

Tesis de Posgrado

Fragmentación de sistemas finitos

Chernomoretz, Ariel

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:

Chernomoretz, Ariel. (2002). Fragmentación de sistemas finitos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_3498_Chernomoretz.pdf

Cita tipo Chicago:

Chernomoretz, Ariel. "Fragmentación de sistemas finitos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2002.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_3498_Chernomoretz.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

Fragmentación de Sistemas
Finitos

Autor: Lic. Ariel Chernomoretz

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

Septiembre de 2002

*"Porque yo soy del tamaño de lo que veo
y no del tamaño de mi estatura."
F. Pessoa*

*Para César y Ludmila,
los dos extremos de mi madeja.*

Resumen:

En la presente tesis estudiamos procesos de fragmentación de sistemas finitos, formados por constituyentes que interactúan de a pares a través de potenciales de corto rango. Utilizamos técnicas de dinámica molecular para simular experimentos de fragmentación de sistemas confinados en volumen, de sistemas libres no-confinados y de procesos de producción de fragmentos como consecuencia de colisiones entre un blanco y un proyectil. En cada escenario analizamos el proceso de formación de fragmentos no sólo en el espacio configuracional, sino también en el espacio de fases, utilizando algoritmos avanzados de reconocimiento de fragmentos que buscan estructuras ligadas en el espacio $q-p$.

En el estudio de sistemas confinados encontramos, para situaciones de alta dilución, claras señales de una transición de fase de primer orden, entre una fase tipo-líquida (presencia de una gota de gran masa) y una fase tipo-vapor (sólo fragmentos livianos), que tiene lugar en un sistema finito. Analizamos la existencia de fluctuaciones anormalmente grandes de la energía cinética, curvas calóricas con convexidades anómalas (*loops*) y calores específicos negativos. Determinamos el origen microscópico de dichas señales y pudimos explicar cómo “desaparecen” en la medida en que la densidad del sistema aumenta y la transición se torna continua. A su vez, utilizando información de correlaciones microscópicas en el espacio de fases, pudimos obtener el diagrama de fases y caracterizar el comportamiento crítico del sistema.

En el análisis de sistemas no-confinados encontramos que la dinámica del sistema sólo admite el establecimiento de un *equilibrio local* sobre un campo de velocidades asociado a un movimiento colectivo de expansión. En este nuevo escenario estudiamos el comportamiento de la curva calórica y la dependencia temporal de observables tales como las fluctuaciones relativas de la energía cinética, K y los espectros de masas de los fragmentos producidos. Pudimos reconocer el vínculo natural que se presenta entre fluctuaciones anormalmente grandes de K y la presencia de espectros de masa asintóticos libres de escala.

Finalmente analizamos dos aspectos relacionados directamente con el mecanismo de excitación por colisiones. Por un lado estudiamos el proceso de deposición de energía en el blanco por parte del proyectil y pudimos encontrar la correspondiente curva calórica, encontrando que presentaba características similares al caso de explosiones no confinadas. Por otra parte, considerando un potencial semi-clásico para modelar la interacción nuclear, pudimos desarrollar un modelo de formación de fragmentos en colisiones de iones pesados que fija un marco dentro del cual se pueden interpretar recientes resultados experimentales.

Palabras Clave: Fragmentación - Sistemas Finitos - Colisiones de Iones Pesados - Transiciones de Fase - Fenómenos Críticos - Física Computacional - Dinámica Molecular

‘Finite Systems Fragmentation’

Abstract: In this thesis we studied the process of fragmentation of small systems composed by atomistic constituents that interact through short range potentials. We used molecular dynamics techniques in order to simulate fragmentation processes that take place in volume constrained systems, free to expand systems, and projectile-target collisions. We characterized the process of fragment formation not only in configurational space but also in phase space. We used, to that end, advance fragment recognition algorithms that search for well correlated structures in $\mathbf{q-p}$ space.

In the case of constrained systems, for very diluted configurations, clear signals of a first order phase transitions taking place between a liquid-like phase (presence of a big cluster) and a gas-like phase (just light clusters) could be found. In particular, we analyzed the presence of abnormally large kinetic energy fluctuations, abnormal convexities (loops) in caloric curves, and negative specific heats. We analyzed the microscopic origin of those signals, and explained why they disappear as the system density is increased. Finally, using information about the microscopic correlations in phase space, we obtained the system phase diagram and characterized its critical behavior.

For non-constrained systems we found that a *local equilibrium* picture, mounted over an expansive collective motion, is best suited to describe the fragmentation scenario. In this case, we studied the caloric curve behavior and the temporal evolution of observables like mass fragment distributions and relative kinetic energy fluctuations. In this way, we could recognize the relationship between large K fluctuations and scale-free asymptotic mass distributions.

Finally, we analyzed two features directly related to collisions as a mechanism to excite finite system. On one hand, we studied the energy deposition process in the target, and calculated the respective caloric curve, finding that it presented the same features as the one corresponding to the non-constrained case. On the other hand, we introduced a quasi-classical model for the fragment formation process that take place in heavy ion collisions.

Key Words: Fragmentation - Finite Systems - Heavy Ion Collisions - Phase Transitions - Critical Phenomena - Computer Physics - Molecular Dynamics

Glosario

CC	Curva Calórica. Dependencia funcional de la temperatura de un sistema con su energía.
CIP	Colisiones de Iones Pesados.
CMD	Dinámica Molecular Clásica.
DAAB	Ruptura asimétrica retardada y alineada (<i>delayed aligned asymmetric break-up</i>).
ECRA	Algoritmo de reconocimiento temprano de fragmentos (<i>Early cluster recognition algorithm</i>).
FDML	Fluctuación de densidad más ligada en el espacio de fases.
FP	Partícula Libre (a tiempo t_{tag}).
FSS	Escaleo de tamaño finito (<i>finite size scaling</i>).
IMF	Fragmentos de Masas Intermedias (<i>intermediate mass fragments</i>).
MST	<i>Minimum Spanning Tree</i> (algoritmo de reconocimiento de fragmentos).
MSTE	<i>Minimum Spanning Tree in Energy Space</i> (algoritmo de reconocimiento de fragmentos).
MVT	Velocidad Media Transferida (<i>mean velocity transferred</i>).
NVM	Varianza media normalizada.
PEPs	Partículas emitidas prontamente (<i>promptly emitted particles</i>).
QP	Cuasi-proyectil.
QT	Cuasi-blanco.
TRF	Función de respuesta térmica (<i>thermal response function</i>).

Índice General

Glosario	vii
1 Introducción	1
1.1 Fragmentación Nuclear	2
1.2 Motivación	4
1.3 Organización del Trabajo	5
2 Características de los sistemas bajo estudio	9
3 Transiciones de fase: Conceptos Generales	13
3.1 Transiciones de Fase en Sistemas Infinitos	14
3.1.1 Termodinámica de Transiciones de Primer Orden	14
3.1.2 Termodinámica de Transiciones Continuas	16
3.1.3 Parámetros de Orden	16
3.1.4 Fenómenos Críticos	17
3.1.5 Universalidad	19
3.1.6 Descripción mediante Ensamblés	19
3.2 Transiciones de Fase en Sistemas Finitos	20
3.2.1 Enfoque Microcanónico	24
3.2.2 Señales de la Transición	26
4 Fragmentación en sistemas confinados	31
4.1 Introducción	31
4.1.1 Descripción del Modelo	31
4.1.2 Definiciones de Fragmento	32
4.2 Descripción Termodinámica	34
4.2.1 Curva Calórica	34
4.2.2 Función de Respuesta Térmica	37
4.3 Correlaciones Microscópicas	39
4.3.1 Distribución de Fragmentos	40
4.3.2 Origen Microscópico de Fluctuaciones	43
4.3.3 Señales de la Transición	44
4.3.4 Exponentes Críticos	46
4.4 Diagrama de Fases	47
4.5 Conclusiones	51
5 Fragmentación en sistemas no confinados	53
5.1 Introducción	53
5.2 Sistemas No Confinados	54
5.2.1 Evolución Dinámica	55
5.2.2 Curva Calórica	56

5.3	Evolución Confinada vs. Evolución Libre	58
5.3.1	Fluctuaciones de la Energía Cinética	61
5.4	Conclusiones	64
6	Sistemas Excitados por medio de Colisiones	67
6.1	Introducción	67
6.2	Modelo	68
6.3	Partición del Sistema en Fragmentos	69
6.4	Evolución Dinámica	69
6.4.1	Cálculo de la Energía de Excitación	72
6.4.2	Tiempo de Formación de Fragmentos	73
6.4.3	Comparación con Sistemas Isotrópicamente Excitados	75
6.5	Estimación de Temperaturas	78
6.5.1	Temperatura Local	79
6.5.2	Temperatura de Fragmentos	80
6.6	Curva Calórica	81
6.7	Conclusiones	82
7	Dinámica de Formación de Fragmentos en Colisiones Nuclea-	
	res	83
7.1	Introducción	83
7.2	Escenario de una Reacción de Iones Pesados	83
7.3	Datos Experimentales	85
7.4	Modelo Semiclásico de Interacciones Nucleares	85
7.5	Reconocimiento de Fragmentos	87
7.6	Fiabilidad de las Simulaciones	88
7.7	Fuentes de Emisión de Partículas	90
7.8	Tiempos de Emisión de IMF	91
7.9	El Rol de las Interacciones Coulombianas	94
7.10	Escenarios de Producción de Fragmentos	95
7.11	Conclusiones	96
8	Conclusiones y Perspectivas	97
A	Algoritmos de Dinámica Molecular	99
B	Percolación	101
C	Cálculo de Exponentes Críticos τ y γ	103
D	Persistencia de una Partición	105

Capítulo 1

Introducción

Muchos de nosotros seguramente hemos sido testigos de la destrucción de la *Estrella de la Muerte* en manos de Luke Skywalker, y vimos como la misma se convertía en infinitud de fragmentos al explotar en el espacio. Al margen de este episodio de ficción, el fenómeno de fragmentación ocupa la atención de científicos en muy diversas áreas de la física y otras ciencias, como por ejemplo la biología y la geología [1].

Desde un punto de vista muy general, se puede definir como *fragmentación* al proceso por el cual un cuerpo caracterizado por una magnitud extensiva m (típicamente su masa) se convierte en un conjunto de cuerpos más pequeños, de la misma naturaleza, caracterizados por cantidades: $m_1, m_2, \dots, m_n$.

Dentro de este marco, el fenómeno de fragmentación se presenta como un proceso, muy común de la Naturaleza, que involucra un gran número de sistemas con dimensiones características que difieren entre sí en varios órdenes de magnitud y que abarcan desde modelos de formación y distribución de galaxias y asteroides [2, 3, 4], hasta la multifragmentación de núcleos atómicos. Entre esos dos extremos, una muy resumida lista de otros sistemas donde el proceso de fragmentación es relevante podría incluir: colisiones de clusters moleculares con superficies [5], deposición subita de energía sobre superficies libres (ablación por laser) [6], fragmentación de objetos de arcilla [7, 8], de yeso, o de parafina [9], análisis de fragmentos causados por terremotos [10], fragmentación en líquidos sobrecalentados [11], etc.

A pesar de la diversidad de sistemas en los que se presenta y de las diferencias en los mecanismos específicos involucrados, es posible encontrar similitudes significativas entre ellos. En particular, un rasgo que ha recibido mucha atención por parte de la comunidad científica es una observación experimental relacionada con el comportamiento de las distribuciones de tamaños de los fragmentos producidos: las mismas pueden ser ajustadas, independientemente del detalle de las interacciones del sistema y para determinados valores de los parámetros de control, por una ley de potencias del tipo:

$$n_s \sim s^{-\tau} \tag{1.1}$$

donde n_s es la cantidad producida de fragmentos de tamaño s .

El aspecto más relevante de la ecuación (1.1), es que indica que el proceso descrito no involucra ninguna escala característica. El tamaño finito del objeto inicial y el tamaño de los constituyentes actúan como cortes máximo y mínimo de la distribución, pero a parte de ellos no existe tamaño característico alguno que pueda separar dos regímenes bien diferenciados.

Esto es bien conocido en el área de los fenómenos críticos. Como veremos en el Cap. 3, en las proximidades del punto crítico la longitud de correlación del sistema diverge. Desaparece entonces del sistema la noción de *escala característica* por lo que todas las escalas se vuelven relevantes y esto se traduce en la aparición de comportamientos tipo ley de potencias (distribuciones libres de escala) para diversos observables [12]. En particular, el modelo de la gota de Fisher, que como veremos describe propiedades de la distribución de fragmentos en un sistema que realiza una transición líquido-vapor, predice que en el punto crítico los tamaños de los racimos de partículas presentes en el sistema siguen una ley de la forma dada por la ecuación 1.1 (ver Sec. 3.1.1).

1.1 Fragmentación Nuclear

Uno de los ámbitos desde donde más se ha impulsado el estudio del problema de la fragmentación, por estar éste naturalmente ligado a las únicas técnicas experimentales disponibles, es en el campo de las reacciones nucleares de iones pesados. En efecto, las colisiones de iones pesados (CIP) a energías intermedias ($E_{beam} \lesssim 100$ MeV/nucleon) son la única herramienta experimental que se dispone para estudiar sistemas nucleares sometidos a diferentes condiciones de densidad y energía de excitación.

Típicamente, el núcleo atómico es 14 ordenes de magnitud más denso que cualquier compuesto químico, como podría ser el agua (casi toda la masa del átomo se encuentra localizada en el núcleo). Sin embargo, las fuerzas entre sus constituyentes (protones y neutrones) presentan una fuerte similitud con respecto a las que se encuentran entre las moléculas de un líquido. Son de rango acotado, fuertemente repulsivas a distancias cortas, y atractivas a distancias intermedias. Esto permitió sugerir, desde un punto de vista teórico, la existencia de una posible transición de fase tipo líquido-vapor para la materia nuclear [13]. En dicha transición, la fase de baja energía está constituida por un *líquido de Fermi*, y la de alta energía, por un *gas nuclear* compuesto por nucleones libres y algunos fragmentos livianos.

En este contexto el trabajo que atrajo la atención general sobre el proceso de multifragmentación nuclear fue, sin duda, la observación experimental, realizada por el grupo de Purdue [14], de que espectros de fragmentos producidos en colisiones de iones pesados podían ser efectivamente ajustados por una ley de potencia como la referida en la ecuación 1.1 (ver Fig. 1.1).

La observación de este tipo de distribución de fragmentos fue considerada por muchos investigadores como la evidencia experimental que, vía modelos teóricos como el desarrollado por Fisher [15] (ver 3.1.1 más adelante), permitía

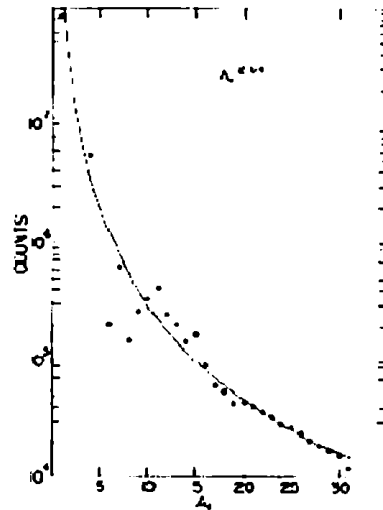


Figura 1.1: Espectro de masas obtenido en experimentos de colisiones nucleares de protones sobre núcleos de Xe, ajustados por una ley de potencias [14].

vincular al proceso de fragmentación nuclear con el concepto de transiciones de fase. Más aún, dicho modelo predice una distribución tipo ley de potencias sólo en el punto crítico de la transición, por lo que el hallazgo del grupo de Purdue fue interpretado como una signatura de la ocurrencia de fenómenos críticos en el sistema^{1 2} [17, 18, 19, 20]

A partir de este resultado, mucho esfuerzo se ha invertido en la búsqueda de parámetros y exponentes críticos [21, 22, 23, 24, 25]. En particular, a partir de la década de los '90, gracias al desarrollo de una tecnología de detección adecuada, hubo gran actividad experimental consagrada no sólo a la búsqueda de dicha transición sino también a resolver la cuestión más general: ¿cuál es la ecuación de estado para la materia nuclear? [26, 27, 28].

Un punto que es importante mencionar es que justamente para las energías de excitación intermedias (del orden de la energía de ligadura del núcleo), para las cuales se encuentran distribuciones tipo leyes de potencia, los núcleos excitados producidos en CIP se desintegran dando lugar a *fragmentos de masa intermedia* (IMF), constituidos por clusters de tamaños mayores a las partículas evaporadas, pero menores que los productos de fisión o residuos de la emisión evaporativa. Típicamente se toma $3 \leq z \leq Z_0/3$, con z la carga de los IMF y Z_0 la carga del núcleo de origen. Este nuevo canal de desexcitación, caracterizado por la producción de IMF, es intrínsecamente diferente por su naturaleza a los modos de fisión, evaporación o vaporización total del núcleo y es conocido bajo el nombre de régimen de *multifragmentación* [29, 30].

¹Aunque el ajuste de la Fig. 1.1 es aceptable, el valor estimado de $\tau = 2.64$ resulta extremadamente alto cuando se lo compara con los valores $\tau \sim 2.3$ obtenidos posteriormente. La causa de este desacuerdo se debe a errores sistemáticos en el trabajo original relacionados con la clasificación de eventos de acuerdo a su energía

²Vale la pena destacar, sin embargo, que encontrar una dependencia tipo ley de potencias es una condición necesaria pero no suficiente para determinar la existencia de fenómenos críticos, por lo que señales de criticalidad adicionales son requeridas [16].

1.2 Motivación

En años recientes se ha ido desarrollando un interés creciente en tratar de extender el análisis termodinámico usual, aplicable al estudio de sistemas infinitos, para describir el comportamiento de sistemas finitos. Más aún, la idea que sistemas pequeños puedan ser estudiados desde la mecánica estadística como problemas en sí mismos, en vez de ser considerados como una versión *en pequeño* de sistemas macroscópicos ha ido ganando más y más adeptos en los últimos tiempos.

Mucho ya se ha hecho en este sentido. Podemos mencionar, por ejemplo, la importante contribución de T. Hill, quien sentó las bases para el análisis termodinámico de sistemas pequeños [31]. También estudios computacionales, desarrollados desde finales de la década del '80 por Doyle, Berry & Wales, enfocados principalmente en transiciones desde una fase tipo-sólida a una tipo-líquida en clusters atomísticos, permitieron extender conceptos tales como el de *coexistencia de fases* a sistemas de tan sólo una decena de componentes [32, 33].

Centrado en el análisis de una transición tipo líquido-gas y motivado principalmente por el estudio de la multifragmentación nuclear, podemos citar el desarrollo de los primeros modelos estadísticos de Randrup y Koonin [34] y la labor posterior del grupo de Bondorf [35] y de D. H. Gross [36]. Este último planteó una formulación estadística aplicable a sistemas finitos, desarrollada a partir de un enfoque enteramente microcanónico. En el mismo sentido, se puede destacar la labor de Ph. Chomaz y F. Gulminelli, quienes llamaron la atención acerca de posibles maneras de determinar experimentalmente la ocurrencia de una transición de fase en sistemas finitos [37], y trabajaron en la generalización de la forma de caracterizar transiciones de fase que ocurren en este tipo de sistemas [38].

También han sido importantes los avances obtenidos utilizando el enfoque dinámico. En este sentido, a partir de trabajos realizados por nuestro grupo utilizando técnicas de dinámica molecular clásica (CMD), se pudo entender el mecanismo de formación de fragmentos a partir del análisis de las particiones más ligadas en el espacio de fases. De esta forma se pudo determinar que en objetos fragmentantes no confinados la fragmentación se produce muy temprano en la dinámica del sistema, cuando todavía el mismo se presenta como un único fragmento altamente excitado en el espacio configuracional [39, 40]. Por otra parte, dentro de un escenario de equilibrio local, ha sido posible predecir [41, 42] para la curva calórica del sistema, CC, una forma tipo "subida-meseta" que más tarde fue confirmada experimentalmente [43, 44] (ver Sección 3.2.2).

En cuanto al estudio experimental, con el desarrollo de nuevas técnicas de medición y el advenimiento de detectores 4π , el estudio de la multifragmentación nuclear se ha desarrollado vigorosamente desde la década de los '90. Al respecto, una de las propiedades más atractivas de la fragmentación en reacciones de iones pesados es que señales asociadas a transiciones de fase de diferente orden se han extraído a partir de datos experimentales.

Por un lado signatures compatibles con comportamiento crítico (i.e. transiciones de fase continuas) se han obtenido asumiendo una relación de escalado de tipo-Fisher (ver Sección 3.1.1) para las distribuciones de fragmentos asintóticos [45, 46, 47, 21]. Por el otro, también se han detectado señales compatibles con la existencia de una transición de primer orden. (En particular vale la pena destacar el trabajo del grupo de M. D'Agostino, quien por primera vez pudo determinar experimentalmente para el caso nuclear la presencia de una rama de calor específico negativo asociada a una transición de fase de primer orden [48]. Señales del mismo tipo fueron reportadas en el estudio experimental de la fragmentación de clusters de sodio [49].) En relación con esto, en trabajos recientes [50, 51], se ha sugerido que la observación de comportamiento crítico es compatible con una transición de primer orden que tiene lugar en sistemas 'pequeños' y que tiene su origen exclusivamente en efectos de tamaño finito.

Finalmente, vale la pena mencionar el trabajo de la colaboración Aladin [26] y, más recientemente, del grupo de Texas A&M en relación a la obtención y análisis de curvas calóricas [44], así como la caracterización de la ecuación de estado nuclear, llevada a cabo por la colaboración ISiS [52].

Como vemos, mucho es lo que se ha avanzado en el tema. Sin embargo, aún existen ciertos aspectos de carácter básico que hace falta comprender. Por ejemplo, plantear un estudio crítico de las suposiciones que hacen diversos modelos estadísticos a la hora de describir el proceso de fragmentación y de cuáles son las consecuencias que tales suposiciones imponen, estudiar qué tipo de señales de criticalidad son de esperar encontrar en este tipo de sistemas, qué información acerca de la ecuación de estado es posible obtener, analizar si efectivamente es posible su determinación por medio de excitaciones colisionales, estudiar el desarrollo de inestabilidades que dan origen a fluctuaciones *anormalmente* grandes de energías cinéticas y su relación con funciones respuesta termodinámica, entre otros interrogantes, son algunas de las cuestiones que abordaremos a lo largo de la presente tesis.

1.3 Organización del Trabajo

El presente estudio se estructuró de la siguiente manera: en el Capítulo 2 nos detendremos en las propiedades generales más relevantes que caracterizan a los sistemas que estudiaremos.

En el Cap.3 presentaremos un breve repaso de los conceptos teóricos fundamentales relacionados con el estudio del fenómeno de las transiciones de fase. Nos referiremos tanto a las nociones propias de la termodinámica que se podría llamar *usual*, aplicable a sistemas infinitos extensivos, como a las nuevas herramientas desarrolladas para estudiar la posible ocurrencia de fenómenos análogos a las transiciones de fase macroscópicas, pero que tienen lugar ahora en sistemas donde el límite termodinámico no puede emplearse.

En el Cap.4 analizaremos en detalle la evolución dinámica de sistemas finitos, altamente excitados, que evolucionan dentro de un volumen confinan-

te. En particular, nos interesará caracterizar la transición desde dos puntos de vista complementarios. Por un lado desde una visión termodinámica del proceso, mediante el análisis de curvas caloricas, funciones de respuesta termodinámica, etc. Por el otro, desde el análisis de correlaciones microscópicas entre partículas, puestas de manifiesto a partir de la utilización de distintos algoritmos de reconocimiento de fragmentos (que traducen correlaciones microscópicas entre partículas en particiones del sistema en fragmentos). Mediante el uso de estas dos visiones complementarias será posible interpretar de manera natural ciertas *anomalías* reportadas en diversos observables, como así también explorar la naturaleza y tipo de universalidad de la transición.

Como veremos, modelos estadísticos del proceso de fragmentación nuclear emplean el concepto de volumen de *freeze-out*, dentro del cual se asume la existencia de un ensamble de fragmentos en un escenario de equilibrio termodinámico global. Sin embargo, desde nuestra experiencia ganada en simulaciones numéricas, dicho enfoque no parece ser del todo adecuado a la hora de describir procesos de fragmentación que ocurren sin imposición de volúmenes confinantes. En relación a este punto, en el Cap.5 nos dedicaremos al estudio de procesos de fragmentación que tienen lugar en sistemas que son libres de expandirse. Interesará estudiar qué tipo de diferencias surgen entre los resultados obtenidos para éste tipo de sistemas en relación a sistemas fragmentantes confinados. Exploraremos qué tipo de señales, asociadas a una transición de fase de primer orden, es de esperar encontrar y analizaremos además, cómo el grado colectivo de expansión, afecta a distintos observables termodinámicos.

En el Cap 6, habiendo ya examinado distintas propiedades termodinámicas de sistemas que fragmentan *excitados isotrópicamente*, trataremos de responder la siguiente pregunta: ¿Es posible caracterizar termodinámicamente a un sistema utilizando como única herramienta experimental colisiones entre un proyectil y un blanco (i.e. excitación altamente anisotrópica)? Para ello analizaremos un sistema extremadamente simple, deteniendonos en el estudio de la dinámica colisional, en el cálculo de energías de excitación, en la emisión de pre-equilibrio y en la posibilidad de determinar, por ejemplo, la respectiva curva calórica del sistema.

En el Cap 7, nos ocuparemos en el estudio de efectos dinámicos específicos de la fragmentación nuclear. Efectivamente, en el campo de reacciones nucleares de iones pesados, en el rango de energías de Fermi (20 – 100 MeV/nucleon), existe mucho interés en el estudio de la importante emisión de fragmentos de masas intermedias que son emitidos con velocidades intermedias (entre la velocidad del remanente del proyectil y la del blanco) en colisiones nucleares periféricas. Presentaremos un modelo cuasi-clásico de dinámica molecular para describir este tipo de emisión, utilizando las técnicas desarrolladas en los capítulos previos. Al disponer de correlaciones microscópicas de todo orden para todo tiempo, podremos establecer un detallado estudio del proceso de formación de fragmentos. Prestaremos especial atención al origen físico de los fragmentos y a las escalas de tiempo involucradas. Trataremos así de establecer una clara distinción entre procesos de emisión de pre-equilibrio y un nuevo tipo de fenómeno al que denominaremos: ruptura asimétrica retardada y alineada (*delayed aligned asymmetric breakup*, DAAB).

Finalmente, en el Capítulo 8, presentaremos las conclusiones generales a las que arribamos así como también una breve descripción de las perspectivas de trabajo que surgen como consecuencia de lo realizado a lo largo de esta tesis.

Capítulo 2

Características de los sistemas bajo estudio

Antes de comenzar con el análisis del fenómeno de fragmentación en general, y del caso nuclear en particular, es bueno tener en consideración algunas particularidades relacionadas con la naturaleza de los sistemas que estudiaremos. La multifragmentación nuclear involucra sistemas:

- i) de carácter transitorio: todos los observables evolucionan en el tiempo,
- ii) finitos, compuestos por un número limitado de partículas, que pueden presentar interacciones de rango comparable al tamaño del sistema.
- iii) que no pueden experimentalmente ser sometidos ni a baños térmicos ni a presiones externas.

NOCIÓN DE EQUILIBRIO:

El punto (i) impone en principio un llamado de atención relacionado con el uso de herramientas y conceptos de la mecánica estadística *de equilibrio*. Al margen del mecanismo detallado del proceso, la escala de tiempos involucrada es del mismo orden que escalas típicas del sistema. Por ejemplo, en eventos de multifragmentación, los tiempos de emisión de IMF estimados experimentalmente [53, 54, 55] se encuentran en el rango de $\tau_{em} \sim 50 - 200 \text{ fm}/c \sim 10^{-22} \text{ s}$. Estos tiempos son comparables con el tiempo que un nucleón necesita para atravesar con velocidad de Fermi al sistema nuclear involucrado. Por otra parte, τ_{em} resulta además del mismo orden que la escala temporal dada por $\tau_{coulomb} \sim 10^{-21} \text{ s}$, asociada al tiempo que los fragmentos emitidos necesitan para escapar del rango de los multipolos de la interacción Coulombiana con otros fragmentos [36]. En este sentido es posible considerar al fenómeno como un proceso de emisión de fragmentos simultáneo, para el cual la aplicación de la noción de *sistema en equilibrio*, debe ser al menos, críticamente examinada.

En la actualidad, usando la hipótesis de equilibrio termodinámico, se han formulado modelos estadísticos, como el Microcanonical Metropolis Monte Carlo sampling (MMMC)[56, 57], o el Statistical Multifragmentation Model (SMM)[35], que gozan de amplia aceptación por la comunidad nuclear experimental a la hora de interpretar resultados. En ambas modelizaciones la justificación de la asunción del equilibrio al momento de fragmentar es soste-

nida por una imagen del proceso de multifragmentación en la cual se define la existencia de un volumen de congelamiento (*freeze-out volume*). Dentro del mismo se asume la existencia de un ensamble de fragmentos, ya formados y bien definidos, que coexisten en equilibrio. Finalmente, a partir de los pesos estadísticos asociados a cada posible partición del sistema en fragmentos, diferentes observables termodinámicos pueden ser calculados mediante los promedios estadísticos apropiados.

Sin embargo, varias diferencias se ponen de manifiesto cuando en lugar de asumir un escenario de *equilibrio global*, como lo hacen los antedichos modelos, se adopta una descripción dinámica y microscópica para el sistema, a partir de la cual se reconstruyen posibles observables termodinámicos. Dentro de este grupo de modelos que describen reacciones de iones pesados a energías intermedias, podemos mencionar a: modelos basados en distribuciones de un cuerpo, como el de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU), Landau-Vlasov o Vlasov-Uehling-Uhlenbeck (VUU) [58], y modelos clásicos [59] o semi-clásicos [60, 61, 62, 63] de dinámica molecular.

El enfoque dinámico, al que nosotros adherimos, presenta diferentes ventajas. Por un lado, evita trabajar *a priori* bajo una hipótesis ergódica y de una ocupación determinada del espacio de fases disponible al momento de la formación de fragmentos. Por otro, permite realizar un análisis detallado de las correlaciones microscópicas con el cuál caracterizar al proceso de formación de fragmentos. Finalmente el tratamiento dinámico admite la noción del establecimiento de un *equilibrio local*, y permite así el correcto tratamiento de grados colectivos de libertad no térmicos, tales como el desarrollo de flujo radial, que son necesarios diferenciar para establecer un correcto análisis termodinámico del sistema [42, 64].

TAMAÑO FINITO

El segundo punto arriba señalado, (ii), constituye un aspecto fundamental del proceso que estudiamos. El fenómeno de fragmentación es un nuevo grado de libertad propio de los **sistemas finitos**, que no presenta análogo para el caso de sistemas en el límite termodinámico ($V \rightarrow \infty|_{V/N}$) [65].

Para sistemas finitos como el caso nuclear, núcleos excitados por encima de $E^* \sim 3\text{MeV}/A$ no decaen simplemente evaporando *vapor nucleónico* (protones y neutrones libres), sino que lo hacen a través de la *fragmentación* en núcleos de variados tamaños. Esto da lugar al establecimiento de numerosos y muy diferentes canales de desexcitación posibles. Este agrandamiento del espacio de fases accesible al sistema juega, como veremos en el Cap.3, un papel fundamental en el proceso que estudiamos.

El carácter finito de los sistemas bajo análisis tiene otra importante consecuencia. Aún en un escenario de equilibrio estadístico, las descripciones desde diferentes ensambles dejan de ser equivalente. Dos ensambles que impongan condiciones distintas sobre las fluctuaciones del parámetro de orden (ver Sec. 3.1.3) conducirán a ecuaciones de estado diferentes en las cercanías de una transición de primer orden. Por ejemplo, en el ensamble microcanónico el calor específico puede diverger y presentar una rama negativa, mientras que

en el ensamble canónico permanece siempre positivo y finito [66, 38]

MECANISMOS DE EXCITACIÓN:

La última característica mencionada, (iii), tiene implicancias relevantes desde el punto de vista experimental. En la búsqueda de una posible transición de fase de la materia nuclear, no se cuenta con la posibilidad de disponer ni de baños térmicos, ni de recipientes confinantes con los cuales imponer campos externos (de presión y temperatura) a los sistemas que se pretende estudiar.

Relacionado con esto, y con lo discutido en los puntos anteriores, aún hoy, luego de casi 30 años de desarrollo en el área, subsiste la discusión acerca de si la multifragmentación es un proceso de naturaleza eminentemente estadística, guiado por la topología del espacio de fases [67], o dinámica, regido principalmente por los canales de entrada y salida de la reacción [68, 69, 70]. Parte de la dificultad en dirimir este punto se debe a que nos encontramos ante un problema en el que dos enfoques diametralmente opuestos, tales como lo son el estadístico y el dinámico, conducen al mismo tipo de soluciones para diversos observables, como por ejemplo, las distribuciones de fragmentos.

Para 'complicar' aún más el panorama se debe tener en cuenta que la noción de *equilibrio global termodinámico* puede ser refutada pero no confirmada por la experiencia, es decir: el hecho que modelos estadísticos puedan ajustar, para determinados valores de los parámetros de control, el comportamiento de observables experimentales, no puede de ninguna manera considerarse una prueba de que se haya establecido en el sistema el equilibrio termodinámico global [71].

Capítulo 3

Transiciones de fase: Conceptos Generales

Las transiciones de fases constituyen un fenómeno que se presenta como una propiedad general de sistemas constituidos por partículas interactuantes. Las mismas, han sido extensamente estudiadas en el límite termodinámico, $\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} N/V = o(1)$, de sistemas que interactúan mediante un potencial de rango finito.

Sin embargo, en muchas situaciones de interés, este límite no se satisface. Es el caso de sistemas en presencia de fuerzas de muy largo rango, como la interacción gravitatoria o Coulombianas, que aún poseyendo dimensiones astronómicas, no pueden considerarse como sistemas en el límite termodinámico debido a que las interacciones no presentan un comportamiento de saturación [72, 73]. Otros ejemplos lo constituyen sistemas muy pequeños, de naturaleza microscópica y/o mesoscópica, como por ejemplo clusters atómicos que pueden derretirse antes de vaporizarse [33, 32] o sistemas finitos que fragmentan, tales como, clusters moleculares [49, 74] o núcleos atómicos en reacciones nucleares que, como mencionamos en la Introducción, pueden exhibir características propias de una transición líquido-vapor [48, 52].

Estos últimos sistemas tienen la particularidad de ser *no-extensivos*. Es decir, si pensamos sin pérdida de generalidad que el sistema X está constituido por dos subsistemas tal que $X = X_1 + X_2$, se tiene que para la energía, H , resulta:

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}$$

con $H_{12} \neq 0$ la energía de interacción entre los subsistemas. En los casos que estudia la termodinámica usual, las dimensiones características R del sistema, y la naturaleza de las interacciones son tales que $R \gg r_c$ (siendo r_c el rango característico de la interacción, por lo que $H_{12}/(H_1 + H_2) \sim 0$). Sin embargo, para los sistemas que mencionamos arriba no es posible despreciar esta energía de interfase, lo que traerá aparejado, como veremos, importantes consecuencias.

En este capítulo, luego de una breve reseña de la termodinámica de las

transiciones de fase en sistemas infinitos, presentaremos algunas herramientas teóricas apropiados para llevar a cabo el análisis del fenómeno en sistemas finitos no extensivos. Veremos que, en muchas oportunidades, deberemos abandonar algunos prejuicios adquiridos en cursos básicos de mecánica estadística y termodinámica (desarrolladas en la mayoría de los libros de texto) para ganar en cambio una nueva intuición de lo que ocurre en este nuevo tipo de sistemas.

3.1 Transiciones de Fase en Sistemas Infinitos

Un sistema termodinámico puede existir en una variedad de estados cuyo comportamiento macroscópico puede diferir enormemente. Ejemplos de transiciones de fases son muy comunes. A la presión de 1 atm y a la temperatura de 0°C, el agua se separa en dos fases: una líquida y otra sólida que coexisten en equilibrio. El helio líquido se separa en dos fases, I y II a la presión de 1 atm y a una temperatura de 2.18K. Existen transiciones polimórficas en sólidos, la ebullición en los líquidos y la aparición de una fase ferro en sistemas magnéticos, entre otras.

En una transición de fase para una sustancia pura, el potencial químico de cada fase -es decir la energía libre de Gibbs correspondiente, $G(T, P)$ - debe cambiar de manera continua [75, 76]. Sin embargo, puede establecerse una clasificación de acuerdo al comportamiento de las derivadas de dicha energía libre. Aquellas transiciones que van acompañadas de una discontinuidad en la primera derivada de G son llamadas *transiciones de fase de primer orden*. Por otra parte se denomina *transiciones continuas* a aquellas que presentan discontinuidades de orden superior.

3.1.1 Termodinámica de Transiciones de Primer Orden

Consideremos a una sustancia que realiza una transición de fase de primer orden desde una fase que se presenta a altas temperatura a una que se manifiesta a temperaturas bajas. En este caso, una cantidad finita de energía en forma de calor es liberada cuando el material se enfría en un rango infinitesimal de temperaturas centrado en la temperatura de transición T_t . Esta cantidad de calor se denomina *calor latente*, ΔH , y está relacionado con un cambio en la estructura microscópica del sistema. Por ejemplo, para una transición líquido-sólido en el agua, $\Delta H \sim 334\text{J/g}$ es la cantidad de energía liberada cuando las moléculas de H_2O se acomodan según una estructura FCC.

Si bien una transición de fase de primer orden presenta $\Delta H \neq 0$, puede suceder que la misma tenga como límite, para determinados valores de las variables de control, una transición continua, que no presente calor latente alguno. Tal es el caso del agua. Cuando una cantidad de agua líquida es calentada dentro de un volumen dado, una fracción de la misma se evapora por lo que la densidad del vapor aumenta. A su vez, la fase líquida remanente sufre una ligera expansión, por lo que su densidad decrece. De esta manera la diferencia de densidades entre las dos fases disminuye. Para una dada

temperatura, el calor latente absorbido cuando parte de líquido se convierte en vapor refleja las diferentes energías de ligadura entre moléculas de H_2O en fase líquida y en fase gaseosa. Esta diferencia disminuye al aumentar la temperatura, ya que las densidades de ambas fases son cada vez más parecidas. Si el valor del volumen del contenedor es el apropiado, ($\rho_c = 0.323g/cm^3$) existe un valor de temperatura, ($T_c = 647K$), para el cuál el calor latente efectivamente se anula. Estos valores de densidad y temperatura definen el *punto crítico* de la transición líquidor-vapor. Para la densidad $\rho = \rho_c$ la transición ocurre de manera *continua* al variar la temperatura. Para $T > T_c$ no es posible diferenciar entre vapor y líquido, ambas fases son indistinguibles.

Modelo de Fisher

Dada la estrecha vinculación que presenta con los procesos de fragmentación que nos interesa describir, introducimos en este punto una breve descripción del conocido *modelo de la gota* de Fisher [15]. El mismo estudia las propiedades de la distribución de gotitas líquidas (agregados de partículas más o menos grandes) en equilibrio con una fase gaseosa (monómeros).

Si pensamos que una gotita esférica de masa A se ha formado en un gas que consistía originariamente de $A + B$ partículas, la energía libre del sistema será [77]:

$$G_{congota} = \mu_l A + \mu_g B + 4\pi R^2 \sigma + T\tau \ln A \quad (3.1)$$

y la del gas:

$$G_{singota} = \mu_g (A + B) \quad (3.2)$$

μ_l y μ_g son los potenciales químicos del líquido y del gas respectivamente. σ es la tensión superficial, que depende de T y cumple que $\sigma(T \rightarrow T_c) \rightarrow 0$. El último es un término de curvatura que tiene en cuenta que las superficies son cerradas. Utilizando las Ecuaciones 3.1 y 3.2 podemos expresar a la probabilidad que ocurra una fluctuación de densidad en el sistema como [78]:

$$P \sim e^{-\beta \delta G} \quad (3.3)$$

con $\beta = 1/T$ y δG la variación de energía libre entre los estados considerados.

En consecuencia, la probabilidad de formación de una gotita de masa A resulta:

$$Y(A) = Y_0 \cdot A^{-\tau} \cdot \exp \left(\frac{\mu_g - \mu_l}{T} A - \frac{4\pi\sigma r_0^2 A^{2/3}}{T} \right) \quad (3.4)$$

Como vemos, la producción de fragmentos de un dado tamaño A viene dada por el producto de una ley de potencias y dos factores exponenciales que dependen de la temperatura T . El término lineal en A da la contribución de volumen (gas) mientras que $A^{2/3}$ la de superficie (líquido).

Para $T \lesssim T_c$ hay una competencia entre los estados líquido y gaseoso. La distribución de masas asumirá una forma tipo-U, es decir: presencia de una gota de tamaño considerable, cantidad de gotas de muy pocas partículas y ausencia de gotas de tamaños intermedios. Para $T \sim T_c$ sucede que $\mu_l \rightarrow \mu_g$

temperatura, el calor latente absorbido cuando parte de líquido se convierte en vapor refleja las diferentes energías de ligadura entre moléculas de H_2O en fase líquida y en fase gaseosa. Esta diferencia disminuye al aumentar la temperatura, ya que las densidades de ambas fases son cada vez más parecidas. Si el valor del volumen del contenedor es el apropiado, ($\rho_c = 0.323g/cm^3$) existe un valor de temperatura, ($T_c = 647K$), para el cuál el calor latente efectivamente se anula. Estos valores de densidad y temperatura definen el *punto crítico* de la transición líquidor-vapor. Para la densidad $\rho = \rho_c$ la transición ocurre de manera *continua* al variar la temperatura. Para $T > T_c$ no es posible diferenciar entre vapor y líquido, ambas fases son indistinguibles.

Modelo de Fisher

Dada la estrecha vinculación que presenta con los procesos de fragmentación que nos interesa describir, introducimos en este punto una breve descripción del conocido *modelo de la gota* de Fisher [15]. El mismo estudia las propiedades de la distribución de gotitas líquidas (agregados de partículas más o menos grandes) en equilibrio con una fase gaseosa (monómeros).

Si pensamos que una gotita esférica de masa A se ha formado en un gas que consistía originariamente de $A + B$ partículas, la energía libre del sistema será [77]:

$$G_{\text{congota}} = \mu_l A + \mu_g B + 4\pi R^2 \sigma + T\tau \ln A \quad (3.1)$$

y la del gas:

$$G_{\text{singota}} = \mu_g (A + B) \quad (3.2)$$

μ_l y μ_g son los potenciales químicos del líquido y del gas respectivamente. σ es la tensión superficial, que depende de T y cumple que $\sigma(T \rightarrow T_c) \rightarrow 0$. El último es un término de curvatura que tiene en cuenta que las superficies son cerradas. Utilizando las Ecuaciones 3.1 y 3.2 podemos expresar a la probabilidad que ocurra una fluctuación de densidad en el sistema como [78]:

$$P \sim e^{-\beta \delta G} \quad (3.3)$$

con $\beta = 1/T$ y δG la variación de energía libre entre los estados considerados.

En consecuencia, la probabilidad de formación de una gotita de masa A resulta:

$$Y(A) = Y_0 \cdot A^{-\tau} \cdot \exp \left(\frac{\mu_g - \mu_l}{T} A - \frac{4\pi\sigma r_0^2 A^{2/3}}{T} \right) \quad (3.4)$$

Como vemos, la producción de fragmentos de un dado tamaño A viene dada por el producto de una ley de potencias y dos factores exponenciales que dependen de la temperatura T . El término lineal en A da la contribución de volumen (gas) mientras que $A^{2/3}$ la de superficie (líquido).

Para $T \lesssim T_c$ hay una competencia entre los estados líquido y gaseoso. La distribución de masas asumirá una forma tipo-U, es decir: presencia de una gota de tamaño considerable, cantidad de gotas de muy pocas partículas y ausencia de gotas de tamaños intermedios. Para $T \sim T_c$ sucede que $\mu_l \rightarrow \mu_g$

y $\sigma \rightarrow 0$ por lo que la distribución de fragmentos toma una forma de ley de potencias, tal como la descrita en la Ecuación 1.1 Finalmente para $T \gtrsim T_c$ el modelo predice una distribución de fragmentos exponencialmente decreciente con el tamaño.

3.1.2 Termodinámica de Transiciones Continuas

En general, las transiciones de primer orden se reducen a transiciones continuas para un punto determinado del diagrama de fases. Sin embargo no todas las transiciones continuas están asociadas a transiciones de primer orden. Tal es el caso, por ejemplo, de la aparición de la fase ferromagnética en el hierro para temperaturas menores a la temperatura de Curie, $T_c = 1043K$.

Para este sistema, cuando $T > T_c$, el hierro es paramagnético. Esto significa que en ausencia de campo externo el material no se magnetiza, y si un campo débil H es aplicado, el momento magnético del material m , resulta proporcional al mismo. En la fase ferromagnética ($T < T_c$) en cambio, el material presenta $m \neq 0$ aún en ausencia de campo externo, y si se lo somete a alguno, instantáneamente el material alinea su magnetización con el campo externo aplicado. Consecuentemente, en este régimen m deja de ser una función lineal de H . A diferencia de lo que ocurriría con las transiciones de primer orden, en esta transición de fase continua, no ocurren cambios estructurales drásticos en el sistema al atravesar la temperatura crítica T_c . La magnetización $m(T, H = 0)$ desaparece "suavemente" cuando $T \rightarrow T_c^-$.

En el lenguaje de los potenciales termodinámicos lo que sucede típicamente en éste tipo de transiciones es que la energía libre de Gibbs y sus primeras derivadas son continuas. Generalmente la pendiente de G cambia rápidamente, y esto produce la aparición de un máximo (o aún una divergencia) en el calor específico [75]. La entropía, entonces, no presenta discontinuidades por lo que tampoco existe calor latente asociado. Esta característica está íntimamente relacionada con el hecho de que en este tipo de transiciones las propiedades del sistema no cambian discontinuamente en T_c .

Antes de abandonar esta sección vale la pena mencionar un modelo geométrico muy simple que sobrelleva una transición continua que ha sido estudiado en gran detalle. Se trata del *modelo de percolación*. El mismo es conceptualmente muy sencillo y debido a su simplicidad es utilizado como una aproximación de muchos y muy diversos fenómenos, tales como: fragmentación nuclear, diseminación de epidemias, formación de galaxias, etc. Debido a lo mucho que aporta para el entendimiento de fenómenos críticos en general, y de efectos de tamaño finito en particular, incluimos una somera descripción del mismo en el Apéndice B.

3.1.3 Parámetros de Orden

La mayoría de las transiciones de fase tienen asociadas un punto crítico, caracterizado por una temperatura T_c . Las propiedades del sistema son diferentes según éste se encuentre a una temperatura por encima o debajo de su T_c .

Para establecer un análisis cuantitativo de este fenómeno es útil identificar un observable que claramente distinga estos comportamientos. A este observable se lo denomina: *parámetro de orden*, Φ , y típicamente se lo define de manera que su valor medio se anule de un lado de la transición, mientras que tome valores distintos de cero del otro. En la figura 3.1 mostramos ejemplos de parámetros de orden para tres sistemas distintos: para una transición líquido-gas ($\Phi = \rho_l - \rho_g$, diferencia entre densidades de ambas fases), para una transición ferromagnética ($\Phi = m(H=0)$, magnetización media), y, finalmente, para procesos de percolación ($\Phi = P_\infty$, la intensidad del cluster percolante).

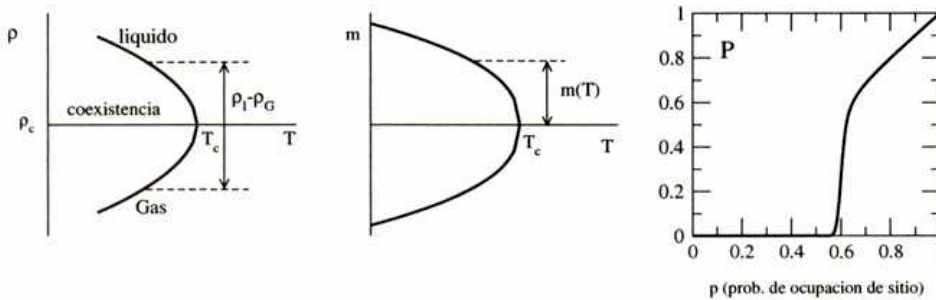


Figura 3.1: Comportamiento de parámetros de orden para un sistema líquido-gas [panel (a)], un sistema magnético [panel(b)] y un sistema percolante por sitios [panel (c)].

3.1.4 Fenómenos Críticos

Como mencionamos en la Sección 3.1.2, en el punto crítico el calor latente de la transición es nulo. Sin embargo esto no implica que el calor específico de una muestra que sobrelleve una transición continua sea una función bien comportada de la temperatura [12]. Por el contrario, en el punto crítico, magnitudes termodinámicas -típicamente funciones respuesta como la susceptibilidad y calores específicos- pueden presentar un comportamiento singular. Así, en muchos casos se observa que el calor específico diverge como una ley de potencias, $c \sim |T - T_c|^{-\alpha}$, con $0 < \alpha < 1$. En otros sistemas puede suceder que $\alpha \ll 1$, por lo que la divergencia de c adquiere un carácter logarítmico $c \sim \log T_c/|T - T_c|$. Finalmente también puede ocurrir que en la transición c presente simplemente un pico finito. La siguiente expresión engloba estas tres posibilidades, según α sea positivo, positivo y cercano a cero, o negativo, respectivamente:

$$c(T) \sim \frac{1}{\alpha} \left(\left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha} - 1 \right)$$

Al parámetro α se lo conoce como *exponente crítico* y junto con otros exponentes caracteriza el comportamiento de diversos observables termodinámicos en las cercanías de la transición.

Otra cantidad que usualmente diverge en el punto crítico es la compresibilidad isotérmica, κ_T . Por ejemplo, para el agua $\kappa_T \sim (T - T_c)^{-\gamma}$, con $\gamma = 1.24$. Es significativo el paralelo que se puede establecer entre los comportamientos

de c y κ_T para $T \rightarrow T_c^+$. Mientras que la divergencia de c es precursora de la aparición de calor latente $\Delta H \neq 0$, relacionado con la diferencia de entropías específicas del líquido y el vapor para $T < T_c$, la divergencia de κ_T es la precursora de la diferencia no nula en los volúmenes específicos entre las dos fases que pueden identificarse a $T < T_c$.

Existen también un par de exponentes críticos que describen cómo se comporta el parámetro de orden en las cercanías de T_c , en función de la temperatura y un campo externo, h . Por un lado el exponente β define cómo se anula Φ cuando $T \rightarrow T_c^-$: $\Phi(T, h=0) \sim (T_c - T)^\beta$. Por otro, el exponente δ describe cómo es la dependencia de Φ con h : $\Phi(T_c, h) \sim h^{-1/\delta}$. Para el caso del agua, $\Phi = \rho_l - \rho_g$, $h = p - p_c$, $\beta = 0.325$ y $\delta = 4.8$.

Todas estas definiciones se resumen en la Tabla 3.1 para tres sistemas distintos. En la misma se identifican cantidades termodinámicas para las cuales se consigna el comportamiento en función de dos parámetros reducidos de control ϵ y h (ϵ mide la distancia al punto crítico, mientras que h es un parámetro asociado con algún campo termodinámico relevante dependiendo del sistema estudiado). Así, para un sistema que presenta una transición tipo líquido-gas: $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ y $h = P - P_c$, para un sistema magnético, $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ y $h = H$, y finalmente para una transición de fase en fenómenos de percolación, $\epsilon = p - p_c$ y $h = p_g$ [79].

Tabla 3.1: Definición de exponentes críticos.

Exponente	Cantidad Termodinámica				Comportamineto
		Liq-Gas	Ising	Percolación	
α	c :	$\frac{\partial E}{\partial T}$		$\sum_s n_s$	$c(\epsilon, h=0) \sim \epsilon ^{-\alpha}$
β δ	Φ :	$\rho_l - \rho_g$	M	P_∞	$\Phi(\epsilon, h=0) \sim (-\epsilon)^\beta$ $\Phi(\epsilon=0, h) \sim h^{1/\delta}$
γ	χ :	$-\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P}$	$\frac{\partial M}{\partial H}$	$\sum_s s^2 n_s$	$\chi(\epsilon, h=0) \sim \epsilon^{-\gamma}$
ν	ξ :	longitud de correlación			$\xi(\epsilon, h=0) \sim \epsilon^{-\nu}$
τ	n_s :	espectro de masa			$n_s(\epsilon=0) \sim s^{-\tau}$

El exponente ν , que incluimos hacia el final de la Tabla 3.1, describe el comportamiento de la longitud de correlación, ξ , en las proximidades de T_c . En la medida que $T \rightarrow T_c$, ξ crece ilimitadamente. Justo en el punto crítico aparecen fluctuaciones a gran escala que correlacionan valores del parámetro de orden entre puntos del sistema muy alejados uno del otro. Es decir, cuando $T = T_c$, las interacciones microscópicas locales son capaces de generar correlaciones que se propagan a lo largo de distancias macroscópicas y que pueden generar estructuras de gran escala. Más aún, aunque las interacciones a nivel microscópico poseen una escala bien definida, las estructuras que surgen como consecuencia del efecto cooperativo puede carecer de un tamaño característico. Este hecho es el responsable de la aparición de leyes de potencias (distribuciones libre de escalas) en la descripción del comportamiento de

ciertos observables.

Finalmente τ es el exponente asociado a la aparición de distribuciones de fragmentos libres de escala que tiene lugar en el punto crítico.

3.1.5 Universalidad

Un aspecto sumamente interesante de los fenómenos críticos es que, sin importar la estructura microscópica particular de cada caso, el comportamiento del sistema puede ser clasificado dentro de unas pocas *clases de universalidad* de acuerdo al valor que adopten los exponentes críticos correspondientes [76]. En este sentido, como se explica en [77], los exponentes críticos funcionan como la “huella digital” de la transición. En la Tabla 3.2 mostramos algunos valores de exponentes críticos que serán de utilidad a lo largo de este trabajo.

Tabla 3.2: Exponentes críticos para diferentes clases de universalidad. Extraídos de la Ref. [80]

Exponente	2D-Ising	3D-Ising	Líquido-Gas	Percolación 3D
α	0		0.11	0.6
β	1/8		0.325	0.4
γ	7/4		1.24	1.8
δ	15		4.82	-
ν	1		0.63	0.9
τ	2.06		2.21	2.18

3.1.6 Descripción mediante Ensamblajes

La mecánica estadística convencional, asumiendo *extensividad* y *homogeneidad*, explora el límite termodinámico $V \rightarrow \infty$ [36]. Para ello liga la descripción microcanónica con la gran-canónica a través de una doble transformada de Laplace de la función de partición microcanónica $\Omega(E, N, V) = e^{S(E, N, V)}$:

$$\begin{aligned}
 \Xi(T, \mu, V) &= \int_0^\infty dE dN e^{-[E - \mu N - TS(E, N, V)]/T} \\
 &= \frac{V^2}{\epsilon_0} \int_0^\infty de dn e^{-V[e - \mu n - Ts(e, n, V)]/T}
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

con $e = E/V$, $n = N/V$ y $s = S/V$.

Para V suficientemente grande, se puede evaluar la integral 3.5 mediante métodos asintóticos. En presencia de un único máximo, $s(e, n)$ presenta en todo punto curvaturas negativas, por lo que si se procede a expandir $s(e, n)$ alrededor del punto estacionario (e_s, n_s) , los términos lineales se anularán, mientras que los cuadráticos en $\Delta e = e - e_s$ y $\Delta n = n - n_s$, tomarán la forma:

$$s_2(e, n) = (\Delta e, \Delta n) \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} & \frac{\partial^2 S}{\partial N \partial E} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial N} & \frac{\partial^2 S}{\partial N^2} \end{pmatrix}_{(e_s, n_s)} \begin{pmatrix} \Delta e \\ \Delta n \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

que puede llevarse a una forma diagonal

$$s_2(e, n) = v_1^2 \lambda_1 + v_2^2 \lambda_2 \quad (3.7)$$

La condición que (e_s, n_s) sea un punto estacionario, i.e. pedir que se anulen los términos de primer orden en la expansión de Taylor, define el valor de las variables intensivas: T , μ , y P . Por otra parte, al ser los autovalores λ_i de la matriz de curvatura negativos, la expresión 3.5 involucra la integración de un producto de dos Gaussianas. En este caso, en presencia de un único punto estacionario, es posible establecer un mapeo uno-a-uno entre los ensambles gran-canónico y micro-canónico ya que las fluctuaciones de energía desaparecen en el primero [son de orden $o(1/\sqrt{N})$].

Sin embargo, se debe notar que en el caso de transiciones de fase de primer orden el ensamble gran canónico puede incluir más de un punto estacionario que contribuya a la integral 3.5 para un mismo valor de las variables intensivas. Esto hace que las fluctuaciones no desaparezcan y se pierda la conexión con la descripción micro-canónica, aún en el límite termodinámico.

Más aún, entre los punto estacionarios, $s(e, n)$ presenta ahora una curvatura principal $\lambda_1 \geq 0$. En la Ref.[57] se argumenta que es justamente en este hecho, donde se encuentra el origen de la no-analiticidad que presenta la energía libre $G \sim \ln \Xi$ en presencia de una transición de fase de primer orden. De esta forma, se postula una visión fundada en las propiedades topológicas de la superficie de entropía microcanónica como base de la teoría de Yang y Lee, que describe el fenómeno de transiciones de fase analizando la presencia de los ceros de la gran función de partición en el plano de temperaturas complejas [81].

3.2 Transiciones de Fase en Sistemas Finitos

Una de las principales motivaciones que impulsó el interés en extender resultados de la mecánica estadística usual al caso de sistemas finitos, fue la observación que muchos fenómenos típicamente asociados al límite termodinámico sobrevivían de alguna forma en el caso $N \ll \infty$. Uno de los más notables es, sin duda, el fenómeno de las transiciones de fase.

Como mencionamos en la Introducción, la hipótesis de que un sistema finito puede sobrellevar una transición de fase, fue sugerida para la materia nuclear en la década del '80 por el grupo de Purdue. Una década después, con la disponibilidad de mayor potencia de cálculo, el tema recibió un nuevo impulso con el desarrollo de simulaciones numéricas que modelaban la transición sólido-líquido en clusters de pocos constituyentes.

Para ilustrar este punto, en la Fig. 3.2, mostramos la curva calórica (CC) para el agua a presión constante, definida como la relación entre la temperatura y la energía de la muestra. Se puede observar claramente la presencia de mesetas, asociadas al calor latente involucrado en las respectivas transformaciones: sólido-líquido-gas. En la misma figura, el trazo punteado corresponde

al resultado de simulaciones numéricas de una transición desde una fase cuasi-sólida a una cuasi-líquida, en clusters de una decena de constituyentes.

De la figura es evidente que es posible establecer que trazas del comportamiento macroscópico se encuentran presentes aún en un sistema compuesto por tan sólo 20 moléculas. En este mismo sentido, en la Ref. [82], Labastie y Whetten presentan el cálculo de la densidad de estados clásica, $\Omega(E)$, para clusters Lennard-Jones de 13, 55 y 147 partículas. En todos los casos, para las respectivas CC, encuentran el comportamiento “subida-meseta-subida” relacionado con la transformación cuasi sólido-cuasi líquido antes mencionada. Cabe mencionar que para estos sistemas finitos, debido a que la energía asociada a interfaces es muy grande, no existe entre las fases *coexistencia espacial*, sino más bien *coexistencia temporal*. El sistema evoluciona alternando entre configuraciones tipo sólido (baja movilidad de partículas) y tipo líquido (alta movilidad)[32, 82].

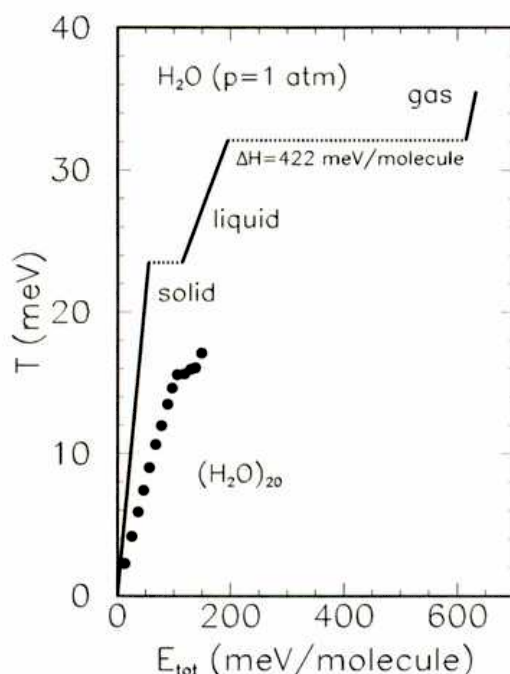


Figura 3.2: Curva calórica de un cluster compuesto por 20 moléculas de agua (trazo punteado) y un sistema macroscópico (trazo continuo). Extraído de [83]

Además de las calorimétricas existen otras propiedades muy estudiadas en relación con la ocurrencia de fenómenos críticos en sistemas finitos. Una de ellas está relacionada con el hecho que todas las divergencias en las cantidades termodinámicas son reemplazadas por máximos, más o menos anchos, desplazados respecto al punto correspondiente al sistema infinito, en una cantidad inversamente proporcional al tamaño del sistema. Un método conocido para estudiar esto es la *teoría de escaleo de tamaño finito* (*finite size scaling theory*, FSS) introducida por Fisher en los '70 [84]. El principal resultado de dicha teoría es que, a pesar que la densidad de energía libre de un sistema *finito* es una función completamente analítica de sus variables, la dependencia con el tamaño del sistema de algunas de sus derivadas está gobernada por cantidades que describen el comportamiento no-analítico del sistema *infinito*, esto es: sus

exponentes críticos (ver Sec. 3.1.4). En este sentido la FSS constituye otra indicación que sugiere que las propiedades críticas del sistema infinito, están ya contenidas en el comportamiento del sistema finito.

Ahora bien, según el planteo usual, las transiciones de fase sólo pueden ocurrir en el límite termodinámico, i.e. $N \rightarrow \infty$. Para sistemas finitos, la función de partición canónica, $Z(T, N, V)$, junto con todas los potenciales termodinámicos derivados de la misma, son funciones analíticas de la temperatura y campos externos. En este caso, resulta evidente que la definición estándar de transición de fase no puede emplearse. Consecuentemente una definición alternativa, independiente del límite termodinámico, debe ser elaborada.

En lo que respecta a una posible transición tipo líquido-gas que ocurre en sistemas finitos, tales como núcleos que fragmentan, D. H. Gross ha propuesto en [36] definirla y clasificarla basándose en el análisis de la presencia de *regiones de curvatura no-negativa* ("convex-intruder" o "back-bending") en la superficie de entropía microcanónica, $s(e, n)$, como función de las cantidades extensivas relevantes del sistema.

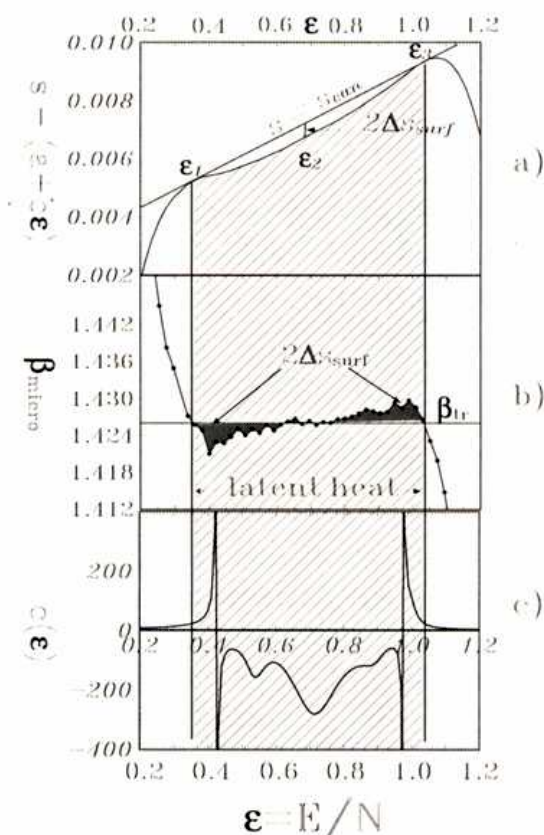


Figura 3.3: a) Entropía específica en función de la energía específica para el modelo de Potts 2D con $q = 10$ en una red de 100×100 sitios. b) Inversa de la temperatura calculada directamente a través de un muestreo Monte Carlo microcanónico. c) Comportamiento del calor específico del sistema.

Daremos un ejemplo para clarificar el sentido de la definición de Gross. En la Figura 3.3 mostramos el resultado de simulaciones realizadas para el

modelo de Potts¹ $q=10$ 2-dimensional sobre una red de 200×200 sitios (ver Ref.[85] para más detalles). Dicho sistema presenta una transición de fase de primer orden.

En la Fig.3.3(b) se muestra la inversa de la temperatura $\beta_{micro}(e) = 1/T(e)$ calculada directamente utilizando un muestreo Monte Carlo *microcanónico*. En este gráfico la transición se manifiesta a través del *loop* que presenta la curva calórica. La línea horizontal define la temperatura de transición (construcción de Maxwell) y las dos áreas opacas representan: la primera, la pérdida de entropía $\Delta S_{surf} = \int_{e_1}^{e_2} \beta(e) de$ que se produce cuando aparecen interfases, mientras que la segunda, la ganancia asociada a la desaparición de las mismas, al convertirse todo el sistema a la nueva fase $e = e_3$.

En el panel 3.3(a) se muestra la entropía específica $s(e) = \int_0^e \beta_{micro}(a) da$ [para una mejor visualización se muestra $s - (a + be)$, con a y b constantes]. En este caso, se puede observar la aparición de un *intruso convexo* en el rango $e_1 < e < e_3$, cuya profundidad $\Delta S_{surf} = O(1/L)$ se puede relacionar con la tensión superficial entre la fase ordenada y la desordenada [85]. El calor latente asociado a la transición resulta $\Delta H = e_3 - e_1$.

En la Fig.3.3(c) se muestra el calor específico $c(e) = \frac{\partial e}{\partial \langle T \rangle} = \frac{-\beta^2}{\partial \beta / \partial e}$. Se puede apreciar que dentro de la región de coexistencia (área sombreada) el calor específico microcanónico tiene dos polos entre los cuales presenta una rama negativa. Ésta es una señal propia de una transición de fase de primer orden que tiene lugar en un sistema finito. Si ocurriese que el calor latente $\Delta H \rightarrow 0$ y $\Delta S_{surf} \rightarrow 0$ estaríamos, en cambio, en presencia de una transición continua. En este caso, los dos polos de $c(e)$ se “unirían” dando lugar a una singularidad en el punto de transición.

Vemos de esta manera que el enfoque microcanónico provee todos los elementos para caracterizar por completo el comportamiento del sistema. En particular, teniendo en cuenta que $1/T = \beta(e) = \partial s / \partial e$, se puede entender al comportamiento anómalo de la curva calórica [T decreciente (o β creciente) en función de la energía] como reflejo de un crecimiento *más que normal* de la entropía, es decir, de una apertura *más que normal* de nuevos dominios accesibles en el espacio de fases (entendiendo por *normal* al comportamiento que tiene lugar en un sistema infinito, $L \rightarrow \infty$, para el cuál el crecimiento de la entropía es lineal en la región de coexistencia). Volveremos sobre esto en la siguiente sección.

Finalmente mencionamos que, alternativamente, se ha propuesto en [38, 50] una definición más general de transición de fase aplicable a sistemas finitos, relacionada con la curvatura de la distribución de eventos en el espacio de observables, que predice la aparición del *intruso convexo* en el comportamiento de una variable intensiva cualquiera (por ejemplo μ) como función de su variable extensiva conjugada (por ejemplo N), cuando esta última se conserva en el muestreo utilizado.

¹Generalización del modelo de Ising, en donde cada punto de la red, de tamaño L^d , corresponde a un *spin* que puede tomar q valores discretos diferentes. El Hamiltoniano correspondiente tiene la forma $H = \sum_{i,j} [1 - \delta_{\sigma_i, \sigma_j}]$. En 2 dimensiones, para $q > 4$, el modelo presenta una transición de primer orden.

3.2.1 Enfoque Microcanónico

Para avanzar sobre este punto es importante notar que muchos sistemas finitos reales se encuentran sometidos a la conservación de cantidades como $E, V, N, \vec{P}, \vec{L}$ por lo que mantener un contacto lo más estrecho posible con una perspectiva mecánica suele ser aconsejable. En este sentido, el enfoque micro-canónico aparece como privilegiado frente al canónico o gran canónico. En este ensamble:

$$S(E, N, V) = k \log \Omega(E, N, V) \quad (3.8)$$

$$\text{con } \Omega(E, N, V) = \int \frac{dp^{3N} dq^{3N}}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \delta(E - H_N\{q, p\})$$

y

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}, \quad \mu = -T \frac{\partial S}{\partial N}, \quad P = T \frac{\partial S}{\partial V} \quad (3.9)$$

por lo que se obtiene para el calor específico por partícula que:

$$c_N(\epsilon) = \left(\frac{\partial T}{\partial \epsilon} \right)^{-1} = - \frac{s'_N{}^2}{s''_N} \quad (3.10)$$

donde $\epsilon = E/N$ y $s = S/N$.

Normalmente $s''_N(\epsilon)$ es negativa, lo que produce un calor específico finito. Sin embargo, $c_N(\epsilon)$ se vuelve singular cuando $s''_N(\epsilon) = 0$. Esta es una indicación de una transición de fase y, en principio, no hay razón por la cual esto no pueda suceder también en sistemas pequeños. Más aún, c_N puede tomar valores negativos si sucede que $s''_N(\epsilon) > 0$. Es decir, si aparece un *intruso convexo* en $s(\epsilon)$, para un rango de ϵ .

En un sistema *infinito*, con interacciones de corto rango, no es posible encontrar un intervalo de energías para las cuales $s''_N(\epsilon) > 0$. El siguiente razonamiento demuestra el por qué de esta afirmación. Para $N \rightarrow \infty$ el estado del sistema será aquel que maximice la entropía, ya que podemos despreciar las fluctuaciones alrededor del máximo. Si dividimos al sistema infinito en dos partes A y B , cada una de las cuales contiene una fracción x y $1 - x$ de la masa total, podemos construir un macro-estado repartiendo las cantidades de energía $E_A = x e_A$ y $E_B = (1 - x) e_B$. Como el papel de las interfaces es despreciable tanto para la energía como para la entropía tendremos que:

$$E = E_A + E_B = x \cdot e_A + (1 - x) \cdot e_B \quad (3.11)$$

$$S = S_A + S_B = x \cdot s_A + (1 - x) \cdot s_B \quad (3.12)$$

El número de estado *mixtos* que es posible formar es simplemente el producto $\Omega_A \cdot \Omega_B = \exp[x \cdot s_A + (1 - x) \cdot s_B]$. Ahora bien, tanto E como S son, en la región de estados mixtos, funciones lineales de x , por lo que la entropía asociada a dichos estados resulta mayor que la del sistema original en algún estado puro [ver Fig. 3.4(a)]. Las configuraciones mixtas serán considerablemente más

probables que las puras. por lo que, en el límite termodinámico, la entropía resultará una función cóncava de la energía².

En sistemas *finitos*, el razonamiento arriba esbozado pierde validez. De hecho, “mezclar” dos partes en proporción x y $1 - x$ de dos clases de eventos asociados a energías específicas e_A y e_B , no genera una clase de eventos de energía $E = xe_A + (1-x)e_B$ porque ahora no es posible desprestigiar la energía de interfase. Tanto la energía como la entropía dejan de ser aditivas y los eventos mixtos pueden no ser los más importantes estadísticamente. En particular, la aparición de superficies internas o interfases producen una “pérdida” de entropía proporcional al área de las mismas, debido a correlaciones adicionales que aparecen entre las partículas y las interfases. Este efecto crece como $\propto N^{2/3}$, lo que muestra que la entropía deja de ser lineal con respecto de la energía [36].

En definitiva nada impide que $s_N(\epsilon)$ sea convexa para un rango de ϵ para sistemas finitos no extensivos. De hecho, como ya mencionamos, la presencia de un “intruso convexo” en la entropía puede utilizarse como definición generalizada de transición de fase [ver Figura 3.3].

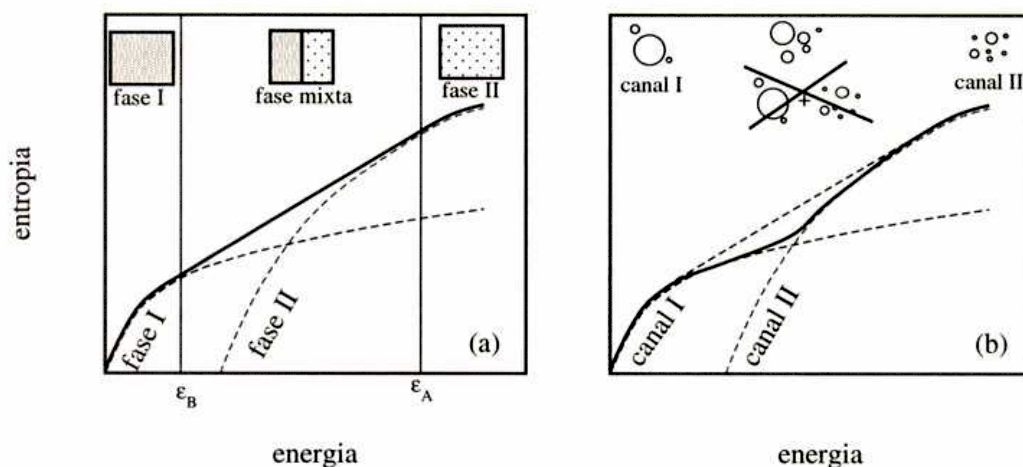


Figura 3.4: Dependencia de la entropía con la energía para sistemas infinitos, panel (a), y para sistemas finitos, panel (b). Adaptado de [86].

En este contexto, como la aparición de eventos mixtos (coexistencia espacial “usual”) deja de ser estadísticamente favorable, más útil que plantear la existencia o no de tales configuraciones, es pensar al problema según la realización de eventos de acuerdo a si pertenecen o no a una dada categoría [86] (notar que estas consideraciones son consistentes con la noción de *coexistencia temporal* introducida en el análisis de transiciones entre fases tipo-sólido y tipo-líquido en clusters atómicos [32]).

En sistemas infinitos podría pensarse en una clasificación de acuerdo a la proporción x de una de las dos fases. En sistemas finitos, en general, existen muchas menos categorías disponibles. Por simplicidad pensemos en sólo dos tipos de eventos distinguibles a partir de diferencias en algún observable que

²Más aún, que la entropía sea lineal para $\epsilon_B < \epsilon < \epsilon_A$ implica que en la región de coexistencia la temperatura microcanónica permanecerá constante. Esto no es otra cosa que la construcción de Maxwell.

puede hacer las veces de parámetro de orden³. Estas dos categorías pueden pensarse como dos canales o modos de desexcitación diferentes. Lejos de la transición uno de los canales domina. Tan pronto como se supera una energía umbral para la apertura del segundo canal, la probabilidad de ocurrencia relativa de los dos canales estará de acuerdo a las respectivas degeneraciones $\Omega_1 = \exp[S_1]$ y $\Omega_2 = \exp[S_2]$. La degeneración total asociada a una dada energía será: $\Omega = \Omega_1 + \Omega_2$. Por lo tanto, si el crecimiento del segundo canal es lo suficientemente rápido, puede originar la anomalía en la concavidad de la entropía total $S = \log \Omega$ [ver Fig. 3.4(b)]. Este razonamiento demuestra que la idea de una apertura abrupta e importante en el canal de desexcitación se encuentra intimamente vinculada con la de una transición de fase de primer orden que tiene lugar en un sistema finito no-extensivo.

3.2.2 Señales de la Transición

Mucho se ha progresado en la caracterización de la termodinámica de sistemas nucleares a partir de datos experimentales, en particular en lo relacionado a la búsqueda de señales asociadas a una posible transición de fase. Mencionaremos a continuación tres indicadores que son relevantes para el presente trabajo:

i) CURVA CALÓRICA:

Como vimos en la Sección 3.2 una de las herramientas más útiles en el estudio de transiciones de fase es la curva calórica, es decir, la relación entre la temperatura y la energía de un sistema (ver Figura 3.2). En el campo de la física nuclear la energía de excitación del sistema, E^* , se estima a partir de la siguiente ecuación de balance:

$$m_0 + E^* = \sum (m_j + E_j) + \sum (m_n + E_n) \quad (3.13)$$

con m_0 la masa del sistema fragmentante original, m_j y E_j las masas y energías cinéticas de los fragmentos (en el sistema de referencia de la fuente emisora), y m_n y E_n las masas y energías cinéticas de los neutrones emitidos [19].

En cuanto a la temperatura del sistema nuclear, existen diferentes prescripciones para su determinación, que no siempre conducen a resultados consistentes entre sí. Mencionaremos dos de ellas:

i) *Temperatura de Isótopos* [87]: Asumiendo un sistema nuclear a baja densidad y en equilibrio químico y térmico, la temperatura del sistema, T_{iso} , se define a partir de la siguiente relación entre poblaciones de isótopos:

$$R \equiv \frac{Y_1/Y_2}{Y_3/Y_4} = a \exp \frac{(B_1 - B_2) - (B_3 - B_4)}{T_{iso}} \propto e^{\Delta B/T_{iso}} \quad (3.14)$$

Las cantidades Y_i y B_i son las poblaciones y energías de ligadura de isótopos detectados, tales que Y_1 e Y_2 difieren en la misma cantidad de neutrones que Y_3 e Y_4 (por ejemplo $R \equiv (Y_{6Li}/Y_{7Li})/(Y_{3He}/Y_{4He})$).

³Por ejemplo: en el caso de la multifragmentación nuclear dicho observable podría ser el tamaño del mayor fragmento o función del número de IMF detectados en el evento.

ii) *Temperatura de Emisión* [43]: Se deduce del análisis de poblaciones relativas de dos estados internos distintos del mismo isótopo. A partir del análisis del decaimiento de resonancias (estados excitados) se puede estimar la temperatura de emisión, T_{emi} según:

$$R \equiv \frac{Y_1}{Y_2} = \frac{2J_1 + 1}{2J_2 + 1} e^{\Delta E/T_{emi}} \quad (3.15)$$

Los Y_i y J_i son las poblaciones y spins de los dos estados del mismo isótopo separados por una energía ΔE .

En la Figura 3.5 mostramos curvas calóricas nucleares obtenidas con estos dos métodos. Los símbolos llenos corresponden a estimaciones de la temperatura según T_{iso} , mientras que los vacíos según T_{emi} .

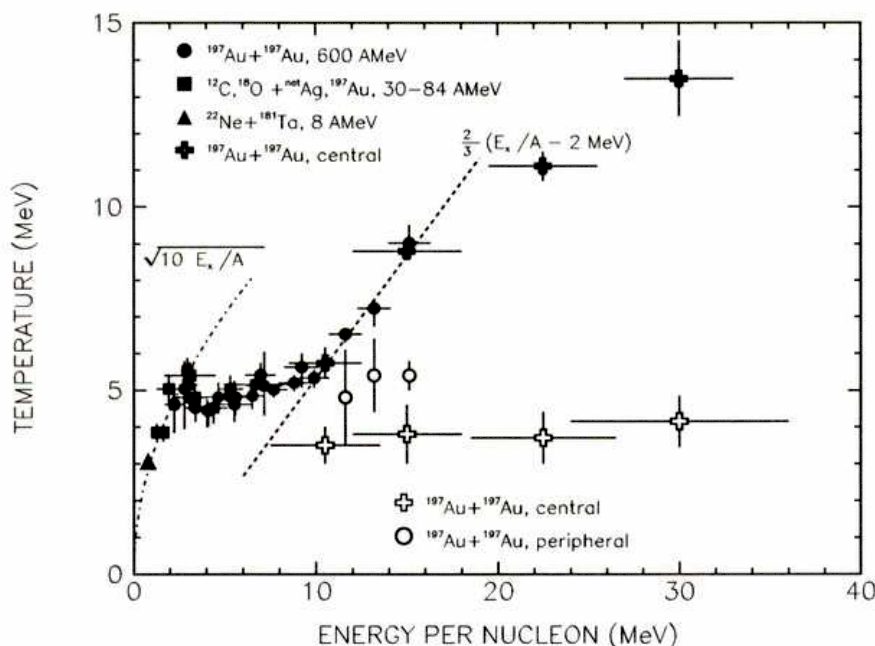


Figura 3.5: Curva calórica nuclear. Temperatura de isótopos (símbolos llenos) [88] y temperatura de emisión (símbolos vacíos) deducida de poblaciones relativas de estados excitados de ^{5}Li [43]

Se puede apreciar que las formas de las CC de la Figura 3.5 muestran importantes discrepancias a energías altas. Para T_{iso} , luego de una “meseta” que se ha interpretado como la presencia de una transición de fase de primer orden (comparar con Fig. 3.2), se observa una dependencia lineal con la energía (asimilable al comportamiento de una rama *gaseosa*). Por otra parte, T_{emi} se mantiene constante para ese rango de energías.

Se ha especulado que estas diferencias surgen debido a que ambos termómetros *muestran* etapas distintas de la reacción a la vez que son afectados en distinta forma por efectos de la emisión de pre-equilibrio y emisiones de desexcitaciones secundarias [89]. Sin embargo, en una comunicación reciente, el grupo de Texas A & M ha recopilado de manera sistemática temperaturas isotópicas

y energías de excitación obtenidas por diferentes colaboraciones a lo largo de más de una década de experimentos [44]. El estudio demuestra que es posible extraer una imagen consistente que englobe a toda la gama de experiencias si se tiene en cuenta la dependencia de las CC con la masa del sistema fragmentante. Esto es, si se analizan las CC agrupando datos de acuerdo a regiones de masas nucleares involucradas, todas las curvas resultan cualitativamente similares y todas ellas exhiben un comportamiento tipo “meseta” para altas energías de excitación. Vale la pena destacar que este tipo de comportamiento ya había sido predicho por nuestro grupo a partir de calculos realizados sobre modelos dinámicos microscópicos para sistemas fragmentantes no confinados [41]. El mismo está estrechamente vinculado a la aparición de un modo colectivo de expansión que actúa como sumidero de energía, constituyendose en una muy eficiente vía de enfriamiento para el sistema. Retomaremos el análisis de las CC en capítulos siguientes.

ii) FLUCTUACIONES:

Recientemente se ha sugerido que es posible utilizar a las fluctuaciones de la energía cinética para estudiar el fenómeno de transiciones de fase en sistemas aislados en equilibrio [37]. Para estos casos, la energía puede ser escrita como suma de dos términos independientes, una contribución cinética y otra potencial: $E = E_K + E_P$. Por lo tanto, en el ensamble microcanónico, la función de partición total, $\Omega(E) = \exp S(E)$, resulta el producto de convolución de las funciones de partición parciales, $\Omega_i(E_i) = \exp S_i(E_i)$, de los dos subsistemas $i = K, V$:

$$\Omega(E) = \int_0^E dE_K \Omega_K(E_K) \Omega_V(E - E_K)$$

Dentro de la aproximación semi-clásica, la ecuación de estado cinética resulta $E_K = 3/2NT_K$, mientras que el calor específico (Ecuación 3.10) toma el valor constante $C_K = 3N/2$. En lo que respecta a la distribución de energías cinéticas, cuando la energía total del sistema es E , se tiene que:

$$P_K^E(E_K) = e^{S_K(E_K) + S_V(E - E_K) - S(E)} \quad (3.16)$$

Usando la Ecuación 3.16 es posible determinar la partición más probable de la energía disponible E entre los dos subsistemas. La misma está caracterizada por una única temperatura microcanónica:

$$\bar{T} \equiv \underbrace{\frac{\partial S_K}{\partial E_K} \Big|_{E_K}}_{T_K(\bar{E}_K^E)} = \underbrace{\frac{\partial S_V}{\partial E_V} \Big|_{E - E_K}}_{T_V(E - \bar{E}_K^E)} \quad (3.17)$$

por lo que, el valor más probable de energía cinética, $\bar{E}_K^E$, puede efectivamente utilizarse como un termómetro microcanónico. Usando una aproximación Gaussiana para $P_K^E(E_K)$, la varianza de la energía cinética puede ser calculada como:

$$\sigma_K^2 = \bar{T}^2 \frac{C_K C_V}{C_K + C_V} \quad (3.18)$$

donde C_K y C_V son los valores específicos microcanónicos calculados para la partición de energía más probable.

Esta última ecuación puede invertirse de manera de obtener la siguiente expresión que relaciona el calor específico del sistema con las fluctuaciones de la energía cinética:

$$C \simeq C_K + C_V = \frac{\bar{T}^2 C_K^2}{\bar{T}^2 C_K - \sigma_K^2} = \frac{C_K^2}{C_K - \sigma_K^2 / \bar{T}^2} \quad (3.19)$$

En ausencia de una transición de fase, dada la condición de $E = cte$, es de esperar que las fluctuaciones σ_K^2 permanezcan menores al valor de expectación canónico $C_K \bar{T}^2$ y que el calor específico total permanezca positivo. Sin embargo, como vimos en la sección precedente, las transiciones de fase de primer orden en sistemas finitos se corresponden con la presencia de polos y calores específicos negativos que corresponden a fluctuaciones de la energía cinética *anormalmente* grandes $\sigma_K^2 \geq C_K \bar{T}^2$.

iii) CALORES ESPECÍFICOS NEGATIVOS:

La ecuación 3.19 muestra que las fluctuaciones de la energía cinética constituyen una medida experimentalmente accesible del calor específico del sistema. En efecto, la prescripción suministrada por dicha ecuación ha sido utilizada para calcular el calor específico no sólo en fenómenos de fragmentación nuclear [48, 90], sino también en transiciones de fase observadas en clusters moleculares [49].

En la Figura 3.6 mostramos el cálculo respectivo aplicado al estudio de la fragmentación del cuasi-proyectil(QP) originado en reacciones periféricas de Au+Au a 35 MeV/A. Los dos paneles de la figura corresponden a dos hipótesis diferentes utilizadas para reconstruir el escenario de fragmentación a partir de información asintótica (hipótesis de *freeze-out*, ver Ref.[48] para más detalles). Lo que es importante resaltar es que ambos paneles muestran el mismo comportamiento cualitativo: el calor específico presenta dos polos y una rama de valores negativos, tal como predice la teoría para una transición de fase de primer orden que tiene lugar en un sistema finito, no extensivo y aislado.

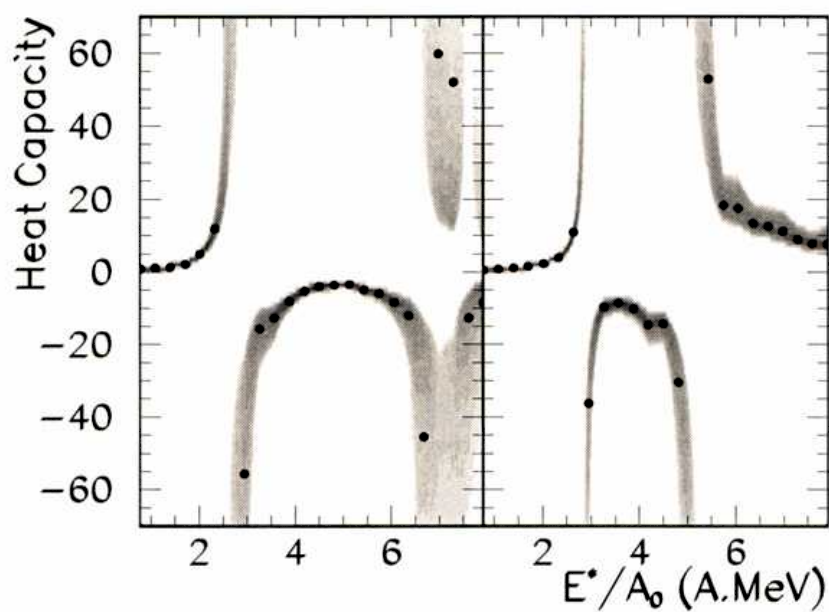


Figura 3.6: Calor específico (símbolos) obtenido a partir de la Ecuación 3.19 en el estudio de la desexcitación del quasi-proyectil en reacciones periféricas de Au+Au a 35 MeV/A. Los dos paneles se refieren a distintas reconstrucciones del escenario de fragmentación (ver [48])

Capítulo 4

Fragmentación en sistemas confinados

4.1 Introducción

Como mencionamos en el Capítulo 2, una hipótesis de trabajo utilizada usualmente por los modelos estadísticos para tratar el problema de la multifragmentación bajo una imagen de equilibrio global, es que puede definirse un volumen de congelamiento o *freeze-out* dentro del cual es posible asumir la existencia de un ensamble de fragmentos en equilibrio.

En el presente capítulo nos proponemos estudiar qué tipo de información acerca de la ecuación de estado del sistema es posible obtener en dicho escenario de *freeze-out*. Para ello, utilizaremos un sistema conformado por partículas interactuantes a través de un potencial de Lennard-Jones¹ y técnicas de dinámica molecular clásica (CMD). Esto nos permitirá estudiar cómo se desarrollan correlaciones, inhomogeneidades y superficies internas dando lugar a gotas más o menos bien definidas. Podremos a su vez investigar el comportamiento del sistema para una muy amplia gama de densidades y establecer una relación entre las distribuciones de fragmentos dentro del volumen confinante y la respectiva descripción termodinámica.

4.1.1 Descripción del Modelo

El sistema bajo estudio está constituido por gotas altamente excitadas compuestas por 147 partículas que interactúan de a pares a través de un potencial 12-6 Lennard Jones:

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

¹La analogía entre la fuerza nuclear e interacciones tipo van der Waals permite, a pesar de su simplicidad, obtener resultados cualitativamente correctos, utilizando este modelo clásico.

Consideramos como radio de corte para la interacción $r_c = 3\sigma$. Las energías y distancias las medimos en unidades del pozo de potencial ϵ y σ respectivamente. La unidad de tiempo utilizada es $t_0 = \sqrt{\sigma^2 m / 48\epsilon}$. Hacemos notar además que, salvo aclaración explícita, tanto en éste capítulo como en los subsiguientes, cada vez que presentemos valores de cantidades extensivas, tales como la energía, utilizaremos valores por partícula.

Para confinar a las partículas usamos un pozo esférico definido a través de un potencial central $V_{pared} \sim (r - r_{pared})^{-12}$, con un radio de corte $r_{cut} = 1\sigma$, en el cual se anula suavemente así como su primer derivada.

El conjunto de ecuaciones de movimiento fue integrado utilizando el algoritmo de Verlet en velocidades (ver Apéndice A) tomando $dt = 0.002t_0$ como paso de integración, con lo que nos aseguramos una conservación de la energía del orden del %0.1. Las condiciones iniciales de la evolución fueron generadas a partir de configuraciones de una gota, de muy baja energía interna, que incluía a todas las partículas del sistema. Las velocidades fueron sorteadas aleatoriamente de manera de ajustar el valor de energía total deseado. Una vez finalizado el transitorio, realizamos un muestreo microcanónico de configuraciones cada $5t_0$.

4.1.2 Definiciones de Fragmento

Para obtener información acerca de las correlaciones que surgen en el sistema, la descripción a nivel “partículas” provista por las simulaciones CMD debe ser reanalizada usando algoritmos de reconocimiento de fragmentos. Existen muchas y muy variadas prescripciones para realizar esta tarea. A continuación describiremos las que usaremos a lo largo de este trabajo.

Fragmentos MST:

La definición más simple e intuitiva de fragmento está basada en correlaciones en el espacio configuracional. Una partícula i pertenece a un fragmento C , si existe otra partícula j , incluida en C , que cumpla que $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq r_{cl}$, donde r_{cl} es un parámetro llamado radio de *clusterización* (en este trabajo fijamos $r_{cl} = r_{cut} = 3\sigma$). Al algoritmo que reconoce tales fragmentos se lo denomina *Minimum Spanning Tree*, (MST), cuya traducción sería: algoritmo de búsqueda del mínimo árbol de conexiones. En éste método de reconocimiento sólo correlaciones en el espacio $\mathbf{q}$ son consideradas mientras que la información de los momentos de las partículas es completamente ignorada. Como consecuencia de esto, los fragmentos MST no son capaces de describir la estructura de fragmentos físicamente relevante en configuraciones de alta densidad [40]. Sin embargo, un punto que vale la pena destacar es que al tomar $r_{cl} = r_{cut}$, una partición del sistema en fragmentos MST asegura que no existen interacciones entre los mismos, por lo cuál la superficie de clusters queda claramente definida. Por eso, el algoritmo MST es útil para examinar el límite que impone un dado volumen confinante a la formación de fragmentos bien definidos en el espacio configuracional. .

Fragmentos MSTe:

Una extensión del MST es el algoritmo conocido como *Minimum Spanning*

Tree in Energy Space (MSTE). En este caso un conjunto dado de partículas $i, j, \dots, k$ pertenecerá al mismo fragmentos C si ocurre que:

$$\forall i \in C, \exists j \in C / e_{ij} \leq 0 \quad (4.2)$$

con $e_{ij} = V(r_{ij}) + (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2/4\mu$, y μ la masa reducida del par i, j . Esta definición está inspirada en la prescripción de Coniglio y Klein para reconocer fragmentos en un sistema de Ising, de manera que los mismos exhiban un comportamiento crítico apropiado (i.e. para que los puntos críticos termodinámicos y geométricos coincidan) [91, 92].

Fragmentos ECRA:

Se puede obtener una definición más robusta de fragmentos si se utiliza información acerca de la *fluctuación de densidad más ligada en el espacio de fases* (FDML) que presenta el sistema. La misma está definida por el conjunto de clusters $\{C_i\}$ para el cuál la suma, $E_{\{C_i\}}$, de las energías internas de los fragmentos toma su valor mínimo:

$$\begin{aligned} E_{\{C_i\}} &= \sum_i E_{int}^{C_i} \\ \text{con } E_{int}^{C_i} &= \sum_{j \in C_i} K_j^{cm} + \sum_{\substack{j, k \in C_i \\ j \leq k}} V_{j,k} \end{aligned} \quad (4.3)$$

K_j^{cm} es la energía cinética de la partícula j medida a partir del centro de masa del cluster que la contiene. V_{ij} es el potencial entre pares de partículas i, j .

El algoritmo desarrollado para encontrar la FDML es conocido como: *algoritmo de reconocimiento temprano de fragmentos*, ECRA [39]. El mismo, busca estructuras de partículas simultaneamente bien correlacionadas tanto en $\mathbf{q}$ como en $\mathbf{p}$, a través de la minimización de los términos potencial y cinéticos de la Ec. 4.3.

Los fragmentos ECRA surgen del compromiso entre la máxima temperatura que los clusters pueden sostener, frente a los efectos de cohesión de la interacción potencial. Esto significa que si en una agrupación de partículas las correlaciones espaciales (minimización de V) no son lo suficientemente importantes como para contrarestar bajas correlaciones en velocidad (alta temperatura) el algoritmo producirá dos o más fragmentos a partir de dicha agrupación.

La prescripción ECRA ha sido extensamente utilizada en muchos estudios de sistemas fragmentantes no confinados [40, 93, 41, 42] y ha permitido establecer, por ejemplo, que gotas altamente excitadas fragmentan en realidad muy temprano en su evolución. Es decir, aún cuando configuracionalmente el sistema se presente como un único fragmento MST, dentro del mismo existe una estructura subyacente de clusters ECRA, precursores de los que serán fragmentos asintóticos.

4.2 Descripción Termodinámica

Diversos observables pueden ser analizados para caracterizar termodinámicamente a un sistema. Por ejemplo, la presión y temperatura pueden ser estimadas a partir del teorema del virial [94]: $\langle p_k \partial H / \partial p_k \rangle = k_B T$, $\langle q_k \partial H / \partial q_k \rangle = k_B T$ para cualquier coordenada q_k o momento p_k generalizados.

Por otra parte, ya hemos visto en la Sección 3.2.2, cómo las curvas calóricas, el análisis de fluctuaciones de la energía cinética y el calor específico, constituyen indicadores de posibles transición de fase. Junto a estas cantidades, el estudio de distribuciones de masa de fragmentos y la caracterización de posibles comportamientos críticos, a través del cálculo de exponentes críticos, aportan una visión complementaria al análisis. En lo que sigue haremos uso de tales observables.

4.2.1 Curva Calórica

Como ya mencionamos, la CC se define como la relación entre la temperatura y energía de un sistema. En el caso en que éste se encuentre en equilibrio microcanónico, resulta:

$$T(E) = \frac{2}{3(N - g)} \langle K \rangle_E \quad (4.4)$$

donde N es el número de partículas, $\langle K \rangle_E$ la energía cinética media promediada sobre una trayectoria CMD realizada a energía E constante. $g = 1$ si el sistema está aislado y cero si no lo está.

En la Figura 4.1(a) mostramos las respectivas CC, calculadas sobre sistemas confinados de densidades: $\rho^h = 0.55\sigma^{-3}$, $\rho^c = 0.35\sigma^{-3}$, $\rho^m = 0.07\sigma^{-3}$ y $\rho^l = 0.01\sigma^{-3}$ (ver leyenda). Claramente podemos reconocer diferentes comportamientos.

Para el caso más diluido, ρ^l (triángulos), la CC correspondiente muestra un *loop* que se continúa en una curva de temperaturas linealmente creciente con la energía (a la que podemos denominar rama gaseosa). Como vimos en la Sección 3.2.1, un valor negativo de la derivada de la temperatura como función de la energía refleja un comportamiento anómalo de la entropía, es decir, la aparición de un *intruso convexo* para el rango de energías respectivo. Esta señal es esperada en transiciones de fase de primer orden que tienen lugar en sistemas finitos no extensivos.

A medida que la densidad aumenta, el *loop* que muestra la CC va desapareciendo gradualmente hasta que es reemplazado por un punto de inflexión (curva ρ^m , diamantes). Finalmente, para densidades más altas, ρ^c (cuadrados) y ρ^h (círculos), no es posible apreciar cambios cualitativos de la segunda derivada de $T(E)$.

En la Figura 4.1(b) mostramos el comportamiento de la energía potencial por partícula, V , como función de la energía total del sistema. Para las densidades más bajas (ρ^l, ρ^m) podemos reconocer dos regímenes. Por un lado, una

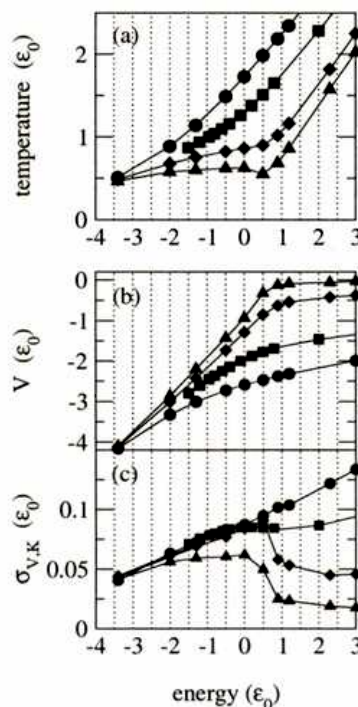


Figura 4.1: La curva calórica, la energía potencial V , y la raíz de su dispersión cuadrática media σ_V se muestran en los paneles a), b) y c) respectivamente como función de la energía del sistema. Se incluyen curvas para las siguientes densidades: $\rho = 0.01, 0.07, 0.35$ y $0.55\sigma^{-3}$ (triángulos, diamantes, cuadrados y círculos respectivamente).

región que presenta un fuerte incremento de V para energías $E \lesssim 0.5\epsilon_0$, que puede relacionarse con un incremento de la distancia media entre partículas y la disminución de pares de ligaduras que sobreviene con la aparición de superficies internas. Por el otro, podemos observar un comportamiento de saturación de V para $E \gtrsim 0.5\epsilon_0$. Para densidades más altas (ρ^c, ρ^h), por el contrario, podemos reconocer una dependencia mucho más suave de $V(E)$.

Otra propiedad interesante de nuestro sistema surge al analizar cómo evoluciona la raíz de la dispersión cuadrática media de las energías parciales tanto potencial como cinética², $\sigma_{V,K}$, como función de la energía total [ver Figura 4.1(c)]. Para las densidades más bajas (triángulos y diamantes) una disminución abrupta de σ_V puede reconocerse para $E \gtrsim 0.5\epsilon_0$, mientras que para el caso más denso, $\rho^h = 0.8\sigma^{-3}$ (círculos), la dependencia de $\sigma_V(E)$ resulta lineal a lo largo de todo el rango de energías consideradas. Vale la pena mencionar, para referencias futuras, que la transición en el carácter monótonico de $\sigma_V(E)$ tiene lugar para densidades $\rho \sim \rho^c = 0.35\rho_0$.

Para entender mejor el comportamiento de las magnitudes que mostramos en las Figs. 4.1(b) y (c) podemos seguir dos estrategias: *i*) estudiar las correlaciones partícula-partícula, *ii*) analizar la distribución de masa de fragmentos de acuerdo a las definiciones introducidas en la Sección 4.1.2. En lo que sigue presentaremos resultados obtenidos siguiendo el primer enfoque y

²Se debe recordar que debido a que trabajamos en el ensamble microcanónico ambas dispersiones están fuertemente correlacionadas

pospondremos el análisis de las propiedades de los fragmentos hasta la sección siguiente.

En la Figura 4.2 mostramos la distribución de distancias entre partículas, r_{ij} . Consideramos dos valores de densidad: ρ^l y ρ^h , que mostramos respectivamente en los paneles (a) y (b). Para cada densidad, tres valores de energías (menor, igual y mayor que $E = 0.5\epsilon_0$) fueron utilizados (ver figura para detalles). En ambos paneles, incluimos una línea vertical para indicar el radio de corte de la interacción, r_c .

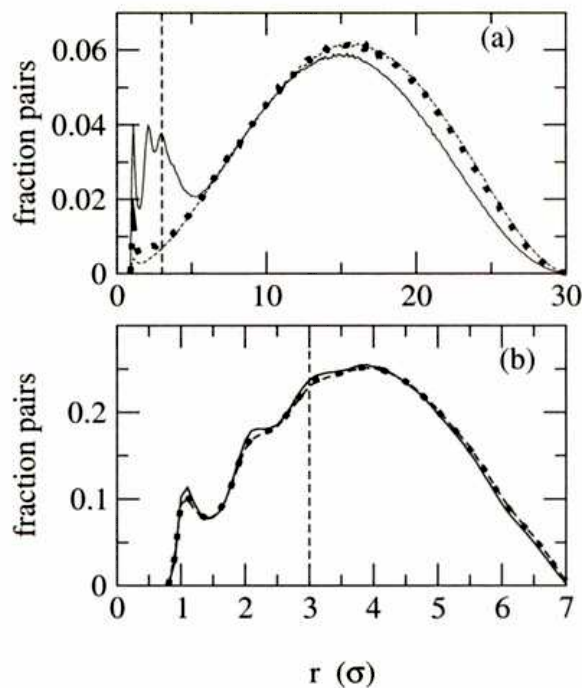


Figura 4.2: La distribución normalizada de la distancia interpartículas, calculada para ρ^l y ρ^h , se muestran en los paneles a) y b) respectivamente. Consideramos los siguientes valores de energía: $E = 0.0, 0.5$ y 1.0ϵ para el panel (a) y $E = -0.5, 0.5$ y 1.0ϵ para el panel b), que se muestran con trazo continuo, punteado y rayado respectivamente. Notar las diferentes escalas de r_{ij} .

En el panel (a) (caso muy diluido) podemos ver una estructura bien definida de pares de partículas interactuantes para bajas energías (trazo continuo). Los picos que se observan señalan la presencia de una gran gota auto-sostenida, con una estructura de primeros, segundos y hasta terceros vecinos. Para energías mayores, esta estructura se va borroneando, siendo evidente una reducción importante en el número de pares de partículas interactuantes. Esto ocurre gracias al espacioso volumen disponible, que resulta lo suficientemente grande como para acomodar, sin solapamiento, pequeños agregados de partículas. En esta transición se crean superficies, aparecen fragmentos MST bien definidos en el espacio configuracional y, como vemos en la Fig.4.1(b), V tiende a un valor residual que refleja básicamente el tamaño medio del mayor fragmento configuracional, que en el límite de altas energías sólo depende del volumen disponible.

Un comportamiento cualitativamente diferente presenta el sistema más denso considerado, $\rho = \rho^h$, que mostramos en la Fig.4.2(b). En este caso no

se observan cambios en la estadística de la distribución de r_{ij} a medida que la energía se incrementa. (Notar que la distribución tipo campana, asociada con el conteo “trivial” de pares de partículas no interactuantes, aparece superpuesta a la estructura de picos. Sin embargo, la presencia de primeros, segundos y hasta terceros vecinos puede aún reconocerse.) Es posible utilizar esta última observación para completar la imagen con la cual entender el comportamiento de $V(E)$ para altas densidades. A medida que más energía se agrega al sistema, el tamaño del volumen confinante no permite que ocurra un cambio cualitativo en la estructura del sistema. Aún con alta movilidad, las partículas no pueden escapar del rango atractivo de la interacción con sus vecinas y no se pierden ligaduras atractivas en éste límite. Por esto, un aumento de E sólo trae aparejado un incremento muy suave de V relacionado con el tiempo que pasa la partícula en las regiones más negativa del potencial de interacción [ver Figura 4.1(b)].

Finalmente, podemos asociar la caída de σ_V , observada para *bajas* densidades [triángulos y diamantes en la Fig.4.1(c)], con la pérdida de ligaduras atractivas que tiene lugar cuando domina la dinámica un regimen de fragmentos no interactuantes. Como un número creciente de partículas dejan de interactuar unas con otras, es de esperar que el sistema se vuelva “menos caótico” (ver [95] para un análisis cuantitativo de esta afirmación). En este sentido, la división del sistema en pequeños agregados *ordena* su dinámica y produce una disminución en σ_V . Por otra parte, para *altas* densidades, la región del potencial de interacción con la mayor no linealidad se presenta como la más relevante. Como consecuencia de esto, y de que las partículas no pueden dejar de *verse* debido a la severa restricción que impone el volumen, un incremento de las fluctuaciones de la energía potencial entre configuraciones sucesivas es de esperar que ocurra cuanto más energía disponga el sistema [ver Figura 4.1(c)].

Vale la pena destacar que la imagen que presentamos puede utilizarse para interpretar recientes resultados obtenidos con relación al comportamiento del máximo exponente de Lyapunov (MLE) en sistemas confinados [95]. Más aún, es posible reconocer una asombrosa similitud entre el comportamiento de $\sigma_V(E, \rho)$ y $\text{MLE}(E, \rho)$, comparando las Figuras 4.1(c) del presente trabajo y la Fig.5 de tal referencia.

4.2.2 Función de Respuesta Térmica

La presencia de un *loop* en la curva calórica observada para bajas densidades [triángulos en Fig.4.1(a)] conlleva a la aparición de una rama de valores negativos para el calor específico o función respuesta térmica (TRF) del sistema. En efecto, teniendo en cuenta que al calor específico se lo puede expresar como: $C = \partial T / \partial E^{-1}$ es claro que para este caso el mismo toma valores negativos en el rango $0.0\epsilon_0 \lesssim E \lesssim 0.6\epsilon_0$.

La Figura 4.3 nos permite avanzar sobre este punto. En ella mostramos el comportamiento de la TRF para tres densidades: $\rho_A = 0.026\sigma^{-3}$, $\rho_B = 0.055\sigma^{-3}$ y $\rho_C = 0.1\sigma^{-3}$ (trazo lleno, a rayas y punteado-rayado respectiva-

mente).

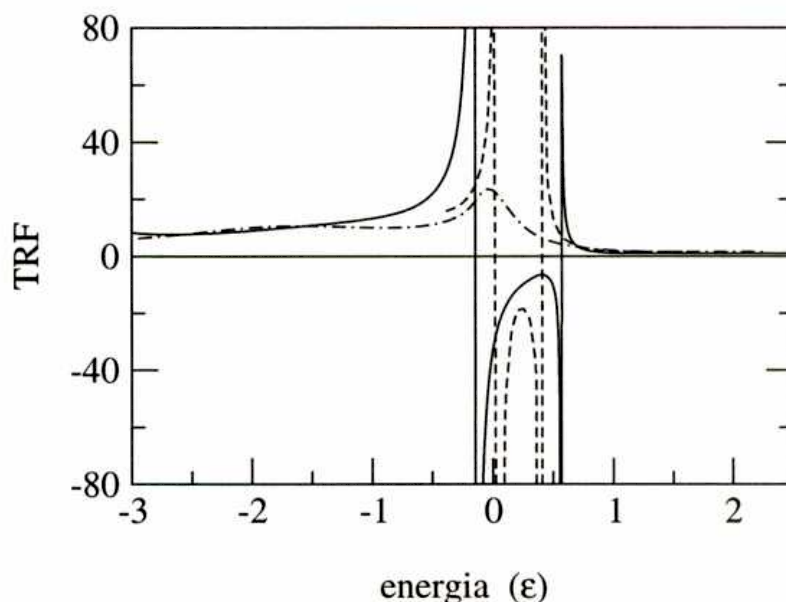


Figura 4.3: Función de respuesta térmica (TRF) calculada para sistemas de densidades $\rho_A = 0.026\sigma^{-3}$ (trazo continuo), $\rho_B = 0.055\sigma^{-3}$ (trazo rayado) y $\rho_C = 0.1\sigma^{-3}$ (trazo rayado-punteado)

Observamos para ρ_A la presencia de dos polos y una rama negativa. Podemos relacionar a la primera singularidad con el comienzo de la transición y a la segunda con la entrada del sistema a la fase gaseosa, siendo la distancia entre ambas una medida del calor latente asociado a la transformación. Para el caso ρ_B , podemos observar el mismo tipo de comportamiento, simplemente la distancia entre polos se ha visto reducida. Sin embargo, para la densidad más alta, $\rho_C = 0.1\sigma^{-3}$, los dos polos han colapsado en una única singularidad suavizada por efectos de tamaño finito. En este caso la TRF permanece positiva para cualquier energía, mostrando un máximo como signatura de la transición. Esto se corresponde con la desaparición del *loop* en la respectiva CC [ver Fig.4.1(a)] y en principio indicaría la ocurrencia de una transición desprovista de calor latente, es decir, de una transición continua.

Como mencionamos en la Sección 3.2.2, existe otra manera de calcular la TRF de un sistema aislado en equilibrio, dada la relación que existe entre las fluctuaciones de la energía cinética y el calor específico [96]:

$$\frac{\sigma_K^2}{N} = \frac{3}{2\beta^2} \left(1 - \frac{3}{2C}\right) \quad (4.5)$$

De esta expresión, resulta evidente que C tomará valores negativos siempre que σ_K^2 crezca por encima del valor de expectación canónico: $\frac{3N}{2\beta^2}$. Utilizando las ecuaciones 4.5 y 4.4, se puede definir una cantidad, $A_K(E)$, que permita analizar la aparición de tales fluctuaciones anormalmente grandes de la energía cinética:

$$A_K(E) = N \frac{\sigma_K^2|_E}{\langle K \rangle_E^2} \quad (4.6)$$

donde N es el número de partículas y $\langle \rangle$ denota un promedio sobre el muestreo microcanónico de configuraciones. En la Figura 4.4 mostramos el comportamiento de esta cantidad para ρ_A y ρ_C . Los símbolos corresponden a cálculos directos aplicando la Ecuación 4.6, mientras que las líneas corresponden a estimaciones de A_K obtenidas a partir de la respectiva CC. En el gráfico incluimos una línea horizontal que marca el valor canónico esperado.

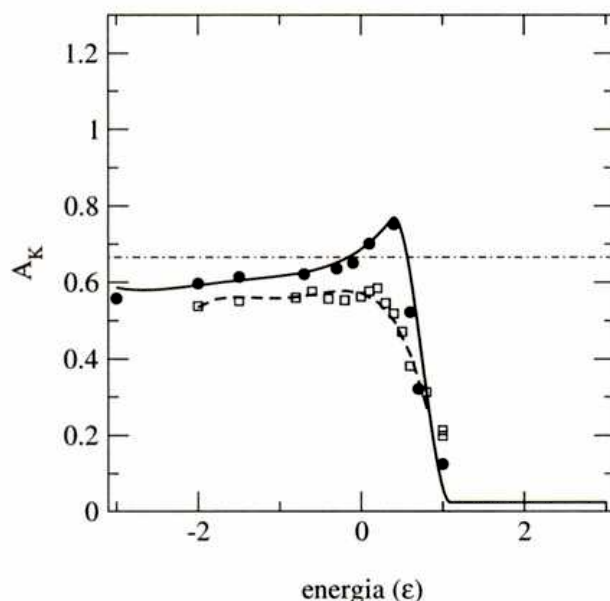


Figura 4.4: Fluctuación relativa de energía cinética, $A_K(E)$, calculada para diferentes densidades como función de la energía del sistema. Los símbolos corresponden a cálculos directos para ρ_A (círculos) y ρ_C (cuadrados). Las curvas corresponden a estimaciones obtenidas a partir de la curva calórica respectiva. La línea horizontal muestra el valor de espectación canónico para las fluctuaciones.

Como primera observación podemos remarcar el excelente acuerdo entre ambas maneras de calcular A_K . Vemos además que, para el rango de energías apropiado, grandes fluctuaciones relativas de K aparecen en el sistema para el caso ρ_A , mientras que para el caso ρ_C sólo un leve máximo local que no excede el valor canónico puede, identificarse.

Analizaremos el origen microscópico de este comportamiento en la siguiente sección, donde estudiaremos las propiedades de los fragmentos que pueden ser definidos en el sistema.

4.3 Correlaciones Microscópicas

Cada uno de los tres algoritmos de reconocimiento de fragmentos descriptos en la Sección 4.1.2 hace uso de información diferente a la hora de buscar correlaciones que permitan agrupar partículas dentro de fragmentos. Por esta razón, cada uno de ellos brinda información complementaria sobre el sistema bajo estudio. Teniendo presente esto último, trataremos ahora de entender el origen microscópico del comportamiento de las cantidades analizadas en

la sección precedente utilizando los tres algoritmos de reconocimiento antes presentados.

4.3.1 Distribución de Fragmentos

En la Figura 4.5 mostramos resultados obtenidos con el algoritmo de reconocimiento MST. Los espectros obtenidos fueron calculados para diferentes energías ($E = 0.0, 0.5$ y $1.0\epsilon_0$, con trazo continuo, punteado y rayado) para tres densidades distintas: $\rho = 0.01, 0.026$ y $0.1\sigma^{-3}$ que se muestran en los paneles (a), (b) y (c) respectivamente.

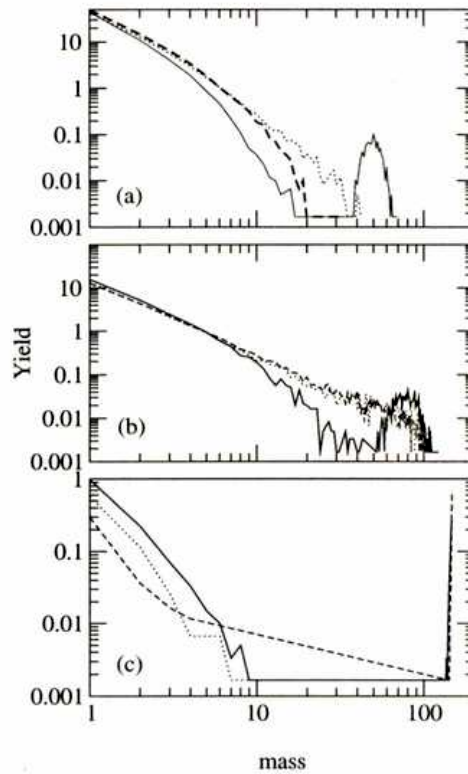


Figura 4.5: Distribución de fragmentos MST para densidades $\rho = 0.01, 0.03$ y $0.10\sigma^{-3}$ se muestran en los paneles a), b) y c) respectivamente. Para cada caso se consideran tres valores de energía: $E_{tot} = 0.0, 0.5$ y 1.0ϵ (trazo continuo, punteado y rayado respectivamente)

Para bajas densidades, panel(a), el sistema evoluciona desde un régimen caracterizado por la presencia de un cluster pesado a bajas energías, hasta un régimen dominado por la presencia de fragmentos livianos a energías altas. Esto refleja el hecho que el volumen confinante es lo suficientemente espacioso como para permitir que el sistema fragmente en agregados aislados, bien definidos en el espacio $\mathbf{q}$, a medida que crece la energía. Vale la pena mencionar que para esta densidad obtuvimos curvas calóricas que presentaban anomalías tipo *loop* en su comportamiento [símbolos triangulares de la Fig.4.1(a)]. Así mismo, como veremos más adelante, la aparición de superficies internas bien definidas se puede relacionar con el desarrollo ya reportado de las fluctuaciones anormalmente grandes de las energías parciales.

A medida que consideramos casos más densos [paneles (b) y (c)] la distri-

bución de masas de fragmentos tiende a una forma tipo-u, donde casi ninguna estructura MST puede ser identificada a parte de la contribución trivial del cluster que contiene a la mayoría de las partículas del sistema. Esto refleja la fuerte restricción a la aparición de superficies internas impuesta por el confinamiento.

En relación con esta observación, en la Figura 4.6, mostramos el valor medio del tamaño del mayor fragmento MST, como función de la energía, para dos densidades $\rho = \rho_A = 0.026\sigma^{-3}$ (triángulos) y $\rho = \rho_C = 0.1\sigma^{-3}$ (círculos). Podemos ver que para el caso más denso, el máximo fragmento

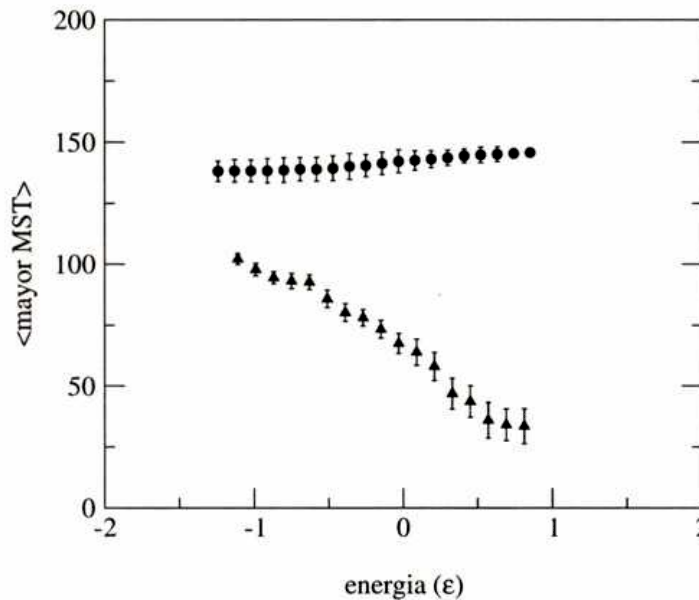


Figura 4.6: Valor medio de la masa del mayor fragmento MST. Los círculos denotan $\rho = \rho_C$ y los triángulos $\rho = \rho_A$.

MST comprende a casi toda la masa del sistema independientemente del valor de la energía del mismo. Por otra parte, para el caso más diluido, el tamaño del mayor fragmento MST decrece a medida que se incrementa la energía del sistema. Nuevamente, este resultado es consistente con la idea de que para altas densidades es inhibida la aparición de superficies internas (no pueden aparecer clusters MST de tamaños intermedios o livianos) mientras que para casos más diluidos los fragmentos MST de variados tamaños surgen como estructuras bien definidas en el espacio configuracional.

En la Figura 4.7 mostramos resultados obtenidos con los algoritmos de reconocimiento de clusters ECRA, MSTe y MST (círculos vacíos, cuadrados llenos y triángulos vacíos respectivamente). Trabajamos, en este caso, sobre un sistema de densidad $\rho = 0.2\sigma^{-3}$ (igualmente las tendencias encontradas son generales). En la primer columna de paneles mostramos la distribución de masas de los fragmentos, mientras que en la segunda, la dependencia de la energía interna, $E_{int}^{C_i}$ (ver Ec.4.3), con la masa del cluster. En los paneles (a)-(b) mostramos resultados obtenidos para $E = -0.6\epsilon_0$, en (c)-(d) $E = 0.0\epsilon_0$, mientras que en (e)-(f) $E = 0.5\epsilon_0$.

Para la densidad considerada, el algoritmo MST encuentra sólo una gran gota. Por otra parte, el ECRA y MSTe encuentran distribuciones de clusters

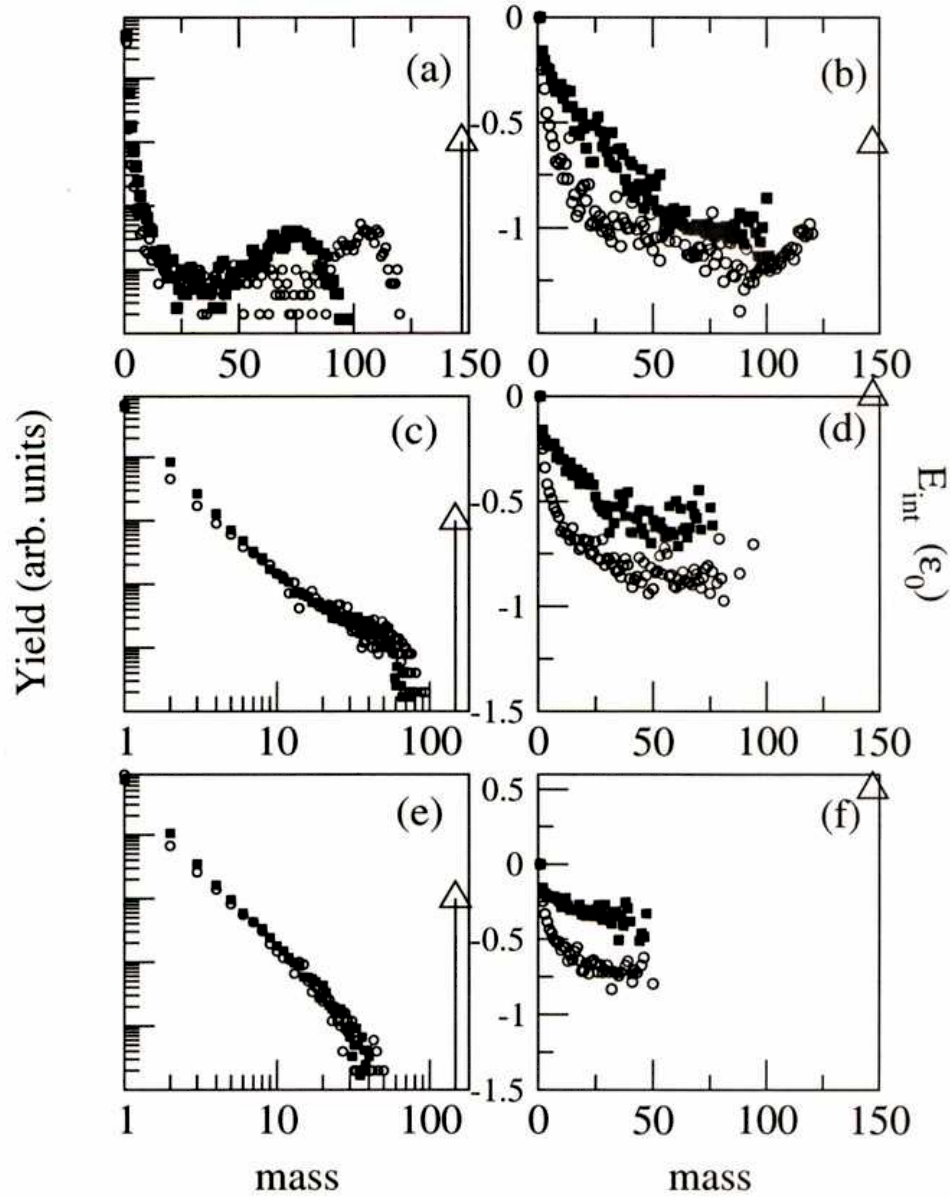


Figura 4.7: La distribución de masa de fragmentos y la energía interna de los mismos se muestran en la primer y segunda columna respectivamente. Se consideran sistemas a tres energías: $E_{tot} = -0.6\epsilon$ [paneles a)-b)], 0.0ϵ [paneles c)-d)] y 0.5ϵ [paneles e)-f)]. Los círculos, cuadrados y triángulos denotan fragmentos ECRA, MSTE y MST respectivamente.

no triviales, que muestran la transición esperada (desde una forma tipo-U, hasta un comportamiento exponencial) en la medida que la energía del sistema es incrementada. Podemos ver además que, como regla general, el algoritmo ECRA produce fragmentos más ligados que el MSTE. Esto es consistente con la idea que efectivamente el ECRA encuentra la fluctuación más ligada en el espacio de fases. Debido a esta última propiedad continuaremos nuestro análisis de acuerdo a las propiedades del sistema sólo según su estructura de fragmentos ECRA.

4.3.2 Origen Microscópico de Fluctuaciones

En la Sección 4.2.2 mostramos que la aparición de una rama negativa para la TRF estaba ligada con fluctuaciones anormalmente grandes de la energía cinética del sistema (ver Ec.4.5). Para entender cuál es el origen de estas fluctuaciones mostramos en la Figura 4.8 la evolución temporal de la energía cinética K [panel (a)] y de la masa del mayor fragmento ECRA [panel (b)] para un sistema de densidad $\rho = \rho_A = 0.026\sigma^{-3}$ y $E = 0.4\epsilon_0$. Incluimos además en el panel (c), la evolución del tamaño del mayor fragmento MST.

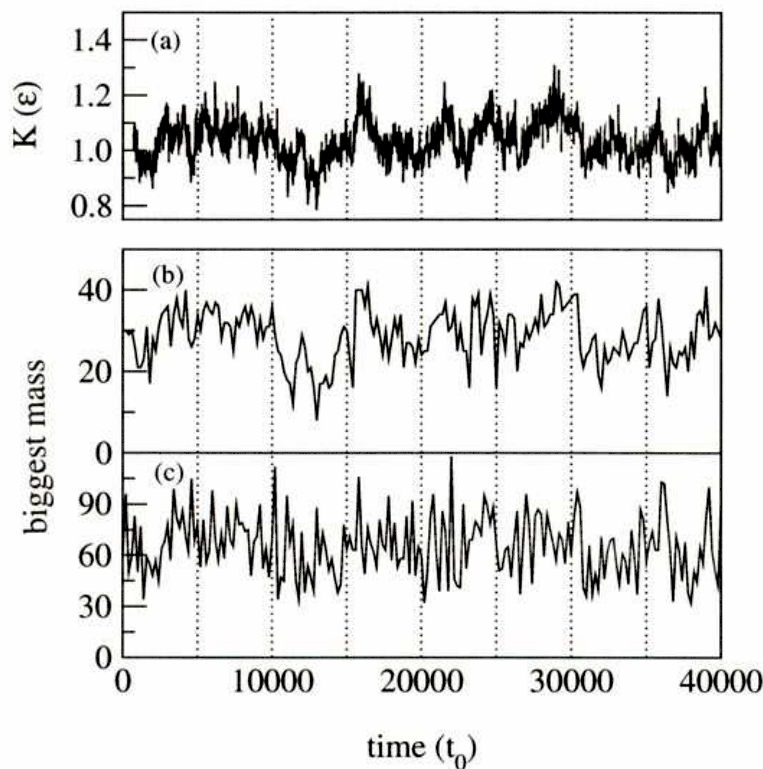


Figura 4.8: La dependencia temporal de la energía cinética, del tamaño del mayor fragmento ECRA y del mayor fragmento MST se muestran en los paneles a), b) y c) respectivamente. Los cálculos corresponden a un sistema de densidad $\rho = \rho_A$ y $E = 0.4\epsilon$.

Podemos observar que existe una buena correlación entre las primeras dos cantidades, cosa que no ocurre con la tercera. Esto indicaría que desde una perspectiva microscópica el sistema se presenta *en el espacio de fases*, algunas veces como líquido (mayor fragmento ECRA grande) y otras como vapor (mayor fragmento ECRA pequeño). Esta alternancia temporal de fases, tal como

vimos en la Sección 3.2, es el tipo de coexistencia que es de esperar ocurra para sistemas finitos, y es la responsable de las fluctuaciones anormalmente grandes que presenta K durante la transición.

4.3.3 Señales de la Transición

Como mostramos en la Figura 4.7 para un sistema de $\rho = 0.2\sigma^{-3}$, la distribución de fragmentos ECRA, para un valor determinado de energía, muestra una dependencia del tipo ley de potencia con la masa. Este comportamiento es general, en el sentido que para cualquier otra densidad puede encontrarse una $E = E_*(\rho)$ asociada con una distribución de fragmentos libre de escalas.

Este resultado es interesante porque implica que, aún en sistemas de alta densidad, un tipo de transición está ocurriendo entre dos regímenes, uno *con* y otro *sin* la presencia de una gota ECRA de grandes dimensiones (esto es, con o sin la presencia de una estructura tipo líquido en el espacio de fases). Más aún, esta transición no puede ser detectada usando simplemente información configuracional. Sólo considerando la prescripción adecuada de reconocimiento de correlaciones microscópicas, las distribuciones tipo ley de potencias pueden ser utilizadas para demarcar una línea de transición en el diagrama (T, ρ)

En este punto es importante notar lo siguiente. Según el modelo de la gota de Fisher, cuando se consideran sistemas infinitos, es de esperar distribuciones de fragmentos libres de escalas en el punto crítico de la transición, donde una transformación continua tiene lugar e hipótesis de escaleo pueden ser aplicadas. Sin embargo, ha sido reportado [50, 97, 98, 51], que varias signatures de criticalidad también aparecen cuando transiciones de fase de primer orden ocurren en sistemas pequeños. En particular, como se señala en la Ref.[97], justo antes de desaparecer al cruzar el sistema la línea de coexistencia, el mayor fragmento (asociado a la fase líquida) tiene un tamaño comparable con el de la fase vapor por lo que puede establecerse en el sistema finito una *pseudo invariancia de escala*. Por esto, una cierta similitud con comportamientos críticos es esperable en transiciones que ocurren en este tipo de sistema pequeños a pesar que, en el límite termodinámico, serían unívocamente clasificadas como de primer orden.

Para estimar $E_*(\rho)$ buscamos el comportamiento tipo ley de potencias en distribuciones de masa de fragmentos (relacionado con la transición entre los dos antedichos regímenes). Para ello utilizamos la siguiente función de ajuste sobre los espectros ECRA disponibles [99]:

$$n(A) = q_0 A^{-\tau}, \text{ con } q_0(\tau) = \frac{1}{\sum_A A^{1-\tau}} \quad (4.7)$$

$n(A)$ es el número de fragmentos de masa A y q_0 es una constante de normalización. La contribución del fragmento más grande no es tomada en cuenta.

En cada caso, cuantificamos la calidad del procedimiento de ajuste usando el coeficiente χ^2 estandar (ver Apéndice C), quedando el valor de energía E_* determinado por el mejor ajuste del espectro. En la Figura 4.9(a) mostramos una estimación típica de χ^2 para espectros de fragmentos ECRA correspondientes

a un sistema de densidad $\rho = 0.10\sigma^{-3}$. De la figura, podemos determinar un $E_* = 0.10 \pm 0.05\epsilon_0$.

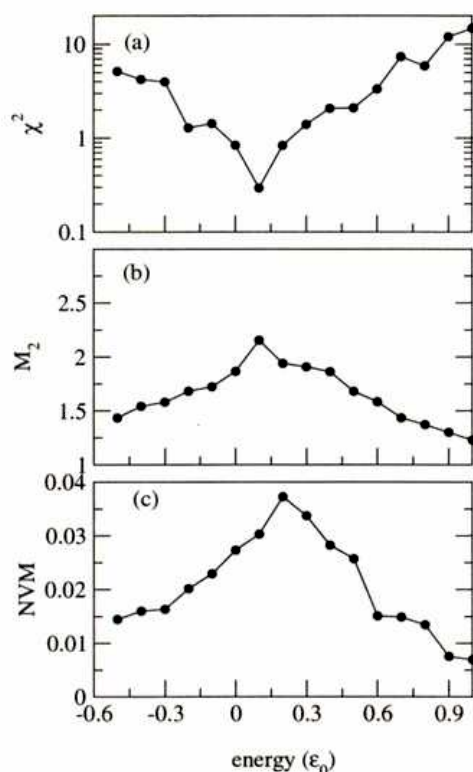


Figura 4.9: Señales de la transición calculadas para un sistema de $\rho = 0.10\sigma^{-3}$. El coeficiente χ^2 , el segundo momento de la distribución de masa M_2 y la varianza media normalizada NVM , se muestran en los paneles a), b) y c) respectivamente.

Otro observable de interés para buscar distribuciones libres de escala es el segundo momento de la distribución $M_2 = \sum'_A A^2 n(A)$ (al igual que en la determinación de τ , excluimos la contribución del fragmento más grande en la suma primada). M_2 es proporcional a la compresibilidad κ_T , que en el límite termodinámico presenta una singularidad tipo ley de potencias para transiciones continuas (ver Sección 3.1.4). En sistemas finitos, la divergencia es reemplazada por un máximo. En la Fig.4.9(b) mostramos una estimación de $M_2(E)$ para un sistema de $\rho = 0.10\sigma^{-3}$. Notamos que el máximo está localizado en el mismo valor de energía para el cual el espectro es mejor fiteado por una dependencia tipo ley de potencias.

Este tipo de acuerdo también se presenta cuando analizamos la varianza media normalizada (NVM) de la masa del mayor fragmento, A_{max} . La magnitud NVM está definida según:

$$NVM = \frac{\langle A_{max}^2 \rangle - \langle A_{max} \rangle^2}{\langle A_{max} \rangle} \quad (4.8)$$

y ha probado ser una herramienta robusta para caracterizar fenómenos de transición en los cuales ocurre un incremento importante de fluctuaciones [20]. Como vemos del panel (c) de la figura, esta señal, aunque levemente desplazada dentro de la resolución de trabajo, también presenta un máximo en la misma región que las anteriores.

El acuerdo entre las distintas señales, reportado para el caso $\rho = 0.10\sigma_0$, también se verifica para cualquier otra densidad analizada en este trabajo. Esto significa que a lo largo de todo el rango de densidades, distribuciones tipo leyes de potencia para fragmentos ECRA pueden encontrarse cuando grandes fluctuaciones tienen lugar en el sistema.

4.3.4 Exponentes Críticos

Una vez identificado el valor de energía E_* procedimos a caracterizar las propiedades del sistema en dicho estado. Para ello, comenzamos analizando el valor obtenido para el exponente τ (Ec.4.7). Mostramos el resultado de dicho cálculo en la Figura 4.10(a).

Para fenómenos críticos *verdaderos* que tienen lugar en sistemas tridimensionales, se debe verificar que: $2 \leq \tau \leq 3$ [15]. Esta condición no se satisface para $\rho \lesssim 0.05\sigma^{-3}$. Para estos casos de alta dilución, las distribuciones de fragmentos libres de escala no sobrevivirían al límite termodinámico. Las mismas no están ligadas a ninguna transición continua, sino que surgen estrictamente como consecuencia de efectos de tamaño finito. Vale la pena mencionar que $\rho \sim 0.05\sigma^{-3}$ es la máxima densidad para la cual la respectiva CC muestra un *loop* y, por lo tanto, presenta $C_v < 0$ (ver Fig 4.1). Por otra parte, para $\rho > 0.05\sigma^{-3}$, el valor calculado de τ presenta un buen acuerdo con el valor esperado para una transición líquido-sólido (línea punteada): $\tau_{liq-gas} = 2.21$.

En una transición de segundo orden, el comportamiento de M_2 cerca del punto crítico puede ser descrito en términos del exponente crítico γ [16]:

$$M_2(\epsilon) \propto |\epsilon|^{-\gamma} \quad (4.9)$$

con $\epsilon = (E_c - E)/E_c$. Esta relación es válida para un sistema *infinito* en el límite $\epsilon \rightarrow 0$. Sin embargo, como ya dijimos, en sistemas finitos M_2 presenta un máximo en lugar de la divergencia predicha por la ecuación 4.9. Teniendo esto en cuenta, utilizamos para estimar el valor de γ un procedimiento conocido como *γ -matching* [100, 99], que detallamos en el Apéndice C.

Mostramos el resultado del cálculo del exponente γ en la Figura 4.10(b). Podemos ver que los valores obtenidos tienden al valor $\gamma_{liq-gas} = 1.23$ (línea punteada), correspondiente a una transición líquido-gas. Dicha convergencia se produce para densidades $\rho \gtrsim 0.35\epsilon_0$ (ρ^c , simbolizado con cuadrados en la Fig. 4.1). Recordamos que para esta densidad habíamos reportado un cambio en el comportamiento de las fluctuaciones de la energía potencial como función de la energía del sistema [Fig. 4.1(c)] y que podíamos asociar esto con la aparición de la invariancia en la distribución de las distancias entre partículas, r_{ij} , observada para altas densidades [Fig.4.2(b)]. Esto sucedía como consecuencia de la restricción en volumen que impone el contenedor y generaba las condiciones para la ocurrencia de una transición de fase continua en el sistema.

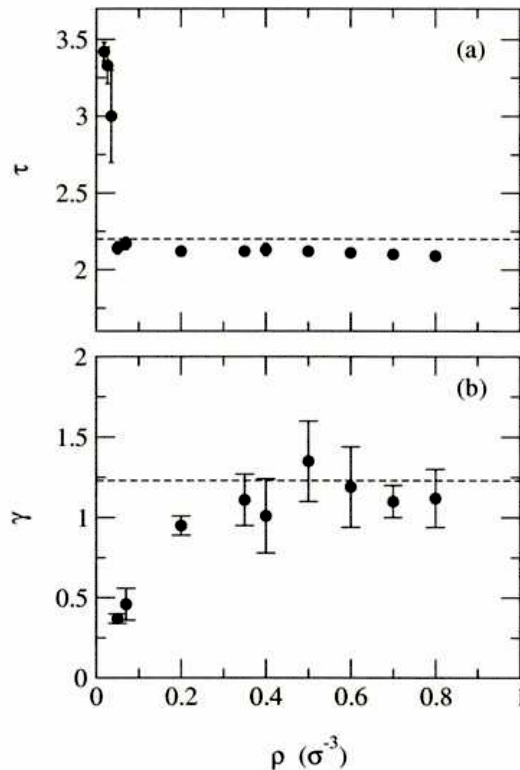


Figura 4.10: Estimaciones de los exponentes τ [panel a)] γ [panel b)] a partir de partiones ECRA. Los valores correspondientes a la clase de universalidad de 3D-Ising se indican con una línea horizontal.

4.4 Diagrama de Fases

En las secciones precedentes analizamos diversas signatures relacionadas con un cambio en las propiedades de los espectros de masa de fragmentos ECRA. Para una dada densidad, ρ , encontramos una energía de transición, $E_*(\rho)$, para la cual el sistema exhibía grandes fluctuaciones y una distribución de masas de clusters ECRA libre de escala.

En la Figura 4.11 mostramos la dependencia de E_* con la densidad. Podemos ver que para $\rho \geq 0.35\sigma^{-3}$, E_* adopta un valor prácticamente constante (un resultado similar fue reportado en [101] usando fragmentos MSTE). Es posible entender este comportamiento si analizamos el juego que se establece entre: la energía potencial interna media de los fragmentos ECRA, V_{int} , y la energía de interacción media inter-cluster, V_{ic} :

$$V_{int} = \sum_{\substack{i < j \\ i, j \in C_k}} V_{i,j} \quad (4.10)$$

$$V_{ic} = \sum_{\substack{i \in C_k \\ j \in C_l \\ k \neq l}} V_{i,j} \quad (4.11)$$

V_{int} es el potencial medio que siente una partícula de un cluster debido a su interacción con los demás miembros del mismo fragmento. Por otra parte, V_{ic} representa el potencial medio que siente una partícula debido a sus interacciones con partículas que pertenecen a otros fragmentos ECRA. Mostramos

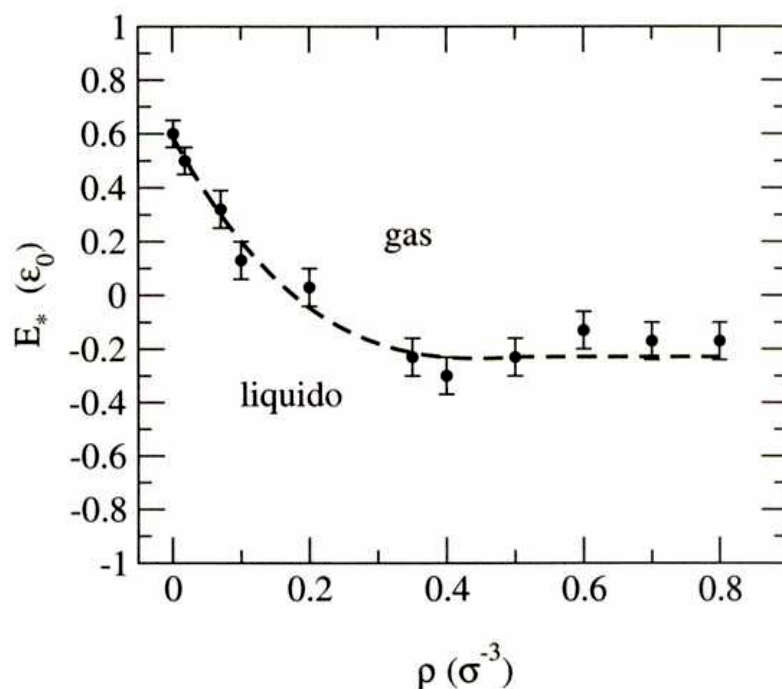


Figura 4.11: Dependencia de E^* con la densidad del sistema.

el comportamiento de ambas cantidades en las Figuras 4.12(a)-(d), calculadas para cuatro densidades: $\rho = 0.01, 0.07, 0.35$, and $0.55\sigma^{-3}$, respectivamente.

La tendencia general que muestran V_{int} y V_{ic} es fácil de interpretar. Para una dada densidad, a energías bajas, encontramos un gran fragmento ECRA, con una importante energía de ligadura. Además, como casi no aparecen otros fragmentos, aparte del mayor, $V_{ic} \sim 0$. A energías altas las particiones ECRA presentan en cambio una relativamente alta multiplicidad de fragmentos livianos, por lo que $V_{int} \rightarrow 0$ en este límite y V_{ic} aumenta en valor absoluto.

Después de una inspección de la Fig 4.12 podemos darnos cuenta que, para una dada densidad, la energía para la cual $V_{int} = V_{ic}$ resulta ser $E_*(\rho)$, i.e. la energía para la cual aparecen espectros de masas del tipo ley de potencias. Esto significa que las distribuciones de masa ECRA libres de escala tienen la siguiente propiedad: un balance se establece entre el potencial medio que afecta a una partícula de un dado cluster debido a su interacción con otros miembros del mismo fragmento, y debido a su interacción con el resto de las partículas del sistema. Este balance de energías potenciales, según el cuál no se puede establecer distinción entre la contribución de interacciones internas y externas a un cluster, es reminiscente de la desaparición de los términos de potencial químico y tensión superficial que tiene lugar en el punto crítico dentro del modelo de la gota de Fisher [15]

Con toda la información obtenida hasta ahora podemos construir el diagrama de fases de nuestro sistema de 147 partículas Lennard-Jones confinadas que mostramos en la Figura 4.13.

Los círculos corresponden a los puntos (T_*, ρ) obtenidos a través de la determinación de E_* por los métodos ya presentados, y el mapeo $E_* \rightarrow T_*$ provisto por la CC respectiva. La curva continua es una estimación de la

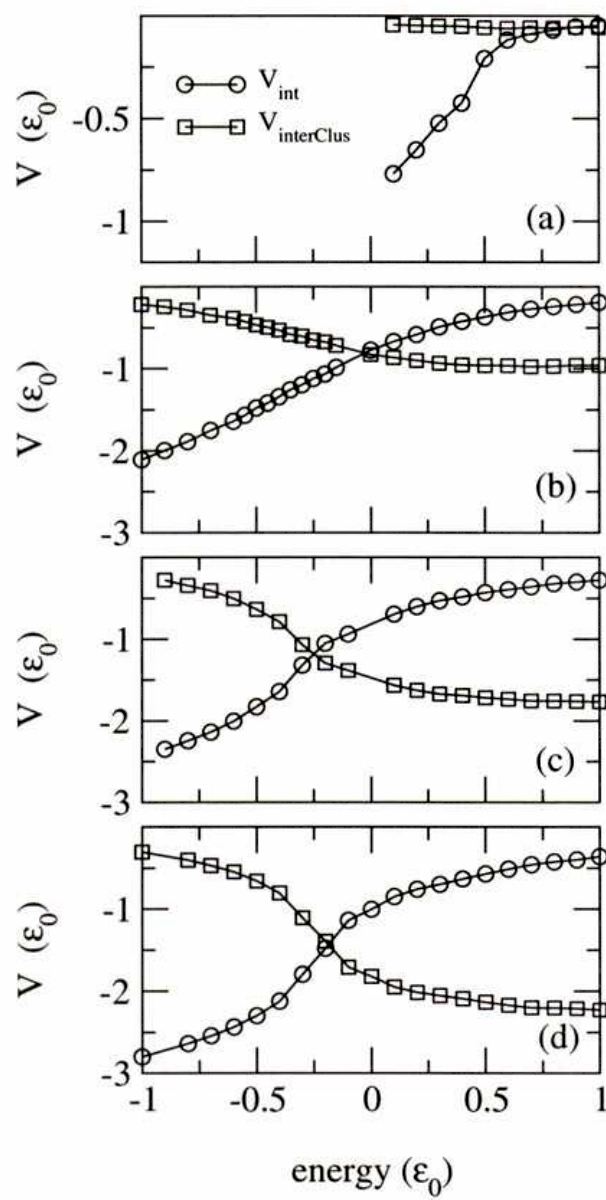


Figura 4.12: La dependencia de V_{int} (círculos) y V_{ic} (cuadrados) con la energía se muestra en los paneles a)-d) para sistemas de densidad $\rho = 0.01, 0.20, 0.50$ y $0.80\sigma^{-3}$ respectivamente.

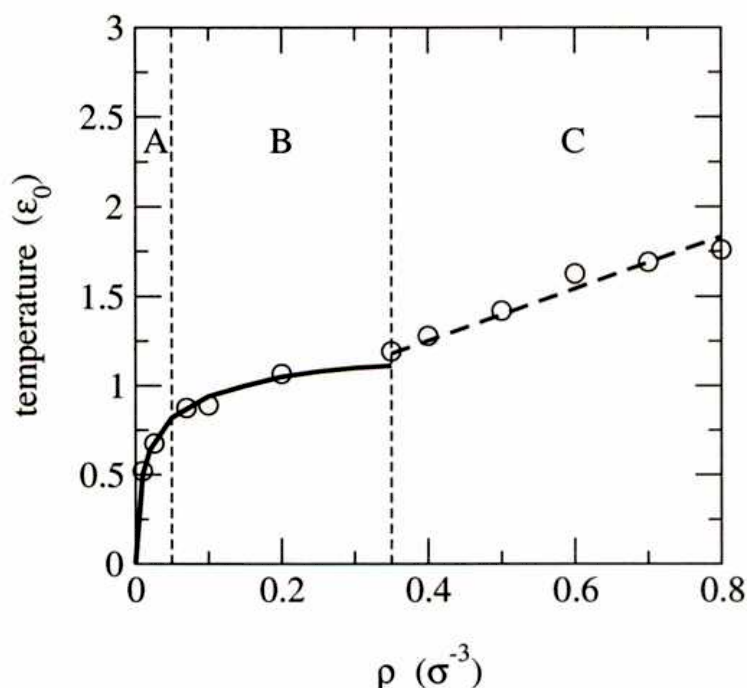


Figura 4.13: Diagrama de fase para una gota Lennard-Jones confinada de 147 partículas. La determinación de la 'línea de coexistencia' a partir de la información de la distribución de fragmentos ECRA y del comportamiento de c_v se indica con círculos y línea de trazo continuo respectivamente.

curva de coexistencia obtenida a partir del análisis del comportamiento del calor específico del sistema (ver Ec.4.5). En este caso, para densidades en las cuales la CC mostraba un *loop*, E_* se tomó como la media de los valores correspondientes a las dos singularidades del calor específico. Para densidades mayores, utilizamos la ubicación del máximo de c_v . No pudimos establecer una estimación confiable de la energía que maximizaba c_v por este método para densidades $\rho > 0.35\sigma^{-3}$. Incluimos la línea a trazos como una ayuda visual.

Podemos ver en la Figura 4.13 que se pierde, para este sistema finito, la simetría entre bajas y altas densidades característica del caso infinito [ver Fig.3.1(a)]. En cambio, una rama lineal de puntos críticos puede ser identificada para $\rho > \rho^c$.

En el plano (T, ρ) , a su vez, pueden diferenciarse tres regiones:

i) La región que llamaremos A ($\rho \lesssim 0.05\sigma^{-3}$). La misma presenta las señales esperadas para una transición de fase de primer orden que tiene lugar en un sistema finito: las correspondientes CC muestran un *loop* que se puede asociar con calores específicos negativos e intrusos convexos en la entropía, a la vez que la ocurrencia de un cambio estructural puede reconocerse en la transición [ver Fig.4.2(a)]. Esta región es la única en la cual el volumen disponible es lo suficientemente grande como para acomodar particiones de fragmentos bien definidos en el espacio configuracional. De hecho, las particiones ECRA y MST coinciden para estos sistemas diluidos.

ii) La región que llamaremos C ($\rho \gtrsim 0.35\sigma^{-3}$), en la cuál el sistema se encuentra comprimido y el algoritmo MST reconoce únicamente un único gran

fragmento. Una transición continua ocurre según el comportamiento de las correlaciones en el espacio de fases, cuando la línea de coexistencia es atravesada. No se presentan anomalías en las respectivas CC, ni cambios cualitativos en las propiedades estadísticas de la distribución de distancias inter-partículas [ver Fig.4.2(b)]. Los valores de los exponentes τ y γ presentan un buen acuerdo con los esperados para la clase de universalidad de 3D-Ising o líquido-gas (ver Tabla 3.1). Notar que, a diferencia del caso infinito, no existe uno sino toda una línea de puntos críticos.

iii) Entre las regiones A y C se encuentra la región B ($0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$). Si bien pudimos obtener un valor de τ compatible con la clase de universalidad 3D-Ising, el valor obtenido para el exponente γ resultó demasiado bajo para poder clasificar a la transición como perteneciente a alguna clase de universalidad conocida. Esto sugiere que en límite termodinámico encontraríamos que en esta región tiene lugar una transición de fase de primer orden. La aparición de distribuciones libres de escala, aún con un exponente τ razonable, surgen como consecuencia del tamaño finito del sistema (ver Sección 4.3.3).

Antes de abandonar esta sección vale la pena hacer el siguiente comentario. Debido a la naturaleza multivaluada de la temperatura como función de la energía (i.e. la presencia de un *loop* en la CC) que tiene lugar en la región A , no es rigurosamente válido que estructuras ECRA tipo-líquido (espectros de masa tipo-U) puedan ser encontradas sólo por debajo de la línea de transición que mostramos en el plano (T, ρ) de la Fig.4.13 para ese rango de densidades. El carácter suave y ‘monotónico’ que muestra la transición de espectros de masa *como función de la energía* se pierde al usar a T como el parámetro de control. De esta manera, para sistemas altamente diluidos sólo en el plano (E, ρ) (Fig.4.11), y no en el (T, ρ) , la identificación de distribuciones libres de escala de fragmentos ECRA puede ser asociada sin ambigüedad con una línea de transición. Esta peculiaridad desaparece para las situaciones más densas (regiones B y C).

4.5 Conclusiones

En este capítulo realizamos un detallado análisis del origen microscópico de algunas propiedades termodinámicas de un sistema clásico, finito y confinado. Nuestro enfoque nos permitió ir más allá de lo que usualmente asumen los modelos estadísticos que hacen uso de la hipótesis de volumen de *freeze-out*, i.e. presencia de fragmentos bien definidos configuracionalmente.

Así, pudimos encontrar que desde el punto de vista del espacio configuracional, la ecuación de estado del sistema es muy simple. Existe un valor de densidad máximo ($\rho \sim 0.05\sigma^{-3}$) hasta el cual el sistema puede experimentar una transición de fase de primer orden. En esta región, las CC's presentan un *loop* y las funciones de respuesta termodinámicas toman valores negativos. Estas propiedades nos permitieron definir una curva de transición entre dos regímenes. Uno con una estructura tipo-líquido y el otro una tipo vapor. Para densidades más altas, no hay suficiente lugar para que el sistema desa-

rolle superficies internas por lo que sólo un único fragmento MST puede ser identificado.

Ahora bien, al tomar en consideración correlaciones en el espacio de momentos aparece un comportamiento mucho más rico. Aún para densidades mayores que $\rho \sim 0.05\sigma^{-3}$, transiciones entre distribuciones de masa tipo-U y exponencialmente decrecientes pueden identificarse por la aparición de distribuciones de masas de fragmentos ECRA libres de escala.

Analizando los valores que toman los exponentes críticos τ y γ una nueva clasificación según rangos de densidad es pertinente. En la región que llamamos *A* el valor obtenido de τ es demasiado alto como para poder relacionarlo con un comportamiento crítico verdadero. Esto es consistente con la idea que en esta región el sistema experimenta una transición de primer orden en $E_*(\rho)$. Para densidades $0.05\sigma^{-3} < \rho < 0.35\sigma^{-3}$, aunque los valores de τ están en buen acuerdo con la clase de universalidad 3D-Ising, el valor encontrado para γ resulta demasiado bajo para clasificar a la transición que ocurre en la descripción ECRA como continua. Para $\rho \gtrsim 0.35\sigma^{-3}$, los valores de ambos exponentes toman valores compatibles con dicha clase de universalidad, por lo que podemos inferir que en ese rango de densidades el sistema sobrelleva una transición continua a lo largo de toda una línea de puntos críticos.

Finalmente debe quedar en claro que en un escenario de *freeze-out*, esto es de fragmentación confinada en equilibrio, es fundamental el rol del volumen confinante. De acuerdo al grado de dilución del sistema la transición entre regímenes tipo-líquido y tipo-gas, que ocurre en el espacio de fases para cualquier densidad, puede manifestarse también en el espacio configuracional. Cuando esto ocurre es posible observar anomalías tanto en la curva calórica como en funciones de respuesta termodinámicas. Estas señales desaparecen a medida que las superficies entre fragmentos configuracionales se *borronean* como consecuencia del solapamiento que induce un aumento de la densidad del sistema.

Capítulo 5

Fragmentación en sistemas no confinados

5.1 Introducción

En el capítulo anterior presentamos un análisis completo del proceso de fragmentación en sistemas confinados. Si bien entender las propiedades del fenómeno en ese contexto presenta interés en sí mismo, no es evidente que tal descripción de equilibrio pueda emplearse para estudiar sistemas finitos que fragmentan en condiciones más realistas, es decir: sistemas no confinados y libres de expandirse que evolucionan sin interactuar con elementos externos.

Tener en cuenta las diferencias que surgen entre ambas descripciones puede resultar provechoso, por ejemplo, para el caso del estudio de la multifragmentación nuclear (ver Capítulo 1). En este campo sólo se tiene acceso experimental a observables asintóticos por lo que, como ya mencionamos en la Introducción, el escenario de fragmentación debe ser reconstruido mediante alguna hipótesis de trabajo. La más utilizada es la aproximación de *freeze-out*, en la cual se asume la existencia de un ensamble de fragmentos configuracionales que coexisten *en equilibrio* dentro de un volumen de *freeze-out*. Siguiendo esta línea de trabajo, se estiman las propiedades termodinámicas para la materia nuclear teniendo en cuenta las siguientes expresiones [48]:

$$E_K = E - E_V = m_0 + E^* - \sum_{i=1}^M m_i - E_{Coulomb} \quad (5.1)$$

$$\langle E_K \rangle = \langle \sum_{i=1}^M a_i \rangle T^2 + \langle 3/2(M-1) \rangle_E T \quad (5.2)$$

donde E , E_K , E_V , $E_{Coulomb}$ son la energía total, cinética, potencial y Coulombiana del sistema, M la multiplicidad de fragmentos, m_0 la masa del núcleo original, m_i la masa de los fragmentos *dentro del volumen de freeze out*. En la segunda expresión, el primer término es una contribución del tipo gas de Fermi en la cual a es la densidad de niveles y T la temperatura. E^* es la energía de excitación medida a través de procedimientos calorimétricos, planteando el

siguiente balance [19]:

$$m_0 + E^* = \sum (m_j + K_j) + \sum (m_n + K_n) \quad (5.3)$$

donde el segundo miembro involucra cantidades asintóticas: m_j, K_j son las masas y energías cinéticas de los fragmentos detectados y m_n, K_n de los neutrones producidos.

Al margen de si es razonable o no asumir que el sistema se encuentra efectivamente en una situación de equilibrio termodinámico (ver Capítulo 2), podemos ver que una de las aproximaciones más cuestionables de este enfoque es que el movimiento colectivo de expansión está completamente desacoplado del proceso de formación de fragmentos. Sólo es tenido en cuenta a posteriori, a través de la conversión del término de energía Coulombiana, $E_{Coulomb}$, en la energía cinética asociada al flujo de los clusters asintóticos. En concordancia, se asume que E_K es energía cinética de naturaleza exclusivamente térmica.

Alternativamente, nuestro grupo ha desarrollado una intensa labor en el análisis de procesos de fragmentación que sobrevienen en sistemas altamente excitados y libres de expandirse, utilizando técnicas de dinámica molecular [40, 41, 42, 93]. En este sentido, hemos estudiado propiedades tales como: desarrollo de correlaciones en el espacio de fases, tiempos de formación de fragmentos, estimación de temperaturas, extracción de curvas calóricas, desarrollo de modos colectivos, entre otras. Como resultado de esta labor encontramos que la descripción dinámica, en la cual es posible establecer la noción de *equilibramiento local* a tiempo de fragmentación, se presenta como la más apropiada para estudiar el fenómeno de interés.

A partir de estas consideraciones en este capítulo nos proponemos establecer una comparación entre las dos visiones con las que es posible abordar al problema: la del equilibrio global y la del equilibrio local. Para ello comenzaremos exponiendo algunos resultados obtenidos en relación con procesos de fragmentación en sistemas no-confinados [40, 41, 64, 93]. Posteriormente, trataremos de determinar qué propiedades de las ya estudiadas en el capítulo precedente están relacionadas exclusivamente con la imposición de la condición de termalización del sistema y cómo se modifican en el escenario de expansión libre.

5.2 Sistemas No Confinados

Una de las principales diferencias entre la fragmentación que tiene lugar en sistemas libres con respecto a la que ocurre en sistemas confinados, es que en el primer caso se trata de procesos no estacionarios, por lo que la determinación del tiempo en el cual se forman los fragmentos juega un papel fundamental para su caracterización. En relación a este punto, uno de los resultados más importantes obtenidos por nuestro grupo es que, en sistemas no confinados, los fragmentos asintóticos se forman muy temprano en el espacio de fase [39, 40]. En efecto, esto ocurre cuando el sistema todavía es denso y configuracionalmente presenta un fragmento-MST en el que está incluida gran parte de la masa total.

5.2.1 Evolución Dinámica

Típicamente, en las etapas tempranas de la evolución, el algoritmo ECRA reconoce, dentro de los clusters MST, sub-estructuras que conforman lo que llamamos la partición más ligada en el espacio de fases [ver Sección 4.1.2]. Cuando estas particiones ECRA alcanzan estabilidad microscópica, (ver Apéndice D), es posible definir un *tiempo de formación de fragmentos*: τ_{ff} . A partir de este instante ya se encuentran definidas las fluctuaciones de densidad en el espacio de fases que se convertirán, más adelante en la evolución, en los fragmentos asintóticos. En la Figura 5.1 esquematizamos este escenario de producción de fragmentos.

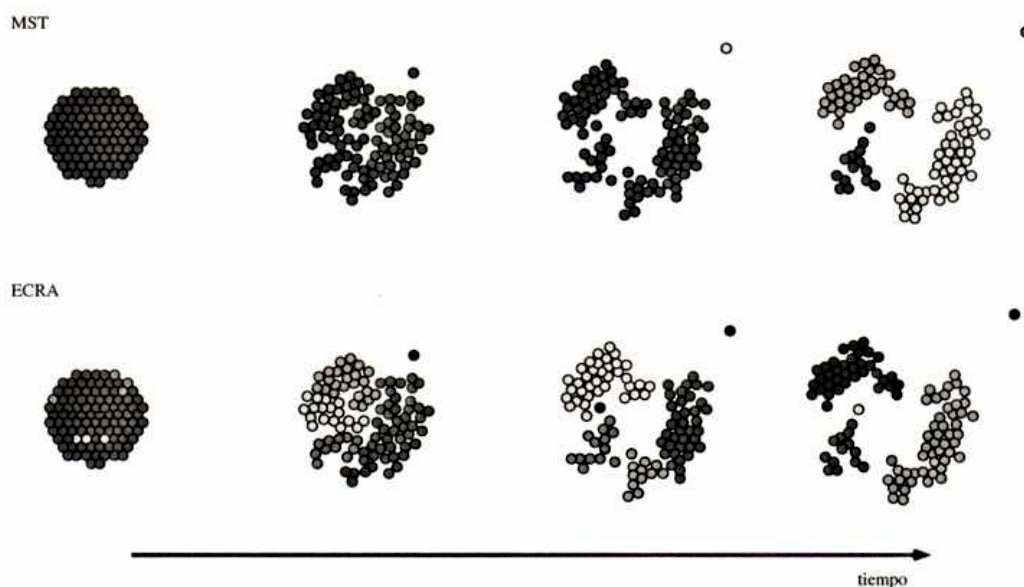


Figura 5.1: Esquema del proceso de formación de fragmentos en sistemas altamente excitados no-confinados según el ECFM (*Early Cluster Formation Model*)

En la figura mostramos una secuencia de cuatro instantes que tuvieron lugar durante el proceso de fragmentación de una gota Lennard-Jones bidimensional excitada. En la parte superior los colores indican diferentes fragmentos MST, mientras que en la inferior se muestran las correspondientes particiones ECRA. Es posible verificar que el patrón de fragmentos MST queda definido recién al tiempo correspondiente al último panel. Por otra parte, al tener en cuenta correlaciones en el espacio de fases completo, el algoritmo ECRA reconoce estructuras no triviales dentro del fragmento MST. Más aún dichas *fluctuaciones de densidad en el espacio de fases* se estabilizan en una etapa temprana de la evolución (en el esquema, en un tiempo intermedio al que corresponden el segundo y tercer panel).

Una vez determinado τ_{ff} , es posible calcular diversas propiedades del sistema al momento de fragmentar. Para ello podemos dividir el espacio en capas esféricas concéntricas, centradas en el centro de masa del sistema, y calcular

la velocidad radial media asociada a cada una de ellas [42]:

$$v_{rad}^{(i)}(t) = \frac{1}{N_i(t)} \sum_{ev} \sum_{j \in i} \frac{\vec{v}_j(t) \cdot \vec{r}_j(t)}{|\vec{r}_j(t)|} \quad (5.4)$$

donde i es el índice de la capa, $\vec{r}_j$ y $\vec{v}_j$ son la posición y velocidad de la partícula j y N_i el número total de partículas pertenecientes a la capa i a tiempo t en todos los eventos.

Una vez hecho esto, es posible verificar que la velocidad de expansión crece linealmente con la distancia respecto al centro de masa del sistema. Por otra parte, puede definirse una *temperatura local* asociada con las fluctuaciones de la velocidad con respecto a la velocidad radial media de cada capa [42]:

$$T_{loc}^{(i)} = \frac{2}{3n_{ev}N} \sum_{capas} \sum_{j \in i} \frac{1}{2} m \left(\vec{v}_j - v_{rad}^{(i)} \frac{\vec{r}_j}{|\vec{r}_j|} \right)^2 \quad (5.5)$$

De esta manera, adoptamos como conjetura que al momento de fragmentar el sistema se encuentra en una situación de *equilibrio local*, compatible con una distribución de velocidades del tipo [42]:

$$f(\vec{v}, r) = \rho(r) \left(\frac{m\beta(r)}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{\beta(r)m}{2} (\vec{v} - \vec{v}_{rad}(r))^2} \quad (5.6)$$

donde $\vec{v}_{rad}(r) = v_{rad}\hat{r}$ es la velocidad colectiva y $\rho(r)$ y $\beta(r)$ son la densidad local y la inversa de la temperatura local respectivamente. Esta suposición de equilibramiento local se sustenta en la observación de que las fluctuaciones de velocidad sobre el movimiento expansivo resultan isotropas. Esto es, la temperatura local extraída a partir de fluctuaciones en la dirección radial es igual a la calculada utilizando fluctuaciones transversales a dicha dirección.

En la Figura 5.2 mostramos los perfiles de densidad y temperatura locales, calculados a τ_{ff} , para explosiones de gotas Lennard-Jones tridimensionales excitadas con diferentes energías. En estos experimentos, partimos de una condición inicial conformada por gota en su 'estado fundamental' (las posiciones iniciales de las partículas eran elegidas de manera de que la gota posea el mínimo de energía potencial) mientras que las velocidades de las partículas eran elegidas según una distribución Maxwelliana compatible con un dado valor de $\langle K \rangle$, de manera de ajustar una energía total dada, $E = K + V$.

Podemos ver en la figura que, al tiempo de fragmentación, la temperatura local de las capas interiores presenta un valor prácticamente constante que podemos considerar como una buena estimación de la temperatura del sistema al momento de fragmentar y que resulta independiente de la energía inicialmente depositada en el mismo (para más detalles ver [42]).

5.2.2 Curva Calórica

Una característica del proceso de fragmentación en *equilibrio global* es la presencia de una rama vapor en la curva calórica del sistema (la misma adopta

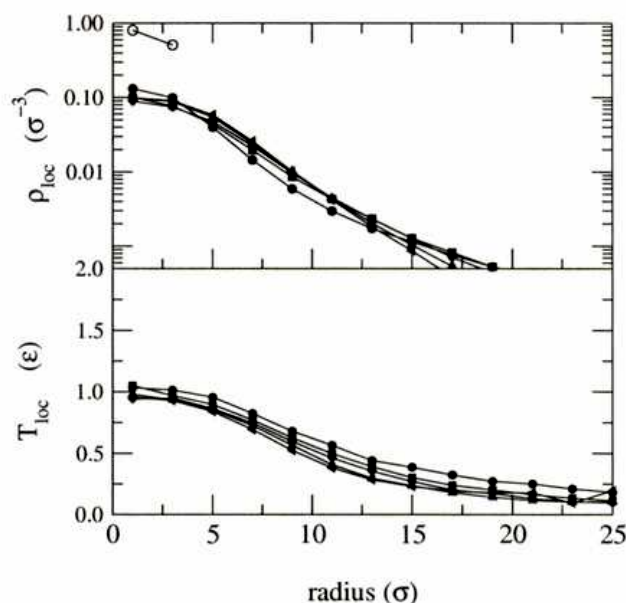


Figura 5.2: En el panel superior: densidad local inicial (símbolos vacíos) y a tiempo de fragmentación (símbolos llenos) como función de la distancia al centro de masa del sistema. En el panel inferior: perfil de temperatura a tiempo de fragmentación. Los círculos, cuadrados, triángulos hacia arriba y hacia abajo corresponden a las energías $E = 0.0\epsilon, 0.5\epsilon, 0.7\epsilon, 0.9\epsilon$ y 1.2ϵ respectivamente.

una forma: subida-meseta-subida). Para altas energías, E , la energía potencial media $\langle V \rangle$ tiende a un valor de saturación dependiente del volumen disponible, por lo que un incremento de la energía total se traduce en un incremento casi igual de la energía cinética media $\langle K \rangle$. Como en este caso los grados de libertad cinéticos se encuentran completamente termalizados resulta $T \propto \langle K \rangle$, lo que explica la presencia de la segunda rama creciente de T en la respectiva curva calórica (ver Figura 4.1).

Sin embargo, en el caso de sistemas no-confinados aparece un grado de libertad colectivo: el movimiento expansivo asociado al flujo radial de partículas, que debe ser tenido en cuenta.

En la Figura 5.3(a) mostramos la curva calórica calculada utilizando la expresión 5.5 para estimar la temperatura del sistema a tiempo de fragmentación (círculos). En la misma figura incluimos una curva adicional (cuadrados) para la cual utilizamos la energía cinética total, i.e. incluyendo no sólo fluctuaciones sobre el movimiento colectivo de expansión sino a la expansión misma. La comparación entre las dos curvas nos permite reconocer que el movimiento colectivo cobra relevancia en las cercanías de $E = 0.0\epsilon$ y se vuelve dominante alrededor de $E = 2.0\epsilon$. A su vez, vemos que la correspondiente curva calórica presenta las siguientes características: *i*) muestra un máximo en $E \sim 0.0\epsilon$ y *ii*) no presenta una rama gaseosa, sino que T resulta prácticamente constante como función de E para altas energías.

Este comportamiento está directamente relacionado con la presencia del grado de libertad colectivo de expansión que aparece en la dinámica de los sistemas no-confinados. En efecto, el flujo expansivo (movimiento ordenado)

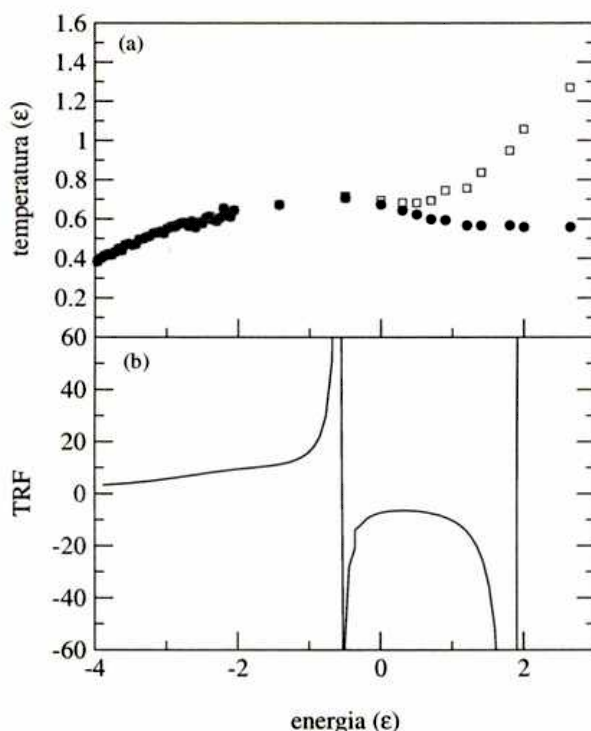


Figura 5.3: (a) Curva calórica calculada al tiempo de fragmentación para un sistema no confinado (círculos sólidos). Los símbolos cuadrados corresponden a una estimación de una 'temperatura ficticia' sin tener en cuenta el grado de libertad colectivo (ver texto). (b) Función de respuesta térmica del sistema

se comporta como un sumidero de calor y un eficaz modo de enfriamiento que impide que la energía cinética de carácter térmico crezca con la energía total del sistema (para más detalles ver [42]).

En la Figura 5.3(b) mostramos el comportamiento de la función respuesta termodinámica del sistema, TRF , calculada a partir de la curva calórica como:

$$TRF = \left(\frac{\partial T}{\partial E} \right)^{-1} \quad (5.7)$$

La TRF presenta una rama negativa entre dos polos, lo que es compatible con la ocurrencia de una transición de fase de primer orden en nuestro sistema finito (ver Sección 3.1). El primer polo ($E \sim -0.5\epsilon$) se relaciona con la entrada del sistema en el régimen de multifragmentación, mientras que el segundo ($E \sim 1.7\epsilon$) aparece como consecuencia de la estabilización de la temperatura a altas energías y, por tanto, se puede vincular con el límite impuesto por el desarrollo de flujo colectivo a la termalización de la energía total disponible.

5.3 Evolución Confinada vs. Evolución Libre

Hasta aquí hemos realizado un pormenorizado estudio del escenario de fragmentación confinada (Capítulo 4) y presentamos los principales resultados obtenidos en el estudio de la fragmentación de sistemas no-confinados (Sec-

ción 5.2). Nos ocuparemos ahora de establecer un vínculo entre ambas descripciones.

Consideramos un sistema compuesto por una gota tridimensional de 147 partículas que interactúan, al igual que en los casos anteriores, de a pares a través de un potencial del tipo Lennard-Jones (ver Ecuación 4.1).

Realizamos los siguientes experimentos numéricos: en primer lugar dejamos que el sistema se equilibre dentro de un volumen confinante dado (llamamos a estas configuraciones *configuraciones o estados confinados*). Seguidamente retiramos las paredes y dejamos que el sistema evolucione libremente durante un tiempo suficientemente largo como para que la composición de los fragmentos configuracionales alcance la estabilidad. A estas configuraciones las denominamos: *configuraciones asintóticas*.

De esta manera, dentro del volumen (donde enfoque termodinámico es apropiado) usamos a la dinámica molecular para generar un muestreo microcanónico de configuraciones confinadas. Una vez que las paredes son removidas la dinámica molecular provee la evolución temporal de condiciones iniciales preparadas en un ensamble microcanónico.

En la Figura 5.4 mostramos, en el diagrama de fases del sistema confinado, las densidades que utilizamos como punto de partida para las evoluciones no confinadas. Elegimos tres valores de densidad correspondiendo cada uno a una región distinta del diagrama de fases de acuerdo a la clasificación elaborada en el capítulo anterior (ver Figura 4.13): $\rho_A = 0.026\sigma^{-3}$, $\rho_B = 0.1\sigma^{-3}$ y $\rho_C = 0.6\sigma^{-3}$.

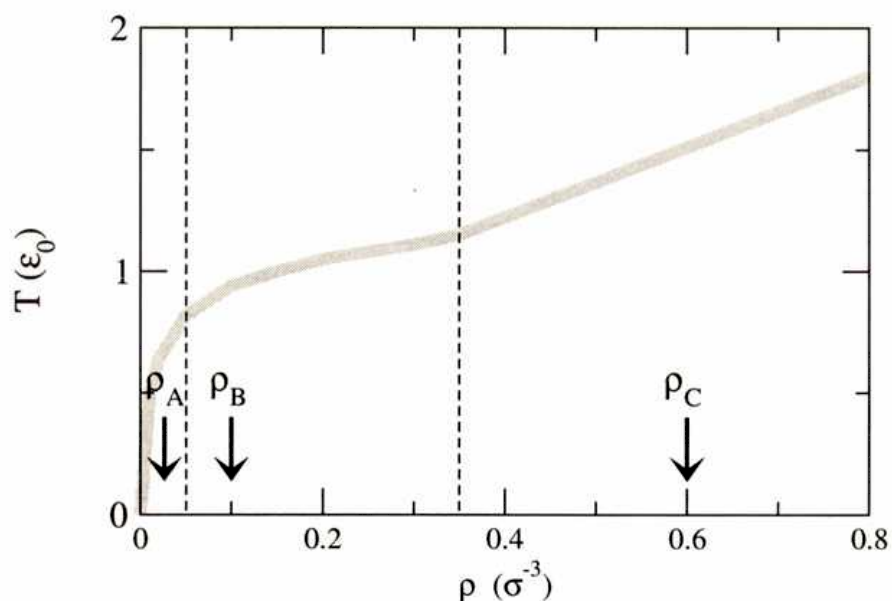


Figura 5.4: Localización de las densidades de trabajo en el diagrama de fases del sistema confinado.

Es útil presentar en este punto una comparación entre las distribuciones de masa de los fragmentos que utilizamos para caracterizar las configuraciones confinadas (fragmentos ECRA, definidos en el espacio de fases) y las correspondientes particiones asintóticas (fragmentos MST, bien definidos en el espacio configuracional). A tal efecto, en la Figura 5.5, mostramos dichos espectros.

calculados para una energía $E = 0.1\epsilon$ y las tres densidades: ρ_A, ρ_B y ρ_C .

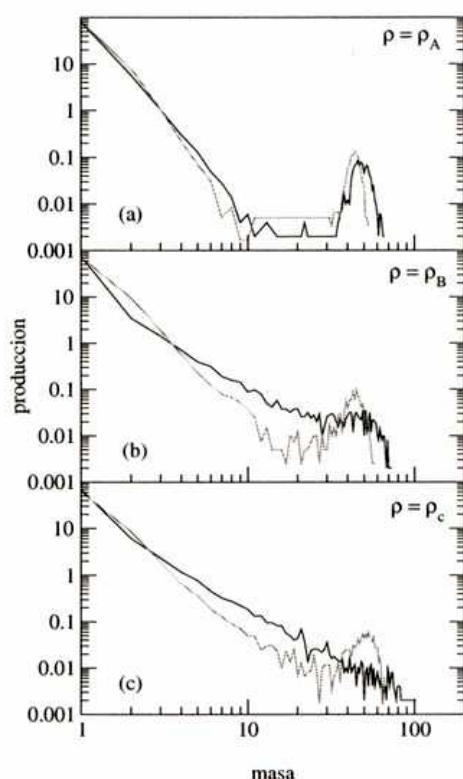


Figura 5.5: Los espectros de masas para fragmentos ECRA (configuraciones confinadas) y fragmentos asintóticos MST (evoluciones libres) se muestran con línea negra y verde-claro respectivamente para configuraciones de $E = 0.1\epsilon$. Los casos correspondientes a ρ_A, ρ_B y ρ_C se muestran en los paneles a), b) y c) respectivamente.

Podemos ver en la Figura 5.5 que para la densidad más baja ($\rho = \rho_A$, en el primer panel) la dinámica del sistema luego de remover las paredes es trivial. En este caso, el volumen impuesto por las paredes es tan espacioso que el sistema confinado ya se encuentra fragmentado en el espacio configuracional, por lo que la forma del correspondiente espectro asintótico no presenta mayores diferencias con respecto a la distribución de fragmentos confinados.

Por otra parte, para la densidad más alta ($\rho = \rho_C$, en el tercer panel) encontramos que las correlaciones en el espacio de fase (fragmentos ECRA) de los estados confinados de partida se ven cualitativamente modificadas por la evolución posterior a la remoción de las paredes. En efecto, sobreviene un comportamiento de cohesión de fragmentos ECRA y redistribución de partículas dentro de los mismos. Es necesario que las colisiones desarrollen un flujo expansivo para que, siendo el sistema aún denso, se establezca la partición ECRA, tal como sucedía con los experimentos ‘explosivos’ presentados en la Sección 5.2. Es evidente entonces que para este caso, entre el estado confinado inicial y el correspondiente estado asintótico existe un estado intermedio, caracterizado por la presencia de un movimiento colectivo de expansión, que juega un rol fundamental en el proceso de formación de fragmentos.

5.3.1 Fluctuaciones de la Energía Cinética

Al retirar las paredes una caracterización dinámica, en lugar de una termodinámica, se presenta como la más adecuada para estudiar las propiedades del sistema. En particular ahora los diversos observables físicos evolucionarán en el tiempo.

Surge entonces un aspecto interesante que vale la pena explorar: en el capítulo precedente vimos que en sistemas confinados la ocurrencia de señales relacionadas con una transición de primer orden (*loop* en la curva calórica, grandes fluctuaciones de la energía cinética, calores específicos negativos, etc) estaba condicionada por el volumen disponible y con la posibilidad o no de que aparezcan en el sistema superficies internas. En particular nos detuvimos en el estudio del comportamiento de las fluctuaciones de la energía cinética del sistema, σ_K que caracterizamos mediante la cantidad (ya introducida en la Ecuación 4.6):

$$A_K(E) = N \frac{\sigma_K^2|_E}{\langle K \rangle^2|_E} \quad (5.8)$$

Recordemos a su vez que en el caso de sistemas confinados se tiene, como consecuencia de la termalización, que $\langle K \rangle \propto T$, por lo que el calor específico (o función de respuesta térmica) del sistema podía estimarse mediante:

$$TRF(E) = \frac{C_K^2}{C_K - \frac{\sigma_K^2}{T^2}} = \frac{3/2}{1 - \frac{2}{3}A_K(E)} \quad (5.9)$$

Cuando el sistema es libre de expandirse, sin embargo, la situación es muy diferente. Un escenario de equilibrio *local* reemplaza al de equilibrio *global* inicial y se tiene que:

$$E = V + K_{int} + K_{col}$$

donde K_{col} y K_{int} son las energías cinéticas asociadas al movimiento colectivo y térmico respectivamente. Con la aparición de un término cinético de carácter no térmico ya no se cumple que $\langle K \rangle \propto T$, por lo que ahora no es posible estimar la TRF del sistema utilizando una expresión análoga a la 5.9.

A pesar de esto, en este contexto aún podemos extraer información valiosa sobre lo que le ocurre al sistema estudiando el comportamiento de $A_K(E)$ en función del tiempo (ver Figura 5.6). En los paneles superiores de la figura mostramos el comportamiento de $A_K(E, t)$ para evoluciones libres de tres energías ($E = -1.7\epsilon, 0.1\epsilon$ y 0.8ϵ) obtenidas a partir de un sistema confinado a densidad $\rho = \rho_C = 0.60\sigma^{-3}$. Incluimos en las mismas figuras el comportamiento del tamaño normalizado del mayor fragmento MST para tener una idea acerca de la situación del sistema en el espacio configuracional (i.e. generación de superficies). En los paneles medios de la Figura 5.6 mostramos las correspondientes evoluciones de $\langle K \rangle$ y σ_K . Finalmente, en los paneles inferiores incluimos espectros de fragmentos MST calculados a diferentes tiempos.

$A_K(E, t)$ crece muy rápidamente hasta alcanzar un valor asintótico de saturación. Dicho valor depende de la energía del sistema y caracteriza al número de posibles maneras que tiene el sistema para fragmentarse. En otras

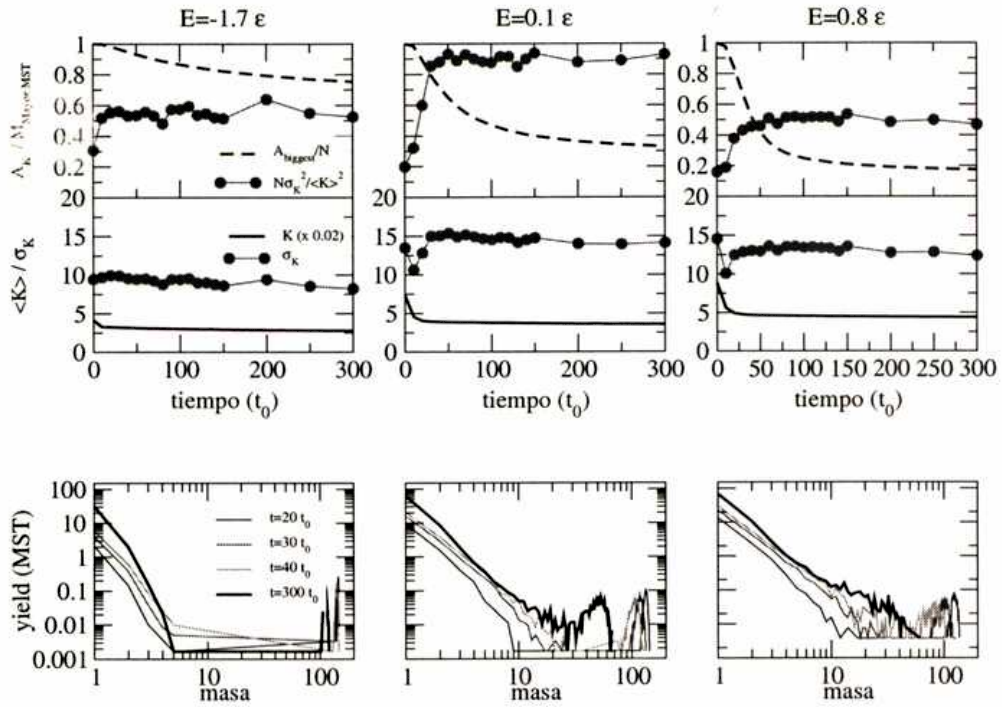


Figura 5.6: Paneles superiores: $A_K(t)$ (círculos) y tamaño normalizado del mayor fragmento MST (línea rayada) en función del tiempo. Paneles medios: Energía cinética del sistema (línea sólida) y su dispersión cuadrática media (círculos) como función del tiempo. Paneles inferiores: Espectro de fragmentos MST calculados a tiempos $t = 20, 30, 40$ y $300t_0$. Cálculos realizados para un sistema de densidad $\rho = 0.6\sigma^{-3}$ a tres energías diferentes: $E = -1.7\epsilon, 0.1\epsilon$ y 0.8ϵ se muestran en la primera, segunda y tercer columna respectivamente.

palabras, debido a que nuestras simulaciones de dinámica molecular conservan la energía total, grandes fluctuaciones, evento a evento, en la energía cinética se relacionan directamente con grandes fluctuaciones, evento a evento, en las correspondientes energías potenciales. Teniendo en cuenta que estas últimas están estrechamente ligadas a las superficies que se generan en el sistema, es de esperar que en definitiva se establezca una relación entre las fluctuaciones de K , evento a evento, y las respectivas distribuciones de fragmentos asintóticos. Vemos además que $A_K(E = 0.1\epsilon) > A_K(E = -0.7\epsilon) \sim A_K(E = 0.8\epsilon)$. Esto indica que el conjunto de modos de decaimiento (i.e. patrones de fragmentación) que puede seleccionar el sistema a $E = 0.1\epsilon$ es mucho más rico y variado que para las otras energías consideradas. Esta observación nos permite comenzar a entender de manera natural la relación que existe entre la ocurrencia de grandes fluctuaciones de K y la aparición de espectros de masa asintóticos libres de escala, esto es: espectros descritos por leyes de potencias, donde se presentan fragmentos de cualquier tamaño. En efecto, este tipo de espectros aparece cuando se promedian eventos con muy diferentes canales de desexcitación, que incluyen tanto particiones con grandes gotas residuales como así también particiones de alta multiplicidad con aparición de IMFs.

En los paneles intermedios de la Figura 5.6 mostramos la evolución diferenciada de $\langle K \rangle$ y σ_K . Es posible ver que ambas cantidades alcanzan sus respectivos valores de saturación aproximadamente al mismo tiempo (hacemos notar además que el mayor valor de σ_K corresponde al sistema de energía $E = 0.1\epsilon$). Para el caso de menor energía (panel izquierdo) σ_K no cambia en el tiempo. Esto es de esperar ya que para una energía tan baja el sistema sólo evapora algunos fragmentos livianos en una etapa temprana y luego permanece como una gran gota.

Para casos más energéticos, la primer caída de σ_K se puede relacionar con la dinámica de pre-equilibrio que involucra el desarrollo de movimiento colectivo (flujo expansivo) y emisión temprana de fragmentos livianos y que es común a todos los eventos del ensamble. Un poco más tarde, sobreviene un proceso de generación de superficies internas que da lugar a un conjunto muy grande de posibles canales de decaimiento (una apertura del espacio de fases) y que es responsable del incremento de σ_K .

Es interesante destacar que el tiempo en el cual $A_K(E, t)$ alcanza su valor de saturación señala el momento en el cual, en promedio, tiene lugar la partición del sistema en fragmentos para eventos de una misma energía (i.e. es cuando el sistema “elige” un dado canal de desexcitación). En relación con esto, en los paneles inferiores de la Figura 5.6, mostramos espectros de masas de fragmentos MST calculados a diferentes tiempos. Es fácil ver que para $t \sim 50t_0$ los fragmentos asintóticos de masas intermedias (IMFs, $4 \leq s \leq 10$) ya han sido producidos en su gran mayoría. Es decir, ya se han desarrollado en el sistema las superficies internas más relevantes. Para tiempos más largos sólo resta la eventual desexcitación del mayor fragmento residual a través de la evaporación de partículas livianas (ver espectros).

Finalmente, en el panel superior de la Figura 5.7, mostramos el comportamiento asintótico de $A_K(E)$. En la misma figura (panel inferior) incluimos

el respectivo cálculo realizado para sistemas confinados a los efectos de poder compararlos. Podemos ver que sin importar la densidad inicial, un rango de energías puede reconocerse para el cual se produce un incremento notorio en las fluctuaciones de energía cinética en el sistema. Como ya mencionamos, este incremento en fluctuaciones relativas se relaciona con la aparición de superficies producto del proceso expansivo de nuestro sistema finito y con el número de las distintas posibles maneras de particionar al sistema en fragmentos.

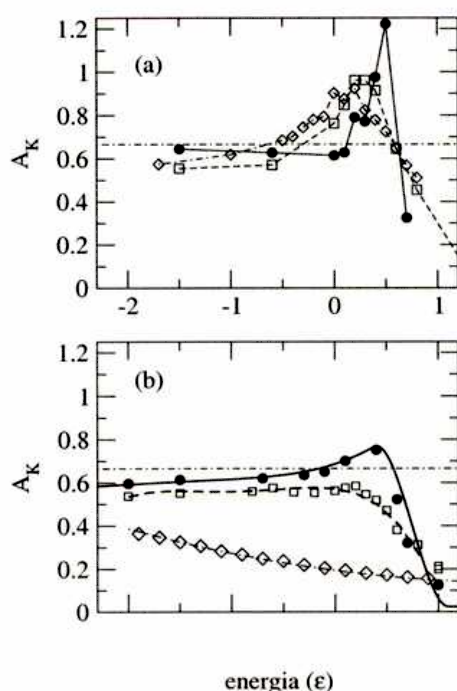


Figura 5.7: Panel superior: $A(K)$ calculado para configuraciones asintóticas correspondientes a diferentes densidades de partida: $\rho = 0.026\sigma^{-3}$, $0.1\sigma^{-3}$ y $0.6\sigma^{-3}$ (círculos, cuadrados y diamantes). Panel inferior: misma cantidad calculada para estados confinados.

Utilizando las mismas técnicas descritas en el capítulo anterior (Sección 4.3.3), estudiamos cuantitativamente la aparición de espectros asintóticos libres de escala. Para ello analizamos para qué energías, E^* , las distribuciones de fragmentos asintóticos eran mejor ajustadas por una ley de potencias. Encontramos que E^* resulta prácticamente independiente de la densidad inicial del sistema, y toma un valor $E^* \sim 0.4\epsilon$, en concordancia con los valores de energía que exhiben grandes fluctuaciones de energía cinética (Figura 5.7). En la Tabla 5.1 resumimos la información relevante de este cálculo. Es interesante notar que sólo para la densidad $\rho = \rho_C = 0.6\sigma^{-3}$, para la cuál el sistema confinado presentaba una transición continua en el espacio de fases, obtenemos un valor del exponente τ compatible con comportamiento crítico.

5.4 Conclusiones

En este capítulo analizamos las diferencias que se presentan en la descripción del proceso de fragmentación de un sistema finito que es libre de expandirse y la que tiene lugar en un sistema finito confinado. Las principales discrepancias

Densidad ρ	Sistema Confinado		Sistema No Confinado	
	E^*	τ	E^*	τ
A-0.026	0.50 ± 0.05	3.33 ± 0.12	0.5 ± 0.1	3.50
B-0.100	0.13 ± 0.07	2.17 ± 0.04	0.3 ± 0.1	3.12
C-0.600	-0.13 ± 0.07	2.11 ± 0.02	0.5 ± 0.1	2.11

Tabla 5.1: Energías, E^* , para las cuales los respectivos espectros de masa, $n(s)$, son mejor ajustados por leyes de potencias $n(s) \propto s^{-\tau}$.

tienen su origen básicamente en dos factores:

a) En el caso confinado la presencia de paredes provoca una re-inyección de partículas hacia el interior del sistema por lo que el régimen de colisiones y, por lo tanto, la estructura de las correlaciones que se establecen en el espacio de fases entre las partículas es cualitativamente distinta en ambos escenarios. En particular, en el caso no-confinado las particiones ECRA alcanzan la estabilidad microscópica y posteriormente se convierten en fragmentos asintóticos, bien definidos en el espacio configuracional (Figura 5.1).

b) Para el sistema no confinado, la posibilidad de desarrollar un modo colectivo de expansión provee un mecanismo de ‘enfriamiento’ que no está presente en el caso confinado. Como consecuencia de esto la curva calórica del sistema libre de expandirse carece de una ‘rama vapor’ (figura 5.3).

Encontramos además que podemos obtener mucha información analizando el comportamiento de las fluctuaciones de la energía cinética del sistema. Tanto en el caso confinado como en el no-confinado la presencia de fluctuaciones anormalmente grandes de K (ver Sección 3.2.2) se pueden relacionar con un aumento en el número de posibles maneras que tiene el sistema de generar superficies internas bien definidas en el espacio configuracional.

Para el caso confinado sólo es posible detectar grandes fluctuaciones de K en situaciones de alta dilución. Sin embargo, para sistemas que fragmentan sin confinamiento observamos que para todas las condiciones iniciales consideradas ($0.026\sigma^{-3} \leq \rho \leq 0.6\sigma^{-3}$) existe una ventana de energías totales para las cuales $K(t \rightarrow \infty)$ fluctúa considerablemente evento a evento (Figura 5.7). Justamente para estas energías es donde se presentan espectros de fragmentos asintóticos que mejor ajustan una dependencia del tipo ley de potencias. Notamos finalmente que sólo para eventos de densidad inicial $\rho = \rho_C$ [para esta densidad el sistema confinado presentaba una transición de fase de segundo orden en el espacio de fases (ver Sección 4.4)] encontramos un valor de τ compatible con una transición continua.

Capítulo 6

Sistemas Excitados por medio de Colisiones

6.1 Introducción

En los dos capítulos precedentes calculamos curvas calóricas (CC) a partir de estudios de dinámica molecular enfocados en sistemas clásicos que evolucionaban dentro de un contenedor (Cap.4) o eran libres de expandirse (Cap.5). Independientemente de sus diferencias, vimos que en ambos casos fue posible extraer información acerca de la CC de los sistemas finitos involucrados. Sin embargo, comprobamos que las condiciones de contorno bajo las cuales se produce la fragmentación (i.e. si el sistema está confinado o es libre de expandirse) juegan un rol fundamental en el proceso.

Motivados por esta observación, el punto que investigaremos en el presente capítulo es cómo afecta el cálculo de la curva calórica un tercer escenario de fragmentación (mucho más relevante desde la perspectiva experimental): el de las colisiones entre un ‘núcleo proyectil’ y un ‘núcleo blanco’. En otras palabras trataremos de responder la siguiente pregunta: ¿es posible extraer la curva calórica de un sistema a partir de colisiones, es decir realizando una inyección no isotrópica de energía de excitación en el sistema?

Esta pregunta es en verdad pertinente ya que, aunque mucho es lo que se ha avanzado en el estudio de las propiedades de sistemas nucleares por medio de colisiones de iones pesados, los procedimientos experimentales utilizados presentan varias dificultades. Como explican Pochodzalla y Trautmann en la Ref. [102], existen complicaciones, por ejemplo, relacionadas con la reconstrucción de la energía efectivamente depositada en el sistema a partir del canal de salida, con el tamaño variable del sistema excitado producido en la reacción [103] y con la existencia de cadenas de desexcitación secundarias [104] entre otras consideraciones (de hecho, ya vimos en la Sección 3.2.2 como diferentes “termómetros” conducen en principio a CC contradictorias).

Para llevar a cabo nuestro estudio discutiremos primero cómo estimar la fracción de la energía del proyectil que efectivamente actúa como energía de

excitación para el sistema. Deberemos para eso cuantificar los efectos de la emisión de pre-equilibrio que sobreviene en los primeros instantes de la colisión. En segundo lugar determinaremos la temperatura del sistema al tiempo de fragmentación. Finalmente, una vez conocidas la temperatura y la energía de excitación, calcularemos la curva calórica del sistema.

6.2 Modelo

Para estudiar la dinámica de formación de fragmentos en procesos colisionales utilizamos técnicas de dinámica molecular clásica. En particular trabajamos sobre un sistema bidimensional compuesto por partículas clásicas que interactúan a través de un potencial Lennard-Jones (ver Sección 4.1.1 para más detalles acerca del potencial de interacción).

Realizamos experimentos numéricos que consistieron en simulaciones de colisiones centrales (parámetro de impacto $b = 0$) entre un proyectil, compuesto por tres partículas, y un blanco de 100 componentes que inicialmente se encuentra en su 'estado fundamental', $\epsilon_0 \sim -2.8\epsilon$. Para cada evento elegimos la orientación relativa entre el proyectil y blanco de manera aleatoria y lanzamos el primero hacia el segundo. Repetimos este procedimiento para 200 eventos por cada energía considerada. Utilizamos energías cinéticas del proyectil en un rango de $E_{beam} = 18\epsilon$ hasta 2520ϵ en el sistema de referencia solidario al centro de masa del sistema. De este modo dispusimos de evoluciones dinámicas cualitativamente muy diferentes: desde eventos en los cuales el proyectil era adsorvido por la superficie de la gota-blanco, hasta eventos con espectro de masas asintóticas exponencialmente decrecientes (ver Figura 6.1).

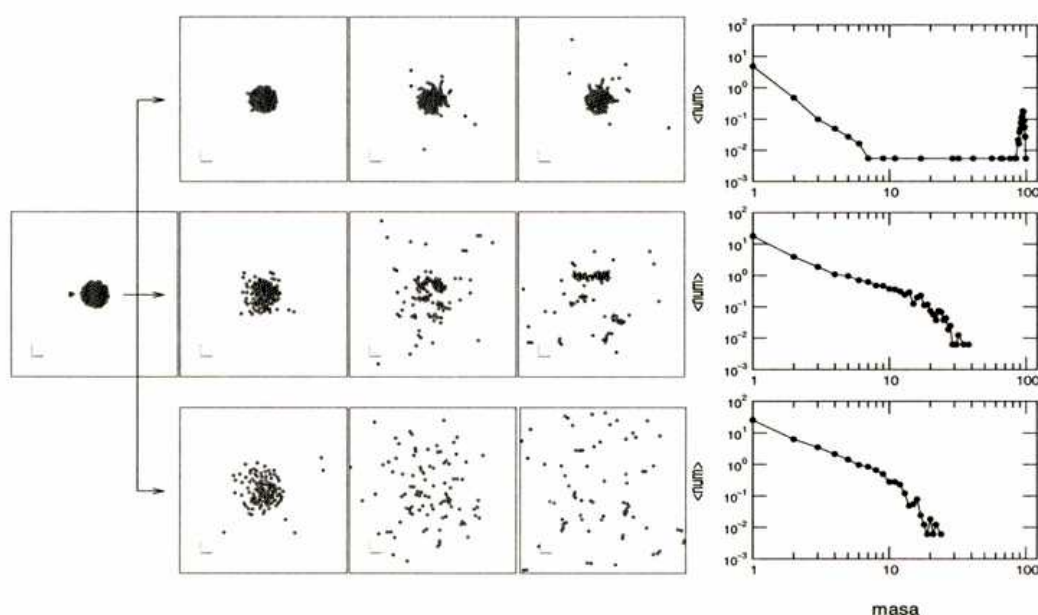


Figura 6.1: Espectros de masa asintóticos correspondientes a $E_{beam} = 280\epsilon$, 1120ϵ y 2520ϵ se muestran en los paneles superior, medio e inferior respectivamente.

6.3 Partición del Sistema en Fragmentos

A lo largo de éste Capítulo empleamos distintas definiciones de fragmentos para obtener información acerca de diferentes tipos de correlaciones microscópicas que se desarrollan en el sistema. Para ello usamos los algoritmos de reconocimiento de fragmentos MST, MSTe y ECRA, ya introducidos en la Sección 4.1.2 de esta tesis.

Para seguir avanzando recordemos que lo que nos interesa calcular es la curva calórica, definida como la relación funcional entre la energía de excitación y la temperatura del sistema *al tiempo de formación de fragmentos*. Por lo tanto, necesitamos estimar la energía de excitación y temperatura cuando efectivamente ocurre la fragmentación. Como ya vimos en el capítulo anterior podemos definir al tiempo de formación de fragmentos τ_{ff} como el tiempo para el cual se estabiliza la partición del sistema en fragmentos ECRA. La cuantificación de este concepto la llevamos a cabo investigando el comportamiento de lo que denominamos: *coeficientes de persistencia*. Son tres: la persistencia diferencial P^{dt} , la persistencia directa P^+ y la persistencia inversa P^- , descriptos en detalle en el Apéndice D.

Muy brevemente: el valor del coeficiente $P^{dt}(t)$ cuantifica el hecho de que partículas que en un tiempo t aparecen contenidas en el mismo fragmento, permanezcan unidas a tiempo $t + dt$. Un valor bajo de P^{dt} señala que entre los tiempos t y $t + dt$ tuvieron lugar muchos reacomodamientos microscópicos en la estructura de fragmentos del sistema. Nos brinda entonces una idea acerca de la *actividad* de la partición analizada y puede, por lo tanto, emplearse para definir cuantitativamente un tiempo de formación de fragmentos τ_{ff} , una vez que cierto grado de estabilización se halla alcanzado [es decir, se obtengan P^{dt} altos (ver Apéndice D)]. Por otra parte, $P^+(t)$ determina si las partículas que están juntas en un tiempo t permanecen juntas a tiempos asintóticos. De manera similar, $P^-(t)$ mide el valor recíproco, i.e. el grado con el cual la partición asintótica es contenida por la partición calculada a tiempo t . En consecuencia, podemos utilizar estas dos últimas cantidades, por ejemplo, para analizar cómo la composición microscópica de la partición más ligada del sistema (i.e. la partición ECRA) evoluciona hacia su estado asintótico.

6.4 Evolución Dinámica

Armadados con las herramientas de cálculo ya presentadas (simulaciones de dinámica molecular, algoritmos de reconocimiento de fragmentos MST, MSTe y ECRA, y los coeficientes de persistencia: P^+ , P^- y P^{dt}) estudiamos la evolución de las colisiones generadas como describimos en la Sección 6.2.

Dos etapas bien diferenciadas pueden reconocerse. Una inicial, altamente colisional que tiene lugar cuando el proyectil impacta sobre la superficie del blanco y, posteriormente, una desordenada caracterizada por un patrón caótico de colisiones que distribuyen la energía disponible entre todas las partículas del

blanco. El primer régimen de colisiones *ordenadas* genera una onda de choque responsable de la rápida emisión de partículas y fragmentos livianos desde la superficie. En la medida que esta onda viaja a través del blanco, produce fluctuaciones de densidad y ‘fracturas’ internas mientras transfiere momento induciendo colisiones *desordenadas* que termalizarán al sistema remanente.

Podemos entender mejor este mecanismo de transferencia si analizamos el comportamiento de un observable que denominamos ‘velocidad transferida media’ (MVT):

$$MVT_j(t) = \langle \sum_{i=0}^N |(\vec{v}_i(t+dt) - \vec{v}_i(t)) \cdot \hat{e}_j| \rangle_{\text{eventos}}$$

donde j denota las direcciones incidente ($\hat{x}$) y perpendicular ($\hat{y}$) y $dt = 0.25t_0$.

La Figura 6.2 muestra la evolución temporal de MVT_x y MVT_y para energías de proyectil de valores $E_{beam} = 280\epsilon$, 630ϵ , 1120ϵ y 1750ϵ en los paneles (a)-(d) respectivamente.

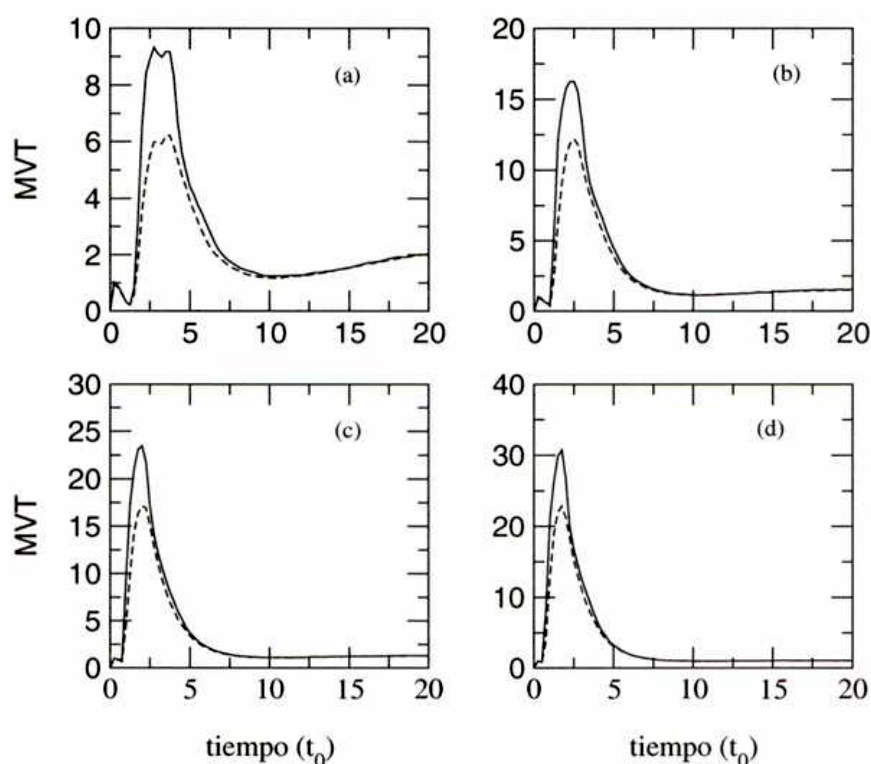


Figura 6.2: La velocidad media transferida en la dirección del proyectil, MVT_x (línea sólida) y en la dirección perpendicular, MVT_y (línea punteada), se muestran para colisiones con $E_{beam} = 280\epsilon$ (a), 630ϵ (b), 1120ϵ (c) y 1800ϵ (d).

Para todos los casos $MVT_x > MVT_y$ en la primera etapa de la colisión (recordemos que $\hat{x}$ es la dirección del proyectil). El máximo valor de MVT_x y MVT_y se alcanza simultáneamente a $2t_0 \lesssim t \lesssim 3t_0$, cuando el frente de la onda de choque alcanza la región media de la gota y más partículas participan del proceso de transferencia de momento. Para $4t_0 \sim t \lesssim 7t_0$, el frente ya ha atravesado la gota y encontramos que $MVT_x \sim MVT_y$ para todo el rango de energías considerado.

A partir de ese instante podemos decir que el sistema ha perdido la memoria del canal de entrada de la reacción. Las colisiones isotrópicas (*modo colisional desordenado*) que sobrevienen entonces son las responsables de la redistribución de momento entre las partículas que permanecieron hasta entonces ligadas al blanco. La energía asociada constituye la energía de excitación *efectiva* depositada en el sistema. Vale la pena destacar que el modo de colisión desordenado era el único modo presente en los estudios de sistemas isotrópicamente excitados, tales como los que mostramos en los dos capítulos precedentes (en el caso del sistema libre, coexistía con el modo 'ordenado' de expansión).

Podemos utilizar la información que provee el algoritmo de reconocimiento MSTE para entender un poco mejor la dinámica de nuestro sistema. Para ello en la Figura 6.3 mostramos la evolución del tamaño del mayor fragmento MSTE y de la multiplicidad y coeficientes de persistencias asociados a dichas particiones.

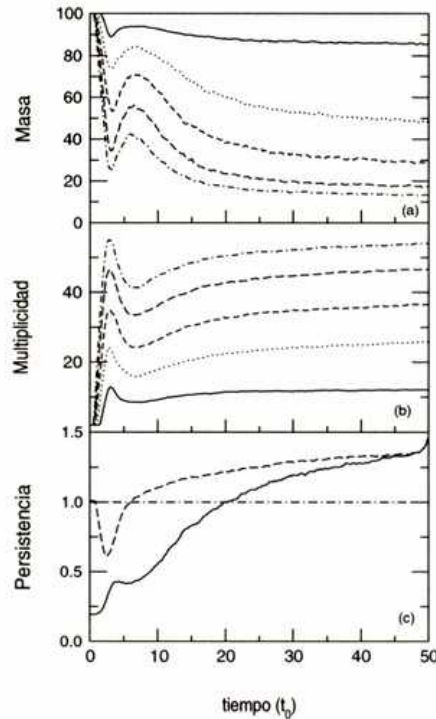


Figura 6.3: Masa del mayor fragmento MSTE (a) y multiplicidad de la partición MSTE (b) para $E_{beam} = 280\epsilon$ (línea sólida), 650ϵ (línea punteada), 1120ϵ (línea rayada) y 1800ϵ (línea punteada-rayada). En el panel (c): coeficientes de persistencia directa (P^+ , línea sólida) e inversa (P^- , línea rayada) para particiones MSTE calculadas sobre experimentos de $E_{beam} = 1120\epsilon$

Observamos que la masa del mayor fragmento primero disminuye, luego aumenta hasta un máximo para finalmente decrecer de manera monótona. Esto se debe a que, debido a la violencia de la colisión inicial, algunas partículas adquieren mucha energía cinética, lo que les impide ser parte del mayor fragmento MSTE, a pesar de estar configuracionalmente muy cerca o aún dentro del mismo. Debido a esto se reduce la masa de dicho cluster en la etapa temprana de la evolución ($t \sim 3t_0$) incrementándose a su vez la multiplicidad

de la partición. Esta tendencia se mantiene hasta que la disminución del momento relativo medio de las partículas que se encuentran configuracionalmente próximas permite que se ‘reconecten’ unas con otras según el criterio del algoritmo. De esta forma, luego de la reducción inicial del tamaño del mayor fragmento tiene lugar un proceso de coalescencia que vuelve a incrementar la masa del mismo, hasta que alcanza un máximo para $t \sim 7t_0$. Este tiempo, que denominamos *tiempo de deposición*, t_d , marca la finalización del proceso de deposición de la energía inicial.

Los coeficientes de persistencia (Ec.D.3 del Apéndice D) pueden utilizarse a su vez para analizar cómo la composición microscópica de los fragmentos MSTE evoluciona hasta su forma asintótica. En la Figura 6.3(c) mostramos la evolución temporal de $P^+[x(t)]$ y $P^-[x(t)]$ calculados usando particiones MSTE sobre eventos de $E_{beam} = 1120\epsilon$, asumiendo $t_\infty = 50t_0$. El coeficiente de persistencia inversa (línea a rayas) muestra una abrupta disminución inicial que corresponde a una etapa de producción de fragmentos, seguida por un subsecuente incremento debido a una dinámica de ‘reabsorción’ que subsiste hasta t_d . (Se debe recordar que valores de P^- altos indican que más partículas que pertenecen a un dado cluster asintótico, están juntas a tiempo t). De manera consistente, el coeficiente P^+ toma un valor cuasi-constante durante esta etapa de reabsorción, seguido por un incremento monótono debido a la evolución de tipo evaporativa que sufren, a posteriori, los fragmentos MSTE. Vale la pena mencionar que durante toda esta etapa de la evolución el algoritmo MST identifica una gran gota de aproximadamente el 80% – 90% de la masa del sistema.

En definitiva, podemos reconocer una etapa inicial (que dura hasta $t \sim 3t_0$) caracterizada por la existencia de una onda de choque y un modo colisional ‘ordenado’ (con $MVT_x > MVT_y$), que expulsa partículas ligeras de la superficie, reduce el tamaño del mayor fragmento MSTE e incrementa la multiplicidad de ese tipo de fragmentos (P^- disminuye). Para $t \sim 4 - 7t_0$, la onda de choque ya atravesó la gota-blanco, se pierde memoria acerca del canal de entrada $M_x \sim M_y$, y aparece una dinámica de coalescencia que agranda al mayor cluster MSTE y reduce la multiplicidad de fragmentos. Luego de esta etapa sobreviene finalmente una dinámica de ‘tipo evaporativa’ sugerida por el comportamiento creciente de P^+ .

6.4.1 Cálculo de la Energía de Excitación

Tal como sucede en el ámbito experimental [105], la presencia de partículas emitidas prontamente (PEPs) hace imposible conocer *a priori* qué proporción de la energía del proyectil es efectivamente transferida como energía de excitación al blanco. Esta complicación, ausente en los cálculos que presentamos en los capítulos precedentes, demanda el uso de una definición de la energía de excitación que necesariamente va a depender de las propiedades de la emisión de PEPs.

Podemos definir a las PEPs como aquellos clusters livianos ($masa \leq 4$) detectados por el algoritmo MSTE al tiempo t_d , que permanecen libres (no son

reabsorvidos por fragmentos no-PEPs) para cualquier tiempo posterior. Podemos darnos una idea de las propiedades de estas partículas observando la Figura 6.4. En la misma incluimos la distribución de velocidades de monómeros producidos en colisiones con $E_{beam} = 280\epsilon$ y 2520ϵ . Los histogramas muestran la distribución asintótica de velocidades para todos los monómeros (grisado) y para los monómeros PEPs (transparente). Es evidente que éstos conforman la mayoría y que los mismos son responsables de la gran asimetría de la distribución observada para ambas energías (característica de emisión de pre-equilibrio).

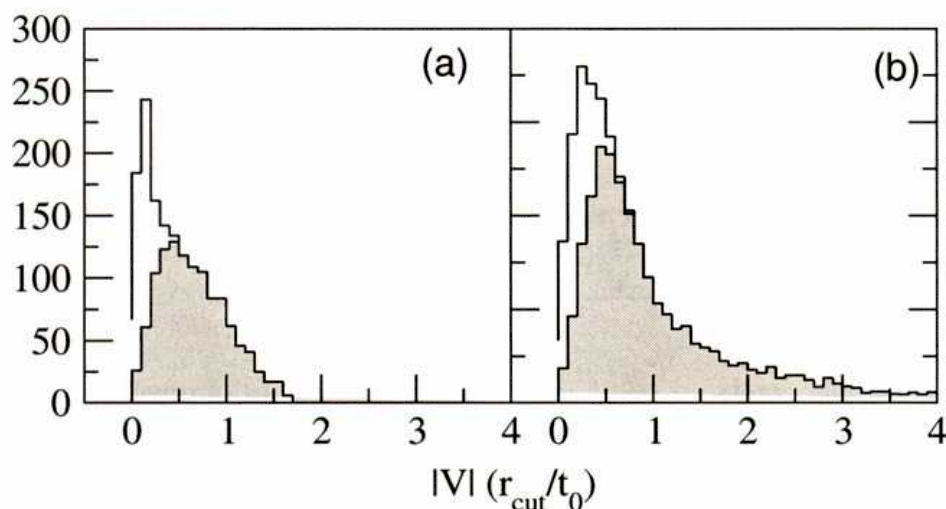


Figura 6.4: Histogramas del módulo de la velocidad asintótica de monómeros, calculados para $E_{beam} = 280\epsilon$, panel (a), y 2520ϵ , panel (b). El histograma vacío corresponde a la producción completa de monómeros, mientras que el grisado considera sólo los producidos en la etapa temprana de la evolución.

Definidas las PEPs, podemos estimar su energía cinética para determinar cuál es la energía que en definitiva queda en el sistema. Las Figuras 6.5(a) y (b) muestran la energía asociada a las PEPs y el número de las mismas como función de la energía del proyectil. En la Figura 6.5(c) calculamos la energía que queda en el sistema a tiempo t_d , mostrando la energía de excitación del blanco, $E^* = E_{beam} - E_{PEPs}$, como función de E_{beam} . Todas estas figuras indican que la fracción de energía que ‘abandona’ al sistema como consecuencia de la emisión temprana es considerable. Más aún, es posible apreciar que la energía de excitación presenta un comportamiento de saturación que indica que existe un límite en la cantidad de energía que puede ser transferida mediante colisiones, efecto que hasta el momento (en los capítulos precedentes) no se nos había presentado.

6.4.2 Tiempo de Formación de Fragmentos

Para tiempos posteriores al tiempo de deposición t_d , la energía cinética presente en el sistema ya se encuentra distribuida de manera más o menos homogénea entre las partículas de lo que queda del blanco. Las colisiones comienzan a desarrollar correlaciones de densidad en el espacio de fases, a la vez que ge-

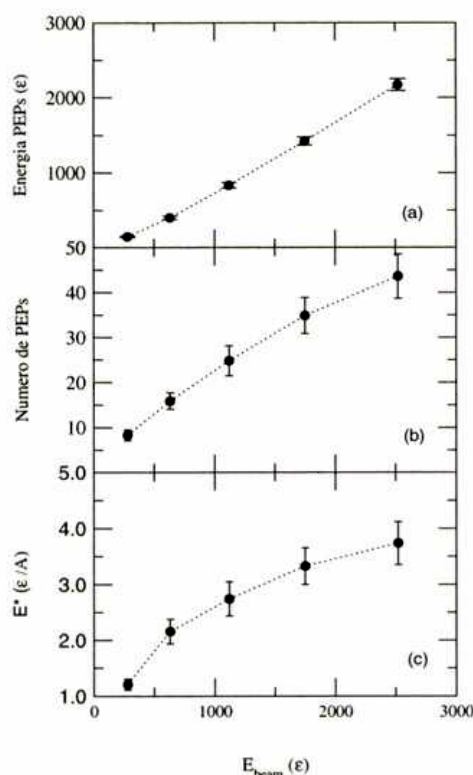


Figura 6.5: Panel (a): energía media transportada por las partículas emitidas en la etapa temprana de la colisión. Panel (b): número medio de PEPs producidos. Panel (c): energía de excitación que permanece en el sistema residual en función de la energía del proyectil.

neran un modo colectivo de expansión. Eventualmente dicho flujo expansivo provocará que las fluctuaciones de densidad se conviertan en fragmentos bien definidos en el espacio configuracional y sean reconocibles por el algoritmo MST.

Sin embargo, la CC debe reflejar el estado del sistema en el momento en que queda definida la forma en que se particionará el sistema. Consistentemente, elegiremos como el tiempo de formación de fragmentos, t_{ff} , al instante asociado con la estabilización de las particiones ECRA.

En la Figura 6.6 mostramos el comportamiento del coeficiente de persistencia diferencial P^{dt} , calculado sobre particiones ECRA para experimentos con $E_{beam} = 630\epsilon_0, 1120\epsilon_0, 1750\epsilon_0$ y $2520\epsilon_0$ (círculos, cuadrados, diamantes y triángulos respectivamente). Tomamos $dt = 2t_0$ y consideramos masas $m > 3$.

Como P^{dt} es una cantidad normalizada (ver Ecuación D.3) toma el valor unidad cuando la composición microscópica de los fragmentos de la partición a tiempo t difiere de la calculada a $t + dt$ sólo en un proceso de evaporación de una partícula. Definimos en consecuencia a t_{ff} como el tiempo para el cual $P^{dt} = 1$. Los resultados que obtuvimos fueron $\tau_{ff} = 20t_0, 15t_0, 12t_0$ y $10t_0$, para las energías $E_{beam} = 630\epsilon_0, 1120\epsilon_0, 1750\epsilon_0$ y $2520\epsilon_0$.

La evolución temporal de la partición media ECRA, es decir de la fluctuación de densidad más ligada, puede analizarse a través del comportamiento de

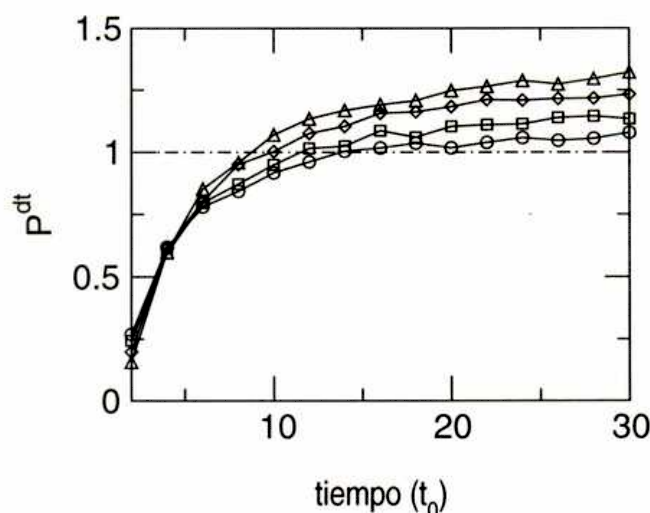


Figura 6.6: Dependencia temporal del coeficiente de persistencia diferencial ($dt = 2t_0$) calculado para particiones ECRA en colisiones con $E_{beam} = 630e$ (círculos), $1120e$ (cuadrados), $1750e$ (diamantes) y $2520e$ (triángulos).

P^+ y P^- , tal como lo hicimos en la Sección 6.4 con particiones MSTE. En la Figura 6.7 mostramos el resultado de este análisis efectuado para las mismas E_{beam} que en la Fig.6.6, utilizando $t_\infty = 50t_0$. El hecho que para todos los casos P^+ alcance la referencia antes que P^- refleja una inicial sobreproducción de fragmentos ECRA, debido al mecanismo de inyección de energía al sistema. Sin embargo, una vez finalizado el pre-equilibrio, la dinámica subsecuente ‘suaviza’ las fluctuaciones de densidad en el espacio de fases y se observa un comportamiento de coalescencia para los clusters ECRA.

Es importante notar que P^+ y P^- indican cómo evoluciona la partición ECRA hacia su forma asintótica. En todos los casos se cumple que esas dos cantidades alcanzan el nivel de referencia para un tiempo aproximadamente igual a τ_{ff} , lo que refuerza la idea que éste último es una estimación adecuada del tiempo de formación de fragmentos.

6.4.3 Comparación con Sistemas Isotrópicamente Excitados

Resulta provechoso en este punto establecer una comparación de lo encontrado hasta ahora para nuestro sistema y lo que sucede en sistemas de composición similar, pero excitados de manera isotrópica (por ejemplo, mediante ‘explosiones’). Para simular este segundo tipo de eventos, realizamos simulaciones 2D de la dinámica de una gota excitada no confinada de 100 partículas Lennard-Jones. Partimos de un estado configuracional fundamental, con velocidades aleatorias asignadas según una distribución de Maxwell-Boltzmann, de varianza compatible con una dada energía de excitación.

En la Figura 6.8 mostramos espectros de masa asintóticos, obtenidos para colisiones y explosiones. Para establecer una correcta comparación, utilizamos como energías de excitación del sistema que explota idénticos valores que para las E^* del sistema remanente después de la colisión. En particular, incluimos

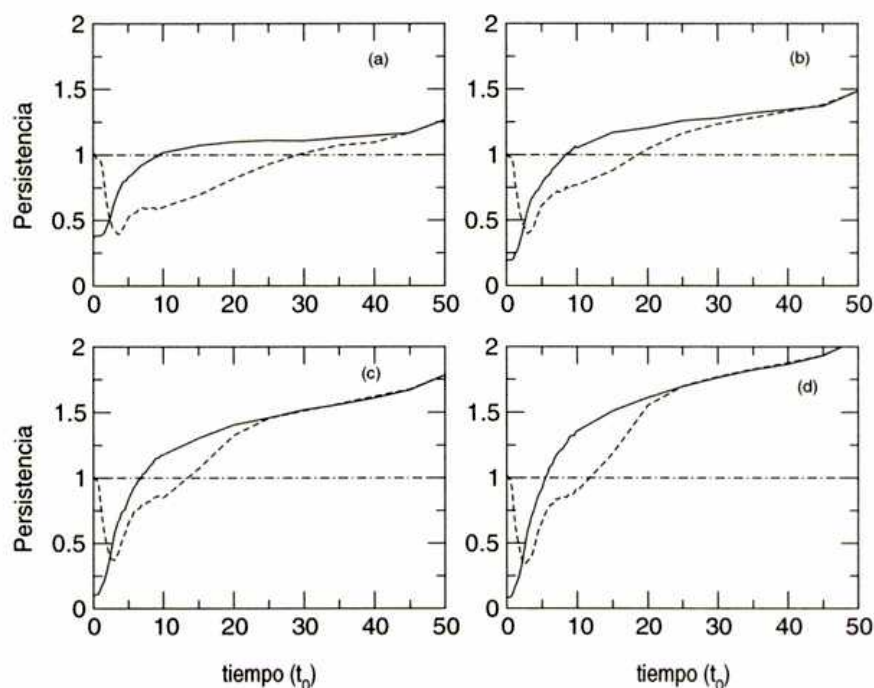


Figura 6.7: Coeficientes de persistencia directa (línea sólida) e inversa (línea rayada) calculados para particiones ECRA en colisiones con $E_{beam} = 630\epsilon$ (a), 1120ϵ (b), 1750ϵ (c) y 2520ϵ (d).

en los paneles superior, medio e inferior eventos con $E^* = 1.3\epsilon, 2.8\epsilon$ y 3.4ϵ respectivamente.

Graficamos las distribuciones de masa como función de la masa reducida m' , definida como $m' = m / \langle m_{max} \rangle$ para poder establecer una comparación con significado físico. Podemos observar un acuerdo muy bueno entre las distribuciones, lo que da sustento a nuestro procedimiento para estimar la energía de excitación en experimentos colisionales.

La Figura 6.9 muestra la determinación de τ_{ff} para los experimentos de explosiones. Consideramos las siguientes energías de excitación por partícula: $E^* = 2.2\epsilon, 2.8\epsilon, 3.4\epsilon$ y 3.8ϵ , de manera de poder establecer una comparación con los experimentos colisionales considerados [ver Figura 6.5(c)].

Los tiempos de formación de fragmentos respectivos, ordenados según excitaciones crecientes, fueron $\tau_{ff} = 20t_0, 12t_0, 9t_0$ y $8t_0$, y resultan del mismo orden que los obtenidos para colisiones.

Finalmente, en la Figura 6.10, mostramos el comportamiento de P^- y P^+ como función del tiempo. Podemos ver diferencias cualitativas con lo reportado para colisiones en la Figura 6.7. En las explosiones $P^+ < P^-$ para todo tiempo. Más aún, como P^+ cruza la referencia después que P^- , podemos inferir la presencia de un comportamiento de tipo evaporativo en los clusters ECRA en la etapa temprana de este tipo de evoluciones. Esto no ocurría con las colisiones.

Podemos entonces construir la siguiente imagen del proceso. Para el caso de explosiones, las correlaciones en el espacio de fase deben construirse desde cero. Así mismo, el flujo expansivo que surge como consecuencia del

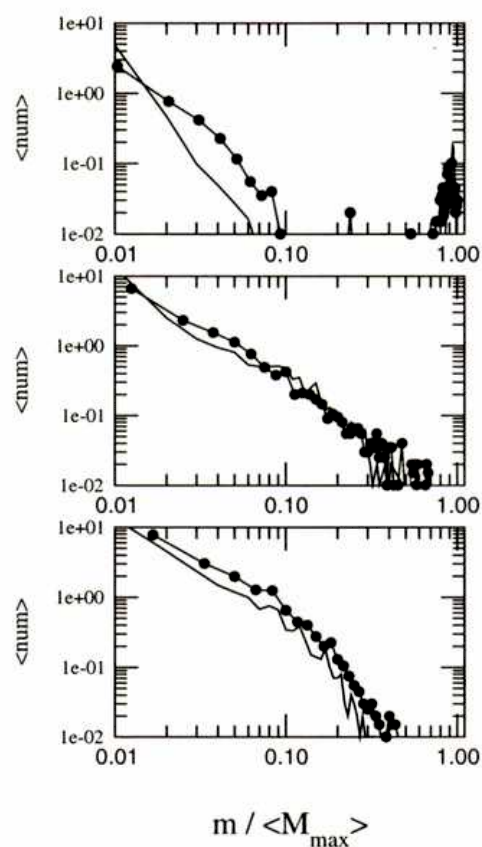


Figura 6.8: Comparación de espectros de masa asintóticos obtenidos para colisiones (círculos) y explosiones (líneas) de igual energía de excitación. $E^* = 1.3\epsilon, 2.8\epsilon$ y 3.4ϵ en los paneles superior, medio e inferior respectivamente. Ver texto para detalles.

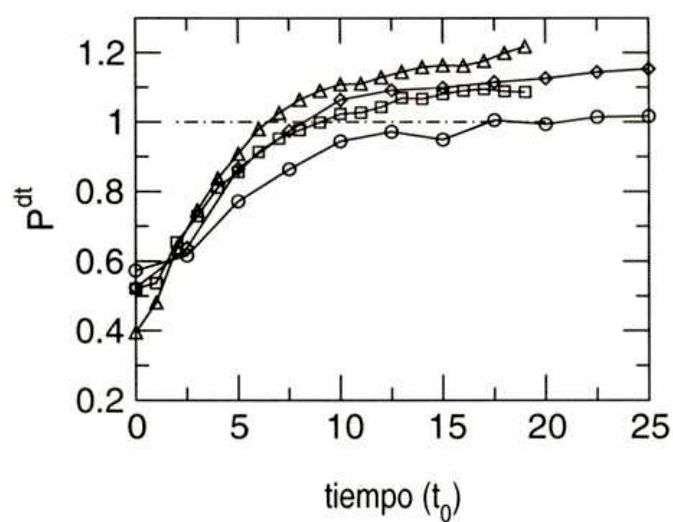


Figura 6.9: Dependencia temporal de la persistencia diferencial, $P^{dt=2t_0}$, calculada para particiones ECRA de sistemas uniformemente excitados con $E^* = 2.2\epsilon$ (círculos), 2.8ϵ (cuadrados), 3.4ϵ (diamantes) y 3.8ϵ (triángulos).

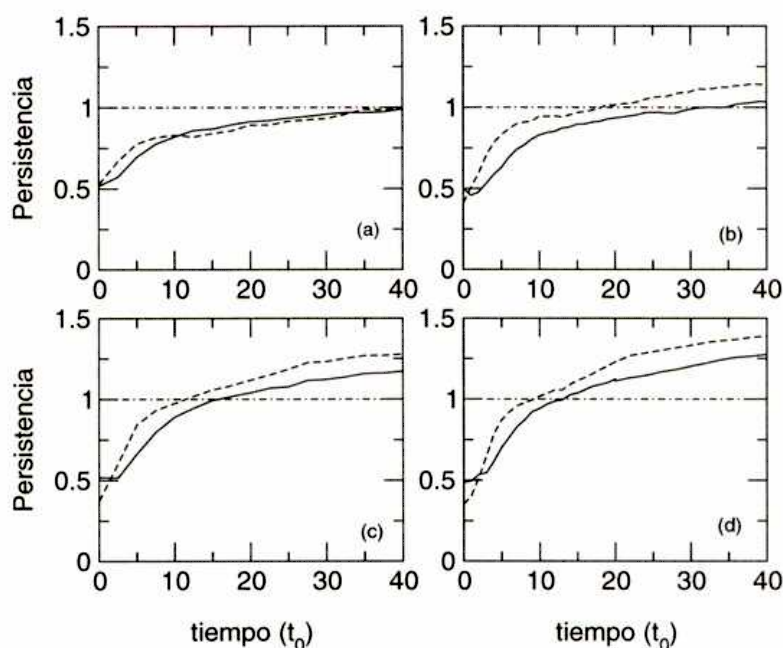


Figura 6.10: Coeficientes de persistencia directa (línea sólida) e inversa (línea rayada) calculados para particiones ECRA de eventos con excitación isotrópica. $E^* = 2.2\epsilon$ (a), 2.8ϵ (b), 3.4ϵ (c) y 3.8ϵ (d).

modo *desordenado* de colisiones, enfría rápidamente al sistema y estabiliza las fluctuaciones de densidad (esto es, los clusters ECRA). Los coeficientes de persistencia indican que esta dinámica es principalmente de carácter evaporativo.

Por otra parte, en colisiones, podemos reconocer dos etapas. Una, caracterizada por una alta transferencia de momento, con la presencia de una onda de choque que produce la emisión de cluster livianos de la superficie, a la vez que desarrolla superficies internas. La segunda etapa en cambio presenta un patrón de colisiones desordenado. El sistema todavía es denso, y sobreviene un proceso de coalescencia de estructuras ECRA, a la vez que se va gestando un movimiento colectivo radialmente expansivo.

Notamos además que aunque la dinámica microscópica de las particiones ECRA resultaron cualitativamente diferentes, los tiempos de formación de fragmentos τ_{ff} encontrados fueron similares para ambos tipos de excitaciones. Finalmente remarcamos que la identificación de etapas alcanzada en este trabajo es consistente con observaciones experimentales [105].

6.5 Estimación de Temperaturas

El siguiente paso para la construcción de la curva calórica es el cálculo de la temperatura del sistema a tiempo de fragmentación. Típicamente, a este tiempo, el sistema todavía es denso y su temperatura varía con la posición. Del mismo modo que en la Ref.[40] dos estimaciones alternativas pueden considerarse: la *temperatura local*, teniendo en cuenta las fluctuaciones de velocidad sobre una media local, y la *temperatura de fragmentos*, relacionada con las fluctuaciones de velocidad de las partículas alrededor de la velocidad media

de los fragmentos.

6.5.1 Temperatura Local

Para estimar la temperatura local, T_{loc} , consideramos una grilla cuadrada ubicada sobre la región de interés y procedimos a calcular las fluctuaciones locales de velocidad en cada celda. Es decir,

$$T_{loc}^i = \frac{1}{2} < (< v^2 >_i - < v >_i^2) >_{ev} \quad (6.1)$$

con v la velocidad de las partículas, $< \dots >_i$ el promedio sobre las partículas de la celda i , y $< \dots >_{ev}$, el promedio sobre eventos. Elegimos el tamaño de las celdas $l_{cell} = 3\sigma$ de manera de asegurar una población media aproximada de siete partículas para tiempos $t < 20t_0$. Para cuantificar la temperatura de las celdas centrales calculamos el promedio, $\bar{T}_{loc}(t)$, sobre aquellas celdas cuyos centros no estuviesen más alejados que una distancia 9σ respecto al centro de masa del sistema. Aproximadamente el 40% de las partículas permanecían en esa región para tiempos $t \leq 40t_0$ para los experimentos más energéticos.

En la Figura 6.11 podemos ver que el sistema se enfría rápidamente hasta una temperatura $\bar{T}_{loc} \sim 0.3\epsilon$ para $t \sim 15t_0$ independientemente de la energía considerada. Notamos además para $E_{beam} = 280\epsilon$ y 630ϵ un sobreenfriamiento. Esto se debe a que, para estos dos casos de colisiones poco energéticas, la expansión es lo suficientemente débil como para permitir que las interacciones atractivas produzcan un incremento temporario de densidad antes de que el sistema fragmente. Este efecto no se presenta para energías de proyectil mayores, para los cuales el movimiento de expansión es dominante.

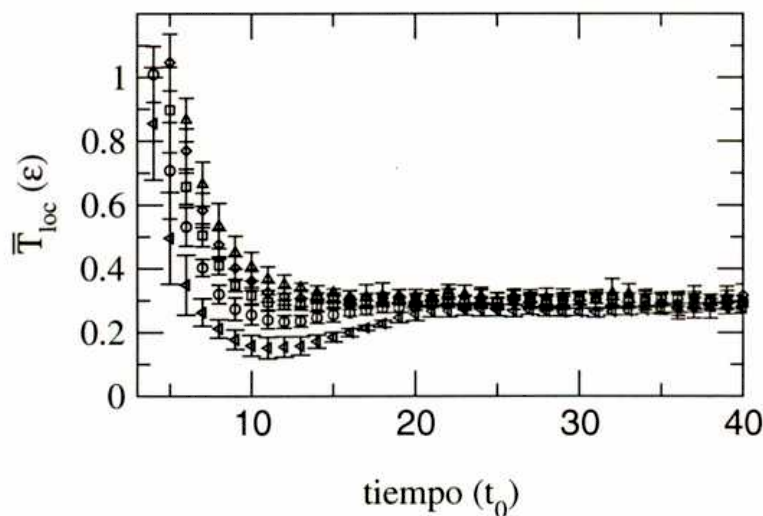


Figura 6.11: Temperatura local media, $\bar{T}_{loc}$, como función del tiempo, calculada para colisiones con $E_{beam} = 630\epsilon$ (círculos), 1120ϵ (cuadrados), 1750ϵ (diamantes) y 2520ϵ (triángulos).

6.5.2 Temperatura de Fragmentos

Podemos obtener una estimación de la temperatura de fragmentos del sistema considerando la energía cinética interna de los fragmentos ECRA. De esta manera, la temperatura del cluster C_i puede definirse como:

$$T_{C_i} = \frac{1}{n_i} \sum_{j \in C_i} K_j^{cm} \quad (6.2)$$

con n_i el número de partículas del fragmento C_i y K_j^{cm} la energía cinética de la partícula j medida desde el sistema de referencia del centro de masa del fragmento al que pertenece.

En las Figuras 6.12(a) y (b) mostramos la temperatura de clusters T_C calculada para el tiempo de formación de fragmentos τ_{ff} y para t_∞ para los casos $E_{beam} = 280\epsilon, 630\epsilon, 1120\epsilon, 1750\epsilon$ y 2520ϵ .

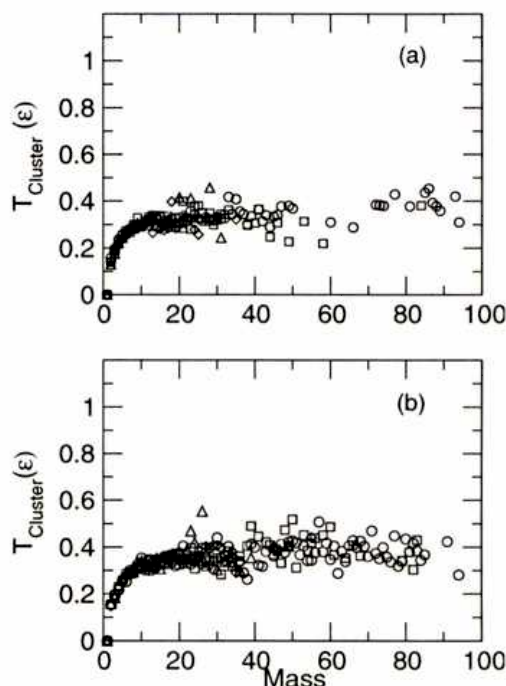


Figura 6.12: Temperatura de fragmentos como función de la masa calculada para fragmentos ECRA a tiempo $t = \tau_{ff}$ (a) y a tiempo asintótico (b), para colisiones con $E_{beam} = 630\epsilon$ (círculos), 1120ϵ (cuadrados), 1750ϵ (diamantes) y 2520ϵ (triángulos)

A partir de la dependencia de T_{C_i} con la masa definimos como temperatura del sistema, T_C , al promedio de T_{C_i} para fragmentos de masa $m \geq 20$.

Aunque el sistema es aún denso para $t \sim \tau_{ff}$ (el mayor fragmento MST compromete casi el $\sim 80\%$ de la masa total) las temperaturas calculadas para los clusters ECRA ya han alcanzado sus valores asintóticos que coinciden con los esperados a partir de la estimación de la temperatura local $\bar{T}_{loc}$. Este comportamiento también ha sido reportado en el estudio de experimentos explosivos en la Ref. [41].

Vale la pena en este punto comentar lo siguiente. Primero, debe quedar claro a partir de la Figura 6.12 que la estimación de la temperatura del sistema

en el momento de formación de fragmentos τ_{ff} puede realizarse a partir de las temperaturas *asintóticas* de los mismos, tanto en experimentos explosivos como colisionales. En segundo lugar, destacamos que en nuestro análisis no invocamos en ningún momento la hipótesis de *equilibrio global* para calcular temperaturas. En cambio, nuestras definiciones de temperatura se basan en un escenario de *equilibrio local* que describe al proceso de fragmentación de un sistema no confinado de una manera más adecuada.

6.6 Curva Calórica

Luego de la detección de PEPs y demás fragmentos en la simulación de la colisión, de la identificación del tiempo de fragmentación y del cálculo de la energía de excitación y temperatura del sistema, podemos construir finalmente la curva calórica del mismo.

En la Figura 6.13 mostramos dicha curva. Por completitud incluimos un rango de bajas energías de excitación, $E^* < 1\epsilon$, para las cuales no se presenta desexcitación mediante el canal de fragmentación¹ (círculos). Para energías de excitación mayores mostramos la estimación de $\bar{T}_{loc}$ (cuadrados) y T_C (triángulos) calculadas a τ_{ff} .

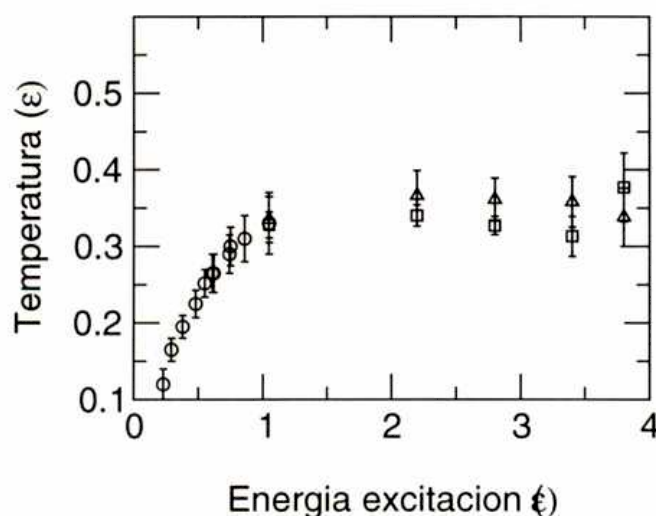


Figura 6.13: Curva calórica calculada para experimentos de colisiones. Para eventos de baja energía se muestra la temperatura del mayor fragmento (círculos). Para casos más energéticos se incluye el valor de $\bar{T}_{loc}$ (cuadrados) y T_C (triángulos) calculados al tiempo de fragmentación τ_{ff} .

Como podemos observar la curva obtenida es similar a la que presentamos en trabajos pasados analizando sistemas clásicos isotrópicamente excitados [41]. Nuevamente en este caso la propiedad relevante es el comportamiento prácticamente constante de la temperatura que comienza en la región dominada por el régimen de fragmentación. En otras palabras, los datos extraídos a partir de simulaciones de colisiones conducen a una curva tipo ‘subida-meseta’.

¹Como en estos experimentos no hay, o sólo hay algunas, partículas evaporadas, la temperatura del sistema se corresponde directamente con la del mayor fragmento remanente.

en la cual no hay registro de una nueva 'subida' que se podría asociar con una rama *gaseosa*. Al igual que en lo reportado para explosiones no confinadas, también en este caso el desarrollo de un modo colectivo de expansión funciona como sumidero de calor e inhibe la aparición de dicha rama.

6.7 Conclusiones

En definitiva podemos concluir que las correlaciones inducidas por colisiones no impiden de manera alguna la obtención de la curva calórica del sistema. Aún cuando exista una importante producción de PEPs, se induzcan fracturas internas y aparezcan grandes correlaciones de densidad como producto directo del mecanismo de excitación colisional, la información acerca de la temperatura del sistema a tiempo de fragmentación se ve reflejada en la temperatura asintótica de los fragmentos de manera fidedigna. Esta observación sugiere que las colisiones constituyen un método de suma utilidad para explorar la curva calórica de sistemas que fragmentan, siempre y cuando la energía de excitación responsable del proceso sea debidamente calculada.

Capítulo 7

Dinámica de Formación de Fragmentos en Colisiones Nucleares

7.1 Introducción

En el Capítulo anterior analizamos, utilizando un modelo extremadamente simple (i.e. sistema 2D con interacciones clásicas), algunas características del proceso de excitación a través de colisiones. En esta Sección presentamos un cálculo más “realista” de un proceso particular de formación y emisión de fragmentos que tiene lugar en el ámbito de las reacciones nucleares. Veremos que las técnicas de análisis desarrolladas en los capítulos precedentes son lo suficientemente versátiles como para obtener una descripción con sentido físico del proceso bajo estudio, en el cual juegan un papel preponderante los efectos de carácter dinámicos inducidos por la colisión.

7.2 Escenario de una Reacción de Iones Pesados

Las reacciones de iones pesados en el rango de la energía de Fermi¹ (20-100MeV/nucleón) han constituido un vasto campo de investigación desde hace algo más de una década. Una de las características principales que pudo establecerse en relación a los mecanismos de reacción involucrados fue que, a diferencia de lo que ocurre a energías menores (donde exclusivamente se obtienen dos fragmentos primarios o un único fragmento de fusión) las colisiones a energías intermedias producen estructuras más complejas, es decir, fragmentos de masas intermedias. En particular, son emitidos fragmentos de tamaños intermedios (IMFs) que pueblan lo que se conoce como la región de *velocidades intermedias*, lo que significa que la componente de la velocidad de dichos fragmentos, paralela al haz incidente, (velocidad paralela, $v_{||}$, de aquí en más)

¹En este rango la velocidad del proyectil es del orden de la velocidad media de los nucleones dentro del núcleo en reposo y la energía de excitación del orden de la de ligadura del núcleo.

se sitúa entre la de los principales participantes de la colisión: el remanente asociado al proyectil y el asociado al blanco.

Esta producción de partículas a velocidades intermedias se suele interpretar bajo el escenario *espectador-participante* (ver Figura 7.1), rigurosamente válido en realidad para energías relativistas ($\sim 1\text{Gev}/A$) [106]. Según este

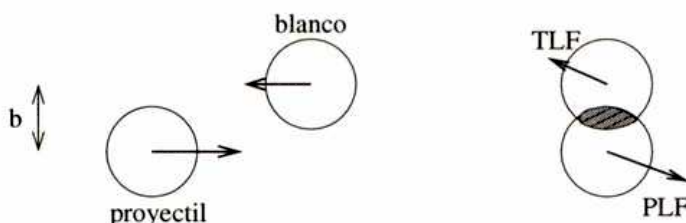


Figura 7.1: Diagrama esquemático del escenario *espectador-participante* para una colisión periférica de parámetro de impacto b .

esquema, en las reacciones con altas energías de proyectil, pueden reconocerse tres regiones a partir de la geometría de la colisión. Así, se consideran dos esferas de radio R_p y R_b (radio de proyectil y blanco respectivamente) cuya distancia entre centros es b (el parámetro de impacto) y se distinguen: la región de solapamiento de las esferas (*fireball*) y las restantes dos piezas, que luego de la colisión se alejan aproximadamente con sus velocidades iniciales respecto al centro de masa, y que se conocen como el cuasi-proyectil (QP) y el quasi-blanco (QT) o también como *espectadores*. En la región de solapamiento o *participante* se producen colisiones nucleón-nucleón muy energéticas por lo que la misma se constituye en una fuente ‘caliente’ de partículas tales como protones, neutrones y partículas cargadas de poca masa². En cuanto a los nucleones de la zona sin solapamiento, se mueven sin cambiar drásticamente su velocidad inicial. Son esencialmente dos fragmentos de gran masa (su tamaño dependerá del parámetro b) los cuales han ‘perdido’ una fracción de nucleones. Por lo tanto se encuentran excitados y tratarán de evolucionar hacia sus estados fundamentales. La energía de excitación puesta en juego en los espectadores es menor que en la región de solapamiento, pero puede ser comparable a la energía de ligadura del sistema en su estado fundamental. Por esto, en definitiva, según este esquema en una colisión periférica existen básicamente tres fuentes de fragmentos: el *fireball*, el cuasi-proyectil y el cuasi-blanco. La emisión de todas ellas pueden utilizarse para estudiar las propiedades de la materia nuclear.

Para energías de Fermi, sin embargo, el rol que juega la interacción nucleón-nucleón y el establecimiento de movimientos colectivos modifica dicha imagen simplificada del proceso y puede dar lugar a procesos específicos de producción de IMFs que estudiaremos en el presente capítulo.

En la actualidad no existe todavía un acuerdo respecto a los mecanismos de emisión en este rango de energías. El patrón en el espacio de velocidades de los IMFs emitidos a velocidades intermedias no puede ser explicado por un proceso simple de emisión estadística de los dos núcleos participantes. A pe-

²A lo largo de este capítulo llamaremos “partícula” tanto a nucleones aislados como a fragmentos nucleares livianos de carga $z \leq 3$.

sar de esto, recientemente se utilizó en la Ref.[107] un enfoque estadístico que incluía interacciones Coulombianas para explicar dicho tipo de emisión. Alternativamente, otros investigadores adoptaron una descripción dinámica para analizar el mismo proceso. Así, se ha utilizado el modelo semiclásico de transporte de Landau-Vlasov para analizar la presencia [108] y el comportamiento temporal [109] del proceso de emisión de partículas que pueblan la región de velocidades intermedias. Finalmente, en una contribución reciente [110] un mecanismo de emisión desde la superficie de los núcleos participantes fue sugerido.

En este contexto presentamos a continuación un modelo muy simple capaz de describir por completo el proceso de emisión de IMFs a velocidades intermedias. En particular, nos ocuparemos del estudio de dos reacciones asimétricas de núcleos livianos: $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ y $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ a 34.5MeV/nucleón. La motivación por estudiar estos sistemas en particular reside, por una parte, en que nos permitirán hechar luz en relación a la ocurrencia de dos procesos completamente diferentes: uno de emisión rápida y otro de emisión de IMFs por rotura de una estructura tipo cuello que se establece entre los participantes de la reacción. Por otra parte nuestro trabajo le dará el marco teórico a recientes observaciones experimentales relacionadas con efectos de proximidad y alineamiento en la ruptura de estructuras tipo cuello en colisiones asimétricas [111].

7.3 Datos Experimentales

Las dos reacciones estudiadas en este capítulo fueron realizadas en los aceleradores acoplados Tandem y Cyclotróon super conductor de AECL en Chalk River, Canada. Un haz de ^{58}Ni acelerado a 34.5MeV/A bombardeó alternativamente un blanco de carbón (2.4 mg/cm²) y otro de oro (2.7mg/cm²). Las partículas cargadas fueron detectadas en la matriz CRL-Laval 4 π , constituida por 144 detectores dispuesto en 10 anillos concéntricos al eje del haz, con una cobertura angular desde 3.3° hasta 140° (ver Ref.[112] para más detalles). Para el presente trabajo consideramos eventos seleccionados en un análisis *off-line* con una carga total detectada de al menos 24 y 34 unidades para las reacciones $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ y $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ respectivamente.

7.4 Modelo Semiclásico de Interacciones Nucleares

Para obtener información sobre el proceso de producción de fragmentos y de las propiedades cinemáticas del material emitido en las reacciones de interés utilizamos simulaciones numéricas de dinámica molecular. El modelo que consideramos fue originalmente propuesto por Lenk, Pandharipande y colaboradores para estudiar la precisión de la aproximación de Vlasov-Nordheim en la descripción de colisiones de iones nucleares a energías intermedias [61]. Es un modelo clásico de dinámica molecular, con un potencial de interacción de dos cuerpos, esférico, en el cuál las interacciones Coulombianas son tenidas en cuenta mientras que el “sabor” nuclear está dado por los siguientes términos

de interacción:

$$V_{np}(r) = V_r \left[\frac{e^{-\mu_r r}}{r} - \frac{e^{-\mu_r r_c}}{r_c} \right] - V_a \left[\frac{e^{-\mu_a r}}{r} - \frac{e^{-\mu_a r_c}}{r_c} \right] \quad (7.1)$$

$$V_{nn}(r) = V_0 \left[\frac{e^{-\mu_0 r}}{r} - \frac{e^{-\mu_0 r_c}}{r_c} \right] \quad (7.2)$$

V_{np} y V_{nn} son interacciones de neutrones con protones y nucleones idénticos respectivamente. $r_c = 5.4$ fm es el radio de corte del potencial. Usamos el conjunto de parámetros *M-set* de la Ref. [61] ($V_r = 3088.118$ MeV fm, $V_a = 2666.647$ MeV fm, $V_0 = 373.118$ MeV fm, $\mu_r = 1.7468$ fm⁻¹, $\mu_a = 1.6$ fm⁻¹ y $\mu_0 = 1.5$ fm⁻¹) que ha sido ajustado de manera de producir secciones eficaces realistas. A su vez, la parametrización utilizada se corresponde con una ecuación de estado para la materia nuclear con una compresibilidad de alrededor de 250 MeV, una densidad de equilibrio de $\rho_0 = 0.16$ fm⁻³ y $E(\rho_0) = -16$ MeV A.

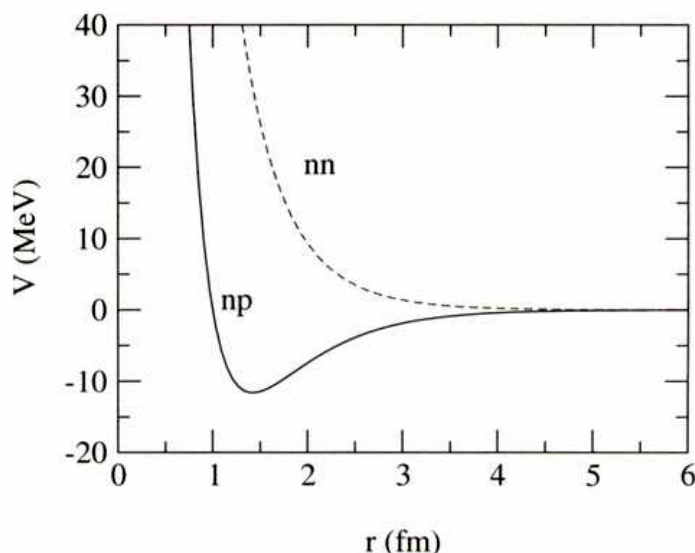


Figura 7.2: Potenciales de interacción entre nucleones con la misma (V_{nn} , línea a rayas) y con distinta (V_{np} , línea continua) proyección de isospin.

En la Figura 7.2 mostramos el comportamiento de los potenciales V_{np} y V_{nn} en función de la distancia entre nucleones. La interacción repulsiva entre dos nucleones del mismo tipo provee una especie de principio de exclusión, que no permite la existencia de estados ligados entre dos nucleones con idéntica proyección de isospin.

Los núcleos que utilizamos como proyectil y blanco en nuestros experimentos computacionales consistieron en agregados de partículas con el número adecuado de protones y neutrones dispuestos en configuraciones de baja energía ($E \sim -9$ MeV A). Para construirlos usamos técnicas de dinámica molecular. Comenzamos con un núcleo confinado y altamente excitado al cual le aplicamos un protocolo de enfriamiento hasta conseguir un estado auto-sostenido de baja energía interna. Antes de cada colisión, tal como lo hicimos en el capítulo precedente, variamos la orientación relativa proyectil-blanco e impulsábamos el centro de masa del proyectil hacia el blanco a la energía deseada. Integramos el conjunto de ecuaciones de movimiento hasta $t_\infty = 2000$ fm/c utilizando

el algoritmo de Verlet en velocidades (ver Apéndice A) tomando $t_{int} = 0.02$ fm/c como paso de integración. Con esto logramos conservar la energía en un 0.01%. Bajo este esquema analizamos 8400 eventos de $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ a una energía de 34.5 MeV/A para un amplio rango de parámetros de impacto ($b \leq 4.5\text{fm}$) y 3400 eventos para $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ a 34.5MeV/A para $5\text{fm} \leq b \leq 8\text{fm}$.

7.5 Reconocimiento de Fragmentos

Para explorar las correlaciones nucleón-nucleón que dan lugar al proceso de formación de fragmentos adoptamos la definición de fragmento compatible con el algoritmo de búsqueda que denominamos MSTE (ver Sección 4.1.2). Recordamos que dicho algoritmo busca estructuras bien correlacionadas en el espacio configuracional con la posibilidad de invalidar la incorporación de una dada partícula a un determinado fragmento de acuerdo al momento relativo entre pares de partículas (las partículas $i, j, \dots, k$ pertenecen al mismo cluster-MSTE C_a si: $\forall i \in C_a, \exists j \in C_a / e_{ij} \leq 0$, con $e_{ij} = V(r_{ij}) + (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2/4\mu$, y μ la masa reducida del par $\{i, j\}$). De esta manera la conformación de particiones MSTE refleja cierto grado de correlación en el espacio de fases $\mathbf{q}-\mathbf{p}$ del sistema.

Con la disponibilidad de correlaciones de todos los ordenes para cualquier tiempo pudimos avanzar en el estudio de la presencia y origen de la emisión de fragmentos a velocidades intermedias. Así, inmediatamente después de la etapa más violenta de la colisión, en un tiempo que denominamos t_{tag} , un paso de reconocimiento de fragmentos MSTE nos permitió clasificar a los fragmentos como pertenecientes al QP, al QT, o como no correlacionados con ninguna de esas dos estructuras. Determinamos el valor adecuado de t_{tag} evento a evento. Para ello analizamos la evolución temporal del tamaño de los dos mayores fragmentos y asociamos a t_{tag} con el tiempo en que la masa de dichos fragmentos registraba su primer período de relativa estabilidad luego de que el proceso de fragmentación hubiese comenzado³. La Figura 7.3 ilustra este último punto. En ella mostramos una típica determinación de t_{tag} para una realización de $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ con un parámetro de impacto $b = 6\text{fm}$.

Podemos fácilmente ver que t_{tag} señala la entrada en un nuevo y menos violento regimen de desexcitación con partículas clasificadas como pertenecientes al QP o QT bien correlacionadas en el espacio configuracional luego de la etapa altamente colisional.

Adicionalmente, la descripción microscópica nos permite calcular el instante t_e en el cual cualquier fragmento es efectivamente emitido, simplemente ‘pasando la película hacia atrás’ y analizando la historia de la evolución dinámica del sistema. Como cada fragmento asintótico es emitido en una etapa dife-

³Tomamos además en consideración que tanto el QP como el QT debían satisfacer ciertas condiciones cinemáticas. Por ejemplo: luego de la colisión el fragmento candidato a ser clasificado como QP (QT) debía poseer una velocidad paralela a la dirección proyectil-blanco mayor (menor) que cero en el sistema de referencia del centro de masa. Para las colisiones periféricas analizadas en este trabajo esta condición fue suficiente para identificar QP y QT's razonables.

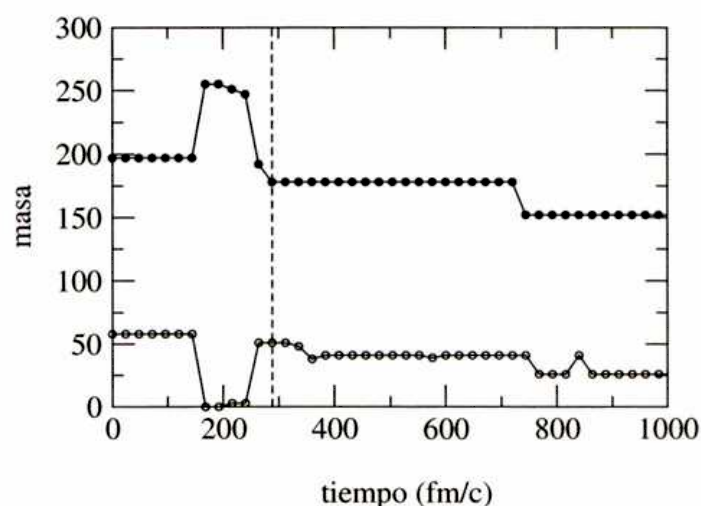


Figura 7.3: Evolución temporal de los dos mayores fragmentos MSTE para un evento típico de la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ con $b = 6\text{ fm}$. La línea vertical señala el valor estimado de t_{tag} .

rente de la reacción (consideramos un cluster como tal cuando la mayoría de los nucleones que lo constituyen se diferencian de otros fragmentos) es posible extraer información sumamente útil correlacionando este tiempo de emisión de cada cluster con otros observables cinemáticos relevantes.

7.6 Fiabilidad de las Simulaciones

Nos ocuparemos ahora de establecer si el modelo que adoptamos, a pesar de su simplicidad, es lo suficientemente flexible como para poder establecer una comparación con sentido físico entre simulaciones y datos experimentales. Para ello adoptamos la siguiente prescripción para estimar el parámetro de impacto experimental de la reacción b_{exp} [111, 113]:

$$b_{\text{exp}} = r_0(A_P^{1/3} + A_T^{1/3}) \frac{\Pi_{\parallel}^{\text{cm}}}{P_P^{\text{cm}}}, \quad (7.3)$$

donde $\Pi_{\parallel}^{\text{cm}}$ es el momento total paralelo de todas las partículas cargadas emitidas en la hemiesfera de velocidades negativas medidas, en el sistema de referencia del centro de masa del sistema, mientras que A_P , A_T y P_P^{cm} son la masa del proyectil, la masa del blanco y el momento del proyectil respectivamente. Tomamos $r_0 = 1.2\text{ fm}$. Para poder establecer una correcta comparación, clasificamos a todos los eventos simulados según ésta cantidad.

En los paneles (a) y (b) de la Figura 7.4 mostramos la distribución normalizada de velocidades paralelas ($v_{\parallel}^{\text{cm}}$) en el sistema de referencia centro de masa, para los productos de la colisión con cargas $z \geq 3$ generados en colisiones $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ periféricas ($b_{\text{exp}} \geq 2.5\text{ fm}$). En el primer panel incluimos datos experimentales y en el segundo presentamos resultados de la simulación. Utilizamos un grisado para identificar la contribución de IMFs ($3 \leq z \leq 7$) mientras que la de IMFs clasificados como emisión del QP fue diferenciada en la figura

correspondiente a la simulación con un rayado oblicuo ⁴.

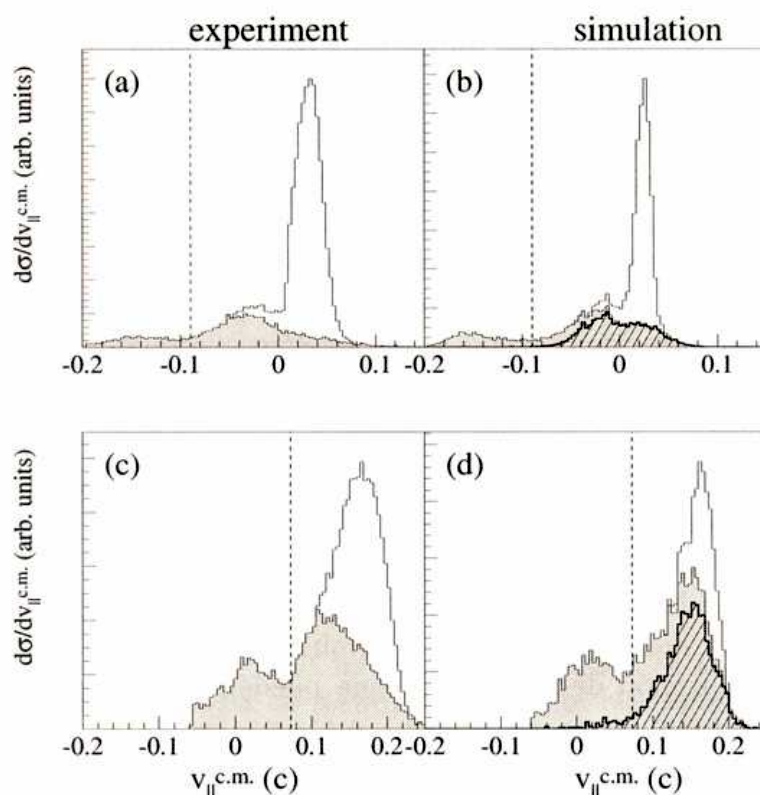


Figura 7.4: Distribución de la velocidades paralelas calculadas en el centro de masa del sistema para partículas con $z \geq 3$. Los datos correspondientes a reacciones periféricas $^{58}\text{Ni} + \text{C}$ y $^{58}\text{Ni} + \text{Au}$ se muestran en los paneles superiores e inferiores respectivamente. Las líneas verticales indican el valor de la velocidad nucleón-nucleón. Los paneles (a) y (c) muestran resultados experimentales, mientras que (b) y (d) simulaciones. En cada panel la contribución de IMFs figura grisada. A su vez, la contribución de los IMF provenientes del QP fue rayada de manera oblicua.

De la Figura 7.4 podemos ver que las características generales de la distribución son bien reproducidas por la simulación. Aparte de los picos asociados al fragmento-remanente-del QP y del fragmento-remanente-del QT, centrados a $v_{||}^{cm} \sim 0.04c$ y $-0.15c$ respectivamente, notamos la presencia de una tercer estructura ubicada entre la velocidad nucleón-nucleón, v_{nn} (línea vertical) y la velocidad del residuo del proyectil, tanto en el experimento como en la simulación. No obstante debemos mencionar que nuestro modelo CMD sobrestima la cantidad de IMFs originados en el QP para regiones de altas velocidades $v_{||}^{cm} \sim 0.03c$.

En los paneles (c) y (d) de la misma figura incluimos los resultados correspondientes a reacciones periféricas ($b_{exp} > 6\text{fm}$) $^{58}\text{Ni} + \text{Au}$. Para este caso, previo a la etapa de análisis, los resultados de las simulaciones fueron procesados de manera de tener en cuenta las limitaciones impuestas por la geometría

⁴La cobertura 4π del detector y la condición de carga completa detectada en el experimento nos permitieron, en este caso, establecer una comparación válida entre éste y reacciones simuladas sin filtrar.

y los umbrales de detección del dispositivo experimental. A pesar de que el canal de entrada es completamente distinto para esta reacción y del efecto diferente de los umbrales de detección del aparato, podemos esbozar conclusiones similares al caso anterior: las características generales de la distribución son bien reproducidas por el modelo, pero una sobreproducción de IMFs que vienen del QP también puede reconocerse (emisión centrada a $v_{||}^{cm} \sim 0.15c$).

Posibles causas del desacuerdo encontrado tienen que ver con que el modelo no reproduce adecuadamente los procesos de desexcitación secundarios en un nivel cuantitativo. En particular, tanto la amplitud relativa de partículas cargadas livianas ($z < 3$) como de IMFs en el canal de desexcitación del QP, no son bien reproducidas debido a que nuestro enfoque cuasi-clásico no trata adecuadamente los grados de libertad relevantes en procesos lentos de desexcitación nuclear.

En definitiva podemos concluir que aún si una descripción *cuantitativa* del proceso mediante nuestro modelo parece cuestionable, el uso del mismo puede ayudar a entender cualitativamente el fenómeno de producción de partículas a velocidades intermedias. A pesar de su simplicidad, veremos que el modelo es lo suficientemente flexible como para permitir la existencia de diferentes mecanismos de producción de fragmentos que pueden ser integrados en una descripción unificada del proceso.

7.7 Fuentes de Emisión de Partículas

La descripción microscópica de la reacción nos permite asociar dos cantidades a cada fragmento asintótico detectado: una relacionada con su tiempo de emisión (t_e), y otra con su origen físico [i.e. si dicho fragmento pertenecía al QP, al QT o ya estaba desligado de ellos (era un fragmento libre, FP) a tiempo t_{tag}]

En la Figura 7.5 mostramos las distribuciones de $v_{||}^{cm}$ para simulaciones de las dos reacciones analizadas. Consideramos, al igual que en la Figura 7.4, eventos periféricos. En los paneles, la contribución de partículas clasificadas como QT, FP, QP fueron sombreadas con distintas texturas (ver descripción en figura). El panel (a) corresponde a simulaciones de la reacción $^{58}\text{Ni} + \text{C}$ ($2.5\text{fm} \leq b_{exp} < 6.0\text{fm}$), mientras que el panel (b) a simulaciones de la reacción $^{58}\text{Ni} + \text{Au}$ ($9.0\text{fm} \leq b_{exp} < 12.0\text{fm}$).

Para (a), podemos apreciar que las partículas marcadas como FP son emitidas a una velocidad ligeramente superior a la v_{nn} . Se trata en su mayoría de partículas livianas, expulsadas en una etapa muy temprana de la reacción. La dispersión observada en el pico asociado a fragmentos QT está relacionada con el hecho de que el ^{12}C se fragmenta fácilmente en la colisión, produciendo principalmente clusters con $z \leq 3$. Por otra parte la colisión periférica da lugar a un proceso ‘abrasivo’ en el que fragmentos livianos son ‘arrancandos’ del ^{58}Ni y terminan poblando la región de velocidades $v_{||}^{cm} < 0$. En cuanto a la emisión de fragmentos clasificados como QP no sólo podemos identificar un máximo centrado en la velocidad asociada al residuo del QP, sino que un

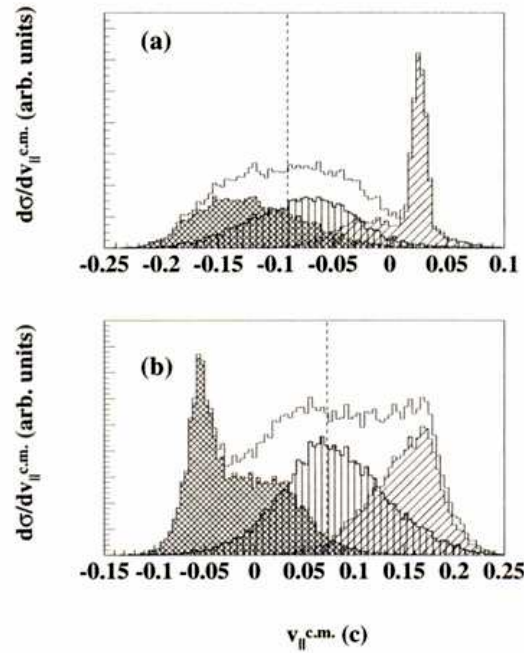


Figura 7.5: Distribución de las velocidades paralelas en el sistema centro de masa para todas las partículas emitidas en reacciones $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ (a) y $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ periféricas simuladas. Se distinguen las contribuciones de partículas clasificadas como QT (doble rayado oblicuo), QP (rayado oblicuo simple) o FP (rayado vertical).

segundo pico puede reconocerse en las regiones de velocidades intermedias.

En la Figura 7.5(b) vemos que para la simulación de la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ ($9.0\text{fm} \leq b_{\text{exp}} < 12.0\text{fm}$) la distribución asociada a las FPs se encuentra centrada a v_{nn} . También esta emisión está principalmente compuesta por partículas livianas. Por su parte, la emisión QP alcanza su máximo a la velocidad asociada al fragmento residual correspondiente, presentando una leve asimetría hacia la región de velocidades intermedias. Sin embargo, es importante destacar que esta última característica es mucho más notoria del lado del participante más pesado de la reacción, para el cual una contribución ‘extra’, a parte de la asociada directamente con el residuo proveniente del QT, es fácilmente reconocible.

7.8 Tiempos de Emisión de IMF

Como mencionamos hacia el final de la Sección 7.5 el tiempo de emisión t_e de cada cluster asintóticos puede ser fácilmente estimado y señala el instante en el que el un dado fragmento alcanza estabilidad de masa. En este punto es importante recordar que la clasificación en cuanto al origen físico de los fragmentos refleja el estado de correlaciones espaciales y de velocidad inmediatamente después que el sistema comienza a fragmentarse y comienza la separación del cuasi-proyecil (QP) y cuasi-blanco (QT).

En la Figura 7.6 mostramos distribuciones de velocidad en el plano $v_y - v_z$, perpendicular al de la colisión, calculadas en el centro de masa del sistema para IMFs ($3 \leq Z \leq 7$) en reacciones periféricas ($2\text{fm} \leq b_{\text{exp}} \leq 4\text{fm}$) $^{58}\text{Ni} + \text{C}$. Utilizamos escala logarítmica para las curvas de nivel. Las contribuciones de partículas clasificadas como QT, FP y QP se muestran en la primer, segunda y tercer columna respectivamente. Los fragmentos emitidos a tiempos $t_e < 150$ fm/c, $150 \text{ fm/c} \leq t_e < 600$ fm/c y $t_e \geq 600$ fm/c después de la colisión se muestran en la primera, segunda y tercera fila de gráficos respectivamente. Incluimos como referencia las velocidades medias (tomadas sobre el total de partículas cargadas) de partículas QP y QT (círculos sólidos).

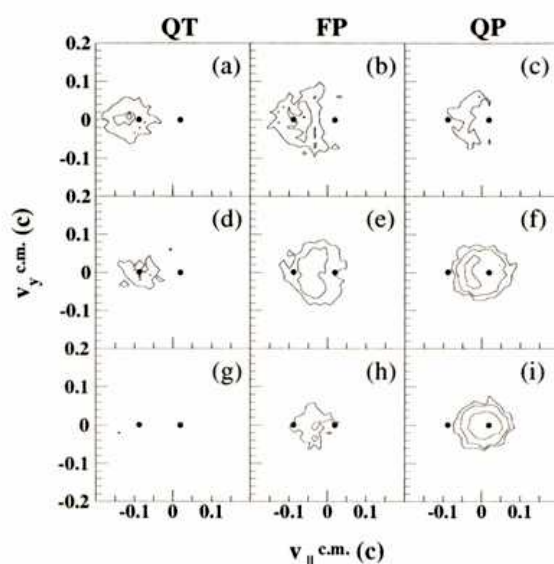


Figura 7.6: Distribución de velocidades en el plano (v_y, v_z) , perpendicular al plano de la reacción para el caso $^{58}\text{Ni} + \text{C}$. La primera, segunda y tercera columnas incluyen datos correspondientes a la emisión caracterizada como QT, FP y QP respectivamente. La primera, segunda y tercera fila de paneles muestran la emisión producida a tiempos: $t < 150\text{fm/c}$, $150\text{fm/c} \leq t < 600$ fm/c y $t \geq 600$ fm/c respectivamente.

Podemos observar que los IMFs-QT son emitidos muy temprano en la evolución [Fig.7.6(a)]. Los mismos corresponden principalmente a pequeños IMFs provenientes de la fragmentación del ^{12}C y eventuales nucleones ‘arrancados’ del ^{58}Ni . Por otra parte, los IMFs-FP (paneles centrales de la figura), que a t_e ya se encontraban diferenciados del cuasi-proyectil y cuasi-blanco, presentan un patrón cónico de emisión para $t_e < 150\text{fm/c}$ que refleja la violencia de la colisión y la asimetría de masas en el canal de entrada. Una segunda contribución de este tipo de fragmentos aparece un poco más tarde, $150\text{fm/c} \leq t_e < 600\text{fm/c}$, cuando clusters-FP aún excitados emiten una segunda ola de fragmentos que puebla la región de velocidades inter-

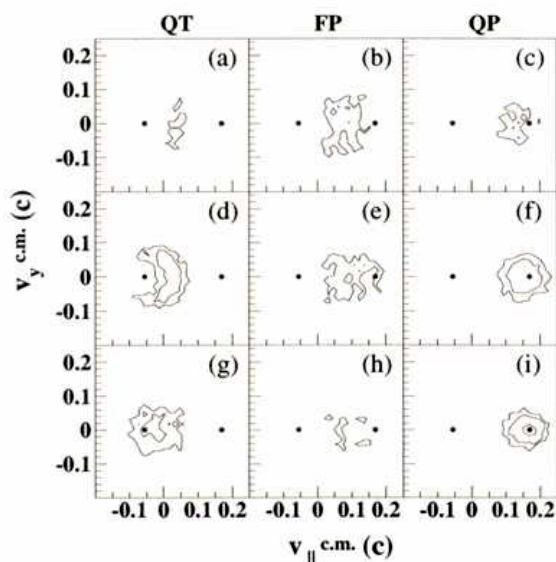


Figura 7.7: Misma figura que 7.6 pero calculada para la simulación de la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$

medias⁵[Fig. 7.6(e)]. Finalmente la evolución de los fragmentos-QP, que se muestra en la tercer columna, presenta características sumamente interesantes. El máximo de emisión de IMFs-QP ocurre para tiempos intermedios, $150\text{fm}/c \leq t_e < 600\text{fm}/c$ después de la colisión [panel (f)]. Un ‘agujero de Coulomb’ en el patrón de emisión, reflejo de la interacción del residuo del proyectil y los clusters IMFs emitidos, puede fácilmente reconocerse. Este patrón explica el segundo máximo observado en las distribuciones de velocidad paralelas que mostramos en la Fig.7.5(a) y puede considerarse como una signature de una *rotura retardada dinámicamente inducida* del cuasi-proyectil. Vale la pena notar que luego de este tipo de emisión retardada, se observa un patrón isotrópico para tiempos mayores [panel 7.6(i)].

Este análisis puede aplicarse también para la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ (Figura 7.7). El mismo tipo de comportamiento puede reconocerse para tiempos de emisión muy cortos y muy largos (primera y tercera fila respectivamente). Sin embargo, el patrón de emisión del sistema para tiempos intermedios, $150\text{fm}/c \leq t_e < 600\text{fm}/c$ luego de la colisión, presenta un interés especial. Podemos observar que en este caso una emisión retardada de IMFs sucede principalmente en el lado de QT de la reacción, mientras que la emisión de IMFs-QP se presenta como prácticamente isotrópica para estos tiempos [en contraste con lo que se observa en la Figura 7.6(f)].

Completamos la caracterización de este nuevo tipo de emisión con la Figura 7.8, donde mostramos para ambas reacciones, las distribuciones de velocidad

⁵Es importante recordar, sin embargo, que la contribución principal de fragmentos-FP no son IMFs sino partículas livianas ($z < 3$)

en el plano de la reacción $v_x - v_z$ (primer columna) y en el plano perpendicular $v_y - v_z$ (segunda columna), para IMFs con $150 \text{ fm/c} \leq t_e < 600 \text{ fm/c}$.

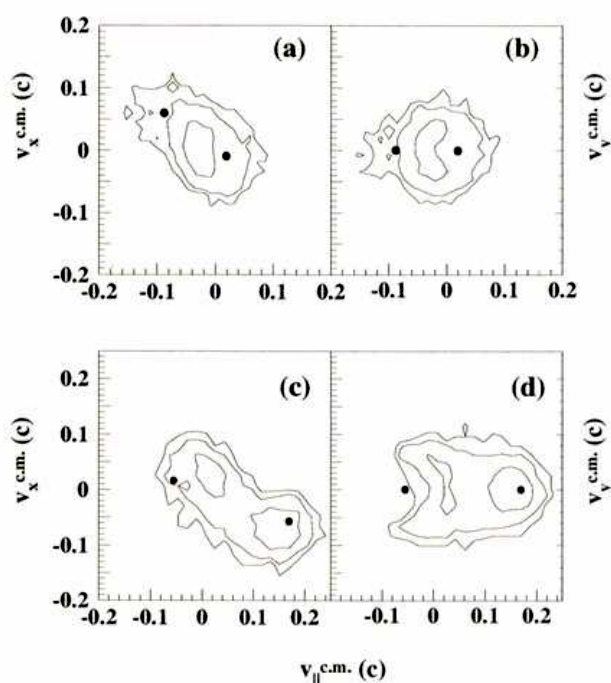


Figura 7.8: Distribución de velocidades de las partículas IMFs emitidas entre $t_e = 150 \text{ fm/c}$ y $t_e = 600 \text{ fm/c}$. Los paneles (a) y (b) corresponden a la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ mientras que (c) y (d) a $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$. La primer columna muestra la proyección sobre el plano de la reacción (v_x, v_z), mientras que la segunda la proyección sobre el plano perpendicular (v_y, v_z)

La primer y segunda fila de paneles corresponden a las reacciones $^{58}\text{Ni}+\text{C}$ y $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ respectivamente. Podemos observar que la emisión retardada de IMFs ocurre principalmente a lo largo de la dirección entre los residuos mayores del cuasi-blanco y cuasi-proyectil, presentandose una leve desviación en este alineamiento debido al momento angular ganado en la colisión.

7.9 El Rol de las Interacciones Coulombianas

En esta sección nos detendremos en el análisis del rol específico que juegan las interacciones Coulombianas en el proceso reportado de emisión retardada de IMFs. Para eso, estudiaremos la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$ y compararemos el comportamiento del sistema cuando dichas interacciones no son consideradas.

En la Figura 7.9 mostramos las distribuciones de velocidad para los casos en que Coulomb no es incluido [paneles (a) y (b)] y cuando sí es considerado [paneles (c) y (d)]. La contribución de fragmentos-QT y QP se muestra en la primer y segunda columna respectivamente.

Podemos ver que el patrón de emisión de fragmentos-QT se ve severamente afectado por la presencia o no de interacciones Coulombianas. En el panel (a)

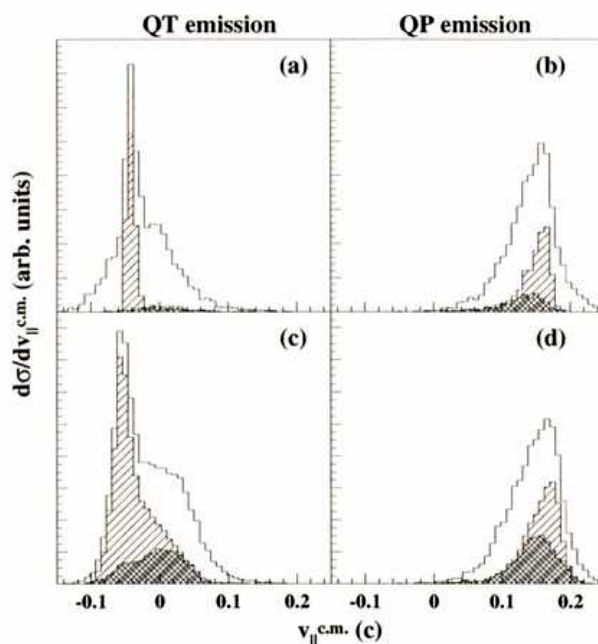


Figura 7.9: Distribución de las velocidades paralelas para partículas emitidas desde el QP [paneles (a) y (c)] y desde el QT [paneles (b) y (d)] en la reacción $^{58}\text{Ni}+\text{Au}$. La contribución de partículas $z \geq 3$ se presenta con un rayado oblicuo mientras que la de los IMF con un rayado doble. Los paneles superiores muestran resultados obtenidos sin considerar la interacción Coulombiana. Los paneles inferiores, incluyendo dicha interacción.

la producción de IMFs-QT es despreciable. Los pocos IMFs que aparecen se encontraban sólo levemente ‘conectados’ al mayor fragmento proveniente del cuasi-blanco, siendo emitidos muy tempranamente. Sin las inestabilidades Coulombianas las deformaciones dinámicamente inducidas en el cuasi-blanco son, en su gran mayoría, reabsorvidas por el mismo.

Este no es el caso cuando tomamos en cuenta las interacciones electrostáticas. Más aún, el patrón de emisión, considerando la totalidad de carga emitida, es bastante isotrópico en el panel (a) y ha perdido en cierto grado la memoria del canal de entrada de la reacción. Por el contrario vemos en el panel (c) que la emisión QT en presencia de Coulomb se ve severamente afectada por el carácter colisional del proceso de excitación, dando lugar a lo que llamamos *emisión retardada y alineada de IMFs*.

En cuanto a lo que ocurre con el QP, el respectivo patrón de velocidades muestra el mismo comportamiento cualitativo con o sin Coulomb. Esto implicaría que las interacciones electrostáticas no son el ingrediente principal en el proceso de desexcitación del QP.

7.10 Escenarios de Producción de Fragmentos

Todos estos hallazgos sugieren la existencia de dos diferentes escenarios para la producción de partículas con velocidades intermedias. Por un lado hay una importante emisión temprana de partículas livianas en la etapa altamen-

te colisional de la reacción. Dichos clusters provienen principalmente de la región de solapamiento de los núcleos y surgen como consecuencia de colisiones nucleón-nucleón que los alejan rápidamente del alcance del campo medio nuclear.

Por otra parte, puede reconocerse un mecanismo donde deformaciones inducidas dinámicamente se producen en el remanente más pesado inmediatamente después del pasaje del proyectil sobre el blanco. Eventualmente, esto conduce a la emisión del ‘cuello’ que se establece entre núcleos participantes y es seguido por un ‘empuje’ Coulombiano, debido a la proximidad de la fuente pesada, que proyecta a las partículas emitidas hacia la región de velocidades intermedias. Esta segunda alternativa ocurre en una escala de tiempos más lenta e involucra principalmente a IMFs. Este segundo tipo de emisión puede, además, ser considerado como una forma de fisión asimétrica inducida dinámicamente. De hecho, el estudio de dos reacciones con asimetría de masas inversa en el canal de entrada nos permitió enfatizar que este tipo de fenómeno tiene su origen en una inestabilidad configuracional dinámicamente inducida que afecta principalmente al participante más masivo de la reacción. Deformaciones más importantes pueden ser sostenidas por más tiempo por el núcleo más pesado para permitir el desarrollo de inestabilidades Coulombianas que culminan con el proceso de fisión asimétrica.

7.11 Conclusiones

En este capítulo hemos mostrado como, mediante técnicas de simulación de dinámica molecular y de reconocimiento de fragmentos, es posible estudiar procesos no triviales de formación de fragmentos que tienen lugar en reacciones nucleares de iones pesados, en el rango de energías de Fermi.

En particular, haciendo uso intensivo de la información proveniente de correlaciones microscópicas, pudimos establecer una clara distinción entre dos procesos diferenciados de emisión de fragmentos. Uno extremadamente rápido, que principalmente involucra partículas livianas, y otro al que denominamos *emisión retardada y alineada* de fragmentos de masas intermedias.

Encontramos que nuestros cálculos son consistentes con los datos experimentales y que los procesos de producción de fragmentos descritos pueden explicar características generales reportadas en el área experimental [110, 111].

Capítulo 8

Conclusiones y Perspectivas

A lo largo de esta tesis nos abocamos al estudio del fenómeno de fragmentación de sistemas finitos. Se trabajó principalmente en el análisis de simulaciones numéricas de los sistemas de interés, llevadas a cabo con técnicas de dinámica molecular clásica y semi-clásica. En particular, centramos nuestra atención en el estudio de procesos de fragmentación que sobrellevan sistemas finitos sometidos a las siguientes condiciones de contorno:

i) FRAGMENTACIÓN CONFINADA EN VOLÚMEN (Capítulo 4),

En este escenario estudiamos las propiedades de lo que se podría llamar *fragmentación en equilibrio*. Nuestro trabajo nos permitió entender el origen microscópico de señales asociadas con una transición de fase de primer orden en sistemas finitos, tales como fluctuaciones anormalmente grandes de la energía cinética, curvas calóricas con *loop* y calores específicos negativos. A su vez pudimos obtener el diagrama de fases y caracterizar el comportamiento crítico del sistema, utilizando información de correlaciones microscópicas en el espacio de fases.

ii) EXPLOSIONES NO CONFINADAS (Capítulo 5), En este caso avanzamos hacia la descripción del proceso de fragmentación en un escenario más realista. La dinámica del sistema sólo admite el establecimiento de un *equilibrio local* que se establece sobre un campo de velocidades asociado a un movimiento colectivo de expansión. Esto repercute en el comportamiento no sólo de observables termodinámicos (como la curva calórica) sino también en el desarrollo de fluctuaciones microscópicas que dan lugar a la formación de fragmentos. En este contexto estudiamos la dependencia temporal de las fluctuaciones relativas de la energía cinética y pudimos reconocer el vínculo natural que se presenta entre fluctuaciones anormalmente grandes de K y la presencia de espectros de masa asintóticos libres de escala.

iii) FRAGMENTACIÓN EN COLISIONES (Capítulos 6 y 7) Finalmente en los últimos dos capítulos discutimos aspectos directamente relacionados con el mecanismo de excitación por colisiones. Por un lado realizamos un detallado estudio acerca del proceso de deposición de energía en el blanco y pudimos determinar la curva calórica correspondiente, encontrando que presentaba características similares al caso de explosiones no confinadas. Por otra parte, considerando

un potencial semi-clásico para modelar la interacción nuclear y utilizando las mismas técnicas de análisis y reconocimiento de fragmentos, pudimos desarrollar un modelo de formación de fragmentos en colisiones de iones pesados que fija un marco dentro del cual se pueden interpretar recientes resultados experimentales.

Si bien nuestro trabajo se vió inicialmente motivado por el estudio de la multifragmentación nuclear, a lo largo de esta tesis hemos tratado de responder a la siguiente pregunta de carácter general: ¿Qué le sucede, al ser excitado, a un sistema finito formado por constituyentes que interactúan de a pares a corto rango? Desde esta perspectiva los resultados obtenidos presentan interés no sólo en el campo de la física nuclear, sino en el área más general y básica de la caracterización de transiciones de fase en sistemas finitos, lejos del límite termodinámico [114].

Al respecto ya existe una línea de trabajo en el grupo para extender el análisis que aquí presentamos a otro tipo de potenciales, con diferentes rangos de interacción. En particular ya hay resultados preeliminares acerca de cómo afecta la presencia de interacciones Coulombianas al proceso de fragmentación, tanto en sistemas confinados como libres de expandirse [115]. En relación a este último caso ya se ha desarrollado una extensión del algoritmo de reconocimiento temprano de fragmentos ECRA para trabajar en presencia de interacciones de largo alcance.

También se ha encarado el estudio del proceso de formación de fragmentos en superficies bidimensionales excitadas localmente (modelizando procesos de *sputtering* por bombardeo con iones o ablación con laser). Para ello se ha desarrollado otra extensión del algoritmo ECRA capaz de buscar la partición más ligada en un espacio de fases de dimensiones mucho más grandes que en el caso nuclear (sistema compuesto por alrededor de 7000 partículas [116]).

Apéndice A

Algoritmos de Dinámica Molecular

La técnica de dinámica molecular clásica consiste básicamente en integrar numéricamente las ecuaciones de Newton en el tiempo. Para un sistema de N partículas dichas ecuaciones se escriben como:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i \quad 1 \leq i \leq N \quad (\text{A.1})$$

donde $\mathbf{r}_i$ es el vector posición, m_i es la masa del i -ésimo átomo y $\mathbf{f}_i$ la fuerza total que experimenta.

En particular, para el caso en que el potencial de interacción es del tipo Lennard-Jones, se tiene que la fuerza que experimenta la partícula i a causa de la partícula j resulta:

$$\mathbf{f}_{ij} = m \frac{\partial^2 \mathbf{r}_{ij}}{\partial t^2} = 48 \frac{\epsilon}{\sigma} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - 0.5 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\sigma}. \quad (\text{A.2})$$

que se puede escribir, si definimos las siguientes variables adimensionales, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/\sigma$ y $t' = t/t_0$, de la siguiente manera (suprimimos los sub-índices ' ij ' por claridad):

$$\frac{m\sigma}{t_0^2} \frac{\partial^2 \mathbf{r}'}{\partial t'^2} = 48 \frac{\epsilon}{\sigma} \left[r'^{14} - 0.5 r'^8 \right] \mathbf{r}' \quad (\text{A.3})$$

Teniendo en cuenta esto, a lo largo del presente trabajo, tomamos como unidad de tiempo: $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/48\epsilon}$ y como unidades de energía y distancia a ϵ y σ respectivamente. Consideramos para la masa, $m_0 = 1$.

Hay muchos métodos numéricos para integrar ecuaciones del tipo A.3 (para una descripción detallada ver [117, 118, 119] y referencias allí mencionadas). Nosotros hemos elegido el algoritmo conocido como Verlet de segundo orden.

El sistema de ecuaciones A.1 puede reescribirse en coordenadas cartesianas como:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{p}_i \quad (\text{A.4})$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\nabla_{\mathbf{r}_i} V = \mathbf{f}_i \quad 1 \leq i \leq N \quad (\text{A.5})$$

Si desarrollamos a segundo orden la posición de una partícula a tiempo $t + \Delta$ tenemos:

$$\vec{r}(t + \Delta) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta^2 \quad (\text{A.6})$$

análogamente para las velocidades:

$$\vec{v}(t + \Delta/2) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\frac{\Delta}{2} + \dots \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{v}(t + \Delta) = \vec{v}(t + \Delta/2) + \vec{a}(t + \Delta)\frac{\Delta}{2} + \dots \quad (\text{A.8})$$

por lo que

$$\vec{v}(t + \Delta) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2} [\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta)] \Delta \quad (\text{A.9})$$

Las ecuaciones A.6 y A.9 establecen el algoritmo de integración, conocido como Verlet en velocidades, que permite calcular posiciones y velocidades a tiempo $t + \Delta$ en función de las mismas cantidades a tiempo t .

Este algoritmo presenta varias ventajas. Es muy simple y de fácil implementación, es exacto hasta orden $o(\Delta^3)$, garantiza una muy buena conservación de energía (particularmente a tiempos largos), presenta muy chica deriva, y además es reversible frente a inversión temporal [118].

Apéndice B

Percolación

El modelo de percolación es quizás el más simple ejemplo de un sistema que presenta comportamiento crítico. Es puramente geométrico y puede describirse como una grilla de dimension Euclideana d , en la cual cada sitio se ocupa con probabilidad p . En este caso se habla de un problema de *percolación de sitio*. Alternativamente se puede considerar que en vez de activar sitios, activamos aleatoriamente los enlaces entre-sitios con probabilidad q . Estaríamos, en este caso, en un problema de percolación de enlaces. Los problemas de percolación de enlaces pueden reducirse a problemas de sitio, pero la inversa no se cumple.

En este modelo, p (o q) actúa como parámetro de control mientras que la transición de fase está relacionada con la presencia de un *cluster percolante*. Es decir, una estructura de primeros vecinos que se extienda desde $-\infty$ hasta $+\infty$ o, en sistemas finitos de una dada geometría, desde un borde del sistema hasta el opuesto. Para un sistema infinito existe un valor bien determinado de la probabilidad de ocupación $p = p_c$ para el cual la probabilidad de encontrar un cluster percolante es 1 si $p > p_c$ y 0 si $p < p_c$. Para redes finitas en cambio la transición entre los dos regímenes se ve notablemente suavizada.

El parámetro de orden del modelo es P_∞ , que es la fracción de sitios ocupados que pertenecen al cluster percolante, por sitio. En la Figura 3.1(c) mostramos el comportamiento de dicha cantidad en función de la distancia al punto crítico $\epsilon = p - p_c$. Para $\epsilon \rightarrow 0$ se verifica que:

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta \quad (\text{B.1})$$

donde β es uno de los exponentes críticos del sistema.

Los sitios (o enlaces) se encuentran vacíos con probabilidad $(1 - p)$, pertenecen al cluster percolante con probabilidad pP_∞ y a algún cluster finito con probabilidad $\sum_s s.n_s$. Por lo tanto:

$$(1 - p) + pP_\infty + \sum_s s.n_s = 1 \quad (\text{B.2})$$

donde n_s es la probabilidad de encontrar un cluster de tamaño s en un evento de percolación. Las propiedades de criticalidad del sistema se ponen de

manifiesto en el compartimiento singular que sobrellevan los momentos de la distribución de masas de los clusters:

$$\begin{aligned}
 M_0 &= \sum_s n_s(p) \sim |p - p_c|^{2-\sigma} \\
 M_1 &= \sum_s s n_s(p) \sim (p - p_c)^3 \\
 M_2 &= \sum_s s^2 n_s(p) \sim |p - p_c|^\gamma \\
 M_k &= \sum_s s^k n_s(p) \sim |p - p_c|^{(\tau-1-k)/\gamma} \\
 \xi(p) &\sim |p - p_c|^{-\nu}
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Estas últimas expresiones ponen en evidencia la ocurrencia de fenómenos de escaleo, o *scaling* en el sistema. La idea es que cerca del punto crítico existe una única escala relevante: la distancia de correlación ξ que diverge en este punto. Se puede por lo tanto definir una escala típica para las dimensiones de los fragmentos, s_ξ , que proveen la contribución principal en las sumas que presentamos en las Ecuaciones B.3. Para seguir avanzando, se asume como hipótesis que la cantidad relevante en cuanto al tamaño de los fragmentos cumple con:

$$n_s/n_{s_\xi} = F(s/s_\xi) \tag{B.4}$$

Así definida, esta cantidad es independiente de la distancia $(p - p_c)$. Teniendo en cuenta que en el punto crítico $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$ se obtiene que:

$$n_s(p) \sim s^{-\tau} f(z) \quad , \text{ con } z = (p - p_c)s^\sigma \text{ y } f(0) = 1 \tag{B.5}$$

A esta última expresión para la distribución de fragmentos cerca del punto crítico se la conoce como *hipótesis de scaling*. Utilizándola, es posible determinar los exponentes críticos que describen el comportamiento singular de los momentos como función de los exponentes τ y σ que caracterizan a la distribución de fragmentos. Para más detalles acerca del fenómeno de percolación sugerimos consultar la Referencia [120].

Apéndice C

Cálculo de Exponentes Críticos τ y γ

El comportamiento de un sistema cerca del punto crítico puede ser descripto en término de funciones de escala. Por ejemplo, la distribución de fragmentos puede expresarse como:

$$n_A(\epsilon) = q_0 A^{-\tau} f(z) \quad (\text{C.1})$$

con n_A la probabilidad por partícula de que se presente un fragmento de tamaño A , ϵ la distancia al punto crítico, τ es un exponente crítico, q_0 una constante de normalización y $f(z)$ la función de escala. z , conocida como *variable de escaleo*, depende de A y ϵ de la siguiente manera: $z = A^\sigma \epsilon$ con σ otro exponente crítico.

En el punto crítico $f(z = 0) = 1$ [120], por lo que la función distribución se puede expresar como la siguiente ley de potencias:

$$n_A = q_0 A^{-\tau} \quad (\text{C.2})$$

Debemos notar que, utilizando la condición de normalización sobre la masa q_0 en realidad depende de τ a través de la función ζ de Riemann:

$$q_0 = \zeta(1 - \tau) = \frac{1}{\sum_A A^{1-\tau}} \quad (\text{C.3})$$

Teniendo en cuenta esto, ajustamos las distribuciones de fragmentos n_A , obtenidas con nuestras simulaciones, con funciones leyes de potencias (Ec.C.2) que cumplan la condición de normalización, Ec.C.3 (en la Figura C.1a) mostramos un caso típico). Con el mejor ajuste determinabamos la energía crítica E^* y con la respectiva pendiente en un gráfico log-log el valor del exponente crítico τ . Utilizamos el coeficiente estándar χ^2 para cuantificar la calidad del ajuste, que fue realizado en el rango de masas: $3 < A < 20$ para disminuir las distorsiones causadas por efectos de tamaño finito.

Para calcular γ procedimos de la siguiente manera [16]. Como vimos en la Ecuación 4.9 el comportamiento del segundo momento de la distribución de

fragmentos, M_2 , puede ser descripto en términos del exponente crítico γ . La divergencia que dicha ecuación predice para $\epsilon \rightarrow 0$ es válida sólo para sistemas infinitos. Sin embargo, para el caso finito, es posible encontrar un rango de valores para ϵ para los cuales aún vale que $M_2 = \Gamma_{\pm} |\epsilon|^{\gamma_{\pm}}$.

En consecuencia seguimos los siguiente pasos para determinar γ . Primero tomamos como valor crítico de la energía E_c uno ubicado en un pequeño rango centrado en el valor extraído del cálculo del exponente τ . Luego fijamos dos intervalos como límites del ajuste de M_2 , uno para la región del gas ($\epsilon < 0, [\epsilon_g^{min}, \epsilon_g^{max}]$) y otro para la región del líquido ($\epsilon > 0, [\epsilon_l^{min}, \epsilon_l^{max}]$). En cada una de estas dos regiones ajustamos $M_2(E)$ con una ley de potencias, almacenando los valores obtenidos de γ_g, γ_l y los correspondientes χ_g^2 y χ_l^2 . Repetimos esto considerando una gran variedad de intervalos de fiteos, guardando registro de aquellos exponentes (γ_g y γ_l) que satisficieran dos criterios: *i*) γ_g y γ_l no debían presentar diferencias significativas, *ii*) los respectivos χ^2 debían ubicarse por debajo del 20% de la distribución (en la Figura C.1 b) mostramos un caso típico). Repetimos todo este procedimiento para diferentes posibles valores de E_c .

Finalmente levantamos histogramas con los valores de los exponentes que satisficieran las dos condiciones presentadas, a partir de los cuales pudimos estimar tanto el valor medio como la varianza asociados al exponente crítico γ .

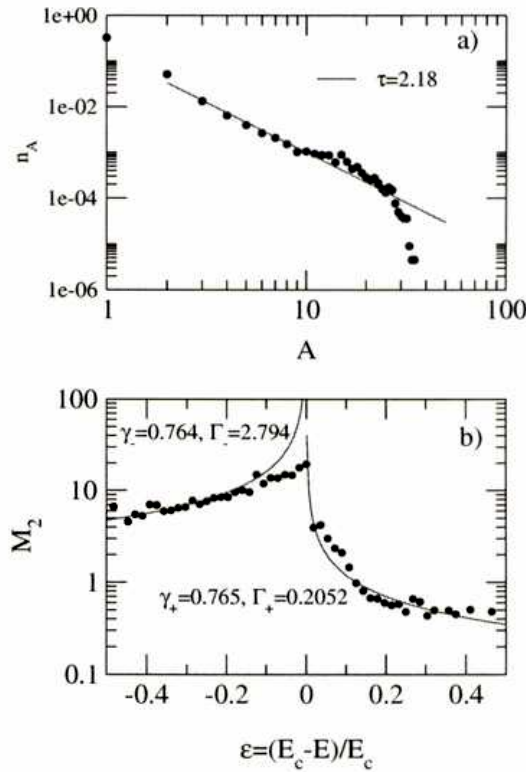


Figura C.1: Ejemplos de fiteos para la obtención del exponente crítico τ , panel a), y γ , panel b) [121]. Ver texto para más detalles.

Finalmente, en lugar del uso directo de estas cantidades, encontramos de mayor utilidad analizar las siguientes cantidades normalizadas:

$$\begin{aligned}
 P^+[X(t)] &\equiv \hat{P}^+[X(t)] / \langle P[X(t \rightarrow \infty), X'(t \rightarrow \infty)] \rangle_{events} \\
 P^-[X(t)] &\equiv \hat{P}^-[X(t)] / \langle P[X(t), X'(t)] \rangle_{events} \\
 P^{dt}[X(t)] &\equiv \hat{P}^{dt}[X(t)] / \langle P[X(t + dt), X'(t + dt)] \rangle_{events}
 \end{aligned} \tag{D.3}$$

donde X' es la partición compuesta por los mismos fragmentos que la partición X , pero cada uno de ellos habiendo evaporado una partícula. Estas nuevas cantidades normalizadas comparan entonces el valor absoluto de los $\hat{P}'$ s con un nivel de referencia de tipo evaporativo. Así, P^+ , P^- y P^{dt} (que llamaremos: coeficientes de persistencia directa, inversa y diferencial respectivamente) nos permiten estimar el tiempo para el cual se alcanza la estabilidad microscópica, i.e. el tiempo de formación de fragmentos.

Bibliografía

- [1] D. Beysens, X. Campi, and E. Pefferkorn, eds., *Fragmentation Phenomena*, (Les Houches), Les Houches Series, World Scientific, 1994.
- [2] R. McCrosky *Spec. Rep. Smithsonian Astrophys. Observ.*, vol. 280, 1968.
- [3] W. Hartmann *Sci. Am.*, vol. 84, 1977.
- [4] J. R. Donnison and R. Sugden *Mon. Not. R. Astron. Soc*, vol. 210, p. 673, 1984.
- [5] H.-P. Cheng *J. Chem. Phys.*, vol. 11, p. 7583, 1999.
- [6] S. Tosto *Applied Physics A*, vol. 68, p. 439, 1999.
- [7] D. Grady and M. Kipp *J. Appl. Phys*, vol. 58, p. 1210, 1985.
- [8] A. Meibom and I. Balslev *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, p. 2492, 1996.
- [9] L. Oddershede, P. Dimon, and J. Bohr *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, p. 3107, 1993.
- [10] D. L. Turcotte, *Fractals and chaos in geology and geophysics*. Cambridge University Press, 1993.
- [11] J. Blink and W. G. Hoover vol. 32, p. 1027, 1985.
- [12] 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.
- [13] H. Jaqaman *Phys. Rev. C*, vol. 29, p. 2067, 1984.
- [14] J. E. Finn *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, p. 1321, 1982.
- [15] M. E. Fisher *Rep. Prog. Phys.*, vol. 30, p. 615, 1967.
- [16] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 62, p. 64603, 2000.
- [17] A. Bonasera, M. Bruno, C. O. Dorso, and F. Mastinu *Nuovo Chimento*, vol. 23, 2000.
- [18] J. B. Elliott *et al. Phys. Lett. B*, vol. 418, p. 34, 1998.
- [19] M. D'Agostino *et al. Nucl. Phys. A*, vol. 650, p. 329, 1999.

- [20] C. O. Dorso, V. Latora, and A. Bonasera *Phys. Rev. C*, vol. 60, p. 034606, 1999.
- [21] X. Campi *Phys. Lett. B*, vol. 208, p. 351, 1988.
- [22] M. L. Gilkes *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 1590, 1994.
- [23] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 49, p. 3185, 1994.
- [24] W. Bauer and W. A. Friedman *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 767, 1995.
- [25] C. O. Dorso *et al. Phys. Rev. C*, vol. 60, p. 34606, 1999.
- [26] J. Pochadzalla *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 1040, 1995.
- [27] Y. G. Ma *et al. Phys. Lett. B*, vol. 390, p. 41, 1997.
- [28] K. Kwiatkowski *et al. Phys. Lett. B*, vol. 423, p. 21, 1998.
- [29] P. J. Siemens *Nature*, vol. 305, p. 410, 1983.
- [30] M. W. Curtin, H. Toki, and D. K. Scott *Phys. Lett. B*, vol. 123, p. 289, 1983.
- [31] T. Hill, *Thermodynamics of small systems*. Dover, 1994.
- [32] D. J. Wales and R. S. Berry *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 2875, 1994.
- [33] J. P. Rose and R. S. Berry *J. Chem. Phys.*, vol. 98, p. 3246, 1993.
- [34] J. Randrup and S. E. Koonin *Nucl. Phys. A*, vol. 356, p. 223, 1981.
- [35] J. B. Bondorf, A. S. Botvina, A. S. Iljinov, I.Ñ. Mishustin, and K. Snep-
pen *Phys. Report*, vol. 257, p. 133, 1995.
- [36] D. H. Gross, *Microcanonical Thermodynamics*. Singapore: World Scien-
tific, 2001. Lecture notes on Physics 66.
- [37] P. Chomaz and F. Gulminelli *Nucl. Phys. A*, vol. 647, p. 153, 1999.
- [38] P. Chomaz, F. Gulminelli, and V. Dufflot *Phys. Rev. E*, vol. 64,
p. 046114, 2001.
- [39] C. O. Dorso and J. Randrup *Phys. Lett. B*, vol. 301, p. 328, 1993.
- [40] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 55, p. 775, 1997.
- [41] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 58, p. 632, 1998.
- [42] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 59, p. 285, 1999.
- [43] V. Serfling *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, p. 3928, 1998.
- [44] J. B. Natowitz *et al. Phys. Rev. C*, vol. 65, p. 034618, 2002.
- [45] A. S. Hirsh *et al. Phys. Rev. C*, vol. 29, p. 508, 1984.

- [46] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, p. 1194, 2000.
- [47] P. Balenzuela, A. Chernomoretz, and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, 2002. En prensa.
- [48] M. D'Agostino *et al. Phys. Lett. B*, vol. 473, p. 219, 2000.
- [49] M. Schmidt *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, p. 1191, 2001.
- [50] F. Gulminelli and P. Chomaz *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, p. 1402, 1999.
- [51] J. M. Carmona, N. Michel, J. Richert, and P. Wagner *Phys. Rev. C*, vol. 61, p. 037304, 2000.
- [52] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, p. 042701, 2002.
- [53] Browman *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, p. 3534, 1993.
- [54] Z.-Y. He *et al. Phys. Rev. C*, vol. 63, p. 011601, 2001.
- [55] O. Schapiro and D. H. Gross *Nucl. Phys. A*, vol. 576, p. 428, 1994.
- [56] D. H. Gross and H. Massman *Nucl. Phys. A*, vol. 471, p. 339, 1987.
- [57] D. H. Gross *Rep. Prog. Phys.*, vol. 53, p. 605, 1990.
- [58] W. Bauer and J. Kapusta, eds., *Advances in Nuclear Dynamics*. World Scientific, 1991.
- [59] T. J. Schlagel and V. R. Pandharipande *Phys. Rev. C*, vol. 36, p. 162, 1987.
- [60] C. O. Dorso and J. Randrup *Phys. Lett. B*, vol. 232, p. 29, 1989.
- [61] R. J. Lenk, T. J. Schlagel, and V. R. Pandharipande *Phys. Rev. C*, vol. 42, p. 372, 1990.
- [62] J. Aichelin and H. Stocker *Phys. Lett. B*, vol. 176, p. 14, 1986.
- [63] Y. Tosaka, A. Ono, and H. Horiuchi *Phys. Rev. C*, vol. 60, p. 064613, 1999. y referencias.
- [64] A. Chernomoretz, M. Ison, S. Ortíz, and C. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 64, p. 0000, 2001.
- [65] A. Strachan, "Fragmentación de sistemas pequeños," Master's thesis, Dto Física, FCEyN UBA, 1997.
- [66] M. S. S. Challa and J. H. Hetherington *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, p. 77, 1988.
- [67] A. J. Cole, *Statistical Models for Nuclear Decay*. Institute of Physics Publishing, 2000.
- [68] D. Jouan *et al. Z. Phys. A*, vol. 340, p. 63, 1991.

- [69] G. Peilert, H. Stocker, and W. Greiner *Rep. Prog. Phys.*, vol. 57, 1994.
- [70] S. P. Baldwin *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, p. 1299, 1995.
- [71] J. Randroup. comunicacion privada.
- [72] O. Fliegans and D. H. E. Gross. arXiv:cond-mat/0102062.
- [73] T. Padmanabhan *Physics Report*, vol. 188, p. 285, 1990.
- [74] B. Farizon *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, p. 4108, 2001.
- [75] L. E. Reichl, *A modern course in Statistical Physics, second Ed.* John Wiley & Sons Inc., 1998.
- [76] K. Huang, *Statistical Mechanics.* J. Wiley & Sons Inc., 1987. 2nd ed.
- [77] J. A. López and C. O. Dorso, *Phase Transformations in Nuclear Matter.* World Scientific, 2000.
- [78] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Physique Statistique.* Mir, 1967.
- [79] P. J. Reynolds *et al.* vol. 10, p. 203, 1977.
- [80] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena.* Oxford Science, 1971.
- [81] C.Ñ. Yang and T. D. Lee *Phys. Rev.*, vol. 87, p. 410, 1952.
- [82] P. Labastie and R. L. Whetten *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, p. 1567, 1990.
- [83] D. J. Wales and I. Ohmine *J. Chem. Phys.*, vol. 98, p. 1321, 1993.
- [84] M. E. Fisher and M.Ñ. Barber *Phys. Rev. Lett.*, vol. 28, p. 1516, 1972.
- [85] D. H. Gross, E. Ecker, and X. Z. Zhang *Ann. Physik*, vol. 5, p. 446, 1996. arXiv:cond-mat/9607150.
- [86] P. Chomaz, "Introduction to phase transition discussion," in *Nucleus-Nucleus Collisions*, p. 209, World Scientific, 2001.
- [87] S. Albergo, S. Costa, E. Costanzo, and A. Rubbino *Nuovo Cimento*, vol. 89, p. 1, 1985.
- [88] J. Pochodzalla *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 1040, 1995.
- [89] S. R. Souza *et al. Phys. Rev. C*, vol. 62, p. 064607, 2000.
- [90] M. D'Agostino *et al. Nucl. Phys. A*, vol. 699, p. 795, 2002.
- [91] A. Coniglio and W. Klein *J. Phys. A*, vol. 13, p. 2775, 1980.
- [92] X. Campi and H. Krivine *Nucl. Phys. A*, vol. 520, p. 46, 1997.
- [93] A. Strachan and C. O. Dorso *Phys. Rev. C*, vol. 56, p. 995, 1997.
- [94] T. Cagin and J. R. Ray vol. 37, p. 247, 1988.

- [95] M. Ison, P. Balenzuela, A. Bonasera, and C. O. Dorso *Eur. Phys. Jour. A*, 2002. En prensa.
- [96] J. L. Lebowitz, J. K. Percus, and L. Verlet *Phys. Rev.*, vol. 153, p. 250, 1967.
- [97] F. Gulminelli *et al. Int. Journ. Mod. Phys. E*, vol. 8, p. 527, 1999.
- [98] S. D. G. J Pan and M. Grant *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, p. 1181, 1998.
- [99] H. Nakanishi and H. E. Stanley *Phys. Rev. B*, vol. 22, p. 2466, 1980.
- [100] J. B. Elliott *et al. Phys. Rev. C*, vol. 55, p. 1319, 1997.
- [101] X. Campi, H. Krivine, and N. Sator *Nucl. Phys. A*, vol. 681, p. 458, 2001.
- [102] B.-A. Li and W. U. Schroder, eds., *Isospin Physics in Heavy Ion Collisions at Intermediate Energies*, (New York), Nova, 2001.
- [103] J. B. Natowitz *et al. Phys. Rev. C*, vol. 52, p. 2322, 1995.
- [104] X. Campi, H. Krivine, and E. Plagnol *Phys. Lett. B*, vol. 385, p. 1, 1996.
- [105] J. A. Hauger *et al. Phys. Rev. C*, vol. 57, p. 764, 1998.
- [106] G. D. Westfall *et al. Phys. Rev. Lett.*, vol. 37, p. 1202, 1976.
- [107] A. Botvina *et al. Phys. Rev. C*, vol. 59, p. 3444, 1999.
- [108] J. Lukasik *et al. Phys. Rev. C*, vol. 55, p. 1906, 1997.
- [109] P. Eudes and Z. Basrak *Eur. Phys. J. A*, vol. 9, p. 207, 2000.
- [110] S. Piantelli *et al. E*, vol. 1, p. 111, 1111.
- [111] L. Gingras *et al. Phys. Rev. C*, vol. 65, p. 061604, 2002.
- [112] L. Gingras, "Etude," Master's thesis, Université Laval, 1998.
- [113] L. Gingras *et al. in Proceedings of the XXXVth Winter Meeting on Nuclear Physics* (I. Iori, ed.), (Bormio, Italy), p. 361, 1998.
- [114] A. Chernomoretz and C. Dorso, "Phase transformation in highly excited clusters," *European Journal of Physics D*. submitted.
- [115] M. Ison, A. Chernomoretz, and C. Dorso en preparacion.
- [116] A. Chernomoretz, M. Kalemkariani, and C. Dorso en preparacion.
- [117] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1989.
- [118] D. Frenel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation, from Algorithms to Applications*. Academic Press, 1996.

- [119] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science, 1997.
- [120] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*. Taylor and Francis, 1992.
- [121] P. Balenzuela. comunicacion privada.

Agradecimientos

Mirando hacia atrás, me doy cuenta que mucho tiempo y trabajo llevó llegar a este punto. Por eso me parece importante reservar este lugar para agradecer a una cantidad de personas que facilitaron mi camino, cada uno a su manera.

Empiezo por Claudio Dorso, a quien le estoy profundamente agradecido por la dedicación y atención que me dedicó en todos estos últimos años. Extraña síntesis de físico y hacedor-de-katanas, de él aprendí no sólo a trabajar en lo que me gusta sino a hacerlo apasionadamente (aunque acaloradamente). Con él se justifica decir: ante cualquier duda, ver al dorso. Me considero muy afortunado de haber sido formado bajo su tutela.

Quiero agradecer también a la gente de la facu. A Aldo Pedro Balen, a *linux-wizard*-Miquel, a Damián, al loco Berlin, al Mison, a *nasty* Peralta, a Vetu, Zeta, Pezzi, Ritchie y Salvatore, con los cuales me divertí soberanamente y aprendí un poco de todo hablando mucho de nada.

Quisiera también dejar expresado mi agradecimiento a la Universidad Pública, que me dió la oportunidad de crecer y saberme útil.

Gracias también a mi familia, en quienes siempre encontré apoyo incondicional por lo que hago.

Desde hace doce años que tengo la dicha de tenerte junto a mí. Mi mujer, mi amiga, mi compañera. Me diste a Lulita, me das el mundo. Uno, dos, tres mil gracias son nada para corresponder el saberme cotidiano de tu presencia. Sin embargo lo intento. Gracias Sil por todo eso.