de Lyapunovs locales en el tiempo lo cual nos permitió seguir la evolución dinámica de la gota en su proceso de fragmentación. Encontramos que el sistema evoluciona de un estado muy caótico a otro mas ordenado y obtuvimos los tiempos característicos a partir de los cuales el sistema está 'ordenado'. Encontramos además que el MLE toma su valor máximo a aquellas energías para la cual la gota alcanza su máxima temperatura sin fragmentarse.

Para el sistema confinado, estudiamos la dependencia del MLE con la energía y la densidad y su posible vinculación con la transición de fase definida mas arriba. Encontramos que el MLE es un indicador sensible de dicha transición y que su comportamiento esta altamente relacionado con las fluctuaciones de energía potencial/cinética del sistema.

Palabras Clave:

Fragmentación - Fenómenos críticos - Transiciones de fase en sistemas finitos - Exponentes de Lyapunov - Física Computacional - Dinámica Molecular.

'Criticality and non-linearity in Fragmentation'

Abstract:

In this thesis we study the critical behavior and non-linear properties of highly excited systems composed by 147 particles interacting via a Lennard-Jones potential. We analize two different processes: the evolution of free expanding drops that undergo fragmentation and the evolution of systems confined to espherical volumens of differents sizes. This calculations are performed by using Molecular Dynamics techniques.

The critical behavior of the systems was studied by the analysis of the fragment mass distributions. In the case of free expanding drops, we found that the fragment distributions obtained at fragmentation time (in phase space) as well as those calculated at asymptotic time (in configurational space) follow the scaling hypothesis that describes critical behavior in the percolation problem. In this way, we could obtain the critical point by looking for the energy at which certain fluctuations have a maximum and power laws in the mass distributions appear. We also extracted the critical exponents that describe the transition. We found that critical exponents obtained from the asymptotic fragment mass spectra properly characterize the critical behavior of the system at fragmentation time. This results support current experimental efforts toward the analysis of asymptotic mass dsitributions.

In the case of confined systems, we found strong evidency of a first order phase transition at very low densities. On the other hand, by analizing the cluster distributions obtained in phase space, we found critical exponents corresponding to a second order phase transitions in at large densities.

The non-linear properties of the system were studied by the analysis of the maximum Lyapunov exponent (MLE). In the free expanding drop case, we defined the maximum local (in time) Lyapunov exponent which allowed us to follow the dynamical evolution of the fragmentation process in phase space. We found that the system evolves from a very chaotic state to a more ordered one and we calculated the characteristic of this process. We found that the MLE is maximum at the energies for which the drop have its maximum size and temperature.

For the confined systems, we studied the dependence of the MLE with the energy and the density and the possible link with the phase transition described above. We found that the MLE is quite sensitive to this transition and its behavior is highly related to the with the potential/kinetic energy fluctuations of the system.

Key Words:

Fragmentation - Critical Phenomena - Phase transitions in finite systems - Lyapunov exponentes - Computational Physics - Molecular Dynamics.

Índice General

1 Introducción **1**
1.1 Motivación 2
1.2 Organización de la tesis 3

2 Transiciones de Fase **5**
2.1 Sistemas Termodinámicos 5
2.1.1 Clasificación de transiciones de fase 6
2.1.2 Diagramas de Fase y Punto crítico 7
2.1.3 Definición de exponentes críticos 10
2.2 Sistemas Finitos 14
2.2.1 Evidencias de transiciones de fase en racimos (clusters) 15
2.2.2 Definición de transiciones de fase en sistemas finitos 16
2.3 El modelo de la gota de Fisher (FDM) 20
2.3.1 Descripción en términos de las distribuciones de racimos 22
2.4 Percolación 25
2.4.1 Leyes de escala en las distribuciones de racimos 27
2.4.2 Percolación en la fragmentación nuclear 29

3 Señales de criticalidad **33**
3.1 Introducción 33
3.2 Señales de criticalidad y sus dependencia con el tamaño de la red 34
3.3 Cálculos de exponentes críticos. 39
3.4 Funciones de escala 41
3.5 Conclusiones 42

4 Sistemas Libres **45**
4.1 Introducción 45
4.2 Modelo utilizado 46
4.3 Reconocimiento de Fragmentos 47
4.4 Señales de criticalidad y su persistencia en el tiempo 53
4.5 Exponentes críticos 55
4.6 Funciones de escala y su persistencia en el tiempo 59
4.7 Conclusiones 60

5 Sistemas confinados **61**
5.1 Introducción 61
5.2 Modelo utilizado 62
5.3 Indicios termodinámicos de la transición 62
5.4 Particiones del sistema: fragmentos ECRA y MST 66
5.5 Análisis de las particiones $ECRA$: señales de criticalidad y exponentes criticos. 66

5.6 El diagrama de fases 70
5.7 Conclusiones 73

6 Aspectos no lineales de la fragmentación 75
6.1 Introducción 75
6.2 Exponentes de Lyapunov en sistemas Hamiltonianos 76
6.3 Máximo Exponente de Lyapunov 78
6.4 Sistemas libres 81
6.4.1 $MLLE$ como función del tiempo y la energía 81
6.4.2 Comportamiento del MLE en la etapa asintótica 86
6.5 Sistemas confinados 89
6.5.1 MLE y su dependencia de la energia y de la densidad 90
6.5.2 Analisis del comportamiento del MLE 91
6.6 Conclusiones 93

7 Conclusiones y Perspectivas 95
7.1 Criticalidad en fragmentación 95
7.2 Transiciones de fase en sistema confinados 96
7.3 Aspectos no lineales en la evolución de gotas 97
7.4 Perspectivas 97

Capítulo 1

Introducción

El proceso mediante el cual un sistema se rompe en varias partes se denomina *Fragmentación* y es uno de los fenómenos mas interesantes de abordar desde el punto de vista de la Mecánica Estadística.

La fragmentación de sistemas finitos tiene lugar cuando una gran cantidad de energía es entregada súbitamente al sistema y se manifiesta en diversas ramas de la física, desde objetos submicroscópicos [1] hasta colisiones entre asteroides [2]. Una de las características comunes en todos estos campos de la física es la aparición de una ley de potencias en la distribución de fragmentos para un dado valor de la energía a la cual se excita el sistema. Esto ha sido observado en una amplia variedad de experimentos, como por ejemplo en colisiones entre iones pesados a energías intermedias [3, 4], en colisiones entre iones de hidrógeno y fullerenos [5], en fragmentación de yeso [6], etc.

La existencia de una distribución del tipo ley de potencias indica la presencia de fragmentos de todos los tamaños y sugiere la posibilidad de que la fragmentación pueda entenderse como un fenómeno crítico [7]. Esta característica ha motivado el estudio del problema en varios campos de la ciencia, pero mas allá de los intensos esfuerzos dedicados a analizar el tema no se ha llegado a un entendimiento completo del mismo.

Dado el desarrollo de los aceleradores de iones pesados en los últimos años, la comunidad nuclear ha sido una de las mas activas en el análisis de este tipo de problemas. A partir del experimento del grupo de Purdue [3], en el cual el espectro de masas se ajustó a una ley de potencias con exponente $\tau = 2.3 \sim 2.6$, la idea que la fragmentación nuclear, de acuerdo al modelo de la gota de Fisher [8, 9], es una manifestación de la transición líquido-gas de la materia nuclear se hizo presente.

Numerosos modelos han sido desarrollados desde ese momento para explicar este comportamiento, desde los estadísticos [10, 11, 12] que asumen que el sistema alcanza el equilibrio antes de fragmentarse, hasta los dinámicos [13, 4] que proponen que el sistema está apropiadamente descripto por un dado Hamiltoniano y siguen la evolución del sistema excitado. Para recientes reviews ver, por ejemplo, [4, 14].

1.1 Motivación

Para la materia nuclear infinita, la ecuación de estado nuclear ($NEOS$) debería ser similar a la de un gas de Van der Walls (VDW), dado que la interacción entre nucleones exhibe, al igual que en VDW, una repulsión de cortísimo rango seguida de una cola atractiva de rango mas largo. Es sabido [15, 16] que el gas de VDW tiene una región de inestabilidad en el plano $T-\rho$ donde ocurre una transición líquido-gas. Por lo tanto es también de interés estudiar la región de inestabilidad para la materia nuclear. La única manera real que tenemos de hacer esto es estudiar el choque de núcleos de manera que los fragmentos que se forman puedan ser relacionados con esa región de inestabilidad.

Esto fue una de las motivaciones para la realización de experimentos con colisiones de iones pesados, que se fortalecieron con la primera observación de una ley de potencias en las distribuciones de fragmentos, con una pendiende de $\tau = 2.3 \sim 2.6$ [3], en concordancia con el valor esperado para una transición de segundo orden líquido-gas de acuerdo al modelo de la gota de Fisher [1].

En este punto, el problema no solo es interesante desde el punto de vista nuclear, sino desde la física estadística. Lo que tenemos es un sistema finito, altamente excitado, que evoluciona expandiéndose y fragmentándose en varias partes. Las preguntas que surgen es acerca de como se puede caracterizar ese proceso. Para el caso que nos compete, la cantidad de total de constituyentes de nuestro sistema es del orden de $N = 20 - 400$ y por lo tanto no es posible tomar el límite termodinámico $N \to \infty$. Sin embargo, trabajos recientes [17] han propuesto que es posible definir transiciones de fase en sistemas finitos si se lo hace en el ensamble microcanónico.

Por otro lado, es claro que el sistema no alcanza el equilibrio global, sino solo un equilibrio local como se demostró en [18]. No podemos fijar la densidad ni la temperatura y la presión es siempre cero pues la gota se expande contra el vacío.

Aún así un sistema finito puede exhibir comportamiento crítico que no necesariamente esté relacionado a la transición de fase líquido-gas, como uno esperaría de consideraciones termodinámicas. Por ejemplo, en [6], objetos hechos de yeso fueron fragmentados al arrojarlos al piso o mediante el uso de un martillo y la distribución de masa de los fragmentos sigue una ley de potencias con exponente $\tau = 1.6$. Esto no tiene nada que ver con una transición líquido-gas (donde se espera que $2 < \tau < 3$, ver sec.(2.3)) sino que está relacionado con criticalidad autoorganizada en fragmentación. Nada prohibe, en principio, que esto ocurra para la fragmentación nuclear.

Una manera de estudiar este problema es mediante simulaciones numéricas usando la técnica de dinámica molecular para resolver las ecuaciones de movimiento clásicas. Las motivaciones de usar un sistema clásico son las siguientes: Es posible construirse un sistema clásico cuya ecuación de estado sea como la de VDW y por lo tanto se parezca a la ecuación de estado nuclear cerca del pun-

[1] Fue mostrado mas tarde que el valor del exponente crítico observado fue el resultante de una mezcla de diferentes tipos de eventos y una integración sobre distintos parámetros de impacto.

to crítico. Una vez hecho esto, podemos resolver el modelo para un sistema finito altamente excitado que se expande y se fragmenta. De esta manera podemos analizar la relevancia del tamaño del sistema y su expansión fuera del equilibrio en la fragmentación de este tipo de sistemas y su vinculación con la transición de fase que exhibe el sistema equilibrado e infinito.

1.2 Organización de la tesis

En esta tesis estudiamos principalmene el problema de la fragmentación de gotas altamente excitadas que sobrellevan un proceso de fragmentación desde el punto de vista de su comportamiento crítico y sus propiedades no-lineales. Consideramos un sistema clásico, compuesto de 147 partículas que interactúan mediante un potencial de Lennard-Jones truncado y corrido libre de expandirse. Así mismo, estudiamos también los efectos de confinar la gota a volumenes esféricos de distintos radios que le permite alcanzar el equilibrio. La evolución de nuestros sistemas la hacemos resolviendo las ecuaciones de movimiento clásicas mediante la técnica de dinámica molecular. De esta manera, conocemos las posiciones y las velocidades de las partículas a lo largo de toda la evolución del sistema.

La tesis está organizada de la siguiente manera:

El capítulo 2 contiene una introducción a las transiciones de fase y a la caracterización de los fenómenos críticos. Se describirán las herramientas usuales usadas en los sistemas infinitos y además se introducirá la definición de transición de fase en sistemas finitos mediante el uso del ensamble microcanónico [17]. Así mismo, daremos una descripción del primer modelo que caracterizó la transición líquido-gas en términos de distribuciones de racimos, el modelo de la gota de Fisher y describiremos un modelo muy usado para estudiar fenómenos críticos: Percolación.

En el capítulo 3 se definirán las magnitudes usadas para caracterizar un comportamiento crítico y se describirán los métodos usados para calcular los exponentes críticos en los espectros de masa en redes percolantes tridimensionales de dos tamaños distintos.

En el capítulo 4 se analizará el poceso de fragmentación de gotas libres altamente excitadas mediante sus distribuciones de fragmentos a tiempos de fragmentación y a tiempos asintóticos. Se calcularán señales de criticalidad y exponentes críticos y se estudiará su evolución en el tiempo.

En el capítulo 5 se analizará el problema de gotas altamente excitadas confinadas a volumenes esféricos de distintos radios. Se analizará su comportamiento en función de la energía y la densidad mediante magnitudes termodinámicas y a través de las distribuciones de las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases.

En el capítulo 6, se presentan los resultados de la evolución dinámica de la gota, tanto libre como confinada, en términos de sus propiedades no-lineales. Para esto estudiamos la dependencia del máximo exponente de Lyapunov

con la energía, la densidad y el tiempo y los comparamos con los resultados obtenidos en los capítulos anteriores.

Por último, en el capítulo 7 presentamos las conclusiones sobre el trabajo y sus perspectivas futuras.

Capítulo 2

Transiciones de Fase

2.1 Sistemas Termodinámicos

Un sistema termodinámico puede exhibir diferentes fases, cada una con diferentes propiedades macroscópicas. Generalmente, a bajas temperaturas las fuerzas de cohesión se imponen sobre el movimiento térmico y el sistema tiende a ser mas ordenado, opuestamente de lo que ocurre a temperaturas altas. Los cambios de fase, si bien ocurren para unas dadas temperatura y presión en un sistema PVT, se anuncian a medida que el sistema se acerca a dicho punto [15].

Tomemos como ejemplo un fluido. Desde un punto de vista termodinámico, la transición entre las fases puede estudiarse en término de las variables macroscópicas del sistema. Como las fases pueden intercambiar materia y energía, el equilibrio entre las mismas ocurre cuando sus potenciales químicos se igualan (a P y T constantes). Durante la transición, los potenciales químicos de las fases, y por lo tanto la energía libre de Gibbs (G), cambian continuamente. No obstante, las transiciones de fase pueden ser clasificadas en dos clases de acuerdo al comportamiento de las derivadas de la energía libre de Gibbs. Aquellas que son acompañadas por un cambio discontinuo en las variables de estado (con primeras derivadas de G respecto de la temperatura y de la presión discontinuas) son llamadas *transiciones de fase de primer orden.* Por otra parte, aquellas acompañadas por un cambio continuo de dichas variables (con derivadas de mas alto orden discontinuas) son llamadas *transiciones de fase de segundo orden o continuas.*

Los fluidos clásicos proveen algunos de los ejemplos mas familiares de transiciones de fase de primer orden: la líquido-vapor, la vapor-sólido, la sólido-líquido, por ejemplo.

La transición de fase líquido-gas tiene además asociada un punto en el cual la transición es de segundo orden. Este punto tiene una temperatura y una densidad bien definidas, T_c y ρ_c y se llama *punto crítico.* Para $T > T_c$ el sistema se encuentra en una fase homogénea. Para $T < T_c$ y en un dado rango de densidades, la homogeneidad se pierde al entrar en la región de coexistencia entre líquido y vapor. La transición entre ambas fases a $\rho = \rho_c$

es una transición de segundo orden [ver Fig.(2.2)].

Este tipo de transiciones se caracterizan por el comportamiento de una nueva variable termodinámica: *el parámetro de orden.* El parámetro de orden es cero para $T > T_c$ y distinto de cero para $T < T_c$ y para sistemas PVT se define como la diferencia de las densidades de las fases en coexistencia: $(\rho_L - \rho_G)$ [Ver Fig.2.4(a)].

El punto crítico juega un rol único en la teoría de las transiciones de fase. Cuando el sistema se aproxima al punto crítico desde temperaturas mayores que T_c, aparecen grandes fluctuaciones (principalmente de densidad) las cuales señalan la emergencia del parámetro de orden definido mas arriba, el cual finalmente aparece en el mismo punto crítico.

2.1.1 Clasificación de transiciones de fase

La mayoria de los sistemas pueden existir en un número diferente de fases, cada una de las cuales exhibe un comportamiento macroscópico diferente. La fase particular que se manifiesta en la naturaleza, para valores dados de las variables de estado del sistema, es aquella con energía libre mas baja. Para ciertos valores de éstas, se puede dar el caso en donde dos o mas fases coexistan, en equilibrio térmico, mecánico y químico. En ese caso decimos que el sistema está experimentando una transición de fase.

Si pensamos en un sistema PVT compuesto por un solo tipo de partículas, decimos que dos fases (I y II) pueden coexistir para valores fijos de P y T si sus respectivos potenciales químicos son iguales:

$$\mu^I(P,T) = \mu^{II}(P,T). \tag{2.1}$$

Si bien durante la transición estas derivadas de la energía libre de Gibbs (G), $\mu = \left(\frac{\partial G}{\partial n}\right)_{P,T}$ deben ser iguales, no existen restricciones sobre las derivadas $V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,n}$ y $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,n}$. El comportamiento de estas derivadas es lo que se usa entonces para clasificar las transiciones de fase. Si las derivadas $\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,n}$ y $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,n}$ son discontinuas en el punto de la transición (eso es, si V y S tienen valores diferentes en ambas fases), la transición se llama *de primer orden.* Si dichas derivadas son continuas en la transición, decimos que es *de segundo orden o continua.*

La discontinuidad en $\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,n}$ significa que hay una discontinuidad en el volumen de las 2 fases,

$$\Delta V = V^I - V^{II} = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)^I_{T,n} - \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)^{II}_{T,n}, \tag{2.2}$$

mientras que la discontinuidad en $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,n}$ significa una discontinuidad en la entropia de las dos fases,

$$\Delta S = S^{I} - S^{II} = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)^{II}_{P,n} - \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)^{I}_{P,n} \tag{2.3}$$

y trae aparejada salto en la entalpía ($\Delta H = T\Delta S$) llamado *calor latente.*

Para una transición de fase continua, la energía libre de Gibbs (G) es continua pero su pendiente cambia rápidamente en las vecindades del punto crítico. Esto puede llevar a un pico en el calor específico en el punto de transición. En la Fig. (2.1) puede verse como cambian G y sus derivadas durante una transición de fase de segundo orden.

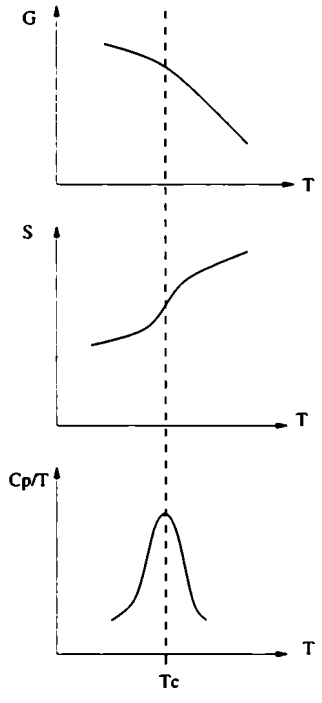

Figura 2.1: Comportamiento típico de la energía libre de Gibbs en una transición de fase de segundo orden

2.1.2 Diagramas de Fase y Punto crítico

Un sistema de partículas que interactúan mediante un potencial con un carozo repulsivo y una región atractiva de corto rango afuera del carozo, presenta un diagrama de fases como el que se observa en la Fig.(2.2). En la misma se muestran las lineas de coexistencia de las fases asi como las isotermas en el plano ($P - 1/\rho$). Como es sabido, para $T < T_c$ la transición líquido-vapor es de primer orden, mientras que para $T = T_c$ es una transición continua. En particular, el punto C del diagrama se lo conoce como *el punto crítico.*

La curva de coexistencia entre las fases líquido y vapor puede graficarse tambien en términos de las cantidades reducidas T/T_c y ρ/ρ_c, donde T_c y ρ_c son la temperatura y la densidad en el punto crítico. Estas cantidades reducidas dan una medida de la distancia del estado de una sustancia particular al punto

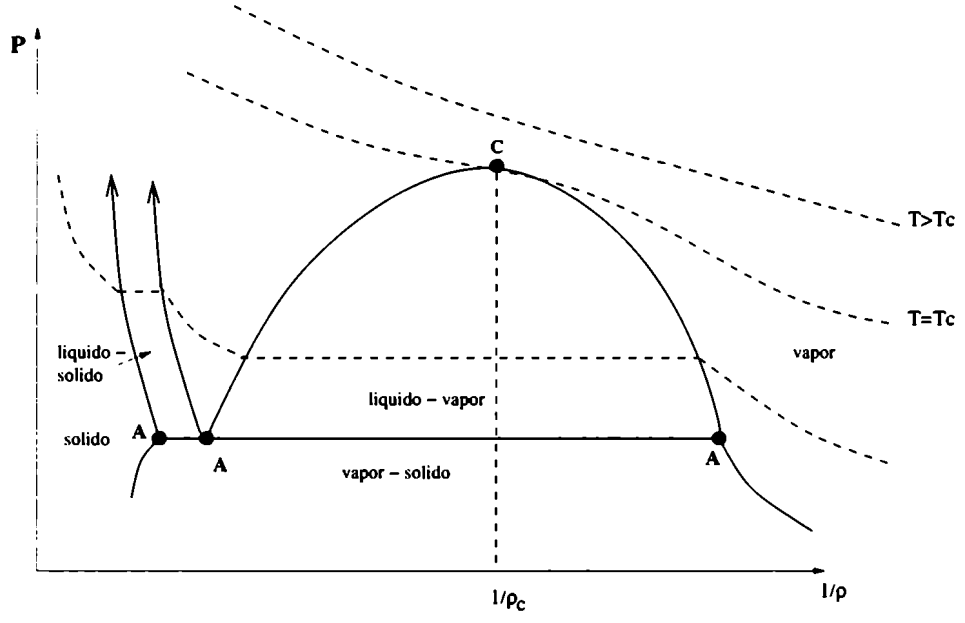

Figura 2.2: Diagrama de fases típico de un sistema termodiámico PVT. El punto C en el vértice de la campana representa el punto crítico.

crítico. Es muy interesante, como se observa en la Fig. (2.3) [19], que para la mayoria de las sustancia graficadas en términos de estas variables, los estados termodinámicos colapsan sobre la misma curva. Este es un ejemplo de la llamada ley de los estados correspondientes, la cual dice que para todos los fluidos clásicos, cuando son descriptos en términos de cantidades reducidas, obedecen la misma ecuación de estado [15].

Dadas las particulares características que presentan los sistemas en las cercanías del punto crítico, es muy interesante el estudio los mismos en dicha región ya que una variedad de sistemas microscópicamente diferentes se comportan de manera similar en las vecindades del punto crítico.

Todas las transiciones de fase de segundo orden se caracterizan por la presencia de un parámetro de orden para la fase con $T < T_c$. Por ejemplo, en la transición líquido-vapor, el sistema se separa en dos fases que coexisten por debajo del punto crítico y el parámetro de orden se define precisamente como la diferencia de las densidades de dichas fases: $\rho_L - \rho_G$. En un sistema de espines, el punto crítico indica la temperatura a la cual se hace distinto de cero el parámetro de orden dado por la magnetización del sistema en ausencia de campo externo: $M(T)$.

En la Fig.(2.4) vemos la analogía que existe entre un sistema PVT y un sistema magnético en su aproximación al punto crítico, si graficamos sus respectivos parámetros de orden en los planos $\rho - T$ y $M - T$.

Se observa que ambos sistemas exhiben un comportamiento radicalmente diferente a ambos lados del punto crítico. Cuando se aproximan al punto crítico por temperaturas $T > T_c$, el sistema anticipa el nuevo comportamiento haciendo 'ajustes' a escala microscópica. Estos ajustes aparecen en la forma de

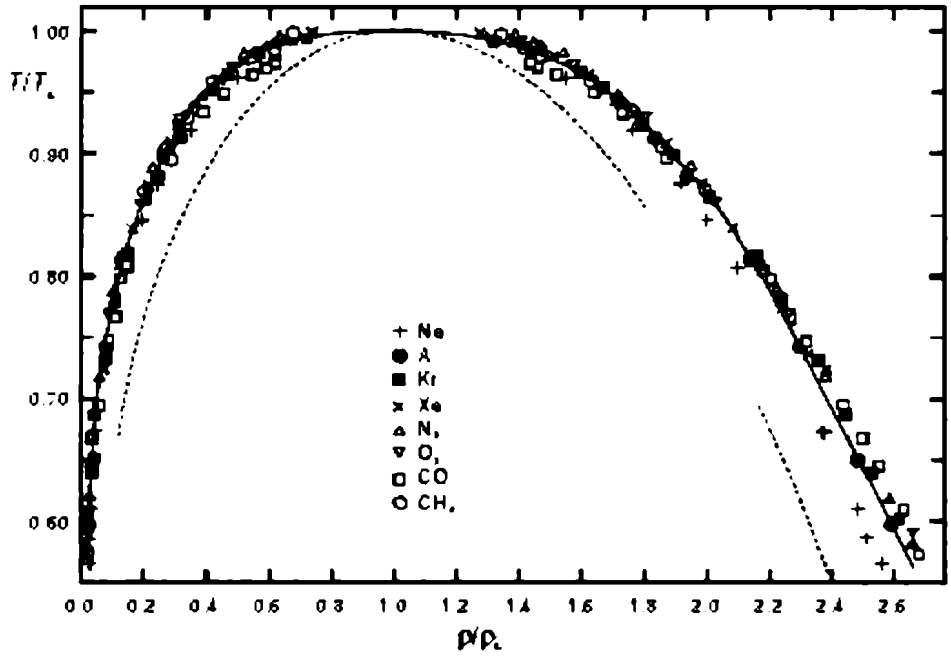

Figura 2.3: Curva de coexistencia líquido-vapor experimental para una variedad de sustencias. El gráfico es entre la temperatura reducida en función de la densidad reducida y fue obtenido por Guggenheim en 1945 [19]

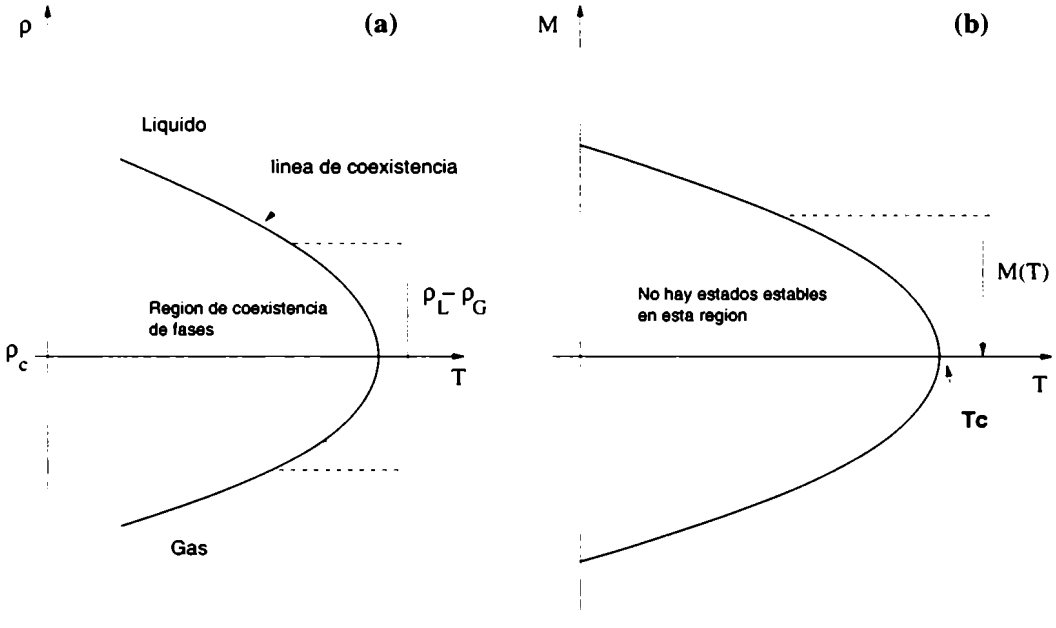

Figura 2.4: Curvas de coexistencias para un sistema PVT en el plano $\rho - T$ (a) y para un sistema magnético en el $M - T$ (b, M es la magnetización del sistema). M es el parámetro de orden en el sistema magnético y $(\rho_l - \rho_g)$ lo es en el PVT. La analogía entre ambos es clara.

fluctuaciones de densidad, magnetización o alguna otra magnitud, las cuales se hacen cada vez mas grandes cuando mas cerca del punto crítico está el sistema y que se traducen en la aparición del parámetro de orden para $T \leq T_c$.

2.1.3 Definición de exponentes críticos

Para describir como una variedad sistemas se comportan al aproximarse al punto crítico, es muy útil introducir la idea de exponentes críticos. Cuando un sistema se aproxima al punto crítico, varias cantidades termodinámicas pueden diverger o ir a cero. Es conveniente entonces definir un parámetro de expansión, la distancia al punto crítico:

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c}. \tag{2.4}$$

ya que, cerca del punto crítico, todas las variables termodinámicas pueden ser escritas de la forma [15, 20]:

$$f(\epsilon) = A\epsilon^{\lambda}(1 + B\epsilon^{y} + ...), \tag{2.5}$$

donde $y > 0$. Los exponentes críticos para la función $f(\epsilon)$ se definen:

$$\lambda = lim_{\epsilon \to 0} \frac{ln[f(\epsilon)]}{ln[\epsilon]}. \tag{2.6}$$

Si λ es negativa, $f(\epsilon)$ diverge en el punto crítico. Si λ es positiva, $f(\epsilon)$ va a cero en el punto crítico.

Exponentes críticos en sistemas PVT

Existen cuatro exponentes críticos que se usan comunmente para describir las propiedades termodinámicas de volumen de sistemas PVT. A continuación los definimos y damos sus valores experimentales [15].

(a) El exponente δ describe la variación de $(P - P_c)$ con $(\rho - \rho_c)$ a lo largo de la isoterma crítica:

$$\frac{P - P_c}{P_c^0} \equiv A_\delta \left| \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} \right|^{\delta} signo(\rho - \rho_c) \qquad T = T_c, \tag{2.7}$$

donde A_δ es una constante y P_c^0 es la presión crítica de un gas ideal. Experimentalmente se encuentra que $4 \leq \delta \leq 6$.

(b) El exponente β describe el comportamiento del parámetro de orden (la diferencia entre las densidades del líquido y el gas) en términos de la distancia relativa a la temperatura crítica, ϵ, cuando el sistema se aproxima al punto crítico, como se observa en la Fig.[2.4(a)]:

$$\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_c} = A_\beta(-\epsilon)^\beta, \tag{2.8}$$

donde ρ_l es la densidad del líquido a temperatura $T < T_c$, ρ_g es la densidad del gas a temperatura $T < T_c$, cada una evaluada sobre la curva de coexistencia, y A_β es una constante. La cantidad $(\rho_l - \rho_g)$ es el parámetro de orden del sistema. Este es cero por encima del punto crítico y distinto de cero por debajo. Experimentalmente, el exponente β toma valores $\beta \simeq 0.3 - 0.4$.

(c) El exponente α describe el comportamiento del calor específico a volumen constante para $T \to T_c$:

$$C_V = \begin{cases} A'_\alpha(-\epsilon)^{-\alpha'}, & T < T_c \quad \rho = \rho_c, \\ A_\alpha(-\epsilon)^{-\alpha}, & T > T_c \quad \rho = \rho_c, \end{cases} \tag{2.9}$$

donde A'_α y A_α son constantes. Experimentalmente, los exponentes α y α' son cero o toman valores pequeños. El caso $\alpha = 0$ corresponde en algunos casos a una singularidad logaritmica.

(c) El exponente γ describe la divergencia de la compresibilidad isotérmica cuando el sistema se acerca al punto crítico:

$$\frac{\kappa_T}{\kappa_T^0} = \begin{cases} A'_\gamma(-\epsilon)^{-\gamma'}, & T < T_c \quad \rho = \rho_l(T) \quad o \quad \rho_g(T), \\ A_\gamma(-\epsilon)^{-\gamma}, & T > T_c \quad \rho = \rho_c, \end{cases} \tag{2.10}$$

donde A'_γ y A_γ son constantes. Los valores experimentales se encuentran para γ y γ' en $1.1 - 1.4$.

Exponentes críticos en sistemas magnéticos

Un punto interesante de ver es que para sistemas magnéticos, los exponentes α, β, γ y δ pueden ser definidos en forma análoga con los fluidos puros. Debajo de la temperatura crítica, los espines comienzan a ordenarse espontaneamente dando lugar a una fase con una dada magnetización M y por lo tanto, con propiedades de simetría muy diferentes a las que tenia el sistema para $T > T_c$.

(a) El exponente δ describe la magnetización con campo magnético a lo largo de la isoterma crítica:

$$\frac{H}{H_c^0} = B_\delta \left| \frac{M_H(T_c)}{M_0(0)} \right|^\delta \tag{2.11}$$

donde $H_c^0 = k_B T/m_0$, $M_0(0)$ es la magnetización con campo cero atemperatura cero, m_0 es el momento magnético por spin y B_δ es una constante de proporcionalidad. Experimentalmente se encuentra que $4 \leq \delta \leq 6$ en acuerdo de los valores de δ para fluidos puros.

(b) El exponente β describe el comportamiento del parámetro de orden cuando el sistema se aproxima al punto crítico [ver Fig.2.4(b)]. En este tipo de sistemas, el parámetro de orden es la magnetización a campo cero:

$$\frac{M_0(T)}{M_0(0)} = B_\beta(-\epsilon)^\beta, \tag{2.12}$$

donde B_β es una constante. Experimentalmente, $\beta \simeq 1/3$ como en fluidos.

(c) En sistemas magnéticos, los coeficientes α y α' se definen para describir el comportamiento del calor específico a campo constante:

$$C_H(H=0) = \begin{cases} B'_\alpha(-\epsilon)^{-\alpha'}, & T < T_c, \\ B_\alpha(-\epsilon)^{-\alpha}, & T > T_c, \end{cases} \tag{2.13}$$

con B'_α y B_α son constantes. Los exponentes α y α' se encuentran experimentalmente en valores $\alpha \sim 0$ y $\alpha' \sim 0$.

(d) La susceptibilidad magnética en la vecindad del punto crítico puede escribirse como:

$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = \begin{cases} B'_\gamma(-\epsilon)^{-\gamma'}, & T < T_c \quad H = 0, \\ B_\gamma(-\epsilon)^{-\gamma}, & T > T_c \quad H = 0, \end{cases} \tag{2.14}$$

donde B'_γ y B_γ son constantes y χ_T^0 es la susceptibilidad de un sistema no interactuante a la temperatura crítica . Los valores experimentales de ambos (γ y γ') se encuentran en $1.1 - 1.4$.

La caraterística sobresaliente de estos dos sistemas es que tienen los mismos exponentes críticos. Esto es, dos sistema muy distintos físicamente, se aproximan en manera similar al punto crítico.

Una magnitud importante en la descripción de un sistema cerca del punto crítico [21] es la *función de correlación*, $C(r)$, la cual mide la correlación entre las fluctuaciones de densidad (o magnetización) entre dos puntos separados una distancia r [20].

En la fase desordenada de alta temperatura, esta correlación cae exponencialmente:

$$C(r) = e^{-r/\xi}, \qquad (T > T_c), \tag{2.15}$$

donde ξ es la longitud de correlación (depende de T) y es una medida del rango de la función de correlación. En la fase de baja temperatura, se produce un efecto cooperativo que produce que $C(r)$ alcance un valor constante para r grandes. La desviación del valor asintótico puede ser descripta por

$$C(r) - C(\infty) = e^{-r/\xi}, \qquad (T < T_c). \tag{2.16}$$

Cuando el sistema se aproxima a la transición, ya sea desde el lado de altas temperaturas como desde el de bajas, la longitud de correlación diverge como

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu}, \tag{2.17}$$

donde ν es otro exponente crítico. en el punto crítico, la correlación decae como una ley de potencias con la distancia:

$$C(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \tag{2.18}$$

donde η es otro exponente crítico y d es la dimensión del espacio. Este decrecimiento via una ley de potencias en las correlaciones, implica que no hay una escala de longitudes en el sistema. Cuando el decaimiento exponencial ($T \neq T_c$), ξ provee la escala de longitudes (es una longitud característica), ya que $c(r)/c(2r)$ depende de r/ξ. Sin embargo, con un decaimiento tipo ley de potencias, como ocurre si $T = T_c$ donde $c(r) \sim (r_0/r)^n$, el cociente $c(r)/c(2r)$ es independiente de r/r_0. Esto da lugar a la aparición de estructuras de todos los tamaños, desde nivel molecular hasta la del sistema. Esta propiedad es responsable, por ejemplo, del fenómeno de opalescencia crítica [22]. Cuando un fluido transparente alcanza el punto crítico, surgen fluctuaciones de densidad de todos los tamaños y estas fluctuaciones dispersan la luz de todas las longitudes de onda, tornando turbio el fluido transparente [20, 23].

Leyes de escala y Universalidad

Dos características importantes de los exponentes críticos son que: (i) son clasificados en *clases de Universalidad* y (ii) se pueden derivar relaciones entre ellos y por lo tanto un pequeño número son independientes.

Usando argumentos puramente termodinámicos [20], Rushbrooke [24] mostró que

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2. \tag{2.19}$$

Un número de otras desigualdades pueden tambien ser derivadas, como aquellas hechas por Griffiths [25, 26]:

$$\alpha' + \beta(1+\delta) \geq 2, \quad (T < T_c), \tag{2.20}$$

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1), \quad (T < T_c), \tag{2.21}$$

$$\gamma(1+\delta) \geq (2-\alpha)(\delta - 1), \quad (T > T_c), \tag{2.22}$$

y Fisher [27]

$$(2-\eta)\nu \geq \gamma \qquad (T > T_c). \tag{2.23}$$

En la mayoría de los casos, ya sea en mediciones experimentales o predicciones de modelos, estas desigualdades se cumplen como igualdades. El primer indicio de que efectivamente son igualdades vino de una hipótesis que ha sido sumamente exitosa. Esta hipótesis se denomina *hipótesis de escala* y supone que la energía libre de Gibbs [20] es una función homogénea generalizada. Para un sistema magnético, esto es esquivalente a pedir que existan dos parámetros, r y s, tales que

$$G(\lambda^s \epsilon, \lambda^r h) = \lambda G(\epsilon, h), \tag{2.24}$$

para cualquier valor de λ y con $\epsilon = (T - T_c)/T_c$. Es importante resaltar que esta hipótesis no especifica los valores de r y s.

A partir de esto, se puede ver [20] que todos los exponentes críticos pueden escribirse en términos de r y s (y por lo tanto, si especificamos r y s inmediatamente determinaríamos todos los exponentes críticos). De esta manera se arriban a relaciones entre los exponentes que consisten en reemplazar por igualdades las desigualdades mostradas mas arriba y a que $\alpha = \alpha'$ y $\gamma = \gamma'$.

El hecho que no podamos especificar r y s corresponde al hecho que la hipótesis de escala no determina los valores de los exponentes críticos.

La primera exposición clara de estas ideas fue debido a Widom [28, 29], y uno de las primeros en plasmar la hipótesis de escala fue Kadanoff [30, 31], a partir de dividir un modelo de Ising en una coleccion de bloques de espines promediando sobre cada bloque y comparar este nuevo sistema con el anterior.

La culminación de las hipótesis de escala y universalidad es la teoría de *Grupos de Renormalización* debida a K.G.Wilson [32]. La idea básica de esta teoría involucra dos pasos conceptualmente simples: (i) Un promedio sobre los grados de libertad de la escala mas pequeña (Los bloques de espines de Kadanoff son un ejemplo de esto) y (ii), la determinación de como deber ser cambiado el Hamiltoniano de manera tal que la función de partición del sistema no cambie. Este nuevo Hamiltoniano se llama Hamiltoniano renormalizado.

La idea de universalidad es que todos los sistemas cerca de una transición de fases continua pueden ser agrupados en un número relativamente pequeño de clases. Dentro de cada clase los exponentes críticos son iguales y están completamente determinados por la dimensión del espacio, d y carácter del parámetro de orden (asumiendo que las interacciones son de corto rango).

2.2 Sistemas Finitos

Tradicionalmente, las transiciones de fase se definen unicamente en el límite termodinámico. Existe incluso la opinión que es imposible definir las transiciones de fase fuera de este límite. Sin embargo, recientemente se ha ido acumulando evidencia, tanto a traves de experimentos como de simulaciones, que sistemas de apenas decenas o centenas de partículas exhiben transiciones análogas, en algunos casos, a las de sus respectivos sistemas infinitos. Un

ejemplo claro de esto puede verse en la transición sólido-líquido del agua. En la Fig.(2.5) puede observarse la curva calórica (relación funcional entre la temperatura y la energía) del agua tanto para una cantidad del orden del numero de avogadro como para un racimo de 20 moleculas de H_2O. La figura muestra claramente que ambas curvas presentan la misma forma funcional y deja en evidencia la idea que la transición de fase no es exclusiva de sistemas donde valga la aproximación de límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$).

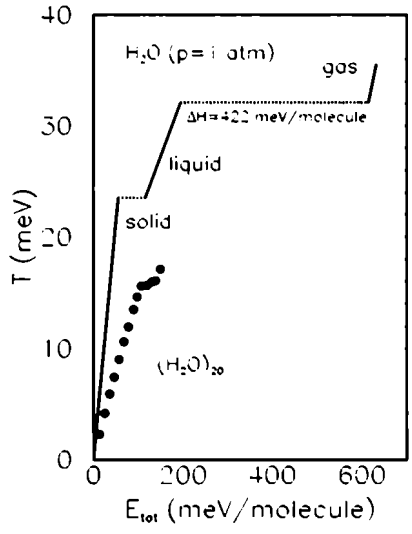

Figura 2.5: Curva calórica del agua para el bulk y para un racimo de 20 moleculas (extraido de [33]).

2.2.1 Evidencias de transiciones de fase en racimos (clusters)

La transición sólido-líquido en gotas de decenas o cientos de partículas ha sido ampliamente estudiada tanto mediante simulaciones [34, 35, 36, 37, 38, 39] como experimentalmente [40, 41, 42, 43, 44]. El principal hallazgo de estos estudios es que las gotas exhiben dos formas claramente diferenciadas. En la primera, las partículas conservan una estructura de cristal y el movimiento de las mismas es básicamente de vibraciones alrededor de las posiciones de equilibrio. En la segunda esta correlación espacial se pierde y el movimiento de las partículas es mucho mas desordenado. Estas formas son las análogas de las fases sólida y líquida de un sistema infinito. Lo que se observa es que para energías bajas, las gotas están en su fase rígida, mientras que a energías mas altas, están en la no-rígida. En un rango intermedio, la gota puede existir en cualquiera de las dos y muestra una coexistencia temporal de ambas fases: pasa un tiempo en una y otro en la otra. Esto se observa en que la distribución de energía cinética es bimodal [34].

La transición ha sido analizada a través de distintos observables, como la función de distribución radial, la curva calórica, el calor específico, el coeficiente de Lindemann, etc. Todas muestran evidencias de una transición como la descripta en el párrafo anterior en el mismo rango de energías [34, 35]. La curva calórica muestra un bucle o "loop"cuando se la calcula usando métodos

de dinámica molecular (ensamble microcanónico de diámica molecular) y una región plana cuando se usa el método de Metrópolis Monte-Carlo (ensamble canónico). En este último caso, el calor específico muestra un pico durante la transición que se hace mas agudo cuanto mayor es el número de partículas del racimo y el coeficiente de Lindemann (que es una medida de las fluctuaciones promedio de la distancia interpartícula) presenta un súbito incremento en la misma región de energías. La conclusión entonces es que la transición sólido-líquido en racimos estaría bien definida y exhibiría propiedades de escaleo de tamaño finito hacia una transición de fase de primer orden en el sentido de tener un calor latente por átomo aproximadamente constante [34].

Por otra parte, la posibilibidad que el proceso de multifragmentación en núcleos atómicos sea una transición de fase del tipo líquido-gas empezó a pensarse a partir del experimento del grupo de Purdue [3]. Desde ese momento, numerosos experimentos y simulaciones [4, 14, 45, 46, 47, 48, 49, 50] han sido dirigidos hacia la búsqueda de evidencia que permita interpretar la fragmentación nuclear como un posible indicio de la transición líquido-gas de la materia nuclear.

2.2.2 Definición de transiciones de fase en sistemas finitos

Dada la evidencia reunida, la pregunta de si puede definirse una transición de fase en un sistema pequeño llevó a D.H.E Gross [17] a postular una definición de transición de fase en el ensamble microcanónico que no necesita asumir la condición de límite termodinámico.

Núcleos, racimos atómicos y objetos astrofísicos no son "grandes" comparados con el rango de la interacción entre sus constituyentes. Por lo tanto estos sistemas son no-extensivos, es decir: si dividimos al sistema en partes la entropía del conjunto no es la suma de las entropías de las partes. Para la termoestadística convencional, las hipótesis de extensividad y límite termodinámico son fundamentales. Sin embargo, es posible demostrar [17] que la estadística microcanónica es aplicable incluso para sistemas pequeños, sin invocar ni extensividad ni el límite termodinámico.

A continuación veamos, siguiendo [17] como la termodinámica estadística se puede deducir de principios de la mecánica solamente. Un sistema de muchos cuerpos en equilibrio es caracterizado por unas pocas variables macroscópicas:

1. Su Energía E, número de constituyentes N, su volumen V;
2. Su entropía S;
3. Su temperatura T, presión P y potencial químico μ.

Notemos que todas las variables del primer grupo son claramente mecánicas. Estas se conservan y además están bien definidas en el espacio de fases de N-cuerpos. También la entropía, tiene, desde la definición de Boltzman, una clara interpretación mecánica:

$$S = k_B.ln[W], \tag{2.25}$$

relacionando la entropía S con el tamaño $W(E, N, V) = \epsilon_0 tr[\delta(E - H_N)]$ de la superficie de energía E en el espacio de fases $6N$ dimensional a un dado volumen V. ϵ_0 es una constante y H_N el Hamiltoniano de N-parículas. El conjunto de puntos de esta superficie definen el ensamble microcanónico. En contraste con las cantidades conservadas, las cuales están definidas en cada punto del espacio de fases, la entropía se refiere al ensamble total. Es importante notar que así definida, la entropía es una función monovaluada y varias veces derivable de las variables dinámicas conservadas, todas "extensivas".

El tercer grupo de cantidades (T,P y μ), dentro de la estadística microcanónica, pueden definirse mediantes las derivadas de la entropía respecto a las cantidades conservadas:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \tag{2.26}$$

$$\mu = -T\frac{\partial S}{\partial N} \tag{2.27}$$

$$P = T\frac{\partial S}{\partial V} \tag{2.28}$$

Al igual que la entropía, estas cantidades caracterizan el ensamble microcanónico total y no un punto individual en el espacio de fases de N-partículas.

Empezando desde este punto, la termoestadística convencional asume extensividad y explora el límite termodinámico ($N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = cte$) [16]. Gibbs [51] sigue este procedimiento e introduce el ensamble canónico. El vínculo entre ensambles se establece a través de una transformada de Laplace. Por ejemplo, la función de partición Gran Canónica es la doble transformada de Laplace de de la función de partición micro-canónica, $W(E, N, V) = e^{S(E,N,V)}$:

$$\begin{aligned} \Xi(T, \mu, V) &= \int\int_0^\infty \frac{dE}{\epsilon_0} dN \qquad e^{-[E-\mu N - TS(E,N,V)]/T} \\ &= \frac{V^2}{\epsilon_0} \int\int_0^\infty dedn \qquad e^{-[e-\mu n - Ts(e,n,V)]/T} \end{aligned} \tag{2.29}$$

Transiciones de fase en el ensamble microcanónico

De acuerdo a Yang y Lee [52], las transiciones de fase son indicadas por las singularidades de los potenciales del Gran-Canónico ($\propto \frac{1}{V} ln[\Xi]$) como función de $z = e^{\mu/(k_B.T)}$ en el eje z positivo. Esto puede ocurrir solamente en el límite termodinámico, ya que para N y V finitos, Ξ es una suma finita de potencias de z^N y $\frac{1}{V} ln[\Xi]$ es analítica para z positivos y cualquier T. Sin embargo hemos visto que en sistemas finitos se observan fenómenos típicos de las transiciones de fase.

En este punto es cuando uno necesita una extensión de la termodinámica a sistemas pequeños, la cual evite el límite termodinámico. Sin embargo, el problema aquí reside en que los tres ensambles mas populares no son equivalentes para sistemas "pequeños". La energía por partícula en los ensambles canónico y gran-canónico, puede fluctuar alrededor de su valor medio pero son cero en el micro-canónico. Además, el calor específico es estrictamente positivo en el ensamble canónico mientras que puede ser negativo en el microcanónico. En este sentido, es importante tener en cuenta que el ensamble microcanónico como fue introducido por Boltzman es el único que tiene una definición mecánica clara para sistemas finitos.

Para extender la definición de transición de fase de Yang y Lee a sistemas finitos, se debe estudiar que característica de la función de partición microcanónica $W(E,N,V)$ lleva a las singularidades del potencial gran-canónicos $\frac{1}{V}ln[\Xi]$ como función de $z = e^{\mu/T}$ mediante la transformada de Laplace de la ecuación (2.29). En el límite termodinámico, esta integral puede ser evaluada por métodos asintóticos. Siempre que la superficie de entropía $s(e,n)$ tenga curvatura negativa en todo el dominio, el integrando de la ecuación (2.29) tendrá un solo máximo. Para $V \to \infty$ la integral de la ecuación (2.29) es entonces dominada por la contribución de su máximo. Si expandimos $s(e,n)$ a segundo orden alrededor de su máximo, el punto estacionario $\{e_s, n_s\}$, tenemos que el término lineal se hace cero para T y μ tales que:

$$\begin{aligned} T^{-1} &= [\partial s/\partial e]_{(e_s,n_s)}, \\ \mu/T &= -[\partial s/\partial n]_{(e_s,n_s)}. \end{aligned} \tag{2.30}$$

El término cuadrático, por otro lado, puede escribirse en términos de la matriz de las curvaturas de la superficie de entropía (Hessiano) y los incrementos $\Delta e = e - e_s$ y $\Delta n = n - n_s$:

$$s_2(e,n) = (\Delta e, \Delta s).\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} & \frac{\partial^2 s}{\partial n \partial e} \\ \frac{\partial^2 s}{\partial e \partial n} & \frac{\partial^2 s}{\partial n^2} \end{bmatrix}.\begin{pmatrix} \Delta e \\ \Delta n \end{pmatrix} = v_1^2\lambda_1 + v_2^2\lambda_2, \tag{2.31}$$

donde λ_i ($\lambda_1 \geq \lambda_2$) son los autovalores del Hessiano y $\mathbf{v_i}$ sus autovectores en (e_s, n_s). En este caso la integral puede escribirse:

$$\Xi(T,\mu,V) = \frac{V^2}{\epsilon_0} e^{-\frac{[e-\mu n - Ts(e,n,V)]}{T}} \int\int_{-\infty}^{\infty} dv_1 dv_2 e^{\frac{V}{2}[\lambda_1 v_1^2 + \lambda_2 v_2^2]} \tag{2.32}$$

$$= e^{-F(T,\mu,V)/T} \tag{2.33}$$

$$f(T,\mu,V) \to e_s - \mu n_s - Ts_s + \frac{Tln(\sqrt{det(e_s,n_s)})}{V} + o(\frac{lnV}{V}) \tag{2.34}$$

Donde $f = F/V$, $det(e_s, n_s)$ es el determinante de las curvaturas de la superficie de entropía (Hessiano), $det(e_s, n_s) = \lambda_1\lambda_2$.

λ_1 puede ser positivo o negativo. Si λ_1 es negativo (y por lo tanto λ_2), $det(e_s, n_s) > 0$ y los últimos dos términos de la ecuación (2.34) se hacen cero en el límite termodinámico. De esta manera se obtiene la expresión usual de la densidad de energía libre cualquiera sea el ensamble utilizado:

$$f(T, \mu, V \to \infty) = e_s - \mu n_s - T s_s. \tag{2.35}$$

Como vemos, el determinante de la superficie de entropía $s(e, n, V)$ decide si el ensamble gran-canónico concuerda con el microcanónico en el límite termodinámico. Si $det(e_s, n_s) > 0$, las ecuaciones (2.30) tienen una única solución (hay un solo punto estacionario) entonces hay un mapeo $1:1$ entre los ensambles gran-canónico y microcanónico y $f(T, \mu)$ es analítica en $z = e^{\beta\mu}$. En este caso el sistema tiene una única fase estable [52].

Por otra parte, si $det(e_s, n_s) \leq 0$, el término $ln(\sqrt{det(e_s, n_s)})$ diverge o no está definido y la energía libre (f) no puede ser definida. Este es el caso de las *transiciones de fase*. En una transición de primer orden, el ensamble gran-canónico contiene varios puntos estacionarios a la misma temperatura y potencial químico los cuales contribuyen de manera similar a la integral (2.29). Consecuentemente las fluctuaciones estadísticas de e y n no desaparecen en el ensamble gran-canónico aún en el límite termodinámico. Entre los puntos estacionarios, $s(e, n)$ tiene al menos una curvatura principal $\lambda_1 \geq 0$ [17] y la condición de concavidad para la entropía es violada. En el límite termodinámico, estos puntos salen fuera de la integral (2.29) y $ln[Z]$ se hace no-analítica. De esta manera, en [17] el autor define las *transiciones de fase en sistemas finitos* por los puntos y regiones de curvatura no-negativa de la superficie de entropía $s(e, n)$.

Experimentalmente, uno identifica las transiciones de fase de primer orden no por los puntos no-analíticos de $\frac{1}{V} ln[Z]$ sino por la interfases que separan las fases coexistentes. Las interfases tiene ciertos efectos sobre la entropía y en particular relacionados a la formación de superficies. Cuando las gotas crecen, su superficie tambien crece. Esto se conecta a una pérdida de entropía (entropía de superficie) proporcional al área de interfase. Como el número de átomos en la superficie es $\propto N_1^{2/3}$ (N_1: número de átomos de la gota), esto no es lineal en ΔE y lleva a la aparición de un intruso convexo en la entropía $S(E, N, V)$.

En el punto crítico en cambio, las fases se hacen indistinguibles porque la entropía de superficie desaparece.

Por otra parte, las anomalías en el $\det(e_s, n_s)$ también están ligadas a la presencia de fluctuaciones críticas, esto es, fluctuaciones anormalmente grandes de alguna variable extensiva o a la divergencia de algunas funciones respuesta como por ejemplo, el calor específico microcanónico:

$$c_\mu(e, n, V) = \left.\frac{\partial e}{\partial T}\right|_\nu = -\frac{s_{nn}}{T^2 det(e, n)}. \tag{2.36}$$

Si el sistema tiene una sola fase estable, $s_{nn} < 0$, $det(e, n) > 0$ y $c_\mu > 0$.

Pero si el $det(e, n) \leq 0$, el calor específico microcanónico puede diverger o hacerse negativo.

2.3 El modelo de la gota de Fisher (FDM)

En esta sección describiremos la teoria de Fisher [8, 9] para la transición crítica líquido-gas basada en la idea de la condensación de gotitas o racimos de un gas a baja densidad.

La idea básica es que, en un gas de partículas interactuando con carozos repulsivos y fuerzas atractivas de corto rango, la configuración típica a bajas densidades consistirá de racimos esencialmente aislados de una, dos, tres o mas partículas. Un racimo suficientemente grande es una pequeña gotita de fase líquida a la misma temperatura. Estas gotitas estarán en equilibrio dinámico y las proporciones relativas de gotitas de diferentes tamaños cambiará con la temperatura y la presión. La condensación en este marco corresponde al crecimiento de una gota macroscópica del líquido.

Para formular estas ideas matemáticamente Fisher escribe la gran función de partición como:

$$ln[\Xi(T, z, \Omega)] = \sum_{l=1} q_l . z^l, \tag{2.37}$$

donde $q_l = q_l(T, \Omega)$ es la función de partición configuracional para un racimo de l partículas en el dominio Ω:

$$q_l(T, \Omega) = \frac{1}{l!} \int d\mathbf{r}_1 ... \int d\mathbf{r}_l e^{-(E_l/k_B T)}, \tag{2.38}$$

donde E_l es la energía de ligadura del racimo con l partículas. A fin de encontrar una expresión para q_l, tengamos es cuenta que el centro de masa de un racimo es libre de moverse a través del volumen, de manera que $q_l \propto V(\Omega)$. Además, la energía de un racimo en alguna configuración fija contiene: (i) Un término de volumen $-lE_0$ donde E_0 es la energía de ligadura por partícula en el fluido denso, y (ii) un término de superficie $+\omega s$ donde s es el área de la superficie del racimo, y ω es la energía de superficie que surge a través de la pérdida de energía de ligadura de las partículas cerca de la superficie.

En este sentido, podemos esperar que la superficie media o mas probable $\bar{s}$ de un racimo de tamaño l varíe como:

$$\bar{s}(l) \simeq a_0 l^\sigma \qquad (l \to \infty), \tag{2.39}$$

con $0 < \sigma < 1$ para $d \geq 2$ y a_0 una constante.

Como a suficientemente baja temperatura un racimo típico tendrá una forma mas bien esférica, el exponente que caracteriza la superficie puede escribirse

$$\sigma \simeq 1 - \frac{1}{d} = \frac{1}{2} \qquad d = 2 \tag{2.40}$$

$$= \frac{2}{3} \qquad d = 3. \tag{2.41}$$

Ahora podemos escribir aproximadamente

$$q_l(\Omega, T) \simeq V(\Omega) g(\bar{s}) e^{l\beta E_0} e^{-\beta\omega\bar{s}} \tag{2.42}$$

donde el factor combinatorio $g(\bar{s})$ es proporcional al número de configuraciones de l partículas idénticas con centro de masa fijo y superficie $\bar{s}$. Para un lattice gas en dos dimensiones $g(\bar{s})$ sería el número de poligonos de perímetro $\bar{s}$ (y área l). A partir de esto Fisher propone [8, 9] que $g(\bar{s})$ se escriba como

$$g(\bar{s}) \simeq \frac{g_0 \lambda^{\bar{s}}}{\bar{s}^{\tau/\sigma}} \qquad (\bar{s} \to \infty) \tag{2.43}$$

donde g_0 es una constante, τ es un exponente positivo y λ define la entropía media por unidad de superficie, $\bar{\omega}$, de la forma: $k_B.ln[\lambda] = \bar{\omega}$. De esta manera $ln[g(\bar{s})]$ es proporcional a la entropía configuracional de un racimo con superficie $\bar{s}$, $\bar{s}\bar{\omega}$

Si combinamos estos resultados e introducimos las variables

$$y = z e^{\beta E_0}, \tag{2.44}$$

$$x = \lambda^{a_0} e^{-\beta\omega a_0} = e^{-\frac{a_0(\omega - \bar{\omega}T)}{k_B T}}, \tag{2.45}$$

con $z = e^{\beta\mu}$, encontramos una expresión para la presión en un sistema infinito:

$$\frac{p}{k_B T} \simeq g_0 \sum_{l=1}^{\infty} l^{-\tau} x^{l^\sigma} y^l. \tag{2.46}$$

El radio de convergencia de esta serie viene dado por:

$$y_\sigma = lim_{l\to\infty} \left| l^{-\tau} x^{l^\sigma} \right|^{-1/l} = lim_{l\to\infty} |x|^{-1/l^{1-\sigma}} = 1, \tag{2.47}$$

para todo x (tomando que $0 < \sigma < 1$). Como los términos de la serie son todos positivos, el punto $y_\sigma = 1$ debe ser una singularidad de la función y se identifica con el punto de condensación [8, 9].

La singularidad $y = y_\sigma$ define entonces un potencial químico μ_σ en el punto de condensación que representa el potencial químico de la coexistencia líquido-vapor. De esta manera, la variable y puede reescribirse como

$$y = e^{\beta(\mu-\mu_\sigma)} = e^{\beta(\mu-\mu_{coex})} \tag{2.48}$$

Para $y = y_\sigma$, la presión y todas sus derivadas con respecto a z y T convergen siempre que $x < 1$, esto es, que T esté por debajo de la temperatura crítica T_c definida como

$$T_c = \frac{\omega}{\bar{\omega}}. \tag{2.49}$$

A $T = T_c$, la tensión superficial microscópica $(\omega - \bar{\omega}T)$ en (2.45) se hace cero. Para $y > y_\sigma$ la serie (2.46) diverge y la presión es la presión de la fase líquida. Esta fase no es descripta apropiadamente en este formalismo y en consecuencia no mostrará la simetría usual entre líquido y gas.

2.3.1 Descripción en términos de las distribuciones de racimos

Se puede apreciar que en este formalismo, la magnitud mas relevante es la probabilidad de encontrar un racimo de tamaño l, n_l, que puede escribirse en términos de la función de partición configuracional, q_l, como

$$n_l = (q_l/V)z^l. \tag{2.50}$$

Tomando las aproximaciones especificadas arriba [Eq.(2.44) y (2.45)], puede reescribirse en términos de x e y como:

$$n_l = q_0 x^{l^\sigma} y^l l^{-\tau}. \tag{2.51}$$

El comportamiento de n_l en términos de y para $T < T_c$ $(x < 1)$ puede analizarse como:

a Si $y < 1$ $(\mu < \mu_{coex})$, n_l decae rápidamente a cero cuando l crece.

b Si $y = 1$ $(\mu = \mu_{coex})$, n_l decrece mas lentamente cuando l crece y en particular decae como una ley de potencias con exponente τ si $x = 1$ (esto es, si $T = T_c$).

c Si $y > 1$ $(\mu > \mu_{coex})$ ligeramente, n_l primero decrece dominado por el factor x^{l^σ} pero para l mas grandes se incrementa dominado por el factor y^l.

La ecuación (2.51) no es otra cosa que la distribución de racimos y su comportamiento, descripto arriba, es mostrado en la Fig.(2.6) . La distribución de racimos n_l cumple un rol fundamental en la descripción de la transición líquido-vapor dentro del modelo de Fisher. Las principales magnitudes termodinámicas pueden expresarse en términos de n_l, como por ejemplo la presión:

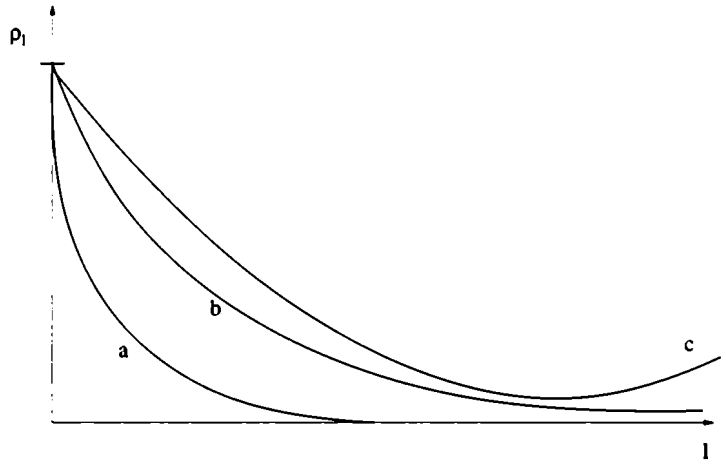

Figura 2.6: Densidad de racimos de tamaño l para distintos valores de y. Para $y < 1$ (a) el sisema está en su fase vapor. Si $y = 1$ (b), el sistema está en el punto de condensación y para $y > 1$ aparece la fase líquida reflejada en ele incremento de la densidad para l grandes.

$$\frac{p}{k_B T} = \sum_l n_l(\mu, T) = M_0(\mu, T) \tag{2.52}$$

Donde $M_0(\mu, T)$ es el momento cero de la distribución de racimos. También la densidad puede escribirse en términos del primer momento de la distribución:

$$\rho = \frac{\partial P}{\partial \mu} = q_0 \sum_l l^{1-\tau} x^{l^\sigma} y^l \tag{2.53}$$

$$= \sum_l l n_l(\mu, T) = M_1(\mu, T) \tag{2.54}$$

Siguiendo el mismo camino, podemos encontrar una expresión para la compresibilidad isotérmica en términos de la misma distribución de fragmentos y su comportamiento cerca del punto crítico en términos del exponente γ.

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T . \tag{2.55}$$

Si tenemos en cuenta que $k_B T = y(\mu, T)[\partial P / \partial y(\mu, T)]$ la ecuación (2.55) puede escribirse como:

$$\kappa_T = \frac{-1}{\rho^2}\left(y\frac{\partial P}{\partial y} + y^2 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}\right)_T \tag{2.56}$$

lo cual lleva, usando la ecuación (2.52), a expresar la compresibilidad isotérmica en términos del segundo momento de la distribución $M_2(\mu, T)$:

$$\kappa_T = \frac{1}{k_B T \rho} + \frac{1}{k_B T \rho^2} M_2(\mu, T). \tag{2.57}$$

La suma del segundo término puede expresarse en términos de una integral ya que los racimos de mayor tamaño son los que dominan dicha suma:

$$\kappa_T = \frac{1}{k_B T \rho} + \frac{1}{k_B T \rho^2} \int_0^\infty n_l(\mu, T) l^2 dl. \tag{2.58}$$

Si nos movemos a lo largo de la curva de coexistencia líquido-gas (donde $y = 1$), esta ecuación la podemos expresar como

$$\kappa_T = \frac{1}{k_B T \rho} + \frac{1}{k_B T \rho^2} q_0 \int_0^\infty l^{2-\tau} e^{-[ln(x^{-1})] l^\sigma} dl. \tag{2.59}$$

Haciendo la sustitución $t = \theta l^\sigma$, donde

$$\theta = ln(x^{-1}) = \frac{a_0 \omega T_c}{k_B T} \epsilon, \tag{2.60}$$

y $\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c}$. Esto produce que la parte singular de κ_T (que es la que domina cerca de T_c) pueda escribirse como

$$\kappa_T \simeq \frac{q_0}{\sigma} \epsilon^{\frac{(3-\tau)}{\sigma}} . \Gamma\left(\frac{3-\tau}{\sigma}\right), \tag{2.61}$$

donde $\Gamma(x)$ es la función gamma y

$$\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma}, \tag{2.62}$$

define el exponente de la compresibilidad isotérmica, γ, en términos de τ y σ. De la misma manera pueden expresarse el resto de los exponentes críticos definidos antes en términos de estos dos:

$$\beta = \frac{\tau - 2}{\sigma}, \tag{2.63}$$

$$\alpha = 2 - \frac{\tau - 1}{\sigma}, \tag{2.64}$$

$$\delta = \frac{1}{(\tau - 2)}. \tag{2.65}$$

Vemos que τ debe cumplir que $2 < \tau < 3$ para que $\beta > 0$ y $\gamma > 0$.

Con estas ecuaciones se llega a las mismas relaciones entre exponentes críticos a las que se llegaban usando argumentos de escala.

De esta manera podemos ver como la transición líquido-gas puede entenderse en términos de la distribución de gotas o racimos y como pueden obtenerse los exponentes de la transición crítica.

2.4 Percolación

Para entender que es Percolación, imaginemos una red cuadrada como la que se muestra en la Fig.2.7(a). A una cierta fracción de los cuadrados que quedan definidos en la red los llenamos con un punto negro en el centro, mientras que al resto de los cuadrados los dejamos vacios, como en la Fig.2.7(b). Definimos entonces un racimo como el grupo de primeros vecinos ocupados por los puntos negros. Estos racimos están remarcados en la Fig.2.7(c). Como se observa, todos los cuadrados que pertenecen a un racimo están conectados por una cadena de primeros vecinos ocupados por un punto negro. Este tipo de percolación se llama *percolación de sitios*.

Podemos pensar en cambio en una red cuadrada formada por circulos negros como lo muestra la Fig.[2.8(a)]. A algunos de ellos los conectamos con sus primeros vecinos como vemos en la Fig.[2.8(b)]. En este caso, los racimos también se definen como el conjunto de puntos conectados mediante una cadena de primeros vecinos como se ve en la Fig.[2.8(c)]. Este tipo de percolación se llama *percolación de ligaduras*.

En general, la teoría de Percolación trata con el número y las propiedades de estos racimos.

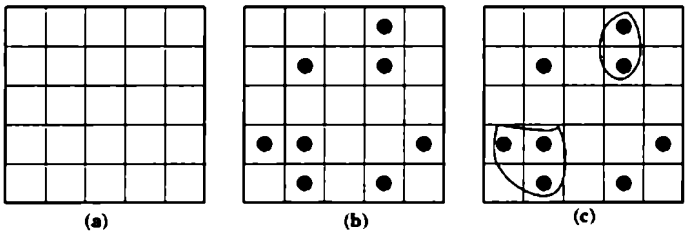

Figura 2.7: Ejemplo de percolación de sitios: En (a) se observa la red cuadrada vacia. En (b) algunos cuadrados están ocupados con puntos negros y en (c), los 'racimos' o grupos de primeros vecinos ocupados, están marcados execpto cuando los racimos consisten en un solo sitio ocupado (Figura tomada de [7]).

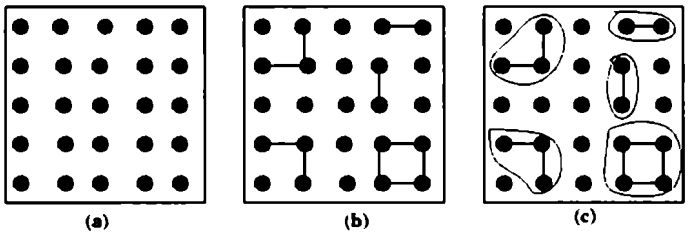

Figura 2.8: Ejemplo de percolación de ligaduras: En (a) se observa la red cuadrada de puntos desconectados. En (b) algunos puntos están conectados mediante ligaduras y en (c), los 'racimos' o grupos de primeros vecinos ocupados, están marcados execpto cuando los racimos consisten en un solo sitio ocupado.

La ocupación de los cuadrados en la Fig.(2.7) es totalmente al azar, esto es, cada sitio está ocupado o vacío independientemente del estado de ocupación

de sus vecinos. Si llamamos p a la probabilidad de que el sitio esté ocupado y la red tiene N sitios, notaremos que una fracción pN de estos cuadrados estarán ocupados y los restantes $(1-p)N$ permanecerán vacios en el límite $N \to \infty$.

Del mismo modo, la distribución de ligaduras en la Fig.(2.8) también es totalmente al azar. La diferencia en percolación de ligaduras es que todos los sitios están siempre ocupados y lo que aumenta con la probabilidad p es que se vinculen entre sí para formar racimos de primeros vecinos conectados.

De esta manera, fijado el tamaño y la topología de la red, el problema queda totalmente definido por esta probabilidad. En la Fig.(2.9) puede verse como una red de 20×20 se va llenando a medida que aumenta la probabilidad p (percolación de sitios).

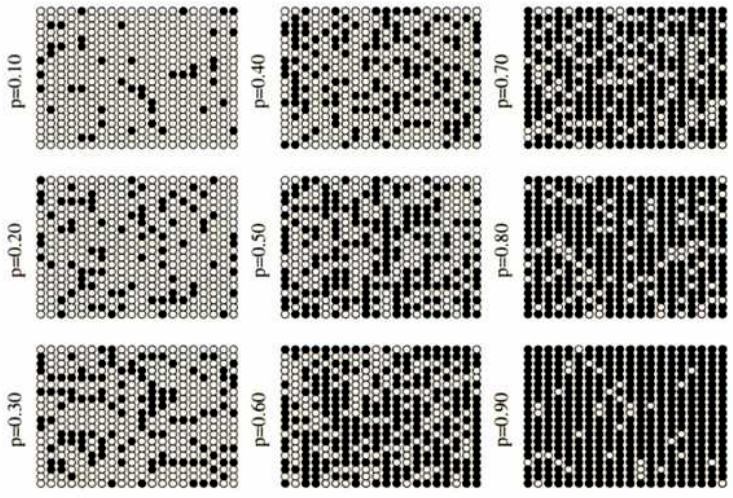

Figura 2.9: Ejemplo de percolación para una red cuadrada de 20×20 para distintos valores de la probabilidad de ocupar un sitio, p. Los circulos llenos representan los sitios ocupados.

Como vimos mas arriba, en percolación se llaman racimos al grupo de sitios de la red ocupados conectados por distancia de primeros vecinos. A un racimo con s sitios ocupados se lo llama s-racimo. Dada la cantidad de racimos de varios tamaños que pueden existir en una red, se define como n_s al número de racimos de tamaño s por sitio de red, o sea, el número de racimos de tamaño s dividido por el número total de sitios de la red.

Por ejemplo, para un problema de percolación de sitios, el comportamiento de la red en términos de la probabilidad de llenado es fácil de entender: si p está cerca de cero, la mayoria de los sitios ocupados estarán aislados con algunos pocos pares o tripletes presentes [Fig.(2.9), $p = 0.10$]. Por otro lado, si p tiene un valor cercano a 1, casi todos los sitios estarán ocupados y estarán

conectados unos con otros formando un gran racimo que atraviesa toda la red [Fig.(2.9), $p = 0.90$]. En una red suficientemente grande, este tipo de racimos "percolantes"(atraviesan la red de un lado a otro) están presentes de a uno o no lo están, pero nunca conviven mas de uno [siempre y cuando la dimensión del sistema sea $d \leq 6$ [53]]. Existe entonces una distinción clara entre dos tipos de comportamientos diferentes de la red: o existe un racimo percolante o no. Para redes infinitas, este cambio ocurre a una dada probabilidad p_c por encima de la cual el racimo percolante siempre existe. A esta probabilidad p_c se la llama *probabilidad crítica* e indica una transición de fase entre ambos comportamientos. El mismo comportamiento se observa en percolación de ligaduras.

En esta transición, el parámetro de orden se define como la fracción de sitios ocupados que pertenecen al racimo percolante, P_∞. $P_\infty = 0$ para $p < p_c$ ya que no existe racimo percolante y $P_\infty \neq 0$ para $p > p_c$. Como hemos visto en la Sec.(2.1.3), la emergencia del parámetro de orden es descripta por el exponente β, de manera que $P_\infty \propto |p - p_c|^\beta$ para $p > p_c$.

2.4.1 Leyes de escala en las distribuciones de racimos

En [7] se propone, a partir de generalizar los resultados obtenidos para una red de Bethe, la siguiente forma para la distribución de racimos:

$$n_A \propto A^{-\tau} e^{-cA} \tag{2.66}$$

donde c depende de la distancia al punto crítico p_c y de un exponente σ

$$c \propto |p - p_c|^{1/\sigma} \tag{2.67}$$

Como las distribuciones de fragmentos cerca del punto crítico escalean en percolación de forma similar a como lo hacían en en el modelo de Fisher, la ecuación (2.66) es del tipo de la Ec.(2.51).

Sin embargo, la Ec.(2.66) no describe correctamente la distribución y debe ser corregida. En el modelo de Fisher, n_A es proporcional a $x_A = e^{-c_1 \epsilon A^\sigma}$, mientras que aquí n_A es proporcional a $x_A = e^{-(c\epsilon^{1/\sigma} A)}$. ϵ es la distancia al punto crítico y se escribe como $(T_c - T)$ en el modelo de Fisher y como $(p - p_c)$ en percolación. ¿Que tienen ambas en común? En ambos casos, la función $x_A(\epsilon) = n_A(\epsilon)/n_A(\epsilon = 0)$ depende de las variables A y ϵ, con la combinación de ϵA^σ solamente. En el primer caso es una función de una exponencial de esta combinación, mientras que en el segundo caso de una exponencial de alguna potencia de esta combinación. Entonces, es posible escribir para ambos casos:

$$x_A(\epsilon) = f(z) \qquad z = \epsilon A^\sigma \tag{2.68}$$

De esta manera, la ecuación (2.66) puede ser reemplazada como

$$n_A(\epsilon) = q_0 A^{-\tau} f(\epsilon A^\sigma) \tag{2.69}$$

La forma precisa de la función de escala $f(z)$ no es predicha en esta hipótesis y tiene que ser obtenida mediante simulaciones numéricas. Sin embargo, se pueden hacer consideraciones sobre la forma que debería tener. Para z grandes, la función de escala $f(z)$ debe ir a cero para que las sumas que definen los momentos [Eq.(2.74)] converjan. Además, $f(z)$ tiene que tener al menos un máximo en $z < 0$ para que $P_\infty = 0$ para $p < p_c$ [7]. Para $d \leq 7$, se encuentra que $f(z)$ tiene un solo máximo [53]. El valor de $f(z)$ en su máximo se lo llama f_{max} y el valor negativo de z para el cual este máximo es alcanzado se llama z_{max}. Por lo tanto,

$$f(z_{max}) = f_{max} \qquad f(z) < f_{max} \qquad si \qquad z \neq z_{max} \tag{2.70}$$

Como en el punto crítico no hay un tamaño de racimo característico debido a la divergencia de la longitud de correlación, la distribución de racimos es una ley de potencias $n_s = q_0 s^{-\tau}$ y por lo tanto $f(0) = 1$

Para percolación de ligaduras, la cantidad total de puntos ocupados es siempre el tamaño de la red. Esto lleva a que:

$$\sum_A n_A(p)A = 1 \qquad \forall p. \tag{2.71}$$

Si expresamos esto en $p = p_c$,

$$M_1(p = p_c) = \sum_A A.n_A(p = p_c) = q0 \sum_A A^{1-\tau} = 1, \tag{2.72}$$

y vemos que la normalización q_0 depende de τ [53] mediante la función ζ de Riemmann:

$$q_0 = 1/\sum_A A^{1-\tau} = \zeta(\tau - 1)^{-1}. \tag{2.73}$$

A partir de la distribución de racimos, se pueden calcular los k-ésimos momentos asociados a dicha distribución (es importante tener en cuenta que las sumas corren sobre todos los tamaños pero excluyendo el racimo percolante),

$$M_k = \sum_A A^k n_A, \tag{2.74}$$

que pueden escribirse en términos de (2.69) como:

$$\begin{aligned} M_k &\propto \sum_A A^{k-\tau} f(A^\sigma \epsilon) \\ &\propto \int A^{k-\tau} f(A^\sigma \epsilon) dA \\ &= \epsilon^{\frac{\tau-1-k}{\sigma}} \int z^{-1+\frac{k-\tau+1}{\sigma}} f(z) dz \end{aligned}$$

De esta manera, vemos que podemos escribir los momentos de la distribución en términos de alguna potencia de la distancia al punto crítico, similarmente a lo ocurrido en el modelo de Fisher,

$$M_k \propto \epsilon^{\tau-1-k/\sigma} \propto |p-p_c|^{(\tau-1-k)/\sigma} \tag{2.75}$$

Asi como en el modelo de Fisher los momentos de la distribución de racimos estaban asociados a cantidades termodinámicas (como la presión, la densidad, la compresibilidad isotérmica, etc), en percolación los momentos están asociados a características propias del problema: M_0 es la multiplicidad (cantidad total de racimos en la red), M_1 es la masa total del sistema (cantidad de sitios ocupados), M_2 está asociado al tamaño de racimo promedio, etc. Cerca del punto crítico, el comportamiento de estos momentos son descriptos en términos de los exponentes críticos que, dada la ecuación (2.75), pueden escribirse todos en términos de σ y τ.

$$\left[\sum_A n_A(p)\right]_{sing} \propto |p-p_c|^{2-\alpha} \tag{2.76}$$

$$\left[\sum_A A n_A(p)\right]_{sing} \propto |p-p_c|^{\beta} \tag{2.77}$$

$$\left[\sum_A A^2 n_A(p)\right]_{sing} \propto |p-p_c|^{-\gamma} \tag{2.78}$$

Donde *sing* denota la parte singular de las series. Las relaciones obtenidas entre los exponentes críticos con estas definiciones son las mismas halladas anteriormente. Los exponentes críticos relevantes en nuestro problema, τ, σ, γ y β son 'universales' en el sentido que solo dependen de la dimensionalidad de la red, pero no de su estructura.

Precisamente, si bien las distribuciones de racimos escalean en forma similar tanto para el modelo de Fisher como para Percolación, los valores que se obtienen de dichos exponentes son distintos en uno y otro caso. Decimos entonces que pertenecen a "distintas clases de universalidad". La transición de fase líquido-gas pertenece a la clase de universalidad llamada 3D-Ising, distinta a la de percolación en 3D. En la tabla (4.5) podemos ver los valores típicos de ambas clases de universalidad.

2.4.2 Percolación en la fragmentación nuclear

Para estudiar aspectos relacionados con la transición de fase en el problema de fragmentación nuclear, han sido desarrollados entre otros modelos de Percolación de ligaduras [54, 55] que permiten ajustar los datos resultantes de experimentos con colisiones de iones pesados.

Para entender la motivación de usar este tipo de modelos en fragmentación nuclear, consideremos una representación esquemática de este proceso en la

Tabla 2.1: Exponentes críticos correspondientes a las clases de universalidad 3d-Ising (transición de fase líquido-gas) y Percolación 3D [16, 20]

Exponents	3D-Ising	Percolation
τ	2.21	2.18
σ	0.64	0.45
β	0.33	0.41
γ	1.23	1.82

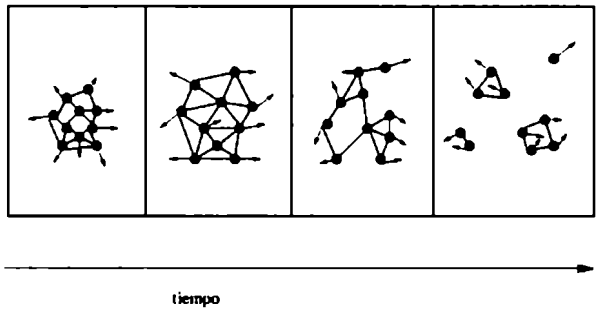

Figura 2.10: Representación esquemática del proceso de fragmentación para un sistema en en expansión con interacciones a primeros vecinos. Esta secuencia de cuatro cuadros representa diferentes fases de la expansión, con el tiempo corriendo de izquierda a derecha. Las interacciones a primeros vecinos son representadas esquemáticamente por las lineas rectas que unen las partículas, y las flechas representan sus velocidades. (Figura tomada de [56])

presencia de una interacción de corto rango (a primeros vecinos) como se muetra en la Fig.(2.10). En sistemas con este tipo de interación, tales como núcleos atómicos o moleculas, se la inyecta energía de excitación de forma que las partículas se mueven alejándose unas de otras mas allá del rango de interacción. Esto provoca que se rompan las ligaduras entre partículas causando que los vecinos pierdan contacto unos con otros. Los que aún permanecen conectados via ligaduras, finalizarán como racimos en los detectores. Es entonces una aproximación razonable al problema de la fragmentación usar un modelo basado en percolación de ligadura.

En este modelo, los nucleones del sistema altamente excitado se representan por puntos que ocupan un volumen aproximadamente esférico en una red tridimensional cúbica simple en el espacio de coordenadas. El espaciado de la red b es calculado aproximadamente de la densidad de saturación nuclear,

$$b = \frac{1}{\rho_0^{1/3}} \simeq 1.8fm. \tag{2.79}$$

El número de puntos usados es igual al número de nucleones del blanco y se conserva durante los cálculos, cumpliendose de esta manera la ley de conservación de la masa en el proceso de fragmentación

$$\sum_i^m A_{frag}(i) = A_T, \tag{2.80}$$

donde $A_{frag}(i)$ es la masa (expresada en cantidad de nucleones) del fragmento i y m es la multiplicidad total de todos los fragmentos.

Los nucleones están conectados a sus $z = 6$ primeros vecinos de la red por medio de ligaduras o "links"que representan la interacción nuclear de corto rango. Cada ligadura puede absorber una energía máxima, llamada la energía de rompimiento de una ligadura, E_b, y a a su vez tiene una probabilidad p_b de romperse.

El modelo asume también que la energía distribuida en cada ligadura, ϵ_b, puede ser descripta por una distribución de Boltzmann con energía media $< \epsilon_b >$. Cada sitio de la red finita tiene un promedio de α ligaduras. La energía de excitación promedio depositada por sitio es $< E_s >= \alpha < \epsilon_b >$ y la energía de ligadura por nucleón del sistema nuclear inicial es $B = \alpha E_b$. Cuando el sistema se expande, cualquier ligadura cuya energía sea mayor que E_b se romperá. Por lo tanto, la probabilidad de rompimiento de una ligadura es

$$p_b = \frac{\int_{E_b}^{\infty} \sqrt{\epsilon_b} e^{-\epsilon_b/t_b} d\epsilon_b}{\int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon_b} e^{-\epsilon_b/t_b} d\epsilon_b} \tag{2.81}$$

$$= \frac{\int_B^{\infty} \sqrt{E_s} e^{-E_s/T_s} dE_s}{\int_0^{\infty} \sqrt{E_s} e^{-E_s/T_s} dE_s} \tag{2.82}$$

$$= 1 - \frac{2}{sqrt\pi} \Gamma(\frac{3}{2}, 0, \frac{B}{T}) \tag{2.83}$$

donde $t_b = \frac{2}{3} < \epsilon_b >$ y $T_s = \alpha t_b = \frac{2\alpha}{3} < \epsilon_b >= \frac{2}{3} < E_s >$ y Γ es la función gamma incompleta generalizada.

No hay una manera directa de calcular la energía de excitación depositada por sitio, $< E_s >$ como función de la energía del haz incidente. Por lo tanto, este modelo usa p_b como un parámetro con el cual se ajustará los datos experimentales.

Para una dada p_b, la idea es generar un número al azar ξ_{ijk} entre 0 y 1 para cada ligadura B_{ijk}. Si $\xi_{ijk} \leq p_b$ entonces la ligadura se rompe y en caso contrario permanece inalterado.

Una vez recorridos todos los vínculos, se identifican los racimos. Repitiendo el proceso para un gran número de eventos y además sumando sobre todos los parámetros de impacto se generan entonces las distribuciones de masa correspondientes.

Este modelo es capaz de reproducir muy bien mediciones experimentales de espectros de masa en colisiones de protones contra iones pesados [54].

Un modelo alternativo que no hace uso de la red subyacente fue presentado en [57, 58, 59].

Capítulo 3

Señales de criticalidad

3.1 Introducción

Hemos visto en el capítulo anterior que cuando un sistema se aproxima al punto crítico aparecen en él grandes fluctuaciones. Estas fluctuaciones dan lugar a que ciertas magnitudes diverjan y otras, como el parámetro de orden, hagan su aparición en el punto crítico. Cuando en cambio el sistema es finito, las divergencias se convierten en máximos cuyo ancho es tanto mas grande cuanto mas chico es el sistema.

El comportamiento peculiar de estas magnitudes en las cercanias del punto crítico puede ser usado entonces como indicadores de que el sistema está sobrellevando un proceso crítico.

Diferentes magnitudes han sido propuestas en la literatura para detectar señales de criticalidad en sistemas finitos tanto en experimentos como en simulaciones [4, 14, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 54, 55]. En algunos de estos casos, estas magnitudes han sido analizadas sobre sistemas en los cuales no existe la certeza que tengan una transición crítica bien definida [60]. Por lo tanto es importante asegurarse que las magnitudes que uno quiere usar para identificar y caracterizar al punto crítico sean efectivas en un sistema que tenga una transición crítica.

En el problema de multifragmentación de gotas altamente excitadas, las distribuciones de fragmentos (dada su accesibilidad experimental) son fundamentales en la caracterización del proceso. Estas distribuciones van desde 'con forma de U' hasta exponencialmente decrecientes, pasando por 'tipo ley de potencias' cuando se incrementa la energía, son similares a las que aparecen en el problema de percolación, como hemos visto en la sección (2.4). Esto ha llevado a plantear modelos de percolación para la fragmentación nuclear como ha sido descripto en la sección (2.4.2).

Dado que el problema de percolación presenta una fenómeno crítico bien definido y es posible explorarlo para diferentes tamaños de red, analizaremos diferentes señales de criticalidad y métodos para extraer exponentes críticos en redes de percolación tridimensionales.

3.2 Señales de criticalidad y sus dependencia con el tamaño de la red

En esta sección se analizarán señales de criticalidad para un problema de percolación de ligaduras en redes cúbicas simples para dos tamaños distintos: $30 \times 30 \times 30$ y $6 \times 6 \times 6$ (cuyo tamaño es del orden del de un sistema nuclear). La comparación de las señales de criticalidad en ambas redes nos dará una idea de como el fenómeno crítico definido en un sistema infinito se manifiesta en sistemas mas pequeños.

Como vimos en la sección (2.4) las propiedades de este tipo de problemas se obtienen de las distribuciones de racimos. Estas distribuciones las obtenemos generando 200000 eventos de percolación para cada tamaño con una probabilidad p que varía aleatoriamente entre 0 y 1. Luego agrupamos los eventos en intervalos de p de 0.01 y generamos las distribuciones de fragmentos promediando los eventos que caen dentro de cada intervalo. De esta manera tendremos las distribuciones $n_A(p)$ para 100 valores equiespaciados de p con $0 \leq p \leq 1$. El cluster mas grande de cada evento es excluido a la hora de generar las distribuciones, teniendo en cuenta la validez de la ley de escalas [Eq.(2.69)] [1]

Diferentes magnitudes han sido propuestas para analizar la posibilidad de comportamiento crítico en una amplia variedad de sistemas [60, 62, 7, 61, 63, 64, 65, 55, 66]. Algunas de ellas, como por ejemplo encontrar la distribución de fragmentos que mejor se ajusta a una ley de potencias o buscar el máximo del segundo momento de la distribución (M_2), tienen su origen en el modelo propuesto para el escaleo de las distribuciones de fragmentos [Eq.2.69]. Otras, como las fluctuaciones normalizadas del tamaño del máximo fragmentos (NVM, Normalized Variance of the size of the Maximum fragment) [62] o la entropía de información (S_1) [60] han sido propuestas en diferentes trabajos como indicadores de comportamiento crítico.

Hemos visto en la sección (2.4) que para percolación, el número de clusters de tamaño A por sitio de red, n_A, a una dada probabilidad p [7] sigue la ley de escalas:

$$n_A(\epsilon) = q_0 A^{-\tau} f(z), \tag{3.1}$$

con $z = A^{\sigma}\epsilon$ [$\epsilon = (p - p_c)/p_c$] y para valores de p no muy lejos de p_c.

En el punto crítico, la distribución de fragmentos viene dada por una ley de potencias con exponente τ,

$$n_A(p_c) = q_0 A^{-\tau} \tag{3.2}$$

Todo esto, recordemos, es válido para sistemas infinitos en los cuales el

[1] En realidad, debe ser excluido para $p > p_c$ donde el cluster mas grande es el percolante [7]. Como al calcular las señales de criticalidad no conocemos p_c a priori, lo excluimos en todos los eventos. Esto no altera significativamente las distribuciones de $p < p_c$ [61].

racimo percolante (o de mayor tamaño) ha sido removido. En sistemas finitos sin embargo, no se obtendrá una ley de potencias pura ya que la propia finitud de la red hace que no puedan aparecer racimos mas grandes que el tamaño del mismo. Sin embargo, existe un rango de tamaños (que dependerá del tamaño del sistema, por supuesto) para el cual el espectro de racimos presenta un comportamiento del tipo ley de potencias, como se observa en la Fig.[3.1(f)].

Una forma de encontrar el punto crítico es entonces es hallar la probabilidad para la cual la distribución de racimos es mejor ajustada por una ley de potencias como la dada en Eq.(3.2) en un determinado rango de masas. Existen en la literatura dos métodos principales para encontrar el punto crítico de esta manera. El primero consiste en ajustar dichas distribuciones con una simple ley de potencias, en un dado rango de masas, con dos parámetros independientes, q_0 y τ, y buscar entonces por el valor de p para el cual el exponente τ es mínimo [55, 60, 63, 64, 65, 66]. El segundo método [61] tiene en cuenta la condición impuesta por la normalización, esto es, $q_0 = q_0(\tau)$ [Eq.(2.72)], que lleva a que q_0 depende de τ via la función ζ de Riemann [Eq.(2.73)]. Tomando en cuenta esta dependencia, se ajusta la distribución de fragmentos con una ley de potencias pero con un solo parámetro independiente, τ. De esta manera, el punto crítico es señalado por el espectro de masas mejor ajustado por esta ley de potencias (BPF), esto es, la que minimiza el coeficiente χ^2.

El punto crítico también puede encontrarse a través del máximo en el segundo momento de la distribución [7], definido en la ecuación (2.74).

En [62], se propuso a las fluctuaciones normalizadas del tamaño del máximo fragmento NVM como un indicador natural del punto crítico, ya que en este punto es donde, precisamente, se maximizan las fluctuaciones de diversos tipos y en particular las del fragmento de masa mas grande. El NVM es definido como

$$NVM =< \frac{< A_{max} - < A_{max} >>^2}{< A_{max} >} >, \tag{3.3}$$

donde A_{max} es el tamaño del fragmento mas grande y $< ... >$ es un promedio sobre un ensamble de eventos a una dada probabilidad p.

Finalmente en [60] se propuso también el máximo en la entropía de información (S_1) era una indicación de comportamiento crítico. S_1 es definida como:

$$S_1 = -\sum_A p_A \ln(p_A), \tag{3.4}$$

donde p_A es la probabilidad de detectar un fragmento de tamaño A definida como $p_A = N_A/N_t$, con N_A el número de fragmentos de tamaño A detectados en un set de experimentos y $N_t = \sum_A N_A$ el número total de fragmentos detectados en el mismo set de experimentos. Esta magnitud es referida como S_1 porque pertenece a la familia de las entropías generalizadas de Renyi definidas como [67, 68]:

$$S_q = \begin{cases} -\sum_A p_A ln(p_A) & q = 1 \\ (-1/(q-1))ln(\sum_A p_A^q) & q \neq 1. \end{cases} \tag{3.5}$$

En la figura (3.1) mostramos los resultados de los cálculos de los indicadores arriba mencionados para redes de percolación en tres dimensiones para los tamaños explicitados arriba. En la Fig.[3.1(a)] se observa el NVM, en la Fig.[3.1](b) el M_2, en la Fig.[3.1](c) el χ^2 del BPF (el mínimo denota el mejor ajuste a una ley de potencias con un solo parámetro libre τ), en Fig.[3.1](d) el τ (correspondiente a ajustar los espectros de masa con una ley de potencias con 2 parámetros libres; el mínimo valor de τ correspondería al punto crítico), y S_1 en la Fig.[3.1(e)], todas en función de la probabilidad p.

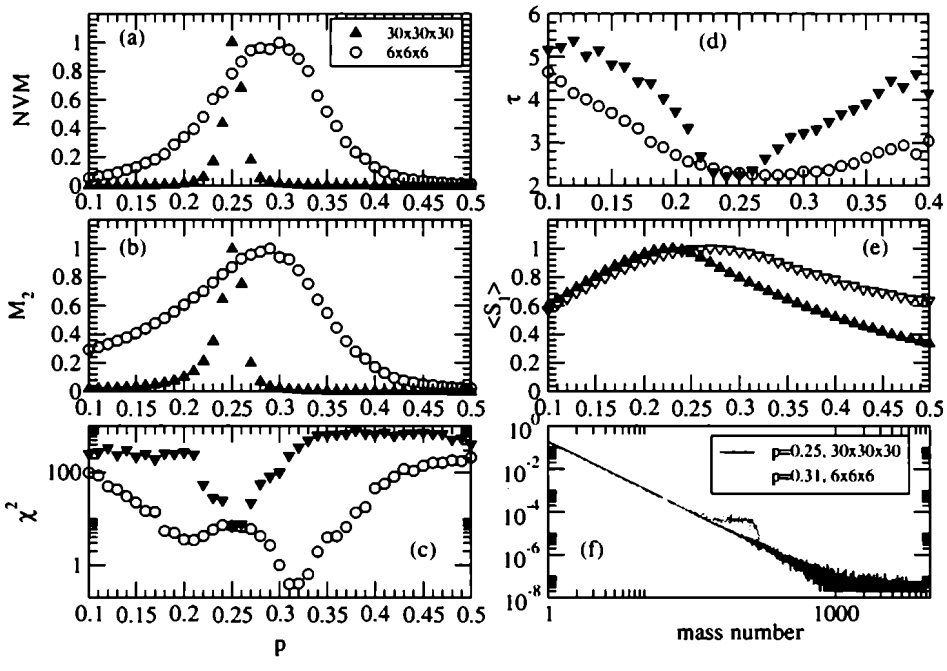

Figura 3.1: Las fluctuaciones normalizadas del tamaño del máximo fragmento NVM (a), el segundo momento de la distribución de fragmentos M_2 (b), el coeficiente χ^2 del ajuste a una ley de potencias con un solo parámetro libre (τ) (c), el exponente τ del ajuste de las distribuciones a una ley de potencias con dos parámetros libres (d) y la entropía de información (S_1) (e), como función de la probabilidad de activar una ligadura, p, para dos tamaños de redes percolantes $30 \times 30 \times 30$ (triangulos llenos) y $6 \times 6 \times 6$ (circulos vacios). En (f) se grafica la distribución de clusters en las probabilidades críticas para ambos tamaños.

Se puede observar que para los espectros de masa correspondientes a las redes de $30 \times 30 \times 30$, las señales NVM, M_2 y el BPF, indican la misma probabilidad crítica ($p_c = 0.25 \pm 0.01$). Los máximos en NVM y M_2 como la

calidad del BPF son muy agudos y la probabilidad crítica es la correspondiente a la red infinita tridimensional, indicando que los efectos de tamaño finito son despreciables. Por otro lado, el máximo en la entropía de información es muy chato y además está corrido respecto de los otros (a $p = 0.225 \pm 0.015$), mostrando que no es un buen indicador del punto crítico. Finalmente, podemos ver que cuando ajustamos la distribución de fragmentos a una ley de potencias con dos parámetros independientes, el exponente τ_{eff} es mínimo a $p = 0.24 \pm 0.01$, ligeramente corrido de las otras señales (aunque se superponen las barras de error) y con un mínimo menos pronunciado que cuando se ajusta el espectro de masas con τ y $q_0(\tau)$ (mínimo χ^2).

Para la red mas chica ($6 \times 6 \times 6$) (circulos vacios en la Fig.3.1) vemos que los extremos de las señales analizadas concuerdan aunque con menos precisión que en la red grande, aún para el caso de la entropía de información. El BPF es a $p = 0.31 \pm 0.01$ [Fig.3.1(c)], el NVM es máximo a $p = 0.30 \pm 0.01$ [Fig.3.1(a)], el M_2 a $p = 0.29 \pm 0.01$ [Fig.3.1(b)] y $S_1(p)$ a $p = 0.27 \pm 0.05$ [Fig.3.1(e)].

Como se puede ver, cuando el sistema es pequeño, los efectos de tamaño finito pueden introducir distorsiones y desdibujar ligeramente los indicios de comportamiento crítico. Sin embargo, cantidades como NVM, M_2 y χ^2 se muestran como robustos indicadores aún en sistemas de tamaños tan pequeños. No es el caso de la entropía de información S_1, para la cual su máximo se muestra corrido y mas disperso, aún para la red grande.

Para profundizar en la comprensión del comportamiento de la entropía de información en esta clase de sistemas, se ha elegido generar una familia de distribuciones de fragmentos de acuerdo a la ecuación (3.1), con los exponentes críticos correspondientes a percolación en una red infinita tridimensional [68]. La constante de normalización q_0 es tomada como la inversa de la función ζ de Riemann evaluada en $\tau = 2.18$ de acuerdo a la Eq.(2.73) y la función de escala la tomamos del ajuste realizado en Ref.([49]) como la combinación de dos gaussianas. También se eligió $p_c = 0.25$ que es el valor correspondiente a la red infinita. Estas distribuciones de clusters tienen la misma forma funcional que las correspondientes al problema de percolación pero sin el cluster percolante y sin efectos de tamaño finito.

La entropía de información puede ser calculada si reemplazamos la expresión de $n_A(p)$ en la definición de entropía [Eq.(3.4)] de acuerdo a su expresión en la ecuación (3.1). Los resultados de estos cálculos son mostrados en la Fig.[3.2(c)] y podemos ver que el máximo en la entropía no corresponde a una distribución de ley de potencias "pura"($p_c = 0.25$ en este caso) como fue propuesto en Ref.([60]) sino a la distribución correspondiente a $p = 0.22$ mostrada en la Fig.[3.2(d)]. Podemos corroborar estos resultados si calculamos la derivada de S_1 respecto de $\epsilon = (p - p_c)/p_c$:

$$\frac{dS_1}{d\epsilon} = q_0^2 \sum_{s_1 s_2} s_1^{(-\tau)} s_2^{(-\tau)} s_1^{\sigma} f'(s_1, \epsilon) f(s_2, \epsilon) log[(s_1^{-\tau} f(s_1, \tau))/(s_2^{-\tau} f(s_2, \tau))], \tag{3.6}$$

con $f(s,\epsilon) = f(z)$ (la función de escala) y $f'(z) = \frac{df}{dz}$. Si evaluamos la Eq.(3.6) en el punto crítico, esto es, en $\epsilon = 0$, obtenemos

$$\left(\frac{dS_1}{d\epsilon}\right)_{\epsilon=0} = \frac{\tau}{\zeta^2(\tau)} f'(0) \sum_{s_1 s_2} s_1^{\sigma} s_1^{(-\tau)} s_2^{(-\tau)} [log(s_1) - log(s_2)] \simeq -1.6. \quad (3.7)$$

Es muy claro de esta expresión que la entropía de información no exhibe un extremo en el punto crítico para esta familia de funciones y por lo tanto, S_1 no es un indicador de comportamiento crítico.

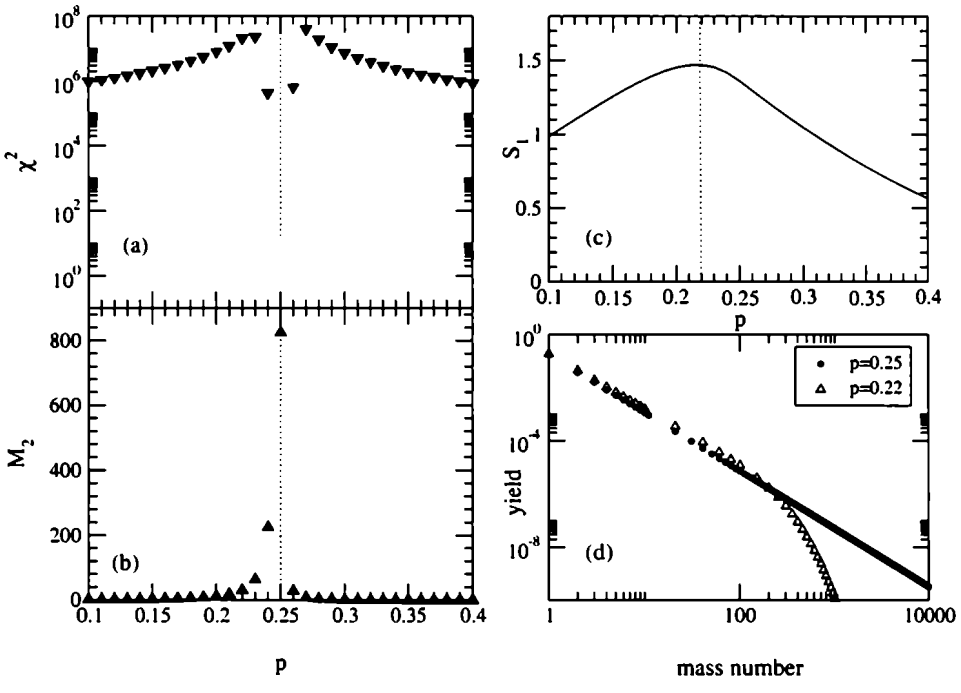

Figura 3.2: El coeficiente χ^2 (a) y M_2 (b) como función de la distribución de clusters generada a partir de la Eq.(3.1) usando la función de escala fiteada obtenida en Ref.[12]. En (c) graficamos la entropía de información calculada mediante el reemplazo de la distribución de clusters dada por la Eq.(3.1) en la de finición de entropía [Eq.3.4]. En (d) observamos dos distribuciones de fragmentos para distintas probabilidades p: la correspondiente a la probabilidad crítica ($p = 0.25$) y la que maximiza la entropía de información ($p = 0.22$). Se observa claramente que la distribución que maximiza la entropía no es una ley de potencias.

Ahora usamos estas distribuciones para analizar el comportamiento de otros indicadores, como el M_2 y la distribución BPF. En la Fig.[3.2(a)] se ha graficado el coeficiente χ^2 como función de la probabilidad para la distribución mejor ajustada por una ley de potencias con un solo parámetro libre [$q_0 = q_0(\tau)$

via la Eq.(2.73)] y en la Fig.[3.2(b)], el segundo momento de la distribución de clusters, M_2. Puede observarse que estan magnitudes son indicadores muy precisos del punto crítico para esta familia de funciones.

3.3 Cálculos de exponentes críticos.

Vimos en la sección (2.4) que los momentos de la distribución de racimos se comportan como leyes de potencia de la distancia relativa al punto crítico y que los exponentes que caracterizan dichas leyes de potencia se llaman *críticos*. También la ley de escalas dada por la Eq.(3.1) se expresa en términos de dos exponentes críticos: τ y σ.

En esta sección calcularemos, además de τ y σ, dos exponentes críticos relacionados a los momentos de la distribución: γ y β [Eqs.(2.77) y (2.78)]. En un sistema infinito, los últimos dos exponentes están definidos en el límite $\epsilon \longrightarrow 0$.

Para un sistema finito, al transformarse las divergencias de los momentos en máximos, las leyes de potencia que definen los exponentes críticos valen para valores de ϵ cercanos a 0, pero no en el límite $\epsilon \longrightarrow 0$. Así mismo, la ley de escalas [Eq.(3.1)] solo es válida en un rango determinado de masas, que es tanto mas grande cuanto mas grande sea la red. En todos los casos, los exponentes críticos en un sistema finito están bien definidos en aquella región donde el sistema refleja el comportamiento del sistema infinito.

- τ

  El exponente τ se obtiene al buscar la distribución de fragmentos que mejor es ajustada con una ley de potencias. La forma correcta de hacerlo es teniendo en cuenta que la normalización impone la dependencia $q_0 = q_0(\tau)$ de acuerdo a la Eq.(2.73) como hemos visto en la sección anterior. El exponente obtenido es $\tau = 2.20 \pm 0.02$ en ambos casos. Las regiones de ajuste fueron $2 < A < 35$ para $6 \times 6 \times 6$ y $4 < A < 300$ para $30 \times 30 \times 30$. Las distribuciones mejor ajustadas y sus correspondientes leyes de potencia se observan en la Fig.[3.3(a)].

- σ

  Hemos visto en la sección (2.4) [Eq.(2.69)] que el argumento de la función de escala z puede expresarse en términos de σ como

$$z = A^{\sigma}\epsilon. \tag{3.8}$$

  Tomando en cuenta que $f(z)$ tiene un solo máximo [Ver Sec.(2.4)] [7], es posible calcular σ en términos de la probabilidad p buscando el valor de ϵ (ϵ_{max}) que maximiza la producción de clusters de un dado tamaño A:

$$n_A^{max}(\epsilon_{max}) = q_0 A^{-\tau} f(z_{max}), \tag{3.9}$$

donde el argumento de f es $z_{max} = A^{\sigma}\epsilon_{max}$. Esto puede ser reescrito como:

$$\epsilon_{max} = z_{max}A^{-\sigma}. \tag{3.10}$$

Por lo tanto, graficando ϵ_{max} como función de A, se obtiene σ y z_{max} [53, 61]. Este gráfico, así como su mejor ajuste se muestran en la Fig.[3.3(b)], de donde obtenemos $\sigma = 0.50 \pm 0.07$ para $6 \times 6 \times 6$ y $\sigma = 0.48 \pm 0.05$ para $30 \times 30 \times 30$.

- γ

El exponente γ es el que describe el comportamiento del segundo momento de la distribución en las cercanías del punto crítico. Un punto clave en la determinación de este exponente es encontrar la región de ϵ donde la Eq.(2.78) es válida (en este caso, el fragmento mas grande es removido para $p > p_c$). El método usado para calcular γ , denominado "γ-matching"[53], hace uso que γ debe valer lo mismo a ambos lados del punto crítico y consiste en buscar por las regiones de ϵ donde esto se cumple. El procedimiento es el siguiente: primero, tomamos el valor de p_c del rango dado por las señales analizadas en la sección anterior. Luego determinamos dos regiones de fiteo, una para $p < p_c$ ($\epsilon < 0$, $[\epsilon_-^{min} : \epsilon_-^{max}]$) y la otra para $p > p_c$ ($\epsilon > 0, [\epsilon_+^{min} : \epsilon_+^{max}]$). En cada una de estas regiones, ajustamos $M_2(p)$ a una ley de potencias y guardamos los exponentes γ_- y γ_+ y sus correspondientes coeficientes χ_-^2 y χ_+^2 (que miden la calidad del ajuste) para $p < p_c$ y $p > p_c$ respectivamente. Para cada valor de p_c realizamos una gran cantidad de ajustes en un amplio rango de regiones de ϵ y elegimos los exponentes γ_+ and γ_- que satisfacen dos condiciones: que coincidan ambos dentro del error dado por la rutina de ajuste y que sus χ^2 se encuentre dentro del 20% mas bajo de la distribución. Los valores que satisfacen estos criterios fueron distribuidos en un histograma. De aquí extrajimos el valor promedio ($< \gamma >$) y su varianza (σ_γ). Los valores obtenidos son $\gamma = 1.85 \pm 0.20$ para $6 \times 6 \times 6$ y $\gamma = 1.82 \pm 0.13$ para $30 \times 30 \times 30$. El gráfico de M_2 como función de ϵ para ambos tamaños y sus ajustes se observa en la Fig.[3.3(c)]. Es interesante observar como ambos se superponen en la región de validez de la Eq.(2.78) ($M_2 \propto \epsilon^{-\gamma}$).

- β

El exponente β describe el comportamiento del parámetro de orden. En este caso es la fracción de nodos que pertenecen al racimo percolante, P_∞, y es el que domina el primer momento de la distribución de racimos para $p > p_c$. De acuerdo a la Eq.(2.77) la parte singular de M_1 es entonces $P_\infty = A_{max}/A_{tot}$ (donde A_{max} es el tamaño del racimo mas grande y A_{tot} la cantidad total de puntos de la red) y esperamos que se comporte como

$$(A_{\max}/A_{tot}) \propto \epsilon^{\beta}, \ \epsilon < 0, \tag{3.11}$$

para la misma región de ϵ donde el M_2 puede ser descripto en términos de γ. En la Fig.[3.3(d)] observamos el comportamiento de A_{max}/A_{tot} en función de ϵ. Los valores obtenidos son $\beta = 0.30 \pm 0.08$ para $6\times6\times6$ y $\beta = 0.39 \pm 0.04$ para $30\times30\times30$. Aquí se observa cuan relevante es el tamaño del sistema para calcular este exponente. Al estar asociado β al tamaño del fragmento mas grande, las limitaciones de tamaño impuestas por el sistema mas chico hace que el valor obtenido en ese caso esté subvaluado respecto al esperado según la clase de universalidad de Percolación en 3D.

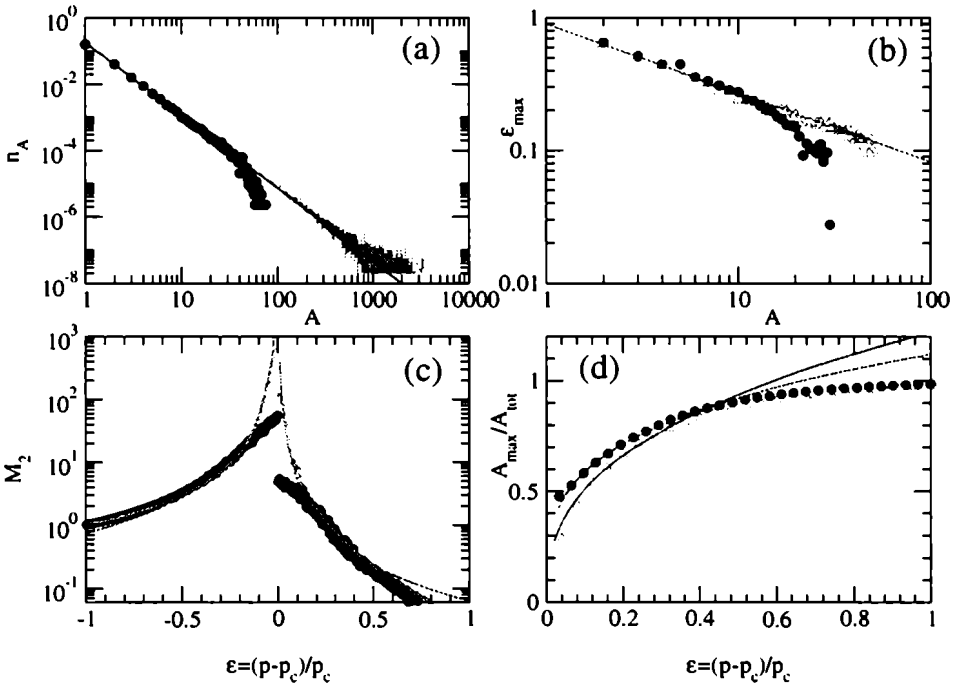

Figura 3.3: Cálculo de los exponentes críticos τ (a), σ (b), γ (c) y β (d), para los dos tamaños de red analizados: $6 \times 6 \times 6$ (negro) y $30 \times 30 \times 30$ (verde). En (a) graficamos la distribución de de racimos, n_A, como función de su tamaño para las probabilidades críticas ($p_c = 0.31$ en negro y $p_c = 0.25$ en verde) junto con el mejor ajuste. En (b) graficamos el valor de ϵ_{max} (definido en el texto) como función de A. En (c) el segundo momento de la distribución, M_2, como función de ϵ y en (d) el tamaño del máximo fragmento normalizado al tamaño del sistema, A_{max}/A_{tot}, también como función de ϵ.

3.4 Funciones de escala

Hasta ahora hemos probado la hipótesis de escala dada por la Ec.(3.1) a través del comportamiento de los momentos de la distribución, mediante el ajuste a

una ley de potencias para calcular τ o cuando calculamos σ. Sin embargo, es posible probarla también probar la hipótesis de escala de una manera mas directa.

Hemos visto en la sección 2.4 que, en general, no se conoce una expresión analítica para la función de escala $f(z)$. Sin embargo, si reescribimos la Ec.(3.1) como

$$\frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)} = f(A^\sigma\epsilon), \tag{3.12}$$

puede observase que si efectivamente los fragmentos siguen la ley de escala mencionada, el gráfico de $y = \frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $x = A^\sigma\epsilon$ deberían colapsar sobre una sola curva que sería $f(z)$.

Dado que tenemos las distribuciones de racimos $n_A(p)$ es posible realizar ese gráfico dado que conocemos el resto de los parámetros que entran en la ecuación pues los obtuvimos en las secciones precedentes: τ, $q_0(\tau)$, σ y p_c.

En la Fig.(3.4) observamos los gráficos de $y = \frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $x = A^\sigma\epsilon$ para ambos tamaños de red. Es notable como los puntos colapsan sobre una sola curva para los valores de p_c, τ y σ calculados mas arriba.

3.5 Conclusiones

En este capítulo se han analizado distintas cantidades propuestas en la literatura como indicadores de comportamiento crítico; (i) S_1, (ii) NVM, (iii) M_2, (iv) el mejor ajuste a una ley de potencias con un solo parámetro (BPF) y (v) el mínimo τ. Hemos visto que el máximo de S_1 no es un indicador de comportamiento crítico como fue propuesto en Ref.([60]) si las distribuciones de fragmentos siguen la ley de escalas propuesta en la Eq.(3.1). El ancho máximo de S_1 en la red de $6 \times 6 \times 6$ puede pensarse como efectos de tamaño finito si no se observara que también es ancho y además esta corrido en la red de $30 \times 30 \times 30$ [Ver Fig.(3.1)] donde las otras señales son mucho mas agudas y coinciden entre sí. En el mismo sentido, el método de encontrar la distribución mejor ajustada por una ley de potencias usando dos parámetros de ajuste (mediante la búsqueda del mínimo τ), tampoco es un método confiable para encontrar el punto crítico.

De acuerdo a los resultados obtenidos, se observó que el mejor ajuste a una ley de potencia con un solo parámetro (BPF), el NVM o el M_2 son excelentes indicadores de comportamiento crítico, aún en sistemas pequeños.

Asimismo, se han calculado cuatro exponentes críticos para ambos tamaños. Se observa que los valores obtenidos son similares en ambos casos salvo para β. Esto nos muestra que aún en un sistema cuyo tamaño sea del orden de 200 constituyentes, es posible extraer los exponentes críticos que caracterizan el fenómeno crítico de una red infinita tridimensional. En cuanto a la discrepancia encontrada en β, puede entenderse si se tiene en mente que es el exponente

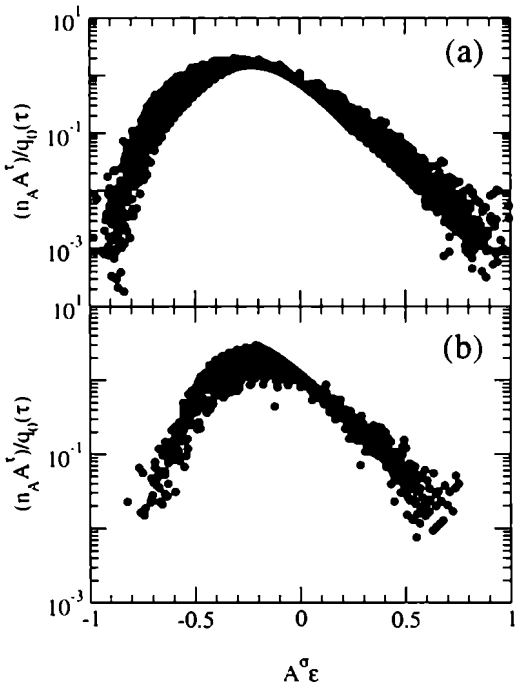

Figura 3.4: Función de escala obtenida mediante el colapso de los puntos sobre una sola curva al graficar $\frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $A^\sigma\epsilon$ a la probabilidad crítica para los dos tamaños analizados: $30 \times 30 \times 30$ (a) y $6 \times 6 \times 6$ (b).

asociado al crecimiento del máximo racimo y que por lo tanto es muy sensible a las limitaciones impuestas por el tamaño de la red.

Capítulo 4

Sistemas Libres

4.1 Introducción

A partir del experimento del grupo de Purdue [3], el proceso de expansión y fragmentación de gotas altamente excitadas se ha convertido en un tema de gran interés . En dicho experimento, espectros de masa resultantes de colisiones entre protones e iones pesados han sido ajustados con una ley de potencias dando lugar a la hipótesis de que el sistema está exhibiendo una transición de fase de segundo orden. Desde ese momento, numerosos trabajos tanto experimentales como numéricos [4, 14, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 54, 55] se han dedicado al tema usando distintas aproximaciones.

En este sentido, la posibilidad de que un sistema tan pequeño y en expansión exhiba una transición de fase, además de su interés desde el punto de vista nuclear, lo tiene desde la mecánica estadística.

Transiciones de fase del tipo líquido-gas son comunmente observadas en sistemas con fuerzas repulsivas en el corto rango y atractivas en un rango mas largo, como es el caso de los fluidos macroscopicos. Dado que la interacción nuclear exhibe estas mismas características, la ecuación de estado de la materia nuclear es parecida [69] a la de los gases no ideales, lo cual nos permite preveer la existencia de diferentes fases de la materia nuclear. De esta manera, estudiar el comportamiento de un sistema cuyo potencial tenga esas características nos permitirá conocer información relevante sobre la relación de la fragmentación nuclear con una posible transición de fase.

En este capítulo, plantearemos este problema desde un punto de vista clásico. Para esto, estudiaremos la evolución de gotas altamente excitadas usando el método de *dinámica molecular*. Las gotas estarán compuestas por partítulas que interactúan mediante un potencial de Lennard-Jones (L-J) truncado y corrido. Las gotas evolucionan desde su condición inicial rompiéndose en fragmentos de acuerdo a su energía inicial.

Dada su accesibilidad experimental, el análisis de este tipo de procesos se realiza principalmente mediante el análisis de las distribuciones asintóticas de fragmentos.

En este capítulo se analizarán entonces distintas señales de criticalidad así como también la extracción de exponentes críticos no solo a partir de las distribuciones de fragmentos asintóticos, sino también de las distribuciones obtenidas a tiempos mas tempranos (en particular, a tiempo de fragmentación). Estas últimas, solo son accesibles mediante simulaciones numéricas y si se usa para reconocerlas un algoritmo de reconocimiento de fragmentos apropiado. Esta información permitirá comparar los resultados asintóticos con el comportamiento del sistema a tiempo de fragmentación.

4.2 Modelo utilizado

Los sistemas a analizar son gotas altamente excitadas compuestas por 147 partículas que interactúan via un potencial de Lennard-Jones (L-J) truncado y corrido,

$$V(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} - \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^{12} + \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^{6} \right] & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c, \end{cases} \tag{4.1}$$

con $r_c = 3\sigma$ el radio de corte. La energía la medimos en unidades del pozo del potencial, ϵ y las distancias en unidades de σ, la distancia a la cual el potencial cambia de signo. El tiempo lo medimos en unidades de $t_0 = \sqrt{\sigma^2 m/48\epsilon}$. El conjunto de ecuaciones de movimiento se integraron usando el algoritmo de Verlet [70], que conserva volumenes en el espacio de fases, con un paso de integración de $\Delta t = 0.001 t_0$.

Los experimentos numéricos realizados consisten en preparar gotas a una dada energía y densidad y hacerla evolucionar resolviendo numéricamente las ecuaciones de movimiento (*dinámica molecular*). Las energías a las cuales las gotas son excitadas son tales que éstas no pueden permanecer autoconfinadas y se fragmentan. La forma en que se fragmentan depende de la energía depositada. Para energías relativamente bajas, la gota solo evapora pequeños racimos: mómeros o dímeros. Si en cambio la gota es altamente excitada, el sistema se rompe en pequeños fragmentos. Para alguna energía intermedia entre estos dos extremos, la distribución de fragmentos es del tipo ley de potencias.

En el rango de energías (E) en que toma lugar la fragmentación, generamos un gran número de gotas excitadas para distintos valores de E. Para cada energía, generamos 1000 eventos de manera de tener una buena estadística al elaborar las distribuciones de fragmentos. Los eventos son luego agrupados por su energía o por su multiplicidad (cantidad total de fragmentos producidos) [1]. Las condiciones iniciales las preparamos a partir de hacer evolucionar un sistema de 512 partículas con condiciones periódicas de contorno. De este sistema equilibrado y termalizado, recortamos gotas aproximadamente esféricas

[1] en experimentos de fragmentación, es usual tomar la multiplicidad como parámetro de control [61]. Esta elección es validada porque la multiplicidad es una función monótona de la energía, como se observa en la Fig.[4.5(d)]

de 147 partículas [71, 72].

4.3 Reconocimiento de Fragmentos

Uno de los ingredientes claves en el estudio numérico del proceso de fragmentación es la forma en la cual se reconocen los fragmentos. Existen diferentes definiciones de fragmentos que llevan a la implementación de distintos algoritmos para reconocerlos. El mas trivial es el provisto por el algoritmo MST [71, 72] (Minumum Spannig Tree), el cual define que dos partículas i y j pertenecen a un fragmento C si se satisface

$$i \in C \Longleftrightarrow \exists j \in C \ / \ r_{ij} \ \leq r_{cl} \tag{4.2}$$

donde r_{ij} es la distancia entre las partículas i y j, y r_{cl} es el radio de "clusterización", que en nuestro caso lo elegimos igual al rango del potencial r_c. Con esta definición, los fragmentos están definidos como los conjuntos de partículas que en un dado instante interactúan entre sí . Este algoritmo no toma en cuenta las correlaciones en el espacio de momentos, de manera que si dos partículas están a una distancia menor que r_c, pertenecerán al mismo fragmento aunque sus momentos sean tales que en el próximo instante estén separadas.

Existe otra manera de definir fragmentos que profundiza más en la naturaleza del fenómeno de fragmentación, pues toma en cuenta todas las correlaciones en el espacio de fases. En el "Early Cluster Formation Model"($ECFM$) [73], los fragmentos están asociados a las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases. En este caso, los fragmentos están dados por el conjunto de fragmentos $\{C_i\}$ para los cuales la suma de sus energías internas alcanza su valor mínimo:

$$\begin{aligned} \{C_i\} &= \min_{\{C_i\}}[E_{\{C_i\}} = \textstyle\sum_i E_{int}^{C_i}], \\ E_{int}^{C_i} &= \sum_i [\sum_{j \in C_i} K_j^{c.m.} + \sum_{j,k \in C_i j \leq k} V_{j,k}], \end{aligned} \tag{4.3}$$

donde la suma en la primera ecuación (4.3) es sobre todos los fragmentos de la partición, $K_j^{c.m.}$ es la energía cinética de la partícula j medida desde el centro de masas del fragmento que la contiene, y $V_{j,k}$ es la enrgía potencial entre entre dos partículas. El algoritmo que reconoce estos fragmentos, mediante un proceso tipo 'Simulated annealing', se denomina $ECRA$ (Early Cluster Recognition Algorithm) y los fragmentos reconocidos con él los llamamos *fragmentos* $ECRA$.

Los fragmentos asintóticos detectados por el algoritmo MST son observables. Por otro lado, los fragmentos $ECRA$, al estar definidos en el espacio de fases, son observables solo cuando gracias a la evolución temporal del sistema, coinciden con los MST. Para tiempos cortos suelen formar parte de fragmentos MST mas grandes. En trabajos anteriores [73, 72, 74] ha sido mostrado

que diferentes propiedades de los fragmentos $ECRA$, como por ejemplo el tamaño medio del fragmento mas grande, ($< MCM >$) o la multiplicidad promedio de fragmentos de masa intermedia (IMF) se hacen estables muy temprano en la evolución, mucho antes que los tiempos de estabilización de las mismas cantidades calculadas para los clusters MST. Esto se observa en la Fig.(4.1) donde ambas cantidades determinadas por los algoritmos $ECRA$ y MST se grafican como función del tiempo.

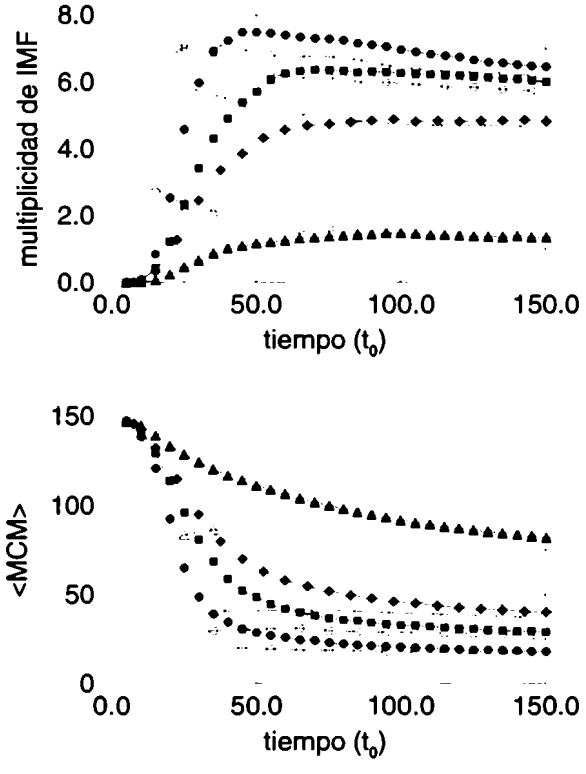

Figura 4.1: Multiplicidad de fragmentos de mas intermedia (IMF, panel superior) y tamaño medio del fragmento mas grande ($< MCM >$, panel inferior) como función del tiempo, obtenidos con el método $ECRA$ (simbolos vacios) y con el MST (simbolos llenos) para diferentes energías: $E = 1.8\epsilon$ (circulos), $E = 0.9\epsilon$ (cuadrados), $E = 0.5\epsilon$ (diamantess) y $E = -0.5\epsilon$ (triangulos)

Dado que ciertas propiedades de los fragmentos $ECRA$ alcanzan sus valores asintóticos a tiempos considerablemente mas tempranos, es posible definir un tiempo de formación de fragmentos (τ_{ff}) como el tiempo en el cual los fragmentos ECRA alcanzan estabilidad microscópica. Esto ocurre cuando estos fragmentos pasan de un régimen dominado por la fragmentación a otro dominado por la evaporación.

Para estimar cuantitativamente este tiempo de fragmentación τ_{ff} usamos la llamada persistencia de tiempos cortos (STP) mediante la cual calculamos la estabilidad de los fragmentos ECRA contra evaporación y coalescencia. La pesistencia se define de la siguiente manera: a un dado tiempo t analizamos

cada fragmento C_i^t de tamaño N_i^t buscando en todos los fragmentos C_j^{t+dt} presentes a tiempo $t + dt$ por el subset mas grande $N_{max}]_i^{t+dt}$ de partículas que pertenecen a C_i^t. Entonces se le asigna a este fragmento un valor $STP_d = (N_{max}]_i^{t+dt})/N_i^t$. Este término toma en cuenta los procesos de evaporación y fragmentación, pero por otro lado uno tiene que tener en cuenta los casos en los cuales el subset mas grande $N_{max}]_i^{t+dt}$ no constituye un cluster libre sino que forma parte de un fragmento mas grande de masa N_i^{t+dt}. Ese efecto se tiene en cuenta definiendo $STP_i = (N_{max}]_i^{t+dt})/N_i^{t+dt}$. De esta manera, la persistencia de tiempos cortos se expresa como:

$$STP(t, dt) = \left\langle \left\langle \frac{STP_d(t, dt) + STP_i(t, dt)}{2} \right\rangle_m \right\rangle_e , \tag{4.4}$$

donde $\langle ... \rangle_m$ es el promedio pesado con la masa sobre todos los fragmentos con $N > 3$, y $\langle ... \rangle_e$ es un promedio sobre un ensamble de eventos de fragmentación a una dada energía E o multiplicidad m. De esta definición se desprende que $STP \sim 1$ si las particiones analizadas permanecen prácticamente inalteradas durante dt y $STP \sim 0$ si todas las partículas que componen los fragmentos a tiempo t dejan de pertenecer a ellos a $t + dt$.

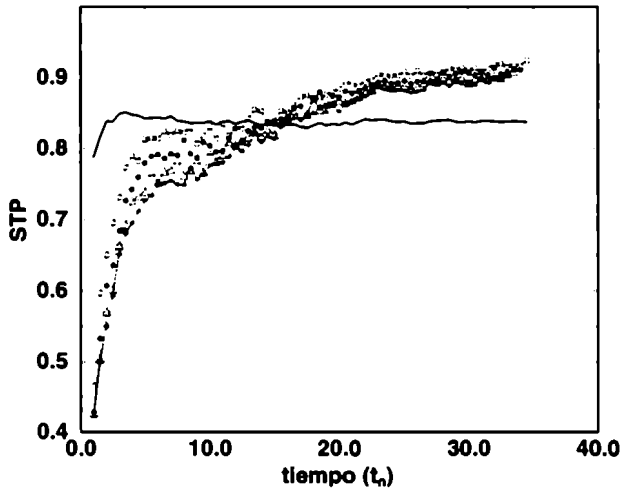

Figura 4.2: Persistencia de tiempos cortos (STP) como función del tiempo para cuatro valores distintos de dt (cuadrados vacios: $dt = 0.5t_0$, circulos llenos: $dt = 1t_0$), triangulos vacios: $dt = 1.5t_0$ y estrellas: $dt = 2t_0$

En la Fig.(4.2) se muestra un cálculo típico de esta magnitud para un caso muy energético, $E = 2.65\epsilon$, en donde el espectro de fragmentos es exponencialmente decreciente. En este figura puede verse $STP(t, dt)$ como función del tiempo t y para diferentes valores de dt, $dt = 0.5t_0, 1t_0., 1.5t_0, 2t_0$. La línea casi horizontal representa el valor de referencia del STP y corresponde al valor que alcanza dicha magnitud si los fragmentos solo sobrellevan un proceso de evaporación simple en ese instante. De esta manera, es posible decir que cuando STP cruce esta línea, el comportamiento del sistema está, en promedio,

cambiando de un regimen de fragmentación a otro de evaporación y llamamos a ese tiempo *tiempo de formacion de fragmentos* τ_{ff}. Usando este criterio, obtenemos escalas de tiempo que van desde $\tau_{ff} \sim 75t_0$ para $E = -0.5\epsilon$ hasta $\tau_{ff} \sim 10t_0$ para $E = 3.7\epsilon$.

Si trabajamos de la misma manera pero con los fragmentos obtenidos con el algoritmo MST obtenemos los tiempos a los cuales estos fragmentos, definidos en el espacio de las coordenadas (espacio q) y no en el espacio de fases, se hacen estables. En este caso al tiempo definido de la misma manera lo llamamos tiempo de emisión de fragmentos τ_{fe}. Estos tiempos son notoriamente mayores que los de formación de fragmentos (τ_{ff}) a las mismas energías, como puede verse por ejemplo para $E = -0.5\epsilon$ donde $\tau_{fe} = 100t_0$. Para nuestros cálculos tomamos como tiempo asintótico $\tau_a >> \tau_{fe}(E), \forall E$, esto es $\tau_a = 600t_0$.

Una vez determinado el tiempo de formación de fragmentos τ_{ff} y el tiempo asintótico τ_a, es posible calcular las correspondientes distribuciones de clusters ECRA a τ_{ff} y compararlas con sus correspondientes de clusters MST a τ_a. Los resultados de este cálculo se muestran en la figura (4.3). Allí se muestran tres espectros de masa típicos: con forma de U en la Fig.[4.3(a)], tipo ley de potencias en la Fig.[4.3(b)] y exponencial decreciente en Fig.[4.3(c)]. Los circulos llenos denotan las distribuciones $ECRA$ a τ_{ff} y los triangulos vacios las MST a τ_a. Es claro de estas figuras que las distribuciones son escencialmente las mismas.

La determinación del tiempo de formación de fragmentos también es importante para el cálculo de la temperatura en este tipo de sistemas en expansión [72]. A τ_{ff}, mas del 60% de las partículas están aún interactuando entre sí en un gran fragmento MST, pero el sistema como un todo está en expansión y por lo tanto fuera de equilibrio. Para obtener una estimación de la temperatura de un sistema como el decripto se ha propuesto en [72] descomponer al sistema en expansión en capas concéntricas y calcular la velocidad radial media de cada capa [2]. A partir de esto se introduce una *temperatura local* la cual es definida en términos de las fluctuaciones de la velocidad local de las partículas alrededor del movimiento colectivo de expansión a tiempo de fragmentación. Para la capa i-ésima, la temperatura local puede ser calculada como [72]:

$$T_{loc}^{(i)} = \frac{2}{3N_i(t)} K_{int}^{(i)} = \frac{2}{3N_i(t)} \sum_{j \in i} \frac{1}{2} m (v_j - v_{rad}^{(i)})^2 \tag{4.5}$$

donde $v_{rad}^{(i)}$ es la velocidad radial media y $N_i(t)$ el número total de partículas, ambas de la capa i. Promediando $T_{loc}^{(i)}$ sobre las capas centrales, donde se concentra la mayoría de la masa, se obtiene la correspondiente temperatura local T_{loc}. De este modo se puede calcular la curva calórica, definida la relación funcional entre la temperatura local del sistema y la energía de excitación, a tiempo de fragmentación τ_{ff}.

[2] en [72] se encontró que la velocidad media de cada capa es aproximadamente lineal con la distancia al centro de masas del sistema y es además una función creciente de la energía.

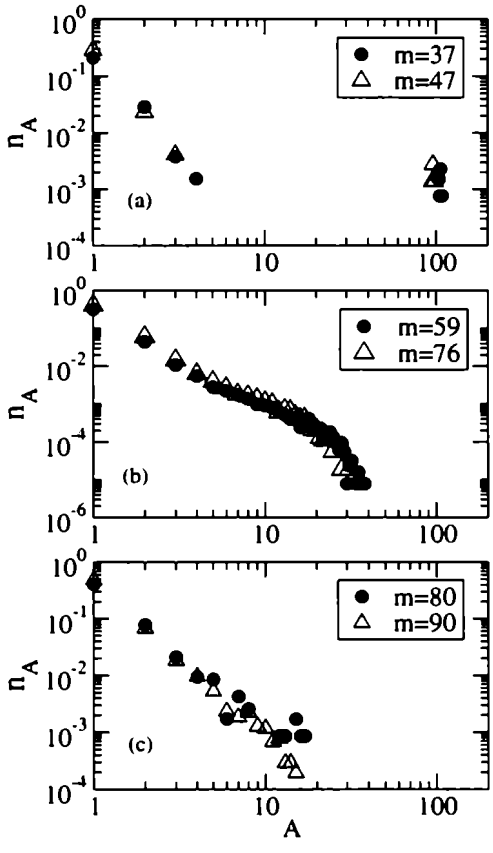

Figura 4.3: Tres típicas distribuciones de fragmentos (n_A: número de fragmentos promedio de tamaño A dividido el número total de partículas) correspondientes a tres valores de energía de excitación distintas y clasificados por sus valores de multiplicidad. Los circulos negros corresponden a distribuciones de fragmentos $ECRA$ a τ_{ff} y los triangulos vacios a las de clusters MST a tiempos asintóticos. Los valores de m indican la multiplicidad de los espectros de masa correspondientes. En (a) se muestra una distribuci'on en forma de U (baja energía de excitación), en (b) una del tipo 'ley de potencias' y en (c) exponenciales decrecientes (altas energías de excitacion).

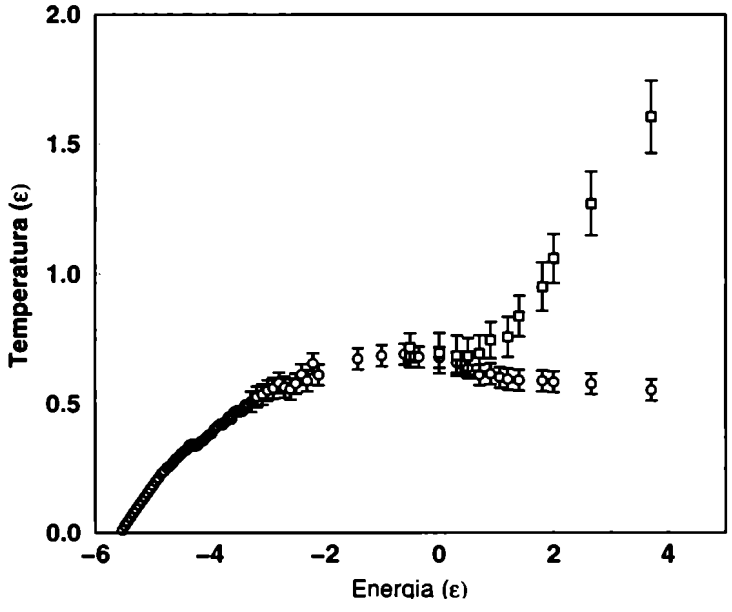

Figura 4.4: Temperatura del sistema como función de la energía de excitación (Curva calórica, circulos) y una falsa temperatura calculada con la energía cinética totalincluyendo la energía cinética del movimiento colectivo (cuadrados)

La curva calórica resultante se muestra en la Fig.(4.4). En esta figura, los circulos denotan la temperatura del sistema a τ_{ff} de acuerdo a la definición de la Ec.(4.5) como función de la energía. Puede observarse que la misma muestra una rama creciente (correspondiente a los regimenes sólido y líquido) seguida por una meseta o 'plateau', pero no muestra una rama de vapor como se esperaría en una transición líquido-gas tradicional (otra rama creciente después de la meseta). En la misma figura, mostramos una curva denotada por cuadrados. Esta es calculada usando la energía cinética total de la capa i, $K^i_{tot} = K^i_{int} + K^i_{coll}$, en lugar de la energía interna de la capa K^i_{int} en la Ec.(4.5). Obviamente, esto no es una temperatura, solo una fracción de la energía cinética total que incluye un modo colectivo. De la comparación entra ambas curvas se ve claramente que el movimiento colectivo comienza a ser importante cerca de $E = 0.0\epsilon$ y se hace dominante para energías mayores a $E = 1.0\epsilon$. La ausencia de una rama de vapor puede entenderse si se tiene en cuenta que el movimiento colectivo actúa como un mecanismo de enfriamiento que previene que el sistema alcance temperaturas por encima de cierto valor límite. Es importante notar también que esta curva calórica tiene una región en la cual la función de respuesta térmica (TRF), definida como

$$TRF = (dT/dE)^{-1} \tag{4.6}$$

es negativa. Los detalles de este cálculo pueden verse en [75].

4.4 Señales de criticalidad y su persistencia en el tiempo

Hemos visto en el capítulo 2 que cerca del punto crítico el comportamiento del sistema puede ser descripto en términos de leyes de escala. En dicho capítulo, vimos dos modelos (FDM y Percolación) en los cuales las distribuciones de fragmentos siguen leyes de escala que difieren principalmente debido a la presencia del potencial químico [Ecs. (2.51) y (2.69)] respectivamente. Sin embargo, las leyes de escala son similares si en el FDM nos restringimos a la curva de coesxistencia y la única diferencia es en asumir o no una forma explícita para la función de escala $f(z)$. Para analizar las distribuciones de fragmentos generadas a partir de los experimentos numéricos usaremos entonces una ley de escala:

$$n_A(\epsilon) = q_0 A^{-\tau} f(z), \tag{4.7}$$

$$z = A^{\sigma}\epsilon. \tag{4.8}$$

La distancia al punto crítico puede expresarse, además de las maneras usuales explicadas en capítulos anteriores, en términos de la multiplicidad: $\epsilon = (m_c - m)/m_c$ [61]. En el punto crítico, $\epsilon = 0$ y como hemos visto, la distribución de fragmentos sigue una ley de potencias

$$n_A = q_0 A^{-\tau}, \tag{4.9}$$

con $q_0 = q_0(\tau)$ via la función zeta de Riemann ζ como se mostro en la ecuación (2.73).

Dadas entonces las distribuciones de fragmentos a τ_{ff} y a τ_a, se buscará señales de comportamiento crítico usando el modelo explicitado arriba.

Es sabido que cuando un sistema infinito está en el punto crítico, ciertas magnitudes divergen. Sin embargo, en un sistema finito las divergencias se transforman en máximos y podemos usar estos máximos como indicadores del punto crítico. Como se vió en Cap.3, el punto crítico puede ser ubicado por los máximos del segundo momento de la distribución, M_2 y de las fluctuaciones normalizadas del fragmento mas grande (NVM).

La dependencia de estas magnitudes con la multiplicidad se muestra en la Fig.(4.5) para los dos tiempos analizados: τ_{ff} y τ_a. Se observa del gráfico que ambos observables tienen su máximo para, escencialmente, el mismo valor de multiplicidad para cada uno de los tiempos analizados. A τ_{ff}, el NVM tiene un pico en $m = 60 \pm 1$ [Fig.(4.5a)] y el M_2 en $m = 65 \pm 4$ [Fig.(4.5b)] (triangulos negros en ambos casos), mientras que a tiempos asintóticos estas magnitudes tienen sus máximos en $m = 73 \pm 1$ [Fig.(4.5a)] y $m = 77 \pm 3$ [Fig.(4.5b)] respectivamente (triangulos blancos). Los valores mayores en la

multiplicidad observados a tiempos asintóticos puede entenderse por el proceso de evaporación que sobrellevan los fragmentos y que incrementa la cantidad de monómeros y dímeros en las distribuciones. Si solo consideramos fragmentos de masa mayor que 2, ambas magnitudes (M_2 y NVM) se pican en el mismo valor de multiplicidad m. Estos resultados son compatibles con la presencia de comportamiento crítico.

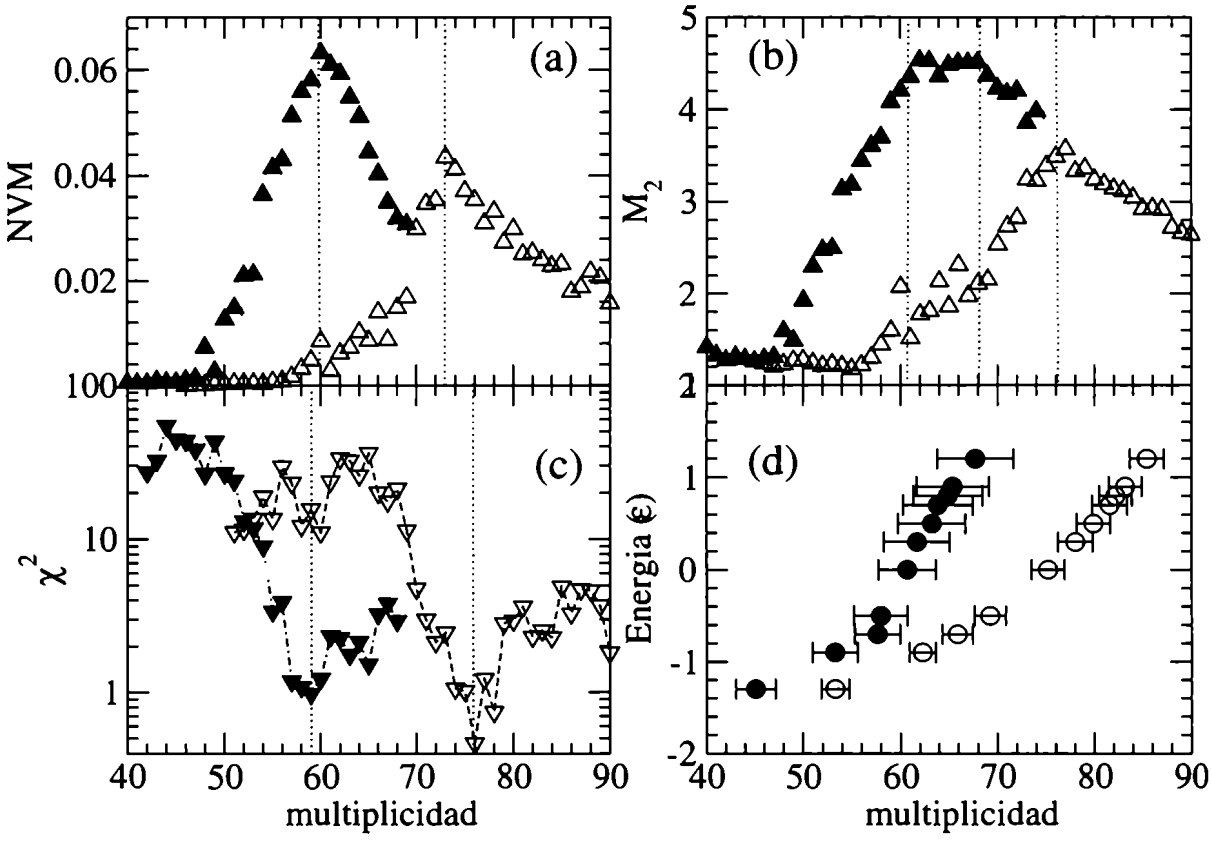

Figura 4.5: Fluctuaciones normalizadas del tamaño del máximo fragmento (NVM) (a); segundo momento de la distribución defragmentos (M_2) (b); y el mejor ajuste a una ley de potencias [con $q_0 = q_0(\tau)$ via la ecuación (2.73)] como función de la multiplicidad para el tiempo de fragmentación τ_{ff} (triangulos llenos) y para tiempos asintóticos τ_a (triangulos vacios) (c). En (d) podemos ver la multiplicidad promedio y su desviación standard en función del a energía para τ_{ff} (circulos llenos) y τ_a (circulos vacios) [76].

Como se vió en el Cap.3, el punto crítico puede estimarse también buscando aquella energía para la cual la distribución de fragmentos es mejor ajustada por una ley de potencias de acuerdo a la ecuación (4.9) (BPF), en la cual $q_0 = q_0(\tau)$ [ecuación (2.73)] como se detalló en el Cap.3 . En este caso, la distribución BPF es aquella que corresponde a la multiplicidad crítica. La calidad del procedimiento de ajuste es medida con el coeficiente usual χ^2 (y por lo tanto, un mínimo en χ^2 corresponderá al mejor ajuste).

El ajuste se realizó en un rango de masas $0.02A_{tot} < A < 0.15A_{tot}$ para evitar efectos de tamaño finito. En la Fig.[4.5(c)] podemos ver el coeficiente de la distribución BPF, χ^2, como función de la multiplicidad calculada a

τ_{ff} (triangulos llenos) y a τ_a (triangulos vacios). El mínimo de χ_2 señala la distribución BPF y, por lo tanto, la multiplicidad crítica: $m_c = 59 \pm 2$ para τ_{ff} y $m_c = 76 \pm 2$ para τ_a (Los valores obtenidos de τ se mostrarán el el próximo capítulo). Estos resultados concuerdan muy bien con los obtenidos con NVM y M_2.

La relación entre multiplicidad y energía del sistema está graficada en Fig.[4.5(d)]. Podemos ver en el mismo que las multiplicidades críticas corresponden principalmente a energías alrededor de $E = 0.3\epsilon$, energía para la cual el movimiento colectivo comienza a ser notable [ver figura (4.5)]. Puede observarse, además, una correpondencia $1 : 1$ entre la energía y la multiplicidad que además es lineal para $m > m_c$. Esta característica sostiene el uso de la multiplicidad como parámetro de control en nuestros experimentos numéricos. Un comportamiento similar fue observado también en percolación entre la multiplicidad m y la probabilidad p [49].

Todas estas señales muestran fuertes evidencias de comportamiento crítico a tiempos asintóticos (cuando los fragmentos son experimentalmente accesibles) que se corresponden con las halladas a tiempos de formación de fragmentos (cuando éstos están aún interactuando y son reconocidos por el algoritmo $ECRA$). De esta manera mostramos que las señales de criticalidad asintótica reflejan apropiadamente el comportamiento del sistema a tiempos de fragmentación.

4.5 Exponentes críticos

En esta sección se mostrará el cálculo de cuatro exponentes críticos: τ, γ, σ y β a tiempos de formación de fragmentos (τ_{ff}) y a tiempos asintóticos (τ_a).

Los métodos utilizados para obtener estos exponentes son los mismos descriptos en el Cap.3.

Si ajustamos las distribuciones de fragmentos a una ley de potencias en le rango de masa explicitado en la sección anterior obtenemos $\tau = 2.18 \pm 0.03$ para ambos tiempos, τ_{ff} y τ_a. El fragmento mas grande de cada evento fue excluido al generar la distribución de fragmentos a una dada multiplicidad [61]. Se ha encontrado que el valor resultante de τ no depende del rango de fiteo siempre y cuando nos circunscribamos a $0.02A_{tot} < A < 0.15A_{tot}$, donde los efectos de tamaño finitos son despreciables. Las distribuciones de fragmentos a la multiplicidad crítica y sus correspondientes fiteos se muestran en la figura [4.6(a)] para τ_{ff} y en la [4.7(a)] para τ_a.

El exponente σ se obtiene [Ver Cap.(3)] a partir del argumento de la función de escala [Eq.(4.8)] teniendo en cuenta que $f(z)$ tiene un solo máximo y buscando el valor de ϵ (ϵ_{max}) que maximiza la producción de clusters de un dado tamaño A:

$$\epsilon_{max} = z_{max} A^{-\sigma}. \tag{4.10}$$

Si graficamos ϵ_{max} como función de A, podemos obtener σ si ajustamos con

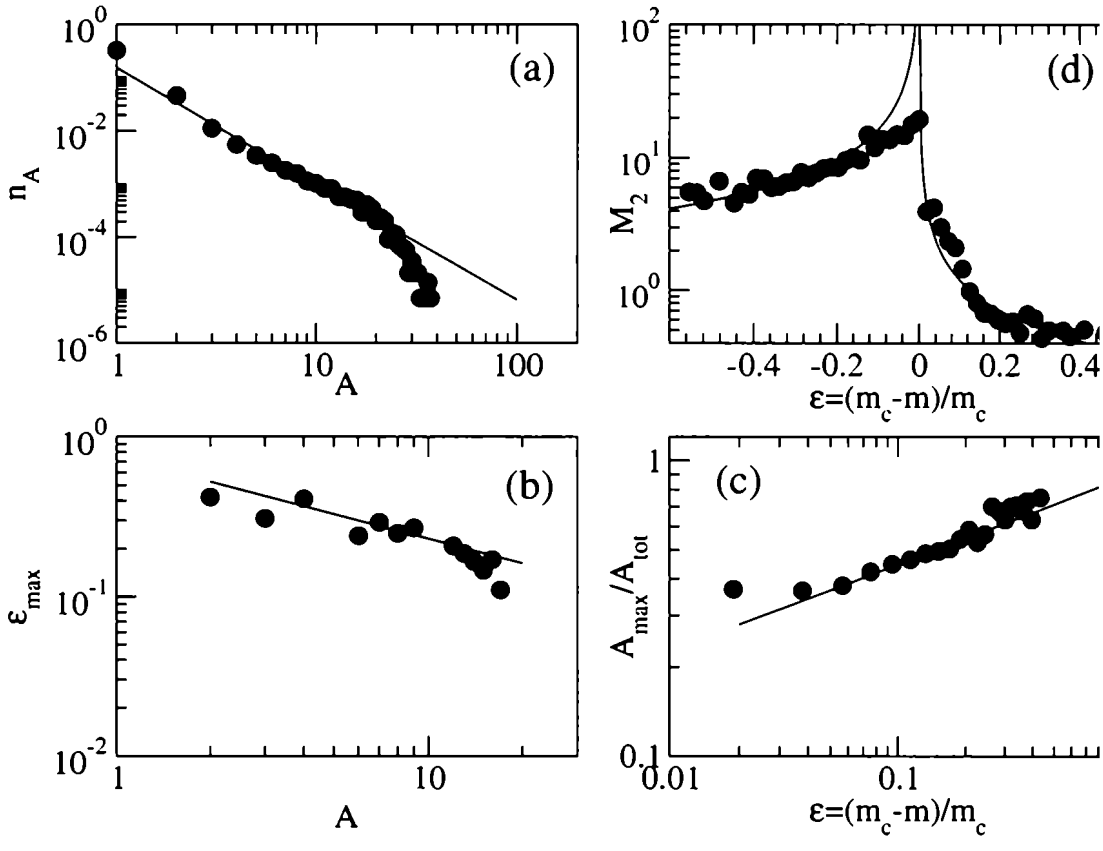

Figura 4.6: Exponentes críticos a τ_{ff}: τ (a), σ (b), β (c) y γ (d). En (a) se grafica el numero de fragmentos por partícula $n(A)$ como función del número de integrantes de cada fragmento (masa) A y su mejor ajuste (linea llena). En (b) graficamos el valor de ϵ_{max} (definido en el texto) como función de A y su mejor fiteo (linea llena). En (c) se muestra la masa del fragmento mas grande normalizada al tamaño del sistema (A_{max}/A_{tot}) como función de $\epsilon = \frac{m_c - m}{m_c}$ y el mejor ajuste que provee el valor de β. En (d) se grafica el valor de M_2 como función de ϵ y la curva con el valor de γ obtenido mediante el procedimiento de ajuste explicado en el texto [76].

una ley de potencias [53, 61]. Los resultados obtenidos son $\sigma = 0.51 \pm 0.15$ para τ_{ff} y $\sigma = 0.64 \pm 0.18$ para τ_a y se muestran en la Fig.[4.6(b)] y Fig.[4.7(b)] respectivamente. Puede verse que los valores de τ y σ medidos a tiempos asintóticos concuerdan bastante bien con los valores obtenidos a tiempos de fragmentación, aunque las barras de error en el caso de σ son algo grandes.

Además de estos dos exponentes, calculamos también β, el exponente relacionado al comportamiento de la masa del fragmento mas grande normalizado al tamaño del sistema, A_{max}/A_{tot} como se mostró en la Eq.(3.11).

Los gráficos de (A_{max}/A_{tot}) vs ϵ se muestran en las Fig.[4.6(c)] para τ_{ff} y Fig.[4.7(c)] para τ_a. Los valores obtenidos de β son 0.29 ± 0.08 y 0.28 ± 0.13 respectivamente. Estos valores son cercanos a 0.31, el valor correspondiente a la transición líquido-gas [clase de universalidad 3D-Ising], y están alejados del valor correspondiente a percolación (0.45). No obstante, hemos visto en el Cap.3 el tamaño del sistema es responsable de los grandes errores en β y de una posible subvaluación del exponente, como fue notado también en [77].

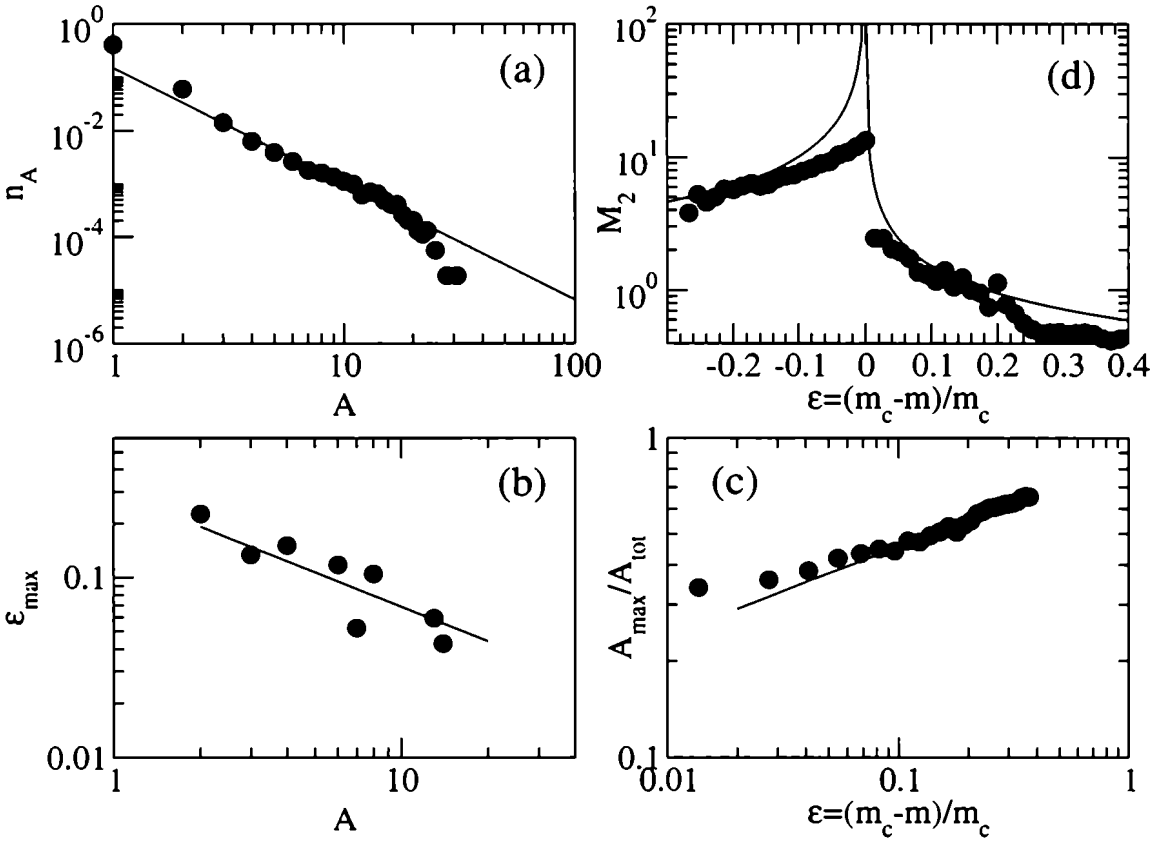

Figura 4.7: El mismo dibujo que en la figura (4.6) pero a τ_a [76].

Para determinar el exponente γ tomamos en cuenta que cuando el sistema se acerca al punto crítico, el segundo momento de la distribución crece como una potencia de la distancia relativa al punto crítico. El exponente que describe este comportamiento es γ y un método para calcularlo, denominado 'γ-matching', fue explicado en el Cap.3.

Siguiendo dicho método obtenemos $\gamma = 0.77 \pm 0.25$ a τ_{ff} y $\gamma = 0.72 \pm 0.33$ a τ_a. Los resultados obtenidos se pueden ver en las Fig.[4.6(d)] y Fig.[4.7(d)] para τ_{ff} y τ_a respectivamente. Se observa inmediatamante que el valor de γ es mas chico que el esperado para la clase de universalidad 3D-Ising, pero está definitivamente alejado del valor de percolación (ver tabla 4.5).

Tabla 4.1: Exponentes críticos calculados a tiempo de τ_{ff} y a τ_a, y los correspondientes a las clases de universalidad 3DIsing (liquido-gas) y Percolación [16, 20, 76]

Exponents	τ_{ff}	τ_a	3D-Ising	Percolation
τ	2.18 ± 0.03	2.18 ± 0.03	2.21	2.18
σ	0.51 ± 0.15	0.64 ± 0.18	0.64	0.45
β	0.29 ± 0.08	0.28 ± 0.13	0.33	0.41
γ	0.77 ± 0.25	0.72 ± 0.33	1.23	1.82

En la tabla (4.5) podemos ver los valores de los exponentes críticos calculados a tiempo de fragmentación (τ_{ff}) y a tiempos asintóticos (τ_a). Ademas mostramos los valores estos exponentes para dos clases de universalidad diferentes, 3D-Ising (transición líquido-gas) y percolación. Observando esta tabla, podemos decir lo siguiente:

1. El tiempo de evolución posterior al tiempo de fragmentación no altera significativamente los valores de los exponentes críticos, esto es, los valores obtenidos a tiempos asintóticos caracterizan apropiadamente el proceso de fragmentación, lo cual es consistente con la definición de τ_{ff}.

2. Los exponentes obtenidos no pertenecen a ninguna de las clases de universalidad mostradas (3D-Ising y Percolación 3D), debido fundamentalmente al bajo valor de γ, aunque tienen valores mas cercanos a la clase de universalidad 3D-Ising (a la cual pertenece la transición líquido-gas). Esto estaría relacionado a que el sistema no alcanza el equilibrio durante su evolución [aunque si alcanza cierto grado de equilibrio local [75]]. De hecho veremos en el Cap.5 que si al mismo sistema se lo confina dentro de un volumen permitiéndole alcanzar el equilibrio, se obtienen valores de γ compatibles con 3D-Ising para determinados valores de densidad.

3. Dado la pequeñez del sistema, los errores en los valores de los exponentes obtenidos (salvo en τ) son considerables. En el Cap.3 vimos como para la red percolante de 216 integrantes, los errores son casi tan grandes como en este caso y además, como disminuyen cuando la red tiene 27000 puntos.

4.6 Funciones de escala y su persistencia en el tiempo

Los cálculos hechos hasta ahora muestran fuertes evidencias que el proceso de fragmentación analizado es un fenómeno crítico. Una forma mas de probar la hipótesis que nuestras distribuciones de fragmentos están bien descriptas por la ley de escala dada por la Eq.(4.7) es graficando la función de escala $f(z)$ como se hizo en el capítulo 3.

Allí vimos que si reescribimos la Ec.(4.7) como:

$$\frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)} = f(A^\sigma \epsilon). \tag{4.11}$$

al graficar $y = \frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $x = A^\sigma \epsilon$ (con $\epsilon = (m_c - m)/m_c$) los puntos deberían colapsar sobre la curva dada por $f(z)$ si efectivamente las distribuciones de fragmentos siguen la ley de escala asumida.

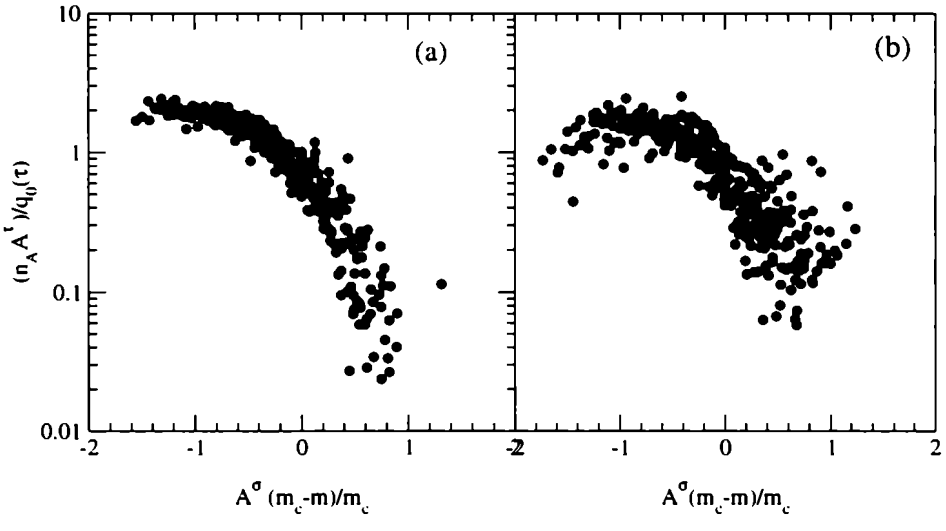

Figura 4.8: Función de escala obtenida mediante el colapso de los puntos sobre una sola curva al graficar $\frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $A^\sigma \epsilon$ a la multiplicidad crítica para τ_{ff} (a) y τ_a (b) (circulos negros) con sus correspondientes gaussianas que mejor los ajustan (lineas llenas).

Los valores de τ, $q_0(\tau)$, σ y m_c los tomamos de los valores calculados en las secciones previas.

En la figura (4.8) observamos un gráfico de $\frac{n_A(\tau)A^\tau}{q_0(\tau)}$ como función de $A^\sigma\epsilon$. Este cálculo se efectuó para las distribuciones de fragmentos a tiempo de fragmentación (τ_{ff}) y a tiempos asintóticos (τ_a). Es muy interesante de ver en dicha figura que los puntos colapsan sobre una sola curva, con un solo máximo ubicado en la región de $z < 0$, mostrando que efectivamente en la región analizada ($0.02A_{tot} < A < 0.15A_{tot}$) las distribuciones de fragmentos se comportan de acuerdo a la ecuación (4.7).

4.7 Conclusiones

Concluyendo esta sección, digamos que se han calculados diferentes señales de comportamiento crítico, tanto a tiempo de fragmentación como a tiempos asintóticos. Hemos visto que la evolución dinámica que sigue al proceso de fragmentación no altera las características de criticalidad del sistema, esto es, los exponentes críticos calculados a tiempo de fragmentación son similares a los asintóticos. De esta manera, se observa que es posible obtener los exponentes críticos que describen la física involucrada en el proceso de fragmentación desde las distribuciones de fragmentos asintóticas accesibles experimentalmente. Por otro lado, creo que no es posible asegurar que el proceso bajo estudio pueda ser clasificado dentro de la clase de universalidad 3D-Ising. En particular, el valor de γ tiene valores visiblemente menores al esperado para el valor correspondiente a la clase 3D-Ising. Esto parece sugerir que efectos de no-equilibrio juegan un rol fundamental en este proceso. Como vimos en el capítulo 4, si le imponemos al sistema la posibilidad que alcance el equilibrio a través de un volumen confinante, los valores de γ que se obtienen para determinadas densidades son los esperados para una transición líquido-gas.

Capítulo 5

Sistemas confinados

5.1 Introducción

Como hemos visto en la introducción, los modelos utilizados para analizar el fenómeno de fragmentación pueden dividirse en dos grandes clases: los dinámicos y los estadísticos.

La primera aproximación, la dinámica, asume que el sistema es apropiadamente descripto por un dado Hamiltoniano y siguen la evolución temporal del sistema excitado. Dentro de esta aproximación se encuentra el sistema descripto en en el capítulo anterior, para el cual se ha mostrado que el sistema no alcanza el equilibrio global [18] aunque sí alcanza cierto grado de equilibramiento local. Como vimos en la Fig.(4.4), la curva calórica en este caso es del tipo "crecimiento-meseta"y no muestra ninguna rama vapor.

Los segundos asumen que el sistema nuclear altamente excitado es capaz de alcanzar el equilibrio a un volumen fijo (usualmemte llamado volumen de "freeze-out") y recién entonces fragmentarse. En este modelo, para el cual el proceso de fragmentación es enteramente manejado por el espacio de fases disponible por el sistema, ha dado buenos resultados al describir algunos aspectos de la fragmentación. Entre algunas de sus predicciones mas conocidas está que la curva calórica (T vs. E) es del tipo "creciente-meseta-creciente"y por lo tanto exhibe una rama vapor [10, 11, 12].

Estos dos tipos de modelos del proceso de fragmentación dan una buena descripción de algunas propiedades del sistema fragmentante, sobre todo en lo referente a la forma en que escalean las distribuciones de fragmentos, pero difieren en el grado de equilibramiento alcanzado por el sistema. Por lo tanto es importante estudiar cuales son las propiedades de un sistema como el mostrado en el capítulo anterior, pero confinado dentro de un volumen que le permita alcanzar el equilibrio. Algunos estudios se han hecho en esta dirección, como en [78] donde se estudió 'lattice' gas confinados a volumenes fluctuantes o en [79] donde un diagrama de fases ha sido construido.

5.2 Modelo utilizado

En este capítulo se analizarán algunas características de un sistema compuesto por 147 partículas que interactúan via un potencial de Lennard-Jones truncado como el indicado en la Eq.(4.1) confinado a volumenes esféricos de distintos radios R. Para confinar nuestro sistema usamos un potencial del tipo $V_{pared} \sim (r-R)^{-12}$ con una distancia de corte de $r_{cut} = 1\sigma$, donde el potencial se hace cero suavemente junto con su primer derivada. Al igual que en el capítulo anterior, usaremos la aproximación de dinámica molecular para evolucionar al sistema e integraremos las ecuaciones de movimiento usando el algoritmo de Verlet [70].

Al usarse la aproximación de dinámica molecular, el sistema puede analizarse dentro del formalismo del ensamble microcanónico de dinámica molecular ($EMDM$). En este marco y como hemos visto en la sección (2.2), la conexión con la termodinámica es a través de principios de la mecánica. En este marco, cantidades como la presión o la temperatura pueden ser estimadas usando el teorema de equipartición generalizado [80], mientras que otras como el calor específico están relacionadas a las fluctuaciones de la energía cinética.

Para los cálculos presentados en este capítulo se barrió un amplio espectro de densidades [$\rho = 3N/(4\pi R^3)$, con N el número de partículas y R el radio del volumen confinante] desde $\rho = 0.02\sigma^{-3}$ hasta $\rho = 0.80\sigma^{-3}$. Para cada densidad se barrió también en un amplio rango de energías desde $E = -3\epsilon$ hasta $E = 3\epsilon$ aproximadamente. Durante cada evolución y una vez superado el transitorio, tomamos configuraciones cada $5t_0$ hasta un tiempo final de $140000t_0$.

5.3 Indicios termodinámicos de la transición

Dentro de la descripción termodinámica de este tipo de procesos, una de las cantidades mas relevantes estudiadas es la curva calórica (CC). Recordemos que en el sistema libre (Cap.4) definimos la curva calórica como la relación funcional entre la temperatura local del sistema a tiempo de fragmentación y su energía. En este caso y dado que el sistema está en equilibrio, calculamos la energía de acuerdo al teorema de equipartición [75],

$$T(E) = \frac{2}{3(N-1)} < K >_E, \tag{5.1}$$

siendo N el número de partículas y $< K >_E$ la energía cinética media promediada a energía total fija durante una trayectoria de dinámica molecular en el espacio de fases.

En la Fig.(5.1) se observan las curvas calóricas para cuatro densidades distintas, $\rho = 0.02, 0.07, 0.20 y 0.50\sigma^{-3}$. Como vemos, se observan diferentes comportamientos de acuerdo a las diferentes densidades. Para el caso menos denso, la CC muestra un bucle seguido de un incremento lineal en la temperatura, la cual es referida como la "rama vapor". A medida que se aumenta la

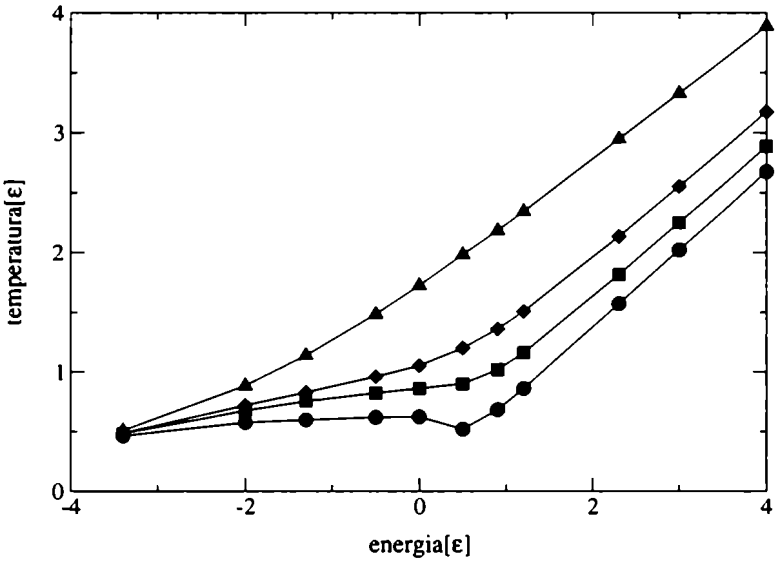

Figura 5.1: Curvas calóricas para cuatro densidades distintas:$\rho = 0.02, 0.07, 0.20 y 0.50\sigma^{-3}$, mostradas con circulos, cuadrados, rombos y triángulos respectivamente.

densidad, el bucle desaparece y las dos ramas de temperatura creciente están conectadas por un punto de inflexión ($\rho = 0.07\sigma^{-3}$ y $\rho = 0.20\sigma^{-3}$). Si la densidad se aumenta aún mas ($\rho = 0.50\sigma^{-3}$), ya no se observan cambios notables en la segunda derivada de la temperatura respecto de la energía y se borra cualquier rastro de transición entre dos tipos diferentes de comportamientos.

Es interesante detenerse un poco mas en el comportamiento del sistema en el caso menos denso. Si tenemos en cuenta que

$$\frac{\partial T}{\partial E} = -T^2 \frac{\partial^2 S}{\partial E^2}, \tag{5.2}$$

$$S = \int \frac{dE}{T(E)}, \tag{5.3}$$

podremos notar que la región de $\partial T/\partial E < 0$ conlleva a un comportamiento anómalo de la entropía en esa región que consiste en la aparición de un llamado *intruso convexo*. La aparición de un intruso convexo en la entropía, prohibido en el límite termodinámico, es una de las señales esperadas en una transición de fase de primer orden de acuerdo a lo visto en la sección (2.2) [17].

En la figura (5.2) observamos el intruso convexo para el caso menos denso ($\rho = 0.02\sigma^{-3}$). Aquí la entropía se calculó a partir de la Eq.(5.3) y habiendo interpolado la curva calórica correspondiente $T(E)$.

Otra forma interesante de visualizar la transición es tomando en cuenta la

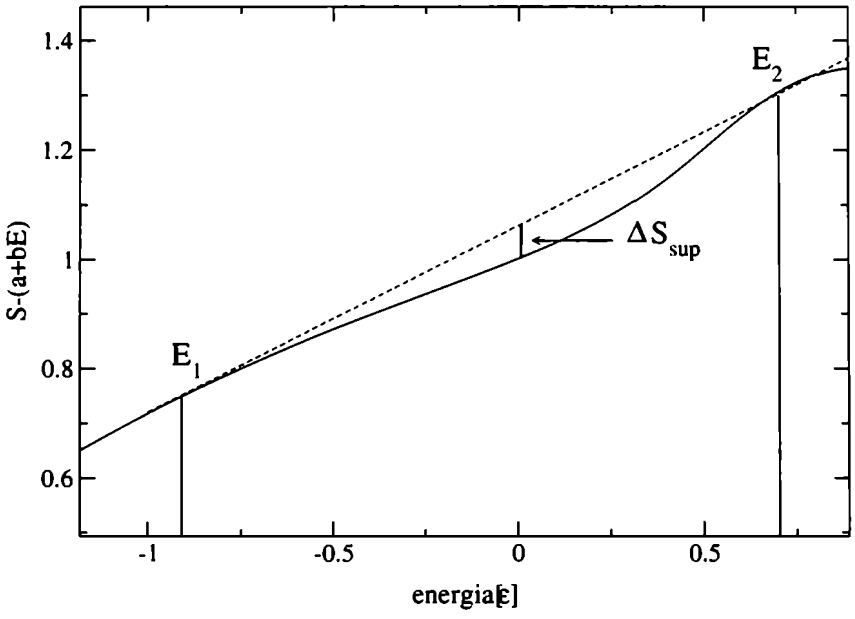

Figura 5.2: En la figura se observa la entropía como función de la energía para el caso menos denso, esto es, cuando la curva calórica muestra un bucle. La curva muestra un intruso convexo entre las energías E_1 y E_2 asociado a una transición de fase de primer orden en esa región. ΔS_{sup} es la entropía perdida en la formación de superficies. Para visualizar el intruso convexo se ha sustraido una función lineal $a + bE$ a la entropía. En este caso, $a = 4.3$ y $b = 1.4$ [epjamison]

definición de calor específico en el ensamble microcanónico

$$\frac{1}{C} = \frac{\partial T}{\partial E} \tag{5.4}$$

En la Fig.(5.3) observamos el calor específico para dos densidades distintas. Para la mas baja, la CC muestra una región de $\partial T/\partial E < 0$ que se corresponde con un valor negativo del calor específico. Esta región está delimitada por dos polos simples para energías E_1 y E_2 y se corresponde con la presencia del *intruso convexo* en la entropía. Calores específicos negativos han sido medidos experimentalmente durante la transición sólido-líquido en racimos de 147 átomos de sodio [81], en la región crítica de fragmentación nuclear [82] y tambien han sido encontrados en modelos de lattice-gas [83].

A medida que se aumenta la densidad, los dos polos en el calor específico se acercan uno a otro hasta que desaparecen. Para densidades aún mayores, la CC ya no muestra un bucle sino un punto de infiexión y el calor específico muestra un pico como en el panel (b) de la Fig.(5.3).

Como vemos, el sistema muestra evidencia de una transición de fase para un amplio rango de densidades. Las características de dicha transición dependen del volumen en el cual se confina el sistema.

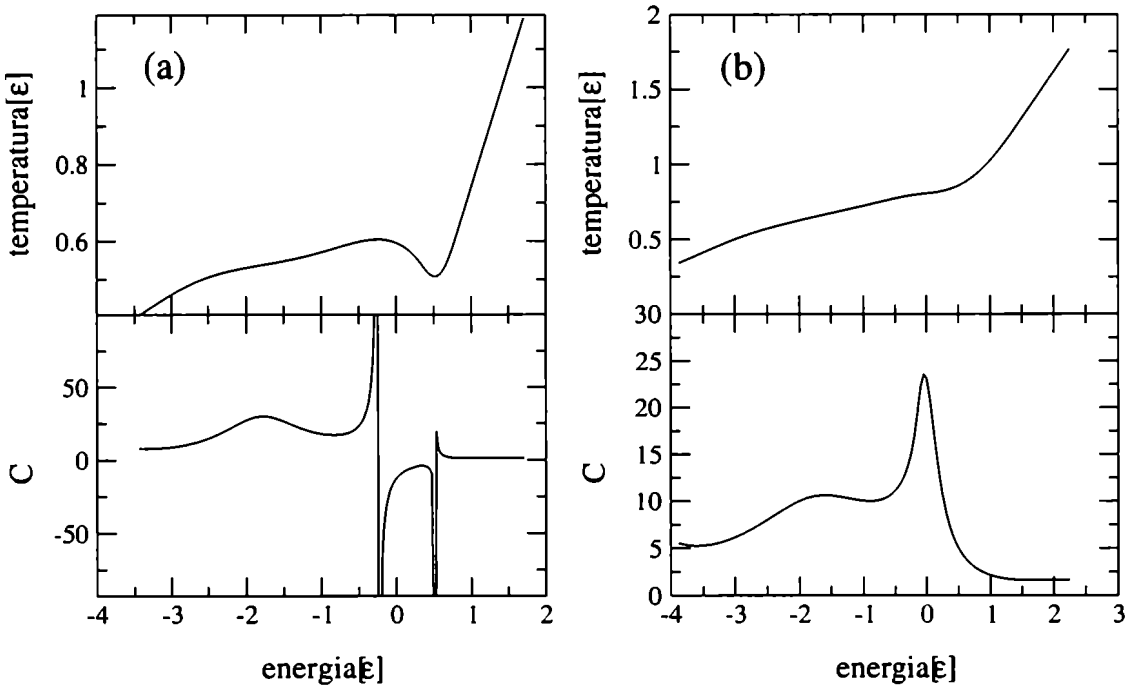

Figura 5.3: En esta figura mostramos las curvas calóricas (paneles superiores) y sus calores específicos asociados. Los gráficos del panel (a) corresponden al caso menos denso ($\rho = 0.02\sigma^{-3}$) mientras que los del panel (b) corresponden a $\rho = 0.20\sigma^{-3}$. Observamos la región de $C < 0$ para el caso mas diluido, delimitada por dos polos, y el pico en el calor específico para el caso mas denso.

5.4 Particiones del sistema: fragmentos ECRA y MST

En el capítulo anterior se mostraron dos maneras distintas de definir fragmentos: una en el espacio de coordenadas mediante el algoritmo MST, y la otra en el espacio de fases mediante el algoritmo $ECRA$. En el primer caso las partículas que forman un fragmento son aquellas que están a una distancia entre sí menor que una dada. Los momentos de las partículas no son tomados en cuenta en esta definición. En el segundo caso, los fragmentos $ECRA$ están asociados a las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases.

En la Fig.(5.4) mostramos las distribuciones de fragmentos MST y $ECRA$ para tres densidades distintas: $\rho = 0.02\sigma^{-3}$ a la izquierda, $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ en el centro y $\rho = 0.50\sigma^{-3}$ a la derecha. En tres casos vemos que las distribuciones $ECRA$ muestran una secuencia que va desde espectros en forma de U para las energías mas bajas mostradas (correspondientes a la rama líquida de la CC) a otros del tipo decaimiento exponencial para las mas altas (rama gaseosa de la CC), pasando por distribuciones del tipo ley de potencias para energías intermedias. Esta secuencia de espectros es similar a la vista en percolación o a los de las explosiones de la gota del capítulo anterior y por lo tanto las analizaremos con la función de escala de la Eq.(3.1) con que lo hicimos en los casos anteriores.

Por otra parte, información muy relevante puede obtenerse de las distribuciones MST. Como vemos en la Fig.(5.4), el sistema se rompe en fragmentos MST (y por lo tanto se forman superficies) solo cuando tiene suficiente espacio disponible, como se ve para el caso mas diluido. Para los dos caso mas densos, el sistema se comporta como un gran fragmento MST aún para energías altas. Esto nos permite entender que el bucle de la CC en el caso menos denso (y por lo tanto la aparición de un $C < 0$ y un intruso convexo en la entropía) se debe a la capacidad del sistema de formar superficies.

5.5 Análisis de las particiones $ECRA$: señales de criticalidad y exponentes criticos.

Si estudiamos el sistema en término de sus particiones $ECRA$, la secuencia de distribuciones encontradas puede ser analizada usando la ley de escala dada por la Eq.(3.1). Esta ley de escala sugiere la presencia de una transición de segundo orden si los exponentes críticos asociados toman determinados valores. Sin embargo, la aparición de señales de comportamiento crítico en sistemas pequeños compatibles con la presencia de una transición de fase de primer orden ha sido notificado en [48, 84, 85] para ciertos sistemas.

En esta sección, analizaremos algunas de las magnitudes ya presentadas como indicadoras de este tipo de transición: el segundo momento de la distribución (M_2), las fluctuaciones normalizadas del tamaño del mayor fragmento (NVM) y el mejor ajuste a una ley de potencias con un único parámetro libre (τ, con $q_0 = q_0(\tau)$).

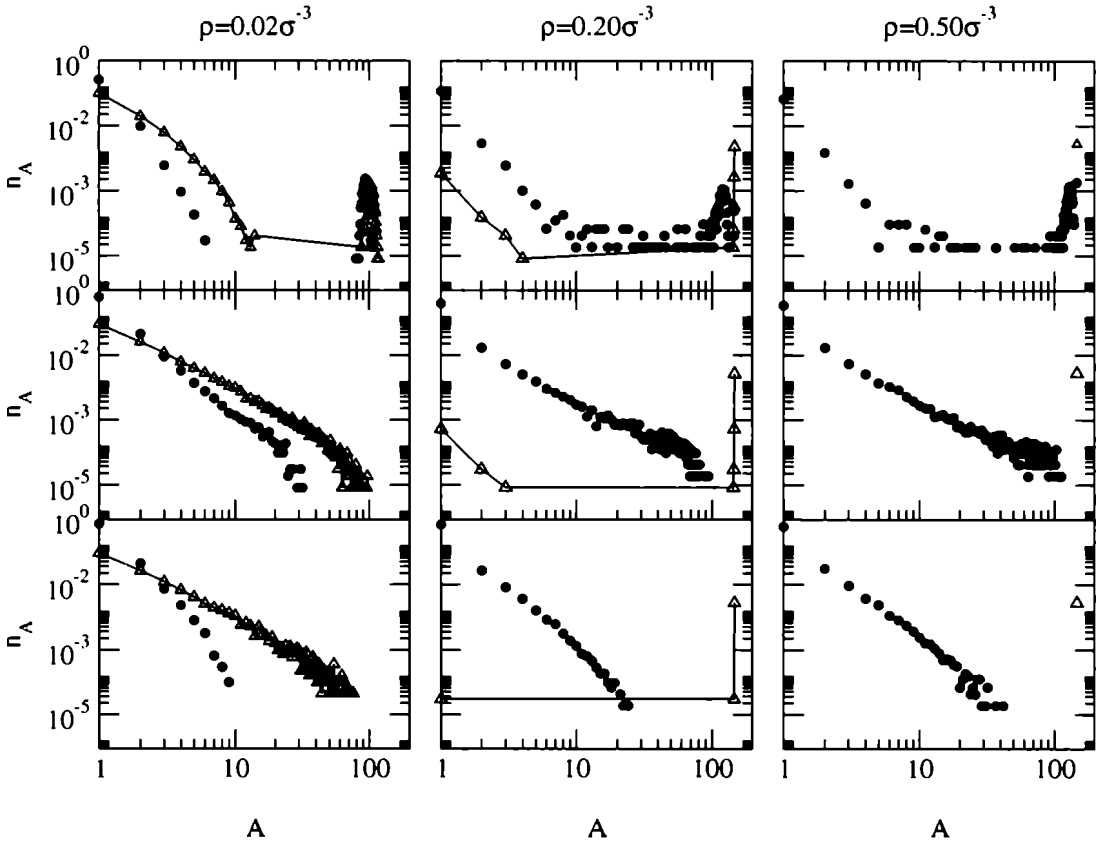

Figura 5.4: Distribuciones de fragmentos $ECRA$ (circulos llenos) y MST (triangulos vacios) para tres densidades distintas: $\rho = 0.02\sigma^{-3}$ a la izquierda, $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ en el centro y $\rho = 0.50\sigma^{-3}$ a la derecha.

Los resultados de estos cálculos se observan en la Fig.(5.5) para dos densidades distintas: $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ a la izquierda y $\rho = 0.50\sigma^{-3}$ a la derecha.

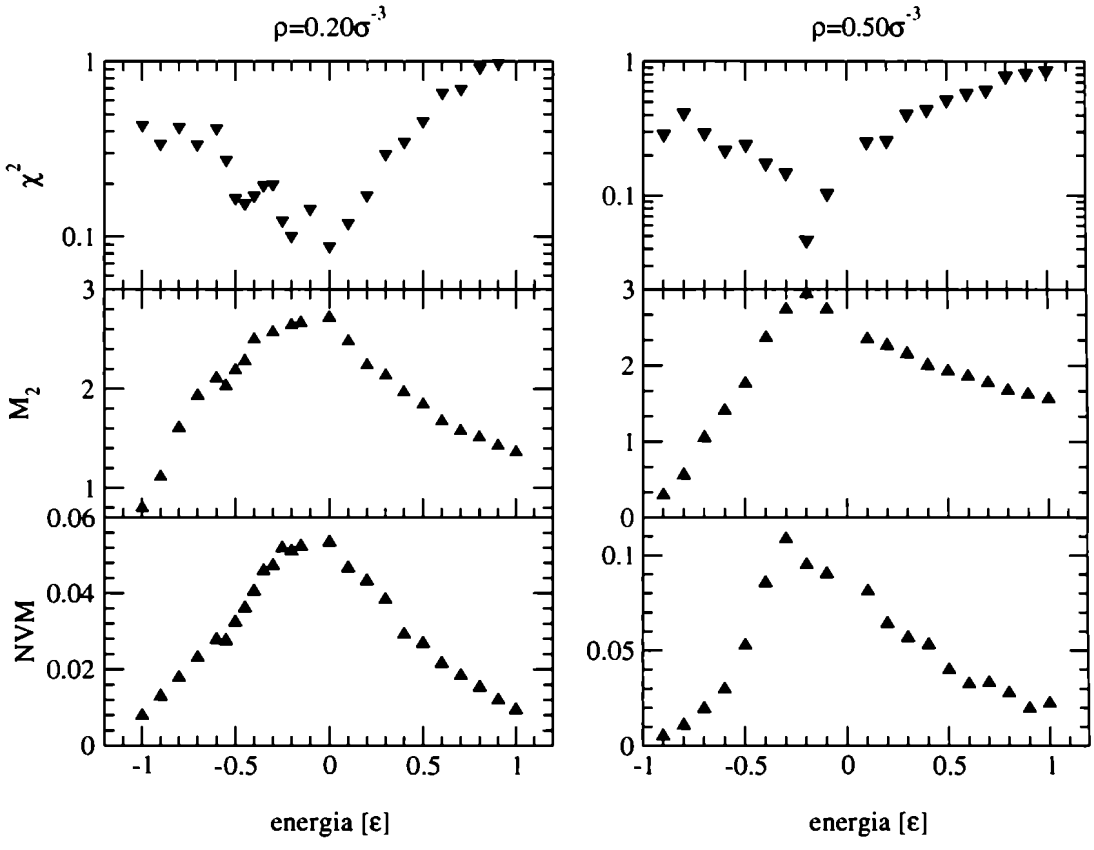

Figura 5.5: Señales de criticalidad calculadas desde las distribuciones de clusters $ECRA$ para dos densidades distintas: $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ a la izquierda y $\rho = 0.50\sigma^{-3}$ a la derecha. Arriba observamos el coeficiente que indica el mejor ajuste a una ley de potencias con un solo parámetro libre, χ^2. En el medio el segundo momento de la distribución M_2. En los paneles de abajo, las fluctuaciones normalizadas del tamaño del fragmento mas grande NVM.

Las distribuciones de clusters $ECRA$ fueron ajustadas a una ley de potencias en el rango $0.02A_{tot} < A < 0.15A_{tot}$, donde pueden despreciarse los efectos de tamaño finito. Para $\rho = 0.20\sigma^{-3}$, la distribución que mejor ajusta a una ley de potencias con la normalización $q_0 = q_0(\tau)$ dada por la Eq.(2.73) es la correspondiente a $E_* = 0.00 \pm 0.05$. En la misma región, también muestra un máximo el segundo momento de la distribución, M_2, y las fluctuaciones del tamaño del máximo fragmento también son máximas. Para $\rho = 0.50\sigma^{-3}$, y como se observa en los paneles de la derecha de la Fig.(5.5), se obtiene $E_* = -0.20 \pm 0.10$.

La presencia de grandes fluctuaciones que llevan a la aparición de los máximos en el NVM y el M_2 asi como también a la distribución tipo ley de potencias son indicios de una transición que está sobrellevando el sistema como se ha dicho al principio de esta sección. Esta transición, puede caracterizarse mas profundamente si calculamos los exponentes críticos asociados.

Para este tipo de sistemas, calculamos dos exponentes críticos para las distintas densidades analizadas: τ y γ. El exponente τ es el exponente de la distribución de fragmentos mejor ajustada por una ley de potencias y el γ es el que describe el comportamiento del M_2 en las vecindades de E_*.

En la Fig.(5.6), mostramos los resultados de los calculos de estos dos exponentes para las dos densidades analizadas en la figura precedente.

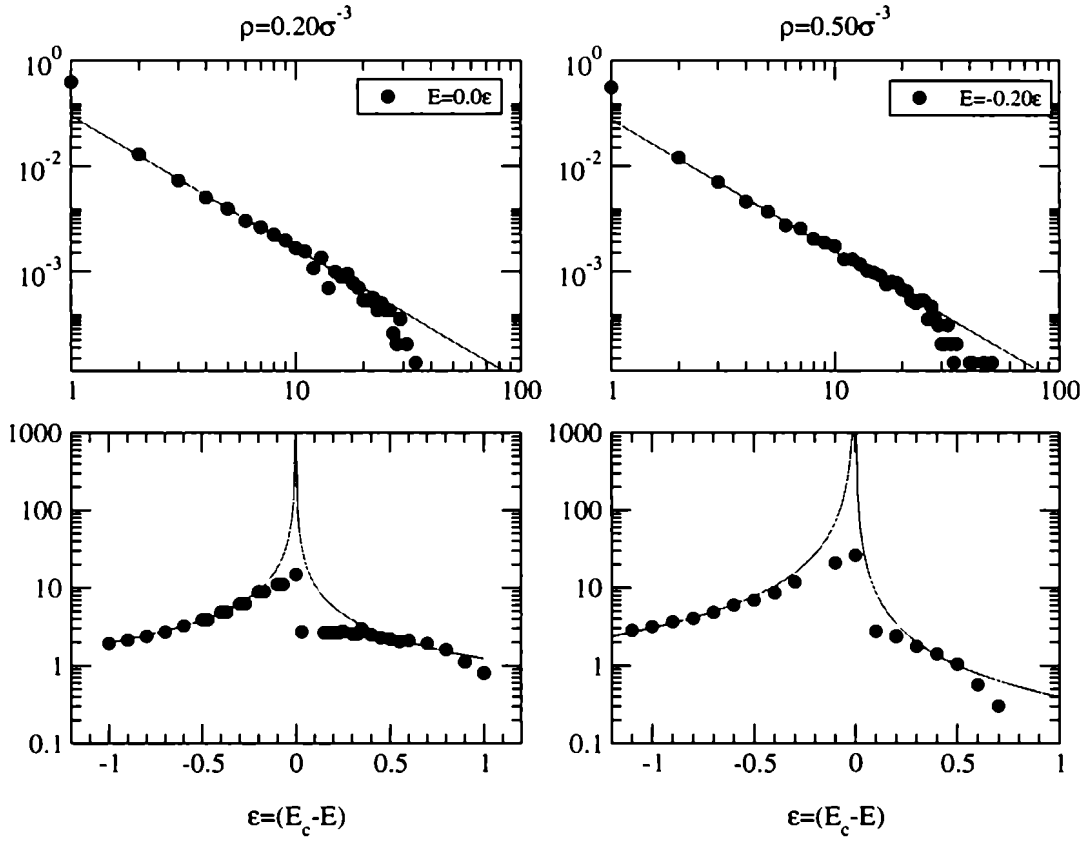

Figura 5.6: Distribuciones de clusters $ECRA$ (paneles superiores) y M_2 para $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ (izquierda) y ($\rho = 0.50\sigma^{-3}$). Para las distribuciones de clusters, las lineas llenas representan la ley de potencias que mejor las ajustan en el rango $2 < A < 30$. Las pendientes de dichas rectas dan el exponente τ en cada caso. En los paneles inferiores, las lineas llenas representan la ley de potencias obtenidas mediante el método de "gamma-matching" descripto en el capítulo anterior.

El exponente τ se obtiene mediante el ajuste de las distribuciones de fragmentos $ECRA$ a una ley de potencias de acuerdo a la ley de escalas utilizada (Eq.3.1). Para sistemas tan pequeños, la ley de escala solo es válido en el rango de masas donde los efectos de tamaño finito son despreciables. Como se observa en los paneles superiores de la Fig.(5.6), el ajuste es muy bueno en la región $2 < A < 30$. Los exponetes obtenidos son $\tau = 2.12 \pm 0.03$ para $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ y $\tau = 2.12 \pm 0.01$ $\rho = 0.50\sigma^{-3}$. Como vemos, ambos valores son compatibles con el valor esperado para un fenómeno crítico en $3D$, para el cual $2 \leq \tau \leq 3$ [8].

El exponente γ se obtiene de acuerdo al proceso explicado en el capítulo anterior, denominado 'gamma-matching' y obtenemos $\gamma = 0.95 \pm 0.06$ para $\rho = 0.20\sigma^{-3}$ y $\gamma = 1.35 \pm 0.25$ para $\rho = 0.50\sigma^{-3}$. El segundo de los valores es compatible con una transición continua líquido-gas, para la cual se espera $\gamma = 1.23$ [16], no asi el primero.

5.6 El diagrama de fases

Este análisis de las distribuciones de fragmentos $ECRA$ lo extendimos a todo el rango de densidades disponibles, desde $\rho = 0.02\sigma^{-3}$ hasta $\rho = 0.80\sigma^{-3}$. En todos los casos se encontró un valor de energía E_* para el cual se maximizan las fluctuaciones del sistema. Como acabamos de ver, esto se manifiesta tanto en los máximos que muestran M_2 y NVM como en la aparición de un espectro tipo ley de potencias para este tipo de fragmentos. Observamos entonces que el sistema exhibe una transición entre dos estados distintos para ese valor de E_*. Sin embargo, las características de dicha transición no son las mismas para todos los valores de densidad.

Una forma de ver esto es calculando los exponentes críticos asociados τ y γ como función de la densidad. Esto es lo que se observa en la Fig.(5.7).

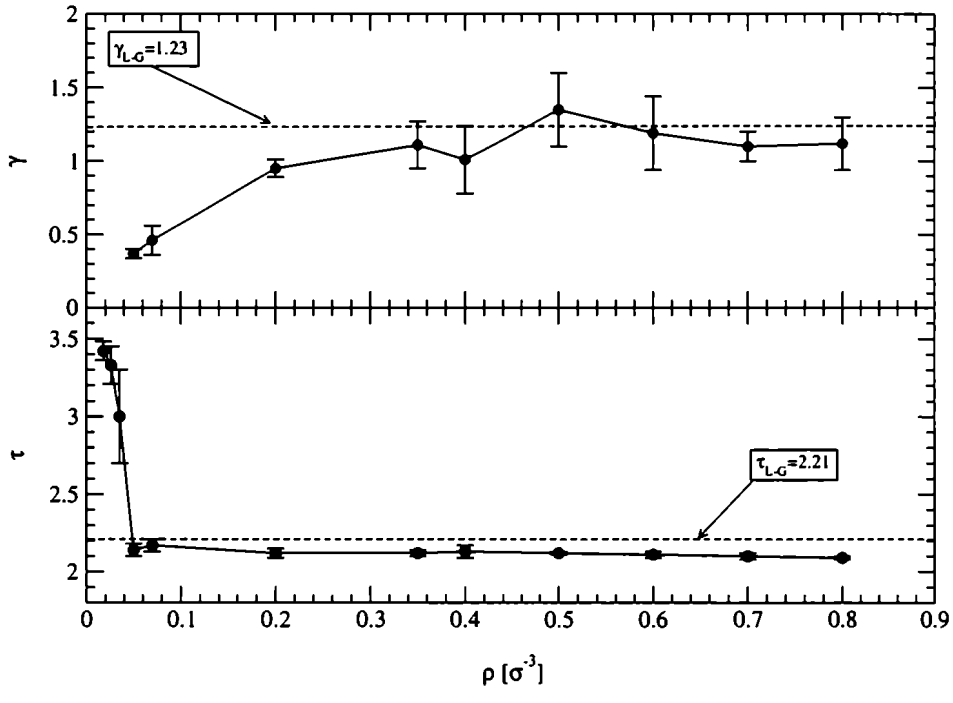

Figura 5.7: Exponentes γ (a) y τ (b) como función de la densidad ρ En lineas punteadas se indican los valores esperados para una transición continua líquido-gas: $\tau = 2.21$ y $\gamma = 1.23$.

En la Fig.(5.7), no solo observamos la dependencia de τ y γ con ρ, sino también, en lineas punteadas, los valores esperados para una transición continua líquido-gas: $\tau = 2.21$ y $\gamma = 1.23$.

Para un sistema exhibiendo un fenómeno crítico se debe cumplir que $2 \leq \tau \leq 3$ [8]. Esta condición no se cumple cuando la densidad del sistema es $\rho < 0.05\sigma^{-3}$. Si $0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$, el exponente τ toma valores cercanos a 2.21 pero los valores de γ están bien por debajo de 1.23. Sin embargo, para $\rho > 0.35\sigma^{-3}$, los valores de τ y σ obtenidos coinciden con los esperados para una transición de fase líquido-gas en un sistema infinito.

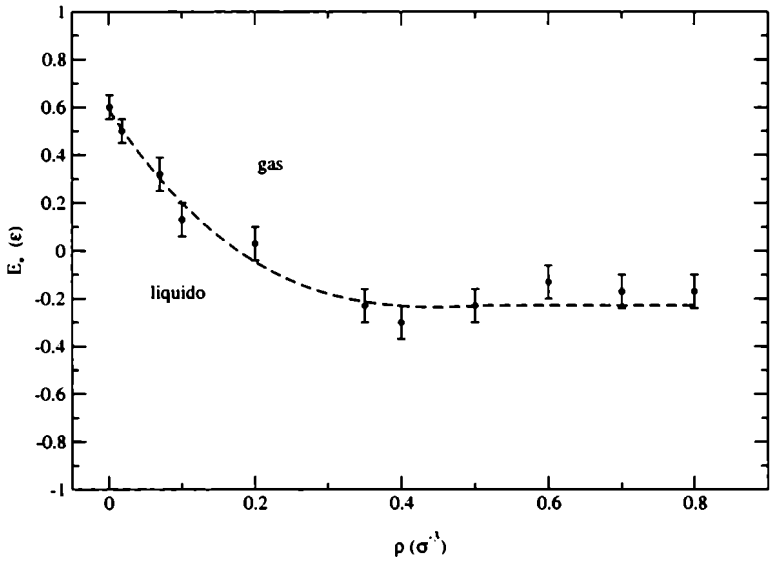

Figura 5.8: Energía a la cual se observa una distribución de racimos $ECRA$ tipo ley de potencias, E_*, como función de la densidad.

Estos resultados pueden analizarse mas cabalmente si reunimos toda la información analizada hasta ahora. Hemos visto que para todas las densidades analizadas el sistema exerimenta una transición entre dos fases que difieren en la presencia o no de un gran fragmento $ECRA$. Los análisis de las distribuciones de clusters nos permiten identificar una curva $E_* = f(\rho)$ en donde esta transición tiene lugar como se observa en la Fig.(5.8). Este cambio en el comportamiento de las distribuciones de fragmentos $ECRA$ está acompañado de cambios reflejados en las magnitudes termodinámicas del problema. Para $\rho < 0.05\sigma^{-3}$ las curvas calóricas exhiben un bucle en la zona de la transición, lo que da lugar a calores específicos negativos ($C < 0$) y la aparic'on de un intruso convexo en la entropía. Si $0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$, la curva calórica tiene un punto de inflexión que vincula la rama "gas"con la "líquido"que se manifiesta como un máximo en C. Para $\rho > 0.35\sigma^{-3}$, ni la curva calórica, ni el calor específico reflejan un cambio de comportamiento. Si por medio de la curva calórica hacemos $T_* = T(E_*)$ podemos repesentar el diagrama de fases del sistema en un gráfico $T - \rho$. Esto se observa en la Fig.(5.9). Los circulos vacios representan los puntos (T_*, ρ) para los cuales aparece una distribución del tipo ley de potencias en los fragmentos $ECRA$. La línea llena es una estimación de la línea de coexistencia obtenida del análisis del calor específico

[86, 87]: la temperatura T_* ha sido tomada, para densidades donde las CC exhiben un bucle, como la temperatura promedio entre los valores correspondientes a los polos de C y para $0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$, se como la ubicación del máximo del calor específico C.

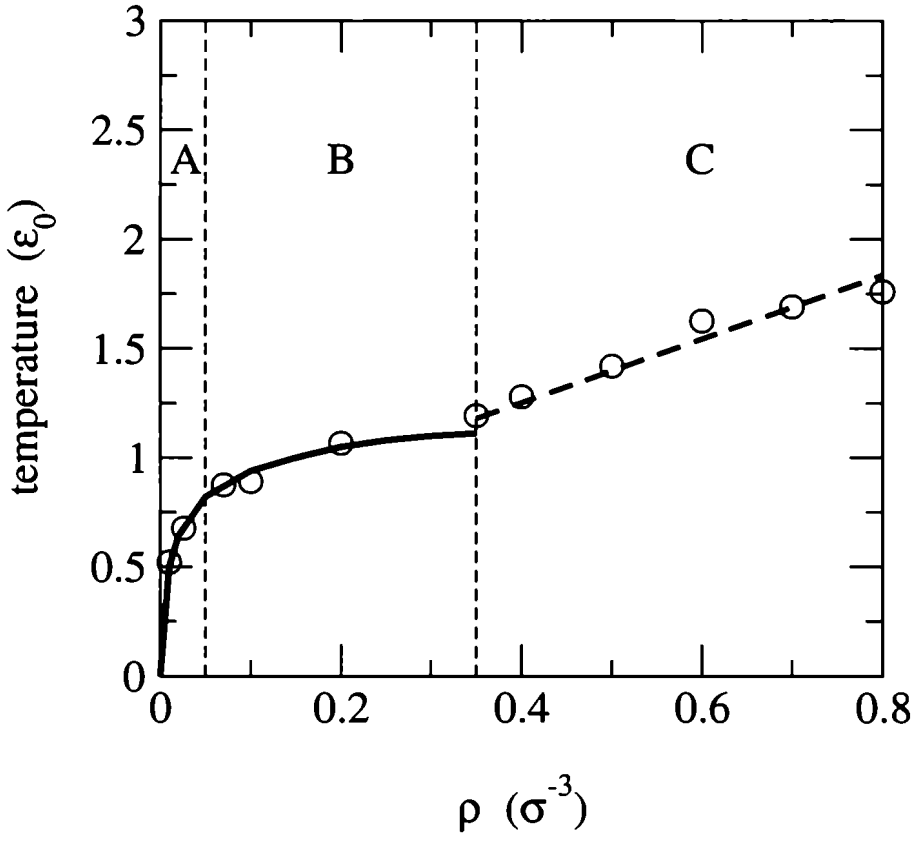

Figura 5.9: Diagrama de fases para un sistema de 147 partículas que interactúna via un potencial de Lennard-Jones. Los circulos vacios indican los valores de energía para cada densidad a la cual el espectro de fragmentos ECRA es ajustado por una ley de potencias. La linea llena indica la transición definida en términos del calor específico como fue definida en el texto. La linea punteada es para guiar el ojo.

Tres tipos de comportamientos diferentes pueden ser identificados en nuestro sistema:

A Si $\rho < 0.05\sigma^{-3}$, el sistema presenta señales compatibles con la presencia de una transición de fase de primer orden en un sistema finito: $C < 0$, la aparición de un intruso convexo en la entropía el bucle en la curva calórica. Así mismo, los valores de τ obtenidos de los espectros de fragmentos $ECRA$ son mayores que 3, indicando que la 'ley de potencias' correspondiente se observa solo por efectos de tamaño finito.

B Si $0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$, si bien el valor el τ es compatible con los de una transición crítica líquido-gas, no lo es el valor de γ.

C Si $\rho > 0.35\sigma^{-3}$, la curva calórica no muestrar ningún indicio de tran-

sición, y los valores de τ y γ son perfectamente compatibles con los esperados para una transición continua líquido-gas.

De acuerdo a cálculos previos en sistemas similares el diagrama de fases presenta similitudes y diferencias. La curva de coexistencia para $\rho < 0.35\sigma^{-3}$ es similar a las halladas [79] y representaría una transición de fase de primer orden del sistema. El punto crítico estaría en $\rho = 0.35\sigma^{-3}$, que es la densidad a partir de la cual los exponentes hallados caen dentro de los esperados para este tipo de transición. La curva de coexistencia para $\rho > 0.35\sigma^{-3}$, presente en sistemas de mayor tamaño, no fue encontrada en este caso al igual que en análisis previos de sistemas con tamaños similares al analizado en el presente trabajo. La línea de exponentes críticos hallada para $\rho > 0.35\sigma^{-3}$ fue reportada en trabajos previos [79, 88, 89] pero con valores de exponentes correspondientes a la clase de universalidad de percolación en $3D$. La diferencia entre ambos es la forma de definir las particiones del sistema: $ECRA$ en este caso y a la Coniglio-Klein [90] en [79].

5.7 Conclusiones

En este capítulo hemos analizado el comportamiento de un sistema compuestoo de 147 partículas confinadas en un volumen esférico que le permite al sistema alcanzar el equilibrio.

Si el sistema es analizado en términos de sus fragmentos $ECRA$, esto es las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases, se observa que para todas las densidades analizadas las distribuciones muestran un comportamiento que puede ser descriptos en término de la ley de escala dada por la Eq.(3.1). Esto es, el sistema exhibe un cambio entre dos fases que difieren en la presencia o no de un gran fragmento $ECRA$ a una cierta energía E_* y para todas las densidades analizadas.

Este transición, sin embargo no es igual para todas las densidades y sus características pueden hallarse si se analizan las curvas calóricas junto con los exponentes críticos calculados. Para $\rho < 0.05\sigma^{-3}$, el sistema exhibe evidencia compatible con la esperada para la existencia de una transición de fase en un sistema finito. Para $\rho \geq 0.35\sigma^{-3}$, se encuentra una línea de exponentes críticos compatibles con una transición continua líquido-gas. En la región intermedia de densidades, etiquetada como B en el diagrama de fases de la Fig.(5.9) las evidencias de una transicón de segundo orden no encuentran respaldo en el valor hallado de los exponentes críticos. Esto parecería indicar que en esa región la transición del sistema sería acorde con una de primer

orden aunque efectos de tamaño finito muestren evidencia de comportamiento crítico [48, 84, 85].

Capítulo 6

Aspectos no lineales de la fragmentación

6.1 Introducción

El problema de gotas altamente excitadas que sobrellevan un proceso de fragmentación es, como hemos visto, un problema fuera del equilibrio. Estudiar su dinámica nos permitirá entender otros aspectos de este proceso además de lo analizado a partir de las distribuciones de fragmentos.

Una manera de caracterizar la dinámica en el espacio de fases de un sistema es a partir de los exponentes de Lyapunov (LE's). Una propiedad característica del movimiento caótico es la alta sensibilidad a las condiciones iniciales. Trayectorias vecinas en el espacio de fases divergen exponencialmente si el movimiento es caótico y lo hacen linealmente si el movimiento es regular. Las cantidades matemáticas que cuantifican apropiadamente la velocidad de divergencia exponencial son los exponentes de Lyapunovs [91]. Si el sistema es caótico, su comportamiento es dominado por el mayor de ellos, el máximo exponente de Lyapunov (MLE), definido como:

$$\lambda = \lim_{t\to\infty} \lim_{d(0)\to 0} \left[\frac{1}{t} ln \frac{d(t)}{d(0)} \right], \tag{6.1}$$

con $d(t)$ la distancia en el espacio de fases entre dos trayectorias a tiempo t.

En numerosos trabajos se ha intentado establecer una conexión entre las transiciones de fase y un cambio en la caoticidad del sistema [37, 38, 92] analizando el comportamiento de los LE's. La dependencia del MLE con la energía ha sido analizada para clusters pequeños y se ha observado que presenta un cambio de pendiente durante la transición cuasi-sólido a cuasi-líquido [37, 93]. En [92] se ha observado también que el MLE exhibe un máximo durante la transición en el regimen de fragmentación de una gota altamente excitada.

Además de la dependencia con la energía, es importante caracterizar la

evolución temporal del proceso de fragmentación en gotas altamente excitadas. Para esto es necesario evitar el límite $t \rightarrow \infty$ en la definición del MLE de la Ec.(6.1) y calcularlo sobre períodos finitos de tiempo. Esto da lugar a la definición de los exponentes de Lyapunov locales en el tiempo ($MLLE$) [94], cuyo comportamiento será analizado mas adelante.

Otro aspecto importante a estudiar, dada la relevancia de las distribuciones de fragmentos en este problema, es la dependencia del MLE con el tamaño de los fragmentos. A partir de esto, será posible establecer una relación entre el valor asintótico del MLE a una dada energía y el de sus fragmentos.

Una vez caracterizado el problema de la fragmentación de gotas altamente excitadas mediante el análisis del máximo exponente de Lyapunov, estudiaremos las consecuencias sobre el MLE de confinar al sistema a volumenes esféricos de distintos radios, como se ha hecho en el capítulo 5

6.2 Exponentes de Lyapunov en sistemas Hamiltonianos

La evolución de un sistema Hamiltoniano de N-partículas en tres dimensiones está asociado con una trayectoria $x(t)$ en el espacio de fases 6-N dimensional. El punto $x(0)$ representa el estado inicial del sistema. En ausencia de fuerzas estocásticas, este punto determina la trayectoria entera $x(t)$.

Consideremos una hiperesfera infinitesimal de 6-N dimensiones en el espacio de fases centrada en $x(0)$. La superficie de esta hiperesfera representa estados del sistema cuyas condiciones iniciales difieren en forma infinitesimal de la original. Cuando esta hiperesfera evoluciona en el tiempo se deforma, a tiempos cortos y de acuerdo al teorema de Liouville [16], en un hipereslipsoide de volumen constante, pero con los ejes principales de longitud variable. Un esquema de esta evolución a tiempos cortos lo podemos ver en la Fig.[6.1(a)]. Al sistema cuya evolución viene dada por la del centro de la esfera la llamamos *principal* y a aquellos representados por la evolución de los puntos de la superficie lo llamamos *hijas*. A medida que pasa el tiempo, las fluctuaciones de tiempos cortos son eliminadas por promedio y $3N$ de los ejes principales crecen, mientras que los otros $3N$ decrecen. La velocidad exponencial promedio de expansión o contracción a lo largo de los ejes principales son los exponentes de Lyapunov. Para el i-ésimo eje principal, el exponente correspondiente se define como

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{t} log \left[\frac{L_i(t)}{L_i(0)} \right] \right] \tag{6.2}$$

donde $L_i(t)$ es el radio del elipsoide a lo largo del i-ésimo eje principal a tiempo t [95]. En esta expresión, la velocidad de crecimiento exponencial es siempre medida a lo largo de los ejes principales, pero la orientación absoluta de dicho eje no está fija.

Estrictamente hablando, los exponentes de Lyapunov así definidos depen-

den de la elección de las condiciones iniciales $x(0)$. Sin embargo, en [96] se ha demostrado que para sistemas Hamiltonianos ergódicos se obtienen los mismos exponentes para prácticamente cualquier elecctión de $x(0)$. También se demostró en el mismo trabajo una serie de teoremas usualmente concernientes a exponentes de Lyapunovs en sistemas Hamiltonianos, como por ejemplo que los exponentes vienen de a pares negativos/positivos o que debe haber al menos $2C$ exponentes con valor cero si el sistema tiene C constantes de movimiento independientes.

Los valores de estos exponentes son independientes de la métrica usada para el espacio de fases y pueden ser ordenados de mayor a menor: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$.

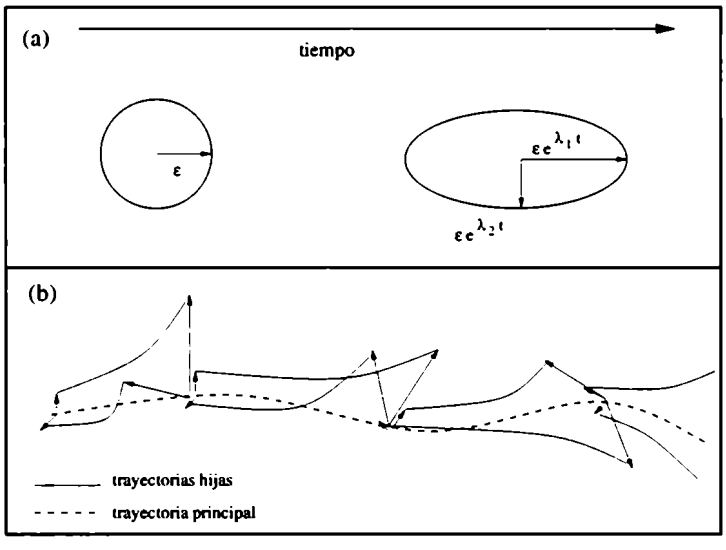

Figura 6.1: Deformación de una esfera infinitesimal en un elipsoide en el espacio de fases debido a la evolución del sistema (a). En (b) vemos un esquema del proceso de reortonormalización usado para obtener el espectro de exponentes de Lyapunovs.

Realizar este cálculo de la manera sugerida por la definición es impráctico ya que el hiperelipsoide colapsará rápidamente sobre el eje principal que diverge con el mayor exponente (λ_1). En [97] y [98] se desarrolló una técnica para calcular los exponentes de Lyapunov evitando estos inconvenientes. Esta técnica se denomina *método del espacio tangente* y permite calcular el set de exponentes de un sistema de ecuaciones diferenciales de movimiento. Básicamente, consiste en seguir la evolución temporal de los $6N$ ejes principales del hiperelipsoide integrando numéricamente las ecuaciones linearizadas de movimiento de vectores finitos en el espacio tangente de nuestro sistema. Para prevenir el colapso de los ejes principales sobre la dirección en la cual se produce e máximo crecimiento, los ejes se reortonormalizan periodicamente. Un esquema de este proceso se observa en la Fig.[6.1(b)].

Como el cálculo del espectro completo de los exponentes de Lyapunov para sistemas con muchos grados de libertad es una tarea muy demandante computacionalmente hablando, solo calcularemos aquí el máximo exponente

de Lyapunov (MLE).

6.3 Máximo Exponente de Lyapunov

Acabamos de ver que el máximo exponente de Lyapunov (MLE) es el exponente que domina la dinámica del sistema dada por el espectro completo de exponentes. El MLE es el que da la medida de la sensibilidad del sistema a las condiciones iniciales y da también una idea de la velocidad a la cual el sistema explora el espacio de fases disponible. Su definición viene dada por la Eq.(6.1) como vimos en la introducción de este capítulo.

A continuación describiremos algunos de los métodos usados para calcular el MLE.

- *Lyapunovs Globales*

  Para calcular el MLE generamos a $t = 0$ una configuración inicial del sistema (punto principal) a una dada energía y generamos otra condición inicial (la "hija") las cuales están alejadas una pequeña distancia d_0 en el espacio de momentos (las velocidades de las partículas son ligeramente diferentes). Si hacemos evolucionar cada punto en el espacio de fases, podemos definir una distancia promedio entre el la trayectoria principal y la de la hija como [92]

$$d(t) = \left(\sum_{i=1}^{N} [a(\mathbf{r}_m(t) - \mathbf{r}_s(t))^2 + b(\mathbf{p}_m(t)) - \mathbf{p}_s(t))^2]_i \right)^{1/2} \tag{6.3}$$

  donde $\mathbf{r}$ y $\mathbf{p}$ se refieren a las posiciones y momentos de cada partícula a tiempo t. Los índices m y s se refieren a las trayectorias del punto principal y de la "hija". a y b son dos parámetros arbitrarios los cuales expresan el hecho que los exponentes de Lyapunovs son independientes de la métrica usada en el espacio de fases [99]. En este trabajo elegiremos $a = 0$ y $b = 1/m$ con m la masa de las partículas (de esta manera la distancia calculada es en el espacio de las velocidades). Cuando calculamos numericamente la evolución temporal de $d(t)$ mediante la solución de las ecuaciones de movimiento clásicas encontramos un crecimiento exponencial seguido por una saturación en el espacio de las velocidades [67, 92] [zonas I y II de la Fig.(6.2)]. La distancia de saturación d_∞ tiene información acerca del espacio de fases explorado por el sistema y en nuestros cálculos ocurre típicamente a $\tau_{sat} \sim 30t_0$. La velocidad del crecimiento exponencial que la precede [zona I de la Fig.(6.2)] es el máximo exponente de Lyapunov λ. Un gráfico típico de esta cantidad puede observarse en la Fig.(6.2).

  Esta forma de calcular el el MLE se denomina *máximo exponente de Lyapunov global* ($MLEG$).

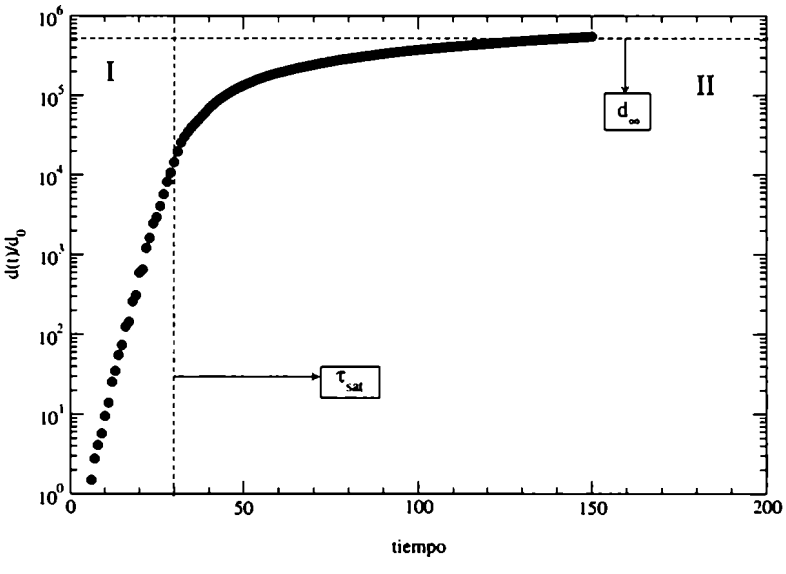

Figura 6.2: Distancia en el espacio de fases entre dos trayectorias inicialmente muy cercanas en función del tiempo calculada de acuerdo a la Ec.(6.3). En la figura se observa el tiempo al cual la distancia satura en el espacio de fases, τ_{sat} y la distancia de saturación, d_∞. Para $0 < t < \tau_{sat}$ la distancia crece exponencialmente con el tiempo y la velocidad de crecimiento exponencial define el máximo exponente de Lyapunov.

- *Método de Benettin*

Un método para calcular el MLE de manera de evitar dicha saturación fue desarrollado en [98]. En este método, despues de un intervalo temporal $\tau << \tau_{sat}$, la distancia $d(\tau) = d_1$ es reescaleada a d_0 en la dirección de máximo crecimiento y la cantidad $ln[d_1/d_0]$ es guardada. Si repetimos este procedimiento a cada intervalo de tiempo τ y guardamos los incrementos logaritmicos $ln[\frac{d_i}{d_{i-1}}]$, el MLE se calcula como

$$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n\tau} \sum_{i=1}^{n} ln \left| \frac{d_i}{d_{i-1}} \right|. \tag{6.4}$$

El cociente $\frac{d_i}{d_{i-1}}$ es una medida de de la divergencia exponencial entre dos trayectorias inicialmente muy cercanas a lo largo de la dirección de máximo crecimiento a tiempo $i\tau$. De esta manera, la Ec.(6.4) puede pensarse como un promedio de "exponentes de Lyapunov locales" lo largo de una trayectoria infinita, cada uno midiendo la caoticidad (en el sentido de divergencia de órbitas inicialmente cercanas en el espacio de fases) en cada intervalo temporal $[i\tau, (i+1)\tau]$. Un esquema del método puede verse en la Fig.(6.3)

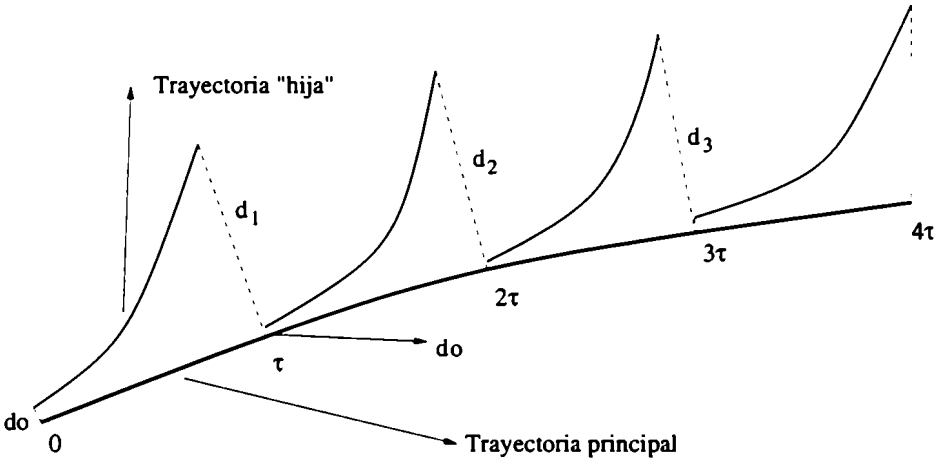

Figura 6.3: Esquema del método de Benettin para calcular el MLE. Dos puntos inicialmente muy cercanos en el espacio de fases (distan d_0 uno de otro) tienen trayectorias que divergen exponencialmente. La trayectoria de la hija es reescaleada a cada intervalo de tiempo τ en la dirección de máximo crecimiento a la distancia inicial d_0, guardandose los cocientes $ln[\frac{d_i}{d_{i-1}}]$.

- *Lyapunovs locales en el tiempo*

Si la suma de la Ec.(6.4) la restringimos entonces a N_i términos a partir del instante de tiempo $t_i = i\tau$ podemos definir los máximos exponentes de Lyapunov locales en el tiempo, $MLLE$, como [94]

$$\lambda_i' = \lambda'(t_i) = \frac{1}{N_i\tau} \sum_{j=i}^{i+N_i} ln \left| \frac{d_j}{d_{j-1}} \right| = \frac{1}{N_i\tau} ln \left| \frac{d_{i+N_i}}{d_i} \right|. \tag{6.5}$$

Esto es válido para una dado punto principal. Como el sistema estudiado es caracterizado por un dado estado macroscópico (a una dada energía), para calcular λ_i' promediamos sobre un ensamble de puntos principales a t_i correspondientes a un set de trayectorias macroscópicamente equivalentes (con la misma energía) a $t = 0$.

Este exponente local [Eq.(6.5)] puede ser considerado como una estimación de camino corto del MLE y ha sido usado en [100] para analizar la evolución de ergodicidad en clusters de argón de 3 y 7 partículas. También en [35], para la misma clase de sistemas, el espectro completo de exponentes de Lyapunovs locales ha sido usado para analizar la dinámica del sistema en términos de la estructura local de la superficie de energía potencial de las gotas.

6.4 Sistemas libres

En esta sección analizaremos el comportamiento de gotas altamente excitadas que sobrellevan un proceso de fragmentación mediante el estudio del máximo exponente de Lyapunov. El sistema a analizar es el mismo que en el capítulo 4 y que ha sido descripto en la sección (4.2)

6.4.1 $MLLE$ como función del tiempo y la energía

En esta parte calcularemos los $MLLE$'s usando la Ec.(6.5) aplicada a la evolución de las gotas de Lennard-Jones de 147 partículas con $\tau = 0.01t_0$ y $N_i = 1000$, de manera de tener un valor de $MLLE$ cada $10t_0$, excepto para los primeros $10t_0$ de la evolución para los cuales usamos $N_i = 100$ y por lo tanto $N_i\tau = 1t_0$. Calculamos el $MLLE$ en un rango de energías desde -2.8ϵ hasta $+3.0\epsilon$. El comportamiento del $MLLE$ como función del tiempo puede verse en la Fig.(6.4) para tres energías diferentes [94].

Para las tres energías analizadas en esta figura el sistema presenta tres comportamientos bien diferenciados que se manifiestan en sus respectivas distribuciones de fragmentos [Ver Fig.(4.3)]. En forma de 'U' para la energía mas baja, tipo ley de potencias para la intermedia y exponencialmente decreciente para la mas alta.

La Fig.(6.4) nos muestra un comportamiento similar en todos los casos: el $MLLE$ decrece abruptamente en los primeros $8t_0$ de la evolución, alcanzando un valor practicamente estacionario despues de $20t_0$. Este comportamiento nos permite clasificar la evolución temporal del sistema en dos etapas bien diferenciadas: la mas temprana, cuando la caoticidad de la gota decrece rápidamente y la asintótica, caracterizada principalmente por la estabilidad de los valores del $MLLE$. Podemos definir entonces un tiempo característico, τ_{mle}, como el tiempo para el cual los $MLLE$'s alcanzan sus valores asintóticos. En este sistema, $\tau_{mle} \simeq 20t_0$.

Si se observa cuidadosamente la Fig.(6.4) se ve que la dependencia con la energía es diferente en ambas etapas. Para tiempos muy tempranos ($t \simeq 2t_0$),

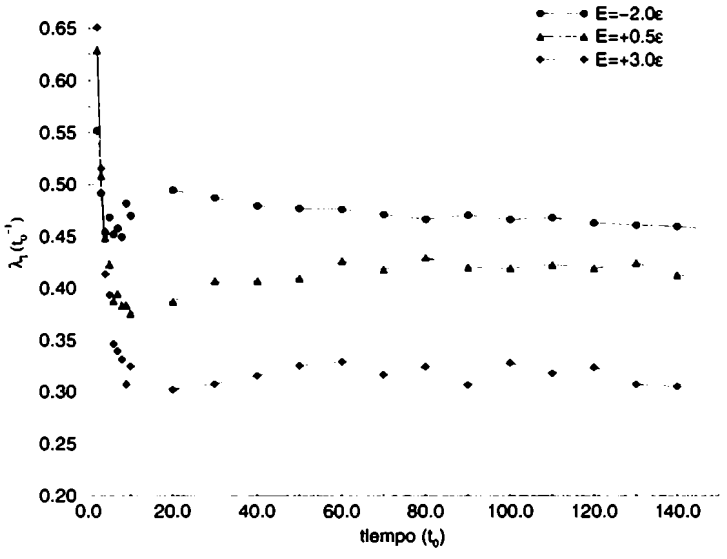

Figura 6.4: Máximo exponentes de Lyapunov local (λ_L) como función del tiempo para tres energías diferentes correspondientes a tres diferentes tipos de comportamiento del sistema. Circulos para $E = -2.0\epsilon$, triangulos para $E = -0.5\epsilon$ y rombos para $E = 3.0\epsilon$.

el $MLLE$ es una función creciente de la energía. Esta tendencia se invierte para $t \simeq 8t_0$ y se estabiliza para $t \simeq 20t_0$. Vemos también que el decrecimiento de los $MLLE$'s es tanto mas abrupto cuanto mas energética es la gota. Esto puede entenderse si tenemos en cuenta que la gota se expande mas rápido (y por lo tanto se 'rompe' mas rápidamente) cuando mas grande es su energía [72].

La dependencia del $MLLE$ con la energía puede verse en la Fig.(6.5) para tres tiempos relevantes durante la evolución.

A $t = 2t_0$, el $MLLE$ es una función creciente de la energía. Esto puede ser entendido si tenemos en cuenta que para ese tiempo, la gota está muy comprimida y excitada ya que no ha desarrollado completamente su modo colectivo radial. Debido a la ausencia de este modo colectivo radial, toda la energía de excitación se va al "movimiento caótico de las partículas"y el sistema se comporta como uno infinito a alta densidad. Para $t \geq 20t_0$, cuando el sistema se encuentra ya en su régimen asintótico, el $MLLE$ muestra un máximo. Este máximo, como veremos en la siguiente sección, depende principalmente del tamaño y la temperatura del fragmento mas grande de la gota fragmentada. Si tenemos en cuenta las distribuciones de fragmentos [Fig.(4.3)] y la curva calórica extendida [Fig.(4.4)], vemos que el máximo del $MLLE$ ocurre a la energía para la cual el fragmento asintótico mas grande es casi tan grande como la gota originaria y la temperatura del sistema es la mayor que puede alcanzar sin fragmentarse. A esta temperatura la llamamos temperatura límite y es

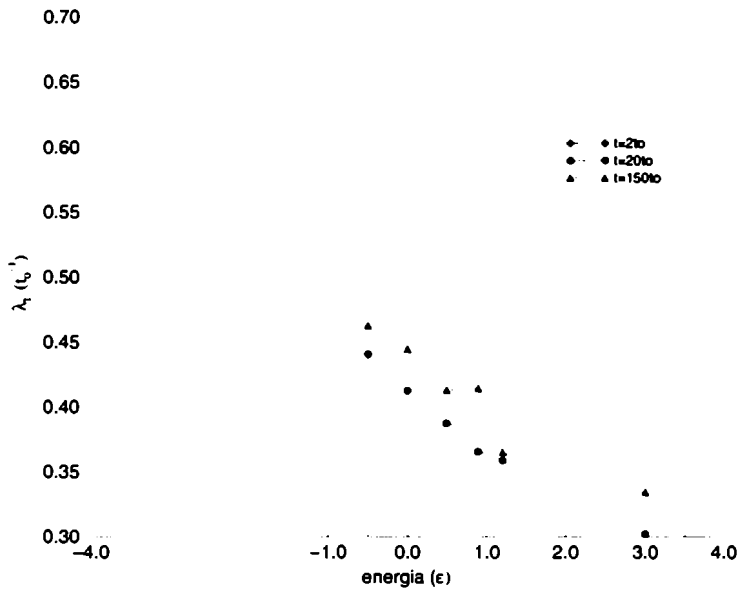

Figura 6.5: Máximo exponente de Lyapunov local (λ_L) como función de la energía para tres tiempos diferentes: $t = 2t_0$ (rombos), $t = 20t_0$ (circulos),$t = 150t_0$ (triangulos).

función del tamaño de la gota: $T_{lim}(A)$ [72].

Este máximo ocurre por lo tanto a la energía a la cual el sistema comienza a fragmentarse. Cuando en la próxima sección estudiemos el MLE del sistema en términos de los MLE de sus fragmentos se comprenderá mejor el rol del fragmento mas grande en el valor asintótico del MLE.

Durante el proceso de evolución de las gotas, el modo colectivo de expansión va separando los fragmentos hasta que estos no interactúan entre sí. De esta manera, partículas que a tiempos muy tempranos interacuaban entre sí dejan de hacerlo y solo lo hacen, mediante colisiones, con las de su propio racimo. Para investigar la relación entre el $MLLE$ y los procesos colisionales, vamos a calcular el momento medio transferido entre partículas como función de la energía y el tiempo [$C(t)$], el cual se define como

$$C(t) = \frac{1}{N_{conf}} \sum_{j=1}^{N_{conf}} \sum_{i=1}^{N} m. \left|\vec{v}(t+\delta) - \vec{v}(t)\right|, \tag{6.6}$$

donde N_{conf} es el número de configuraciones analizadas para cada energía y, por lo tanto, el $C(t)$ también lo calculamos sobre un ensamble de trayectorias con la misma energía.

El comportamiento de $C(t)$ como función del tiempo y para tres energías distintas [las mismas que en la Fig.(6.4)] se observa en la Fig.(6.6).

Vemos que el comportamiento de $C(t)$ es similar al del $MLLE$: a tiempos

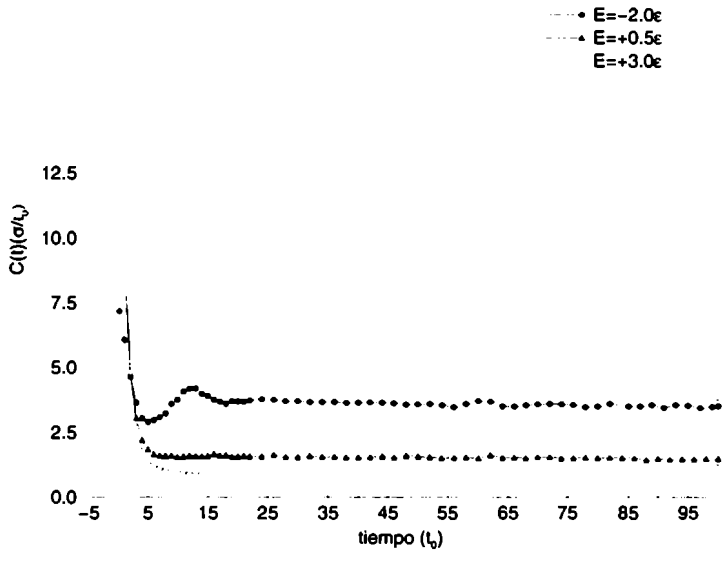

Figura 6.6: Momemto medio transferido entre partículas [C(t)] como función del tiempo para tres energías distintas: $E = -2.0\epsilon$ (circulos), $E = -0.5\epsilon$ (triangulos) y $E = 3.0\epsilon$ (rombos).

cortos ($t \simeq 2t_0$), decrece abruptamente con el tiempo hasta que alcanza un valor asintótico prácticamente estable. Podemos observar que para el caso mas energético, el decrecimiento también es mucho mas abrupto que en el menos energético. Esto es porque el modo colectivo, que tiende a separar al sistema en fragmentos no interactuantes, es mayor a energías mas altas.

Para $E = -2.0\epsilon$, $C(t)$ muestra un bucle entre $5t_0$ y $15t_0$ [Fig.(6.6)]. El mismo comportamiento es observado para energías en el rango $-2.0\epsilon < E < -1.3\epsilon$. Esta característica puede ser entendida si estudiamos el comportamiento del radio cuadrático medio del máximo fragmento (R_{rms}) como función del tiempo. En la Fig.(6.7) vemos que para $E = -2.0\epsilon$ el R_{rms} muestra un bucle similar al de $C(t)$ pero invertido: cuando R_{rms} crece, $C(t)$ decrece y viceversa. O sea, el fragmento mas grande se expande, luego se contrae y por último vuelve a expandirse.

El comportamiento de $C(t)$ como función de la energía es mostrado en la Fig.(6.8) para los mismos instantes en que analizamos el $MLLE$ en la Fig.(6.5). Vemos que a $t = 2t_0$ $C(t)$ es una función creciente la energía. Es decir que cuanto mas energía tiene el sistema, mas intenso es el proceso colisional (y mas caótico es el movimiento). Por otro lado, para $t \geq 20t_0$, $C(t)$ muestra un máximo para $E \simeq -3.0\epsilon$. A esta energía, el sistema aún no se fragmenta y su temperatura es ligeramente mas baja que la temperatura límite, T_{lim}, como se observa en la curva calórica de la Fig.(4.4). Para energías mayores que $E = -2.0\epsilon$, la gota se separa en fragmentos no interactuantes lo cual claramente disminuye la intensidad del proceso colisional entre las partículas.

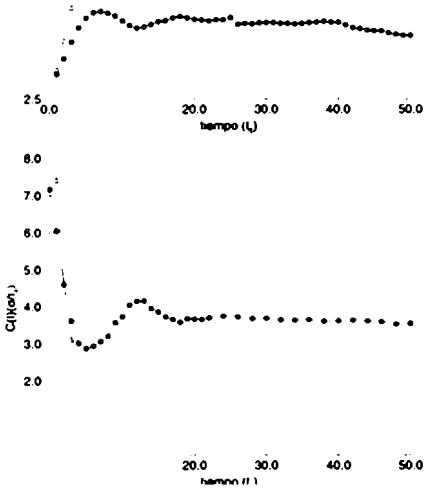

Figura 6.7: Radio cuadrático medio del fragmento mas grande (R_{rms}) (a) y momento medio transferido entre partículas (b) como función del tiempo para $E = -2.0\epsilon$ (circulos) y $E = -0.5\epsilon$ (triangulos).

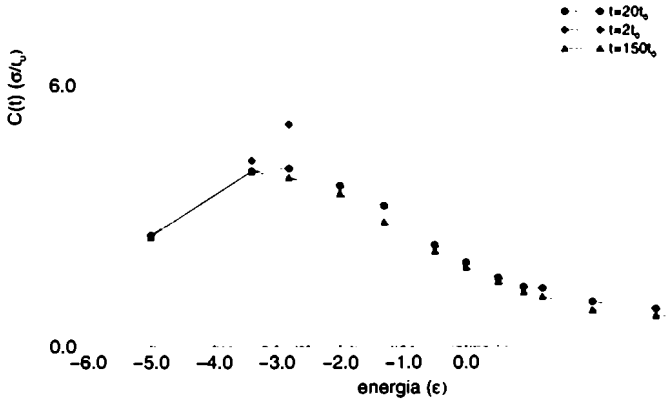

Figura 6.8: Momento medio transferido entre las partículas [C(t)] como función de la energía para tres tiempos diferentes: $t = 2t_0$ (rombos), $t = 20t_0$ (circulos),$t = 150t_0$ (triangulos).

Dado que para $t \geq 20t_0$ $C(t)$ permanece aproximadamente constante, podemos definir también un tiempo característico en este caso como $\tau_{mmt} \simeq 20t_0$.

Del análisis de lo anterior podemos concluir que los $MLLE$'s dependen fuertemente del modo colectivo de expansión: a tiempos muy cortos, la gota es altamente caótica porque toda la energía de excitación se manifiesta como colisiones entre partículas, ya que el modo colectivo no está desarrollado aún. En este caso tanto los $MLLE$'s como el momento medio transferido entre colisiones $C(t)$ aumenta con la energía. Pero cuando el sistema se expande, las colisiones entre partículas decrecen porque el sistema se está rompiendo en fragmentos no interactuantes y por lo tanto se vuelve menos caótico. Es interesante notar que tanto los $MLLE$ como el $C(t)$ se vuelven estables aún cuando los fragmentos $ECRA$ no están totalmente formados en el espacio de fases (para tiempos menores que τ_{ff}). Sin embargo vimos en capítulo 4 [Fig.(4.1)] que ciertas propiedades, como por ejemplo el tamaño medio del fragmento $ECRA$ mas grande, se hacen estables a tiempos similares que τ_{mle} y τ_{mmt} aún cuando los fragmentos no lo sean.

6.4.2 Comportamiento del MLE en la etapa asintótica

El objetivo principal que se perseguirá en esta sección es entender el comportamiento de los MLE asintóticos en términos del MLE de los fragmentos que constituyen el sistema. Pare esto, calculamos el MLE del sistema total y el MLE de sus fragmentos a su temperatura límite T_{lim} [72]. Partimos entonces de las configuraciones asintóticas de los calculos previos y clasificamos los fragmentos de acuerdo a su tamaño, calculando el MLE para cada tamaño usando la Eq.(6.4). El MLE resultante se grafica en la Fig.(6.9) [94].

En la figura vemos como la dependencia del MLE con el tamaño de los fragmentos se ajusta muy bien con una función de la forma:

$$\lambda = a(1 - N^{-1/3}) \tag{6.7}$$

con $a = 0.592t_0^{-1}$.

Si esto lo expresamos como $\lambda = \frac{a.(N-N^{2/3})}{N}$, vemos que el primer término marca una dependencia con el volumen (Si entendemos que $V \propto N$) y el segundo con la superficie. Si tomamos el límite $N \rightarrow \infty$ vemos que $\lambda \rightarrow a$. Por lo tanto, a representa el valor del MLE de un sistema infinito a T_{lim}. Este comportamiento ya ha sido encontrado en otros sistemas [101, 102].

Enfoquemos nuestra atención en el sistema como un todo. Si tomamos como punto de partida la Eq.(6.3), la distancia promedio entre la trayectoria principal y la de la hija en el espacio de velocidades d_v puede ser escrita como:

$$d_v = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_{clust}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_j} \left[(v_{xi}^{(2)} - v_{xi}^{(1)})^2 + (v_{yi}^{(2)} - v_{yi}^{(1)})^2 + (v_{zi}^{(2)} - v_{zi}^{(1)})^2 \right] \right\}}, \tag{6.8}$$

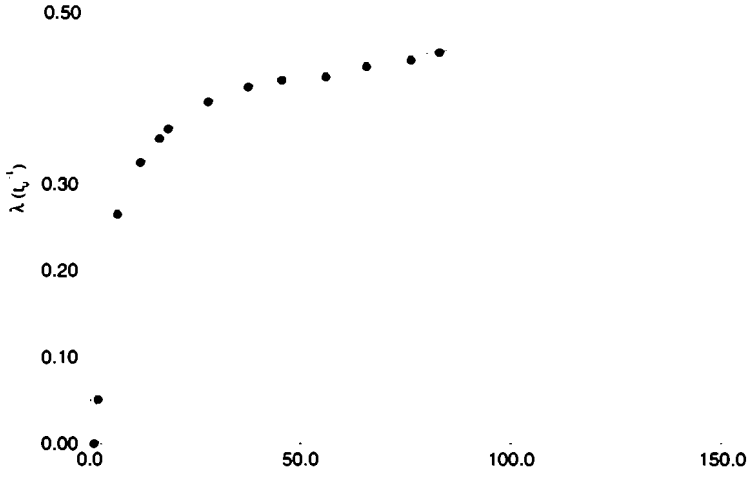

Figura 6.9: MLE (λ) como función del tamaño de los fragmentos asintóticos, A, (circulos negros) junto con la curva que mejor los ajusta (linea llena).

con N_{clust} el número total de fragmentos y n_j el número de partículas en el fragmento j. La expresión entre $\{..\}$ es la distancia en el espacio de velocidades en un cluster con n_j partículas, que si diverge con exponente λ_j, nos permite reescribir la Eq.(6.8) como

$$d_v = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_{clust}} \left[d_0^j.e^{\lambda_j.t}\right]^2}, \tag{6.9}$$

con d_0 la distancia inicial entre ambas trayectorias. Si además tenemos en cuenta que $d_0 \simeq c.n_j$ (con c constante), nos queda

$$d_v = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_{clust}} c^2.(n_j)^2.e^{2.\lambda_j.t}}. \tag{6.10}$$

Esta ecuación puede usarse de la siguiente manera: Para cada energía conocemos las distribuciones de fragmentos, o sea, cuantos fragmentos hay de cada tamaño (n_j). También conocemos la dependencia del MLE con el tamaño a partir de la Ec.(6.7) (λ_j). Esto nos permite graficar d_v de la Ec.(6.10) en función de t y obtener el MLE del sistema a partir de ajustar con una exponencial. Los valores del MLE obtenidos de esta manera y los obtenidos para el sistema usando la Ec.(6.4), se observan en la Fig.(6.10)

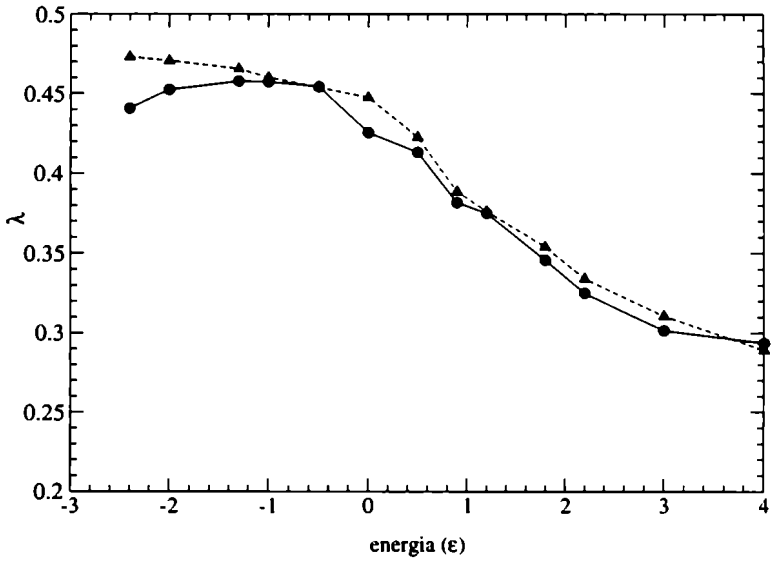

Figura 6.10: MLE del sistema, λ, calculado como función de la energía de acuerdo a la Ec.(6.4) (circulos) y en términos de sus fragmentos usando la Ec.(6.10).

Como puede observarse, ambas formas de calcular el MLE dan practicamente el mismo resultado.

Esta aproximación nos permite extraer aún mas información relacionada con el rol del fragmento mas grande en el valor final del MLE. Los valores del MLE de los fragmentos mas grandes en las distribuciones asintóticas, obtenidos del a Ec.(6.7), están muy próximos al valor del MLE del sistema total calculado de las Eq.(6.10) o (6.4).

De esta manera vemos que el valor del MLE del sistema depende principalmente del valor del MLE del fragmento mas grande que lo compone.

Con este resultado puede entenderse que el MLE del sistema total en su etapa asintótica tenga un máximo a la energía de excitación para la cual el fragmento asintótico mas grande tiene el mayor tamaño y la mayor temperatura posibles.

De la Ec.(6.10) podemos también calcular fácilmente las fluctuaciones de los valores asintóticos del MLE,

$$< \Delta\lambda >= \frac{\sqrt{(< \lambda^2 > - < \lambda >^2)}}{< \lambda >}. \tag{6.11}$$

En la Fig.(6.11) observamos la dependencia de dichas fluctuaciones con la energía del sistema. Es interesante notar que $\Delta\lambda$ muestra un súbito incremento para la enrgía de excitación a la cual la distribución de fragmentos del sistemas es del tipo ley de potencias.

Tomando en cuenta el comportamiento del MLE con el tamaño de los fragmentos, podemos entender este comportamiento de una manera sencilla: a bajas energías el sistema presenta esencialmente un gran fragmento y unos pocos mónomeros y dímeros. Cuando incrementamos la energía, el número de fragmentos pequeños se incrementa y el fragmento grande es reemplazado por fragmentos de tamaños intermedios. Finalmente, a energías suficientemente grandes, los fragmentos predominantes son fundamentalmente pequeños. Cuando este comportamiento es combinado con la dependencia del MLE dada por la Ec.(6.7), las fluctuaciones son amplificadas cuando el estado asintótico del sistema es una mezcla de fragmentos de todos los tamaños, como en una distribución tipo ley de potencias [103].

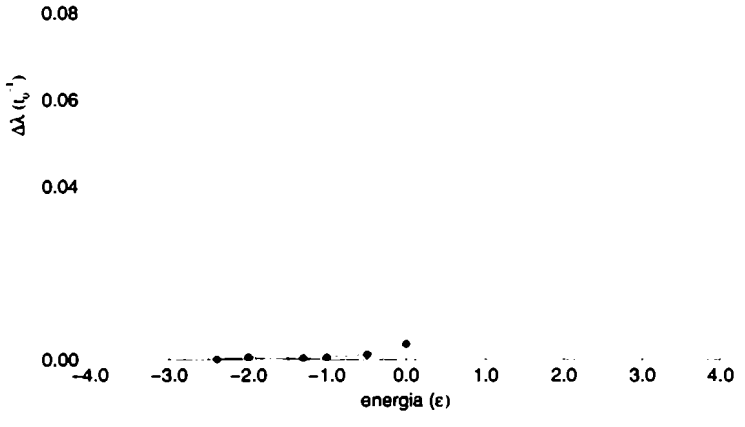

Figura 6.11: Fluctuaciones del MLE del sistema, $\Delta\lambda$, como función de la energía total. La flecha señala la energía para la cual se obtiene una ley de potencias en las distribuciones de fragmentos.

6.5 Sistemas confinados

En esta parte analizaremos un sistema de 147 partículas que interactúan mediante un potencial de Lennard-Jones truncado y corrido, confinado a volumenes esféricos de distintos radios, según ha sido detallado en la sección (5.2). Nos interesa saber como cambian las propiedades diámicas del sistema cuando éste puede alcanzar el equilibrio.

En el capítulo 5 analizamos las propiedades termodinámicas y de las particiones $ECRA$ de este tipo de sistemas. Vimos que el sistema muestra evidencias de una transición de fases en un amplio rango de densidades.

En esta sección nos enfocaremos principalmente en la caracterización dinámica de este tipos de sistemas mediante el estudio del máximo exponente de Lyapunov, MLE, y analizaremos la sensibilidad de esta magnitud a la transición que sobrelleva el sistema.

6.5.1 MLE y su dependencia de la energia y de la densidad

Una vez superado el transitorio, calculamos el máximo exponente de Lyapunov MLE para diferentes densidades de acuerdo al método de Benettin [Eq.(6.4)] tomando trayectorias de hasta $100000t_0$ [104].

En la Fig.(6.12) mostramos la dependencia del MLE como función de la energía para cuatro densidades distintas: $\rho = 0.02, 0.07, 0.20$ y $0.50\sigma^{-3}$, las mismas a las cuales han sido calculadas las curvas calóricas [Ver Fig.(5.1)].

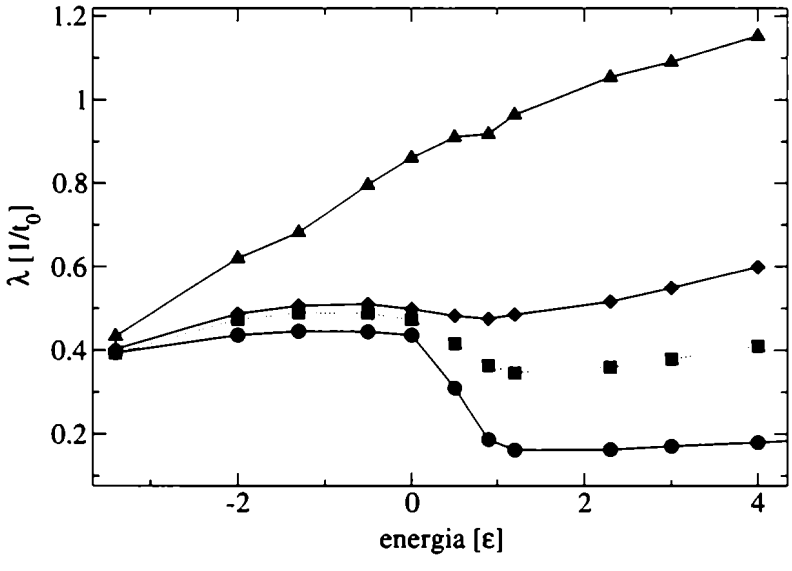

Figura 6.12: MLE como función de la energía depositada en el sistema para cuatro valores de densidad distintas: $\rho = 0.02, 0.07, 0.20$ y $0.50\sigma^{-3}$ con circulos, cuadrados, rombos y triangulos respectivamente.

Puede observarse que para energías menores que cero ($E < 0$), el MLE es una función creciente de la energía para todas las energías analizadas, al igual que la temperatura en el mismo rango de energías [Ver Fig.(5.1)]. Para energías mayores que cero, el comportamiento de los MLE's cambia abruptamente. En el rango $0 < E < 1$ vemos que para $\rho = 0.02$ el MLE es decreciente con la energía en correspondencia con el bucle que exhibe la curva calórica a la misma densidad. Por otra parte, para $\rho = 0.07$ y $0.20\sigma^{-3}$, el MLE decrece en el mismo rango de energías a pesar que sus correspondientes curvas calóricas solo muestran un cambio de pendiente en esa zona. Finalmente, para el caso mas denso considerado en esta sección, el MLE muestra un pequeño valle

cuando la curva calórica no exhibe ningún indicio.

Vemos que la caoticidad del sistema disminuye claramente en la región de energías donde aparecen otras señales relacionadas con indicios de una transición de fase del sistema y que han sido estudiadas en el capítulo 5.

6.5.2 Analisis del comportamiento del MLE

Una de las características principales del sistema durante esta transición (descripta en el capítulo 5) es la aparición de distribuciones de racimos $ECRA$ del tipo ley de potencias. Recordemos que los racimos $ECRA$ son las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases.

La aparición de estas estructuras se refleja en la interacción entre las partículas, como fue observado en [86], y por lo tanto en las fluctuaciones de la energía potencial por partícula. El comportamiento de estas fluctuaciones ($\sigma_{V,K}$) como función de la energía para cuatro densidades distintas se observa en la Fig.(6.13).

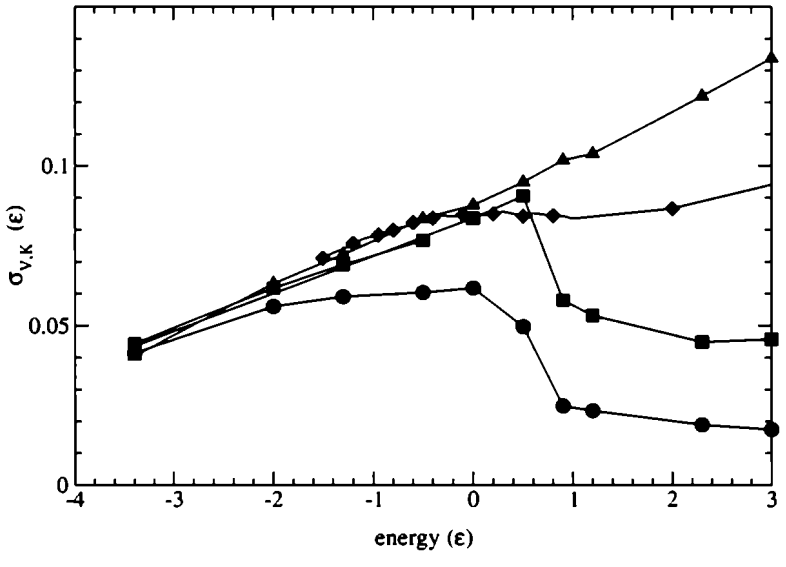

Figura 6.13: Fluctuaciones de energía potencial ($\sigma_{V,K}$) como función de la energía para cuatro densidades distintas: $\rho = 0.02, 0.07, 0.20$ y $0.50\sigma^{-3}$ con circulos, cuadrados, rombos y triangulos respectivamente.

En esta figura se observa como el comportamiento de las fluctuaciones de energía potencial (y por lo tanto cinéticas) es cualitativamente similar, para todas las densidades analizadas, al comportamiento del MLE como función de la energía. Esto nos indica que el comportamiento del MLE está intimamente relacionado a dichas fluctuaciones, como ha sido propuesto en [105] y ha sido analizado en [35] para racimos de 3 y 7 de Lennard-Jones.

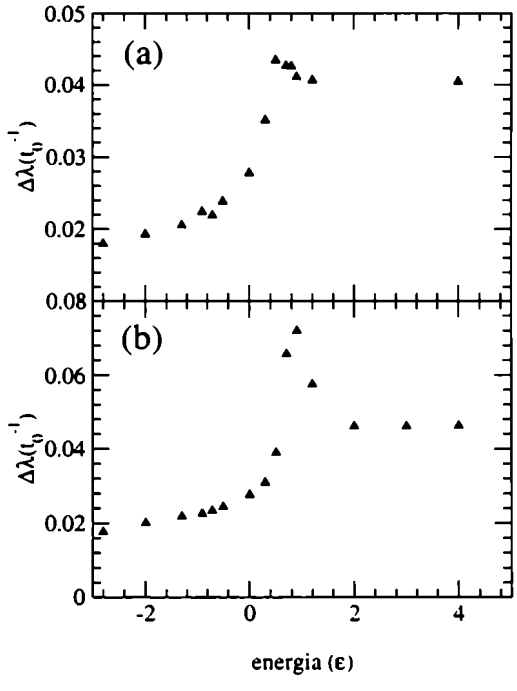

Figura 6.14: Fluctuaciones del MLE ($\Delta\lambda$) como función de la energía para dos densidades distintas: $\rho = 0.02$ y $0.07\sigma^{-3}$ con triangulos y circulos respectivamente.

Por último, dado que durante la transición las particiones $ECRA$ muestran racimos de todos los tamaños posibles, es interesante preguntarse si estas fluctuaciones en el tamaño medio de cada racimo tiene consecuencias sobre las fluctuaciones de los MLE.

En la Fig.(6.14) observamos como las fluctuaciones de los $MLLE$ muestran un pico en la región de la transición para las dos densidades mostradas y probablemente estén relacionadas con las flluctuaciones en los tamaños de los racimos $ECRA$ durante la transición.

6.6 Conclusiones

En la primera parte de este capítulo hemos analizado la evolución temporal de gotas altamente excitadas en términos de los $MLLE$. Encontramos que en la dinámica temprana de la gota es altamente colisional y está caracterizada por una relación creciente del $MLLE$ con la energía. En este regimen, el sistema se comporta como uno confinado a altas densidades: toda la energía de excitación va hacia el movimiento caótico de las partículas. Para tiempos posteriores, como el sistema desarrolla un modo colectivo de expansión, esta tendencia cambia. Para tiempos aún menores que los de fragmentación, tanto el $MLLE$ como el momento medio transferido entre partículas, $C(t)$, alcanzan sus valores asintóticos. Esto puede entenderse si tenemos en cuenta que al expandirse el sistema, el proceso colisional entre partículas disminuye. Para sistemas confinados a altas densidades vimos que el MLE sea una función creciente de la energía [106], pero para sistemas finitos con una superficie libre que desarrollan un modo colectivo, esto no sucede. En este caso, al fragmentar el sistema da lugar a un regimen asintótico compuesto de fragmentos no interactuantes a su temperatura límite (T_{lim}), por lo tanto la única fuente de caoticidad viene del proceso colisional dentro de los fragmentos. El resto de la energía se va al movimiemto colectivo de expansión el cual no contribuye al $MLLE$.

El sistema comienza en un estado altamente caótico y decae hacia uno mas ordenado. En este sentido, podemos pensar el proceso de fragmentación como una transición caos-orden.

Si nos centramos en el régimen asintótico, encontramos que el $MLLE$ es dominado por el de el máximo fragmento que lo compone y que las fluctuaciones del MLE muestran un salto considerable cuando la distribución de fragmentos es del tipo "ley de potencias".

En la segunda parte, hemos analizado el comportamiento de sistemas de 147 partículas encerradas en volumenes confinantes de diferentes tamaños en términos del MLE. Observamos que el MLE es muy sensible a la transición

del tipo líquido-gas que tiene lugar en el sistema. Se encontró también que el comportamiento del MLE con la energía y la densidad está fuertemente vinculado con el comportamiento de las fluctuaciones de la energía potencial por partícula y que las fluctuaciones del MLE tienen un máximo en la zona de la transición.

Capítulo 7

Conclusiones y Perspectivas

En este capítulo discutiremos algunos de los resultados obtenidos en la presente tesis y analizaremos las perspectivas de trabajos futuros que se desprenden de este trabajo.

7.1 Criticalidad en fragmentación

Hemos visto que en la fragmentación de gotas clásicas, las distribuciones de fragmentos pueden ser descriptas en términos de una ley de escalas del tipo

$$n_A = q_0(\tau)A^{-\tau}f(\epsilon A^{\sigma}), \tag{7.1}$$

en un rango de masas para el cual los efectos de tamaño finito son despreciables. Esta ley de escalas implica la presencia de un punto crítico para el cual la distribución de fragmentos sigue una ley de potencias con exponente τ. Hemos encontrado que las distribuciones de fragmentos $ECRA$ a tiempos de fragmentación muestran fuertes evidencias de comportamiento crítico que son absolutamente compatibles, para un cierto valor de energía del sistema, con las que se obtienen de las distribuciones de fragmentos asintóticas. Hemos calculado además cuatro exponentes críticos y comprobamos también que sus valores son similares a los obtenidos de las distribuciones asintóticas. Esto indica que la evolución dinámica que sigue al proceso de fragmentación no altera las características del comportamiento crítico del sistema y por lo tanto las señales de criticalidad y los exponentes críticos obtenidos a tiempos asintóticos (que son los únicos accesibles experimentalmente) reflejan la física del problema a tiempos de fragmentación.

Las señales de criticalidad estudiadas en este sistema, como ser las fluctuaciones normalizadas del tamaño del máximo fragmento, el segundo momento de la distribución o el mejor ajuste a una ley de potencias con un solo parámetro, fueron analizadas previamente en redes de percolación de dos tamaños distintos. De esta manera nos aseguramos dos cosas: (i) que dichas magnitudes reflejen efectivamente el comportamiento crítico del sistema en un problema donde las distribuciones de fragmentos se comportan de manera sim-

ilar y (ii) analizar como dependen dichas señales del tamaño del sistema. Con esto último vimos que las señales de criticalidad usadas son robustas aún en sistemas tan chicos como el de 147 partículas analizado. Mediante el cálculo de los exponentes críticos, comprobamos que existe un rango de masas para el cual la red finita refleja las propiedades críticas de la red infinita. De esta manera desarrollamos las herramientas usadas para buscar comportamiento crítico en los sistemas de 147 partículas que interactúan via un potencial de Lennard-Jones.

7.2 Transiciones de fase en sistema confinados

Hemos visto también que cuando al sistema se le permite alcanzar el equilibrio mediante su confinamiento a volúmenes de diferentes tamaños su comportamiento es notoriamente diferente y altamente dependiente de las dimensiones de dicho volumen. A diferencia del caso de la gota libre de expandirse, que exhibe una meseta en la región de altas energías, las curvas calórica calculadas exhiben todas una 'rama vapor', esto es, una relación creciente de la temperatura con la energía para altas energías. Tambiém vimos que para todas las densidades analizadas, las distribuciones de las fluctuaciones de densidad mas ligadas en el espacio de fases (fragmentos $ECRA$) muestran una distribución tipo ley de potencias a una dada energía. Del análisis de estas distribuciones y de las características de las curvas calóricas surgen fuertes evidencias de que el sistema está experimentando una transición de fase del tipo líquido-gas. Para densidades muy bajas ($\rho < 0.05\sigma^{-3}$), las curvas calóricas muestran un bucle en la zona de transición que se corresponde con valores de calor específico negativos y la aparición de un intruso convexo en la entropía. Todas estas son evidencias esperadas en un sistema finito que sobrelleva uan transición de fase de primer orden [17]. Para densidades intermedias ($0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$), el calor específico exhibe un máximo para aquellas energías en las cuales las distribuciones $ECRA$ muestran un exponente $\tau \sim 2.15$. Sin embargo, el exponente γ calculado es bajo comparado con el esperado para la clase de universalidad 3D-Ising. Esto parecería indicar que el sistema está sobrellevando una transición de primer orden aunque efectos de tamaño finito muestren alguna evidencia de comportamiento crítico. Para densidades $\rho \geq 0.35\sigma^{-3}$, las curvas calóricas no exhiben ninguna característica especial en la región de transición y los exponentes τ y γ calculados pueden ser clasificados dentro de la clase de Universalidad 3D-Ising (a la cual corresponde la transición de fase de segundo orden líquido-gas). Para sistemas de Lennard-Jones mas grande que los analizados se ha identificado el punto crítico para este tipo de sistemas en $\rho = 0.35\sigma^{-3}$ [88]. Así mismo, se ha encontrado en [79] una línea de puntos en el diagrama de fases donde se encuentran exponentes compatibles con comportamiento crítico como en el caso analizado aquí.

7.3 Aspectos no lineales en la evolución de gotas

Hemos analizado las propiedades no lineales de estos sistemas mediante el análisis del máximo exponente de Lyapunov (MLE). Para analizar la evolución temporal del proceso de expansión y fragmentación de la gota definimos el máximo exponente de Lyapunov local en el tiempo ($MLLE$). Mediante su análisis definimos la transición del sistema entre un estado inicial altamente caótico hacia otro mas ordenado cuando el sistema está fragmentado. Encontramos que el tiempo característico asociado a esta transición es menores que el tiempo de formación de fragmentos τ_{ff}, pero del orden del tiempo al cual el modo colectivo de expansión está completamente desarrollado. Por otra parte, del análisis de la dependencia del MLE de los fragmentos asintóticos con su masa encontramos que el valor del MLE asintótico está dominado por el valor del MLE del fragmento mas grande. De esta manera, el MLE asintótico del sistema es máximo para aquella energía para la cual el sistema se encuentra a la máxima temperatura posible sin fragmentarse.

Si la gota es confinada a volumenes esféricos, encontramos que el MLE es muy sensible a la transición de fases que toma lugar en este tipo de sistemas, aún para densidades donde la curva calórica no muestra indicios de tal transición. Así mismo, encontramos que el comportamiento del MLE está fuertemente relacionado a las fluctuaciones de energía potencial del sistema.

7.4 Perspectivas

Una de la perspectivas inmediatas de trabajo es obtener y analizar las funciones de escala con las que analizamos las distribuciones de fragmentos. Si bien algunas de ellas la hemos obtenido para percolación y para el sistema libre, nos queda pendiente a analizarlas en el sistema confinado.

En este sentido, estamos empezando a desarrollar un método que nos permita encontrar el punto crítico como aquel en donde los puntos de la distribución de fragmentos colapsan sobre una sola curva. Esta curva sería la función de escala como hemos visto. Una vez desarrollado este método, será posible probar si las distribuciones de fragmento pueden seguir otras leyes de escala, como por ejemplo la del modelo de la gota de Fisher.

Por otra parte, sería muy interesante analizar el proceso de fragmentación en gotas mas grandes para observar si el fenómeno presenta propiedades de escaleo de tamaño finito. Si bien observamos, aunque no rigurosamente, que la transición en percolación presenta tales características, queda pendiente el problema para fragmentación de gotas Lennard-Jones.

Con relación al fenómeno de la fragmentación, también queda como perspectiva de trabajo tratar de calcular y analizar el espectro completo de exponentes de Lyapunovs y, por medio de estos, el comportamiento de la entropía de Kolmogorov. En este sentido, este estudio nos permitirá una descrición mas detallada de la dinámica del sistema en el espacio de fases.

Por último creemos que quedan importantes avances por hacer a la hora de caracterizar la transición de fase sólido-líquido en pequeñas gotas.

Bibliografía

[1] H. Hutchinson *Science*, vol. 280, p. 693, 1998.

[2] R. P. Binzel *Nature*, vol. 388, p. 516, 1997.

[3] A. S. Hirsch *et al. Phys. Rev. C*, vol. 29, p. 508, 1984.

[4] A. Bonasera, M. Bruno, C. O. Dorso, and F. Mastinu *Nuovo Chimento*, vol. 23, 2000.

[5] B. Farizon *et al. Eur. Phys. Jour. D*, vol. 5, p. 5, 1999.

[6] L. Oddershede, P. Dimon, and J. Bohr *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, p. 3107, 1993.

[7] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*. Taylor and Francis, 1992.

[8] M. E. Fisher *Rep. Prog. Phys.*, vol. 30, p. 615, 1967.

[9] M. E. Fisher *Physics (N. Y.)*, vol. 3, p. 255, 1967.

[10] D. H. Gross and H. Massman *Nucl. Phys. A*, vol. 471, p. 339, 1987.

[11] D. H. Gross *Rep. Prog. Phys*, vol. 53, p. 605, 1990.

[12] J. B. Bondorf, A. S. Botvina, A. S. Iljinov, I.Ñ. Mishustin, and K. Sneppen *Phys. Report*, vol. 257, p. 133, 1995.

[13] W. Bauer and J. Kapusta, eds., *Advances in Nuclear Dynamics*. World Scientific, 1991.

[14] J. A. López and C. O. Dorso, *Phase Transformations in Nuclear Matter*. World Scientific, 2000.

[15] L. E. Reichl, *A modern course in Statistical Physics, second Ed.* John Wiley & Sons Inc., 1998.

[16] K. Huang, *Statistical Mechanics*. J. Wiley & Sons Inc., 1987. 2nd ed.

[17] D. H. Gross, *Microcanonical Thermodynamics*. Singapore: World Scientific, 2001. Lecture notes on Physics 66.

[18] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 58, p. 632, 1998.

[19] E. A. Guggenheim *J. Chem. Phys.*, vol. 13, p. 253, 1945.

[20] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena.* Oxford Science, 1971.

[21] J. Tobochnik *Am. J. Phys.*, vol. 69, p. 255, 2001.

[22] R. A. Ferrell, *Fluctuations in superconductors.* Stanford Research Institute, 1968.

[23] J. J. Binney, N. J. Dowrick, and A. J. Fisher, *The Theory of Critical Phenomena - An introduction to the Renormalization Group.* Oxford University Press, 1992.

[24] G. S. Rushbrooke *J. Chem. Phys.*, vol. 39, p. 842, 1963.

[25] R. B. Griffiths *J. Chem. Phys.*, vol. 43, p. 1958, 1965.

[26] R. B. Griffiths *Phys. Rev. Lett.*, vol. 14, p. 623, 1965.

[27] M. E. Fisher *Phys.Rev.*, vol. 180, p. 594, 1969.

[28] B. Widom *J. Chem. Phys.*, vol. 43, p. 3892, 1965.

[29] B. Widom *J. Chem. Phys.*, vol. 43, p. 3898, 1965.

[30] L.P.Kadanoff, *Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization.* World Scientific, Singapore, 2000.

[31] L. P. Kadanoff *Physics*, vol. 2, p. 263, 1966.

[32] K. G. Wilson *Rev. Mod. Phys.*, vol. 55, p. 583, 1983.

[33] D. J. Wales and I. Ohmine *J. Chem. Phys.*, vol. 98, p. 1321, 1993.

[34] P. Labastie and R. L. Whetten *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, p. 1567, 1990.

[35] R. S. Berry, R. Hinde, and D. Wales *J. Chem. Phys.*, vol. 96, p. 1376, 1992.

[36] D. J. Wales and R. S. Berry *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 2875, 1994.

[37] V. Mehra and R.Ramaswamy *Phys. Rev. E*, vol. 56, p. 2508, 1997.

[38] S.Ñayak, R. Ramaswamy, and C. Chakravarty *Phys. Rev. E*, vol. 51, p. 3376, 1995.

[39] G. Tanner, S.Ñayak, *et al. Phys. Rev. E*, vol. 55, p. 332, 1997.

[40] A. Proykova and R. S. Berry *Zeitschrift fur physik D*, vol. 1, p. 215, 1996.

[41] J. Jellineck, T. L. Beck, and R. S. Berry *J. Chem. Phys.*, vol. 5, p. 84, 1986.

[42] P. M. Ajayan and L. D. Marks *Phys. Rev. Lett.*, vol. 63, p. 279, 1989.

[43] M. S. et al *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, p. 99, 1997.

[44] S. L. L. et al *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, p. 99, 1996.

[45] M. L. Gilkes *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 1590, 1994.

[46] M. Belkacem, V. Latora, and A. Bonasera *Phys. Rev. C*, vol. 52, p. 271, 1995.

[47] F. Gulminelli and P. Chomaz *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, p. 1402, 1999.

[48] J. M. Carmona, N. Michel, J. Richert, and P. Wagner *Phys. Rev. C*, vol. 61, p. 037304, 2000.

[49] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 55, p. 1319, 1997.

[50] J. B. Natowitz *et al. Phys. Rev. C*, vol. 65, p. 034618, 2002.

[51] J. W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Physics.* Yale University Press., 1928.

[52] C.Ñ. Yang and T. D. Lee *Phys. Rev.*, vol. 87, p. 410, 1952.

[53] H.Ñakanishi and H. E. Stanley *Phys. Rev. B*, vol. 22, p. 2466, 1980.

[54] W. Bauer *Phys. Rev. C*, vol. 38, p. 1297, 1988.

[55] W. B. T. Li *et al. Phys. Rev. C*, vol. 49, p. 1630, 1994.

[56] W. Bauer, ed., *Common aspects of phase transitions of molecules, nuclei and hadronic matter*, (Acicastello, Italy), CRIS 2000, North-Holland, 2000.

[57] C. O. Dorso and R. Donangelo *Phys. Lett. B*, vol. 244, p. 165, 1990.

[58] R. Donangelo, C. O. Dorso, and H. D. Marta *Phys. Lett. B*, vol. 263, p. 14, 1991.

[59] C. O. Dorso, P. Balonga, and R. Donangelo *Phys. Rev. C*, vol. 47, p. 2204, 1993.

[60] Y. G. Ma *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, p. 3617, 1999.

[61] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 62, p. 64603, 2000.

[62] C. O. Dorso, V. Latora, and A. Bonasera *Phys. Rev. C*, vol. 60, p. 034606, 1999.

[63] A. D. Panagiotou *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, p. 496, 1984.

[64] W. A. Bauer *et al. Phys. Lett. B*, vol. 150, p. 53, 1985.

[65] T. Li *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, p. 1924, 1993.

[66] C. Williams *et al. Phys. Rev. C*, vol. 55, 1997.

[67] C. O. Dorso and A. Bonasera *European Physical Journal A*, vol. 11, p. 421, 2001.

[68] P. Balenzuela and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 65, p. 57602, 2002.

[69] A. Vicentini, G. Jacucci, and V. R. Pandharipande *Phys. Rev. C*, vol. 31, p. 1783, 1985.

[70] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation, from Algorithms to Applications.* Academic Press, 1996.

[71] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 56, p. 995, 1997.

[72] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 59, p. 285, 1999.

[73] C. O. Dorso and J. Randrup *Phys. Lett. B*, vol. 301, p. 328, 1993.

[74] C. O. Dorso and J. Aichelin *Phys. Lett. B*, vol. 345, p. 197, 1995.

[75] A. Chernomoretz, M. Ison, S. Ortiz, and C. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 64, p. 24606, 2001.

[76] P. Balenzuela, A. Chernomoretz, and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 66, p. 24613, 2002.

[77] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 49, p. 3185, 1994.

[78] F. Gulminelli *et al. Europhys. Lett.*, vol. 50, p. 434, 2000.

[79] X. Campi, H. Krivine, and N. Sator *Nucl. Phys. A*, vol. 681, p. 458, 2001.

[80] T. Cagin and J. R. Ray *Phys. Rev. A*, vol. 37, p. 247, 1988.

[81] M. Schmidt *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, p. 1191, 2001.

[82] M. D'Agostino *et al. Phys. Lett. B*, vol. 473, p. 219, 2000.

[83] P. Chomaz and F. Gulminelli *Nucl. Phys. A*, vol. 647, p. 153, 1999.

[84] J. Pan, S. D. Gupta, and M. Grant *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, p. 1182, 1998.

[85] F. Gulminelli, P. Chomaz, and V.Dulflot *Int. Journ. Mod. Phys. E*, vol. 8, p. 527, 1999.

[86] A. Chernomoretz, P. Balenzuela, and C. O. Dorso. arXiv:nucl-th/0203050.

[87] A. Chernomoretz, "Fragmentación de sistemas finitos," Master's thesis, Dto Física, FCEyN UBA, 2002.

[88] J. P. Hansen and L. Verlet *Phys. Rev.*, vol. 184, p. 151, 1969.

[89] N. B. Wilding *Phys. Rev. E*, vol. 52, p. 602, 1995.

[90] A. Coniglio and W. Klein *J. Phys. A*, vol. 13, p. 2775, 1980.

[91] A. J. Lichtemberg and M. A. Lieberman, *Regular and chaotic dynamics.* Springer Verlag, 1992.

[92] A. Bonasera, V. Latora, and A. Rapisarda *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 3434, 1995.

[93] P.Balenzuela, "Transiciones de fase en sistemas finitos," Master's thesis, Dto Física, FCEyN UBA, 1998.

[94] P. Balenzuela, A. Bonasera, and C. O. Dorso *Phys. Rev. E*, vol. 62, p. 7848, 2000.

[95] G. L. Baker and J. P. Gollub, *Chaotic Dynamics, an introduction.* Cambridge University Press, 1990.

[96] H. D. Meyer *J. Chem. Phys.*, vol. 84, p. 3147, 1986.

[97] I. Shimada and T.Ñagashima *Prog. Theor. Phys.*, vol. 61, p. 1605, 1979.

[98] G. Benettin, L. Galgani, and J. M. Strelcyn *Phys. Rev. A*, vol. 14, p. 2338, 1976.

[99] V. I. Osedelec *Tr. Mosk. Mat. Obsch.*, vol. 19, p. 179, 1968.

[100] C. Armitrano and R. S. Berry *Phys. Rev. E*, vol. 47, p. 3158, 1993.

[101] M. C. Firpo *Phys. Rev. E*, vol. 57, p. 6599, 1998.

[102] V. Latora, A. Rapisarda, and S. Ruffo *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, p. 692, 1998.

[103] P. Balenzuela and C. O. Dorso *Physica A*, vol. 283, p. 267, 2000.

[104] M. Ison, P. Balenzuela, A. Bonasera, and C. O. Dorso *Eur. Phy. Jour. A*, vol. 14, p. 451, 2002.

[105] L. Casetti, C. Clementi, and M. Pettini *Phys. Rev. E*, vol. 54, p. 5969, 1996.

[106] C. Dellago and H. A. Posch *Phys. Rev. E*, vol. 55, 1997.

Agradecimientos

Muchas cosas han pasado desde que inconscientemente me volqué al estudio de las ciencias en épocas en que este país era otro país. Y a mucha gente tengo que agradecer en consecuencia.

En primer lugar, a mis viejos, que me apoyaron desde siempre y me estimularon siempre a seguir. Gracias

En segundo lugar, a dorso, quien me enseño como hacer ciencia y me contagió toda su pasión.

En tercer lugar a mis amigos de acá, con quien hemos compartido estos ultimos años juntos: ariel, el mison, zeta, guido, gianni, richie, laura, silvina....

Y por último a Lolé, mi compañera, sin la cual nada de esto tendría sentido.

№ 34943

Buenos Aires 24-10-02

Lista de Publicaciones relacionadas con su tesis de doctorado del Lic. P.Balenzuela

Publicaciones con referato:

- Maximum Lyapunov Exponent of highly excited finite systems, P.Balenzuela and C.O.Dorso *Physica A*283 (2000) 267
- Local (in time) Maximum Lyapunov exponents in fragmentation, P.Balenzuela, A.Bonasera and C.O.Dorso, *Phys. Rev. E* 62 (2000)
- Time dependence of critical behavior in multifragmentation, P.Balenzuela, A.Chernomoretz, C.O.Dorso Phys.Rev.C 66, 024613 (2002)
- Information Entropy in fragmenting systems P.Balenzuela and C.O.Dorso Phys. Rev.C 65 (2002) 057602
- Dynamical Properties of Constrained Drops. M.Ison, P. Balenzuela, A. Bonasera and C.O.Dorso, *Eur. Phys. J.A* 14 (2002) 451

Actas de Congreso

- Lyapunov exponents of finite systems, P.Balenzuela y C.O.Dorso, Anales AFA (2000)
- Dynamics and Thermodynamics of constrained systems, M.Ison, P.Balenzuela, A.Bonasera y C.O.Dorso; Proc. CRIS 2002 (Catania Relativistic Ion Studies)

Trabajos enviados

- Classical drop phase diagram and cluster distributions A.Chernomoretz, P.Balenzuela, C.O. Dorso, submitted to Nucl.Phys.A arXiv:nucl-theo/0203050

Trabajos en redaccion

- Scaling functions for constrained and unconstrained highly excited drops. P.Balenzuel and C.O.Dorso

Dr. C.O.Dorso