

Tesis Doctoral

Transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos

Giménez Molinelli, Pedro A.

2014-05-21

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:

Giménez Molinelli, Pedro A.. (2014-05-21). Transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

Cita tipo Chicago:

Giménez Molinelli, Pedro A.. "Transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2014-05-21.

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

Transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos

*Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área de Ciencias Físicas*

Por: Pedro A. GIMÉNEZ MOLINELLI

Director de Tesis: Dr. Claudio O. DORSO

Consejero de Estudios: Dr. Hernán G. SOLARI

Lugar de Trabajo: Departamento de Física,
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

30 de marzo de 2014

“Oh great sage, Nasrudin,” said the eager student. “I must ask you a very important question, the answer to which we all seek: What is the secret to attaining happiness?”

Nasrudin thought for a time, then responded. “The secret of happiness is good judgment.”

“Ah,” said the student. “But how do we attain good judgement?”

“From experience.” answered Nasrudin.

“Yes”, said the student. “But how do we attain experience?”

“Bad judgment.”

Joel Ben Izzy - *The Beggar King and the Secret of Happiness*

Resumen

En la presente tesis estudiamos transiciones de fase en sistemas formados por partículas que interactúan a través de potenciales clásicos que modelan las interacciones entre nucleones. Mediante técnicas de dinámica molecular, simulamos colisiones de Iones Pesados en el rango de energías en el que se observa Multifragmentación. Auxiliados con avanzados algoritmos de reconocimiento de fragmentos, que utilizan información de correlaciones en el espacio de fases y no solo configuracional, investigamos el origen de diversas señales que permiten caracterizar el proceso de multifragmentación como una transición de fase: bimodalidad en la distribución del parámetro de orden, y fluctuaciones en el tamaño del fragmento más pesado. Mostramos que esas señales están determinadas en etapas muy tempranas, antes de que el sistema logre alcanzar un equilibrio que justifique plenamente el uso de herramientas de la termodinámica usual. Asimismo, determinamos que la observación de bimodalidad está fuertemente relacionada con los protocolos de selección de eventos. Investigamos además la factibilidad de utilizar el parámetro α de Isoscaling para determinar el término de simetría en la ecuación de estado, como se ha propuesto. Con ese fin, ajustamos las energías de “núcleos” con una fórmula en el espíritu de la “fórmula semi-empírica de masas” para dos parametrizaciones del potencial nuclear y mostramos que presentan distintos términos de simetría. Y luego, a partir de simulaciones adecuadas, observamos que en general es imposible distinguir los resultados de los dos modelos debido a efectos entrópicos. Con el mismo modelo de interacción nuclear y un tratamiento adecuado de la interacción de Coulomb, extendimos el estudio a transiciones de fase morfológicas en sistemas “infinitos” de nucleones, como un modelo de “materia de estrellas de neutrones”. Para ello realizamos simulaciones de dinámica molecular bajo condiciones periódicas de contorno a temperatura y densidad fijas. A densidades de sub-saturación y bajas temperaturas, como las que ocurrirían en la corteza de las estrellas de neutrones, este modelo logra producir una serie de fases in-homogéneas llamadas “Pasta Nuclear”, que surgen de la competencia entre las interacciones Nuclear y Coulombiana para nucleones en “bulk”. Desarrollamos un conjunto de herramientas de caracterización dinámica y topológica que permiten una clasificación unívoca de esas fases. Estudiando el rol de la interacción de Coulomb en la formación de estas estructuras, hallamos que estructuras similares pueden ser producidas en simulaciones incluso sin esa interacción, debido a efectos secundarios de las condiciones periódicas de contorno que, sorprendentemente, no habían sido descritos en la literatura. Esto nos permitió describir con precisión los “efectos de tamaño finito”, propios de este tipo de simulaciones, e identificar las estructuras “reales” de aquellas que están afectadas por aspectos artificiales de las simulaciones.

Palabras Clave: Colisiones de Iones Pesados, termodinámica en sistemas finitos, Dinámica molecular, Astrofísica nuclear, ecuación de estado de la materia nuclear.

“Phase transitions in finite and infinite nuclear systems”

Abstract

In the present thesis we study phase transitions in systems of particles that interact through classical potentials which mimic the nuclear interaction. Using molecular dynamics techniques we simulate Heavy Ion collisions in the energy range where multifragmentation is observed. Assisted with advanced fragment recognition algorithms, which use information from the whole phase space and not only configurational, we investigated the origin of several signals that allow to characterize multifragmentation as a phase transition: bimodality in the order parameter distribution and large fluctuations in the mass of the largest fragment. We show these signals to be established at early stages, before the system can reach an equilibrium which would justify the use of usual thermodynamics tools. Also, we determined that bimodality is strongly related to the event selection criterion. In addition, we investigated the factibility of using the isoscaling parameter α to determine the value of the symmetry term in the nuclear equation of state. To that effect, we adjusted the energy of “nuclei” with a formula in the spirit of the “Semi-empirical Mass Formula” for two parametrizations of the nuclear potential and showed that they present different symmetry terms. Then, with the appropriate simulations, we showed that it is in general impossible to distinguish the results from both models due to entropic effects dominating. With the same model of nuclear interaction and an adequate treatment of the Coulomb interaction, we extended the study to morphological phase transitions in “infinite” systems of nucleons, as a model of “neutron star matter”. To do so we performed molecular dynamics simulations under periodic boundary conditions at fixed temperature and density. At sub-saturation densities and low temperatures, as those expected in the crust of neutron stars, this model is able to produce a series of non-homogeneous phases known as “Nuclear Pasta”, which emerge from the competition of nuclear and Coulomb interaction for nucleons in bulk. We developed a set of dynamical and topological characterization tools that allow for a thorough classification of those phases. When studying the role of the Coulomb interaction in the formation of these structures, we found that similar structures can be produced in simulations without said interaction but due to secondary effects of the periodic boundary conditions which, surprisingly, had not been described in the literature. This enabled us to describe with precision the role of “finite size effects” and to identify the “true Pasta” from those affected by artificial aspects of the simulations.

Keywords: Heavy Ion Collisions, thermodynamics in finite systems, Molecular Dynamics, Nuclear Astrophysics, Nuclear equation of state.

Abreviaturas

CM	Centro de Masa
QP	Cuasi Proyectil (quasi-projectile)
QT	Cuasi Blanco (quasi-target)
NM	Materia Nuclear
EOS	Ecuación de Estado
CPC	C ondiciones P eríodicas de C ontorno
NS	Estrellas de Neutrones
NSM	Materia de Estrella de Neutrones

Índice general

Abstract	II
Abreviaturas	IV
1. Introducción	1
1.1. Multifragmentación Nuclear	1
1.1.1. Anatomía de una Reacción de Iones Pesados	1
1.1.2. Modelos para Describir Reacciones de Iones Pesados	3
1.2. Colisiones y la EOS Nuclear	6
1.2.1. Posible Transición de Fase en Colisiones de Iones Pesados	7
1.2.2. Transiciones de Fase en Sistemas Infinitos	9
1.3. El término de simetría en la mira: Isoscaling	15
1.4. Sobre la necesidad de una descripción dinámica microscópica	17
2. Modelo CMD e Iones Pesados	20
2.1. Modelo CMD	20
2.1.1. Simulando colisiones en CMD	21
2.1.2. Reconocimiento de Fragmentos en CMD	22
2.2. Éxitos previos de CMD	24
3. Bimodalidad en CMD	29
3.1. Bimodalidad en colisiones CMD	29
3.1.1. Colisiones con parámetro de impacto variable	31
3.1.2. Colisiones centrales a energía variable	39
3.1.3. Evolución temporal	43
4. Isoscaling en CMD	48
4.1. Energía de simetría en CMD	48
4.1.1. Entropía de simetría	49
4.1.2. Dos gotas líquidas en CMD	51
4.2. Isoscaling para las dos parametrizaciones de CMD	52
4.2.1. Isoscaling en sistemas confinados	52
4.2.2. Isoscaling en sistemas en expansión	54
5. Estrellas de Neutrones	57
5.1. Ecuación de estado de la materia nuclear	57
5.1.1. Vida y muerte de una estrella masiva	57

5.1.2.	Estrellas de Neutrones por dentro	59
5.1.3.	Vínculos entre física de Iones Pesados y astrofísica nuclear	60
5.1.4.	Fases “Pasta”	61
6.	Extensión CMD-Infinito	64
6.1.	Simulando Sistemas Nucleares “Infinitos”: Materia de Estrellas de Neutrones	64
6.1.1.	Listas de vecinos (“Cell linked Lists”)	65
6.1.2.	El Problema con Coulomb	67
6.1.3.	Apantallamiento de Thomas-Fermi	67
6.1.4.	Sumas de Ewald	68
6.2.	Buscando Pastas CMD. Primeros resultados	70
6.2.1.	Comentarios sobre la Heurística	74
7.	Caracterización de las “Pastas”	77
7.1.	Fragmentos en sistemas infinitos	77
7.1.1.	Reconocimiento de Fragmentos Bajo Condiciones Periódicas de Contorno	77
7.1.2.	Distribuciones de fragmentos	79
7.1.3.	Contenido isotópico de los fragmentos	81
7.2.	Caracterización dinámica	82
7.2.1.	Desplazamiento Cuadrático Medio de nucleones	82
7.2.2.	Persistencia de Fragmentos	84
7.3.	Caracterización estructural	84
7.3.1.	Función de correlación de pares	84
7.3.2.	Factor de estructura	86
7.4.	Caracterización topológica y morfológica	87
8.	Rol de Coulomb I: Materia Nuclear Ideal	91
8.1.	Sistemas con Interacciones Competitivas	91
8.2.	Sorpresa: “Pasta” Sin Coulomb	92
8.3.	Efectos secundarios de las CPC	98
8.3.1.	Consideraciones geométricas I: Volumen y superficie.	100
8.3.2.	Tamaño finito y tamaño pequeño	103
8.3.3.	Superficies Mínimas Tríplemente Periódicas	107
8.3.4.	Consideraciones Geométricas II: Celdas de distintas geometrías	108
8.3.5.	Minimización de superficie bajo distintas CPC	110
8.3.6.	CMD Sin Coulomb bajo distintas CPC	112
8.3.7.	CMD Con Coulomb bajo distintas CPC	114
9.	Rol de Coulomb II: Longitud de apantallamiento crítica	118
9.1.	Longitud de apantallamiento histórica	118
9.2.	Longitud de apantallamiento “Crítica”	119
9.3.	Pasta para todos	120
9.4.	Conclusiones	122
10.	Conclusiones y perspectivas	125

A. Re-Pesado de Histogramas	132
B. Termostato de Andersen	135
C. Condiciones Periódicas de Contorno en celdas no cúbicas	137
D. Placas Gráficas: CUDA	141
E. Lennard-Jones más Coulomb Apantallado 2D	145
E.1. LJ + Coulomb 2D bajo CPC	145
E.2. LJ + Coulomb 2D con paredes reflectantes	148
Bibliografía	150
Agradecimientos	159

Capítulo 1

Introducción

1.1. Multifragmentación Nuclear

A partir del desarrollo en la década del '80 de dispositivos experimentales que permitieron acelerar iones pesados a energías desde unos pocos MeV por nucleón hasta unos GeV por nucleón, se ha observado un canal de decaimiento caracterizado por la producción de muchos fragmentos de masas intermedias. Siendo que las masas de esos fragmentos son mayores que las partículas evaporadas pero menores que los productos de fisión o residuos de emisión por evaporación, este canal de decaimiento es intrínsecamente diferente a los modos de fisión, evaporación o vaporización total del núcleo [1, 2]. Este comportamiento, dominante a energías de excitación en el dominio de Fermi, es el objeto del campo de investigación vagamente denominado Multifragmentación Nuclear (ver [3, 4] para reseñas recientes).

1.1.1. Anatomía de una Reacción de Iones Pesados

Se suelen invocar dos escenarios mentales para dar cuenta del origen de esos fragmentos de masas intermedias. Para colisiones muy periféricas a energías relativamente altas ($E_{beam} \gtrsim 100 MeV$) se definen tres regiones a partir de la geometría idealizada de la colisión (ver figura 1.1, panel b). Esencialmente, se consideran dos esferas con sus centros desplazados una distancia b en una dirección transversal al eje de la colisión, y que se superpongan parcialmente. La región del solapamiento se denomina “Fireball”, y los dos trozos formados por los nucleones de proyectil y blanco que no participan directamente en la reacción conforman los denominados “cuasi proyectil” y “cuasi blanco” (QP y QT respectivamente). La imagen dinámica es la siguiente: debido a la alta velocidad

relativa, los nucleones que están ubicados en la región de solapamiento (materia participante) sufren colisiones de dos cuerpos muy energéticas y conforman una fuente caliente de partículas livianas [5]. Los nucleones ubicados fuera de la *fireball* (llamada materia espectadora) continúan moviéndose casi con su velocidad inicial en el sistema del CM (lo que les vale su denominación de *QP* y *QT*) pero excitados. La energía depositada en la materia espectadora es relativamente menor a la de la *fireball* y comparable con la energía de unión del sistema en su estado fundamental. Los fragmentos *QP* y *QT* pueden des-excitarse mediante por el canal de multifragmentación. Pero el escenario se ve complicado puesto que partículas de masas intermedias también pueden ser emitidas desde la región de la *fireball*, especialmente para colisiones no tan periféricas. En ese caso pueden identificarse hasta tres fuentes de fragmentos de masas intermedias por evento.

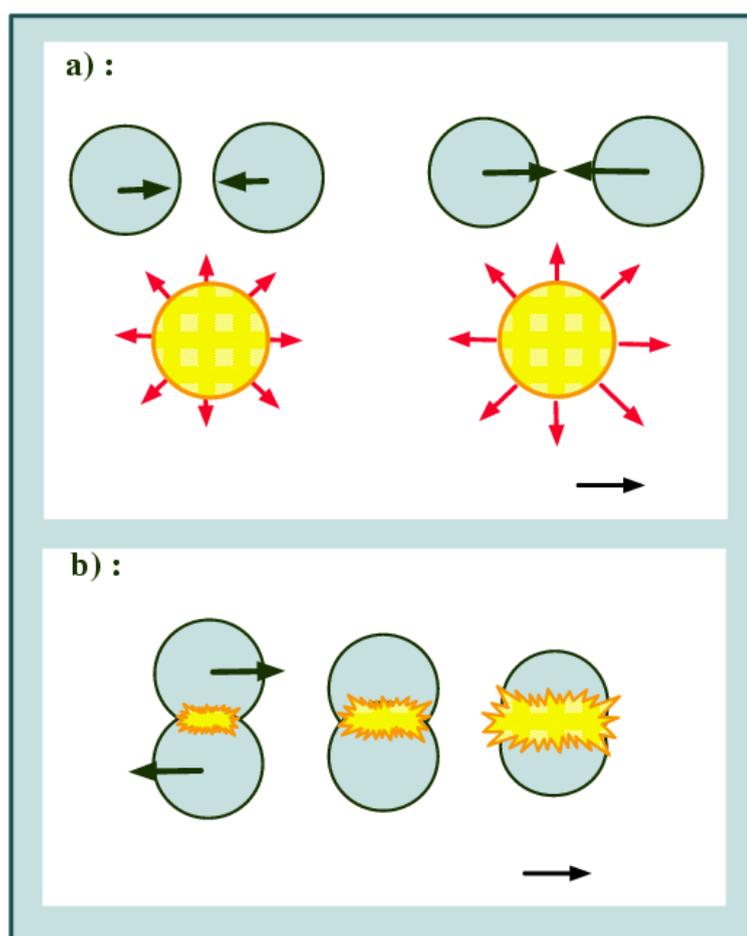


FIGURA 1.1: Concepción del artista de colisiones centrales (a) y periféricas (b).

El otro escenario posible corresponde a colisiones centrales con energías menores (del orden de unas decenas de MeV por nucleón), en las que los núcleos sobrellevan una fusión incompleta o sufren colisiones altamente in-elásticas y posteriormente fragmentan. Esta situación, si bien es mucho más sencilla de describir, ocurre con muy baja probabilidad en los experimentos. En ambos casos se generan sistemas nucleares excitados que pueden decaer mediante multifragmentación.

El interés en la multifragmentación radica en que permite explorar el espacio de fases de sistemas nucleares excitados en diversas condiciones: Es aceptado que las fuentes QT , QP o productos de fusión incompleta se forman casi a la densidad de saturación, por lo que son potencialmente útiles para investigar propiedades de la EOS nuclear (ver sección 1.2) a bajas densidades. Las partículas producidas en la *fireball* o en colisiones centrales muy energéticas podrían, en cambio, proveer información sobre el comportamiento de sistemas nucleares a altas densidades y “temperaturas”, aunque probablemente fuera del equilibrio. No obstante, para hacer realidad esas promesas es necesario determinar el estado de las fuentes de al momento de fragmentarse; y dado que los únicos observables experimentales de los que se dispone que son los fragmentos asintóticos, es de importancia primordial contar con modelos teóricos que describan adecuadamente todas las etapas de la reacción. Esos modelos, además, deben ser puestos a prueba con simulaciones numéricas cuidadosas que permitan interpretarlos adecuadamente.

1.1.2. Modelos para Describir Reacciones de Iones Pesados

Se han propuesto diversos enfoques para modelar el comportamiento de sistemas nucleares, en particular reacciones, de una manera abordable con simulaciones numéricas. Aunque ninguna teoría puede proveer una descripción perfecta de las propiedades y dinámica de sistemas nucleares, cada enfoque tiene sus ventajas y desventajas, y pueden complementarse mutuamente.

Modelos estadísticos

Los primeros estudios sobre fragmentación nuclear en la década de los ‘80 se basaron en modelos estadísticos. El punto de partida de estos modelos es asumir la existencia de una fuente de fragmentos de una masa, carga, momento angular y energía de excitación dados, que está completamente equilibrada al momento de producirse la fragmentación. Este supuesto equilibrio reposa sobre la hipótesis de la existencia de un volumen de congelamiento (“Freeze-out volume”), dentro del cual existe un ensamble de fragmentos ya formados y bien definidos que coexisten en equilibrio [6–11]. La descripción de la fragmentación en estos modelos consiste en dar la probabilidad de que el sistema fragmente

de una determinada manera a partir del número de estados accesible por el sistema en el volumen de freeze-out. Ese número de estados generalmente se escribe en el ensamble canónico, gran-canónico o micro-canónico [12, 13], aunque existen variantes que trabajan en otros ensambles [14]. Estos modelos son muy utilizados por su sencillez, versatilidad, y por ser exitosos en la descripción de muchos datos experimentales (en particular, distribuciones de fragmentos). Pero por otro lado son muy cuestionados por ignorar completamente los aspectos dinámicos del proceso y por utilizar herramientas de termodinámica de equilibrio en sistemas finitos, no extensivos y fuera del equilibrio [15, 16] (en particular, fracasan en describir adecuadamente la curva calórica). En particular, en esta clase de modelos es imposible incorporar consistentemente el modo colectivo de expansión que, como ha sido demostrado [17], desempeña un papel fundamental en la forma de la curva calórica.

Modelos de transporte

Para incorporar efectos dinámicos en la descripción, hacia fines de los ‘90 se desarrollaron modelos basados en teorías de transporte. Utilizaron aproximaciones clásicas, semi-clásicas y cuánticas. Comenzando por los semi-clásicos, una clase de modelos conocidos genéricamente como de *BUU* se basa en la ecuación de Vlasov-Nordheim [18], también conocida como la ecuación de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck [19]. Estos modelos siguen la evolución temporal de la función de distribución de un cuerpo, $f(\vec{r}, \vec{p})$ bajo la acción de un potencial de campo medio $U(\vec{r})$. La incorporación de dinámica y su interpretación semi-clásica son las mayores ventajas de los modelos basados en *BUU*. Sin embargo, para que puedan producir fragmentos, es necesario introducir fluctuaciones “a mano”. Y aún más perturbaciones ajenas a la teoría si se pretende describir decaimientos secundarios u otras características más realistas [20]. Los aspectos dinámicos rigurosos de las ecuaciones originales, se ven ensombrecidos por las sucesivas capas de pos-procesamiento a las que deben ser sometidas las soluciones para poder producir fragmentos.

Modelos dinámicos

Existen también modelos dinámicos “microscópicos”, a falta de mejor palabra. Estos modelos parten de una descripción de los sistemas nucleares basados en nucleones individuales. Los hay clásicos y presuntamente cuánticos (o, más correctamente, semi-clásicos). Entre los modelos semi-clásicos más populares se encuentra el modelo de dinámica molecular conocido como *QMD* [21]. A pesar de su pretensión de cuanticidad, se basa en resolver ecuaciones de movimiento semi-clásicas de partículas representadas por paquetes de onda de ancho fijo. Esos paquetes de onda se mueven bajo la acción de potenciales de

dos cuerpos y sufren colisiones estocásticas. Los potenciales de interacción son de campo medio y en general se derivan de funcionales de la densidad de tipo Skyrme [22]. Esto le permite al usuario variar la compresibilidad de la EOS, su término de simetría, etc. a través del campo medio. El método es tan flexible que permite incluir en la dinámica de mecanismos de bloqueo de Pauli[21], el uso de secciones eficaces de scattering nucleón-nucleón dependientes del isospín[23], interacciones dependientes de los momentos y otras variaciones a gusto del usuario. La principal ventaja de *QMD* sobre los modelos de transporte es que incorpora intrínsecamente correlaciones de muchos cuerpos, lo que permite, a su vez, definir fragmentos de una manera más directa, mediante cualquiera de los algoritmos para reconocer fragmentos que se describirán en la sección 2.1.2. No obstante, las propiedades de esos fragmentos suelen ser muy pobres (en particular, son inestables en el tiempo [24–26]), y para lograr una descripción más robusta de fragmentos se recurre al uso de códigos externos que ofuscan el rol de la dinámica en formación de los mismos. Normalmente, éstos son construidos con un modelo de coalescencia basado en las distancias y momentos relativos de pares de nucleones [27].

Por último, están los modelos dinámicos clásicos. El uso de dinámica molecular clásica para estudiar reacciones nucleares fue introducido por Wilets en [28] y continuado por Dorso [29–31]. En esos trabajos, para emular efectos cuánticos, los autores introdujeron potenciales dependientes del momento de las partículas. En otra línea, y de particular importancia para este trabajo, está el modelo conocido como *CMD*. El modelo fue diseñado por el grupo de Urbana-Champaign [32] para que pudiera reproducir las predicciones de la ecuación de Vlasov-Nordheim y proveer al mismo tiempo una descripción más completa de la dinámica de las reacciones de iones pesados. Como se describirá en mayor detalle en la sección 2.1, el modelo está basado en un juego de potenciales clásicos desarrollado por V. Pandharipande que describe cualitativamente la interacción nuclear. Esos potenciales son una combinación de potenciales de Yukawa cuyos parámetros están ajustados para reproducir correctamente propiedades de equilibrio de la NM como densidad, energía por partícula y compresibilidad.

La única desventaja aparente de *CMD* es la falta de efectos cuánticos como el bloqueo de Pauli, que a bajas energías de excitación impide una correcta descripción de la estructura nuclear y de excitaciones. Sin embargo, las energías de interés para multifragmentación son superiores a la energía de Fermi de los nucleones. La gran cantidad de energía depositada en una colisión abre el espacio de fases accesible lo suficiente como para que los efectos de Pauli sean menores [3]. Puede asumirse que el rol de los efectos cuánticos en la dinámica de las colisiones a las energías de interés está incorporado cualitativamente en el potencial, dada su efectividad para reproducir adecuadamente las secciones eficaces nucleón-nucleón [32] y las distribuciones de velocidades paralelas experimentales de los productos de una colisión (figura 1.2). En el capítulo 2 describiremos en profundidad las

características del modelo y haremos una reseña de sus contribuciones a la comprensión de las reacciones de multifragmentación.

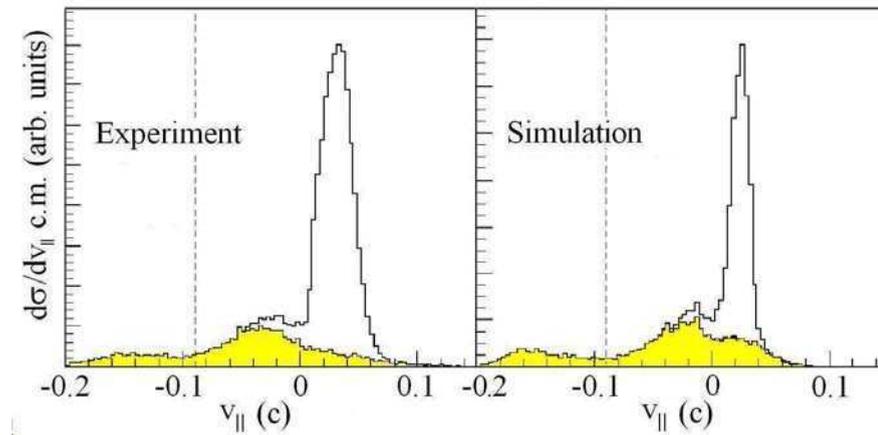


FIGURA 1.2: Distribuciones de velocidades paralelas para colisiones $^{58}\text{Ni} + \text{C}$, como aparece en [33].

Vale remarcar que el uso de modelos dinámicos clásicos como el utilizado en este trabajo tiene un objetivo principalmente pedagógico y exploratorio. Como advierten sus creadores, cualquier comparación directa de los resultados de simulaciones con datos experimentales debe hacerse con cuidado. Debe entenderse que estos modelos sirven para proveer un marco de referencia transparente que permita clarificar algunas propiedades de la fenomenología de sistemas nucleares, y no de dar una descripción cuantitativamente precisa de todos los aspectos de la interacción nuclear.

1.2. Colisiones y la EOS Nuclear

La NM infinita es una abstracción teórica, que no debe confundirse con la materia de la que están hechos los núcleos atómicos. Está definida en el límite termodinámico como un sistema eléctricamente neutro compuesto por un número infinito de nucleones que interactúan según el potencial nuclear, pero no Coulomb. Se llama simétrica cuando está compuesta por el mismo número de protones y neutrones. Por su definición, es posible describir la NM desde la termodinámica de equilibrio y caracterizarla por medio de una EOS:

$$U(\rho, T, \delta) \tag{1.1}$$

donde ρ es la densidad, T la temperatura y $\delta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho}$ caracteriza la asimetría entre la densidad de neutrones ρ_n y de protones ρ_p . El grado de libertad de Isospín (incorporado

a través de δ) suele aparecer como un término aditivo respecto de la EOS para NM simétrica [34].

El programa de intentar caracterizar los sistemas nucleares con una EOS enfrenta una serie de desafíos fundamentales y técnicos. Una dificultad fundamental de este enfoque, de índole teórico, es que la descripción en términos de una EOS es adecuada para sistemas termodinámicos (infinitos, extensivos y en equilibrio) pero experimentalmente sólo tenemos acceso a sistemas nucleares finitos y no extensivos: Los núcleos atómicos. Más aún, esos núcleos se encuentran a densidad “normal” (ρ_0) y a temperatura $T = 0$. En las reacciones nucleares se producen, por un breve instante, sistemas densos y excitados que pueden utilizarse como sondas de algunas características de la EOS, pero esas reacciones son procesos de muy corta duración, en los que no resulta claro que pueda alcanzarse un equilibrio. Para superar esas dificultades es necesario vincular conceptos y herramientas de la termodinámica de equilibrio con observables extraídos de esas reacciones. Eso supone, a su vez, una serie de dificultades técnicas tanto en la detección de señales experimentales claras (no ambiguas) como en la construcción de modelos teóricos y simulaciones numéricas confiables que permitan interpretar adecuadamente esas señales.

1.2.1. Posible Transición de Fase en Colisiones de Iones Pesados

Dadas las características generales de la interacción nuclear (repulsiva a muy corto rango y atractiva a rango finito), la EOS nuclear sería similar a la de un fluido de Van der Waals. En particular, es sabido que un fluido de Van der Waals presenta una región de inestabilidad a densidades y temperaturas en las que ocurre una transición de fase líquido-vapor [35–37], por lo que es esperable que lo mismo suceda para NM.

Se ha propuesto que la multifragmentación nuclear es la manifestación de la existencia de esa región de inestabilidad en la EOS nuclear y de la correspondiente transición de fase. Pero el hecho de que la multifragmentación ocurre en sistemas finitos en expansión y fuera del equilibrio oscurece esta interpretación.

El trabajo que primero atrajo atención sobre el proceso de multifragmentación como la posible manifestación de la ocurrencia de una transición de fase (en particular, de segundo orden) en colisiones de iones pesados, fue la observación experimental hecha por el grupo de Purdue [38] (ver figura 1.3) de que los espectros de masa de los fragmentos producidos en multifragmentación podían ajustarse por una ley de potencias:

$$n_s \propto s^{-\tau} \tag{1.2}$$

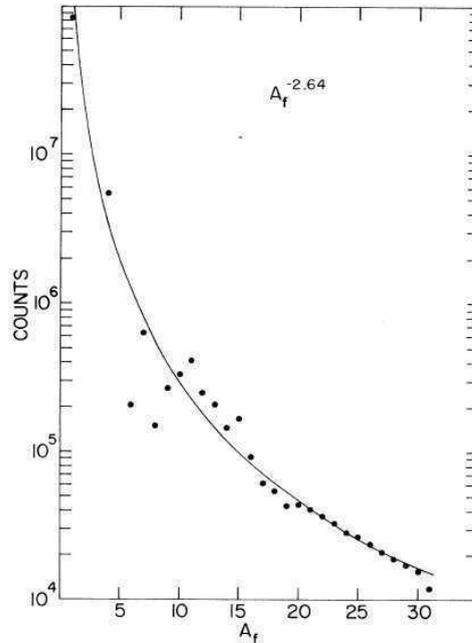


FIG. 4. Mass yield of fragments from xenon vs mass number, A_f , corrected for effects discussed in text.

FIGURA 1.3: Distribución experimental de masas tipo ley de potencias tomada de [38].

donde n_s es la cantidad de fragmentos de tamaño s . Esta observación causó un gran revuelo. Muchos investigadores consideraron esta observación como evidencia de la ocurrencia de la transición de fase sugerida teóricamente para NM, puesto que modelos teóricos como el de *la gotita* de Fisher[39], predice este comportamiento en el punto crítico de una transición de fase tipo líquido-vapor. Sin embargo, a pesar del entusiasmo inicial, desarrollos posteriores determinaron que la asociación de los espectros de masas obtenidos con la ocurrencia de fenómenos críticos fue prematura (ver sección 1.2.2. En todo caso, la propuesta de vincular la multifragmentación nuclear con una transición de fase resulta demasiado atractiva. En ese sentido, el trabajo del grupo de Purdue desencadenó una febril actividad.

A partir de la década de los '90, gracias al desarrollo detectores de ángulo sólido completo, que permiten detectar prácticamente todos los fragmentos producidos evento a evento (ver [40–43], por ejemplo), hubo gran actividad experimental consagrada a la caracterización de la transición de fase asociada con la multifragmentación. En particular, se ha puesto mucho énfasis en la determinación de la curva calórica y otros aspectos termodinámicos (ver [44–50], por ejemplo) o en la ocurrencia de fenómenos críticos [5, 51–54]. Todos estos esfuerzos son parte de un programa a largo plazo por lograr una descripción completa y consistente de la EOS para la NM, que incluya dependencia con la densidad, temperatura y asimetría de isospín. Ahora, ese programa se enfrenta desde el punto de

partida con la dificultad de pretender describir una reacción de iones pesados en términos de una EOS, más adecuada para sistemas termodinámicos en equilibrio. Por eso la extensiva actividad experimental desarrollada desde los '90 estuvo acompañada por un activo desarrollo y refinamiento de modelos teóricos y computacionales que permitieran dar cuenta de la fenomenología observada. Eso requirió extender las herramientas de la termodinámica usual a sistemas finitos y no extensivos (para una lista groseramente incompleta de los trabajos realizados en este aspecto ver [9, 10, 13, 14, 16, 17, 33, 55–60]).

A continuación presentamos una breve reseña de los conceptos termodinámicos elementales relevantes para la descripción de una transición de fase en sistemas infinitos en equilibrio (sección 1.2.2). Luego, en las secciones 1.2.2 y 1.2.2 se describirá brevemente como se propuso extender estos conceptos a sistemas finitos.

1.2.2. Transiciones de Fase en Sistemas Infinitos

Un sistema termodinámico, como un fluido de Van der Waals, puede existir en varios estados (o “fases”) que presentan comportamientos macroscópicos muy distintos. En una transición de fase para una sustancia pura, el potencial químico (o sea, la energía libre de Gibbs $G(T, P)$) debe cambiar de manera continua [35–37], pero no necesariamente sus derivadas. El comportamiento de las derivadas de la energía libre de Gibbs permite establecer una clasificación de las transiciones. Aquellas que van acompañadas de una discontinuidad en la derivada primera de $G(P, T)$ son llamadas *de primer orden*. Las transiciones de tipo líquido-vapor entran en esta categoría. Por otra parte, se denomina *transiciones continuas* a aquellas que no presentan discontinuidades hasta derivadas de orden superior al primero. El modelo de percolación es un típico ejemplo de sistema con una transición continua [61].

Consideremos un sistema que puede sobrellevar una transición de primer orden. Una de estas fases se manifiesta a altas temperaturas mientras que la otra lo hace a bajas temperaturas. La transición entre una y otra puede ocurrir reversiblemente sólo a la temperatura de transición T_t , que será función de alguna variable de control (como por ejemplo, la presión, en el caso de una transición líquido-vapor). Cuando el sistema se enfría en un rango infinitesimal de temperaturas en torno a T_t y ocurre la transición, el sistema libera una cantidad de energía ΔH llamada *calor latente* que está relacionada con cambios en la estructura microscópica del sistema y, consecuentemente, un cambio brusco en la entropía. La existencia de esta variación finita de energía en un rango infinitesimal de temperaturas es la responsable de que la derivada primera presente una discontinuidad.

Si bien en general es $\Delta H \neq 0$, puede suceder que exista un límite, para algún valor de las variables de control, en el cual $\Delta H = 0$. Esos valores de las variables de control definen el *punto crítico*. Allí, al atravesar la temperatura crítica T_c la transición ocurre de manera continua (i.e. sin discontinuidad en la derivada primera de la energía libre). Además, para $T \geq T_c$ la tensión superficial del líquido se anula y la distinción entre las dos fases pierde sentido.

Por otro lado existen transiciones de fase continuas que no están asociadas a un escenario límite de una transición de primer orden. Por ejemplo, la transición observada en el modelo de percolación mencionado arriba o la aparición de una fase ferromagnética en el hierro son transiciones siempre continuas. A diferencia de lo que ocurre en transiciones de primer orden, en una transición continua, al atravesar la temperatura crítica T_c la entropía del sistema no presenta discontinuidades por lo que tampoco existe un calor latente asociado.

En el caso de la NM, y explotando nuevamente la analogía de un fluido de Van der Waals, hay que tener en mente que ésta puede presentar los dos tipos de transiciones.

De todos modos, para vincular la descripción macroscópica (i.e. termodinámica) de una transición de fase con el proceso de multifragmentación, es necesario recurrir a modelos que describan el comportamiento microscópico de sistemas que macroscópicamente presentan una. El modelo de la gota de Fisher [39] es particularmente adecuado para ese propósito. A continuación presentamos una breve descripción de los aspectos del modelo que son más relevantes para esta tesis.

Modelo de Fisher

El modelo de la gotita de Fisher describe propiedades de la distribución de tamaños de *clusters* de partículas (gotitas de fase líquida) en equilibrio con partículas libres (una fase gaseosa) cerca de la transición.

Pensemos una gotita esférica de A partículas que se ha formado espontáneamente por fluctuaciones térmicas en el seno de un gas en equilibrio. El gas originalmente consistía de $A + B$ partículas. La energía libre del sistema en esa configuración sería [3]:

$$G_{\text{congota}} = \mu_l A + \mu_g B + 4\pi R^2 \sigma(T) + T\tau \ln A \quad (1.3)$$

donde μ_l y μ_g son los potenciales químicos de equilibrio a esa temperatura para las fase líquido y vapor puras respectivamente, la función $\sigma(T)$ es la tensión superficial y cumple $\sigma(T \rightarrow T_c) \rightarrow 0$ y el parámetro τ se llama exponente de Fisher. El último termino de

la ecuación 1.3 es un término de entropía que da cuenta de las formas posibles de una gota.

Para a fase gaseosa uniforme la energía libre sería:

$$G_{singota} = \mu_g(A + B) \quad (1.4)$$

Modelando la formación espontánea de una gota según la Ley de Arrhenius [37], la probabilidad de que se forme la gota es:

$$p \sim e^{-\beta\Delta G} \quad (1.5)$$

con $\beta = 1/T$ y $\Delta G = G_{congota} - G_{singota}$. Considerando las energías de los estados con y sin gota dadas por las ecuaciones 1.3 y 1.4, y que la gota tiene un radio dado por $R = r_0 A^{2/3}$, la probabilidad de que se forme esa gota de masa A resulta

$$Y(A) = Y_0 A^{-\tau} \times \exp\left(A \frac{\mu_g - \mu_l}{T} - A^{2/3} \frac{4\pi\sigma(T)r_0^2}{T}\right) \quad (1.6)$$

Esta ley de escala se suele llamar “Scaling de Fisher”. Como puede verse, la probabilidad de formación de una gota en equilibrio está caracterizada por un el producto de una ley de potencias y dos factores exponenciales (función de scaling). Uno de los factores exponenciales está asociado con el volumen de la gota (exponente lineal en A ; favorece a la fase vapor) y otro asociado con su superficie (proporcional a $A^{2/3}$; favorece la coalescencia de gotas para minimizar superficie). Para $T < T_c$, existe una competencia entre las fase vapor y líquida. Como resultado de esa competencia, el estado del sistema se caracteriza por la presencia de una gota de gran tamaño (líquido) y una gran cantidad de gotas pequeñas (vapor). Debido a la ausencia de gotas de tamaños intermedios, la distribución de tamaños tendrá una forma tipo U . Para $T > T_c$ domina el factor exponencial que favorece la fase vapor y la distribución de tamaños de gotas será prácticamente exponencial decreciente. Para $T = T_c$, ocurre que $\mu_g \rightarrow \mu_l$ y $\sigma(T = T_c) = 0$, por lo que la distribución de tamaño de gotas toma una forma de ley de potencias.

En el contexto del trabajo del grupo de Purdue, el ajuste original de la figura 1.3 reportaba un exponente $\tau \sim 2,64$, demasiado alto para corresponder a una clase de universalidad conocida. Pero posteriormente se detectó un error sistemático en el tratamiento de los datos: se consideraban todos los fragmentos, independientemente de su origen y sin clasificar los eventos por energía.

En todo caso, la observación de la ley de potencias independientemente de la selección de eventos y fragmentos, evidencia que una distribución de masas de ese tipo es más común de lo que se pensaba, y que una transición de fase continua no es el único escenario posible. Puntualmente, debido al tamaño finito de los sistemas nucleares involucrados, una distribución de masas como la de la ecuación 1.2 no es inconsistente con la ocurrencia de una transición de primer orden sub-crítica [56, 62].

Por estos y otros motivos, la aplicación de teorías que son rigurosas para sistemas termodinámicos al estudio de sistemas finitos, no extensivos y posiblemente fuera del equilibrio como las reacciones nucleares, no es inmediata [13, 63].

Transiciones de Fase en sistemas Finitos: Termodinámica Micro-canónica

La hipótesis de que un sistema finito puede sobrellevar una transición de fase fue sugerida para la materia nuclear por el trabajo del grupo de Purdue en la década de los '80. A partir de los '90, el notable incremento en la capacidad de cálculo y el desarrollo de simulaciones numéricas adecuadas, permitió observar que existen varios fenómenos tradicionalmente asociados con el límite termodinámico que persisten en sistemas finitos, con $N \ll \infty$. Por ejemplo, además de scaling de Fisher, se ha observado la presencia de mesetas en las curvas calóricas (asociadas con el calor latente) en el modelo de Potts [64], en sistemas de Lennard-Jones de tan solo 147 partículas [17, 65], y también transiciones tipo líquido-sólido en sistemas de 20 moléculas de agua [66]. También se han identificado comportamientos consistentes con transiciones de orden superior en sistemas de bosones confinados en trampas armónicas y clusters metálicos de plata [67].

La clasificación usual de transiciones de fase, basada en divergencias de funciones termodinámicas, sólo puede ser aplicada en el límite termodinámico (i.e. $N \rightarrow \infty$). Para sistemas finitos, la función de partición canónica $Z(T, N, V)$ y todas sus derivadas son funciones analíticas en todas sus variables y, por lo tanto, no pueden presentar divergencias. Consecuentemente, es necesaria una definición que sea independiente del límite termodinámico. En ese sentido, Gross ha señalado que la extensión de la termodinámica a sistemas finitos resulta más natural en el ensamble micro-canónico [13]. Particularmente, ha propuesto que una transición tipo líquido-vapor que ocurre en un sistema finito, puede definirse e identificarse por presencia de regiones de curvatura no negativa en la superficie de entropía micro-canónica $s(e, n)$, como función de las cantidades extensivas relevantes del sistema.

En la figura 1.4 se reproduce una figura de [64] en la que se muestran resultados para una simulación del modelo de Potts con $q = 10$ sobre una red de 100×100 . Dicho sistema

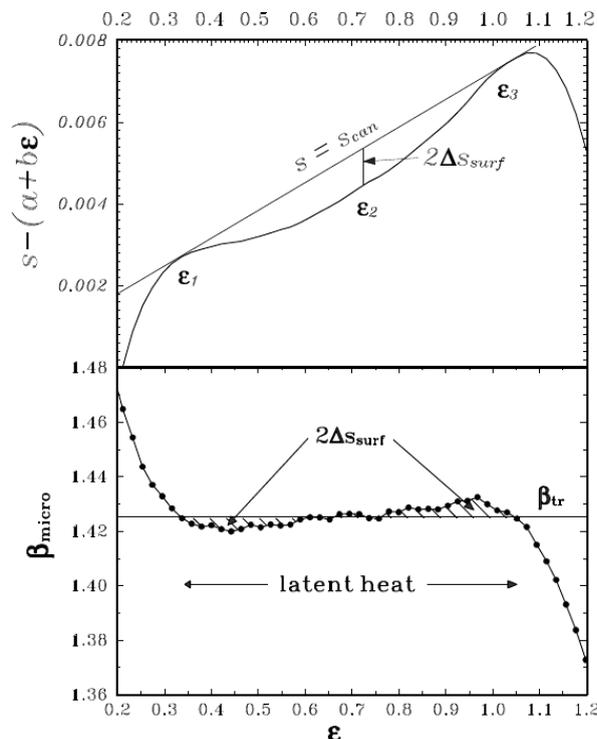


FIGURA 1.4: Entropía y temperatura (β) micro-cánonica para un modelo de Potts con $q = 10$ en una red de 100×100 sitios, como se muestra en [64].

presenta una transición de fase de primer orden. En panel inferior muestra la inversa de la temperatura $\beta_{\mu c}$ como función de la energía (curva calórica). La temperatura fue calculada directamente de una simulación de Monte Carlo micro-cánónico. La línea horizontal (β_{tr}) es la temperatura de transición calculada por medio de la construcción de Maxwell; como tal, correspondería a la temperatura de coexistencia en el límite termodinámico. En esta figura, la transición se manifiesta a través del *loop* que presenta la curva calórica. Las áreas sombreadas corresponden a la diferencia de entropía que se produce por la aparición de interfases que no son despreciables para un sistema tan pequeño.

Conociendo la temperatura como función de la energía, la entropía puede calcularse por integración termodinámica: $s(e) = \int_0^e \beta_{\mu c}(e') de'$. En el panel superior de la figura 1.4 se muestra $s - (a + be)$, con s la entropía calculada de esta manera y a y b constantes para mejorar la visualización. Entre las energías ϵ_1 y ϵ_3 la entropía calculada en el ensamble canónico es la recta etiquetada como s_{can} en la figura, y es siempre cóncava. La entropía micro-cánonica, en cambio, presenta un *intruso convexo*. La diferencia con la canónica es $2\Delta S_{surf} = \mathcal{O}(1/L)$, con L el lado de la red. Esa diferencia de entropías está relacionada con la tensión superficial entre las dos fases [64]. Y el calor latente de la transición puede calcularse como $\Delta H = \epsilon_3 - \epsilon_1$. Si ocurriese que $\Delta H \rightarrow 0$ entonces $\Delta S \rightarrow 0$ y estaríamos

en presencia de una transición continua. De esta manera, el enfoque micro-canónico provee todos los elementos para caracterizar el comportamiento de un sistema en una transición de fases, ya sea finito o infinito, pero sobre todo **en equilibrio**.

Parámetros de orden

Las transiciones de fase usualmente tienen asociada una temperatura crítica T_c tal que las propiedades del sistema son diferentes según este se encuentre por debajo o por arriba de esa T_c . Para cuantificar ese cambio de comportamiento es útil identificar un observable que distinga claramente esos dos comportamientos. Un observable de estas características se denomina *parámetro de orden* (ϕ). Para sistemas en el límite termodinámico es usual elegir uno que se anule de un lado de la transición, y tome valores definidos del otro. Por ejemplo, para una transición líquido-gas (de primer orden) el parámetro de orden por $\phi = \rho_l - \rho_g$, la diferencia entre las densidades del líquido y el gas puros; para una transición ferromagnética (continua de segundo orden) un buen parámetro de orden es la magnetización media espontánea $\phi = m(H = 0)$.

En el caso de la fragmentación nuclear, el tamaño del fragmento más grande M_1 es un buen parámetro de orden: Cuando M_1 es grande, el sistema está principalmente del lado tipo-líquido, mientras que si es pequeño, estamos frente a un comportamiento tipo-gas ¹.

Cerca de una transición de fase de primer orden, en los ensambles canónico y gran-canónico la distribución del parámetro de orden de un sistema finito presenta una bimodalidad característica [70–72]. La temperatura crítica es aquella para la cual los dos picos tienen la misma altura. Físicamente, esa bimodalidad corresponde a la presencia de dos clases de eventos para el mismo valor del parámetro de control β , y la temperatura crítica es aquella para la cual la ocurrencia de las dos clases de estados es equiprobable. La bimodalidad en el parámetro de orden puede verse como la precursora de la coexistencia de fases en el límite termodinámico. Formalmente, esa bimodalidad emerge de la convexidad anómala de la entropía subyacente. Esto puede verse fácilmente en el caso de la multifragmentación, observando que el parámetro de orden M_1 está bien correlacionado con la energía del sistema. Consecuentemente, una bimodalidad en M_1 estará asociada con una bimodalidad en la distribución de energías E .

En un ensamble canónico, por ejemplo, la probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado de energía E es

¹De hecho, ese observable es un buen parámetro de orden para una amplia variedad de transiciones de primer orden o fenómenos críticos en equilibrio: clusters complejos, de percolación a gelación, de nucleación a evaporación, etc.[68, 69].

$$p_\beta(E) = W(E) \exp(-\beta E) Z_\beta^{-1} \quad (1.7)$$

y por lo tanto, una bimodalidad en la distribución de energías canónica es equivalente a una concavidad en la entropía micro-canónica $S(E, N, V) = \log(W(E, N, V))$ [73]. Para una transición continua la distribución del parámetro de orden presenta un único pico muy ancho [71].

En general, si la entropía micro-canónica subyacente presenta un intruso convexo, también lo presentará cualquier variable intensiva (por ejemplo μ) como función de su variable extensiva conjugada (N), cuando esta última se conserve en el muestreo utilizado. Y dado que en las reacciones nucleares las cantidades conservadas son E, N, \vec{L} , el enfoque micro-canónico se presenta como privilegiado frente al canónico o al gran-canónico, pero, ningún ensamble tradicional resulta adecuado. Al tratarse de sistemas en expansión, la no conservación de V automáticamente imposibilita el uso de ensambles tradicionales. De ahí la introducción de la hipótesis *ad-hoc* del volumen de congelamiento [17]. De cualquier manera, la topología del espacio de fases de un sistema cerca de una transición de fase (puntualmente, la curvatura de la densidad de estados) es cualitativamente distinta si se trata de una transición de primer orden o de una continua, independientemente de las condiciones macroscópicas en las que se haga el muestreo [74].

1.3. El término de simetría en la mira: Isoscaling

Avances experimentales de fines de los ‘90 permitieron producir reacciones con isótopos raros (núcleos inestables con exceso de neutrones). Esto posibilitó el estudio de propiedades de la estructura de capas en núcleos ricos en neutrones lejos del valle de estabilidad β y marcó el camino al estudio de la “neutron drip line” [41, 75–77]. Estos resultados entre otros, pusieron el grado de libertad de isospín en el centro de la escena. El interés de la comunidad nuclear es tal que se están construyendo nuevos aceleradores con el fin específico de producir haces de isótopos raros [78] para obtener una mejor descripción del término de simetría de la EOS nuclear.

A temperatura cero, la EOS de la NM asimétrica puede aproximarse muy bien [34] por

$$U(\rho, T, \delta)/A = U(\rho, \delta = 0)/A + C_{Sym}(\rho)\delta^2 \quad (1.8)$$

con $\rho = \rho_n + \rho_p$ y $\delta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho}$. El coeficiente $C_{Sym}(\rho)$ evaluado a la densidad normal ρ_0 coincide con el coeficiente constante de la fórmula de la gota líquida para las energías de unión²:

$$E_{sym} = C_{sym} \frac{(N - Z)^2}{A} \quad (1.9)$$

Para el análisis del término de simetría, una de las herramientas que más atención ha recibido está basada en el estudio de los fragmentos producidos en reacciones centrales isotópicamente diferentes [81–85]. Se ha observado experimentalmente que el cociente entre los número de fragmentos $Y_i(N, Z)$ producidos en reacciones similares $i = 1, 2$, que difieren en la fracción de protones, es de la forma:

$$R_{12}(N, Z) = \frac{Y_2(N, Z)}{Y_1(N, Z)} \propto e^{\alpha N + \beta Z} \quad (1.10)$$

donde los parámetros ajustables α y β se llaman parámetros de “isoscaling”.

En el marco de los modelos estadísticos, esos parámetros tienen una interpretación muy atractiva puesto que bajo distintas aproximaciones y en varios modelos [83, 86–88] puede demostrarse la relación:

$$\alpha = \frac{4C_{Sym}}{T} \left[\left(\frac{Z_1}{A_1} \right)^2 - \left(\frac{Z_2}{A_2} \right)^2 \right] \quad (1.11)$$

donde C_{Sym} es el coeficiente de simetría en la fórmula de la gota líquida para las energías de núcleos en sus estados fundamentales (ecuación 1.9).

Los sub-índices de la ecuación 1.11 refieren a la reacción correspondiente y, por lo tanto, al número de neutrones y protones disponibles para producir dichos fragmentos en cada caso. Por lo tanto, se supone que el observable de isoscaling podría dar información sobre la dependencia en ρ y T del coeficiente C_{Sym} .

Ecuaciones de la forma 1.10 puede derivarse a partir de los fragmentos producidos por la desintegración de una fuente equilibrada en el marco del ensamble micro-canónico y gran-canónico [86], o en el ensamble canónico [12]. También son predichas en modelos de emisión secuencial de fragmentos [83] y también ha sido verificada en simulaciones dinámicas [89].

²Algunas parametrizaciones de la fórmula de la gota líquida contemplan una dependencia de C_{Sym} con A , pero esa dependencia es despreciable para $A \gtrsim 5$ [79, 80]

Desafortunadamente, la falta de dependencia con la densidad y la temperatura de la ecuación 1.9 y la ausencia de efectos dinámicos en la descripción estadística de la fragmentación oscurecen la interpretación dada a α y β . De hecho, la validez de la ecuación 1.11, y por lo tanto esa interpretación de α , es fuertemente cuestionada [90, 91].

Una de las preocupaciones con respecto a la ecuación 1.11 es que la temperatura y la densidad varían durante la reacción [89, 92], y el concepto de “fuente de fragmentación” es sólo una aproximación útil para invocar modelos estadísticos. De hecho, la misma relación se ha observado en simulaciones de dinámica molecular clásica, explícitamente fuera del equilibrio [93–95].

Sin embargo, el hecho que más sombra echó sobre la ecuación 1.10 fue la observación de isoscaling en modelos de percolación policromática [96, 97] que, siendo modelos puramente geométricos, no tienen ni dinámica ni energía. En esos modelos, bajo ciertas suposiciones razonables, pueden encontrarse expresiones analíticas para los valores de α y β en términos de la composición de los sistemas involucrados. La observación de que existe un isoscaling de origen probabilístico llevó a definir una entropía de simetría [88], que jugaría un papel no del todo claro en el isoscaling nuclear. Por lo pronto, comparaciones de valores experimentales de α nuclear con el resultado analítico hacen sospechar que para energías de excitación altas la fragmentación está dominada por la entropía más que por la energía de simetría [98].

1.4. Sobre la necesidad de una descripción dinámica microscópica

La descripción termodinámica micro-canónica descrita arriba, y cualquier fenómeno que se pretenda explicar a partir de ella, es válida siempre y cuando los sistemas se hallen en equilibrio termodinámico. Para sistemas finitos en expansión, como los productos de colisiones en multifragmentación, esa hipótesis no se cumple. Para esos sistemas, la descripción termodinámica se vuelve una aproximación en el mejor de los casos, y solo después de una cuidadosa (y potencialmente *ad hoc*) selección de los eventos [17, 65, 99]. Se ha mostrado en reiteradas ocasiones [100, 101] que efectos dinámicos y de no equilibrio desdibujan la imagen termodinámica de la multifragmentación, y que ésta es mejor descrita como una transición de fase inducida por la expansión. Todo esto indica la necesidad de contar con una descripción dinámica.

Si se conociera exactamente la interacción nucleón-nucleón, y supiéramos resolver la ecuación de Schrödinger para muchos cuerpos, las reacciones podrían en principio describirse en términos de esas interacciones. Y a partir de promedios adecuados podría, también en principio, construirse una EOS, en el espíritu de la mecánica estadística [13, 35–37]. Pero incluso conociendo la solución dinámica exacta, una condición indispensable para que ese plan pueda tener éxito es que durante la corta duración de las reacciones se alcance equilibrio térmico y químico en las variables macroscópicas; una hipótesis seriamente cuestionable y fundamental para los modelos estadísticos de fragmentación. En el mejor de los casos (si efectivamente se alcanza cierto grado de equilibrio), la EOS para NM solo puede ser inferida a partir de los segmentos de la reacción en los cuales las macro-variables se estabilicen, y esto solo puede ser logrado comparando cuidadosamente simulaciones computacionales de reacciones con datos experimentales.

Resulta claro, entonces, que una descripción dinámica y “microscópica” (a nivel de nucleones individuales o funciones de onda de N-cuerpos) que sea capaz de describir tanto las etapas de equilibrio como las de no equilibrio de una reacción es de una importancia primordial, incluso para el programa de describir la EOS nuclear.

Por otro lado, la contrastación con datos experimentales requiere que los modelos provean una buena descripción de los fragmentos. Tanto los modelos hidrodinámicos como *QMD* fracasan en producir fragmentos estables. Esos modelos requieren el uso de parámetros ajustables, a veces ocultos (entre ellos el número de partículas de prueba, ancho de los paquetes de onda, parámetros de los campos medios, masas efectivas y secciones eficaces de scattering) para reproducir datos experimentales. El fracaso de estos modelos en producir fragmentos estables puede ser parcialmente compensado (o enmascarado) por el post-procesamiento de datos requerido, o por una elección adecuada (*ad hoc*) de los parámetros y los eventos. Ahora, si se pretende usar esos modelos precisamente para describir los procesos de formación de fragmentos, eso debería ser inaceptable.

Ninguno de estos problemas están presentes en *CMD*, que sin ningún parámetro ajustable ni oculto es capaz de describir la dinámica de una reacción en el espacio de fases de principio a fin, y con unidades adecuadas de energía, distancia y tiempo. El modelo *CMD* incluye intrínsecamente correlaciones de N-cuerpos y puede, por lo tanto, describir desde núcleos fríos (con nucleones altamente correlacionados) hasta sistemas nucleares densos y calientes como los formados durante una reacción. Puede describir flujo hidrodinámico, como la expansión pos-fragmentación, y decaimientos secuenciales sin ningún agregado. Las definiciones de fragmentos tienen sentido físico claro, son transparentes y precisas. Por estos motivos, por su utilidad como herramienta pedagógica y su probada eficacia para describir y explicar muchos aspectos de las reacciones de iones pesados

(ver sección [2.1](#)), consideramos que las ventajas de *CMD* más que compensan su única desventaja: la no-cuanticidad.

Capítulo 2

Modelo CMD e Iones Pesados

2.1. Modelo CMD

El modelo de interacción nuclear utilizado en este trabajo fue propuesto originalmente por Lenk, Pandharipande y colaboradores para estudiar la precisión de la aproximación de Vlasov-Nordheim en la descripción de colisiones nucleares a energías intermedias [32]. En la literatura es frecuentemente citado como Potencial de Illinois. Se trata de un modelo clásico de interacción de dos cuerpos que incluye la interacción de Coulomb entre protones y un potencial nuclear. El potencial nuclear viene dado por dos términos dependientes del isospín de las partículas:

$$\begin{aligned} V_{np}(r) &= V_r [\exp(-\mu_r r)/r - \exp(-\mu_r r_c)/r_c] - \\ &\quad - V_a [\exp(-\mu_a r)/r - \exp(-\mu_a r_c)/r_c] \\ V_{nn}(r) &= V_0 [\exp(-\mu_0 r)/r - \exp(-\mu_0 r_c)/r_c] \end{aligned}$$

V_{nn} es el potencial de interacción entre nucleones idénticos y V_{np} la interacción entre un protón y un neutrón. Los potenciales están truncados y corridos a cero a una distancia $r_c = 5,4$ fm.

Un aspecto particular que el modelo captura es que la materia pura de neutrones no es estable. En otras palabras, el modelo tiene un término de simetría. Esto se logra haciendo que la interacción entre nucleones idénticos sea puramente repulsiva mientras que la interacción entre nucleones distintos es atractiva (ver figura 2.1). De esta manera,

la materia nuclear más o menos simétrica es estable. El estado fundamental de la NM ideal simétrica en este modelo es un sólido cristalino¹.

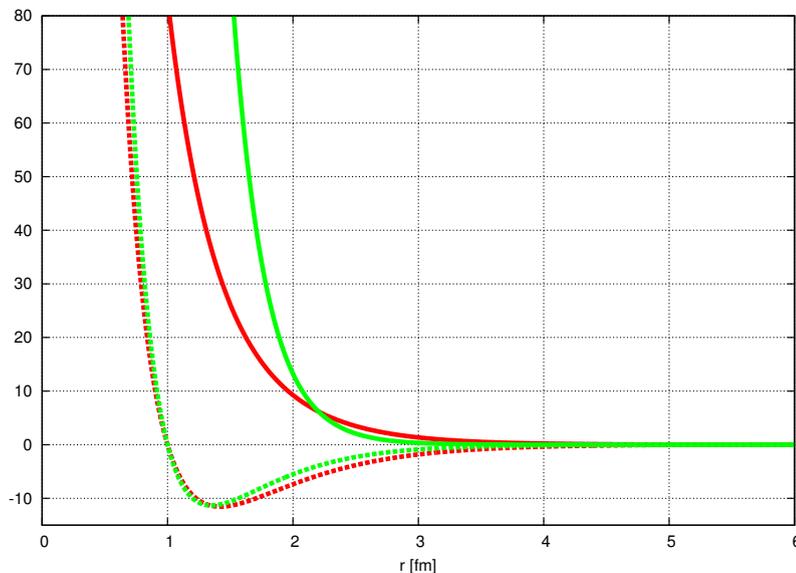


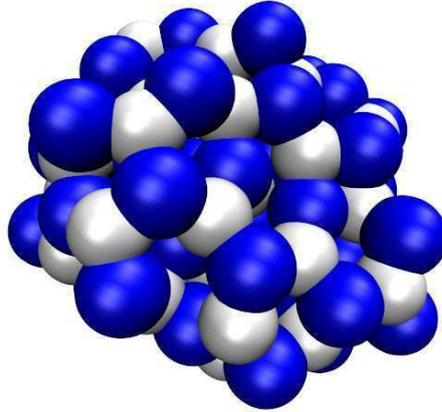
FIGURA 2.1: Potenciales de interacción. Las líneas continuas corresponden al potencial V_{nn} y las punteadas al V_{np} . En rojo (gris oscuro) la parametrización Medium y en verde (gris claro) la Stiff.

Los parámetros fueron ajustados de manera que la energía y la densidad de saturación de la NM ideal simétrica ρ_0 tuvieran los valores estimados experimentalmente de $E_{NM}^{Sat} = 16 \text{ MeV}$ y $\rho_0 = 0,16 \text{ fm}^{-3}$ respectivamente. Esto fue hecho asumiendo una estructura cúbica simple en la cual los primeros vecinos de cada protón son neutrones. En la publicación original los autores proveen dos parametrizaciones distintas para este potencial: la parametrización “Medium” da lugar a una compresibilidad para NM ideal simétrica de $\sim 250 \text{ MeV}$, similar a la estimada experimentalmente [102–104], mientras que la parametrización “Stiff” presenta una compresibilidad de $\sim 535 \text{ MeV}$.

2.1.1. Simulando colisiones en CMD

Para simular colisiones, primero debemos construir “núcleos”. Para construir esos núcleos colocamos en un potencial confinante esférico el número deseado de protones y neutrones. Inicialmente los nucleones son dotados de velocidades elevadas y luego son enfriados hasta alcanzar un estado cercano al fundamental. En particular, trabajamos con núcleos de ^{107}Ag y con la parametrización Medium del potencial como el que se muestra en la figura 2.2. En la sección 4.1 se describirá con detalle el procedimiento y se analizarán propiedades generales del conjunto posible de núcleos para las dos parametrizaciones del potencial.

¹En el capítulo 8 nos referiremos extensamente a la descripción de la NM ideal en el modelo.

FIGURA 2.2: Representación visual de un núcleo de plata en *CMD-Medium*

Una característica de todos los núcleos generados con *CMD* es que son cristales, y no son esféricos. Por eso, antes de comenzar cada colisión rotamos los núcleos al azar de manera que el ensamble de condiciones iniciales tenga simetría esférica. Incidentalmente, las distintas orientaciones proveen una variabilidad deseable en la energía depositada en eventos a b y energía de haz E_{beam} fijos. El diámetro máximo de estos núcleos de plata es de $\sim 10,5$ fm.

Los dos núcleos son ubicados a una distancia arbitraria pero razonable. A uno de ellos se le asigna la velocidad necesaria para lograr la energía deseada y su centro de masa es desplazado en b para seleccionar el parámetro de impacto. A partir de esa condición, se deja evolucionar el sistema hasta que se alcanza un estado que pueda considerarse asintótico. El conjunto de ecuaciones de movimiento fue integrado utilizando el algoritmo de Verlet en velocidades [105] tomando $dt = 0,005$ fm/c como paso de integración, con lo que se garantiza una conservación de la energía del orden del %0,1.

2.1.2. Reconocimiento de Fragmentos en *CMD*

Donde los modelos dinámicos realmente brillan es en la descripción de los fragmentos en sí. La identificación de fragmentos requiere, en todo modelo, un pos-procesamiento de los datos de una simulación. Los modelos de transporte solo incluyen información sobre funciones de distribución de un cuerpo que puede resultar insuficiente en el contexto de

una colisión de muchos cuerpos y a altas densidades, mientras que los modelos estadísticos se basan en hipótesis de equilibrio global muy difíciles de justificar en procesos de tan corta duración. Los modelos dinámicos en cambio, proveen información completa del estado del sistema en el espacio de fases a nivel de partículas individuales, incluyendo intrínsecamente correlación de todos los órdenes y para cada instante de la evolución.

En esta sección se describen los algoritmos que utilizamos en este trabajo.

Fragmentos MST

La definición de fragmento MST (siglas en inglés de *Minimum Spanning Tree*) se basa en la noción más intuitiva de fragmento: partículas cercanas espacialmente conforman un fragmento. El algoritmo utiliza únicamente correlaciones en el espacio configuracional. Según la prescripción MST, una partícula i pertenece a un fragmento C si existe otra partícula j , incluida en C , que se halle suficientemente cerca de i . Formalmente:

$$i \in C \Leftrightarrow j \in C \wedge |r_i - r_j| \leq r_{cl} \quad (2.1)$$

donde r_{cl} es un parámetro fijo del algoritmo que se suele llamar “radio de clusterización”. En este trabajo utilizamos $r_{cl} = r_c$, el radio de corte del potencial. De esta manera, por construcción los fragmentos MST no interactúan entre sí. Puesto que el algoritmo ignora completamente información del espacio de momentos del sistema, los fragmentos MST no son capaces de describir la estructura de fragmentos físicamente relevantes en configuraciones de alta densidad [15, 106].

Fragmentos MSTE

Una extensión del algoritmo MST es el conocido como *Minimum Spanning Tree in Energy space* o MSTE. Según esta definición, un par de partículas pertenecerá al mismo fragmento C si ocurre que:

$$i \in C \Leftrightarrow j \in C \wedge e_{ij} \leq 0 \quad (2.2)$$

donde $e_{ij} = V(r_i - r_j) + (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2 / 4\mu$, con $V(r)$ el potencial de interacción de pares y μ la masa reducida. Esta definición es más restrictiva que MST puesto que no solo requiere proximidad espacial entre las partículas sino que también exige cierta correlación local en los momentos.

Fragmentos ECRA

Es la definición más robusta de fragmento hasta la actualidad. Utiliza información del espacio de fases completo para identificar la fluctuación de densidad más ligada. Esta se define como el conjunto de fragmentos $\{C_i\}$ que minimiza la funcional E_{C_i} , construida como la suma de las energías internas de esos fragmentos:

$$E_{C_i} = \sum_i E_{int}^{C_i} \quad (2.3)$$

$$\text{con } E_{int}^{C_i} = \sum_{j \in C_i} K_j^{cm} + \sum_{j,k \in C_i, j < k} V_{j,k}$$

donde K_j^{cm} es la energía cinética de la partícula j medida respecto del centro de masa del cluster que la contiene y $V_{i,j}$ es el potencial de interacción entre las partículas i y j .

El algoritmo que identifica estos fragmentos se llama ECRA (acrónimo de *Early Cluster Recognition Algorithm*) y fue publicado por primera vez en [31]. Es un algoritmo auto-consistente que identifica estructuras de partículas bien correlacionadas simultáneamente tanto en coordenadas como en momentos. Los fragmentos ECRA emergen del compromiso entre la máxima temperatura que puede soportar un fragmento frente a los efectos cohesivos de la interacción. Esto significa que si en una agrupación de partículas las correlaciones espaciales (que favorecen la minimización de la energía potencial) no son suficientemente fuertes como para contrarrestar bajas correlaciones en velocidad (alta temperatura), el algoritmo identificará esa agrupación como dos o más fragmentos.

La prescripción ECRA ha sido extensamente utilizada y ha permitido establecer, por ejemplo, que en gotas altamente excitadas la fragmentación ocurre en etapas muy tempranas de la evolución [15, 107]. Es decir, aún cuando configuracionalmente el sistema se presente como un único fragmento MST, dentro del mismo existe una estructura subyacente de clusters ECRA que son precursores de lo que serán los fragmentos asintóticos.

2.2. Éxitos previos de CMD

Además de las condiciones impuestas originalmente al modelo sobre densidad y energía del estado fundamental de la NM, éste se ha mostrado capaz de reproducir cualitativamente bien otras propiedades estáticas de sistemas nucleares como las energías de unión experimentales de núcleos pesados (ver sección 4.1) y los tamaños de esos núcleos [32].

Más importante aún, el uso de *CMD* en conjunción con los algoritmos de reconocimiento de fragmentos descritos en la sección 2.1.2 tiene una larga y rica historia en la descripción de la dinámica de procesos de fragmentación de sistemas nucleares [5].

Entre las propiedades dinámicas que reproduce cualitativamente bien podemos mencionar la multiplicidad de fragmentos producidos en colisiones simuladas a las energías de interés [32, 33] y las distribuciones de velocidad de los fragmentos asintóticos (ver figura 1.2 y [33] para más detalles). El modelo *CMD* fue uno de los primeros modelos dinámico en poder dar una descripción completa y consistente de la emisión de partículas producidas en el cuello de una reacción periférica [33, 108].

Utilizando la información completa de la evolución en el espacio de fases y el algoritmo de reconocimiento de fragmentos ECRA, se determinó que independientemente del escenario de excitación, los fragmentos se forman en etapas tempranas y calientes de la reacción [53, 109]. Y la precisa determinación del tiempo de formación de fragmentos permitió examinar las hipótesis de equilibrio global requeridas por los modelos estadísticos. En particular, se logró demostrar que, al menos en el contexto de *CMD* los sistemas no presentan un equilibrio global al momento de fragmentarse, como postulan por hipótesis los modelos estadísticos. Estos resultados también fueron probados para sistemas de Lennard-Jones [15, 110], por lo que son muy generales. No obstante, se determinó que al momento de la fragmentación existe un cierto grado de equilibrio local que permite definir una temperatura, también local, con sentido cinético [108, 110]. En base a esas temperaturas locales pudo determinarse la forma correcta de la curva calórica (figura 2.3 e identificar el rol del modo colectivo de expansión como un sumidero de energía [17, 101]. Esa curva calórica reforzó la propuesta de que la multifragmentación es consistente con una transición de fase de primer orden, pero montada sobre la expansión. Además, estudiando la función de respuesta térmica, logró determinarse la presencia de calores específicos negativos (figura 2.3, predichos para transiciones de fase de primer orden en sistemas finitos en el ensamble micro-canónico [13].

Siguiendo en la línea de la termometría de reacciones, *CMD* sirvió para confirmar que un cierto termómetro ampliamente utilizado llamado “termómetro de isótopos” (o “del doble cociente” [111]) efectivamente refleja propiedades del sistema en la etapa densa y caliente de la colisión [92].

El uso de *CMD* también contribuyó a establecer la ocurrencia de fenómenos críticos en colisiones [53, 57, 99], señalados por la observación de Scaling de Fisher (ecuación 1.2 y figura 2.4) entre otras señales. Más aún, el un exponente crítico τ hallado en *CMD* es consistente con una transición líquido-vapor.

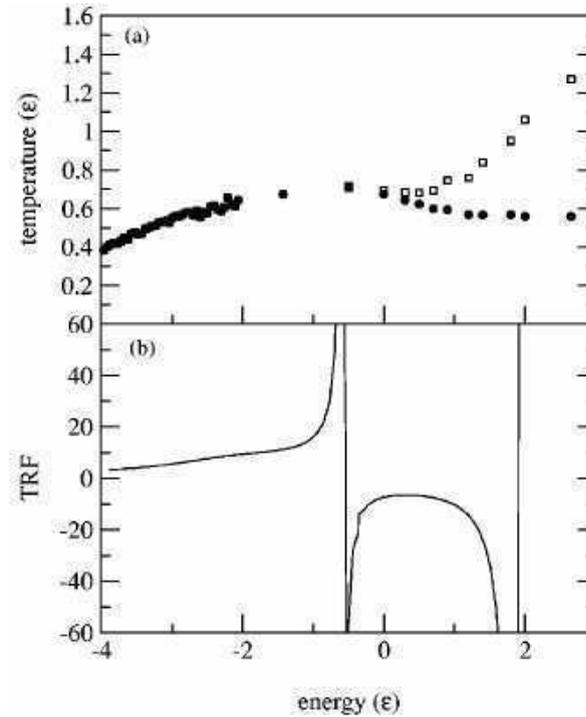


FIG. 2. (a) Caloric curve calculated for the expanding system (solid circles). The empty squares correspond to an estimation of a “fake temperature” that does not take into account in a proper way the collective motion and is calculated simply as a fraction of the total kinetic energy (see text for details). (b) shows the associated thermal response function.

FIGURA 2.3: Curva calórica y función de respuesta térmica para sistemas de Lennard-Jones en expansión, como aparece en [17].

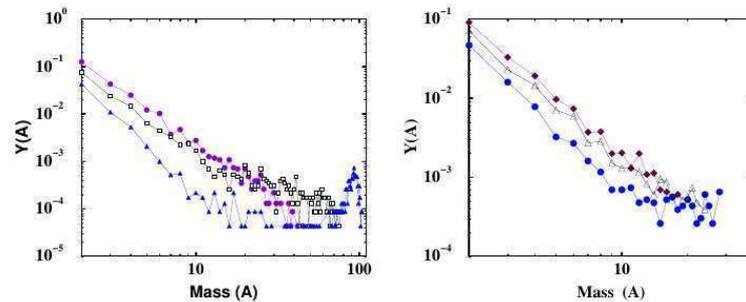
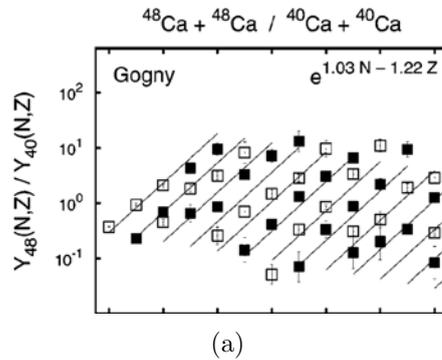


FIG. 3: (Left) Mass spectra from the reaction $Ni + Ni$ at $b = 3$ fm at $E = 1000$ MeV (triangles), $E = 1500$ MeV (squares), and $E = 2000$ MeV (circles). (Right) Similar results for $b = 0$ at $E = 1000$ MeV (circles), $E = 1500$ MeV (triangles), and $E = 2000$ MeV (diamonds).

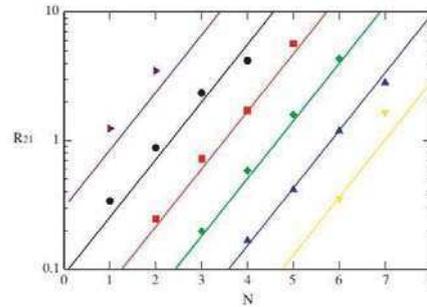
FIGURA 2.4: Distribuciones de masa tipo ley de potencias en colisiones $Ni + Ni$, como aparece en [57].

Más recientemente, se observó [93] que la relación de isoscaling (ecuación 1.10) está presente en simulaciones con *CMD*. Más aún, los valores de los parámetros de isoscaling obtenidos con *CDM* ($\alpha = 1,07$, $\beta = 1,22$, en [93]) son prácticamente indistinguibles de

los obtenidos con modelos más complejos como *AMD* ($\alpha = 1,03$, $\beta = 1,22$, de [89]) y los ajustes mucho más prolijos (ver figura 2.5).



(a)


 FIG. 1. (Color online) Long time behavior of isoscaling. Typical fit to $R_{21}(N, Z)$ for the case $^{40}\text{Ca}-^{48}\text{Ca}$ at 35 MeV/nucleon at 1250 fm/c.

(b)

FIGURA 2.5: Ajuste del cociente R_{12} obtenido con el modelo *AMD* (panel (a), tomado de [89]) y con *CMD*, (panel (b), tomado de [93]).

Además, se mostró que en *CMD* el isoscaling existe desde etapas muy tempranas de la evolución (ver figura 2.6), cuando no puede invocarse ninguna noción de equilibrio[93, 94]. Esto puso en duda la interpretación de los parámetros de isoscaling en relación al término de simetría en la EOS nuclear, puesto que dicha interpretación se basa en la formación de fragmentos a partir de una fuente termalizada.

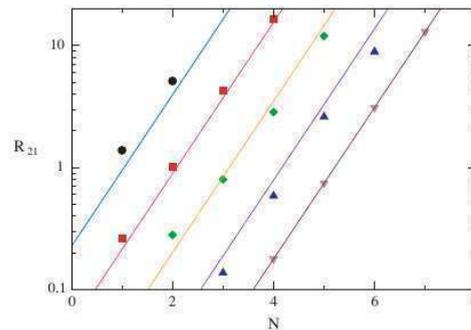

 FIG. 3. (Color online) Early behavior of isoscaling. Typical fit to $R_{21}(N, Z)$ for the case $^{40}\text{Ca}-^{48}\text{Ca}$ at 35 MeV/nucleon at 125 fm/c.

FIGURA 2.6: Ajuste del cociente R_{12} para tiempos cortos, como se muestra en [93].

La observación de isoscaling fuera del equilibrio llevó a investigar e identificar una causa de isoscaling de origen puramente probabilístico [96] que se asoció posteriormente con una entropía de simetría. En el contexto de *CMD*, esa entropía de simetría domina el proceso de fragmentación a energías altas [88], lo que limita la utilidad del isoscaling para caracterizar la dependencia del término de simetría con la temperatura. Este punto

en particular es una parte central de esta tesis y será tratado en detalle en el capítulo [4.1](#).

Capítulo 3

Bimodalidad en CMD

3.1. Bimodalidad en colisiones CMD

De todos los observables que se han propuesto como indicadores de la ocurrencia de una transición de fase en colisiones de iones pesados, el único que no había sido estudiado en *CMD* era el de la bimodalidad en el parámetro de orden. Esta sección está dedicada a su estudio.

La primera observación de bimodalidad en colisiones de iones pesados fue reportada por las colaboraciones INDRA y ALADIN en [74], que estudiaron colisiones de $Xe + Sn$ y $Au + Au$ a energías de centro de masa entre 60 y 100 A MeV (MeV por partícula). Allí los autores observan un cambio abrupto en el patrón de fragmentación en un rango pequeño de la energía transversal de partículas livianas E_{trans} , definida como la energía cinética transversal al eje de la colisión de las partículas con cargas $Z = 1$ o 2 . Esta cantidad está bien correlacionada con la “violencia” de la colisión (energía depositada) y poco correlacionada con el tamaño del fragmento más pesado M_1 que es el observable de interés. Posteriormente, el mismo comportamiento fue reportado en colisiones de $Au + Au$ a tan solo 35 A MeV [112].

Como se discutió en la sección 1.2.2, una transición de fase de primer orden se manifiesta en el ensamble canónico como una distribución bimodal del parámetro de orden para temperaturas cercanas a la de transición. Esta bimodalidad indica que existen dos clases de estados distintos (con energías de excitación E^* distintas) que son predominantemente probables, y el ensamble contiene eventos de las dos clases. La semilla de ese comportamiento se observa en una convexidad anómala en la entropía micro-canónica y, consecuentemente, en la densidad de estados. Para poder observar la bimodalidad en datos experimentales, debe construirse un ensamble con eventos en un rango de energías

de excitación suficientemente amplio como para que abarque las energías de excitación correspondientes a esas dos clases[73]. La clasificación y selección de eventos por E_{trans} permite construir un ensamble de esas características *a priori*, sin conocer exactamente las energías de excitación E^* evento a evento. Lo mismo puede lograrse seleccionando eventos basándose en cualquier variable que esté pobremente correlacionada con E^* , pero ninguno de esos ensambles será estrictamente canónico. En última instancia, para poder vincular la bimodalidad observada con características del espacio de fases del sistema, lo que interesa conocer es cómo se fragmenta el sistema como función de la E^* .

En el contexto de *CMD*, la energía de excitación puede calcularse exactamente como el balance de energías entre la configuración asintótica y la inicial:

$$E^* = \sum_{cl} E_{ppt}^{cl} + \sum_{cl} E_k^{cl} - 2 * E_{gs}^{Ag} \quad (3.1)$$

donde E_{ppt}^{cl} es la energía potencial del cluster asintótico cl , E_k^{cl} la energía cinética del cluster respecto de su centro de masa y E_{gs}^{Ag} es la energía de los núcleos de plata en su estado fundamental.

El cambio en el patrón de fragmentación es caracterizado por un salto en dos observables íntimamente relacionados: La carga del fragmento más pesado Z_1 y el llamado parámetro de asimetría A_2 definido como

$$A_2 = \frac{Z_1 - Z_2}{Z_1 + Z_2} \quad (3.2)$$

donde Z_1 y Z_2 son las cargas del fragmento más pesado y del segundo respectivamente. Ambos observables están muy correlacionados. En particular, Z_1 es un parámetro de orden natural para una transición tipo líquido-vapor por su relación con la densidad en el ensamble gran canónico [113]. El parámetro de asimetría está bien correlacionado con Z_1 y provee información adicional sobre el patrón de fragmentación global. Desde un punto de vista teórico, en las cercanías de una transición de fase los dos observables deberían presentar una distribución bimodal.

En *CMD*; al tener la posibilidad de elegir el parámetro de impacto b y la energía del proyectil disponemos de una gran versatilidad para estudiar distintos escenarios de colisión y criterios de selección de eventos. Y al disponer de información completa del estado del sistema en el espacio de fases a todo instante, podemos estudiar en detalle la dinámica de formación de los fragmentos y sus propiedades en distintas condiciones dinámicas de excitación: Colisiones periféricas (sección 3.1.1) y colisiones centrales (sección 3.1.2).

3.1.1. Colisiones con parámetro de impacto variable

Para emular las condiciones experimentales, en las que no se tiene control sobre el canal de entrada, simulamos series de colisiones a energía de proyectil fija y parámetro de impacto variable.

Evento a evento el parámetro de impacto fue seleccionado al azar de una distribución consistente con un escenario de un haz uniforme impactando sobre un único blanco esférico de radio R . Bajo esas condiciones, la probabilidad de que ocurra una colisión con un parámetro de impacto entre b y $b + \delta b$ es proporcional a b para $b < 2R$ y nula en otro caso. En la figura 3.1 se muestra un histograma típico de los parámetros de impacto de una serie de 20000 colisiones.

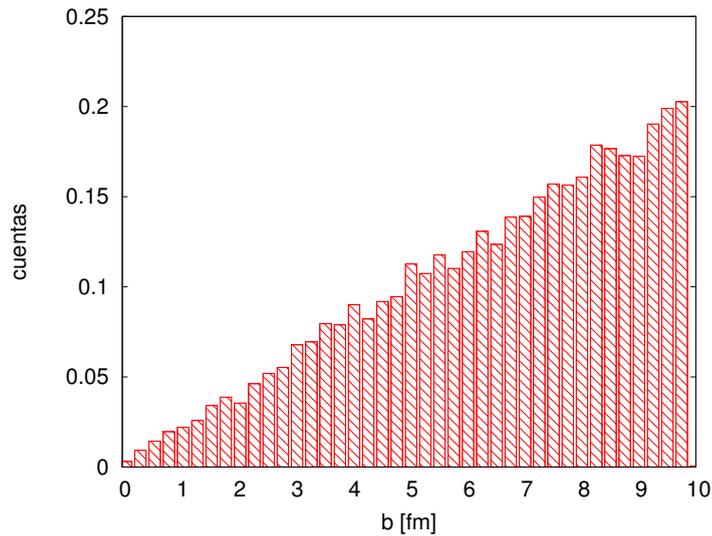


FIGURA 3.1: Histograma de parámetros de impacto típico.

Bajo estas condiciones, simulamos 10000 colisiones a energía de centro de masa $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ (cerca a la energía de Fermi de los nucleones) y 20000 a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$. Para la construcción de los observables seguimos protocolos utilizados en experimentos reales y consideramos únicamente los fragmentos detectados en el hemisferio QP .

Como se mencionó en la introducción, la imagen más aceptada de la multifragmentación distingue vagamente entre fragmentación de origen estadístico y dinámico. Existen en la literatura varios protocolos para seleccionar eventos que sean “más estadísticos” [50, 74, 112]. Sin embargo los resultados parecen ser independientes del criterio de selección [68] y por lo tanto los criterios responden más a prejuicios del observador que a propiedades de los observables. El criterio de selección que utilizamos en este trabajo fue considerar todos los eventos con más de 3 fragmentos (incluyendo partículas libres). Esto garantiza que ocurrió un cierto grado de fragmentación y permite eliminar eventos que son mejor descritos como una colisión inelástica entre los núcleos. También conservamos eventos

con exactamente 3 fragmentos, en los cuales el más grande contenía más del 75 % de la masa del proyectil, de manera de filtrar eventos de fisión. Bajo estas condiciones, de las 10000 colisiones a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ sólo 7892 son consideradas válidas y de las 20000 a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$ sólo 18809.

Para la construcción de los observables, como es usual en los experimentos reales, consideramos únicamente los fragmentos detectados en el hemisferio QP . Los sistemas evolucionaron por $20000 \text{ fm}/c$ y consideramos que el estado final es el asintótico. Esto es confirmado observando que las distribuciones de fragmentos $ECRA$ y MST coinciden 3.2: Por definición (ver sección 2.1.2), los fragmentos MST no interactúan entre sí y los fragmentos $ECRA$ no pueden decaer espontáneamente. Si ambas definiciones producen los mismos fragmentos, éstos ya alcanzaron su estado estacionario. Así y todo, para estar del lado de lo seguro, los resultados que presentamos a continuación corresponden a fragmentos $ECRA$ salvo aclaración explícita.

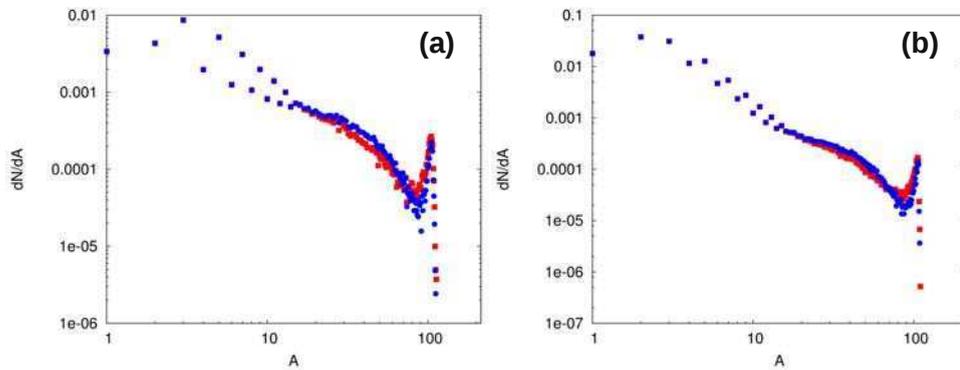


FIGURA 3.2: Distribución de masas de fragmentos MST (cuadrados, rojos en la versión digital) y $ECRA$ (círculos, azules en la versión digital) para configuraciones asintóticas, promediadas sobre el total de eventos aceptados a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ (panel a) y $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$ (panel b).

Eventos generados con $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ y b variable

Para energías tan bajas como $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$, la producción de partículas livianas en CMD es relativamente pobre, como se observa en la figura 3.3. Si bien el orden de magnitud y la tendencia general es comparable con los datos experimentales de [74], si se intenta una clasificación según E_{trans} , un 45 % de los eventos tienen $E_{trans} = 0$, incluso cuando fragmentan considerablemente.

En este escenario, la correlación de E_{trans} con E^* es demasiado pobre, y la clase de eventos con $E_{trans} = 0$ contiene eventos con casi todas las E^* posibles, como se muestra en la figura 3.4.

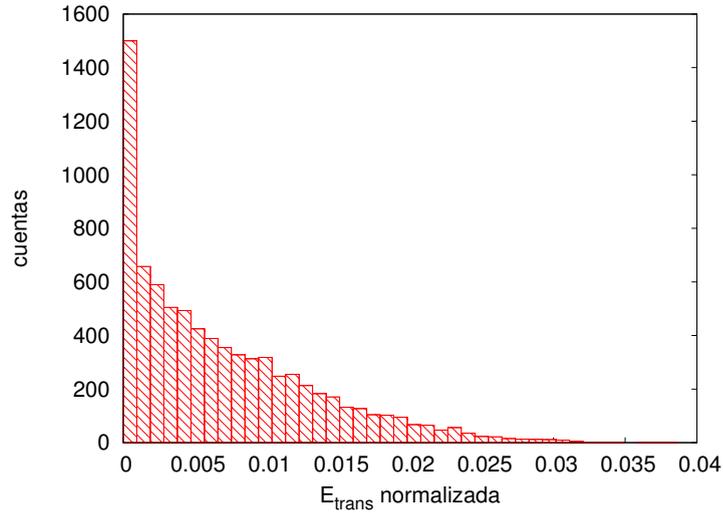


FIGURA 3.3: Histograma de E_{trans} en unidades de E_{beam} para los 7892 eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$. La clase con $E_{trans} = 0$ contiene 2791 eventos.

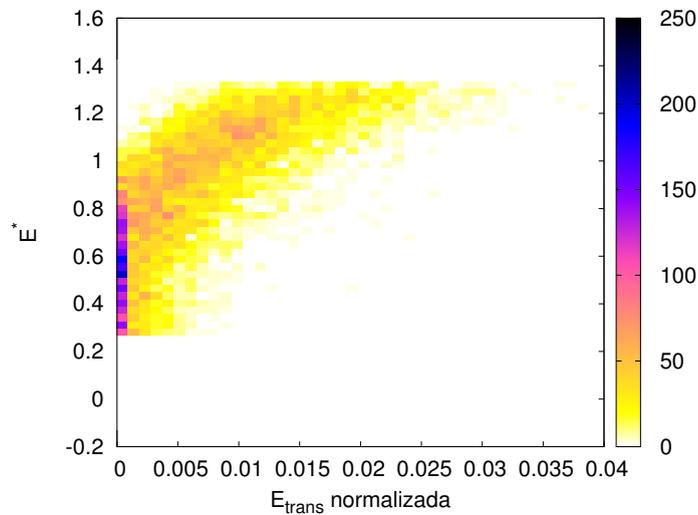


FIGURA 3.4: Histograma de E_{trans} normalizada y E^* para los 7892 eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$.

Dado que hay poco que ganar con una clasificación por E_{trans} , consideramos el ensamble de todos los eventos válidos que generamos. Para este ensamble la distribución de M_1 para $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ se muestra en la figura 3.5, y es claramente bimodal.

Sin embargo, como fue observado en [73, 113], esta distribución puede estar sesgada por la selección de eventos (o en este caso, por la generación de los mismos). Es posible que esa bimodalidad sea espuria y se deba a que el criterio de selección o el canal de entrada favorecen esas energías por sobre las demás. Un ejemplo extremo de sesgo introducido por la selección de eventos corresponde al caso trivial de seleccionar eventos que contengan un rango muy pequeño de E^* . En ese caso, el ensamble de eventos será más parecido

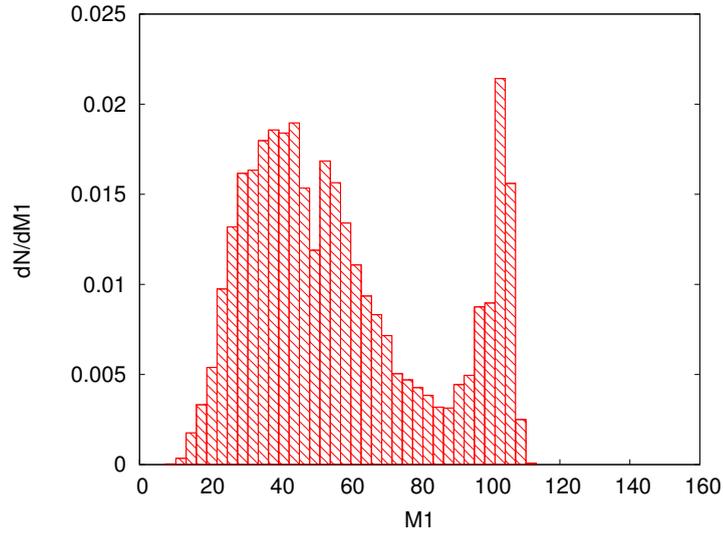


FIGURA 3.5: Histograma de M_1 agrupados de a 3 masas para los 7892 eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV/A}$.

a un micro-canónico y la bimodalidad desaparecería naturalmente. Para eliminar ese sesgo producido por la selección de eventos o el canal de entrada, se propuso re-ponderar los histogramas de las variables relevantes según las frecuencias de E^* de manera de descontar *a posteriori* el sobre-muestreo (oversampling) *a priori* de algunas E^* .

En la figura 3.6 se muestra el histograma de E^* generado sobre todos los eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV/A}$ y se ve que efectivamente están sobre-representados eventos con E^* altas.

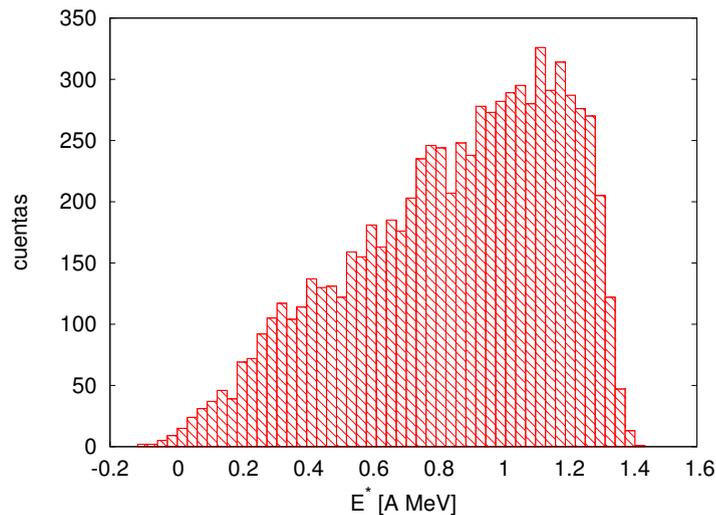


FIGURA 3.6: Histograma de E^* para los 7892 eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV/A}$.

Si se pesan los histogramas para lograr una distribución uniforme de E^* , la distribución que se obtiene en las variables M_1 puede relacionarse directamente con la que se

obtendría en un muestreo micro-canónico (ver apéndice A), asumiendo que el muestreo original es suficientemente bueno. En la figura 3.7 se muestran los histogramas bidimensionales en M_1 y E^* para el conjunto de todos los eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$ antes y después de aplicar el proceso de re-pesar. Adicionalmente, se impuso un filtro en 100 para la mínima cantidad de eventos que consideramos suficientemente bien representada en el ensamble sin pesar.

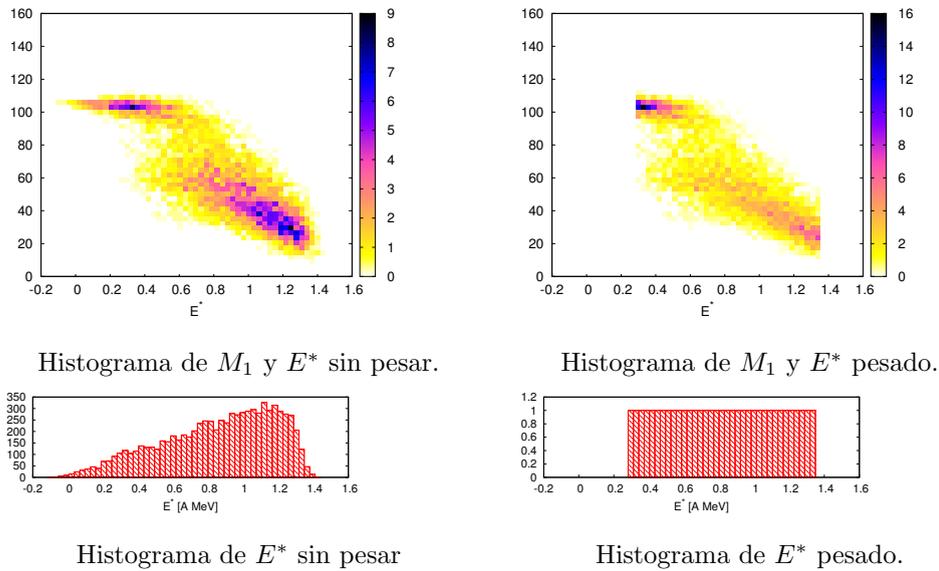


FIGURA 3.7: Histogramas varios antes y después de re-pesar para eliminar el sesgo introducido por el criterio de selección en eventos con b variable a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$.

La bimodalidad en la distribución marginal de M_1 también sobrevive al proceso de repesado, como se ve en la figura 3.8.

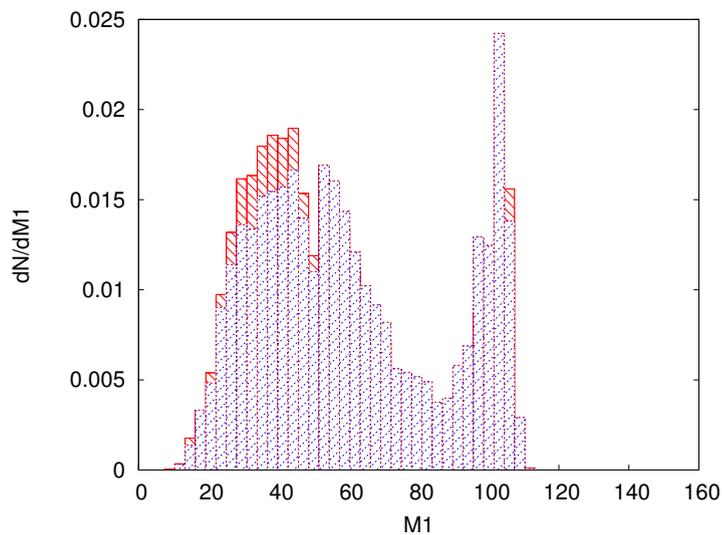


FIGURA 3.8: Histograma de M_1 antes (sombreado diagonal descendente, rojo online) y después de re-pesar (sombreado diagonal ascendente, azul online).

Por otro lado, como se mencionó arriba, en una transición de fase de primer orden, además de M_1 , el parámetro de asimetría también A_2 mostraría un comportamiento bimodal. Pero para ilustrar el cambio de comportamiento en el patrón de fragmentación, es usual representar el valor más probable de A_2 como función de la energía de excitación E^* [74, 112, 114]. La bimodalidad se manifiesta como un salto abrupto en esa variable como función de E^* . En una transición de primer orden, además, se espera que las fluctuaciones del tamaño del fragmento más pesado sean anormalmente grandes. En ese sentido se ha probado que la varianza normalizada del tamaño del fragmento más pesado NVM (ecuación 3.3 presenta un máximo cerca de la transición en sistemas finitos [53].

$$NVM = \frac{\langle M_1^2 \rangle - \langle M_1 \rangle^2}{\langle M_1 \rangle} \quad (3.3)$$

En la figura 3.9 se muestra que estas dos señales de transición, evaluados sobre el conjunto de eventos válidos a $E_{beam} = 37 \text{ MeV}/A$, señalan a la misma energía.

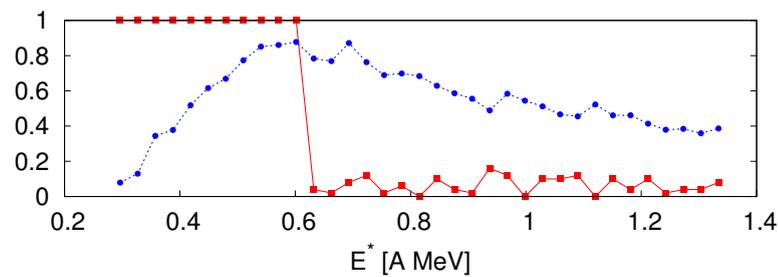


FIGURA 3.9: Valor más probable de A_2 (cuadrados, rojo en versión digital) y NVM (círculos, azul en versión digital) como función de la energía de excitación E^* , señalando la transición entre los dos regímenes en la misma energía

Eventos generados con $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$ y b variable.

Para colisiones a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$, la dispersión en la energía depositada es más amplia. Eso se refleja particularmente en la distribución de E_{trans} sobre el conjunto de 18809 eventos válidos (figura 3.10).

Asimismo, la mayor disponibilidad de energía permite ver mejor la correlación que existe entre E_{trans} y E^* , como se muestra en la figura 3.11.

Para energías de haz más altas, la clasificación de eventos por E_{trans} tiene mucho más sentido. Seleccionar eventos en un pequeño intervalo de E_{trans} corresponde a seleccionar eventos en un rango también pequeño de E^* , y el ensamble de eventos así seleccionado puede semejar un ensamble canónico. Es factible que uno de los motivos del éxito de los modelos estadísticos de fragmentación tenga su origen en esta observación.

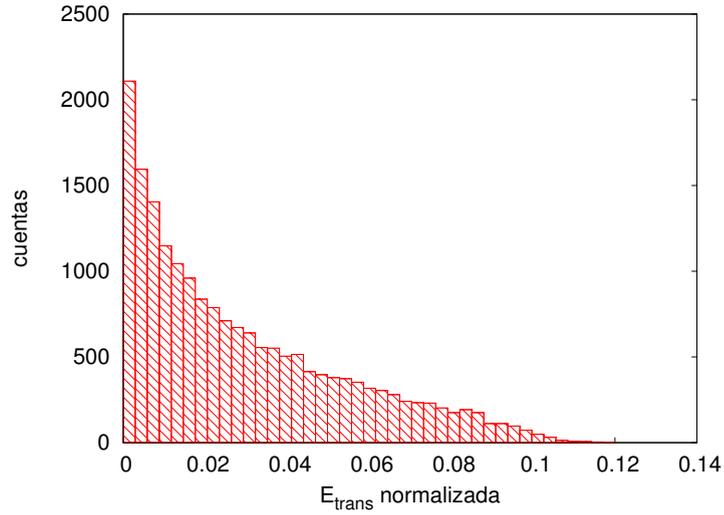


FIGURA 3.10: Histograma de E_{trans} en unidades de E_{beam} para los 18809 eventos válidos a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$.

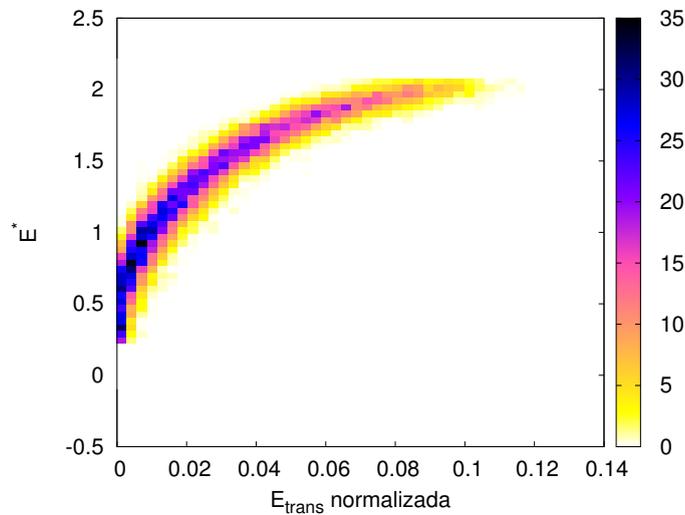


FIGURA 3.11: Histograma de E_{trans} normalizada y E^* para los 18809 eventos válidos a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$.

Nuevamente, la distribución de M_1 es bimodal (figura 3.12), aunque menos pronunciadamente que en el otro conjunto de colisiones.

Sin embargo, el sesgo introducido por la generación de los eventos es más importante para esta energía de colisión. Como puede verse en la figura 3.13, los eventos con baja energía de excitación están severamente sub-representados.

Si se re-pesa el histograma de M_1 la bimodalidad aparece en todo su esplendor (figura 3.14).

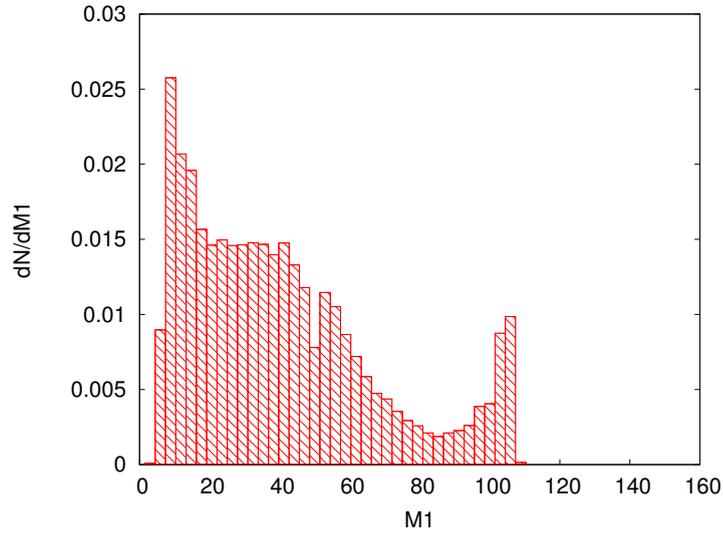


FIGURA 3.12: Histograma de M_1 agrupados de a 3 masas para los 18809 eventos válidos a $E_{beam} = 75 \text{ MeV/A}$.

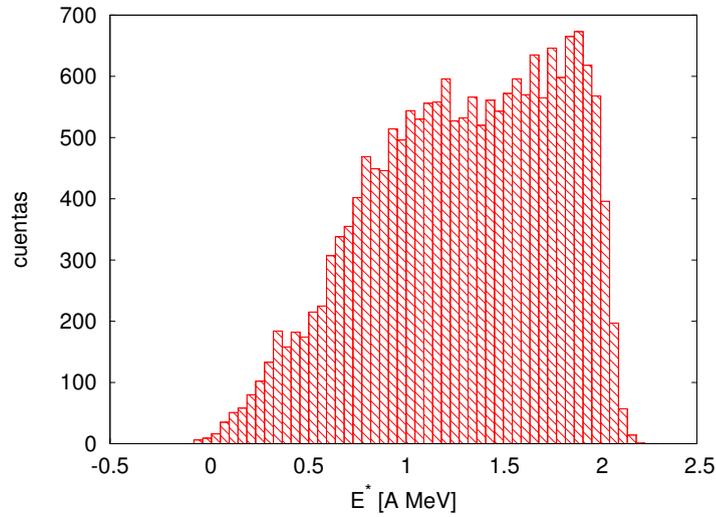


FIGURA 3.13: Histograma de E^* para los 18809 eventos válidos a $E_{beam} = 75 \text{ MeV/A}$.

En los histogramas bidimensionales de M_1 y E^* , el efecto del repesado es más pronunciado, como se ve en la figura 3.15. Nuevamente, aplicamos un filtro adicional ignorando rangos de E^* que contienen menos de 100 eventos como criterio para tener estadística suficiente.

Por último, representamos en la figura 3.16 el valor más probable del parámetro de asimetría A_2 junto con la NVM en función de la energía de excitación E^* .

Notablemente, la energías alrededor de la cuales ocurre la transición es prácticamente la misma para los dos conjuntos de colisiones, aunque la energías disponibles es el doble para el segundo conjunto que para el primero. Postergaremos una comparación detallada

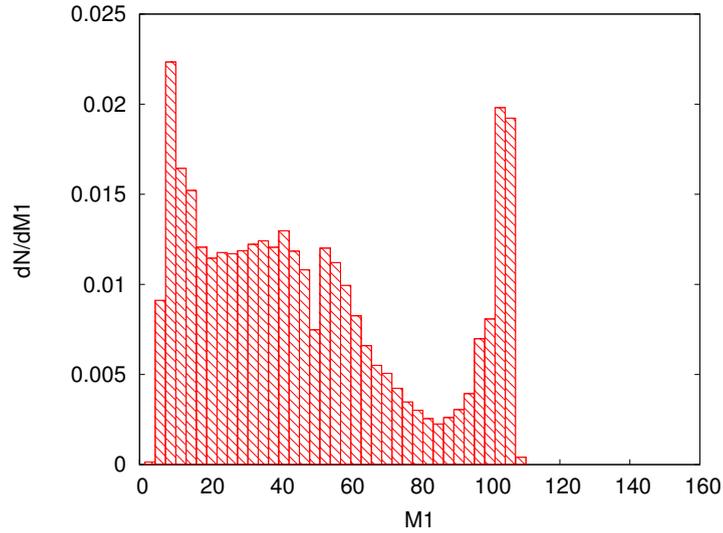


FIGURA 3.14: Histograma re-pesado de M_1 agrupados de a 3 masas para los 18809 eventos válidos a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$.

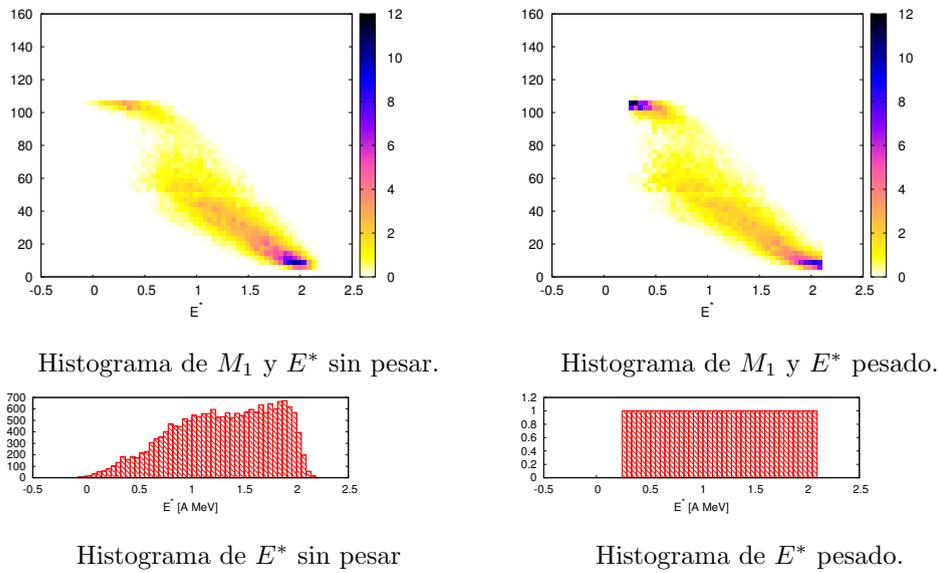


FIGURA 3.15: Histogramas varios antes y después de re-pesar para eliminar el sesgo introducido por el criterio de selección en eventos con b variable a $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$.

de esta coincidencia para después de haber analizado los mismos observables en colisiones centrales a energía variable.

3.1.2. Colisiones centrales a energía variable

Las colisiones centrales presentan características dinámicas distintas a las periféricas: en colisiones centrales las hipotéticas fuentes de fragmentos son más pesadas y su momento angular es sistemáticamente menor. Resulta interesante estudiar si en el marco de *CMD* existe alguna diferencia en el patrón de fragmentación de los dos escenarios.

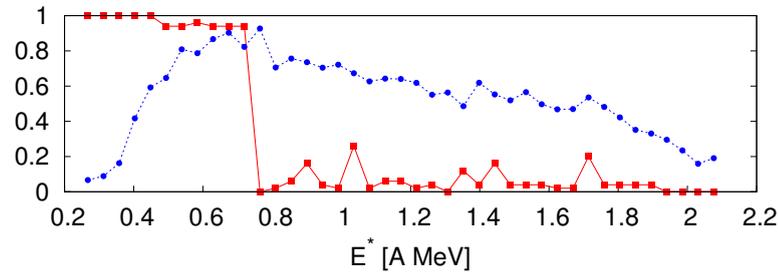


FIGURA 3.16: Valor más probable de A_2 (cuadrados, rojo en versión digital) y NVM (círculos, azul en versión digital) como función de la energía de excitación E^* , señalando la transición entre los dos regímenes en la misma energía

Para eso simulamos un total de 33000 colisiones centrales ($b < 0,5$ fm) a diferentes energías de haz entre $14 \text{ MeV}/A < E_{beam} < 56 \text{ MeV}/A$. Sobre estas condiciones aplicamos los mismos criterios de selección que para las colisiones con b variable (Eliminamos eventos con menos de 3 fragmentos (incluyendo partículas libres) pero conservamos eventos con exactamente 3 fragmentos si el más grande contiene más del 75 % de la masa del proyectil). Con esos filtros, sobreviven 31132 eventos.

En la figura 3.17 se muestra la distribución de energías de excitación en el ensamble, junto con las distribuciones provenientes de cada energía.

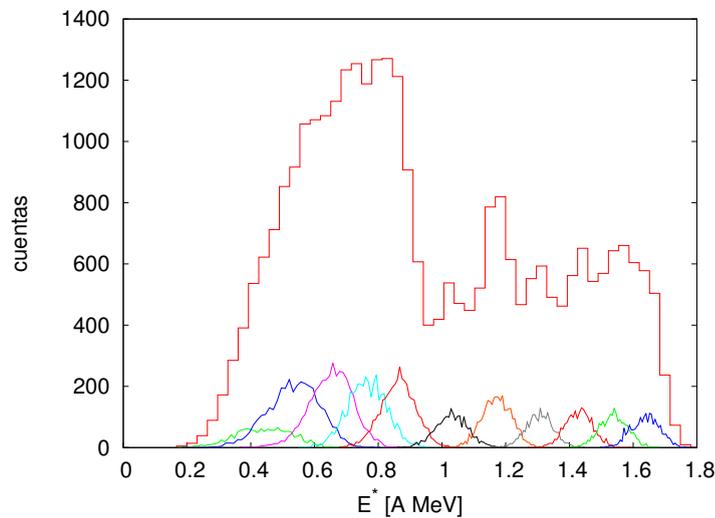


FIGURA 3.17: Histograma de E^* para los 31132 eventos válidos generados en colisiones centrales.

Comparando con la figura 3.13 puede verse que el rango de energías de excitación muestreado por este ensamble se superpone casi completamente con el producido con b variable y $E_{beam} = 75 \text{ MeV}/A$. Más allá de esto, la cantidad de eventos simulada a cada energía fue mayormente arbitraria e improvisada, como delata el perfil irregular de la distribución de energías. El único cuidado particular que tuvimos fue en intentar lograr

un muestreo abundante de la zona de transición, pero nos encontramos con dificultades. Como puede verse de las distribuciones de E^* para cada E_{beam} por separado en la figura 3.17, para las energías más bajas simulamos más eventos. Para las energías por debajo de la transición, el criterio de selección implementado es demasiado restrictivo para colisiones centrales y relativamente pocos eventos lo supera.

Sorprendentemente, la correlación entre E_{trans} y la energía de excitación E^* es muy similar en colisiones centrales (figura 3.18) y periféricas (figuras 3.4 y 3.11). Esto confirma que E_{trans} es un buen observable para clasificar eventos en experimentos reales, particularmente cuando E_{trans} es suficientemente alta.

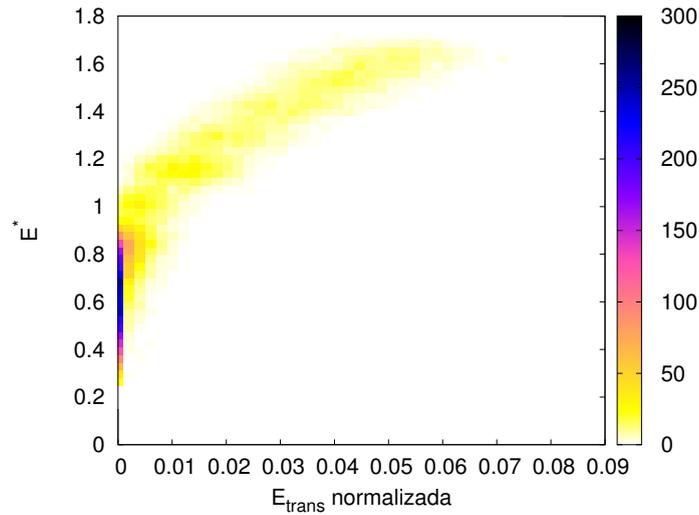


FIGURA 3.18: Histograma de E_{trans} normalizada y E^* para los 31132 eventos válidos generados en colisiones centrales.

La distribución de M_1 y E^* para este conjunto de eventos que se presenta en la figura 3.19, muestra muy elocuentemente el sesgo producido por la generación y selección de eventos (pico a $E^* \sim 5,7$ MeV sin pesar), y también la robustez del procedimiento de re-pesado para reducirlo y revelar la física subyacente. Debido a la baja representación de eventos poco energéticos, en este caso se impuso un mínimo de 50 eventos para cada *bin* de E^* .

La bimodalidad en la distribución marginal de M_1 sólo se hace evidente sólo después de re-pesar los histogramas (figura 3.20).

Notablemente, el pico correspondiente a eventos tipo líquido (M_1 grande) ocurre para masas mayores en colisiones centrales que en periféricas. Para colisiones centrales se observen muchos más eventos con M_1 mayor que la de cada núcleo participante por separado (107) que en colisiones periféricas. Esto sugiere que en las colisiones centrales poco energéticas, los núcleos sufren más frecuentemente una fusión incompleta que luego

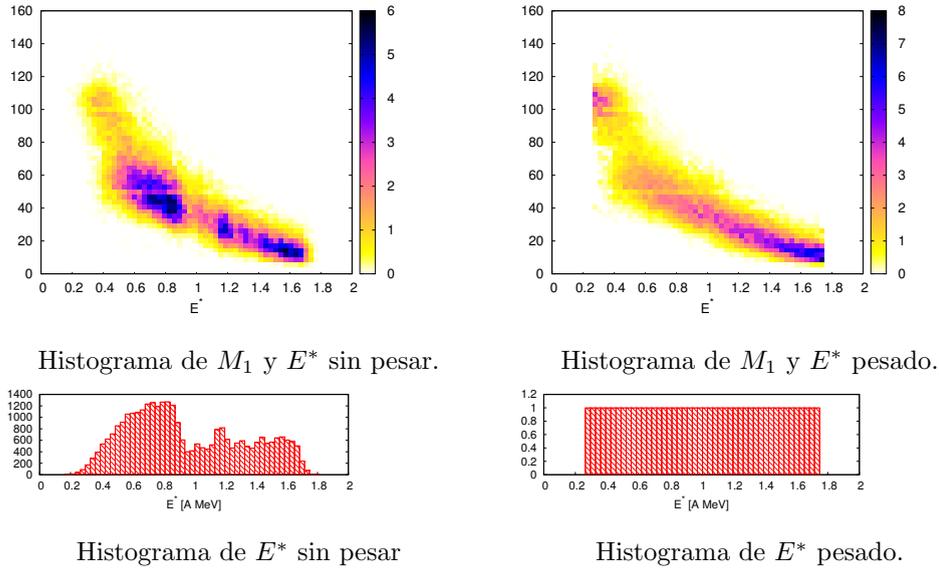


FIGURA 3.19: Histogramas varios antes y después de re-pesar para eliminar el sesgo introducido por el criterio de selección en el conjunto de colisiones centrales.

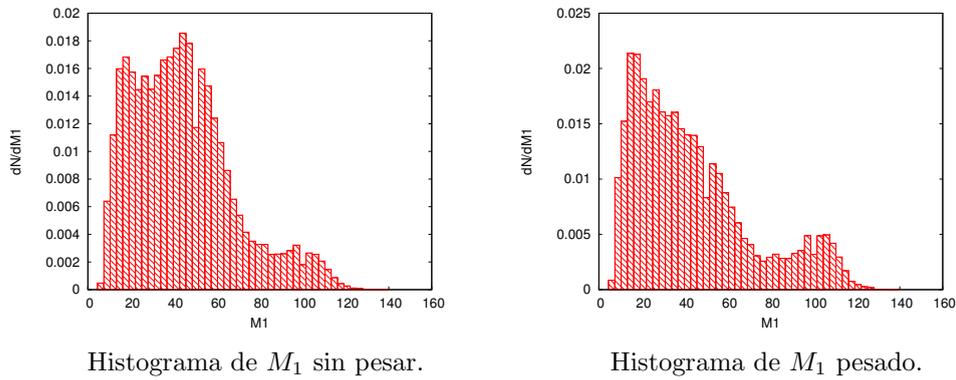


FIGURA 3.20: Histogramas varios antes y después de re-pesar sobre el conjunto de colisiones centrales válidas.

puede decaer, o no¹. En este escenario, la exigencia de que la configuración asintótica contenga al menos 3 fragmentos es la responsable de eliminar gran parte de los eventos tipo líquido.

A pesar de todo, decidimos mantener el mismo criterio de selección de eventos en todos los casos para que la comparación entre los dos escenarios sea más honesta.

Por último, mostramos en la figura 3.21 el valor más probable del parámetro de asimetría A_2 junto con la NVM para el conjunto de colisiones centrales.

En este caso las señales no coinciden, pero el salto en A_2 ocurre sistemáticamente a la misma energía para todos los casos. Pero dado que el pico en la NVM para colisiones

¹Sería interesante estudiar el rol del impulso angular en este fenómeno, pero eso excede los objetivos de este trabajo.

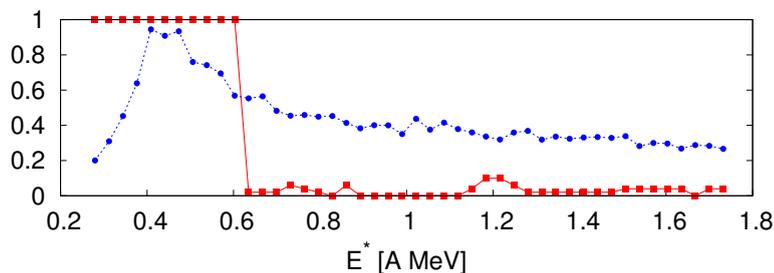


FIGURA 3.21: Valor más probable de A_2 (cuadrados, rojo en versión digital) y NVM (círculos, azul en versión digital) como función de la energía de excitación E^* .

centrales aparece en una región de energías pobremente muestreadas, es razonable pensar que con mejor estadística las dos señales también coincidirían en este caso.

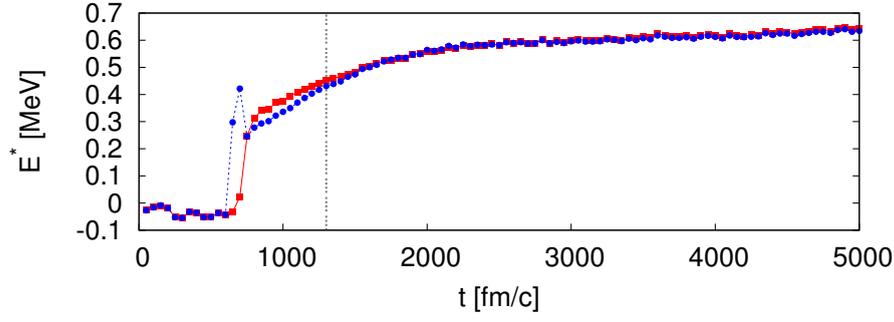
3.1.3. Evolución temporal

Para estudiar los aspectos dinámicos de la formación de estas señales, seleccionamos tres valores de E_{beam} a $b = 0$: $E_{beam} = 15 \text{ MeV/A}$, energía por debajo de la transición, $E_{beam} = 18 \text{ MeV/A}$, levemente superior a la transición, y $E_{beam} = 28 \text{ MeV/A}$, superior a la transición. En cada caso consideramos promedios sobre 100 evoluciones.

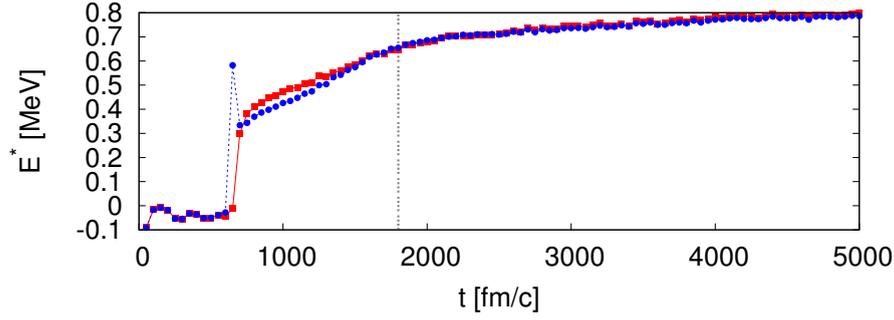
La evolución temporal de E^* que se muestra en la figura 3.22 revela que después de una excitación violenta, coincidente con la etapa de compresión², el proceso de desexcitación continúa por caminos distintos según la energía de la colisión. Vale recordar que definimos la diferencia entre la energía interna de cada fragmento a tiempo t y la energía interna inicial, coincidente con las energías de estado fundamental de los núcleos de Ag . El aparente incremento de la energía de excitación para las colisiones poco energéticas (figura 3.22) se debe a que esos sistemas siguen emitiendo partículas livianas, lo que aumenta la diferencia con la energía inicial. Para energías altas, el escenario de formación rápida y masiva de clusters parece ser adecuado.

Un observable que ha mostrado ser muy útil en la determinación de la estabilidad microscópica de los fragmentos es el llamado coeficiente de persistencia introducido en [107, 115]. Este coeficiente es propio de los modelos dinámicos microscópicos y se calcula a partir de dos cantidades: Se define $a_c(t_2) = (m_c(m_c - 1))/2$ como el número de pares de partículas en el cluster c que existe a tiempo t_2 . Y sea $b_c(t_1)$ el número de pares del cluster c del tiempo t_2 que permanecen juntos en un mismo cluster a tiempo t_1 (pares persistentes). El coeficiente de persistencia propiamente dicho es:

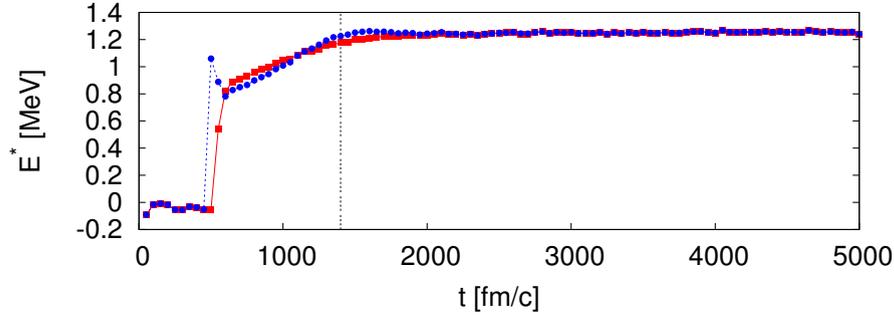
²Los detalles de esta etapa se pierden casi completamente por la baja resolución temporal, pero ha sido extensamente estudiada en trabajos previos (ver sección 2.2).



Evolución de E^* para colisiones centrales a $E_{beam} = 15$ MeV/A, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital).



Evolución de E^* para colisiones centrales a $E_{beam} = 18$ MeV/A, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital).



Evolución de E^* para colisiones centrales a $E_{beam} = 28$ MeV/A, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital).

FIGURA 3.22: Evolución de E^* para colisiones centrales y varias energías de centro de masa. Las líneas verticales señalan el tiempo en el cual los fragmentos alcanzan estabilidad microscópica como se definirá a continuación.

$$P(t_1, t_2) = \left\langle \frac{1}{\sum_c m_c} \sum_c m_c \left(\frac{b_c}{a_c} \right) \right\rangle_{ev} \quad (3.4)$$

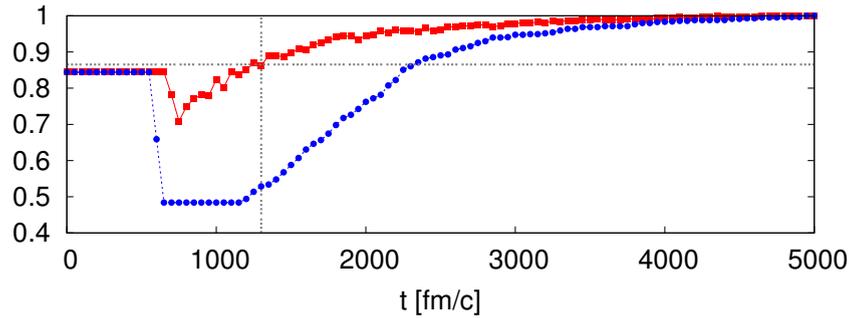
donde el promedio se calcula sobre eventos. Este coeficiente vale 1 si todos los fragmentos permanecen inalterados entre t_1 y t_2 . El coeficiente de la ecuación 3.4 compara

microscópicamente los fragmentos a tiempo t_1 con los fragmentos a t_2 , independientemente del orden temporal. Si, en particular, tomamos $t_1 = \infty$ como referencia y $t_2 = t$, el coeficiente da una medida del grado en que los clusters a tiempo t asemejan a los asintóticos. Ese coeficiente en particular, llamado coeficiente de persistencia inversa, permite determinar a qué tiempo los fragmentos asintóticos ya están formados.

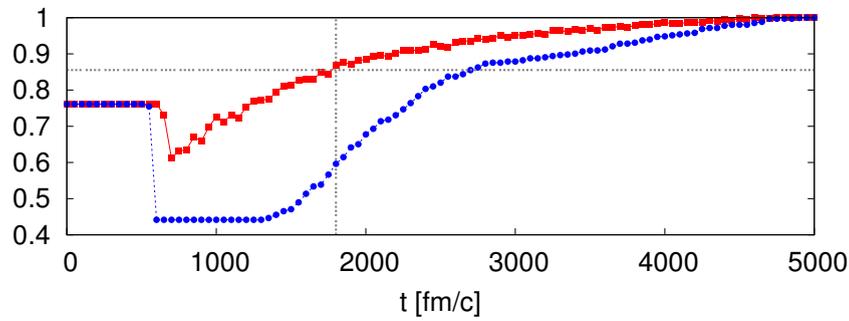
En la figura 3.23 se muestra el coeficiente de persistencia inversa para fragmentos *ECRA* y *MST* a las tres energías estudiadas. Las líneas horizontales corresponden a valores de referencia calculado como la persistencia en un proceso ideal en el cual cada cluster asintótico evapora una partícula. Cuando el coeficiente de persistencia alcanza el 90 % de este valor, el resto de la evolución es dominado ampliamente por procesos de evaporación y la fragmentación habrá terminado. Cuando esto ocurra, diremos que los fragmentos habrán alcanzado estabilidad microscópica.

Como puede verse, los fragmentos *ECRA* alcanzan estabilidad microscópica cuando el algoritmo *MST* identifica casi un único fragmento. Esto significa que el germen de los fragmentos asintóticos ya se encuentra presente en las correlaciones en el espacio de fases que revela *ECRA* a tiempos muy cortos, como ya se había probado en [15, 107]. Por lo tanto, la hipótesis de que los fragmentos se forman en equilibrio en un volumen de *freeze-out*, definido como el volumen que ocupan los fragmentos cuando dejan de interactuar entre sí, no parece verificarse en el contexto de *CMD*. Y más importante aún, no es necesaria para que se observen las señales de transición estudiadas en este trabajo.

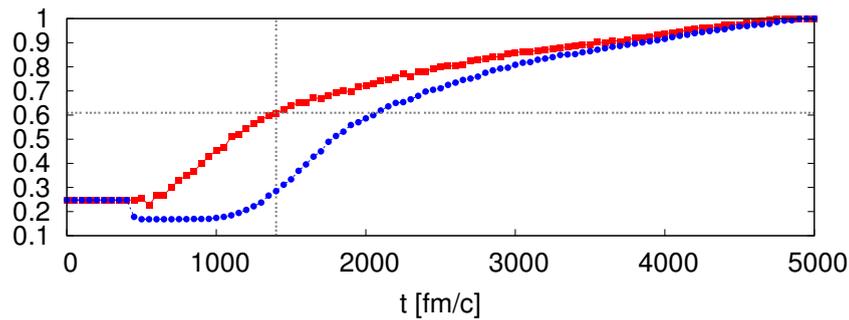
En particular el fragmento más pesado, esencial para el observable de bimodalidad, también está casi completamente determinado (a menos de procesos de evaporación) antes de que el sistema termine de fragmentarse en el espacio de configuraciones (figure 3.24). Nuevamente concluimos que la hipótesis de emisión en equilibrio no es necesaria para que la bimodalidad en M_1 se produzca.



Persistencia para colisiones centrales a $E_{beam} = 15 \text{ MeV}/A$, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital)

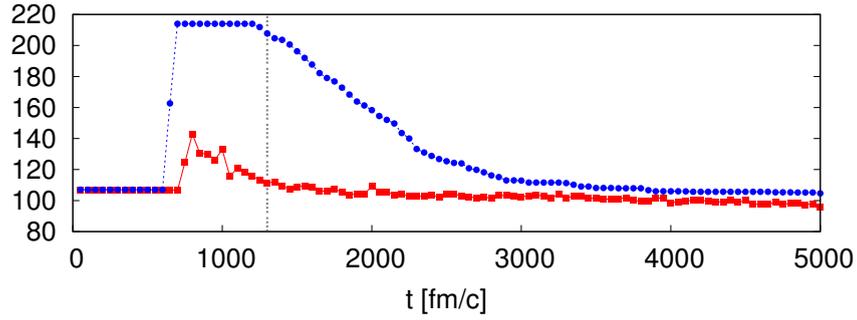


Persistencia para colisiones centrales a $E_{beam} = 18 \text{ MeV}/A$, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital)

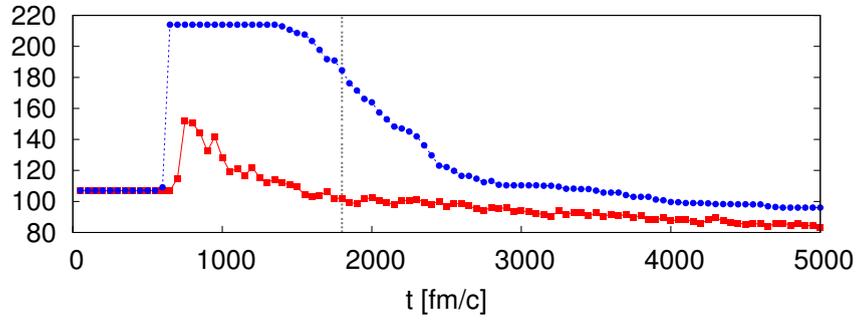


Persistencia para colisiones centrales a $E_{beam} = 28 \text{ MeV}/A$, calculada sobre fragmentos *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital)

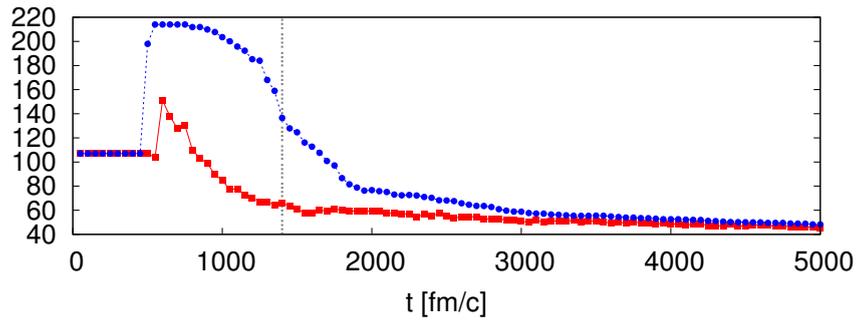
FIGURA 3.23: Coeficiente de persistencia inversa para colisiones centrales a varias energías de centro de masa. Para facilitar la visualización, en lugar de la configuración asintótica como configuración de referencia, se utilizó una a tiempos más cortos que sólo difiere de la asintótica en procesos de evaporación. Y se usaron los fragmentos *ECRA* como referencia en todos los casos.



Evolución temporal de M_1 *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital) para colisiones centrales a $E_{beam} = 15$ MeV/A.



Evolución temporal de M_1 *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital) para colisiones centrales a $E_{beam} = 18$ MeV/A.



Evolución temporal de M_1 *MST* (círculos, azul en versión digital) y *ECRA* (cuadrados, rojo en versión digital) para colisiones centrales a $E_{beam} = 28$ MeV/A.

FIGURA 3.24: Evolución temporal de la masa del fragmento más grande para colisiones centrales a varias energías de centro de masa.

Capítulo 4

Isoscaling en CMD

4.1. Energía de simetría en CMD

Como se mencionó en la introducción, el término Isoscaling refiere a una relación entre los cocientes de los números de fragmentos producidos en dos reacciones nucleares distintas. Dicha relación está dada por:

$$R_{12}(N, Z) = \frac{Y_2(N, Z)}{Y_1(N, Z)} \propto e^{\alpha N + \beta Z} \quad (4.1)$$

En un comienzo se creyó que el fenómeno de Isoscaling se debía exclusivamente a la existencia de un término de simetría en la energía de ligadura de un núcleo, puesto que la probabilidad de producir un fragmento según tal término, en el ensamble canónico, sería de la forma:

$$p \propto \exp\left(-\frac{E_{sym}}{T}\right) = \exp\left(-\frac{c_{sym}}{T} \frac{(N-Z)^2}{A}\right) \quad (4.2)$$

A partir de esta expresión, puede estimarse la probabilidad de que se produzca un fragmento (A, Z) a partir de un núcleo con Z_i protones y masa A_i . Si se considera el cociente entre las probabilidades de que se formen esos fragmentos a partir de dos núcleos distintos $i = 1, 2$, éste toma la forma:

$$R_{12} \propto \exp\frac{\Delta E_1 - \Delta E_2}{T} \quad (4.3)$$

donde ΔE_i es la energía necesaria para producir un fragmento (A, Z) a partir de un núcleo (A_i, Z_i) . Si se considera que la diferencia entre las energías ΔE_1 y ΔE_2 está dominada por el término de simetría y que, además, $Z \ll Z_1$ y Z_2 y $A \ll A_1$ y A_2 se obtiene

$$\Delta E_1 - \Delta E_2 = 4c_{sym} \left[\left(\frac{Z_1}{A_1} \right)^2 - \left(\frac{Z_2}{A_2} \right)^2 \right] N + \left[\left(\frac{N_1}{A_1} \right)^2 - \left(\frac{N_2}{A_2} \right)^2 \right] Z \quad (4.4)$$

Por último, reemplazando la ecuación 4.4 en la 4.3 y comparando con la 4.1, se obtiene la relación

$$\alpha = \frac{4c_{sym}}{T} \left[\left(\frac{Z_1}{A_1} \right)^2 - \left(\frac{Z_2}{A_2} \right)^2 \right] \quad (4.5)$$

En versiones más sofisticadas de la ecuación 4.1, se incluye una dependencia en T y ρ para el coeficiente c_{sym} . Sin embargo, puesto que el proceso de extraer los parámetros de isoscaling de un experimento es muy entrecabado y requiere promedios y ajustes sobre muchas colisiones diferentes, creemos que puede ser inútil intentar extraer de allí una posible dependencia de los parámetros con ρ y T . Y, desafortunadamente, otros enfoques prometedores[34], como los que pretenden extender la *EOS* de materia nuclear simétrica a través de ecuaciones como de la forma $E(\rho, \delta) = E(\rho, \delta = 0) + S(\rho)\delta^2$, donde $\delta = (\rho_n - \rho_p)/\rho$, aún no han sido vinculadas con el isoscaling.

En consecuencia, optamos por un enfoque más directo y pragmático para entender la conexión entre el isoscaling y la *EOS* nuclear: Realizamos simulaciones de reacciones de isoscaling usando dos *EOS* distintas y buscamos diferencias en el comportamiento de los parámetros de isoscaling. Obtener los mismos resultados para distintas *EOS* anularía prácticamente al isoscaling como una sonda del término de simetría. Más aún, para explorar la posibilidad (implícita en la deducción de la relación entre α y c_{sym}) de que el isoscaling acarrea información de la etapa densa y caliente de la reacción, realizamos el mismo estudio para sistemas confinados y para sistemas en expansión.

4.1.1. Entropía de simetría

El fenómeno del Isoscaling es intrínseco a la desintegración de sistemas de varios componentes. Esto fue probado por primera vez en [96], en el marco de un modelo de percolación policromático. Aquí proponemos una deducción alternativa y más sencilla (aunque más limitada) para mostrar que la existencia de Isoscaling no requiere ni energía ni dinámica y que puede emerger de aspectos probabilísticos de la fragmentación.

Se considera un a urna que contiene A_1 bolillas, de las cuales Z_2 son etiquetadas como protones y el resto como neutrones. Si se extraen sin reponer A de esas bolillas, la probabilidad de obtener exactamente Z protones y $N = A - Z$ neutrones obedece una distribución hipergeométrica. Bajo la aproximación $Z \ll Z_1$ y $A \ll A_1$, la distribución hipergeométrica puede aproximarse por una binomial. En ese caso, la probabilidad de extraer por azar un “fragmento” compuesto por Z protones y $N = A - Z$ neutrones de dicha urna es

$$P_{(A,Z|A_1,Z_1)} \approx \binom{A}{Z} (p_1)^Z (q_1)^N \quad (4.6)$$

donde $p_1 = \frac{Z_1}{A_1}$ y $q_1 = \frac{N_1}{A_1}$

Si se consideran dos urna con distinto número de protones y neutrones, el cociente entre las probabilidades de formar un núcleo (A, Z) en cada una obedece la relación

$$R_{12}(N, Z) \propto \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^Z \left(\frac{q_2}{q_1}\right)^N = \exp(\alpha N + \beta Z) \quad (4.7)$$

con

$$\alpha_{ent} = \ln \left(\frac{N_2 A_1}{N_1 A_2} \right) \quad (4.8)$$

$$\beta_{ent} = \ln \left(\frac{Z_2 A_1}{Z_1 A_2} \right)$$

Por lo tanto, en el contexto de la multifragmentación nuclear, existen varias posibles “causas” de isoscaling. Este isoscaling de origen probabilístico se ha asociado con una entropía de simetría (“Symmentropy”[88]) por lo que algunos autores[86, 89] concluyeron que en la ecuación 4.5, el coeficiente c_{sym} corresponde a alguna energía libre y no a la energía interna de los fragmentos. Sin embargo, esta identificación reposa muy fuertemente en la hipótesis (más veces refutada que confirmada) de que efectivamente se alcanza un equilibrio termodinámico evento a evento.

Como se comentó en la introducción, el modelo *CMD* ya ha sido utilizado para estudiar isoscaling [93, 94]. Lo que pretendemos ahora es constatar, en el contexto de *CMD*, hasta qué punto el parámetro α de isoscaling es capaz de discriminar entre las ecuaciones de estado correspondientes a cada una de las parametrizaciones del potencial.

4.1.2. Dos gotas líquidas en CMD

El primer paso en el programa es determinar los coeficientes de la fórmula semi-empírica de masas 4.9 correspondientes a cada parametrización del potencial nuclear de Pandharipande. Como el modelo es clásico, la fórmula utilizada no incluye un término de paridad, cuyo origen es puramente cuántico.

$$E/A = C_v - C_s A^{-1/3} - C_c (Z(Z-1)) A^{-4/3} - C_{sym} (N-Z)^2 A^{-2} \quad (4.9)$$

Para encontrar los coeficiente, construimos “núcleos” en su estado fundamental. Construimos esos núcleos confinando el número deseado de protones y neutrones con un potencial esférico y con un exceso de energía. A continuación, hicimos evolucionar esos sistemas reduciendo muy lentamente su energía escaleando las velocidades. Cuando se alcanzan energías suficientemente bajas los núcleos se vuelven estables y el potencial confinante deja de ser necesario. Para estar seguros de que los núcleos son efectivamente estables, realizamos la última etapa del enfriamiento sin el potencial confinante. Los estados fundamentales de estos sistemas tienen energías de unión razonablemente comparables con las de núcleos reales para iones pesados, pero sobre-estiman severamente las energías de iones livianos, como se muestra en la tabla 4.1. Para masas mayores que $A \sim 40$, las energías de los núcleos *CMD* difieren en menos de un %15 de las reales [116].

Vale remarcar nuevamente que, dado que el modelo de interacción es puramente clásico, los estados fundamentales de estos núcleos son cristales no esféricos (ver figura 2.2). En la figura 4.1 se muestran las energías de los núcleos de la tabla junto con las energías de los ajustes obtenidos por cuadrados mínimos. Para constatar la significatividad del ajuste se incluyeron en la figura las energías de algunos núcleos que no fueron utilizados para el ajuste.

La fórmulas que mejor reproducen las energías de estos núcleos para cada modelo de interacción tienen los coeficientes que se muestran en la tabla 4.2.

Puede verse que los dos modelos presentan coeficientes de simetría que difieren en casi un %40. Esta diferencia permite analizar la factibilidad y las limitaciones de explorar el término de simetría a partir de observables colisionales como se discutió en la sección 1.3.

TABLA 4.1: Energías de los núcleos usados para ajustar la fórmula. Para referencia se incluyen las energías experimentales según [116]

A	N	Z	E_{Med}	E_{Stiff}	E_{exp}
9	5	4	9.527	9.617	6.463
12	6	6	10.163	10.023	7.680
14	7	7	10.148	10.299	7.476
16	8	8	10.387	10.376	7.976
20	10	10	10.450	10.586	8.032
24	12	12	10.521	10.620	8.261
27	14	13	10.614	10.801	8.332
35	18	17	10.660	10.803	8.520
45	24	21	10.580	10.862	8.619
52	28	24	10.523	10.819	8.776
59	32	27	10.405	10.747	8.768
64	35	29	10.360	10.697	8.739
70	39	31	10.265	10.618	8.709
79	45	34	10.100	10.516	8.696
84	48	36	10.026	10.449	8.717
89	50	39	10.002	10.395	8.714
96	54	42	9.907	10.296	8.654
108	61	47	9.744	10.143	8.542
115	66	49	9.647	10.054	8.517
119	69	50	9.553	9.989	8.499

TABLA 4.2: Comparación de los coeficientes obtenidos con los dos modelos y valores de referencia tomados de [117]

Coeficiente	Medium	Stiff	Experimental
C_v	16.1	17.37	15.75
C_s	11.73	14.38	17.8
C_c	0.788	0.904	0.711
C_{sym}	34.07	25.08	23.7

4.2. Isoscaling para las dos parametrizaciones de CMD

4.2.1. Isoscaling en sistemas confinados

En trabajos anteriores se ha estudiado con *CMD* Isoscaling en colisiones de $^{40}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$, $^{48}\text{Ca} + ^{48}\text{Ca}$ y $^{56}\text{Ca} + ^{56}\text{Ca}$ [88, 93, 95] diferentes energías.

En este caso, comenzamos por estudiar sistemas confinados con $(N, Z) = (40, 40)$ y $(56, 40)$, que corresponderían a una fusión completa de los núcleos de los trabajos previos.

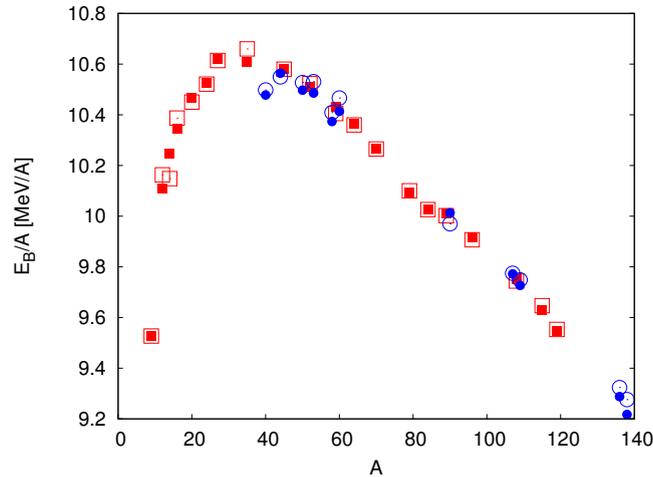
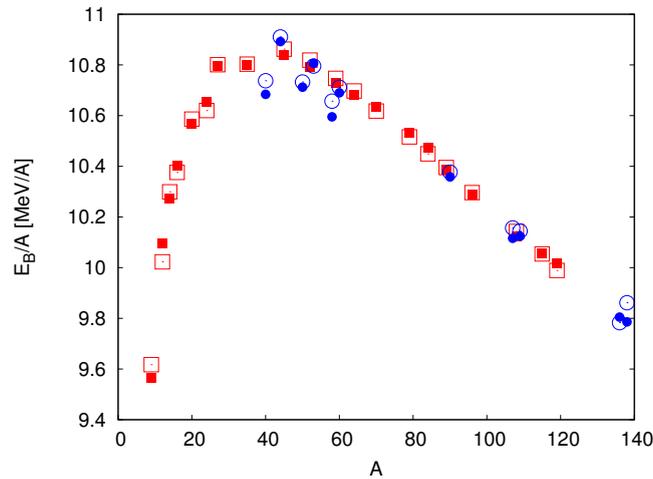

 Energías de unión para núcleos *CMD-Medium*.

 Energías de unión para núcleos *CMD-Stiff*.

FIGURA 4.1: Energías de unión para núcleos *CMD* Medium y Stiff. Los puntos llenos corresponden a las energías de los núcleos y puntos huecos al mejor ajuste. Los cuadrados corresponden a núcleos usados para el ajuste y los círculos son de prueba.

De la misma manera que construimos los núcleos en sus estados fundamentales, colocamos el número deseado de protones y neutrones en un potencial contenedor esférico. Fijamos el radio del contenedor para obtener valores determinados de densidad -3 valores, entre $0,001$ y $0,007 \text{ fm}^{-3}$. Agregamos energía al sistema escaleando las velocidades de las partículas e integramos las ecuaciones de movimiento para calcular las trayectorias de los nucleones individuales. Primero efectuamos una evolución larga para termalizar el sistema, y a continuación realizamos una evolución mucho más larga. De esta evolución termalizada, seleccionamos 2000 configuraciones bien separadas en el tiempo para que estén des-correlacionadas. A partir de la información microscópica dada por las posiciones y velocidades de cada partícula, analizamos la estructura de fragmentos del sistema

utilizando el algoritmo *MSTE* en esas configuraciones seleccionadas¹. Y todo esto para los dos sistemas. Utilizando datos de esas evoluciones, construimos las matrices $Y_i(N, Z)$ para cada sistema y con estas matrices los cocientes $R_{12} = Y_1(N, Z)/Y_2(N, Z)$ para las condiciones enumeradas arriba. Ajustando la ley de isoscaling dada por la ecuación 4.1 usando un método estándar de cuadrados mínimos para todos los puntos correspondientes a cada reacción y energía. De este procedimiento obtuvimos valores para el parámetro α para cada tiempo[118].

En la figura 4.2 se muestra el valor de α obtenido para simulaciones con el potencial Medium, como función de la energía del sistema para tres densidades diferentes.

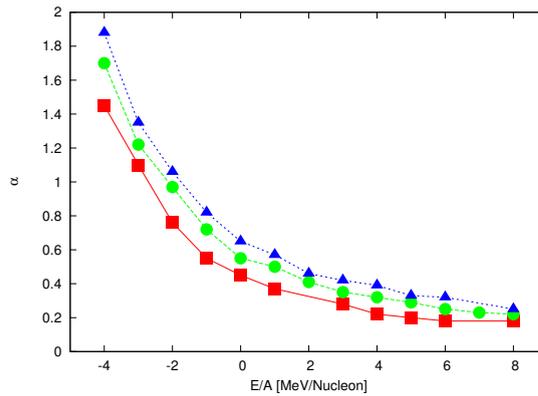


FIGURA 4.2: Parámetro α de isoscaling como función de la energía para sistemas confinados y el modelo Medium a varias densidades: Cuadrados para $\rho = 0,001 \text{ fm}^{-3}$, círculos para $\rho = 0,003 \text{ fm}^{-3}$ y triángulos para $\rho = 0,007 \text{ fm}^{-3}$.

Es importante notar que α es una función decreciente de la energía del sistema y, más importante aún, converge a un valor constante que es muy similar al valor que se obtiene para estos sistemas según la ecuación 4.8: $\alpha_{ent} \approx 0,154$. Esto hace suponer que, para energías altas, el isoscaling observado está dominado por la entropía de simetría. Para confirmar esa sospecha, realizamos las mismas simulaciones pero con el potencial Stiff. En la figura 4.3 se muestran las curvas de α como función de la energía para los dos potenciales a densidad $\rho = 0,003 \text{ fm}^{-3}$.

Puede verse claramente que para energías altas las dos curvas convergen al mismo valor y que, por lo tanto, el uso directo de la ecuación 4.5 no es correcto.

4.2.2. Isoscaling en sistemas en expansión

Se ha reiterado en varias ocasiones en esta tesis que la expansión colectiva de los sistemas estudiados impide o limita la utilización de herramientas de la termodinámica usual. Para

¹Debe tenerse en cuenta que los fragmentos detectados de esta manera corresponden a una dada configuración de la evolución y son “inestables” en el sentido de que su vida media es relativamente corta.

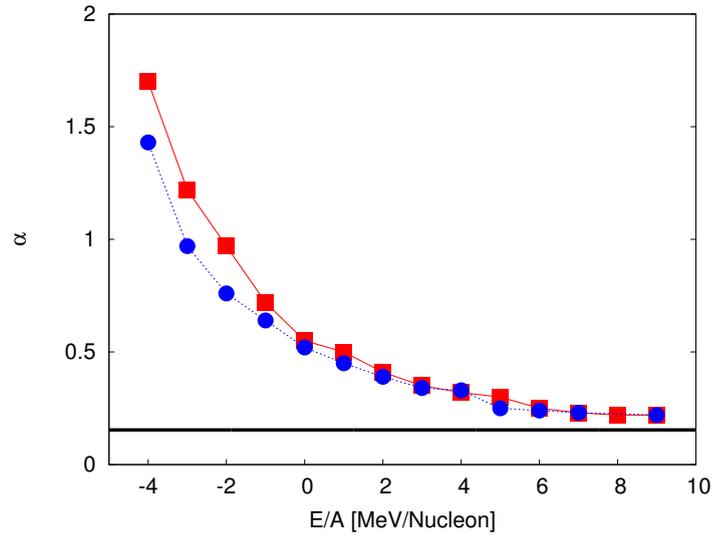


FIGURA 4.3: Parámetro α de isoscaling como función de la energía del sistema a densidad $\rho = 0,003 \text{ fm}^{-3}$. Los cuadrados corresponden al modelo Medium y los círculos al Stiff. La línea horizontal es el valor α_{ent} correspondiente al isoscaling entrópico.

evaluar el efecto de la expansión sobre el isoscaling, reprodujimos los cálculos anteriores pero para sistemas en expansión. Para ello, tomamos las configuraciones de equilibrio registradas en los sistemas confinados, retiramos el potencial confinante y seguimos la evolución subsiguiente. Una vez alcanzado el estado asintótico, repetimos el cálculo del parámetro α [119].

La figura 4.4 muestra los valores de α producidos a partir de estos cálculos. Cada punto de esta figura corresponde con a un punto de la figura 4.3, lo que permite detectar una pequeña disminución global en los valores de α con respecto de los correspondientes a sistemas confinados, pero ninguna diferencia esencial.

Nuevamente se observa que la diferencia entre los valores obtenidos con las dos *EOS* se desvanece para energías altas. Ambas parecen tender al límite entrópico y por lo tanto no proveen información alguna sobre la ecuación de estado a esas energías.

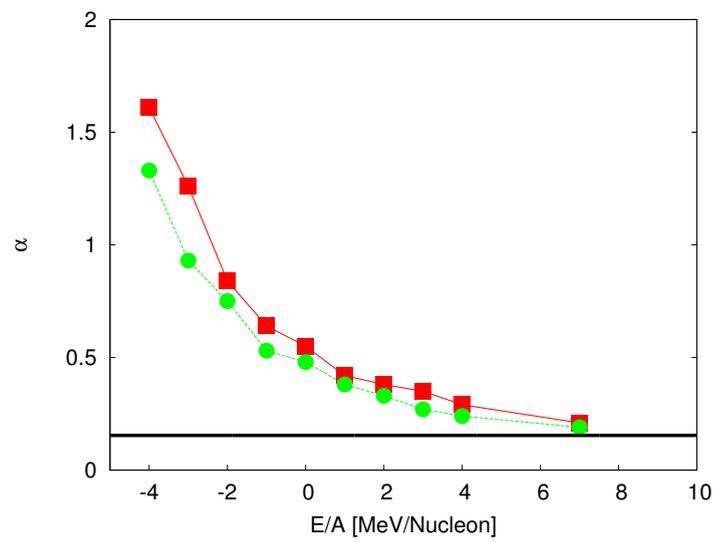


FIGURA 4.4: Parámetro α de isoscaling como función de la energía del sistema para expansiones desde densidad $\rho = 0,003 \text{ fm}^{-3}$. Los cuadrados corresponden al modelo Medium y los círculos al Stiff. La línea horizontal es el valor α_{ent} correspondiente al isoscaling entrópico.

Capítulo 5

Estrellas de Neutrones

5.1. Ecuación de estado de la materia nuclear

El proceso de multifragmentación en colisiones de iones pesados sería la manifestación en sistemas finitos de una transición de fase que estaría bien definida para materia nuclear infinita, en el límite termodinámico. Mucho se ha argumentado al respecto, y la comunidad nuclear mayoritariamente acepta que esa transición sería de tipo líquido-vapor [3, 47, 49]. La principal dificultad presente en el estudio de esta transición de fase proviene precisamente de la imposibilidad de realizar experimentos de laboratorio con sistemas nucleares de más de algunos centenares de partículas. El objetivo último que se persigue con esos experimentos es determinar la ecuación de estado de la NM. Es decir, la presión P de la NM como función de la densidad ρ , la temperatura T y la fracción de protones x . A partir de experimentos de colisiones de iones pesados (en multifragmentación) puede, en principio, explorarse la ecuación de estado a T y ρ altas y para fracciones de protones cercanas a $x \sim 0,5$ [120, 121], pero no es posible producir materia nuclear densa y fría en un laboratorio terrestre.

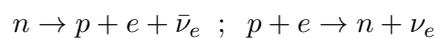
La corteza de las estrellas de neutrones, en cambio, proveen el escenario ideal para el estudio en *bulk* de un sistema similar a la NM fría llamado Materia de Estrellas de Neutrones (NSM) y que se describirá en la sección 6.

5.1.1. Vida y muerte de una estrella masiva

Una estrella es estable mientras las reacciones nucleares de fusión en su interior proveen suficiente energía y presión para compensar la compresión que ejerce la atracción gravitatoria. Cuando nace, una estrella consume principalmente Hidrógeno, produciendo Helio en el proceso. Unos 10^{10} años después el Hidrógeno se agota y la estrella, que ya

no puede compensar la compresión gravitatoria, se contrae y se calienta. Esto le permite comenzar a fusionar Helio, que vuelve a generar presión suficiente para evitar el colapso gravitatorio. A medida que envejece, una estrella va consumiendo y agotando sucesivamente Hidrógeno, Helio, Carbono, Neón, Oxígeno y Silicio. Cada vez que la estrella agota un tipo de combustible, su núcleo se contrae, se calienta y comienza a consumir un nuevo combustible que en general es el producto de la fusión del anterior. Esto se conoce como la “secuencia principal” de una estrella [122]. Para poder fusionar elementos cada vez más pesados una estrella requiere mayor temperatura y solo estrellas muy masivas (con masa $M > 8M_{\odot}$) pueden completar la secuencia. El producto de la fusión de silicio (la última etapa de la secuencia) es principalmente Hierro, y dada su alta energía de unión no es posible extraerle energía por fusión¹. Como no es útil como combustible para la estrella, el hierro se va acumulando en el núcleo estelar. En la etapa de silicio (que dura un par de semanas), casi toda la presión que evita el colapso es provista por un gas degenerado de electrones. Eventualmente el núcleo (principalmente formado por hierro) alcanza una masa de $1,5M_{\odot}$, con un tamaño similar al de la Tierra y una densidad superior a los $10^{10}g/cm^{-3}$.

A esas densidades los electrones comienzan a ser capturados por los núcleos de hierro, aumentando la proporción de neutrones y privando al núcleo estelar de la presión de degeneración de los electrones. Esto precipita el colapso gravitatorio del núcleo que comienza a comprimirse violentamente a una velocidad de $0,25c$. Eventualmente la componente repulsiva de la interacción nuclear detiene la compresión y el núcleo comienza a expandirse. Todo el proceso lleva del orden de un segundo. Durante esta etapa, el núcleo emite una gran cantidad de neutrinos, presuntamente originados en proceso de URCA:



Por mecanismos que no están del todo claros la expansión se detiene, conformando una proto-estrella de neutrones caliente (a unos $20 - 50MeV$).

Esa proto-estrella de neutrones va acreciendo material de las capas exteriores de la estrella y, si no se convierte en un agujero negro, se enfría hasta estabilizarse (principalmente por medio de la emisión de neutrinos) formando un núcleo rico en neutrones de aproximadamente $10km$ de radio: una estrella de neutrones propiamente dicha. Durante esta etapa, la proto-estrella de neutrones emite hasta un 10% de su masa en reposo en forma de neutrinos y se cree que la interacción de estos neutrinos con el material de las capas exteriores de la estrella es lo que produce la Super Nova, aunque no hay consenso sobre los detalles del mecanismo [122, 123]. También está en discusión la factibilidad del

¹Notar que el máximo de la energía de unión de los núcleos *CMD* ocurre cerca del Hierro (figura 4.1).

proceso de URCA como mecanismo de enfriamiento [124, 125], puesto que para algunos modelos de ecuación de estado la fracción de protones en equilibrio no sería suficiente como para producir la cantidad de neutrinos necesaria.

5.1.2. Estrellas de Neutrones por dentro

Las estrellas de neutrones se encuentran entre los objetos más densos del universo. En la jerga astronómica, una estrella de neutrones rotante es un pulsar. Con masas entre 1 y 2 masas solares y radio del orden de 10km ($10^{-5}R_{\odot}$), su densidad media es de unos $5 \times 10^{14}\text{g/cm}^3$ ($\sim 0,2$ nucleones/ fm^3), comparable con la de los núcleos atómicos en condiciones normales (a la densidad normal $\rho_0 \sim 3 \times 10^{14}\text{g/cm}^3 \approx 0,16$ nucleones/ fm^3)[126].

El centro de las estrellas de neutrones (fig. 5.1) estaría formado por una fase exótica muy densa (tal vez un plasma de quarks-gluones o un superfluido de neutrones) que conforma el llamado núcleo interior. Ese núcleo interior estaría rodeado por un núcleo exterior compuesto por un líquido de Fermi de protones y neutrones. A su vez, este núcleo estaría recubierto por una corteza que se divide groseramente en dos capas: una corteza interior de aproximadamente $1-2\text{km}$ de espesor y una corteza exterior de $1/2\text{km}$ compuesta por iones y electrones [126–129].

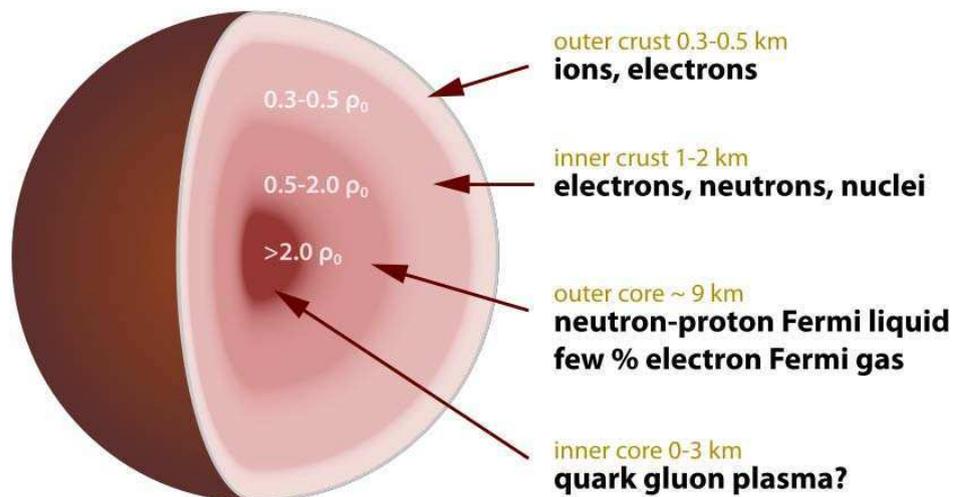


FIGURA 5.1: Sección de una estrella de neutrones. Imagen de Wikimedia Commons.

A aproximadamente $1/2\text{km}$ de la superficie se alcanza la densidad de “neutron drip” ($\sim 4 \times 10^{11}\text{g/cm}^3$), señalando el límite entre la corteza exterior y la corteza interior. En el otro extremo de la corteza interior, cerca del núcleo líquido, la materia nuclear se halla en una fase uniforme a densidad normal, pero con un exceso de neutrones producidos por la captura de electrones, y siempre embebida en un mar de electrones que garantizan

la neutralidad de carga eléctrica. La corteza interior en si es *terra incognita* y es la que nos interesa, puesto que allí habría NSM en equilibrio termodinámico a todas las densidades de interés para la presunta transición de fase de NM, que se manifestaría como multifragmentación en colisiones de iones pesados.

En conjunción con el gradiente de densidad, la corteza interior presenta un gradiente de temperaturas (está más caliente cerca del centro que en la superficie) y un gradiente en la fracción de protones $x = Z/A$, puesto que a mayor densidad la captura de electrones es más probable. Esto significa que alejándose del centro de la estrella, la densidad disminuye junto con la temperatura mientras que la fracción de protones aumenta. Los perfiles de densidad, temperatura y de x dependen fuertemente de la ecuación de estado [124, 129]. En particular, en los muy populares modelos de campo medio, la densidad de transición entre el núcleo y la corteza interior es muy sensible al término de simetría [130].

5.1.3. Vínculos entre física de Iones Pesados y astrofísica nuclear

La extrapolación de resultados de iones pesados a sistemas astrofísicos no es para nada trivial. Las estrellas de neutrones son 18 órdenes de magnitud más grandes que los núcleos y los procesos que llevan a su formación son también 18 órdenes de magnitud más lentos que los involucrados en experimentos de colisiones de iones pesados [121, 130]. Que las escalas temporales sean más lentas implica que estos sistemas nucleares infinitos pueden alcanzar un equilibrio termodinámico, pero su extensión espacial hace que la interacción de Coulomb juegue un rol completamente distinto (esto se discutirá en detalle en la sección 6.1.2).

Se supone que la ecuación de estado de las proto-estrellas de neutrones podría estar directamente relacionada con la que podría obtenerse en colisiones de iones pesados (por ejemplo, a partir de isoscaling) dadas sus condiciones de densidad y temperatura. Pero como se ha mostrado en el capítulo 4, precisamente a esas temperaturas el isoscaling está dominado por la entropía y no da información sobre la EOS. Por ahora, la dependencia de dicha ecuación de estado con la temperatura sólo puede estimarse a partir de modelos teóricos (en general de campo medio) calibrados con propiedades de núcleos estables. Los experimentos de multifragmentación nuclear permiten imponer restricciones generales a los modelos [130]. Por otro lado, los experimentos de multifragmentación nuclear permitirían estudiar el comportamiento de protones y neutrones en el rango de densidades que ocurren en la corteza interior de estrellas de neutrones, pero a temperaturas mayores [121].

Otra dificultad para extrapolar datos de experimentos terrestres proviene de que la asimetría de isospín en estrellas de neutrones es mucho mayor que en los iones pesados,

por lo que el término de simetría de la ecuación de estado (y su dependencia con la densidad) sería determinante para muchas de sus propiedades: la densidad de transición entre núcleo y corteza [129], la relación masa-radio [130], la fracción de protones [47, 120, 121] y más. Por eso mismo se está construyendo en Michigan State University un acelerador para estudiar específicamente colisiones de isótopos asimétricos. Dicho acelerador lleva el nombre de FRIB: Facility for Rare Isotope Beams [78].

En otra línea, se ha argumentado que los iones pesado y asimétricos tienen una “piel de neutrones”, es decir, que la distribución de masa de los neutrones en un núcleo tiene una extensión espacial mayor que la de los protones. Curiosamente, existiría un vínculo entre el espesor de la “piel de neutrones” de iones pesados estables y propiedades de las estrellas de neutrones [75]. Tanto la piel de un núcleo como la corteza interior de estrellas de neutrones estarían compuestos por materia rica en neutrones y a densidades similares. Mediciones precisas de núcleos estables pueden dar información acerca de varios aspectos de la física de las estrellas de neutrones [121, 131].

En todos los casos, para poder vincular observables de reacciones de iones pesados o núcleos estables con la física de las NS es necesario extrapolar los resultados a regiones de densidad y temperaturas distintas de aquellas a las que se puede acceder experimentalmente en la Tierra. Para poder hacerlo, contar con un modelo que pueda describir adecuadamente todos los escenarios es de una utilidad inestimable. El modelo CMD modificado apropiadamente como se describirá en el capítulo 6, provee un excelente marco de referencia para buscar correlaciones entre observables de colisiones de iones pesados con observables astrofísicos. En particular, haciendo uso de las dos parametrizaciones disponibles, de observables que puedan proveer información sobre el término de simetría, y que sirvan para orientar las investigaciones a realizarse en el FRIB.

5.1.4. Fases “Pasta”

En condiciones terrestres normales los nucleones se organizan en, valga la doble redundancia, “núcleos normales”. Esos núcleos son más o menos esféricos y están a densidad normal y $T = 0$ por definición. El máximo tamaño que puede tener un núcleo está determinado por un balance entre las interacciones de Coulomb y nuclear: La interacción nuclear favorece la agregación de partículas mientras que la interacción de Coulomb favorece la dispersión de los protones. De la misma manera, la máxima asimetría en isospín que pueden tener está determinada por el término de simetría en la ecuación de estado. En la corteza de las estrellas de neutrones, el intenso campo gravitatorio confina a los nucleones a tales densidades que ese balance se ve modificado y los núcleos normales

dejan de ser estables. Se ha probado bajo distintas aproximaciones y ecuaciones de estado [127, 128, 132–138] que la materia nuclear a baja densidad puede existir formando ciertas estructuras no homogéneas, llamadas colectivamente “Pasta Nuclear” (ver figura 5.2), en coexistencia con una fase gaseosa formada por nucleones libres.

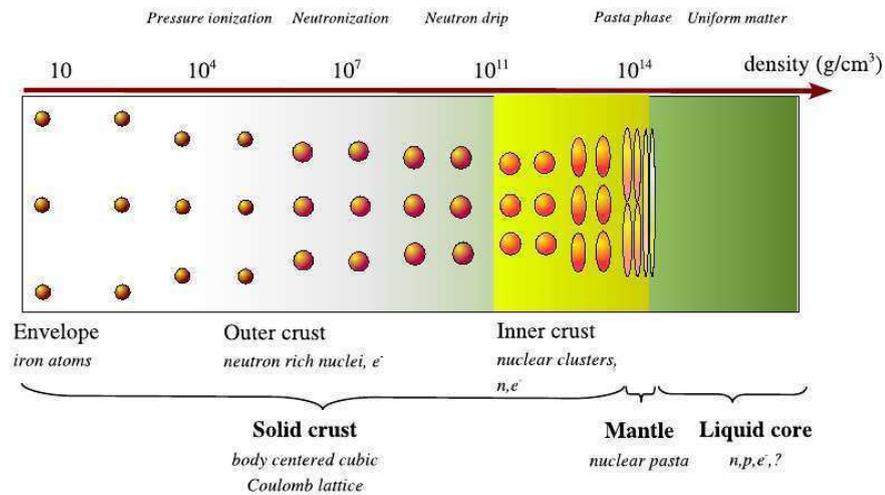


FIGURA 5.2: Imagen esquemática de la estructura del estado fundamental de NSM como función de la densidad. Figura de [139].

Groseramente, el escenario que habitualmente se invoca es el siguiente (ver figura 5.3). A densidades poco menores que la densidad normal, en la fase uniforme empiezan a formarse burbujas aproximadamente esféricas. Y a medida que la densidad disminuye, esas burbujas comienzan a crecer tornándose cilíndricas e “infinitas”. A densidades aún menores, esas burbujas cilíndricas crecen dando lugar a estructuras laminares (llamadas “lasagna”), luego a estructuras alargadas (“spaghetti”) y por último gotas más o menos esféricas (“gnocchi”). A densidades suficientemente bajas, esos gnocchi se vuelven más pequeños y se disuelven en una fase gaseosa prácticamente uniforme compuesta por iones normales y nucleones libres [128].

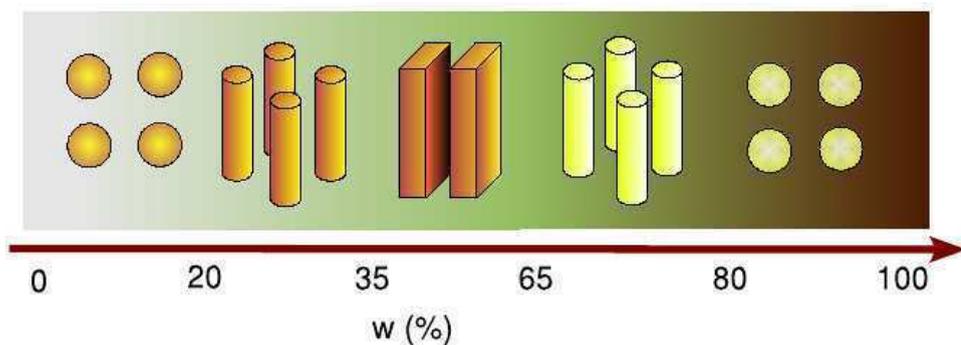


FIGURA 5.3: Caricatura de la secuencia de pastas en la corteza interior de las NS como función de la fracción de volumen w . Figura de [139].

Esas estructuras son el resultado de una competencia entre la interacción nuclear atractiva de corto rango y la interacción repulsiva de Coulomb de largo rango, por lo que el rango de densidades en el que ocurren y las características de cada una dependen del potencial de elección. Incluso algunos investigadores sugieren que la fracción de protones podría ser tan baja que no sería suficiente para la formación de pasta [124].

En particular, la escala espacial de las in-homogeneidades de las fases “pasta” determina las propiedades de transporte de neutrinos de la corteza. El scattering coherente de los neutrinos producidos por la captura de electrones en el núcleo reviste una importancia fundamental en el mecanismo de enfriamiento de una estrella de neutrones (y anteriormente, en el proceso de frenado del colapso de la estrella y en la formación de la siguiente Super Nova[140]). Además, la existencia de estas fases in-homogéneas podría explicar el origen de los llamados “pulsar glitches” y “gamma ray bursts” (GRB) [121, 130].

El objetivo de lo que resta de la tesis es estudiar el comportamiento de sistemas nucleares bajo el formalismo CMD en las condiciones en las que se presentan en la corteza interior de las estrellas de neutrones. Dado que el pasaje de “líquido” nuclear uniforme a “vapor” nuclear uniforme en el límite termodinámico estaría plagado de fases intermedias no homogéneas, comprender en detalle esas fases puede contribuir a comprender mejor el proceso de multifragmentación y a determinar observables astronómicos que puedan proveer información sobre la ecuación de estado de la materia nuclear. En ese sentido, nos hallamos en una posición estratégica dado que nuestro trabajo se haya entre los pocos que utilizan un modelo que es adecuado para estudiar los dos escenarios sin modificaciones severas.

Capítulo 6

Extensión CMD-Infinito

6.1. Simulando Sistemas Nucleares “Infinitos”: Materia de Estrellas de Neutrones

La NSM es un sistema idealizado compuesto por nucleones y electrones. A diferencia de la NM, la interacción de Coulomb está presente en NSM pero esta es eléctricamente neutra debido al balance de cargas. Simular la corteza interior de estrellas de neutrones requiere simular sistemas “infinitos” de nucleones a una determinada densidad, temperatura y fracción de protones, pero simular sistemas realmente infinitos es imposible. El tamaño máximo de sistema que puede simularse está limitado por la capacidad computacional y la paciencia de la que se disponga. Lo más parecido a un sistema infinito que puede simularse es un sistema finito sin interfases o contornos artificiales. Una técnica usual para emular esa ausencia de contornos consiste en confinar un cierto número de partículas en un dominio finito (llamado celda principal o primitiva) sometido a condiciones periódicas de contorno [105].

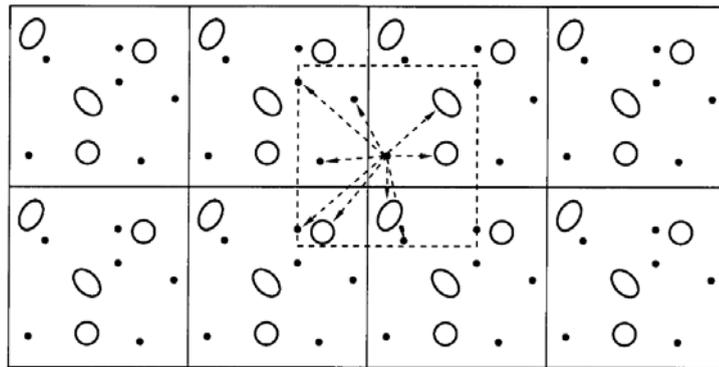


FIGURA 6.1: Esquema para ilustrar las CPC. Figura tomada de [105].

Ajustando el número de partículas y el volumen de la celda se puede controlar la densidad media del sistema simulado.

A los fines prácticos, la celda principal está rodeada completamente con réplicas de ella misma (ver figura 6.1), de manera que partículas cercanas a los bordes pueden interactuar con partículas que se hallen cerca del lado opuesto, donde “cerca” está determinado por el rango del potencial de interacción. Si la celda es muy pequeña respecto del rango de las interacciones, una partícula puede en principio interactuar con más de una réplica de la misma partícula (en celdas vecinas), e incluso con réplicas de ella misma. Por eso es conveniente trabajar con una celda mucho más grande que el rango del potencial de interacción. De esa manera cada partícula interactúa únicamente con la réplica más cercana de las demás y no llega a interactuar con sus propias réplicas. Esto se conoce como convención de la primera imagen.

La imposición de condiciones periódicas de contorno presenta más inconvenientes cuando el sistema a simular incluye interacciones de rango infinito como la de Coulomb, ya que cada partícula cargada formalmente interactúa con infinitas otras, incluyendo sus propias réplicas en otras celdas. Bajo estas condiciones la convención de la primera imagen no puede adoptarse sin más. Para simular la corteza de estrellas de neutrones, alguna aproximación sobre la interacción de Coulomb es necesaria. Y dado el rol central que juega la interacción de Coulomb en la formación de las pastas nucleares, es esperable que los resultados dependan de la aproximación utilizada. Esta cuestión es analizada en la sección 6.1.2.

Para controlar la temperatura de la simulación existen varias técnicas[105]. En este trabajo fue adoptado el termostato de Andersen que se describe en el apéndice B. Para la integración numérica de las ecuaciones de movimiento el algoritmo de Verlet sigue siendo válido, pero el gran número de partículas involucrado hace que sea imprescindible utilizar estrategias que permitan reducir el costo del cómputo de las interacciones. Las estrategias que utilizamos fueron cambiando durante el desarrollo de la tesis de acuerdo a las necesidades puntuales y ameritan una exposición más o menos detallada.

6.1.1. Listas de vecinos (“Cell linked Lists”)

La mayor parte del costo computacional de una simulación de dinámica molecular reside en el cálculo de las fuerzas. El esquema más directo y menos eficiente para hacer esto es recorrer todas las partículas. Luego, para cada partícula, recorrer todas las demás. Para cada par de partículas hay que evaluar la distancia y eventualmente la fuerza. Este esquema de “fuerza bruta” involucra dos bucles anidados sobre $\mathcal{O}(N)$ partículas, por

lo que su costo escala con el número de partículas al cuadrado ($\mathcal{O}(N^2)$) y se vuelve impracticable para sistemas con más de un centenar de partículas.

Si los potenciales involucrados son de rango finito, aunque la mayoría de los pares se hallen tan alejados que no podrán interactuar, el esquema de fuerza bruta es particularmente ineficiente. Si no se toman otras medidas, se evalúan las distancias entre todos los pares de partículas (o la mitad si se utiliza la tercera ley de Newton) innecesariamente.

Una de las técnicas más elementales para reducir el costo computacional de la evaluación de las fuerzas de rango finito consiste en construir listas de las partículas que se hallen próximas en el espacio y utilizar estas listas para identificar qué pares de partículas interactuarán. El esquema es el siguiente. Se divide la celda principal de la simulación en celdas más pequeñas (ver figure 6.2) y se guarda registro de qué partículas se encuentran en cada una. Si los potenciales de interacción son de corto rango y se elige adecuadamente el tamaño de las celdas, cada partícula podrá interactuar únicamente con otras que se encuentren en la misma celda o en las vecinas inmediatas. Este esquema reduce drásticamente la cantidad de distancias espurias que se evalúan.

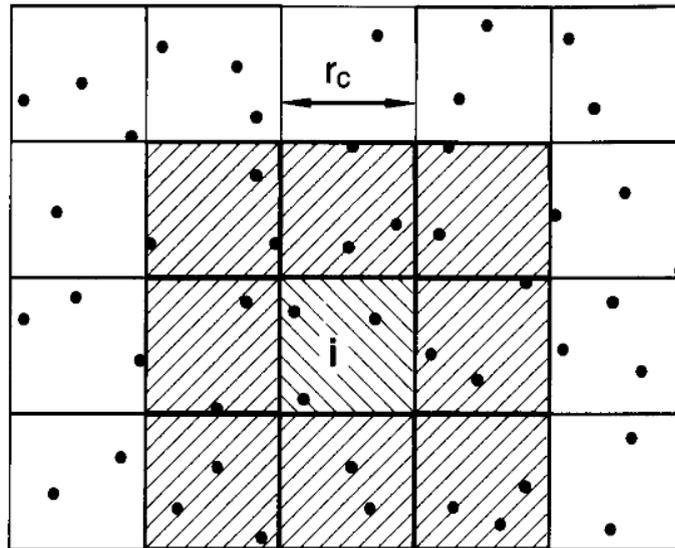


FIGURA 6.2: Esquema de celdas para listas de vecinos, tomada de [105].

En [105] se discuten en detalle los costos y los beneficios de utilizar listas y se muestra que debido al esfuerzo computacional intrínseco de la construcción de las listas, el tiempo de cálculo de las interacciones con un algoritmo de listas de celdas es de orden $\mathcal{O}(N^{3/2})$, mucho menor que por fuerza bruta para sistemas suficientemente grandes. Existen otros esquemas de listas como el de Verlet (ver [105]) pero sólo se vuelve más eficiente que las listas de celdas para sistemas de $N \sim 100000$ partículas. El tamaño crítico de sistema para el cual se vuelve conveniente utilizar esquemas de listas combinados es bastante menor, pero no implementamos ningún otro.

Como se verá en el capítulo 8, ciertas observaciones nos llevaron a querer realizar simulaciones en celdas con geometrías no cúbicas. En esas geometrías, la implementación de las CPC y de las listas de celdas es mucho más costosa y menos eficiente, al menos para sistemas de los tamaños que nuestra capacidad computacional nos permitía. Enfrentados con este problema decidimos experimentar con el uso de placas gráficas (GPU) para cálculo en paralelo masivo. En particular, utilizamos la plataforma CUDA [141] de NVIDIA. En el apéndice D se describen las particularidades de esta plataforma y sus ventajas. Aquí solo mencionaremos que nuestra implementación del algoritmo de fuerza bruta en una GPU resultó más veloz que el algoritmo de listas de celdas para sistemas de menos de $N = 10000$ partículas en un CPU. Y que nuestra implementación rudimentaria del algoritmo de listas de celdas en la GPU fue 30 veces más veloz que en el CPU.

6.1.2. El Problema con Coulomb

Una diferencia entre la dinámica de nucleones en simulaciones de una reacción de iones pesados y en la corteza de estrellas de neutrones es que en el último caso, los nucleones se asumen embebidos en un gas degenerado de electrones relativistas. El gas de electrones garantiza que el sistema sea eléctricamente neutro, por lo tanto la densidad de ese gas es la misma que la de protones, y además es necesario para el equilibrio β . Uno de los efectos del gas de electrones más relevantes para nuestro modelo es que apantalla la carga de los protones, reduciendo el rango efectivo de la interacción coulombiana entre ellos. La forma funcional que toma ese apantallamiento depende de la aproximación en la que se trabaje. Dos de las aproximaciones más usuales son el apantallamiento de Thomas-Fermi y la técnica de las sumas de Ewald. A continuación se incluyen breves descripciones de las dos.

6.1.3. Apantallamiento de Thomas-Fermi

En la aproximación de Thomas-Fermi, el gas de electrones es tratado como un gas ideal de Fermi a la misma densidad de los protones. Este gas no ejerce ninguna fuerza neta sobre los protones, pero se polariza localmente debido a su presencia y apantalla su carga eléctrica. Más allá de eso, la dinámica de los electrones está desacoplada de la de los nucleones puesto que para las densidades de interés, la energía de Fermi de este gas es mucho más grande que la variación del potencial de Coulomb a lo largo de toda la celda [133, 142].

Bajo estas hipótesis, la interacción entre protones aparece como un potencial de Yukawa

$$V_C^{(Scr)}(r) = \frac{e^2}{r} \exp(-r/\lambda) \quad (6.1)$$

donde λ es la longitud de apantallamiento dada por [133]

$$\lambda = \left[\frac{\hbar^2 (96\pi^2 \langle \rho \rangle)^{-1/3}}{me^2} \right]^{1/2},$$

m es la masa del electrón, e la carga y ρ la densidad del gas de electrones, igual a la de los protones.

Este potencial efectivo es de rango finito. Para que esta aproximación sirva en simulaciones con condiciones periódicas de contorno, el tamaño de la celda $L = (A/\rho)^{1/3}$ debe ser significativamente más grande que λ . Para una densidad dada, esa condición puede satisfacerse aumentando el tamaño de la celda junto con el número de partículas, pero eso puede conllevar un aumento prohibitivo en el esfuerzo computacional requerido.

En el rango de densidades de interés para el estudio de la corteza de estrellas de neutrones, la longitud de Thomas-Fermi es del orden de $\lambda \sim 100 fm$. Si se utiliza una celda cúbica, la densidad está dada por $\rho = A/L^3$, por lo que harían falta del orden $A = 10^6$ partículas para que el tamaño de la celda sea significativamente mayor que λ .

Para mantener el espíritu de la aproximación y hacerla realizable, se ha convertido en estándar utilizar para la interacción de Coulomb un potencial como el de la ecuación 6.1.3 pero con un valor artificial de $\lambda = 10 fm$ [136, 140]. Con este valor de λ es suficiente utilizar del orden de $A \sim 10^3$ para evitar efectos de tamaño pequeño. Sin embargo, como veremos más adelante (sección 9), este valor de λ puede resultar demasiado pequeño como para producir estructuras muy ordenadas tales como “lasagna” o “spaghetti” en las simulaciones, al menos en tiempo finito.

6.1.4. Sumas de Ewald

En esta aproximación, el gas de electrones de fondo juega un papel más sutil que en la aproximación de Thomas-Fermi pero igualmente esencial.

La técnica de las sumas de Ewald es ampliamente utilizada para computar la interacción de Coulomb en simulaciones de materia condensada [105, 143]. Se basa en la solución exacta del campo electrostático generado por una distribución de cargas periódica e infinita. Para hallar la solución exacta, el problema se divide en dos partes de la siguiente manera.

Se envuelve cada carga real con una distribución de carga Gaussiana de la misma magnitud y de signo opuesto a la carga que “viste”.

$$\rho_{Gauss}(r) = -e \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \exp(-\alpha r^2),$$

donde e es la carga de un protón.

Cada carga así vestida produce un campo de rango finito, dado por el ancho de la distribución Gaussiana α , que es un parámetro libre. La computación de la energía de interacción debida a este potencial de rango finito se llama Suma Real, dado que se hace en el espacio de coordenadas y toma la forma:

$$U_{Ewald}^R = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j}^Z \frac{\text{erfc}(\sqrt{\alpha} r_{ij})}{r_{ij}} - \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{i=1}^Z e^2 \quad (6.2)$$

donde Z es el número de protones y $\text{erfc}(x)$ es la función error complementaria. El término constante es una corrección por las auto-interacciones entre cada protón y su compañera Gaussiana.

Para compensar las distribuciones Gaussianas auxiliares, al campo generado por la Suma Real, se le superpone el campo generado por otro conjunto de distribuciones de carga Gaussianas iguales a las anteriores pero de signo opuesto, de manera que se cancelen.

La contribución a la energía producida por este segundo juego de distribuciones Gaussianas está dado por

$$U_{Ewald}^F = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0}^{k_{co}} \frac{4\pi}{k^2} |\rho(\mathbf{k})|^2 \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right), \quad (6.3)$$

donde

$$\rho(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^Z \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j)$$

es el factor de estructura dinámico de la distribución de cargas original.

La suma de la ecuación (6.3) corre sobre todos los vectores del espacio recíproco de la forma $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$ con n_i enteros y recibe el nombre de Suma de Fourier.

Esas son las Sumas de Ewald y son la solución exacta al problema de hallar la energía de una distribución de cargas periódica e infinita. Para calcular la fuerza sobre la partícula i -ésima, sólo hace falta diferenciar con respecto a las coordenadas de esa partícula.

En general, la suma de Fourier converge condicionalmente pero ese no es un inconveniente para este sistema en particular. El término problemático en la suma de Fourier es el que corresponde a $k = 0$. Sin embargo, éste puede ignorarse si el sistema se encuentra en un medio infinitamente polarizable[105]. El rol del gas de electrones en esta aproximación es el de proveer ese medio infinitamente polarizable que cancela el término con $k = 0$ en la suma de Fourier. La aproximación propiamente dicha consiste en truncar la suma de Fourier, restringiéndola a los vectores contenidos una esfera en el espacio recíproco definida por otro parámetro libre k_{co} . El parámetro k_{co} dependerá de la precisión deseada. Para su aplicación en simulaciones de sistemas nucleares es conveniente elegir el valor de α de manera que el rango del potencial de la suma real coincida con el rango de la interacción nuclear y utilizar las mismas listas de vecinos para esa suma que para el potencial nuclear.

Debido a la suma en el espacio de Fourier, la técnica de las Sumas de Ewald es computacionalmente mucho más costosa que la simple aproximación de Thomas-Fermi y, como veremos en la próxima sección, no produce resultados que justifiquen dicho costo.

6.2. Buscando Pastas CMD. Primeros resultados

En una primera etapa, para evaluar la viabilidad del modelo CMD en su capacidad para producir Pasta, simulamos [144] sistemas a densidades entre $\rho = 0,06\rho_0$ y $\rho = 0,5\rho_0$ con fracción de protones $x = 0,5$ y $x = 0,3$. Fijamos el número de protones en $N_P = 1000$, por lo que los sistemas simulados contaban con $A = 2000$ o $A = 3333$ respectivamente. Realizamos las simulaciones tanto en la aproximación de Thomas-Fermi como con la técnica de las Sumas de Ewald.

Como condición inicial, ubicamos la cantidad adecuada de nucleones en posiciones al azar dentro de la celda y les asignamos velocidades también al azar, extraídas de una distribución de Maxwell-Boltzmann a temperatura $T = 2MeV$. Luego dejamos evolucionar al sistema bajo la acción del termostato de Andersen a esa temperatura hasta que alcanzase el equilibrio. A esta temperatura los nucleones llenan la celda uniformemente, independientemente de la densidad. Esta primera termalización es extremadamente larga ($t \geq 10^6 fm/c$) debido al carácter aleatorio de las configuraciones iniciales. Posteriormente, para intentar alcanzar el estado de menor energía posible, equilibramos el sistema a temperaturas cada vez más bajas de a saltos de $\delta T = 0,1MeV$ hasta llegar a $T = 0,1MeV$. Dada la dinámica del modelo, esta temperatura corresponde a un estado cristalino, como se verá en la sección 7. Estas termalizaciones llevaron del orden de $t \sim 10^4 fm/c$ cada una.

En la figura 6.3 se muestran algunas de las estructuras halladas bajo la aproximación de Thomas-Fermi con $\lambda = 10 fm$ y para la parametrización Medium del potencial nuclear (en color en la versión electrónica). Las configuraciones de la figura 6.3 corresponden a densidades $\rho = 0,015 fm^{-3}$ (panel A), $\rho = 0,020 fm^{-3}$ (panel B), $\rho = 0,025 fm^{-3}$ (panel C), $\rho = 0,030 fm^{-3}$ (panel D), $\rho = 0,035 fm^{-3}$ (panel E), $\rho = 0,040 fm^{-3}$ (panel F), $\rho = 0,045 fm^{-3}$ (panel G), $\rho = 0,050 fm^{-3}$ (panel H), $\rho = 0,054 fm^{-3}$ (panel I), $\rho = 0,055 fm^{-3}$ (panel J), $\rho = 0,060 fm^{-3}$ (panel K), $\rho = 0,065 fm^{-3}$ (panel L), $\rho = 0,070 fm^{-3}$ (panel M), $\rho = 0,075 fm^{-3}$ (panel N), $\rho = 0,080 fm^{-3}$ (panel Ñ) y $\rho = 0,090 fm^{-3}$ (panel O).

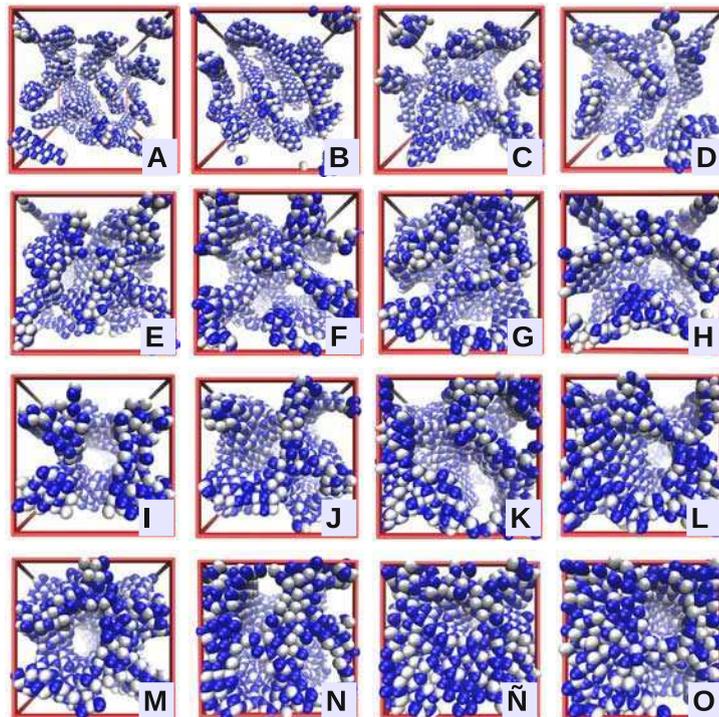


FIGURA 6.3: Muestrario de esponjas halladas con $\lambda = 10 fm$. (Ver texto.)

Independientemente del modelo de interacción nuclear, con un valor de $\lambda = 10 fm$ para el potencial de Coulomb apantallado solo logramos producir gnocchi, estructuras parecidas a spaghetti pero desordenados o “esponjas”. En ningún caso se formaron espontáneamente estructuras tan ordenadas como lasagnas o los spaghetti rectos que para otros modelos son configuraciones de mínima energía. El escenario parece ser el mismo implementando las sumas de Ewald (figura 6.4), empeorado por el costo computacional sensiblemente mayor del algoritmo. Para obtener los mismos resultados decepcionantes, nuestra implementación de las sumas de Ewald tarda unas 10 veces más que el potencial apantallado.

Vale aclarar que no hay nada que garantice que el estado logrado de esta manera sea el de menor energía. De hecho, a ciertas densidades observamos que cambiando levemente

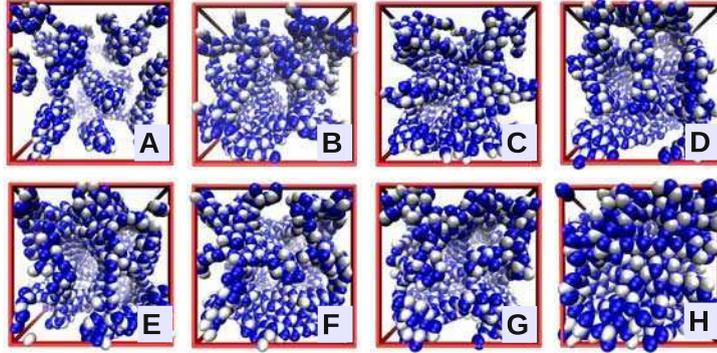


FIGURA 6.4: Muestrario de esponjas halladas con las sumas de Ewald para las densidades $\rho = 0,021 \text{ fm}^{-3}$ (panel A), $\rho = 0,033 \text{ fm}^{-3}$ (panel B), $\rho = 0,036 \text{ fm}^{-3}$ (panel C), $\rho = 0,039 \text{ fm}^{-3}$ (panel D), $\rho = 0,042 \text{ fm}^{-3}$ (panel E), $\rho = 0,045 \text{ fm}^{-3}$ (panel F), $\rho = 0,048 \text{ fm}^{-3}$ (panel G) y $\rho = 0,084 \text{ fm}^{-3}$ (panel H)

el esquema de enfriamiento o la condición inicial se obtenían resultados diferentes. Esto es un problema habitual en las simulaciones de sistemas frustrados y/o cerca de una transición de fase. El paisaje energético de un sistema en esa situación presenta muchos “valles” separados por barreras altas de potencial que no pueden ser franqueadas a temperaturas bajas. A medida que se disminuye la temperatura es muy probable que el sistema quede atrapado en mínimos locales. Esta particularidad hace que las simulaciones presenten histéresis y los resultados dependan fuertemente de la condición inicial [105].

Para sortear esta dificultad existen algoritmos sofisticados [145–149] pero que requieren una capacidad de cómputo de la que no disponíamos en ese momento, por lo que adoptamos un enfoque alternativo para buscar el estado de mínima energía: Conjeturando que el responsable del ordenamiento de largo rango de esas estructuras es la interacción de Coulomb, en un primer intento por evitar caer en mínimos locales implementamos un método heurístico que se describe a continuación¹. A temperaturas mayores que $T = 0,8 \text{ MeV}$ utilizamos un potencial de Coulomb apantallado pero con $\lambda = 50 \text{ fm}$, arbitrariamente truncado y corrido a $r_{coul}^c = 20 \text{ fm}$ para poder utilizar la convención de la primera imagen a todas las densidades de interés con $A = 2000$ partículas. Hicimos esto con la esperanza de que la sobre-estimación de la energía de Coulomb modificase el paisaje energético lo suficiente como para que las barreras que bloquean al estado fundamental se hagan franqueables a temperaturas moderadas y los mínimos locales se hagan menos estables. Pero como también se corre el riesgo de que el estado fundamental se vea modificado, a la temperatura *ad hoc* de $T = 0,6 \text{ MeV}$ cambiamos el potencial de Coulomb por el “estándar con $\lambda = 10 \text{ fm}$ y esperamos que el sistema se equilibre. Esto le permite al sistema hacer un “ajuste fino” de la configuración y, eventualmente escapar de un mínimo artificial. Posteriormente continuamos con el esquema original de equilibrar y cambiar el termostato hasta lograr la temperatura deseada. De esta manera

¹Posteriormente hallamos que un método similar ya había sido descrito en la literatura [150].

se hallaron las estructuras que se muestran en la figura 6.5. En la figura se muestran únicamente los resultados con el potencial Medium. Los resultados con el potencial Stiff son cualitativamente similares.

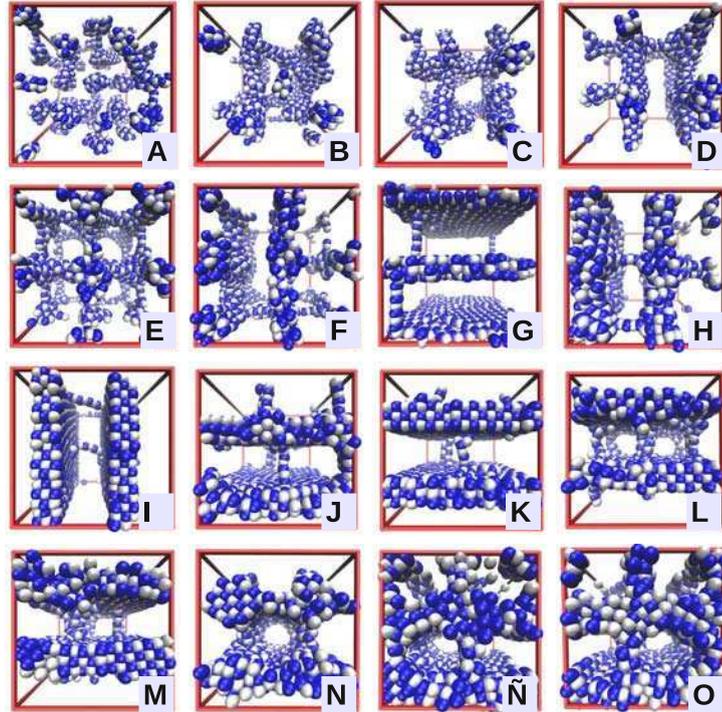


FIGURA 6.5: Muestrario de Pastas halladas con el potencial Medium y $x = 0,5$ según la heurística descrita en el texto.

En este caso las configuraciones de la figura 6.5 corresponden a densidades $\rho = 0,015 \text{ fm}^{-3}$ (panel A), $\rho = 0,021 \text{ fm}^{-3}$ (panel B), $\rho = 0,024 \text{ fm}^{-3}$ (panel C), $\rho = 0,030 \text{ fm}^{-3}$ (panel D), $\rho = 0,033 \text{ fm}^{-3}$ (panel E), $\rho = 0,036 \text{ fm}^{-3}$ (panel F), $\rho = 0,039 \text{ fm}^{-3}$ (panel G), $\rho = 0,045 \text{ fm}^{-3}$ (panel H), $\rho = 0,048 \text{ fm}^{-3}$ (panel I), $\rho = 0,051 \text{ fm}^{-3}$ (panel J), $\rho = 0,064 \text{ fm}^{-3}$ (panel K), $\rho = 0,057 \text{ fm}^{-3}$ (panel L), $\rho = 0,060 \text{ fm}^{-3}$ (panel M), $\rho = 0,063 \text{ fm}^{-3}$ (panel N), $\rho = 0,072 \text{ fm}^{-3}$ (panel Ñ) y $\rho = 0,084 \text{ fm}^{-3}$ (panel O).

Siguiendo este procedimiento el modelo logra reproducir todas las pastas estándar: se observan “Gnocchi” (panel A), unas estructuras tipo “spaghetti” aunque todavía no rectos (paneles B y C), “lasagna” (paneles G,I,J,K,L,M) y “túneles” (o anti-spaghetti, paneles Ñ y O). El rango de densidades en el que existen y el orden en el que aparecen es consistente con los resultados de otros modelos. Además, para densidades intermedias entre distintas pastas aparecen estructuras más o menos amorfas, como las reportadas por esos modelos[138, 151].

Para la parametrización Stiff del potencial de Pandharipande la situación es esencialmente la misma.

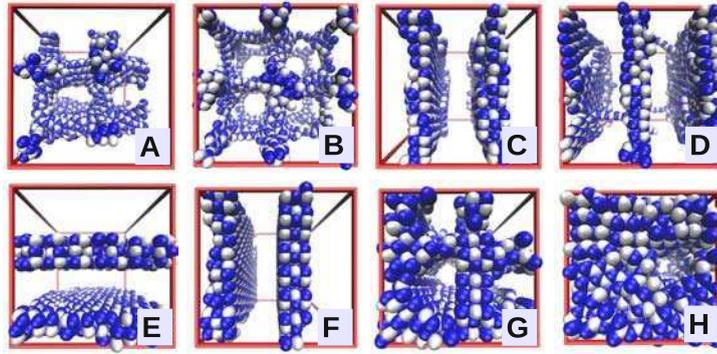


FIGURA 6.6: Muestrario de Pastas halladas con el potencial Stiff y $x = 0,5$ según la heurística descrita en el texto.

Las densidades de la figura 6.6 son $\rho = 0,030 \text{ fm}^{-3}$ (panel A), $\rho = 0,033 \text{ fm}^{-3}$ (panel B), $\rho = 0,040 \text{ fm}^{-3}$ (panel C), $\rho = 0,042 \text{ fm}^{-3}$ (panel D), $\rho = 0,050 \text{ fm}^{-3}$ (panel E), $\rho = 0,060 \text{ fm}^{-3}$ (panel F), $\rho = 0,080 \text{ fm}^{-3}$ (panel G) y $\rho = 0,090 \text{ fm}^{-3}$ (panel H).

Si bien es posible que algunas de estas estructuras correspondan a mínimos locales de energía, en particular la del panel *E* en la figura 6.5 es notablemente simétrica como para desecharla como “intermedia”. Más aún, la misma estructura vuelve a aparecer con otra escala en el panel *N*, después de pasar el rango de densidades de lasagna. Esta estructura no había sido hallada (o reportada) anteriormente con otros modelos, y arrogándonos el derecho por haber sido los primeros en describirla [152], la bautizamos “Jungle-Gym” (fig. 6.7). Posteriormente descubrimos que la superficie que limita esa estructura es bien conocida en otras áreas de la física y de la matemática bajo el nombre de superficie *P* de Schwarz 8.3.3.

6.2.1. Comentarios sobre la Heurística

La implementación de esta heurística provee las mejores soluciones que logramos a $T = 0$ con $\lambda = 10 \text{ fm}$. Sin embargo, la dinámica con el potencial de Coulomb apantallado con $\lambda = 50 \text{ fm}$ y truncado a un rango artificialmente corto, cuando todavía tiene un valor apreciable, es formalmente incorrecta. En otro contexto, por ejemplo a temperaturas finitas o para calcular observables dinámicos, la dinámica generada por este potencial es insatisfactoria [105]. Ahora, si lo único que se desea es facilitar el acceso a una configuración de mínima energía para el apantallamiento de $\lambda = 10 \text{ fm}$, el hecho de que las configuraciones alcanzadas son estables y tienen energías sistemáticamente más bajas que las halladas de otra manera (ver fig. 6.8) es suficiente para justificar su uso.



FIGURA 6.7: Jungle-gym en Montreal. Imagen de dominio público de Wikimedia Commons.

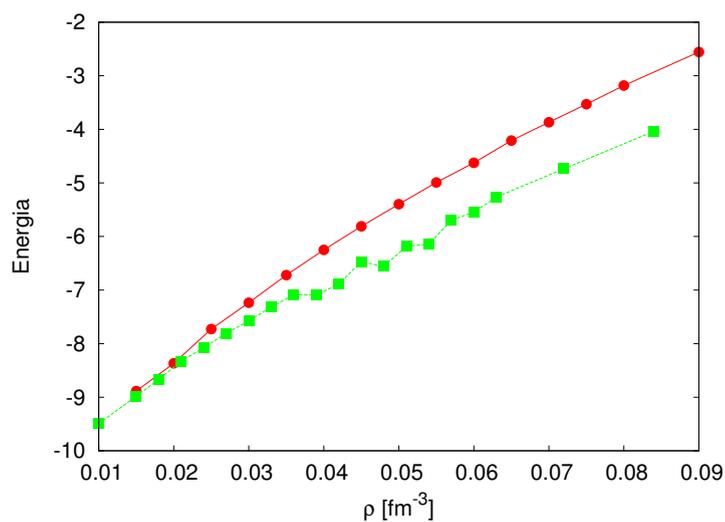


FIGURA 6.8: Energías de las configuraciones halladas con $\lambda = 10\text{fm}$ durante todo el enfriamiento, correspondientes a las estructuras de la figura 6.3 (círculos), y energías para las configuraciones halladas con la heurística descrita en el texto (cuadrados), correspondientes a las estructuras de la figura 6.5.

A pesar de las falencias del método, la riqueza de las estructuras que provee fue oportunamente suficiente para desarrollar herramientas y observables que permiten una caracterización robusta de las mismas. La descripción de esas herramientas son el objeto de la siguiente sección.

Notablemente, haber observado que el rango de Coulomb es tan determinante para la

formación espontánea de las pastas nos puso en un camino que nos llevó a comprender varios aspectos esenciales de las simulaciones de este tipo de sistemas que hasta ahora eran mayormente ignoradas por la comunidad nuclear. Esos aspectos se detallan en el capítulo 8 y refieren al rol del potencial de Coulomb y su rango efectivo en la formación y en la escala de las pastas. Adelantando un poco, para los potenciales nucleares usados $\lambda = 10 \text{ fm}$ resulta ser tan pequeño que el efecto organizador de largo rango de Coulomb se ve avasallado por las fluctuaciones térmicas a temperaturas finitas y el sistema queda fácilmente atrapado en mínimos locales.

Capítulo 7

Caracterización de las “Pastas”

En este capítulo describimos cómo los datos de coordenadas y momentos de las partículas pueden ser usados para construir observables que permiten cuantificar y caracterizar propiedades de interés de las Pastas.

7.1. Fragmentos en sistemas infinitos

7.1.1. Reconocimiento de Fragmentos Bajo Condiciones Periódicas de Contorno

La distancia entre partículas es un ingrediente esencial en todos algoritmos de reconocimiento de fragmentos utilizados en simulaciones de colisiones y explosiones (ver sección 2.1.2). Dado que la imposición de condiciones periódicas de contorno modifica la topología del espacio, partículas que se encuentran en regiones opuestas de la celda principal pueden efectivamente hallarse próximas. Resulta evidente que esos algoritmos deben ser modificados.

Para incorporar las condiciones periódicas de contorno al reconocimiento de fragmentos se implementaron dos esquemas. El primer esquema, sencillo y directo, consiste en adaptar la métrica utilizada para medir distancias: se evalúa la distancia entre una partícula y las imágenes más cercanas de las demás. Así, la prescripción MST será:

$$\begin{aligned}
i \in C \Leftrightarrow j \in C \wedge \\
& |x_i - x_j| - L \times \text{int} \left(\frac{x_i - x_j}{L/2} \right) + \\
& + |y_i - y_j| - L \times \text{int} \left(\frac{y_i - y_j}{L/2} \right) + \\
& + |z_i - z_j| - L \times \text{int} \left(\frac{z_i - z_j}{L/2} \right) \leq r_d
\end{aligned} \tag{7.1}$$

Este método reconoce fragmentos que se extienden a más de una celda pero no sirve para identificar fragmentos infinitos, que pueden ser de interés para estudiar la transición gnocchi-spaghetti como un proceso de percolación.

El segundo esquema fue diseñado con el objetivo de identificar fragmentos infinitos y consta de dos partes. La primera consiste en procesar las coordenadas de las partículas con el algoritmo de reconocimiento de fragmentos que se desee sin contemplar las condiciones de contorno. Esto identifica los “proto-fragmentos”, fragmentos dentro de la celda principal. A continuación, se realiza un proceso iterativo para verificar si esos proto-fragmentos pueden unirse (según el criterio de fragmento que corresponda) con las réplicas en celdas vecinas de los otros proto-fragmentos. Si dos proto-fragmentos se unen, se desplazan las coordenadas del segundo para que quede contiguo (un procedimiento inverso al plegado de coordenadas sobre la celda principal que se efectúa cuando durante la evolución una partícula abandona la celda). Este proceso iterativo se realiza sobre celdas vecinas hasta identificar los fragmentos irreducibles, y puede requerir visitar celdas más allá de las primeras vecinas. Una vez hallados los fragmentos irreducibles, un fragmento será infinito si se une con alguna replica de si mismo.

Para ilustrar el funcionamiento de este procedimiento se muestra en la figura 7.1 la reconstrucción de un fragmento infinito sobre una configuración de un sistema en $2D$ de partículas interactuando con un potencial de Lennard-Jones combinado con un potencial de Coulomb apantallado. Los detalles de la simulación se describen en el apéndice E. La configuración del ejemplo presenta el caso extremo en el que todas las partículas pertenecen a un único fragmento “irreducible” cuando se incorporan las condiciones periódicas de contorno. Se muestran los fragmentos detectados con los dos esquemas descritos anteriormente.

El fragmento es infinito puesto que se cierra sobre si mismo. Sin embargo, para verificar esto algorítmicamente hace falta comparar el fragmento con una réplica que se encuentra a 7 celdas vecinas de distancia. Esta situación corresponde al caso más desfavorable posible en el que todos los proto-fragmentos iniciales (7 en este caso) deben alinearse en

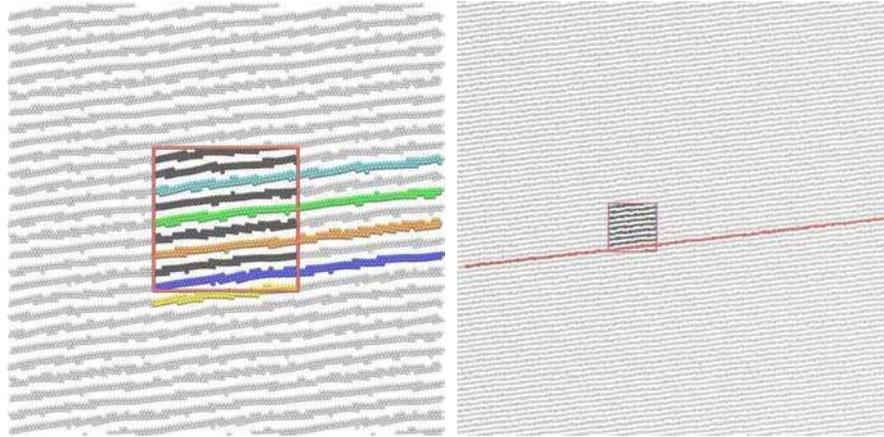


FIGURA 7.1: Reconstrucción de fragmentos debida a las condiciones periódicas de contorno. A la izquierda, fragmentos detectados por el algoritmo *MST* con la métrica modificada. A la derecha, el fragmento irreducible.

una dirección para reconstruir el fragmento irreducible. Claramente este segundo método es mucho más costoso y solo se justifica su uso si interesa el fragmento infinito.

Estos dos esquemas pueden aplicarse sin inconvenientes a las tres definiciones de fragmentos utilizadas anteriormente, pero dado que el algoritmo *ECRA* es computacionalmente demasiado costoso como para aplicarlo sistemáticamente a evoluciones de sistemas con miles de partículas, solo lo implementamos para *MST* y *MSTE*. Por otro lado, *ECRA* provee información esencial de las etapas tempranas (densas y calientes) de procesos transitorios como colisiones o explosiones, pero en las etapas finales (de baja densidad y temperatura) sus resultados son prácticamente indistinguibles de los que proveen los algoritmos más económicos. Los sistemas bajo condiciones de contorno alcanzan un equilibrio termodinámico y, a las bajas temperaturas estudiadas, las correlaciones en momentos de partículas que requieren *MSTE* y *ECRA* no son determinantes. En este escenario, el costo computacional de *ECRA* no se justifica y, en general, el algoritmo *MST* con un radio de corte adecuado es suficiente.

7.1.2. Distribuciones de fragmentos

En la figura 7.2 se muestran ejemplos de distribuciones de masas de fragmentos *MST* y *MSTE* a distintas temperaturas para sistemas con $A = 3333$ partículas y fracción de protones $x = 0,3$. Esas distribuciones son promedios acumulados sobre 200 configuraciones muestreadas de una evolución a cada temperatura. Puede observarse claramente que la multiplicidad de fragmentos de masas grandes crece con la temperatura. En ese sentido, la tendencia general es opuesta a la que se observa en colisiones. En ese escenario, la masa del fragmento más grande disminuye con la energía de excitación debido

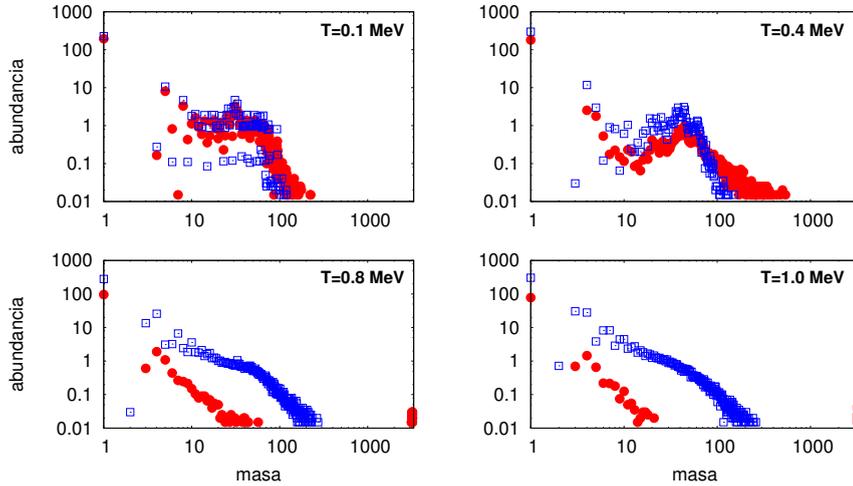


FIGURA 7.2: Distribución de fragmentos *MST* (círculos) y *MSTE* (cuadrados) para varias temperaturas, acumulados sobre 200 configuraciones con $x = 0,3$ y a densidad $\rho \approx 0,1\rho_0$.

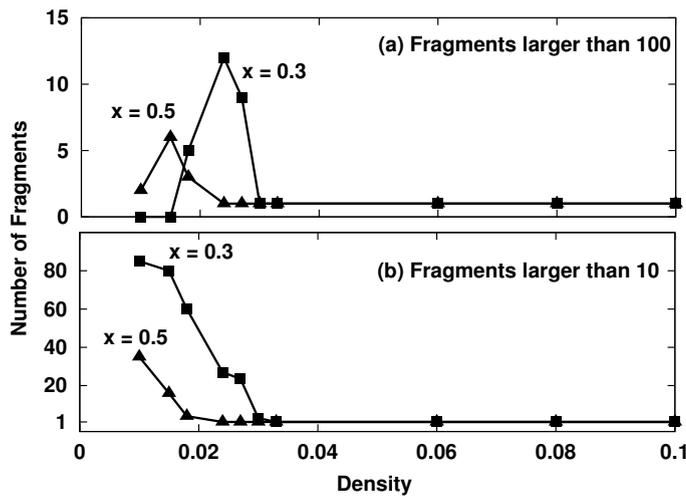


FIGURA 7.3: Abundancia relativa de clusters pesados como función de la densidad para $x = 0,3$ ($A = 3333$) y $0,5$ ($A = 2000$) a $T = 0,1 \text{ MeV}$.

que un sistema muy excitado se fragmenta. En sistemas a densidad fija, en cambio, la imposibilidad de expandirse hace que la fragmentación se vea frustrada. Incluso, como se observa a $T = 0,8$ o 1 MeV las partículas llenan casi todo el espacio y el algoritmo *MST* puede llegar a reconocer a todo el sistema como un único fragmento. Cuando eso ocurre, el algoritmo *MSTE* es más adecuado. Sin embargo, para este rango de temperaturas pueden obtenerse resultados muy similares a los de *MSTE* utilizando el algoritmo *MST* con un radio de clusterización inferior, y a un costo computacional inferior.

La figura 7.3 muestra el comportamiento típico de la multiplicidad de clusters pesados ($A > 100$ y $A > 10$) para distintas densidades y tanto para $x = 0,5$ como para $x = 0,3$ a $T = 0,1 \text{ MeV}$ (muy baja). La multiplicidad de fragmentos pesados a temperatura muy baja crece con la densidad, hasta que el sistema colapsa en unos pocos fragmentos que contienen toda la masa (efectivamente se observa una transición “gnocchi-spaghetti”). La densidad a la que eso ocurre puede pensarse como una densidad de percolación, que claramente dependerá de la temperatura, del modelo de interacción, y de parámetros de la simulación como el tamaño de la celda. Para los casos que se muestran, esa densidad corresponde a $\rho \approx 0,03 \text{ fm}^{-3}$ para $x = 0,3$ y $\rho \approx 0,02 \text{ fm}^{-3}$ para $x = 0,5$ a $T = 0,1 \text{ MeV}$.

La descripción en términos de distribuciones de fragmentos, a pesar de dar un buen indicador de la densidad de percolación, no da información suficiente para caracterizar la estructura del sistema.

7.1.3. Contenido isotópico de los fragmentos

Además de coordenadas y posiciones de cada partícula conocemos su isospín, por lo que resulta inmediato evaluar la composición isotópica de los sistemas a distintas temperaturas y densidades. Esta cantidad es de sumo interés para estudiar el efecto del término de simetría sobre la formación de las pastas nucleares y, eventualmente, estudiar aspectos de nucleogénesis.

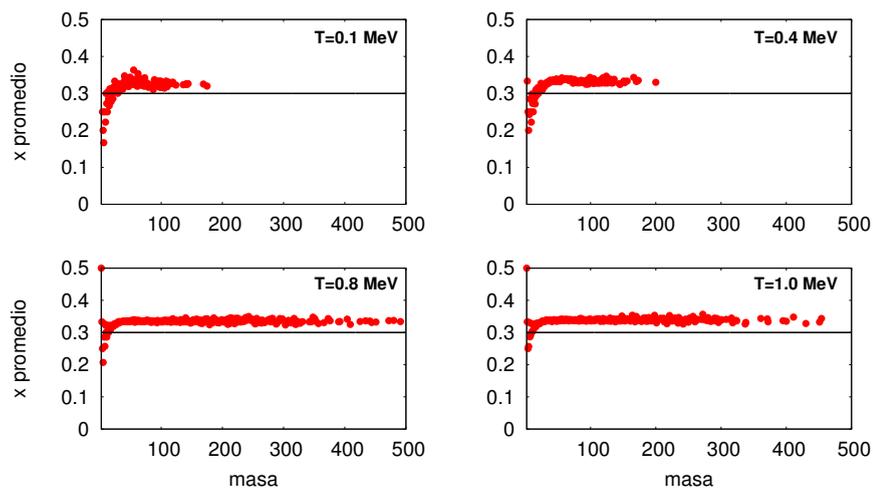


FIGURA 7.4: Fracción de protones x de fragmentos según su masa para sistemas con $x_{tot} = 0,3$, a densidad $\rho = 0,1\rho_0$ y las temperaturas indicadas.

En particular, calculamos la fracción de protones media de los fragmentos como función de su masa. Para sistemas con fracción de protones $x = 0,5$ prácticamente todos los

fragmentos son simétricos en isospín. Para $x = 0,3$, en cambio, los fragmentos resultantes tienen un exceso de neutrones mayor que la media del sistema, como se muestra en la figura 7.4. Este exceso de neutrones en los fragmentos pesados es provisto por los pequeños ($A \lesssim 10$), que tienden a tener menos protones que el promedio. Si bien trasciende los objetivos de esta tesis, este resultado sugiere que, en principio, el modelo podría ser utilizado para estudiar aspectos dinámicos de la nucleogénesis en supernovas. Como prueba de concepto, en la figura 7.5 se muestra la fracción de protones de los fragmentos producidos a $T = 1$ MeV con $x = 0,3$ y a densidad $\rho = 0,1\rho_0$, superpuesta con la de los núcleos reales según [116].

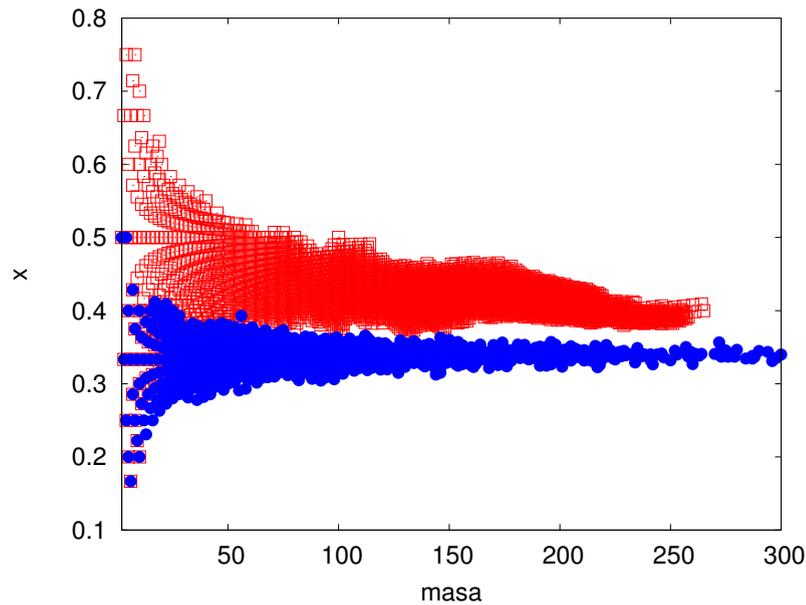


FIGURA 7.5: Fracción de protones para núcleos reales (cuadrados huecos) y para fragmentos en simulaciones (círculos llenos) para $x = 0,3$, $T = 1$ MeV y a $\rho = 0,1\rho_0$

7.2. Caracterización dinámica

7.2.1. Desplazamiento Cuadrático Medio de nucleones

La dinámica de los nucleones en sistemas equilibrados puede caracterizarse en términos de su desplazamiento cuadrático medio como función del tiempo:

$$\Delta_r(t) = \sqrt{\frac{\sum_i \langle (r_i(t) - r_i(0))^2 \rangle}{N}}$$

dónde $r_i(t)$ es la posición de la partícula i -ésima a tiempo t y N el número de partículas. Para partículas en difusión, este coeficiente es proporcional a t . Este coeficiente

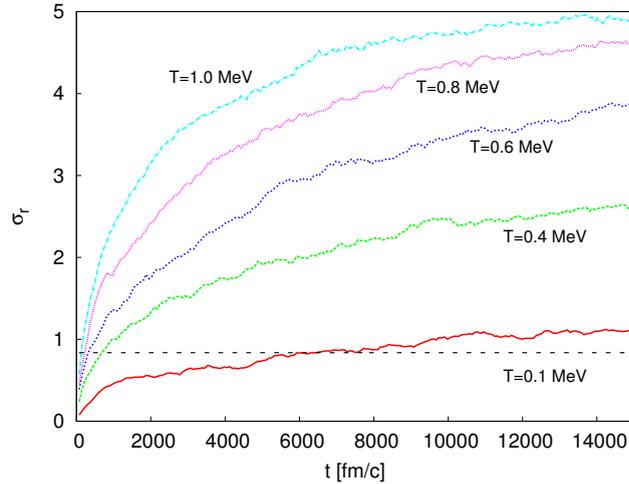


FIGURA 7.6: Desplazamiento cuadrático medio de nucleones respecto de su posición original (arbitraria) como función del tiempo para sistemas con $\rho = 0,015 \text{ fm}^{-3}$ y $x = 0,3$ a las temperaturas indicadas.

es similar en espíritu al coeficiente de Lindemann, utilizado para describir procesos de derretimiento (“melting”) en sólidos.

En la figura 7.6 se muestra el desplazamiento cuadrático medio de las partículas respecto de su posición inicial (arbitraria) a lo largo de 200 pasos de evolución y en unidades de $\rho^{-2/3} = \left(\sqrt[3]{V/N}\right)^2$; es decir, de la distancia entre primeros vecinos que tendría un cristal a la densidad correspondiente ($\rho = 0,1\rho_0$). Para hacerse una idea de la escala de las fluctuaciones, la línea horizontal corresponde a la distancia entre primeros vecinos a densidad normal en las mismas unidades.

Hay dos observaciones evidentes y triviales que pueden hacerse a partir de estas curvas. La primera es que la movilidad de las partículas aumenta con T . La segunda es que la difusión es anómala, debido a la agrupación de partículas en clusters. Una característica también evidente pero menos trivial es que para $T = 0,1 \text{ MeV}$ el desplazamiento medio de las partículas apenas supera la distancia entre primeros vecinos del cristal a densidad normal. Esto sugiere que a temperaturas tan bajas los clusters se encuentran congelados en un cristal a densidad normal. La mayor contribución al desplazamiento cuadrático medio de las partículas proviene de vibraciones de los cristales, y el exceso se debe a las partículas libres y traslación de clusters. A $T \geq 0,4 \text{ MeV}$ el desplazamiento cuadrático medio de las partículas rápidamente supera la escala característica del cristal pero todavía existen fragmentos de hasta 100 partículas (ver 7.2). Este cambio cualitativo de la movilidad de los nucleones dentro de los fragmentos a $T \sim 0,4 \text{ MeV}$ hace pensar en una transición de sólido a líquido dentro de los fragmentos que vale la pena estudiar en todo el rango de densidades. Ese análisis, sin embargo, escapa a los objetivos de esta tesis.

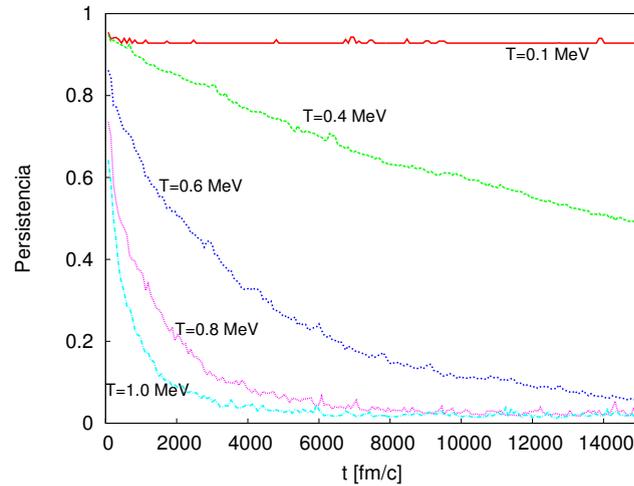


FIGURA 7.7: Evolución temporal de la persistencia de clusters $MSTE$ a distintas temperaturas para $x = 0,3$ y $\rho = 0,015 \text{ fm}^{-3}$.

7.2.2. Persistencia de Fragmentos

La estabilidad de los fragmentos puede cuantificarse mediante el mismo coeficiente de persistencia desarrollado para el estudio de sistemas finitos descrito en la sección 3.1.3. La persistencia exhibe la tendencia de los miembros de cada cluster a permanecer en un mismo cluster a lo largo de la evolución.

En la figura 7.7 se muestra la evolución de la persistencia media de los clusters para sistemas con $\rho = 0,015 \text{ fm}^{-3}$ y $x = 0,3$ a las temperaturas indicadas; nótese que persistencia cercana a 1 significa que la mayor parte de las partículas permanecen en el mismo cluster en el que se encontraban originalmente, mientras que valores más pequeños indican que los miembros de los clusters cambian. Se observa que la persistencia tiene una correlación negativa con el desplazamiento cuadrático medio de las partículas. Para $T = 0,1 \text{ MeV}$, la persistencia cercana a 1 a lo largo de toda la evolución refuerza la visión de que el desplazamiento cuadrático medio está determinado principalmente por vibraciones de las partículas en torno a posiciones de equilibrio en cada cluster.

7.3. Caracterización estructural

7.3.1. Función de correlación de pares

Una de las principales motivaciones para el estudio de las fases no homogéneas en estrellas de neutrones a densidades sub-saturación es la caracterización de la escala de las

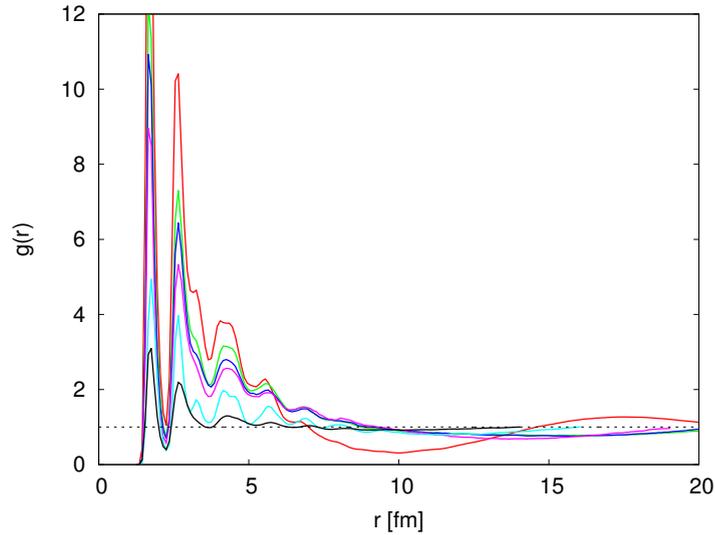


FIGURA 7.8: Ejemplos de $g(r)$ para $x = 0,5$, $T = 0,1 \text{ MeV}$ y varias densidades.

in-homogeneidades, puesto que estas determinan las propiedades de transporte de neutrinos (ver 5.1). Esa caracterización puede realizarse a partir de la función de correlación de pares.

La función de correlación de pares ($g(r)$) está definida como la probabilidad de que haya una partícula a una distancia r de otra.

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N^2} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle,$$

donde r_{ij} es $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ y $\langle \rangle$ significa un promedio sobre el ensamble. Para distancias suficientemente largas, esta función converge a 1. Y en sistemas homogéneos e isotrópicos, esta función representa también el cociente entre densidad local media y densidad global.

La figura 7.8 muestra ejemplos de $g(r)$ obtenidos para simulaciones con 2,000 nucleones, $x = 0,5$, $T = 0,1 \text{ MeV}$ y densidades $0,01 < \rho < 0,09 \text{ fm}^{-3}$. La línea punteada está en 1 y corresponde al límite de densidad uniforme. Para evitar efectos de las condiciones periódicas de contorno, las curvas están truncadas en $r = 1/2L$, donde L es el lado de la caja para cada densidad. En la figura 7.8, además de la estructura cristalina que evidencian la multitud de picos a r pequeños, pueden verse una estructura de más largo rango que corresponde a las pastas propiamente dichas.

Para todas las densidades de la figura 7.8 la posición de los primeros y segundos vecinos (los primeros dos picos de $g(r)$) no cambia sensiblemente a pesar de que la estructura global pasa por varias pastas. Más aún, prácticamente coinciden con las posiciones de la

fase cristalina a densidad normal ($\sim 1,84 \text{ fm}$ para primeros vecinos). Eso indica que esas posiciones responden más a propiedades del potencial de interacción que a la estructura global del sistema, y que la densidad local es prácticamente la normal.

7.3.2. Factor de estructura

Uno de los principales motivos por los que interesa la $g(r)$ es su relación con el factor de estructura estático $S(\mathbf{k})$ que puede ser utilizado para caracterizar procesos de scattering de neutrinos en la corteza de estrellas de neutrones[140].

El factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ (o función de respuesta dinámica) es un observable físico fundamental que contiene toda la información sobre las excitaciones de un sistema de muchos cuerpos. Representa la probabilidad de que el sistema sea excitado por una sonda (fotón, electrón, neutrino, etc.) que transfiera al sistema una energía $\hbar\omega$ y un momento $\hbar\mathbf{k}$. Por lo tanto, es proporcional a la sección eficaz de scattering de esa sonda. Integrando sobre energías se obtiene el factor de estructura estático $S(\mathbf{k})$, que está relacionado con las fluctuaciones instantáneas de densidad[142] con vector de onda \mathbf{k} . Dado que la longitud de onda típica de los neutrinos generados por el colapso de una supernova o en el núcleo de las estrellas de neutrones jóvenes es de $\sim 10 \text{ fm}$ [127, 140], un realce en el factor de estructura estático para esa longitud de onda implicará una mayor opacidad frente a esos neutrinos que afectará sustancialmente la tasa de enfriamiento de las estrellas de neutrones jóvenes.

Por otro lado, el factor de estructura estático está relacionado con la función de correlación de pares $g(\mathbf{r})$ mediante una transformada de Fourier:

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \frac{N}{V} \int d^3r (g(\mathbf{r}) - 1) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Los factores de estructura estáticos para las mismas densidades de la figura 7.8 se muestran en la figura 7.9. La baja resolución en la figura se debe a que para los tamaños de sistema estudiados la longitud de onda de las fluctuaciones de densidad es del orden del tamaño de la celda. Aún así, puede verse que en todos los casos presenta un pico en longitudes de onda entre $\sim 10 \text{ fm}$ y $\sim 20 \text{ fm}$ (que se señalan con las líneas punteadas verticales).

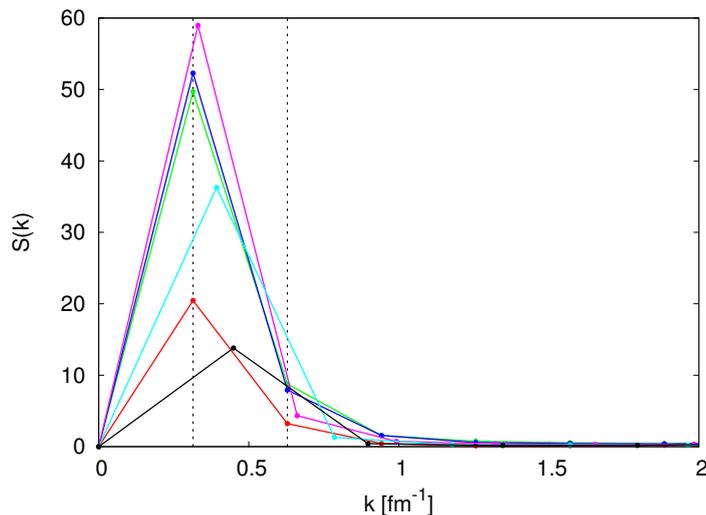


FIGURA 7.9: Ejemplos de $S(k)$ para $x = 0,5$, $T = 0,1 \text{ MeV}$ y varias densidades.

7.4. Caracterización topológica y morfológica

En el siglo XVIII, Euler y L'Huilier mostraron que independientemente de la forma, cualquier poliedro convexo en $3D$ cumple la relación $\chi = F - E + V = 2$, donde F es el número de caras, E el número de aristas, V el número de vértices y χ es una cantidad conocida como Característica de Euler. La característica de Euler es invariante frente a homeomorfismos y, para poliedros no convexos, puede tomar distintos valores. Si bien originalmente se definió para poliedros, puede generalizarse a cualquier superficie cerrada orientable a través del teorema de Gauss-Bonnet[153, 154]. El parámetro χ contiene toda la información topológica de una superficie, es decir, toda la información sobre la conectividad de las regiones del espacio delimitadas por la superficie. Si una superficie cerrada A tiene un contorno regular ∂A , la característica de Euler del contorno está relacionada con la curvatura Gaussiana de la superficie y su "genus" g (número de asas): $G(A) = 2\pi\chi(\partial A)$ y $\chi(\partial A) = 2(1 - g)$.

Dado que χ es un invariante frente a homeomorfismos, permite identificar cuerpos que son topológicamente equivalentes: dos superficies cerradas orientables son homeomórficas si tienen la misma χ y viceversa. Esto permite clasificar topológicamente cualquier superficie cerrada orientable a menos de un homeomorfismo. Para eliminar esa redundancia hacen falta observables morfológicos.

Un teorema de Hadwiger[155] de la geometría integral prueba que en un espacio euclídeo de d dimensiones, existen $d + 1$ funcionales que forman un sistema completo de funcionales aditivas, invariantes frente a traslaciones y rotaciones en el conjunto de objetos

que son unión de un número finito de cuerpos convexos. Esas $d + 1$ funcionales, llamadas Funcionales de Minkowski, caracterizan completamente la morfología y topología de cualquier cuerpo que se pueda construir uniendo cuerpos convexos. En otras palabras, el teorema de Hadwiger garantiza que las propiedades morfológicas y topológicas de cualquier cuerpo en $3D$ pueden describirse completamente en términos de cuatro escalares. En \mathbb{R}^3 las 4 funcionales de Minkowski corresponden, a menos de factores constantes, a Volumen (V), Área (A), Curvatura integral media (H) y la Característica de Euler (χ).

Para calcular estas funcionales a partir de las coordenadas de las partículas tomamos prestado un algoritmo utilizado en procesamiento digital de imágenes[153]. Pero para poder utilizar el algoritmo, debimos implementar un proceso de digitalización sobre los resultados de las simulaciones que permita interpretarlos como una imagen tridimensional en blanco y negro (mapa de bits).

El proceso de digitalización consiste en dividir la celda principal de la simulación en una malla de pequeños cubos (“pixels”) y marcar aquellos que contienen partículas. Esto requiere dos parámetros libres: el tamaño del pixel y el tamaño de una partícula. Para estimar un tamaño de partícula razonable utilizamos información sobre la distancia media entre primeros vecinos que provee la $g(r)$ (ver sección 7.3.1). Esto corresponde a pensar las estructuras como si estuvieran formadas por esferas empaquetadas. El pixel debe ser suficientemente pequeño como para no contener más de una partícula, pero no tan pequeño que muestre las cavidades espurias entre esferas empaquetadas del tamaño que le asignamos a las partículas. Además, un pixel demasiado pequeño lentifica innecesariamente el cálculo. Como subproducto del proceso de digitalización de las estructuras, también obtenemos una digitalización del complemento de esas estructuras, es decir, del espacio de la celda no ocupado por partículas. Esto resulta de utilidad para analizar densidades cercanas a la de saturación. En la figura 7.10 se muestra un ejemplo de una estructura junto con su digitalización.

De esta manera, construimos un poliedro que aproxima la estructura resultante de una simulación, representado como la unión de muchos poliedros convexos (los pixels). Las funcionales de Minkowski son calculadas sobre esta imagen a partir del número de pixels ocupados n_c , el número de aristas n_e , el número de caras n_f y el número de vértices n_v como se describe en[153]:

$$\begin{aligned} V &= n_c & A &= -6n_c + 2n_f \\ 2B &= 3n_c - 2n_f + n_e & \chi &= -n_c + n_f - n_e + n_v \end{aligned}$$

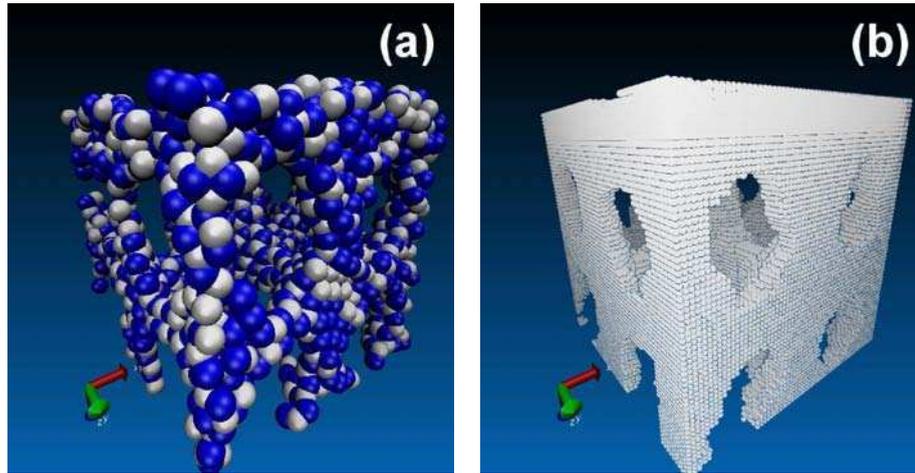


FIGURA 7.10: Ejemplo de digitalización de una estructura nuclear para aproximarla por un poliedro. La estructura corresponde a un caso con $x = 0,5$, $\rho = 0,33 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$. De esa digitalización se obtiene una curvatura $B = 215$ y una característica de Euler $\chi = -17$, lo que según veremos más adelante la clasifica como “jungle-gym”

donde V es el volumen, A el área, $\frac{B}{2\pi} = H$ la curvatura integral media y χ , la característica de Euler.

La característica de Euler χ se puede interpretar como el “(número de regiones conexas aisladas) - (número de túneles) + (número de cavidades conexas aisladas)”, pero para estructuras complejas como las que se observan en la figura 6.5 no resulta evidente cómo hacer esa descomposición. Para ganar intuición acerca de cómo interpretar estas funcionales, construimos artificialmente algunas estructuras que asemejan cualitativamente las estructuras obtenidas en simulaciones.

En la figura 7.11 se muestran algunas pastas artificiales.

Y en la figura 7.12 se muestra un mapa en el plano “curvatura - Euler” que muestra dónde se ubican las estructuras de la figura 7.11 y sus complementos según sus funcionales de Minkowski.

De esta manera, podemos aventurar una clasificación topológica según la tabla 7.1

TABLA 7.1: Clasificación según Curvatura - Euler

	Curvatura < 0	Curvatura ~ 0	Curvatura > 0
Euler > 0	Anti-Gnocchi		Gnocchi
Euler ~ 0	Anti-Spaghetti	Lasagna	Spaghetti
Euler < 0	Anti-Jungle Gym		Jungle Gym

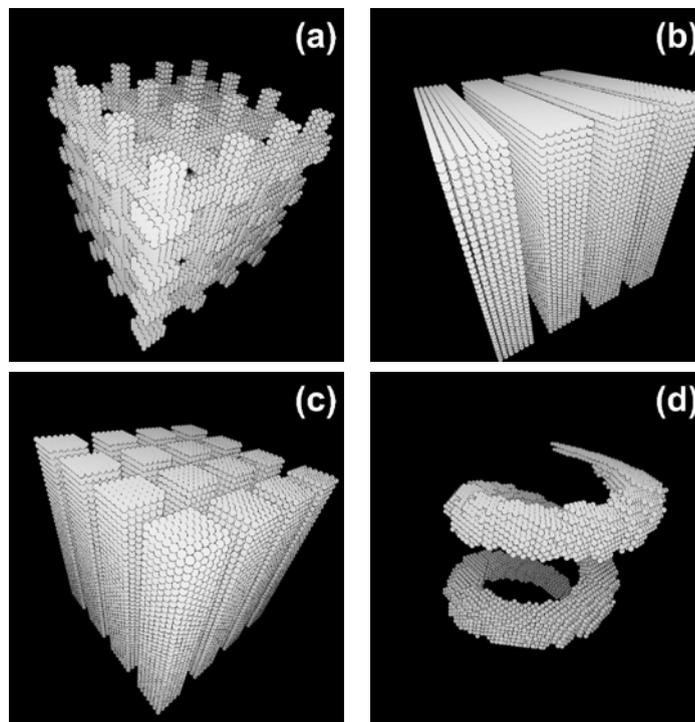


FIGURA 7.11: “Pastas” artificiales típicas usadas para probar la clasificación según Euler y Curvatura. Respectivamente son “jungle gym” (panel (a)), “lasagnas” (panel (b)), “spaghettis crudos” (panel (c)) y un “spaghetti curvado” (o fusilli, panel (d)).

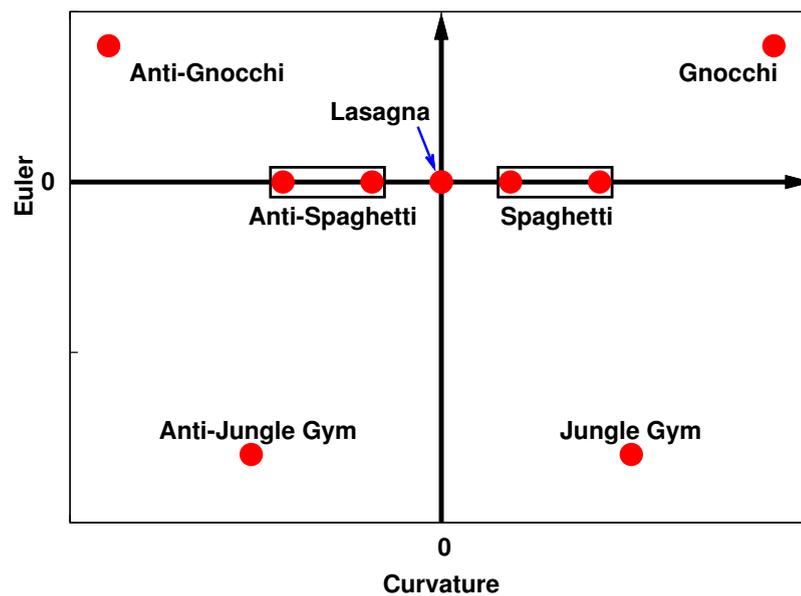


FIGURA 7.12: Clasificación sistemática de las estructuras artificiales de la figura 7.11 y sus complementos en términos de Curvatura y Euler.

Capítulo 8

Rol de Coulomb I: Materia Nuclear Ideal

8.1. Sistemas con Interacciones Competitivas

Históricamente, la existencia de las fases “pasta” se atribuye a la competencia entre la energía nuclear de superficie y la energía de Coulomb. Mientras la interacción nuclear atractiva de corto rango conduce al sistema a minimizar su superficie, la interacción repulsiva y de largo rango de Coulomb intenta alejar a los protones tanto como sea posible. Sería la frustración de la minimización de la superficie por la interacción de Coulomb lo que produce las configuraciones no homogéneas conocidas como pasta.

Existen otros sistemas físicos que presentan fases in-homogéneas o moduladas similares a las pastas nucleares: sistemas de partículas coloidales cargadas dispersas en un solvente, lípidos, co-polimeros, nanopartículas mesoporosas de silicio, etc [156, 157].

La característica común que subyace a todos estos fenómenos es la presencia de interacciones competitivas de distinto rango [156, 158]. Fenomenológicamente esto se manifiesta como una competencia entre energías de volumen y superficie, que generalmente se resuelve adoptando una geometría que minimice la superficie, sujeto a restricciones [159]. Si para un problema particular además de superficie y volumen son relevantes otros términos de energía, como curvatura o de origen químico, la solución puede ser más compleja. Por ejemplo, debido a interacciones químicas con el solvente los co-polímeros pueden formar miscelas (burbujas de dos capas) que no han sido reportadas en modelos inspirados en física nuclear.

Por otro lado, como se mencionó en la sección 6.2, el rango de la interacción de Coulomb en CMD es determinante para la aparición o no de algunas de las estructuras. En este

capítulo investigamos los efectos cualitativos del rango de la interacción repulsiva en la formación de las estructuras no homogéneas.

8.2. Sorpresa: “Pasta” Sin Coulomb

Con el objetivo de desentrañar el rol de la interacción de Coulomb en la formación de las pastas en nuestras simulaciones, comenzamos por simular Materia Nuclear Ideal simétrica ($x = 0,5$), utilizando el formalismo CMD con el potencial Medium, pero sin interacción de Coulomb [160]. Para nuestra sorpresa, volvimos a obtener estructuras no homogéneas.

En la figura 8.1 pueden observarse algunas de las estructuras halladas a $T = 0,1 \text{ MeV}$. A densidad normal, las partículas llenan el espacio ordenadas en un cristal $B1$ (una red cúbica simple en la que cada primer vecino de un protón es un neutrón y viceversa). A densidades más bajas pueden verse claramente huecos esféricos, lasagna y gnocchi. La diferencia más notable entre estas estructuras y las halladas con Coulomb es que en este caso hay una única estructura por celda.

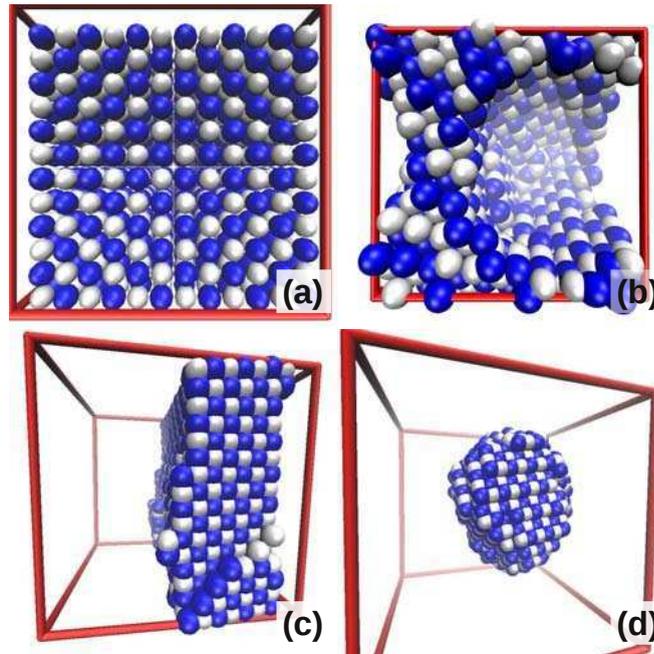


FIGURA 8.1: Estructuras correspondientes a materia nuclear ideal simétrica con el potencial Medium a $T = 0,1 \text{ MeV}$ y a varias densidades: $0,16 \text{ fm}^{-3}$ (panel (a)), $0,1 \text{ fm}^{-3}$ (panel (b)), $0,05 \text{ fm}^{-3}$ (panel (c)) y $0,01 \text{ fm}^{-3}$ (panel (d)). Los resultados corresponden a sistemas con $A = 2000$ partículas

Cabe resaltar que, salvo por la ausencia de la interacción de Coulomb, estas simulaciones fueron realizadas bajo las mismas condiciones que las de la sección 6.2.

En la figura 8.2 se muestra la energía de las configuraciones obtenidas con CMD y el potencial Medium para varias densidades a $T = 0,1 \text{ MeV}$. Además, se incluyen las energías correspondientes a cristales homogéneos de distintas estructuras. Para densidades cercanas a la normal y superiores, las simulaciones reproducen la estructura cristalina, pero para densidades inferiores, las estructuras no homogéneas son más estables. La transición entre fase homogénea y no homogénea ocurre a densidad $\rho_h \sim 0,13 \text{ fm}^{-3}$.

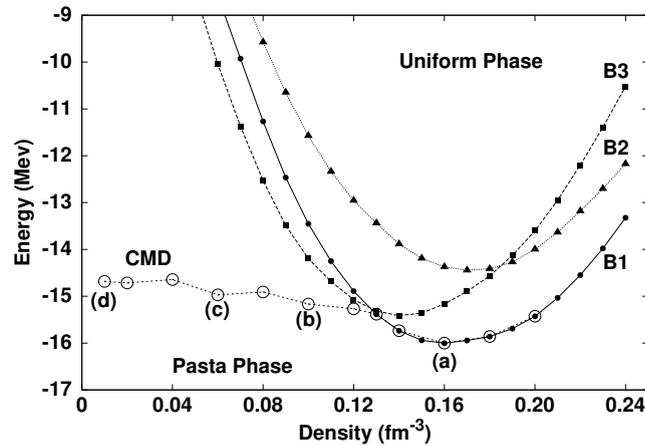


FIGURA 8.2: Energía de unión por partícula para las estructuras obtenidas con el potencial Medium (círculos) a $T = 0,001 \text{ MeV}$. Además, se muestran las energías por partícula de redes cristalinas con estructuras B1, B2 y B3. Los puntos marcados con (a), (b), (c) y (d) corresponden a las estructuras de la figura 8.1. Alrededor de la densidad de saturación CMD produce una red regular B1.

Como puede verse en la figura 8.3, en el rango de densidades $\rho_h < \rho < \rho_0$ la fase homogénea es mecánicamente inestable dado que su presión es negativa, pero sin embargo es estable en la simulación. Esa extensión de la región de estabilidad de la fase homogénea es un efecto de tamaño finito y las condiciones periódicas de contorno [161]. Efectivamente, las réplicas de la celda principal ejercen una tensión sobre ésta que estabiliza la fase cristalina en esas configuraciones no homogéneas. En el límite termodinámico, sin embargo, se espera que en la región de densidades en la que observamos fases no homogéneas haya coexistencia de fases líquido y vapor a temperaturas más altas.

Observamos también este comportamiento a temperaturas finitas. En la figura 8.4 pueden verse las energías de las soluciones de CMD para un amplio rango de densidades y temperaturas. Y en la figura 8.5 algunas estructuras a $T = 1 \text{ MeV}$.

Las estructuras de los paneles (a), (b), y (d) de la figura 8.5 parecen consistentes con un escenario de transición líquido-vapor. En cambio la estructura in-homogénea del panel (c) (que se clasifica como un “jungle-gym” según su topología), no corresponde a lo que se espera en coexistencia fases.

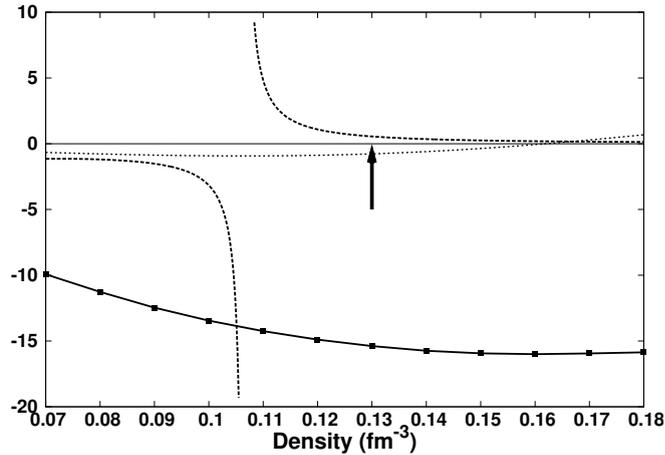


FIGURA 8.3: Presión y compresibilidad para la fase homogénea (cristal $B1$) del potencial Medium en función de la densidad. La flecha señala la densidad de transición a las fases no homogéneas observadas con CMD.

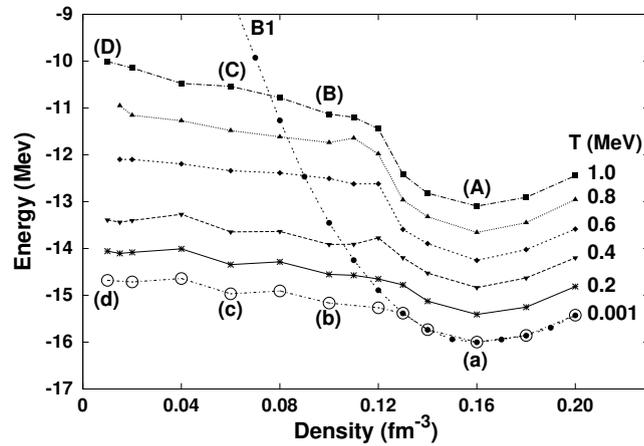


FIGURA 8.4: Energía de unión por partícula para las estructuras obtenidas con el potencial Medium (círculos) a varias densidades y temperaturas. Además, se muestra la energía por partícula de la red cristalina con estructuras $B1$ que corresponde a la fase homogénea a la densidad normal. Los puntos marcados con (a), (b), (c) y (d) corresponden a las estructuras de la figura 8.1 y los marcados con (A), (B), (C) y (D) corresponden a las estructuras de la figura 8.5.

El panorama general no depende del modelo de interacción nuclear. En la figura 8.7 se muestran algunas estructuras halladas con CMD para el potencial Stiff para $T = 0,001 \text{ MeV}$, y en la figura 8.6 se muestran energías por partícula obtenidas de simulaciones y para varias estructuras cristalinas. Incidentalmente, descubrimos que el potencial Stiff presenta una transición de fase estructural en la región homogénea. Para densidades altas la fase homogénea corresponde a una estructura cristalina $B1$, al igual que el Medium, pero cerca de $\rho = 0,18 \text{ fm}^{-3}$ pasa a ser una $B3$ (o zyncblende). Eso no tiene mayores implicaciones para el estudio de las fases in-homogéneas, pero es bueno saber

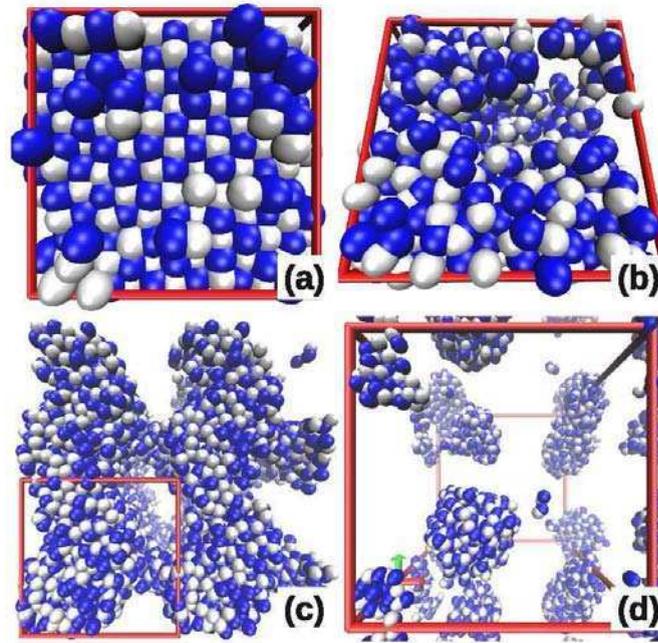


FIGURA 8.5: Estructuras correspondientes a materia nuclear ideal simétrica con el potencial Medium a $T = 1 \text{ MeV}$ y a varias densidades: $0,16 \text{ fm}^{-3}$ (panel (A)), $0,1 \text{ fm}^{-3}$ (panel (B)), $0,05 \text{ fm}^{-3}$ (panel (C)) y $0,01 \text{ fm}^{-3}$ (panel (D)). Los resultados corresponden a sistemas con $A = 2000$ partículas

que existe. La densidad normal real del modelo Stiff se halla desplazada a $0,15 \text{ fm}^{-3}$, donde su energía es de $-16,4 \text{ MeV}$ y su compresibilidad de 494 MeV , un poco más baja que los 535 MeV reportados por sus creadores. A pesar de esa transición adicional, sigue siendo un buen modelo de interacción nuclear para los propósitos de este trabajo.

Continuando con el estudio del potencial Stiff a densidades inferiores a la de saturación, las simulaciones con CMD producen esencialmente las mismas estructuras no homogéneas que el potencial Medium que no son representativas de una coexistencia de fases.

Por lo visto, las simulaciones de materia nuclear ideal producen estructuras tipo pasta sin necesidad de la interacción de Coulomb. Sin embargo, dado que todos los modelos de interacción nuclear que implementamos incluyen tanto interacciones atractivas (entre nucleones de distinto isospín) como repulsivas (entre nucleones del mismo isospín) nos preguntamos si sería posible que estas estructuras tuvieran su origen en una competencia efectiva entre esos dos potenciales. Para descartar que estas pseudo-pastas fueran producidas por la competencia entre esas dos partes del modelo de interacción nuclear decidimos realizar simulaciones para un sistema de Lennard-Jones. Presentamos los resultados en la siguiente sección.

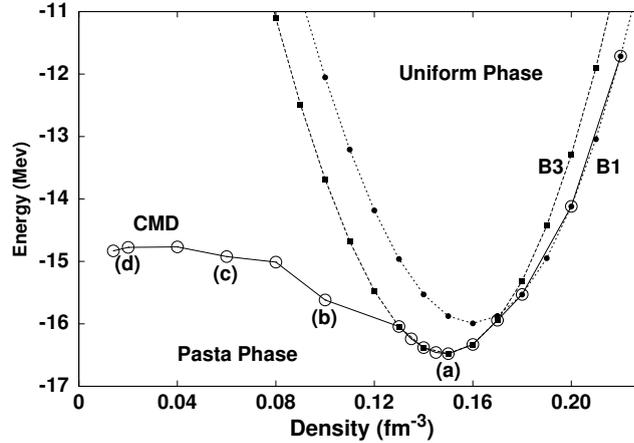


FIGURA 8.6: Energía de unión por partícula para las estructuras obtenidas con el potencial Stiff (círculos) a $T = 0,001 \text{ MeV}$. Además, se muestran las energías por partícula de redes cristalinas con estructuras $B1$, $B2$ y $B3$. Los puntos marcados con (a), (b), (c) y (d) corresponden a las estructuras de la figura 8.7. Alrededor de la densidad de saturación CMD produce una red regular $B3$ y para una densidad superior presenta una transición estructural de $B3$ a $B1$.

“Pasta” en sistemas de Lennard-Jones

Las fases “pasta” nucleares, que se espera que ocurran en la corteza interior de estrellas de neutrones, tiene su origen en la competencia entre la atracción nuclear de corto rango con la interacción repulsiva Coulombiana de largo rango. Debido a ese supuesto origen, no se esperaba que pudieran existir en materia nuclear ideal. No obstante, como se vio en la sección anterior, efectivamente aparecen en simulaciones de dinámica molecular. Frente a esta situación, decidimos simplificar el sistema tratado y usar un solo tipo de partículas interactuando con un único potencial atractivo y de corto rango. Nuevamente recurrimos al potencial de Lennard-Jones para tener un punto de referencia desde el cual juzgar los resultados obtenidos para modelos nucleares.

Con ese fin, adaptamos el formalismo CMD para utilizar un potencial de Lennard-Jones truncado y desplazado, bajo las mismas condiciones de temperatura y número de partículas que las estudiadas en la sección anterior. El potencial de interacción utilizado es

$$V_{LJ}(x) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - V_0 & : r < 5\sigma \\ 0 & : r > 5\sigma \end{cases}$$

donde σ y ϵ fueron elegidos para obtener un mínimo de energía de -16 (en unidades arbitrarias) a densidad $\rho = 0,16$, imitando al potencial Medium de Pandharipande, aunque en una estructura cristalina HCP que es la preferida por el potencial. La constante

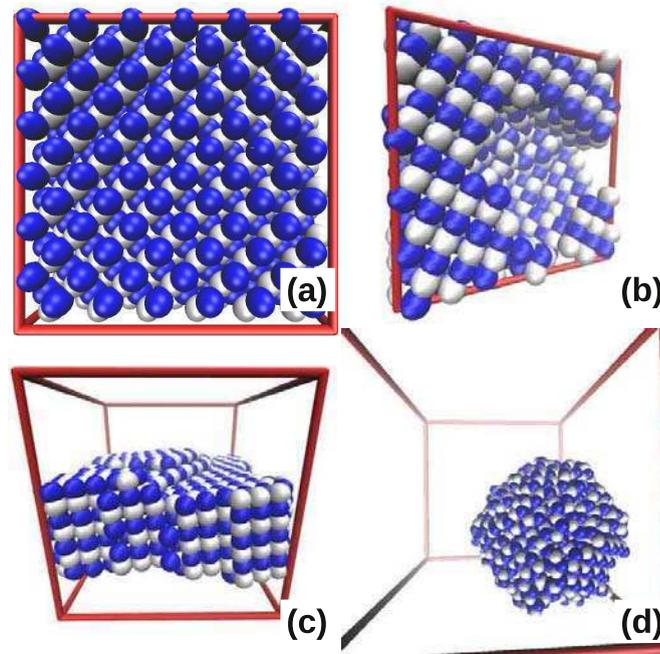


FIGURA 8.7: Estructuras correspondientes a materia nuclear ideal simétrica con el potencial Stiff a $T = 0,001 \text{ MeV}$ y a varias densidades: $0,15 \text{ fm}^{-3}$ (panel (a)), $0,1 \text{ fm}^{-3}$ (panel (b)), $0,06 \text{ fm}^{-3}$ (panel (c)) y $0,01 \text{ fm}^{-3}$ (panel (d)). Los resultados corresponden a sistemas con $A = 2000$ partículas

V_0 se incluye para forzar la continuidad del potencial en $r = 5\sigma$.

La figura 8.8 muestra algunas de las estructuras obtenidas con el potencial de Lennard-Jones, que son sorprendentemente similares a las halladas para materia nuclear. Estas “pseudo-pastas” de Lennard-Jones parecen limitarse a un gnocchi, un spaghetti o una lasagna por celda, exactamente las mismas que en los trabajos fundacionales del estudio de las pastas nucleares [127, 132]. Su existencia echa un manto de duda sobre el verdadero origen de estas estructuras en simulaciones que sí incluyen interacción de Coulomb.

A partir de estos resultados queda claro que las estructuras tipo pasta observadas en simulaciones de materia nuclear sin interacción de Coulomb no surgen de una competencia entre interacciones. Por lo tanto su existencia debe responder a algún aspecto general de las simulaciones (i.e. interacciones atractivas y CPC).

Aunque en ese momento no lo sabíamos, otros autores obtuvieron resultados similares a partir de simulaciones de Montecarlo en el ensamble Gran Canónico con el potencial de Lennard-Jones. En [161–163] los autores muestran que en simulaciones de un fluido de Lennard-Jones en la región de coexistencia líquido-vapor, la fase líquido se ordena en estructuras como las que hallamos. Allí argumentan que se producen por “efectos de tamaño finito”, como nosotros sospechamos inicialmente, pero resultó no ser el caso. Usualmente el enunciado “efectos de tamaño finito” se asocia con “detalles que se

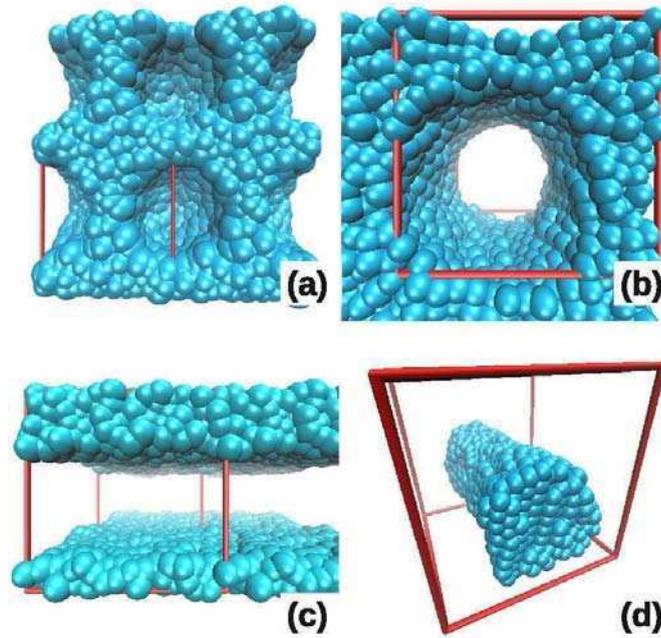


FIGURA 8.8: Estructuras halladas con el potencial de Lennard-Jones. Los resultados corresponden a sistemas con $A = 1728$ partículas

vuelven menos importantes para sistemas muy grandes”. En [162] se observa este comportamiento para sistemas de varios tamaños y se argumenta, basándose en propiedades de *scaling* de la energía libre de Landau, que en el límite $L \rightarrow \infty$ la dependencia con el tamaño de cualquier cantidad *intensiva* desaparece. Esto ocurre porque la dependencia con el tamaño para esas cantidades aparece explícitamente a través del cociente “superficie sobre volumen”, que efectivamente se vuelve despreciable para sistemas grandes. Pero también muestran que para simulaciones en el límite de sistemas muy grandes, la transición de líquido uniforme a vapor uniforme se realiza en etapas discretas, pasando por las mismas secuencias que mostramos nosotros.

Como veremos en la próxima sección, a forma particular de esas “pseudo-pastas” y la densidad a la que ocurren responde a efectos secundarios de las CPC y están presentes en sistemas de cualquier tamaño.

8.3. Efectos secundarios de las CPC

Una cuestión fundamental de las simulaciones numéricas de sistemas “infinitos” es el límite de validez de los resultados dado el tamaño finito de los sistemas tratados. Como se discutió en la sección 6.1, una práctica habitual para evitar introducir superficies o interfases espurias es imponer CPC sobre una celda de un tamaño mucho mayor que

el rango de las interacciones. Esta práctica, por otro lado, limita la máxima longitud posible para fluctuaciones de densidad al tamaño de la celda [105]. Puede decirse que bajo CPC se simulan sistemas que son homogéneos a escalas mucho mayores que las de la celda. Eso no presenta mayores inconvenientes cuando los sistemas simulados son efectivamente homogéneos. Pero cuando se pretende simular sistemas in-homogéneos como son las pastas nucleares (a densidades intermedias y temperaturas bajas), la periodicidad artificial puede, en principio, modificar fuertemente los resultados.

Todas las “pseudo-pastas” halladas en sistemas sin interacción de Coulomb presentan una única estructura por celda, ya sean nuestras simulaciones o las reportadas en [161–163]. Eso significa que la escala de esas estructuras está fijada por el tamaño de la celda de la simulación y no por las propiedades del potencial. Esas estructuras parecen estar limitadas a una esfera, un cilindro, una lámina (slab) o sus complementos (hueco esférico o hueco cilíndrico). Estas cinco estructuras cubren casi todo el rango de densidades hasta la densidad de saturación, a la que el sistema se vuelve homogéneo, salvo para pequeñas regiones de transición entre una y otra como se discutirá en la próxima sección. Notablemente, la mayoría de los trabajos coinciden en que esas mismas estructuras son representativas de las fases pasta de materia de estrella de neutrones y atribuyen su origen a la interacción de Coulomb. En ausencia de esa interacción, sin embargo, estas estructuras son producto de la imposición de CPC.

Para entender esto centrémonos en un sistema de Lennard-Jones. En el límite termodinámico, según la aproximación de Van der Waals y la construcción de Maxwell, si se incrementa la densidad de un sistema que se halla inicialmente en equilibrio en una fase vapor, primero pasa por una región de meta-estabilidad, en la cual comienzan a formarse pequeñas gotas de líquido. Luego, al ingresar en la región espinodal (cuando la presión de la fase homogénea se vuelve negativa) el estado de equilibrio es una mezcla “homogénea” de fase vapor y líquido, comúnmente denominada coexistencia de fases. Si se sigue incrementando la densidad, eventualmente la fase de equilibrio será un líquido uniforme. Y a temperatura suficientemente baja, el estado de equilibrio corresponde siempre a un líquido (o sólido) uniforme. A diferencia de esto, en una simulación bajo CPC no existen estados meta-estables. Como se vio en la sección anterior, las réplicas del sistema en celdas vecinas ejercen una tensión sobre la celda principal; Cuando se esperaría meta-estabilidad, esa tensión estabiliza al sistema en una fase homogénea. Y en la región espinodal, esa tensión es responsable de que las fases coexistentes no sean homogéneas: la fase líquido aparece como pseudo-pasta ¹.

¹El escenario con interacción de Coulomb es muy distinto, puesto que Coulomb puede proveer suficiente presión como para estabilizar al sistema en fases in-homogéneas. Por otra parte, no es posible realizar una construcción de Maxwell para sistemas no aditivos y no está claro cómo se vería una transición de fase en el límite termodinámico para un sistema con interacciones de largo rango.

En la próxima sección veremos que las estructuras no homogéneas que se observan en simulaciones en la región de coexistencia pueden explicarse completamente a partir de consideraciones energéticas íntimamente relacionadas con cuestiones geométricas.

8.3.1. Consideraciones geométricas I: Volumen y superficie.

En ausencia de interacción de Coulomb y para materia nuclear simétrica ($x = 0,5$) o para el potencial de Lennard-Jones, las únicas contribuciones a la energía son de volumen y superficie:

$$E = \epsilon_v V - \epsilon_a A \quad (8.1)$$

que es equivalente en esencia a la ecuación 4.9 (fórmula semi-empírica de masas), pero precisamente sin Coulomb ni término de simetría.

Y a temperatura cero, la estructura más estable es la de mínima energía. Esa minimización se logra adoptando una configuración que maximice volumen y minimice área. Como se discutió en la sección 7.3.1, en la función de correlación de pares $g(r)$ observamos que a $T = 0$ la densidad local y la estructura cristalina corresponden a la de la densidad normal, como fuera conjeturado por Ravenhall [127]. Eso sumado al hecho de que las simulaciones fueron realizadas a número de partículas fijo, indica que el volumen ocupado por la materia es prácticamente el mismo independientemente de la densidad. Esto se muestra explícitamente en la figura 8.9. Allí se gráfica el volumen ocupado por materia, calculado como una de las funcionales de Minkowski (ver sección 7), en función del volumen de la celda. Para densidades altas (celdas pequeñas), el sistema es homogéneo y por lo tanto el volumen ocupado es el de la celda completa. Eso se refleja en los primeros 5 puntos (de izquierda a derecha) que corresponden a densidades entre $\rho = 0,2$ y $\rho = 0,13 \text{ fm}^{-3}$ donde los sistemas son homogéneos. Los siguientes puntos corresponden a densidades 0,12, 0,1, 0,08, 0,06, 0,05, 0,04 y $0,02 \text{ fm}^{-3}$ para los cuales el sistema adopta estructuras in-homogéneas. Algunas de ellas se muestran en la figura 8.1. Puede verse que en el rango de densidades no homogéneas estudiado, el volumen de la celda aumenta un 600% mientras que las variaciones del volumen ocupado por partículas rondan el 4%. Por lo tanto, la energía de volumen de todas las estructuras es prácticamente la misma, y la energía de superficie es la que determina qué estructura específica es la más estable a una dada densidad.

Dado que a una dada densidad, la fracción de volumen ocupada por las partículas es fija y, no habiendo causa de frustración, es esperable que la configuración de equilibrio sea la de mínima superficie, *satisfaciendo las condiciones de contorno impuestas*.

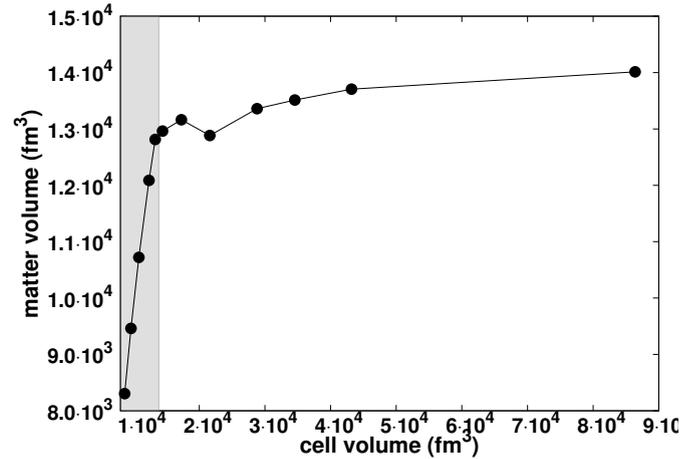


FIGURA 8.9: Volumen ocupado por partículas vs. volumen de la celda para estructuras halladas con el potencial Medium. Los puntos en la zona sombreada corresponden a fases homogéneas a densidades entre $0,2 \text{ fm}^{-3}$ y $0,13 \text{ fm}^{-3}$. El resto corresponde a fases no homogéneas para densidades entre $0,12 \text{ fm}^{-3}$ y $0,02 \text{ fm}^{-3}$.

Para evaluar esta conjetura realizamos un ejercicio geométrico sencillo: Calculamos explícitamente la superficie de una esfera, un cilindro y una lámina como función de la fracción de volumen que ocuparían en una celda cúbica y las comparamos. Tanto el cilindro como la lámina presentarán siempre algunas de sus caras “adheridas” a las caras de la celda cúbica en la que se inscriben. Puede pensarse que, aprovechando las CPC, el sistema “transforma superficie en volumen” adhiriéndose a sus propias réplicas. En las simulaciones estas estructuras son siempre ortogonales a las caras de la celda (nunca aparecen atravesándola en diagonal), por lo tanto consideramos sólo estas orientaciones para el cálculo analítico. Para contemplar las CPC, las caras adheridas a la celda no deben ser consideradas en el cómputo del área. La superficie de cada forma puede expresarse en términos de u (la fracción de volumen), L (el lado de la celda) y un parámetro adicional a que representa el radio de la esfera o el cilindro y el ancho de la lámina. Vale remarcar que dada la constancia de la densidad local de las estructuras, la fracción de volumen está relacionada con la densidad numérica por un factor.

$$S_{esfera} = 4\pi \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \times u^{\frac{2}{3}} \times L^2$$

$$S_{cilindro} = 2(\pi)^{\frac{1}{3}} \times u^{\frac{1}{3}} \times L^2$$

$$S_{lamina} = 2 \times L^2 .$$

Y las superficies de las estructuras complementarias se evalúan reemplazando u por $1-u$. Representamos estas funciones en la figura 8.10

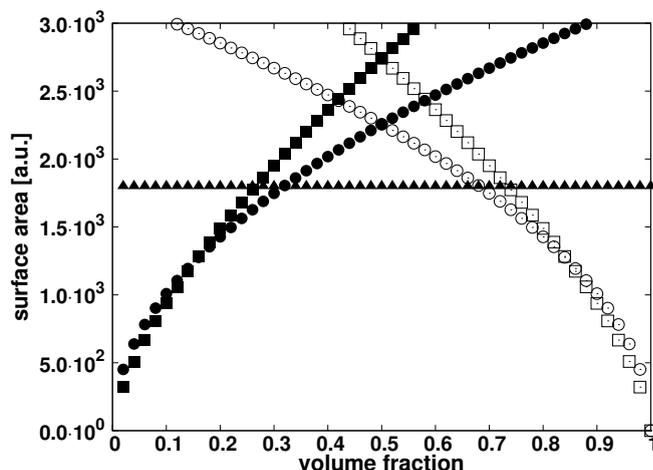


FIGURA 8.10: Superficie de varias formas simples como función de la fracción de volumen de una celda de lado $L = 30$. Las formas son: esfera (cuadrados llenos), cilindro (círculos llenos), lámina (triángulos llenos), hueco cilíndrico (círculos vacíos) y hueco esférico (cuadrados vacíos)

Para densidades bajas la forma con menor superficie es la esfera, como es esperable. Pero cuando la fracción de volumen alcanza un valor de $u_1 = 4\pi/81$ un cilindro tiene menor superficie y por lo tanto es más estable. A $u = u_2 = 1/\pi$ la forma de menor superficie es una lámina. Si se sigue aumentando la fracción de volumen, a partir de $u'_2 = 1 - u_2$ la menor superficie corresponder a una celda llena salvo por un hueco cilíndrico. Y por último, a partir de $u'_1 = 1 - u_1$ la estructura más estable corresponde a un hueco esférico. Si la fracción de volumen aumenta aún más, la superficie del hueco tiende a cero y eventualmente el sistema se vuelve homogéneo.

Sorprendentemente, este resultado muestra que los “efectos de tamaño finito” no desaparecen en el límite $L \rightarrow \infty$, ya que las áreas de todas las estructuras escalan con L^2 . Y como una lámina siempre tendrá menor superficie que un conjunto de gotas con la misma masa, es imposible observar la esperada “coexistencia de fases” en simulaciones de sistemas de este tipo (al menos para temperaturas bajas). Dicho de una manera más dramática, el límite $L \rightarrow \infty$ bajo CPC no corresponde al límite termodinámico, al menos para temperaturas bajas.

Salvo la cantidad de estructuras por celda, éste es el mismo escenario reportado en casi todos los estudios de pasta nuclear, pero lo obtuvimos basados en argumentos puramente geométricos y sin interacción de Coulomb. Y dado que las superficies de todas las formas son proporcionales a L^2 , este comportamiento es independiente del tamaño de la celda. Por lo tanto, atribuirlo a “efectos de tamaño finito”, en el sentido usual, es incorrecto.

Otra forma de describir el comportamiento de estos sistemas es la siguiente. A densidades suficientemente bajas (una celda suficientemente grande), las partículas no se ven afectadas por las CPC y la estructura de menor área es la esfera, al igual que en \mathbb{R}^3 . Pero

si se achica la celda, eventualmente la esfera podrá interactuar con sus propias réplicas en celdas vecinas y el sistema tendrá otro mecanismo disponible para reducir su energía: Al “adherirse” con sus réplicas, el sistema intercambia superficie por volumen. En simulaciones que incluyan la interacción de Coulomb, este mecanismo sigue presente y podría llegar a contribuir a dar forma a las pastas nucleares observadas en simulaciones.

8.3.2. Tamaño finito y tamaño pequeño

El resultado de la sección anterior es válido para cualquier sistema cuya energía esté determinada únicamente por un término de volumen y uno de superficie, que esté sometido a CPC con simetría cúbica. En esas condiciones, determinar qué estructura es la más estable equivale a hallar la estructura de mínima superficie de entre todas las posibles. Sin embargo, los resultados de las simulaciones sugieren que estas 5 formas abarcan prácticamente todo el rango de densidades, salvo para pequeñas regiones de transición entre una y otra. Esas regiones de transición se vuelven más pequeñas cuanto más grande sea el sistema [161, 162]. Eso obedece a que los potenciales de interacción que utilizamos tienen rango finito y por lo tanto no es estrictamente cierto que la energía se descomponga únicamente en volumen y superficie: habrá necesariamente una región de interfase. En ese caso, los resultados del análisis geométrico representan el límite para L muy grande y es esperable que para sistemas pequeños se observen desviaciones. La pregunta es entonces, qué tan chico puede ser un sistema siendo suficientemente grande como para que los efectos de interfase y curvatura puedan ser ignorados.

Para estimar que tan importantes son los efectos de tamaño pequeño, realizamos simulaciones con el potencial medium de sistemas con $A = 1728$ y con $A = 4096$ partículas a las mismas densidades. Mostramos esos resultados en la figura 8.11. Puede verse claramente que hay una única estructura por celda, independientemente del tamaño del sistema. Pero para la densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$, el sistema más pequeño forma una lámina con un orificio mientras que en el sistema más grande la solución es una lámina regular.

La situación a $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ es sugestivamente similar a la observada por Williams y Koonin en [133]. Allí, los autores describen una estructura que llaman “cross” como “una lámina con agujeros regulares”, y muestran que es la configuración de mínima energía para un pequeño rango de densidades, entre el cilindro y la lámina regular. Muestran además que al aumentar adiabáticamente la densidad media del sistema esta estructura se convierte en una lámina regular, pero en una celda más grande. El modelo utilizado por los autores es completamente distinto al nuestro. Ellos construyen una grilla regular dentro de una celda cúbica sometida a CPC y calculan la energía de una configuración

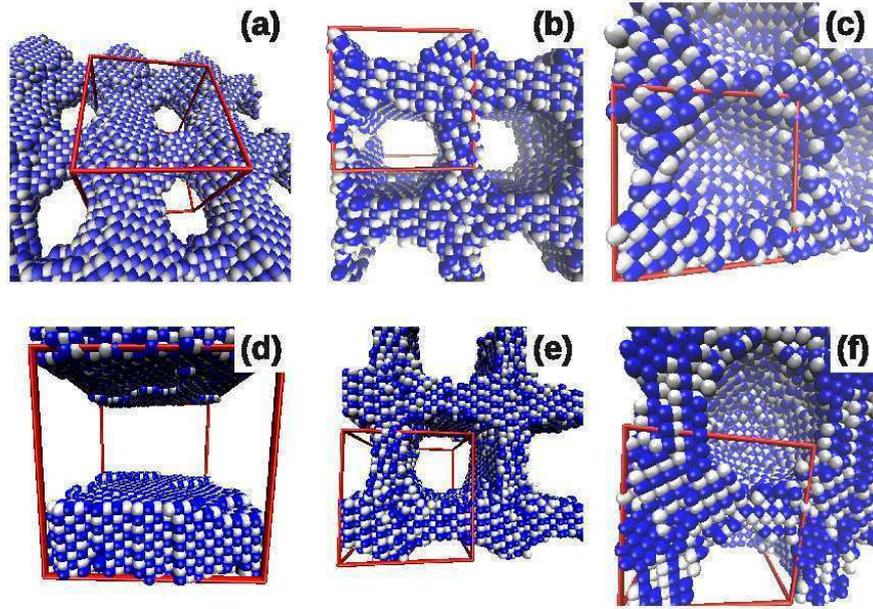


FIGURA 8.11: Comparación de las estructuras para el modelo Medium a $T \sim 0$ con $A = 1728$ (fila superior) y con $A = 4096$ (fila inferior) para densidades $\rho = 0,05 fm^{-3}$ (paneles (a) y (d)), $\rho = 0,08 fm^{-3}$ (paneles (b) y (e)) y $\rho = 0,1 fm^{-3}$ (paneles (c) y (f))

como una funcional de la densidad en cada punto de la grilla ². Luego, mediante un cuidadoso proceso que involucra relajar la densidad en cada punto de la grilla, variar la densidad media y el tamaño de la celda, encuentran la configuración de mínima energía.

Todo eso sugiere que tal vez la lámina con un orificio sea la forma de menor superficie para algún valor de la fracción de volumen u . Para comparar la superficie de esta estructura con las demás, la parametrizamos en términos de la fracción de volumen u , su espesor a y el radio del orificio b . La expresión para el área de esta estructura es

$$b = \frac{L}{\sqrt{\pi}} \times \sqrt{1 - \frac{L \times u}{a}}$$

$$S_{Pslab} = 2L^2 \times \frac{L \times u}{a} + 2\pi b \times a$$

Como se ve en la figura 8.12, esta estructura nunca es la de mínima superficie entre las que consideramos. Más aún, la superficie de la lámina agujereada no escala con L^2 como las demás. El término dominante escala con L^3/a , que siempre es más grande que L^2 . Por lo tanto para valores más grandes de L esta forma siempre tendrá mayor superficie

²esa funcional de energía incluye Coulomb

que alguna de las otras, sin embargo aparecen tanto en nuestras simulaciones como en las de Williams y Koonin, y con metodologías muy distintas.

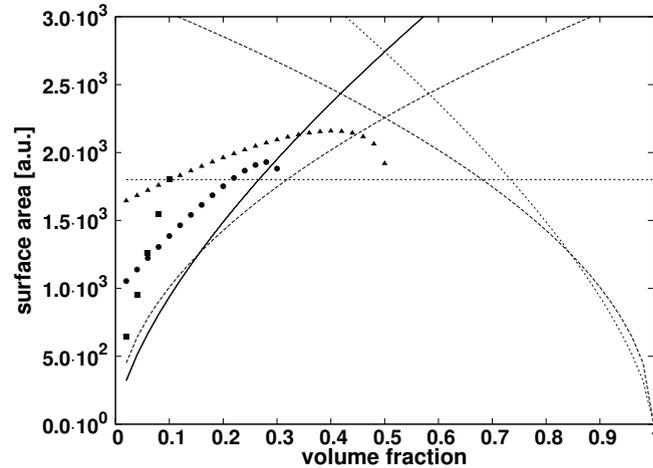


FIGURA 8.12: Área de una lámina agujereada de espesores $a = 0,25L$, (cuadrados), $a = 0,55L$ (círculos) y $a = 0,85L$ (triángulos) para $L = 30$. Se incluyen también las áreas de las mismas estructuras que en la figura 8.10: esfera y hueco esférico (línea punteada), cilindro y hueco cilíndrico (línea quebrada) y lámina (línea llena)

La diferencia de energías entre las dos estructuras de nuestras simulaciones es $\sim 0,25 \text{ MeV}$ en favor de la estructura sin agujeros. Las simulaciones realizadas con $A = 4096$, en cambio, sistemáticamente resultaron en una lámina sin agujeros. Williams y Koonin también observan que la diferencia de energías entre estas estructuras es tan pequeña que sería borrada a temperatura finita [133].

En nuestras simulaciones, esa casi degeneración entre lámina con o sin agujeros es atribuible a efectos de tamaño pequeño. En realidad, una simulación distinta con el mismo sistema resultó en una lámina sin agujeros. Este es un claro ejemplo del problema de la histéresis en este tipo de simulaciones y de la complejidad del paisaje energético, incluso sin interacción de Coulomb. Para el sistema de $A = 1728$ partículas, la lámina sin agujeros tiene un espesor constante de $\sim 13 \text{ fm}$ mientras que el potencial tiene un rango de $r_c = 5,4 \text{ fm}$. Como argumentamos en la sección anterior, dado el rango finito del potencial (y el espesor de una lámina sin agujerear para ese tamaño), la división de energía en volumen más superficie no es una buena aproximación: Partículas en el centro de la estructura “sienten” las interfases, y por lo tanto el “volumen” (bulk) no es tal. Por eso, el precio que paga la estructura por aumentar su superficie generando un orificio es aproximadamente compensado por el incremento de volumen que logra al aumentar localmente el espesor en otras regiones.

Este mismo mecanismo puede ser el responsable de las estructuras más exóticas (jungle-gym) observadas a $T = 1 \text{ MeV}$ en la figura 8.5. Todo parece indicar que $A = 1728$ no es lo suficientemente grande como para poder ignorar efectos de interfase debidos

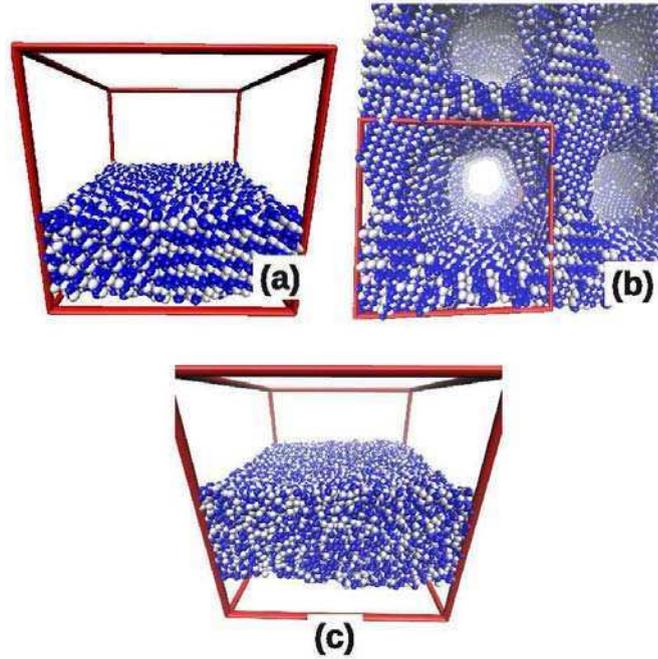


FIGURA 8.13: Algunos resultados con sistemas más grandes. El panel (a) corresponde a $T = 0,001 MeV$ para $A = 13824$ a densidad $\rho = 0,05 fm^{-3}$, el panel (b) a $T = 0,001 MeV$ con $A = 13824$ y densidad $\rho = 0,08 fm^{-3}$. Panel (c) muestra una configuración de $A = 46656$ a densidad $\rho = 0,05 fm^{-3}$ y $T = 1,0 MeV$

solo al potencial nuclear. Para completar el argumento, presentamos en la figura 8.13 algunos resultados con sistemas de $A = 13824$ y $A = 46656$ partículas. A densidad $\rho = 0,04 fm^{-3}$ (paneles (a) y (c) se observan lámina sin agujeros para los dos tamaños. Notablemente, la estructura del panel (c) está a $T = 1 MeV$. Comparando con la figura 8.5 se ve que la estructura de esta última es afectada sensiblemente por el tamaño pequeño a temperatura finita. El panel (b) muestra una estructura a densidad $\rho = 0,08 fm^{-3}$ y presenta un túnel cilíndrico por celda, pero de espesor modulado. Esta modulación se debe muy probablemente a un enfriamiento demasiado rápido.

Los resultados de esta sección indican que, más que el tamaño finito de las simulaciones, es la imposición de CPC la responsable de la formación de las pseudo-pastas, y esto ocurre en cualquier sistema con potenciales atractivos de corto rango. Bajo estas condiciones, las estructuras más estables son aquellas que minimizan superficie para cada densidad. En vista de esto, no resulta claro que las pastas nucleares halladas en simulaciones con interacción de Coulomb sean producto únicamente de una competencia entre interacciones y que la minimización de superficie, aunque frustrada, juega algún papel en la determinación de la estructura de equilibrio. Más aún teniendo en cuenta que las pastas tradicionales son justamente esferas (gnocchi), cilindros (spaghetti) o láminas (lasagna) que son superficies mínimas bajo CPC cúbicas.

De cualquier manera, como regla general, cualquier modelo que pretenda representar las fases in-homogéneas de un sistema con interacciones competitivas (en particular pastas nucleares) bajo CPC, debe poder producir más de una estructura por celda. En caso contrario, es altamente probable que las estructuras que surjan sean artificios de la simulación.

8.3.3. Superficies Mínimas Tríplemente Periódicas

Una superficie mínima se define en geometría diferencial como una superficie que tiene curvatura media nula. Se llaman mínimas porque su área es mínima respecto de todas las otras superficies con el mismo contorno. En el caso de superficies mínimas periódicas, en lugar de un contorno determinado tienen una cierta periodicidad. El problema matemático de hallar una superficie mínima dado un contorno se conoce tradicionalmente como el Problema de Plateau [164], en honor a Joseph Plateau quien planteó el problema en términos de películas de jabón sostenidas por marcos de alambre. Por ejemplo, la superficie que forma una burbuja de jabón sostenida entre dos marcos circulares se llama catenoide. Si los marcos fueran cuadrados, la superficie que forma la burbuja forma otra superficie mínima. Si se conectan seis de estas “catenoides de marco cuadrado” de manera que los marcos formen un cubo, la superficie que queda definida puede extenderse periódicamente y recibe el nombre Superficie Primitiva de Schwarz (o Schwarz-P).

Casi todas las pastas usuales (spaghetti y lasagna), la fase “cross” de Williams y Koonin [133] y el Jungle-gym de CMD [152], además de estructuras más exóticas como el “Giroide” y la “Doble Diamante” [165] (obtenidas recientemente con un modelo relativista de campo medio para materia de estrellas de neutrones) son “Superficies Mínimas (Tríplemente) Periódicas” [159, 164] con simetría cúbica. Por lo tanto, todas son soluciones del problema de Plateau con CPC cúbicas, y por lo tanto es posible que su naturaleza “tríplemente periódica” esté relacionada trivialmente con la simetría cúbica de la celda. Por ejemplo, en [166, 167], los autores simulan materia de estrellas de neutrones con un modelo de Hartree-Fock, cuántico y relativista. Pero a pesar de la sofisticación (y del altísimo costo computacional) del modelo que utilizan, sus soluciones son sistemáticamente una única estructura por celda delimitada por la superficie Schwartz-P e independientemente del tamaño del sistema. Eso sugiere que los resultados que obtienen son producto de las condiciones de la simulación más que del problema físico que pretenden estudiar.

Resumiendo, todo parece indicar que la gran mayoría de las estructuras halladas en simulaciones de materia nuclear y estrellas de neutrones, independientemente del modelo,

son estructuras de superficie mínima trípemente periódica con simetría cúbica. Por lo tanto, es plausible que estén en algún grado restringidas por la geometría y las simetrías de la celda, y no sólo por su tamaño. Si bien esto es más notable cuando la simulación produce una única estructura por celda, no resulta claro en qué grado ocurre en general. Por todo eso, decidimos que explorar celdas con otras simetrías podría ser iluminador.

8.3.4. Consideraciones Geométricas II: Celdas de distintas geometrías

Para imponer condiciones de contorno periódicas, las celdas cúbicas son la elección más frecuente dada su simplicidad y el bajo costo de su implementación computacional, pero no son la única opción posible [168, 169]. Cualquier celda periódica que llene el espacio sólo por traslaciones es apta. En 3D hay sólo 5 que llenan el espacio de esa forma (los Paraleloedros de Fedorov [168]). Estos son el cubo (o cualquier paralelepípedo), el prisma hexagonal, el dodecaedro rómbico, el dodecaedro rombo-hexagonal y el octaedro truncado. El dodecaedro rómbico es la celda de Wigner-Seitz de una red *FCC* y el octaedro truncado la de una red *BCC*. En [168] se discuten extensamente las ventajas y particularidades de cada una. En esta sección describimos y comparamos brevemente el cubo, el prisma hexagonal y el octaedro truncado, que son las tres que implementamos y utilizamos para el estudiar efecto de la geometría y del tamaño de la celda sobre el conjunto posible de configuraciones observables en el marco de CMD. La implementación computacional de las CPC en estas celdas se discute en el apéndice C.

Celda cúbica

Se empaqueta como una red *SC*. Tiene 6 caras cuadradas, 12 aristas y 8 vértices. Si se parametriza por L_C , la longitud de una arista, tiene un volumen $V_C = L_C^3$ y un área total de $S_C = 6 * L_C^2$. Como una medida de la “esfericidad” de una celda puede calcularse en cociente entre el radio la esfera más pequeña que la circunscribe (una esfera cuya superficie contenga los vértices de la celda) y el radio de la esfera más grande que pueda inscribirse en ella (una esfera tangente a todas las caras). En el caso de la celda cúbica este cociente es $s_C = \sqrt{3} \approx 1,73$. La relación superficie-volumen para un cubo de volumen unidad es 6.

Prisma hexagonal

Un prisma de sección hexagonal tiene 6 caras rectangulares y 2 hexagonales (que llamaremos tapas). Se empaqueta como una red *HCP*. Si bien la celda cúbica puede acomodar una *HCP*, el prisma hexagonal tiene una simetría rotacional discreta de orden 6 en torno



FIGURA 8.14: Celdas cúbica, prisma hexagonal y octaedro truncado.

al eje normal a las caras hexagonales. Esta simetría adicional puede tener un impacto en las soluciones que es interesante explorar. Elegimos las dimensiones del prisma hexagonal de manera que la distancia entre cualquier par de caras paralelas L_{HP} sea la misma. Con estas proporciones, el prisma tiene una altura L_{HP} (en la dirección z). En términos de esta distancia, cada cara hexagonal tiene un área $\frac{\sqrt{3}}{2}L_{HP}^2$ y las caras laterales un área $\frac{\sqrt{3}}{3}L_{HP}^2$. El cociente entre los radios de la esfera que la circunscribe y la inscrita es $s_{HP} = \sqrt{\frac{7}{3}} \approx 1,53$. Para una celda de volumen unidad, la relación superficie-volumen del prisma hexagonal de estas dimensiones es $\sim 5,72$.

Octaedro Truncado

El octaedro truncado es la celda de Wigner-Seitz de la red BCC , por lo tanto se empaqueta como BCC . Tiene 14 caras, de las cuales 8 son hexagonal y 6 cuadradas. Por construcción, la distancia entre cualquier par de caras paralelas es la misma. Además, un octaedro truncado puede inscribirse en un cubo de lado L_{TO} y tiene exactamente la mitad del volumen de ese cubo. Con un valor de $s_{TO} = \sqrt{\frac{5}{3}} \approx 1,29$, el octaedro truncado es la celda “más esférica” de las tres. Además, el octaedro truncado es la que menor relación área-volumen tiene, con un valor de $\sim 5,31$ para volumen unidad.

En la figura 8.14 se muestran las tres celdas a escala y desde la misma perspectiva.

En resumen, la celda cúbica tiene la relación área-volumen más grande de las tres, seguida por el prisma hexagonal. Esto significa que para un dado volumen, la celda cúbica será la más sensible a “efectos de superficie” [161]. La celda cúbica es también la menos esférica de las tres. Y la celda hexagonal de estas dimensiones, si bien es más esférica que el cubo, es también menos isotrópica dado el eje de simetría privilegiado. Entre estas tres, el octaedro truncado es la que más ventajas presenta. Y la única ventaja de la celda cúbica parece ser su economía computacional. Incluso, como discuten en [168], el octaedro truncado sería preferible a la celda cúbica en el caso de implementarse un

potencial de largo rango mediante las sumas de Ewald, ya que la suma en el espacio de Fourier lograría mejor precisión con menos términos.

8.3.5. Minimización de superficie bajo distintas CPC

Como mostramos en la sección 8.3.1, la minimización de superficie subyace a la formación de pseudo-pastas en simulaciones de sistemas Lennard-Jones, materia nuclear ideal o cualquier sistema que solo incluya interacciones atractivas de corto rango: A una dada fracción de volumen la configuración más estable es la que tiene la menor área, dadas las CPC.

Para mostrar esto, calculamos analíticamente la superficie de cada una de esas configuraciones asumiendo explícitamente que se hallaban inscritas en una celda cúbica sujeta a CPC (descontando la superficie de las caras adheridas a la celda) y verificamos que las predicciones de este procedimiento coinciden con los resultados de las simulaciones[170]. Utilizando CPC cúbicas, las soluciones parecen estar limitadas a una esfera, un cilindro o una lámina para casi todo el rango de densidades. En esta sección, repetimos esos cálculos para esas mismas estructuras pero bajo CPC en celdas de las geometrías descritas en la sección anterior.

Las expresiones de volumen y superficie para la esfera no dependen de la celda. En el caso de los cilindros o las láminas, en cambio, es de esperarse que las simetrías particulares de cada celda favorezcan alguna orientación sobre otras. En las simulaciones (que mostramos más adelante) observamos que las estructuras siempre son paralelas a algún par de caras. En el cubo todas las caras son equivalentes, mientras que en las otras celdas no es así. La distancia entre cualquier par de caras opuestas es la misma, pero su forma y tamaño limitarán el espesor máximo de las estructuras que pueden alojar.

Dicho esto, para el cálculo analítico de superficies en el prisma hexagonal consideramos únicamente un cilindro paralelo a las caras hexagonales. Esto no supone ninguna pérdida de generalidad. El radio de un cilindro en esta orientación estará menos acotado que uno paralelo a otras caras. Por lo tanto tendrá igual o menor área que un cilindro en cualquier otra orientación, para cualquier fracción de volumen. De la misma manera, el cilindro más general en el octaedro truncado será ortogonal a algún par de caras hexagonales de la celda.

En el caso de la lámina, en las simulaciones se observa que siempre aparece paralela a las caras hexagonales tanto en el prisma hexagonal como en el octaedro truncado. Esta orientación es la que permite un mayor “ahorro” de superficie por medio de las CPC. En el octaedro truncado, una lámina paralela a una cara hexagonal corta la celda a través

de dos caras cuadradas. Entonces nuestro cálculo asume implícitamente que ninguna lámina puede ser más ancha que el lado de una de esas caras. Afortunadamente, ese caso límite ocurre para fracción de volumen $u = \frac{1}{2}$. Cuando más de la mitad de la celda está ocupada por materia, pasa a tener más sentido hablar de “huecos” que de estructuras, por lo tanto nuestro cálculo no excluye ningún escenario posible e incluye adecuadamente la transición de “lámina” a “hueco con forma de lámina”.

En la tabla 8.1 se muestran las expresiones analíticas para el área de las cinco formas usuales sujetas a CPC en celdas con las tres geometrías que describimos. Estas áreas están expresadas como función de la fracción de volumen y del parámetro L_x que define el tamaño de la celda x (con $x = C$ para cubo, HP para prisma hexagonal y TO para octaedro truncado). La primera columna contiene los valores de ese parámetro para que la celda indicada tenga volumen unidad. nuevamente, las expresiones para las estructuras complementarias (“huecos”) se hallan reemplazando u por $1 - u$ en estas expresiones.

	L_x^1	Esfera	Cilindro	Tabla
Cubo	1	$(6\sqrt{\pi}u)^{\frac{2}{3}} L_C^2$	$\sqrt{4\pi}uL_C^2$	$2L_C^2$
HP	$\left(\frac{2\sqrt{3}}{3}\right)^{\frac{1}{3}}$	$3(\sqrt{\pi}u)^{\frac{2}{3}} L_{HP}^2$	$\sqrt{\sqrt{12}\pi}uL_{HP}^2$	$\sqrt{3}L_{HP}^2$
TO	$2^{\frac{1}{3}}$	$(3\sqrt{\pi}u)^{\frac{2}{3}} L_{TO}^2$	$\sqrt{2\pi}uL_{TO}^2$	$\sqrt{2}L_{TO}^2$

TABLA 8.1: Área para formas sencillas bajo diferentes CPC como función de la fracción de volumen u y celda de dimensión L_x . L_x^1 es el valor de L_x para el cual la celda tiene volumen unidad.

Recordemos que la línea de argumentación es que, en ausencia de interacción de largo rango como Coulomb, la energía de unión de un sistema puede dividirse a primer orden en un término de volumen y uno de superficie. Y a $T = 0$ la estructura más estable es la de menor energía de unión. Entonces, para un determinado volumen, la minimización de energía se logra mediante la minimización de la superficie. En la figura 8.15 graficamos las funciones de la tabla 8.1 para celdas de volumen unidad de las tres geometrías. Las etiquetas indican valores de la fracción de volumen u para los cuales la estructura de menor superficie cambia. La característica más evidente de la figura 8.15 es que las regiones de estabilidad de cada estructura son distintas para cada geometría de celda. En (a) el cilindro pasa a ser la forma de menor área en el cubo. Pero eso no ocurre en el prisma hexagonal hasta (b) y en el octaedro truncado hasta (d). La lámina empieza a ser la mejor solución en (c) para el prisma hexagonal y en (e) para el cubo y el octaedro truncado. En particular, en el octaedro truncado la región de estabilidad del cilindro es prácticamente inexistente. Esto implica que hay regiones de u en las cuales las condiciones de contorno arbitrarias que se impongan determinarán qué estructura

es la más estable. Y nuevamente, como todas las áreas son proporcionales a L^2 , este comportamiento es independiente del tamaño del sistema considerado.

Cualitativamente (y *a posteriori*) es razonable que el octaedro truncado, siendo la celda “más esférica” pueda alojar esferas y huecos esféricos en un rango mayor de u antes de que empiecen a jugar las CPC. Pero el hecho de que la solución dependa de las CPC bajo las que se realiza la simulación independientemente del tamaño es potencialmente catastrófico. En particular, existen regiones de u (entre las etiquetas (c) y (d), o sus complementos) para las cuales cada celda da un resultado distinto.

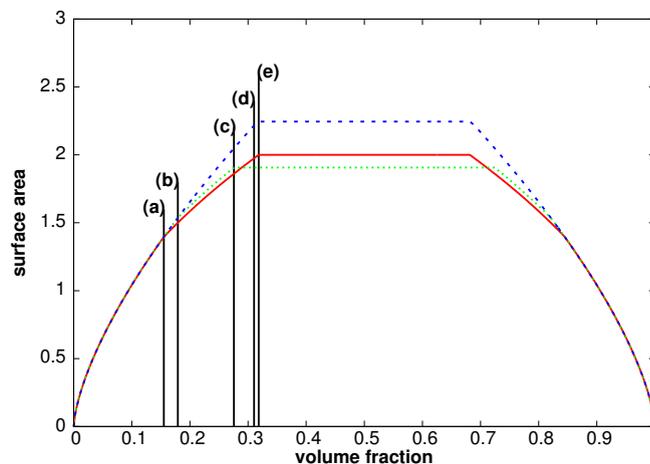


FIGURA 8.15: Área de la estructura de menor área bajo distintas condiciones de contorno en celdas de volumen unidad: cúbica (línea llenas), prisma hexagonal (línea punteada) y octaedro truncado (línea quebrada). Las etiquetas señalan transiciones entre estructuras.

8.3.6. CMD Sin Coulomb bajo distintas CPC

Para verificar la predicción de la sección anterior, realizamos simulaciones a temperatura casi cero y a tres densidades relevantes, para dos tamaños de sistema y en las tres geometrías discutidas previamente: Cúbica, prisma hexagonal y octaedro truncado. Vale destacar que el algoritmo de listas de vecinos utilizado para acelerar los cálculos en la celda cúbica no puede ser implementado en las geometrías no cúbicas estudiadas en este capítulo. Para hacer abarcable el problema, escribimos un nuevo código capaz de utilizar los múltiples procesadores que contienen las placas gráficas (GPU) para realizar cálculos en paralelo masivo. En particular, utilizamos la plataforma CUDA de NVIDIA. En el apéndice D se describe brevemente en qué consiste la plataforma CUDA y se comentan las diferencias entre la implementación del algoritmo de Verlet en serie y en paralelo. Para los detalles de la implementación de las distintas condiciones de contorno ver el apéndice C.

Presentamos los resultados para tres densidades relevantes en las figura 8.16 (densidad $\rho = 0,05 fm^{-3}$), 8.17 (densidad $\rho = 0,08 fm^{-3}$) y 8.18 (densidad $\rho = 0,10 fm^{-3}$).

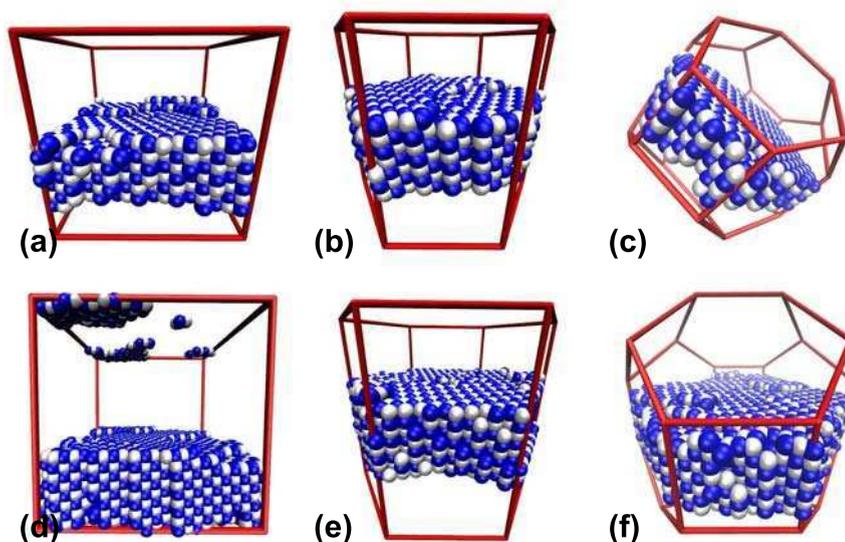


FIGURA 8.16: Soluciones de CMD para el potencial Medium sin interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,05 fm^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

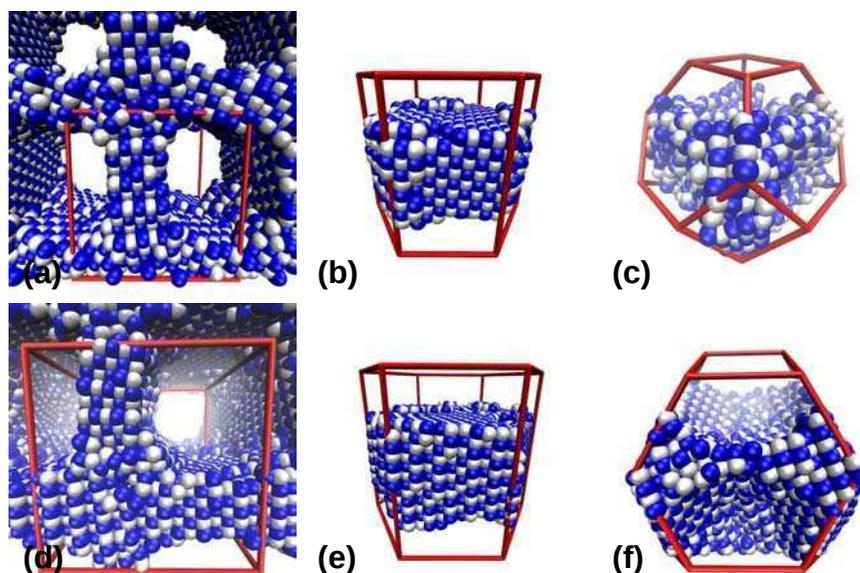


FIGURA 8.17: Soluciones de CMD para el potencial Medium sin interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,08 fm^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

Efectivamente a la densidad $\rho = 0,08 fm^{-3}$, sin interacción de Coulomb cada celda produce un resultado distinto. Para ganar intuición acerca de hasta qué punto las condiciones de contorno compiten con la interacción de Coulomb ordenando las partículas,

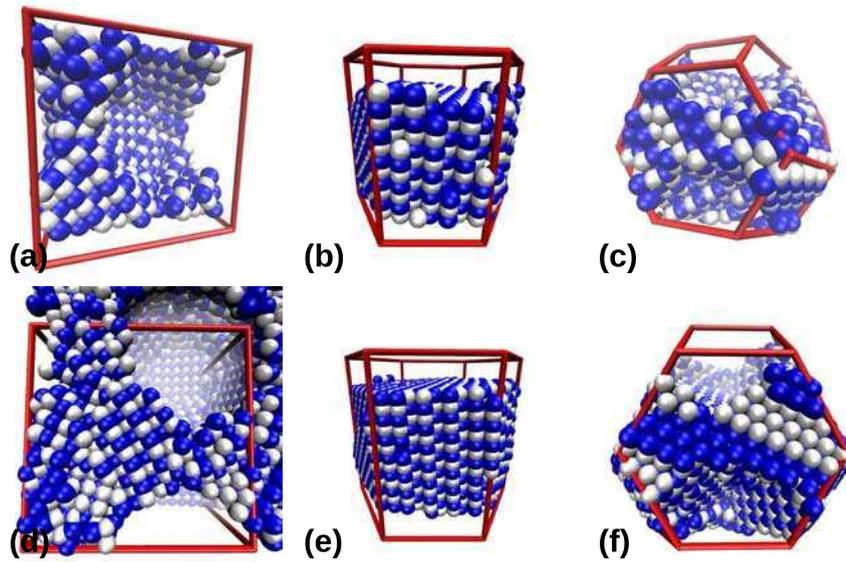


FIGURA 8.18: Soluciones de CMD para el potencial Medium sin interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,10 \text{ fm}^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

realizamos simulaciones a las mismas densidades incluyendo el potencial de Coulomb apantallado siguiendo la heurística descrita en el capítulo 5.

8.3.7. CMD Con Coulomb bajo distintas CPC

Como se dijo, a las densidades y temperaturas de interés, en ausencia de Coulomb el sistema intenta maximizar volumen y minimizar superficie. En esas condiciones, lo único que da forma a los resultados de una simulación son las condiciones de contorno. El tamaño y las simetrías de la celda fijan la escala y la geometría de las soluciones que son, por lo tanto, artificios de la simulación. Y este comportamiento es independiente del tamaño del sistema, puesto que los efectos de tamaño finito son tan finitos como la celda.

Para estudiar en detalle cómo las distintas CPC afectan las configuraciones en simulaciones con interacción de Coulomb, realizamos simulaciones similares a las de la sección anterior, pero incluyendo Coulomb siguiendo la heurística descrita en la sección 6.2. El escenario mejora ostensiblemente si el sistema incluye un potencial repulsivo de largo rango como Coulomb.

Puede verse en las figuras 8.19, 8.20 y 8.21 que en general se produce más de una estructura por celda, pero para sistemas de estos tamaños persiste algún efecto de la geometría

de la celda. La celda más patológica es la hexagonal, que para las tres densidades estudiadas produce “lasagnas” y, para densidades altas, sólo una por celda. Los resultados en las otras dos celdas son más tranquilizadores. Tanto para la celda cúbica como para el octaedro truncado se produce más de una estructura por celda, y el mismo tipo de estructura para la misma densidad. Sin embargo, existen algunas pequeñas diferencias como el espesor de las lasagna o el ordenamiento de los túneles. Así y todo, parece razonable asumir que para celdas más grandes los resultados de todas convergerán.

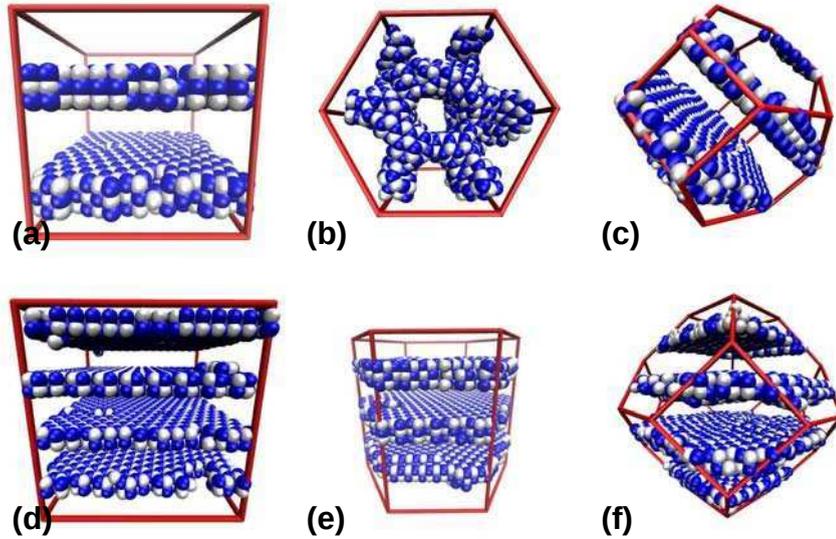


FIGURA 8.19: Soluciones de CMD para el potencial Medium con interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

Esto puede entenderse argumentando que cuando se incluye Coulomb, aparece una nueva escala de longitud asociada con el máximo tamaño que puede tener una “gota” (de cualquier forma) antes de que sea energéticamente conveniente dividirla en dos o más “gotas”. La escala de longitud que surge de la competencia entre el potencial atractivo de corto rango y Coulomb es física, y todo parece indicar que si la celda de simulación es suficientemente más grande que esta longitud, la geometría de la solución que minimize energía será independiente de la geometría de la celda y, en principio, del tipo de condiciones de contorno. Para comenzar a estudiar la conjetura sobre el tipo de condiciones de contorno, realizamos una serie de simulaciones exploratorias con condiciones de contorno reflectantes para sistemas bidimensionales de partículas interactuando por Lennard-Jones y Coulomb apantallado con varias longitudes de apantallamiento. Los resultados se presentan en el apéndice E y no contradicen lo antedicho.

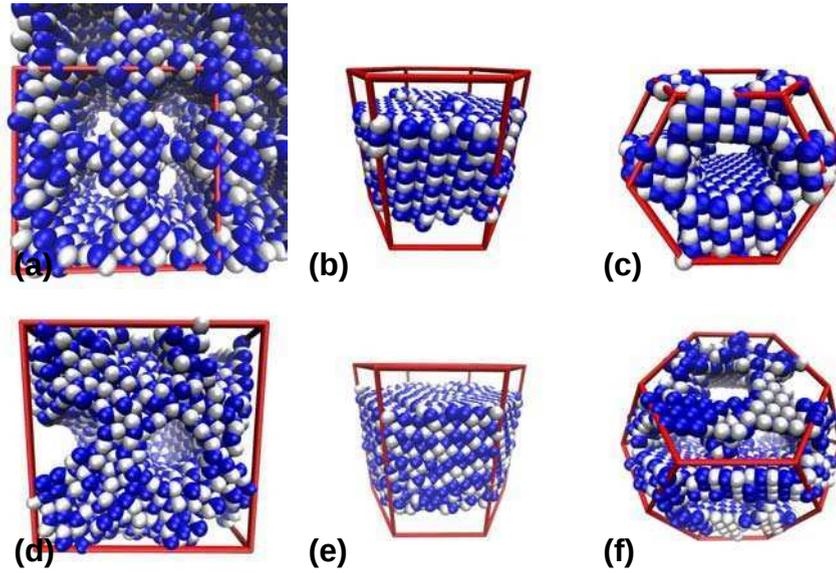


FIGURA 8.20: Soluciones de CMD para el potencial Medium con interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

Con todo esto, no resulta claro que para los tamaños de sistemas considerados, los ahora bien entendidos efectos de tamaño finito sean despreciables. Más aún, la implementación de la heurística mencionada en la sección 6.2 exagera la acción de estos efectos de tamaño finito al sobre-estimar la escala de longitud característica introducida por Coulomb. Por todo eso decidimos estudiar explícitamente cuál es el valor mínimo de la longitud de apantallamiento λ que permite reproducir toda la fenomenología pero sin trucos y sin atajos.

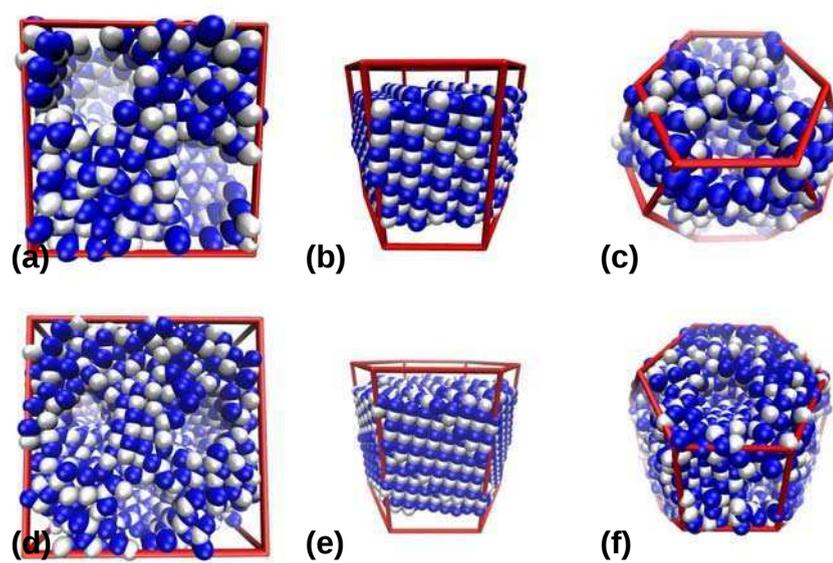


FIGURA 8.21: Soluciones de CMD para el potencial Medium con interacción de Coulomb en celdas de distintas geometrías y a densidad $\rho = 0,10 \text{ fm}^{-3}$. La fila superior corresponde a sistemas con $A = 1728$ partículas y la fila inferior a sistemas con $A = 4096$.

Capítulo 9

Rol de Coulomb II: Longitud de apantallamiento crítica

9.1. Longitud de apantallamiento histórica

Como se discutió en la sección 6.1, en la aproximación de Thomas-Fermi [142], una carga puntual embebida en un fondo polarizable de signo opuesto genera un potencial de Yukawa:

$$V_c(r) = q^2 \frac{e^{-r/\lambda_{TF}}}{r}$$

Bajo esta aproximación, la longitud de apantallamiento para el potencial generado por los protones para las densidades de interés en la corteza de las estrellas de neutrones es del orden de $\lambda_{TF} \sim 100\text{fm}$. Pero históricamente, para simulaciones de NSM basadas en partículas se ha utilizado un valor significativamente menor sin una debida justificación. En esta sección estudiamos las consecuencias de una elección arbitraria de longitud de apantallamiento. Para ello, variamos λ y observamos el efecto que esta variación tiene sobre las propiedades morfológicas y topológicas de los resultados [171].

En particular, trabajamos con valores de λ entre 0 y 20 fm para densidades en 0,005 y 0,08 fm^{-3} . Para $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$, donde se forman gnocchi, extendimos el análisis a $\lambda = 30$ y 50 fm. En todos los casos el potencial fue truncado y corrido en $r_c = \lambda$. Y para poder utilizar la convención de la primera imagen, utilizamos $A = 5000$ partículas de manera que las celdas fueran lo suficientemente grandes. Los cálculos fueron realizados únicamente para el potencial Medium y para $T = 0,001 \text{ MeV}$.

9.2. Longitud de apantallamiento “Crítica”

Una primera pista sobre el efecto de la longitud de apantallamiento puede obtenerse a partir de la presión de las configuraciones de equilibrio. La presión puede computarse a partir de los datos de la simulación mediante el teorema del virial:

$$P = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{1}{3} \frac{\sum_i^N r_i \cdot F_i}{V} \quad (9.1)$$

La presión calculada según la ecuación 9.1 contempla únicamente a las interacciones específicas del modelo; no incluye la presión que ejercerían los electrones y no debe confundirse con la que se esperaría para NSM. Es la presión a la que está sometida la celda principal debida a las celdas vecinas. Por lo tanto debe considerarse como una prueba de la estabilidad mecánica de las configuraciones halladas en el marco del modelo.

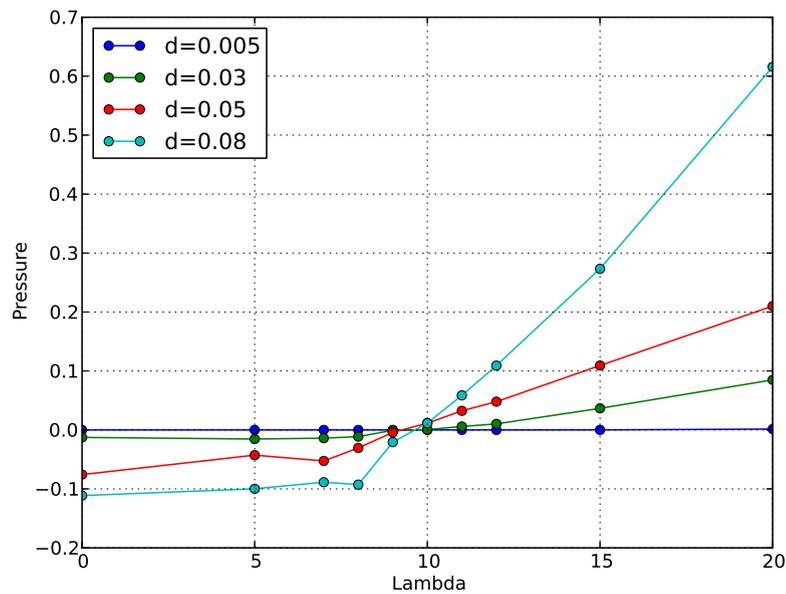


FIGURA 9.1: Presión como función de λ para diferentes densidades.

Como puede verse en la figura 9.1, para valores de $\lambda \lesssim 10$ fm la presión es negativa: señal inequívoca de que las soluciones son artificios de las CPC, como se discutió en el capítulo 8. La presión negativa debe interpretarse como una tensión que ejercen las réplicas de la celda principal sobre ésta. Visto así, resulta evidente que dichas estructuras sólo pueden existir bajo CPC. Para apantallamientos tan cortos, a pesar de haber competencia entre interacciones, éstas son mayormente atractivas y las CPC siguen jugando un rol central en dar forma a las soluciones. Mientras la presión sea negativa, es esperable que el escenario sea indistinguible del observado sin interacción de Coulomb y exista solo

una estructura por celda. Para $\lambda > 10$ fm, en cambio, la presión se vuelve positiva y la interacción de Coulomb empieza a cumplir el rol que se le atribuye: La estructura única por celda que se forma para $\lambda < 10$ fm se va descomponiendo y desarrolla superficies internas. Las estructuras halladas para esos valores de λ presentan in-homogeneidades con escalas menores a las de la celda que sólo pueden surgir de la competencia entre interacciones, como se mostró en la sección 6.2 para $\lambda = 10$ fm.

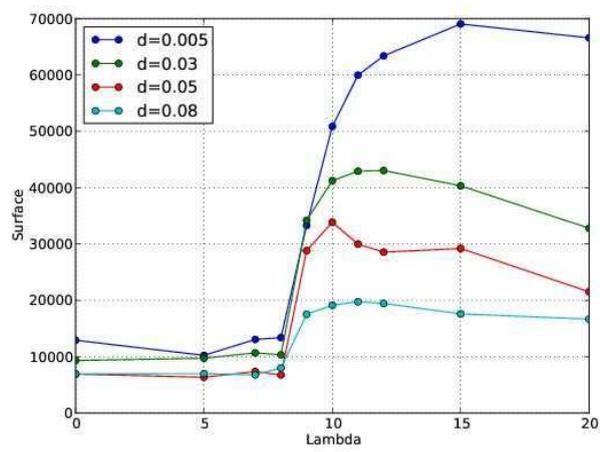
9.3. Pasta para todos

Para estudiar más cuantitativamente el cambio que ocurre cerca de $\lambda \sim 10$ fm analizamos la morfología de las estructuras, caracterizada con las herramientas descritas en la sección 7. En la figura 9.2 se muestra la dependencia de las funcionales de Minkowski con λ para los distintos valores de densidad y puede verse que fluctúan abruptamente cerca de $\lambda \sim 10$ fm.

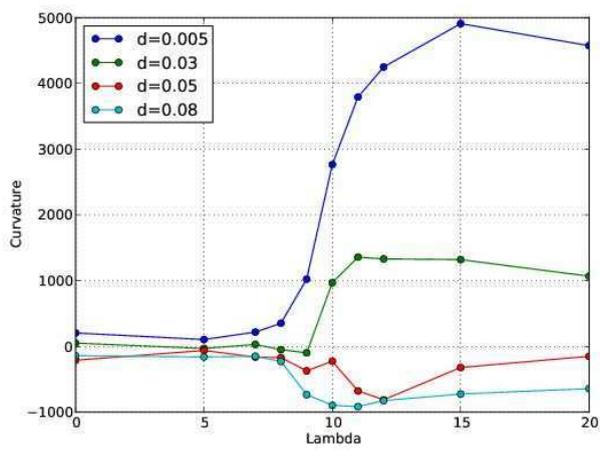
Tanto la superficie como la curvatura de las estructuras aumentan abruptamente. En cuanto a la característica de Euler recordemos que, según la clasificación introducida en la sección 7.4, esperamos $\chi = 0$ para estructuras tipo spaghetti o lasagna. En el caso de los gnocchi en cambio, dada la aditividad de χ esperamos $\chi = 2 \cdot N_{gn}$, con N_{gn} el número de gnocchi en la configuración. Esos valores se alcanzan para $\lambda \gtrsim 20$ fm: $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$ son gnocchi, a $\rho = 0,03 \text{ fm}^{-3}$ se observan spaghetti, para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ hay lasagna y en $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$ hay anti-spaghetti (túneles). En la figura 9.3 mostramos la metamorfosis de las estructuras a esas densidades cuando se pasa de $\lambda = 0$ a $\lambda = 20$ fm.

Con varias estructuras regulares por celda, a $\lambda \sim 20$ fm el escenario parece estabilizarse. Pero para explorar esa conjetura más cuantitativamente, estudiamos con más detalle las configuraciones que se obtienen a $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$ y con λ hasta 50 fm. Analizamos únicamente esta densidad porque con las mismas $A = 5000$ partículas la celda es suficientemente grande. En la figura 9.4 se muestran configuraciones para $\lambda = 0, 10$ y 20 fm. Al pasar de $\lambda = 0$ a $\lambda = 10$ fm el sistema se descompone en varios fragmentos pero de geometrías variadas. No es hasta alcanzar $\lambda = 10$ fm que los fragmentos son merecedores de la denominación “gnocchi”. Esos gnocchi se ordenan en una red cristalina *BCC*.

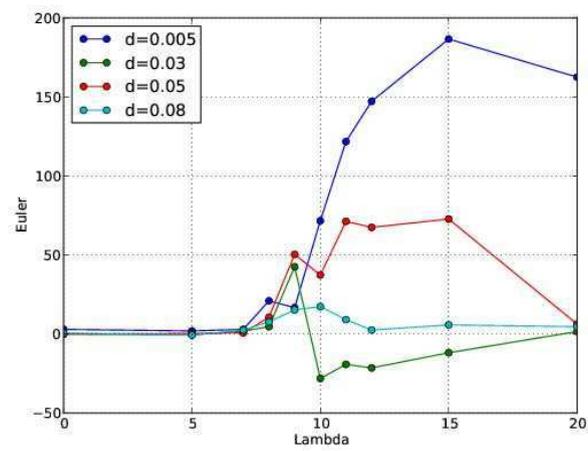
Por último, estudiamos la evolución con λ de la distribución de fragmentos. En particular, graficamos en la figura 9.5 la masa promedio de los fragmentos obtenidos para $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$. Considerando la desviación estándar de las masas, los fragmentos son prácticamente idénticos para $\lambda > 20$ fm.



Superficie



Curvatura



Característica Euler

FIGURA 9.2: Dependencia de las funcionales de Minkowski con λ

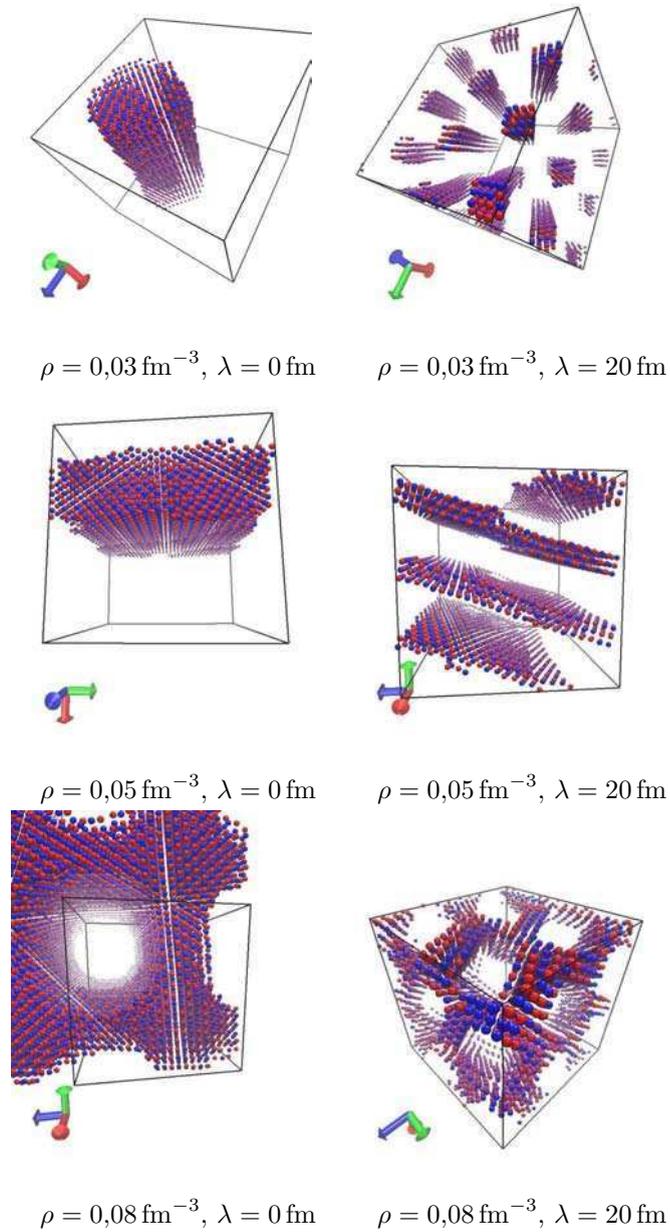
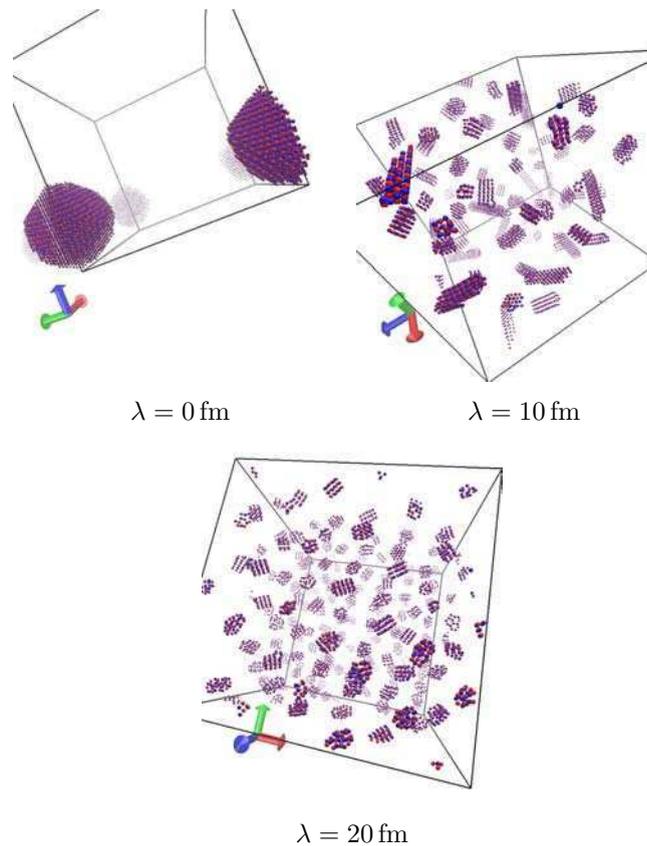
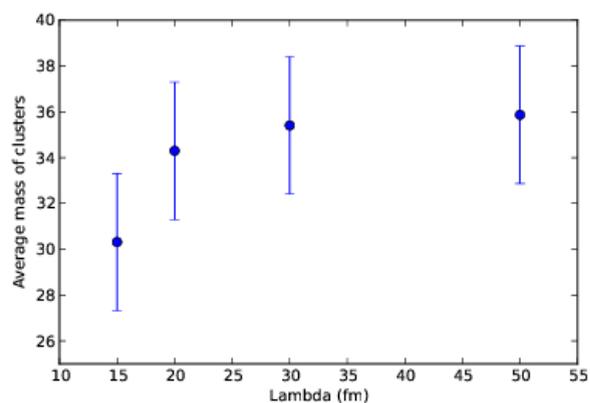


FIGURA 9.3: Comparación entre las pseudo-pastas (sin Coulomb) y las pastas verdaderas (con $\lambda = 20 \text{ fm}$) para tres densidades de interés.

9.4. Conclusiones

Al incrementar arbitrariamente la longitud de apantallamiento λ desde 0 hasta 20 fm, la morfología de las estructuras no homogéneas que se observan a densidades de subsaturación cambian cualitativa y cuantitativamente. En particular, hay un valor “crítico” de λ por debajo del cual la situación es la misma que se observa sin ningún tipo de interacción de Coulomb estudiada en la sección 8.


 FIGURA 9.4: Estructuras obtenidas variando λ para $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$

 FIGURA 9.5: Masa promedio de los fragmentos a $\rho = 0,004 \text{ fm}^{-3}$ como función de λ

Existe una región de transición en la que la competencia entre las interacciones nuclear y Coulombiana comienza a manifestarse produciendo in-homogeneidades en escalas menores que la de la celda de la simulación, pero estas no se estabilizan hasta $\lambda \sim 20 \text{ fm}$. Si bien la longitud correcta dentro de la aproximación de Thomas-Fermi es de $\lambda \sim 100 \text{ fm}$, para valores superiores a $\lambda \sim 20 \text{ fm}$ es esperable que se produzcan cambios cuantitativos pero no cualitativos en las propiedades de las estructuras.

Todo indica que la elección de λ no puede ser arbitraria y debe superar ese valor “crítico” para que el efecto de la interacción de Coulomb sea apreciable y cualitativamente correcto. El valor tradicional de $\lambda = 10$ fm está muy cerca del valor crítico para este modelo de interacción nuclear, y por lo tanto no es satisfactorio. Esa es la causa de que hayamos tenido que recurrir a la heurística que describimos en la sección 6.2 (¡y de que ésta funcionara!) para obtener “pastas” bien definidas.

Capítulo 10

Conclusiones y perspectivas

En esta tesis hemos presentado los resultados de estudiar la dinámica y termodinámica de sistemas nucleares finitos (colisiones de iones pesados) y sistemas nucleares astrofísicos (corteza estrellas de neutrones). El estudio fue llevado a cabo mediante técnicas de dinámica molecular con un modelo clásico para la interacción nucleón-nucleón. Centramos nuestra atención en la búsqueda y validación de observables que podrían ser de utilidad en la determinación del término de simetría de la ecuación de estado de la materia nuclear, con miras a colaborar con el proyecto FRIB[78].

En el ámbito de las colisiones de iones pesados, continuamos una serie de estudios iniciados en este grupo, relacionados con la transición de fase que ocurriría en materia nuclear. Estudiamos el efecto de la geometría de la reacción y la energía disponible (canal de entrada) sobre la distribución del fragmento más pesado producido en el régimen de multifragmentación. Con ese fin, simulamos colisiones con parámetro de impacto variable a energía de haz fija y colisiones centrales a energía variable (capítulo 3). Y Luego procesamos los resultados con un tratamiento estadístico diseñado para exhibir propiedades topológicas de la densidad de estados del sistema (apéndice A). Ese tratamiento estadístico produce distribuciones bimodales y con máximos locales en entornos de las mismas masas para todos los escenarios estudiados. Esa distribución bimodal indica que existen predominantemente dos modos de decaimiento cualitativamente distintos, más allá de los detalles dinámicos de la reacción y es consistente con la existencia de una transición de fase de primer orden subyacente en materia nuclear. De las simulaciones también surge que la transición entre esos dos modos predominantes de decaimiento, asociados con fases tipo-líquido y tipo-vapor de NM, ocurre en entornos de la misma energía de excitación para los dos escenario de excitación e independientemente de la energía total disponible. Esta coincidencia permite ser optimista con respecto al prospecto de medir el calor latente de la transición como se ha propuesto en[68]. Para contribuir

a ese programa, sería interesante intentar extraer ese calor latente de simulaciones de sistemas de Lennard-Jones, cuyo comportamiento en el límite termodinámico es conocido. Para identificar posibles sesgos relacionados con la dinámica y el tamaño finito de los sistemas, esas simulaciones deberían ser realizadas con sistemas de varios tamaños y en distintas condiciones: confinados, o en expansión; Y en este último caso, excitados ya sea por medio de colisiones o isotrópicamente.

Por otro lado, el estudio de la evolución temporal de las correlaciones “microscópicas” entre nucleones permitió mostrar, una vez más, que las señales asintóticas están determinadas en etapas muy tempranas de la reacción, antes del “freeze-out” y, por lo tanto, en condiciones incompatibles con la hipótesis de equilibrio requerida por los modelos estadísticos de fragmentación. Esta aparente paradoja (el éxito de los modelos estadísticos en la descripción de muchos observables experimentales, aún cuando no se cumple una de sus hipótesis más fundamentales), exige una re-interpretación de dichos modelos. Para esclarecer el panorama, un estudio detallado de las propiedades estadísticas de los ensambles de estados generados en las simulaciones es necesario. Conjeturando, es posible que incluso si evento a evento no hay una noción clara de equilibrio, las propiedades estadísticas de esos ensambles sean similares a las de los ensambles de la termodinámica usual, o que sea posible describirlos mediante ensambles gaussianos. En ese caso, una interpretación en términos de teoría de la información o de un principio de máxima entropía sería más apropiada.

En el contexto de la simulación de colisiones de iones pesados, tal vez el resultado más relevante de esta tesis sea el relacionado con Isoscaling (capítulo 4). Primero determinamos que las energías de los núcleos producidos con cada una de las dos parametrizaciones del modelo puede ser ajustado con una fórmula en el espíritu de la fórmula semi-empírica de masas. Pero el término de simetría correspondiente a cada parametrización es distinto. Luego, estudiando isoscaling en sistemas excitados isotrópicamente con los dos modelos mostramos que, si bien a energías de excitación bajas los parámetros de isoscaling producidos por cada modelo son distintos, a energías altas se vuelven indistinguibles. Esto muestra que, sin más, la utilidad del isoscaling para extraer información sobre la EOS nuclear es limitada justamente en la región de interés. Por otro lado, el límite que toma el parámetro α de isoscaling es muy similar al correspondiente al isoscaling de origen probabilístico, asociado con una entropía de simetría. Este hecho no puede ser ignorado si se pretende extraer información sobre el término de simetría de la EOS nuclear a partir del isoscaling. En este sentido, sería iluminador explorar la posibilidad de descontar la contribución entrópica al valor de α en las simulaciones.

A partir de la década pasada aumentó el interés por estudiar sistemas nucleares altamente asimétricos en isospín. Aparte del desarrollo de facilidades para estudiar isotopos

raros[78], de la mano de avances tecnológicos en astronomía de precisión[172] el estudio de las Estrellas de Neutrones pasó a ocupar un lugar central en la escena. En ese contexto, la extensión del modelo CMD para el estudio de objetos astrofísicos resulta natural. Buena parte del trabajo realizado para esta tesis consistió en identificar y resolver problemas técnicos asociados con esa extensión del modelo CMD (puntualmente, a lograr un tratamiento de la interacción de Coulomb adecuado para estos sistemas). Para ello, concentramos nuestro trabajo en sistemas simétricos respecto del número de protones y neutrones ($x = 0,5$). Sin embargo, el trabajo aquí desarrollado sienta las bases para comenzar a estudiar sistemáticamente el rol de la asimetría de isospín en estos sistemas macroscópicos, con un modelo que también describe adecuadamente reacciones con iones pesados. Además, al contar con dos parametrizaciones del potencial (dos EOS), se podrá estudiar como se ven afectados distintos observables por diferencias en el término de simetría.

En un principio exploramos los dos tratamientos habituales de la interacción de Coulomb en simulaciones de NSM (apantallamiento *símil* Thomas-Fermi y sumas de Ewald) pero con éxito parcial, por motivos que entendimos más tarde. En el caso de las sumas de Ewald los parámetros seleccionados no eran adecuados. En el otro caso, la longitud de apantallamiento resultó ser demasiado pequeña para este modelo de interacción (capítulo 9). Para sortear este obstáculo, provisoriamente implementamos un método heurístico (capítulo 6) basado en utilizar un potencial apantallado con una longitud de apantallamiento exageradamente grande y truncado artificialmente. De esta manera logramos que la extensión del modelo CMD a sistemas bajo condiciones periódicas de contorno produzca las “pastas nucleares” a densidades y temperaturas completamente consistentes con las predichas por otros modelos.

A partir de esta solución provisoria al problema de Coulomb, desarrollamos y calibramos un extenso conjunto de herramientas que permiten una caracterización dinámica, estructural y topológica de las estructuras emergentes de las simulaciones (capítulo 7). En [152], mostramos que la combinación de esas herramientas con algoritmos de reconocimiento de fragmentos adecuados, es suficiente para lograr una caracterización robusta de las estructuras halladas a temperaturas, densidades y fracción de protones de interés para el estudio de la corteza de las estrellas de neutrones. En el mismo trabajo, probamos que es necesario extender el menú tradicional de pastas nucleares, al mostrar y caracterizar una estructura estable distinta de los gnocchi, spaghetti y lasagnas tradicionales: el Jungle-gym. La relevancia de estos hallazgos y el interés de la comunidad nuclear por el trabajo desarrollado en esta tesis se ve avalada por selección de nuestro artículo “Topological characterization of neutron star crusts” [152] como Editors’ Suggestion. El mismo artículo fue merecedor de una Sinopsis por el Dr. Joseph Kapusta[173] publicada

en “Physics”, revista de la American Physical Society dedicada a destacar artículos por su “importancia y/o interés intrínseco” (sic.).

En otra línea, como parte del estudio del problema con Coulomb (capítulo 8), realizamos simulaciones sin incluir esa interacción. En ese contexto hallamos uno de los resultados más inesperados de esta tesis: La existencia de estructuras in-homogéneas, muy similares a las pastas nucleares, en simulaciones de materia nuclear ideal (sin la interacción de Coulomb), e incluso en sistemas de Lennard-Jones. A diferencia de la pastas “verdaderas” (con Coulomb), observamos que en esos sistemas, se obtiene una única estructura por celda, independientemente del tamaño; la única escala característica de longitud está dada por la celda de la simulación. Rastreamos el origen de esas estructuras a efectos de tamaño finito característicos de las condiciones periódicas de contorno. Sorprendentemente, esos efectos no están descritos en la literatura. Solo recientemente habían sido observados por otros investigadores y en otro contexto.

Puntualmente, mostramos que simulaciones bajo CPC de cualquier sistema de partículas que interactúa con potenciales de rango finito, atractivos a corto rango (y repulsivos a muy corto rango), producirán estructuras in-homogéneas a densidades de sub-saturación y temperaturas sub-críticas, es decir, en la región de coexistencia líquido-vapor. Esto se debe a que para esa clase de sistemas la configuración de mínima energía (libre) corresponde a una de mínima superficie para la fase líquida. Y bajo CPC, la fase líquida puede disminuir superficie “pegándose” con sus réplicas en celdas vecinas.

En base a esos argumentos, hallando analíticamente la configuración de mínima superficie bajo CPC mostramos que la estructura que adoptará el sistema a $T = 0$ puede ser predicha analíticamente como función de la fracción de volumen ocupada por las partículas y de la geometría de la celda. Las predicciones fueron confirmadas realizando simulaciones en celdas de distintas geometrías. Y la artificialidad de las estructuras fue confirmada elocuentemente mostrando que, a ciertas densidades numéricas, la solución en cada celda es distinta (capítulo 8). La artificialidad de las estructuras se evidencia también en el hecho de que la presión de esas configuraciones, calculada a partir del teorema del virial, es negativa: la celda principal se encuentra bajo tensión, ejercida por sus propias réplicas. Por lo tanto esas configuraciones sólo son estables debido a las CPC. Cambiando CPC por paredes reflectantes, mostramos que las soluciones son completamente diferentes (apéndice E).

A la luz de esto, concluimos que la interpretación usual de que los “efectos de tamaño finito” se vuelven menos importantes en sistemas muy grandes, no es correcta en general. Esto implica que, más allá de limitaciones computacionales obvias, es intrínsecamente imposible siquiera aproximarse al límite termodinámico en simulaciones a esas densidades y temperaturas, para sistemas de tipo Lennard-Jones.

Cuando se incluye la interacción de Coulomb, en cambio, de la competencia entre las distintas interacciones emerge una escala característica físicamente relevante, relacionada con el máximo tamaño que puede tener una gota aislada y que es la responsable de que pueda existir más de una estructura por celda. Habiendo comprendido esto, nos abocamos a estudiar en detalle el efecto de la longitud de apantallamiento en la interacción de Coulomb sobre las propiedades morfológicas de las soluciones. Determinamos que el valor usual de $\lambda = 10$ fm es demasiado pequeño para este modelo de interacción nuclear. Demasiado pequeño en el sentido de que para ese valor la interacción de Coulomb no es lo suficientemente fuerte como para que de la competencia con la nuclear surja una escala bien definida. De hecho, la presión (virial) de algunas configuraciones obtenidas para esa longitud de apantallamiento sigue siendo negativa (capítulo 9) y, por lo tanto, son estables únicamente debido a CPC. En base a esos estudios determinamos que un valor de $\lambda = 20$ fm es suficiente para producir toda la fenomenología conocida de las pastas nucleares con este modelo, en sistemas de tamaños manejables gracias a la tecnología CUDA, de la que ahora disponemos (ver apéndice D).

Queda pendiente una comparación detallada entre los resultados obtenidos con esta versión de la interacción de Coulomb y las sumas de Ewald. Y eso tanto en simulaciones como a nivel teórico, puesto que no hay consenso en la comunidad acerca de cuál es el enfoque correcto para tener en cuenta adecuadamente la física de los electrones.

Por último, todo el arsenal de herramientas está a puesto punto para comenzar a estudiar sistemáticamente lo que era el objetivo inicial: la determinación de observables que puedan utilizarse para estudiar la EOS nuclear, con énfasis en el término de simetría. Para ello será necesario construir un mapa detallado de configuraciones estables en el espacio de las variables (ρ, T, x) para las dos parametrizaciones del potencial y buscar diferencias potencialmente detectables. Por ejemplo, estudiar un corte transversal de la corteza, determinar su composición (qué fracción de la masa corresponde a cada tipo de pasta) y evaluar si existen diferencias significativas en las propiedades de scattering de neutrinos de las cortezas producidas por cada parametrización. Las técnicas de dinámica molecular utilizadas en esta tesis pueden ser insuficientes o ineficientes para desarrollar todas esas tareas. Conscientes de ello, comenzamos a explorar algoritmos modernos, diseñados especialmente para estudiar transiciones de fase en *bulk*. Entre ellas, Replica Exchange Molecular Dynamics, Umbrella Sampling y variantes del método de re-pesado de histogramas descrito en el apéndice A.

Los resultados obtenidos durante el desarrollo de esta tesis están publicados o por publicarse en

- C.O. Dorso and P.A. Giménez Molinelli, Proceedings of the IWM2009, pag. 141, *Colissions, Explosions, Bimodality and Time* (2010)
- C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli and J.A. López, J. Phys. G., Vol.38, pag. 115101, *Isoscaling and the nuclear EOS* (2011)
- C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli and J.A. López, Rev. Mex. Fís. Vol.57, pag. 14-17, *Searching for the origin of Isoscaling: Confinement and expansion* (2011)
- C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli and J.A. López, *From Nuclei to Nuclear Pasta*, capítulo en *Neutron Star Crust*, Nova Publishers - New York, (2011) (ISBN 978-1-162081-902-9)
- C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli and J.A. López, Phys. Rev. C, Vol. 86, pag. 055805 (2012)¹
- P.A. Giménez Molinelli, J.I. Nichols, J.A. López and C.O. Dorso, Nucl. Phys. A, Vol. 923, pag. 31-50, *Simulations of cold nuclear matter at sub-saturation densities* (2014)
- P.N. Alcain, P.A. Giménez Molinelli, J.I. Nichols and C.O. Dorso, arXiv:1311.5923 [nucl-th], *Effect of Coulomb Screening Length on Nuclear Pasta Simulations* (2014). Aceptado para publicarse en Phys. Rev. C.
- P.A. Giménez Molinelli and C.O. Dorso, arXiv:1403.5777 [nucl-th], *Simulations of cold nuclear matter at sub-saturation densities* (2014), enviado a Nucl. Phys. A.

Y algunos fueron presentados en

- International Workshop on Multifragmentation and related topics 2009, Catania (Italia), 4-7 Noviembre de 2009, *Bimodality, time dependence and event mixing*
- TREFEMAC 2010, Poster: *Isoscaling y Entropía de Simetría*, Mar del Plata, Argentina, 2010.
- 95a -Reunión Nacional de la AFA, Poster: *Isoscaling y Entropía de Simetría*, Mar del Plata, Mendoza, Argentina, 2010.

¹Este artículo fue doblemente distinguido como Editor's Suggestion y con una Sinopsis en "APS-Physics: Highlighting Exceptional Research" por parte de J. Kapusta

-
- TREFEMAC 2011, Poster: *Fideos en las estrellas (de neutrones)*, Merlo, San Luis, Argentina,
 - 2a Reunión Conjunta AFA-SUF, Charla: *Multifragmentación y Estrellas de neutrones: Una perspectiva dinámica clásica sobre transiciones de fase en Materia Nuclear.*, Montevideo, Uruguay, 2011.
 - Workshop on Structure and Dynamics of Glassy, Supercooled and Nanoconfined Fluids, Poster: *Nuclear Matter at low temperature and density: A case study of frustration in a two component fluid.*, Buenos Aires, Argentina, 2012.

Apéndice A

Re-Pesado de Histogramas

En este apéndice se reproducen las ideas principales de [73]. Para un sistema en el ensamble canónico en una transición de fase de tipo líquido-vapor, la distribución de probabilidades de los estados microscópicos de un sistema a la temperatura de transición es bimodal tanto en el volumen como en la energía [73]. Para sistemas finitos, el fragmento más grande está correlacionado tanto con el volumen como con la energía y por lo tanto sirve como un parámetro de orden equivalente. En el ensamble micro-canónico, las dos fases no son accesibles en el mismo ensamble de eventos y la bimodalidad se pierde. Lo mismo es cierto para cualquier ensamble que limite fuertemente las fluctuaciones de energía. Este comportamiento es una consecuencia de la in-equivalencia entre ensambles lejos del límite termodinámico.

La presencia de un vínculo que imponga una restricción sobre el parámetro de orden puede modificar observables en una transición, como ha sido observado en [174]. El ejemplo más claro de tal vínculo ocurre en el ensamble micro-canónico. Allí, la transición de fase puede ser reconocida unívocamente estudiando la curvatura de la densidad de estados [13]. De hecho, a partir de la definición del ensamble canónico

$$p_\beta = W(E) \exp(-\beta E) Z_\beta^{-1} \quad (\text{A.1})$$

puede verse que la bimodalidad en éste ensamble es exactamente equivalente a una convexidad anómala en la densidad de estados micro-canónica $W(E)$ (y por consiguiente, en la entropía micro-canónica $S = \log W$).

Si se considera un segundo observable Z Si tanto E como Z son parámetros de orden, y la transición es de primer orden, la distribución de probabilidad $p(E, Z)$ será bimodal tanto en E como en Z dentro del ensamble en el cual estos observables están fijados por sus multiplicadores de Lagrange β y λ :

$$p_\beta(E, Z) = W(E, Z) \exp(-\beta E - \lambda Z) Z_{\beta, \lambda}^{-1} \quad (\text{A.2})$$

y cualquier ley de conservación adicional está contenida en la densidad de estados W . Por ejemplo, si Z representa el tamaño del fragmento más grande y el tamaño total del sistema es Z_{tot} , es

$$W(E, Z) = W_{Z_{tot}}(E, Z) = \sum_{(n)} \delta(E - E^{(n)}) \delta(Z - Z^{(n)}) \delta(Z_{tot} - Z_{tot}^{(n)}) \quad (\text{A.3})$$

donde la suma se extiende sobre los micro-estados del sistema. La búsqueda de bimodalidades en este ensamble generalizado, sólo puede lograrse estudiando la matriz de curvatura de la entropía en el espacio bidimensional de observables

$$C = \begin{pmatrix} \partial^2 S / \partial E^2 & \partial^2 S / \partial E \partial Z \\ \partial^2 S / \partial E \partial Z & \partial^2 S / \partial Z^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Si el parámetro de orden es unidimensional, esta matriz tendrá un único auto-valor positivo y la combinación lineal de los de los observables dada por el auto-vector asociado será el “mejor” parámetro de orden. Será el mejor en el sentido de que mostrará mejor la separación entre las dos fases en el espacio bidimensional.

En el caso físico de la multifragmentación nuclear estudiada experimentalmente mediante colisiones, la distribución de la energía depositada depende fuertemente de la dinámica del canal de entrada y del criterio de selección de eventos. Por lo tanto, el ensamble que describe una serie de datos de multifragmentación no es canónico ni micro-canónico.

Si la correlación entre E y Z no es cero, como es esperable, $W(E, Z) \neq W_E(E)W_Z(Z)$ y la distribución de energías afectará también la distribución de Z . Por lo tanto, la concavidad en la distribución de Z no estará vinculada unívocamente a la convexidad de la entropía.

Esto significa, a su vez, que la presencia de una señal de bimodalidad en experimentos de colisiones de iones pesados puede depender de las condiciones de selección. Sin embargo, a pesar de no poder controlar la distribución experimental de energías, puede ser determinada *a posteriori*. Esto permite descontar el sesgo producido por el canal de entrada o la selección de eventos.

Para recuperar la información de la concavidad de la entropía a partir de las distribuciones medidas es necesario deshacerse de la dependencia con la distribución experimental de energías $p_{exp}(E)$. Con ese objetivo, podemos re-pesar la distribución total de (E, Z)

de tal manera que la distribución total de energía es constante entre E_{min} y E_{max} , con E_{min} y E_{max} lo suficientemente separados como para incluir las dos fases. Este procedimiento corresponde a introducir un peso $\omega(E)$ a cada rango de E en los histogramas medidos:

$$\omega(E) = \left(\int_0^{Z_{max}} dZ p_{exp}(E, Z) \right)^{-1} \quad (\text{A.5})$$

y genera una nueva distribución que es una medida directa de la densidad de estados:

$$p_\omega(E, Z) = \frac{p_{\beta_t}(E, Z)}{p_{\beta_t}(E)} = \frac{W(E, Z)}{W(E)} \quad (\text{A.6})$$

Apéndice B

Termostato de Andersen

Para simular sistemas a T constante, Andersen[175] propuso acoplar el sistema con un baño térmico que impone la temperatura deseada. El acoplamiento está representado por una fuerza estocástica que actúa ocasionalmente sobre partículas seleccionadas al azar. Estas fuerzas estocásticas pueden pensarse como colisiones con el baño térmico. Entre dos colisiones, el sistema evoluciona a energía constante de acuerdo con las leyes de Newton. La fuerza de la interacción con el baño térmico está codificada en la frecuencia de colisiones ν .

El algoritmo que utilizamos para integrar las ecuaciones de movimiento es el conocido como Verlet en Velocidades, y se implementa en dos etapas. La primera, etapa es una actualización de las posiciones y una actualización parcial de las velocidades:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 \quad (\text{B.1})$$

$$v' = v(t) + \frac{f(t)}{2m}\Delta t \quad (\text{B.2})$$

$$(\text{B.3})$$

y sólo involucra cantidades calculadas en el paso previo. La segunda etapa involucra una actualización de las fuerzas, calculadas a partir de las nuevas coordenadas, y la actualización definitiva de las velocidades:

$$v(t + \Delta t) = v' + \frac{f(t + \Delta t)}{2m}\Delta t \quad (\text{B.4})$$

El termostato de Andersen se implementa modificando la segunda etapa de Verlet. Las colisiones con el baño térmico se modelan seleccionando partículas al azar con probabilidad uniforme ν y asignándoles velocidades sorteadas de una distribución de Maxwell-Boltzmann a la temperatura deseada, en lugar de la que les correspondería por Verlet.

La combinación de una dinámica Newtoniana con colisiones estocásticas convierte la simulación de dinámica molecular en un proceso de Markov y puede probarse [105] que el algoritmo produce una distribución canónica.

Apéndice C

Condiciones Periódicas de Contorno en celdas no cúbicas

En este apéndice se discute la implementación computacional de las CPC en simulaciones de dinámica molecular con celdas de distintas geometrías. Puntualmente se discuten las operaciones de re-ubicación de partículas y la identificación de la primera imagen para la correcta computación de las interacciones.

Cubo

La operación de re-ubicación (o “wrapping”) consiste en trasladar a la celda principal partículas que por su dinámica saldrían de ella. Supongamos una celda cúbica de lado L con el origen de coordenadas en uno de los vértices de la celda. En este caso, la operación de “wrapping” corresponde a modificar ligeramente la actualización de las coordenadas en el algoritmo de integración. En FORTRAN90, si \mathbf{x} es el vector de coordenadas de una partícula, esto se logra agregando una línea de código:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} - \text{INT}(\mathbf{x}/L)$$

La identificación de la primera imagen puede implementarse incluyendo la periodicidad del espacio en la definición de distancia. Operacionalmente, esto se logra utilizando aritmética modular. En la celda del ejemplo anterior, si \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 son las coordenadas de dos partículas la operación

$$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 = (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) - L * \text{INT}((2 * (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)) / L)$$

computa correctamente la diferencia entre las coordenadas de las imágenes más próximas de las partículas 1 y 2. Coloquialmente esta operación se basa en notar que si la diferencia entre las coordenadas de las partículas 1 y 2 es mayor que la mitad del lado de la celda, existe una imagen de 2 en una celda vecina que está más cerca de 1 que la partícula 2 de la celda principal.

Otras geometrías

Ya se observó que las celdas de geometrías adecuadas para imponer CPC son celdas de Wigner-Seitz de redes de Bravais. Cuando se utiliza una celda cúbica, las distintas réplicas de la celda principal se ordenan en una red cúbica simple. En ese caso, los vectores de la red de Bravais que identifican las distintas celdas son ortogonales y eso facilita enormemente las operaciones de re-ubicación de partículas y la identificación de la primera imagen.

Discutimos a continuación la re-ubicación de partículas en las celdas Prisma Hexagonal y Octaedro Truncado.

Prisma Hexagonal

Por conveniencia se eligen los vectores unitarios $v_1 = (1, 0, 0)$, $v_2 = (1/2, \sqrt{3}/2, 0)$, $v_3 = (0, 0, 1)$ y se ubica el origen de coordenadas en el centro de la celda para explotar sus simetrías. Elegimos las dimensiones del prisma de manera que la distancia entre cualquier par de caras paralelas sea L . Así las operaciones necesarias para la re-ubicación de partículas son (en FORTRAN90):

```

z = z - L*INT(2*z/L)
x = x - L*INT(2*x/L)
IF ( ABS(x) + SQRT(3.0)*ABS(y) > L ) THEN
  x = x - SIGN(L/2,x)
  y = y - SIGN(SQRT(3.0)*L/2,y)
END IF

```

Octaedro Truncado

El octaedro truncado es la celda de Wigner-Seitz de la red de Bravais BCC . Los vectores unitarios que definen la red subyacente pueden elegirse como $v_1 = (1, 0, 0)$,

$v_2 = (1, 1, 1)/\sqrt{3}, 0$, $v_3 = (0, 0, 1)$. Nuevamente, definimos L como la distancia entre dos caras paralelas opuestas. Así, el algoritmo para la re-ubicación de partículas es:

```

x = x - L*INT(2*x/L)
y = y - L*INT(2*y/L)
z = z - L*INT(2*z/L)
IF (ABS(x) + ABS(y) + ABS(z) > 3*L/4 ) THEN
  x = x - SIGN(L/2,x)
  y = y - SIGN(L/2,y)
  z = z - SIGN(L/2,z)
END IF

```

Primera imagen en celdas no cúbicas

Para identificar correctamente las primeras imágenes en celdas de otras geometrías, es conveniente escribir las coordenadas de las partículas en la base de vectores de la red de Bravais subyacente:

$$\vec{r} = \mathbf{H} \cdot \vec{s}$$

donde \mathbf{H} es la matriz de cambio de base, cuyas columnas son los vectores que definen la red de Bravais subyacente, y el vector \vec{s} son las coordenadas de las partículas en la base de la red. Por construcción, las componentes de \vec{s} son reales entre 0 y 1. Siguiendo a [169], llamaremos r a las coordenadas en el espacio real R y s a las coordenadas en el espacio S . En el espacio S , las coordenadas de una partícula y sus imágenes difieren en cantidades enteras. Las imágenes más cercanas se encuentran, en general, sumando o restando 1 a alguna coordenada en el espacio s . El problema de hallar la imagen más cercana en el espacio S es idéntico al de hallarla en una celda cúbica con $L = 1$ en el espacio R , pero con el origen de coordenadas en el centro de la celda. Con todo esto, identificar la primera imagen en celdas de geometrías arbitrarias se logra en tres pasos. En pseudo-código serían:

```

s1 - s2 =  $\mathbf{H}^{-1}(r1 - r2)$  !Pasar a coordenadas en el espacio S
s1 - s2 = (s1 - s2) - INT((2 * (s1 - s2) - 1)) !Primera imagen en S
r1 - r2 =  $\mathbf{H}(s1 - s2)$  !Volver a espacio R

```

Este procedimiento efectivamente identifica la imagen más cercana en el espacio S , pero esa imagen no es necesariamente la más cercana en el espacio R . Afortunadamente, las excepciones son casos patológicos. Para entender esas excepciones es útil pensar que el proceso de identificación de las primeras imágenes equivale a centrar la celda en la partícula de interés y luego considerar únicamente las imágenes de las otras partículas que se hallan dentro de la celda desplazada. El algoritmo propuesto fallará sólo si una de las otras partículas se halla cerca de alguno de los vértices de la celda desplazada en el espacio R . Esto no supone ninguna limitación si los potenciales involucrados tienen un radio de corte menor que la mitad de menor distancia entre caras opuestas, puesto que el algoritmo identificará correctamente las primeras imágenes de las partículas que efectivamente interactúan. Y dado que para los sistemas que estudiamos esa misma condición estaba impuesta por motivos físicos, es seguro implementarlo.

Apéndice D

Placas Gráficas: CUDA

En los últimos años, impulsadas por el pujante y demandante mercado de los video juegos, las GPU se convirtieron prácticamente en supercomputadoras que albergan hasta varios miles de procesadores en un sola unidad de relativo bajo costo. **CUDA** es una plataforma de computación en paralelo y un modelo de programación propietario de **NVIDIA**, fabricante líder de GPUs para PCs. Desde 2006 **NVIDIA** ofrece un conjunto de herramientas, algunas gratuitas y todas propietarias, para facilitar el desarrollo de software que se ejecute en la GPU y sacar provecho de su paralelismo masivo. El modelo de ejecución en paralelo de **CUDA** se engloba dentro del denominado **SIMD** (Single Instruction - Multiple Data) y con memoria compartida. Es decir que todos los procesadores ejecutan la misma instrucción pero sobre un conjunto de datos distinto, y además, todos los procesadores tienen acceso a los datos que procesan los demás. Estas características lo hacen ideal para cálculos de dinámica molecular. El compilador de **CUDA Fortran** es desarrollado por un tercero y no es gratuito por lo que desarrollamos nuestros códigos en **C**.

La parte más costosa de un código de dinámica molecular es la evaluación de las fuerzas que actúan sobre cada partícula. En su versión serial más rudimentaria, esto involucra dos bucles anidados que recorren todas las partículas y tendría sería similar a

```
for (i=0; i < NPART; i++)
{
  for (j=0; j < NPART; j++)
  {
    ... // Calcular distancias
    ... // Si estan cerca, Computar fuerzas
    ... // etc.
```

```
}  
}
```

donde las operaciones que se realizan para cada par de partículas i, j son las mismas. Ahora, contando con una GPU que dispone de 384 procesadores es posible evaluar, en principio, hasta 384 pares de partículas en un solo ciclo.

Si bien los detalles de buena parte de la arquitectura de las GPU son privados de NVIDIA, el entorno de programación se basa en ciertas capas de abstracción que tienen cierto correlato con una estratificación del hardware subyacente y permiten tener un considerable control sobre la ejecución del código. La ejecución se organiza en “hilos”, que se agrupan en “bloques”, que se organizan a su vez en “grillas”. Todos los hilos ejecutan el mismo código (pero sobre datos diferentes) y tiene un identificador único que puede (y debe) utilizarse para identificar los datos sobre los que debe operar. A nivel del código, CUDA funciona como una extensión al ANSI de C que incluye funciones para asignar memoria en la GPU, mover datos entre CPU y GPU, pero es básicamente C.

En el contexto de un código de dinámica molecular, puede asignarse un hilo a cada partícula y eliminar casi completamente el bucle exterior. El mismo código del ejemplo en C CUDA se vería

```
// Identificador del hilo (un entero no negativo)  
tid = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;  
// Recorro las otras partículas  
for (j=0; j < NPART; j++)  
{  
    if (j != tid)  
    {  
        ... // Calcular distancia entre la partícula "tid" y la "j"  
        ... // Si están cerca, Computar fuerzas  
        ... // etc.  
    }  
}
```

encerrado entre un par de bloques de código que se encargan de la comunicación entre el CPU y la GPU.

Si hubiera suficientes procesadores, el algoritmo de fuerza bruta en paralelo sería, formalmente, de orden $\mathcal{O}(n)$. Cuando no, se le asigna una partícula a cada hilo y el compilador se encarga automáticamente de distribuir las tareas entre los procesadores disponibles.

En la sección 6.1.1 se discutieron algunas estrategias para optimizar el cómputo de las fuerzas utilizando listas para el número de pares de partículas que se evalúan en el bucle interior del ejemplo. Es posible implementar las mismas estrategias para optimizar el código en `C` `CUDA` con resultados sorprendentes, tratándose de una GPU de gama media que adquirimos por menos de 300 dolares. Vale aclarar que las listas de vecinos sólo fueron implementadas para la evaluación de las fuerzas nucleares, mientras que la interacción de Coulomb fue evaluada por fuerza bruta. Las listas de vecinos son particularmente útiles para potenciales de corto rango y utilizando celdas poco más grandes que el rango del potencial. Utilizando celdas suficientemente grandes, es posible evaluar la interacción de Coulomb apantallada y truncada, pero dado el rango de Coulomb y los tamaños de sistemas que estudiamos, esta combinación es más eficiente.

En la figura D.1 se muestran los tiempos de ejecución por partícula para una evolución de 10000 pasos (correspondientes a 50 fm/c) para sistemas con 1728, 4096 y 13824 partículas, interactuando según el potencial Medium y Coulomb apantallado a 10 fm.

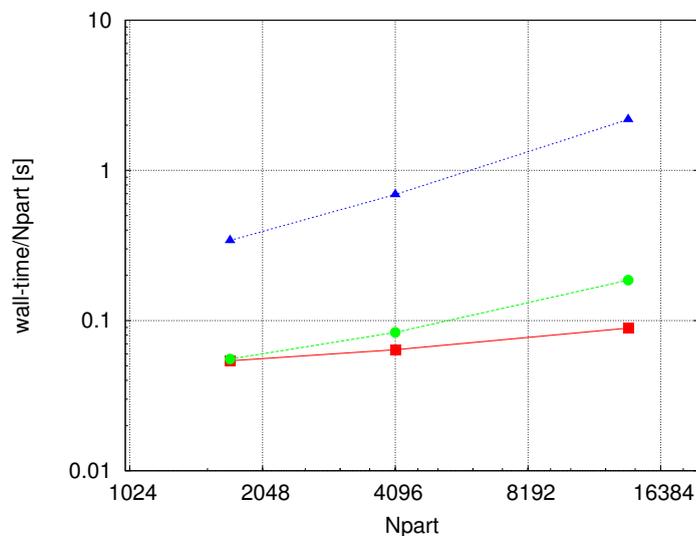


FIGURA D.1: Tiempo de ejecución (Wall-time) por partícula para una evolución de 10000 con Coulomb en tres códigos: Serial en CPU con listas de vecinos (triángulos), paralelo en GPU por “fuerza bruta” (círculos) y paralelo en GPU con listas de vecinos (cuadrados).

Notablemente, el código en `CUDA` es un orden de magnitud más rápido que la versión serial para sistemas de ~ 4000 partículas o más.

Para simulaciones sin interacción de Coulomb (figura D.2), el desempeño del códigos por fuerza bruta en `CUDA` es competitivo con el código serial que utiliza listas hasta $N \sim 4000$. Para sistemas más grandes, el algoritmo de listas de vecinos muestra claramente su eficiencia: Es más rápido correr en un único procesador utilizando listas que correr en 384 por fuerza bruta.

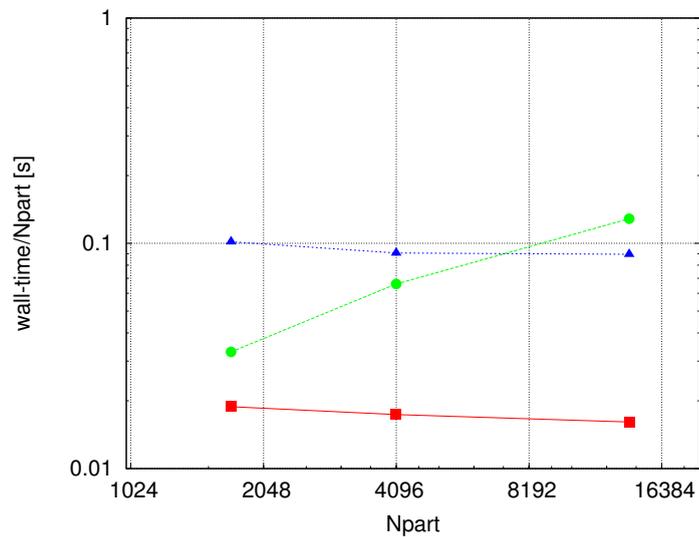


FIGURA D.2: Tiempo de ejecución (Wall-time) por partícula para una evolución de 10000 sin Coulomb en tres códigos: Serial en CPU con listas de vecinos (triángulos), paralelo en GPU por “fuerza bruta” (círculos) y paralelo en GPU con listas de vecinos (cuadrados).

Este notable desempeño del algoritmo de fuerza bruta ejecutado en la GPU fue lo que nos permitió estudiar las CPC no cúbicas de la sección 8.3.4 puesto que en esas geometrías, no se puede implementar el esquema de listas que utilizamos en la versión serial del código.

Apéndice E

Lennard-Jones más Coulomb Apantallado 2D

En cualquier sistema de partículas con interacciones competitivas de distinto rango se espera que existan fases moduladas o in-homogéneas. Pero también hemos observado que las CPC pueden producir configuraciones no homogéneas incluso con potenciales solamente atractivos de corto rango. Por eso decidimos estudiar explícita aunque someramente que rol juegan las condiciones de contorno en la determinación de la escala de las in-homogeneidades cuando hay presentes interacciones competitivas. Para ello simulamos sistemas de partículas interactuando mediante una superposición de un potencial de Lennard-Jones con uno de Coulomb apantallado, para condiciones de contorno tanto periódicas como de paredes reflectantes. Para simplificar el escenario y el análisis, las simulaciones fueron realizadas en $2D$. En este apéndice se muestran y discuten algunos de los resultados obtenidos para distintos valores de la longitud de apantallamiento λ .

E.1. LJ + Coulomb 2D bajo CPC

Cuando se superpone un potencial de Lennard-Jones (atractivo a corto rango) con un potencial de Yukawa (repulsivo de rango dado por la constante λ , en unidades de r_0 , el cero de Lennard-Jones), el potencial resultante tiene el aspecto que se muestra en la figura [E.1](#).

Para valores muy pequeños de λ , la parte repulsiva del potencial no es lo suficientemente fuerte como para competir con la atractiva. En ese caso, la situación es esencialmente la misma que si no hubiera repulsión: La configuración más estable será la que minimice

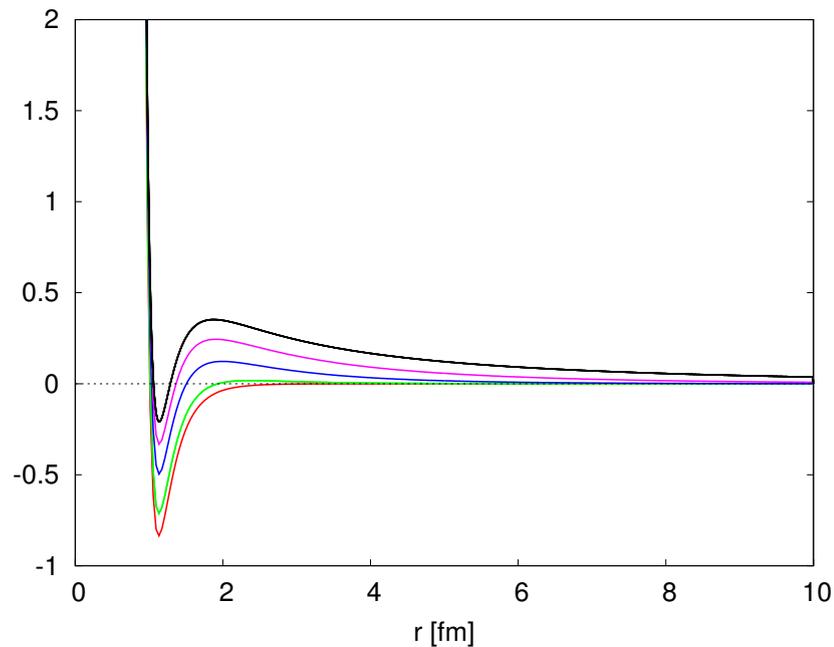


FIGURA E.1: Superposición de Lennard-Jones y Yukawa para varios valores de λ . Las unidades de distancia corresponden al cero de Lennard-Jones

superficie y las condiciones de contorno determinarán las particularidades de las inhomogeneidades.

A medida que se aumenta λ , la competencia entre las interacciones comienza a manifestarse. El potencial compuesto desarrolla una barrera que “frustra” la minimización de superficie. Debido a esa frustración, el sistema adopta configuraciones con superficies internas y fluctuaciones de densidad de un rango menor al de la celda. La barrera de potencial introduce una escala de longitud característica, relacionada con el máximo tamaño que puede tener una gota antes de que sea conveniente dividirla (escenario reminiscente al de los núcleos atómicos normales).

En la figura E.2 se muestran configuraciones a temperaturas muy bajas de sistemas de 800 y 3200 partículas bajo condiciones periódicas de contorno a densidad numérica de $\rho = 0,4$ y para distintos valores de λ .

Y en la figura E.3 se muestra un caso extremo, en el que las dos escalas de longitud están bien diferenciadas. Para 800 partículas la configuración recuerda a las “lasagna” nucleares: una configuración periódica unidimensional. Es altamente probable que la configuración obtenida para 3200 partículas no sea la de mínima energía, y que el mínimo global corresponda también a una estructura periódica unidimensional de franjas, pero eso es mayormente irrelevante. Teniendo en cuenta que el lado de la celda es el doble

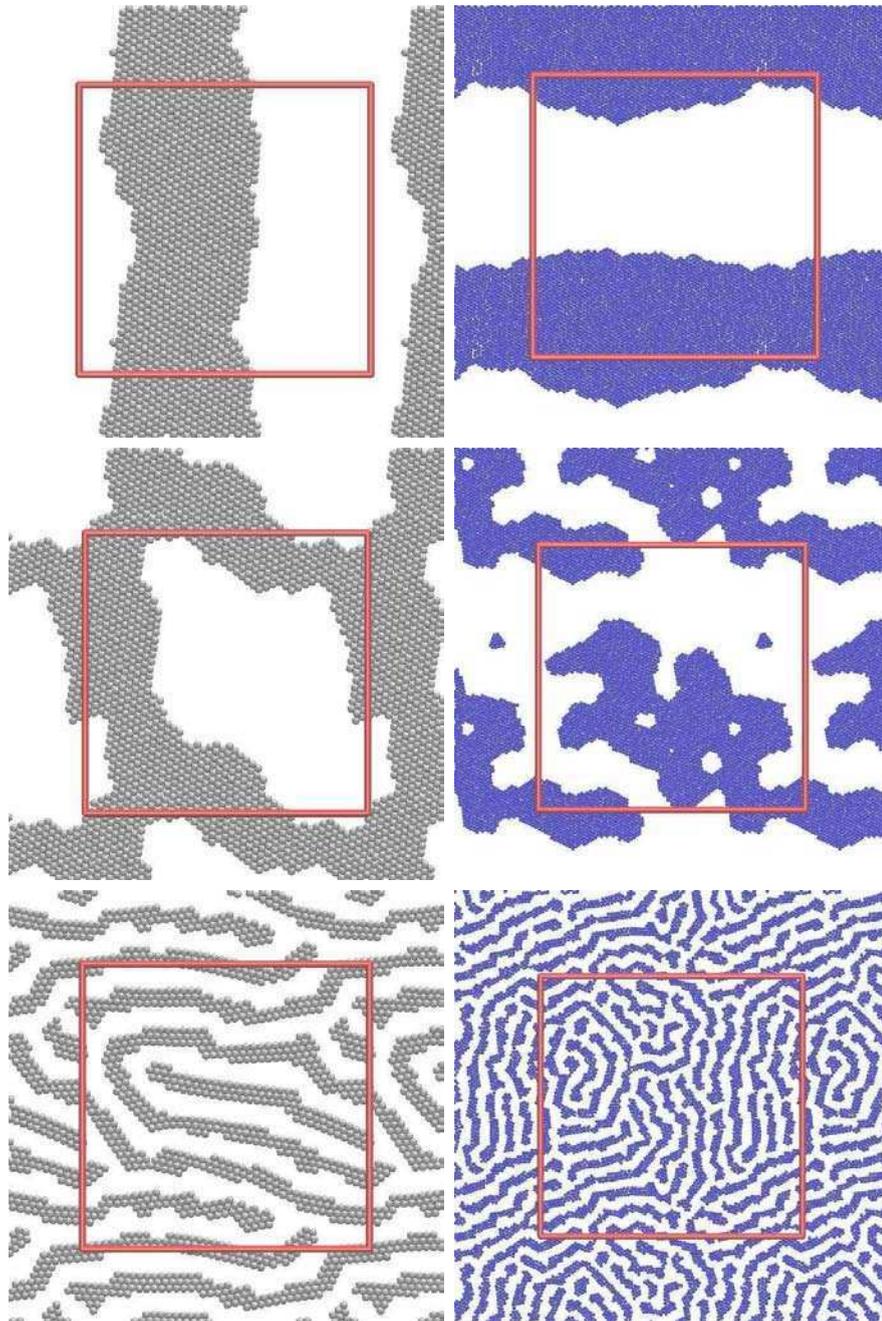


FIGURA E.2: Configuraciones para 800 (izquierda) y 3200 partículas (derecha) con Lennard-Jones más Coulomb apantallado con $\lambda = 0,66, 1$ y $2r_0$. La densidad es $\rho = 0,4$ en todos los casos.

que para 800 partículas, localmente las dos configuraciones son semejantes; más que para otros valores de λ para los cuales las dos escalas presentes no están tan desacopladas.

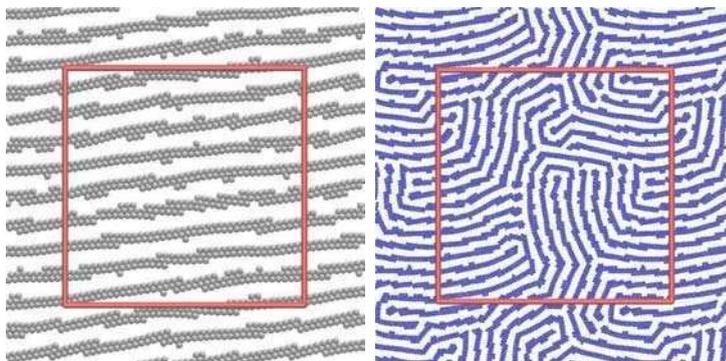


FIGURA E.3: Configuraciones para 800 (izquierda) y 3200 partículas (derecha) con Lennard-Jones más Coulomb apantallado con $\lambda = 10 r_0$. La densidad es $\rho = 0,4$ en todos los casos.

E.2. LJ + Coulomb 2D con paredes reflectantes

Resta ver el efecto que tienen las condiciones de contorno sobre las estructuras. En la figura E.4 se muestran las mismas configuraciones de $N = 3200$ partículas con $\lambda = 0,66 y 10 r_0$ bajo *PBC* y resultados con $N = 7200$ partículas con paredes reflectantes. En ambos casos la densidad es $\rho = 0,4$.

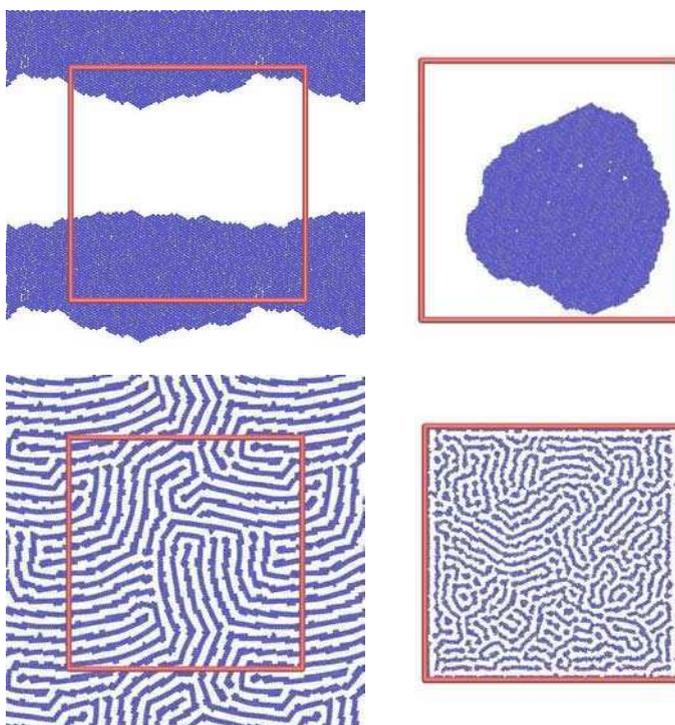


FIGURA E.4: Configuraciones para 3200 bajo CPC (izquierda) y 7200 partículas con paredes reflectantes (derecha). Las interacciones son generadas por un potencial de Lennard-Jones más Coulomb apantallado con $\lambda = 10 r_0$. La densidad es $\rho = 0,4$ en todos los casos.

Puede verse claramente que para el valor más bajo de la constante de apantallamiento, sin la condición de periodicidad la estructura de equilibrio es efectivamente una gota más o menos “esférica”. Cuando el potencial repulsivo es suficientemente fuerte, ocurren dos cosas interesantes. La primera es que un conjunto de partículas se aloja sobre las paredes de la celda debido a la repulsión que ejercen las partículas en centro. Y la segunda es que, lejos de las paredes, la configuración local de las partículas es semejante a la obtenida bajo CPC.

Los resultados presentados en esta sección sugieren que sólo los sistemas con interacciones competitivas (o aquellos que tengan su propia escala de longitud característica) presentarán resultados independientes de las condiciones de contorno en el límite de sistema muy grande.

Bibliografía

- [1] P.J Siemens. *Nature*, 305:410, 1983.
- [2] M.W. Curtin, H. Toki, and D.K. Scott. *Phys. Lett. B*, 123:289, 1983.
- [3] J. A. López and C. O. Dorso. *Lecture Notes on Phase Transformations in Nuclear Matter*. World Scientific, 2000. ISBN 978-981-02-4007-3.
- [4] N. Le Neindre and others for the INDRA & ALADIN collaborations. *Nucl. Phys. A*, 795:47–69, 2007.
- [5] A. Bonasera, M. Bruno, C.O. Dorso, and F. Mastinu. *Nuovo Cimento*, 23, 2000.
- [6] J. P. Bondorf, R. Donangelo, and I.N. Mishustin. *Nucl. Phys. A*, 443:321–347, 1985.
- [7] W.A Friedman. *Phys. Rev. C*, 42:667, 1990.
- [8] J. P. Bondorf et al. *Phys. Reports*, 257:133–221, 1995.
- [9] INDRA Collaboration. *Phys. Lett. B*, 627:18–25, 2005.
- [10] INDRA Collaboration. *Nucl. Phys. A*, 809:111–128, 2008.
- [11] C.B. Das et al. *Phys. Rep.*, 406:1–47, 2005.
- [12] C.B Das, S. Gupta, X.D. Liu, and M.B. Tsang. *Phys. Rev. C*, 64:044608, 2001.
- [13] D.H.E. Gross. *Microcanonical Thermodynamics*. Singapore: World Scientific, 2001.
- [14] F. Gulminelli and Ph. Chomaz. *Nucl. Phys. A*, 734:581–588, 2004.
- [15] A. Strachan and C. O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 55:775, 1997.
- [16] F. Gulminelli and Ph. Chomaz. *Phys. Rev. E*, 66:046108, 2002.
- [17] A. Chernomoretz, M. Ison, S. Ortiz, and C.O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 64:024606, 2001.
- [18] L.W. Nordheim. *Proc. R. Soc. London A*, 119:689, 1928.

- [19] E.A. Uehling and G.E. Uhlenbeck. *Phys. Rev.*, 43:552, 1933.
- [20] A. Bonasera, F. Gulminelli, and F. Molitoris. *Phys. Rep.*, 243:1, 1994.
- [21] Aichelin J. and Stöcker. *Phys. Lett. B*, 176:14, 1986.
- [22] T.H.R. Skyrme. The effective nuclear potential. *Nuclear Physics*, 9(4):615 – 634, 1958.
- [23] Zhao-Qing Feng, Feng-Shou Zhang, Gen-Ming Jin, and Xi Huang. *Nucl. Phys. A*, 750(2-4):232–244, 2005.
- [24] S. Goyal and R.K. Puri. *arXiv:1104.3234v1 [nucl-th]*, 2011. URL <http://arxiv-web3.library.cornell.edu/abs/1104.3234v1>.
- [25] Rajni and S. Kumar. *Eur. Phys. J. A*, 48:19, 2012.
- [26] Cheng Li, Junlong Tian, Li Ou, and Ning Wang. *Phys. Rev. C*, 87:064615, 2013.
- [27] A. Polanski et al. *Radiat. Prot. Dosimetry*, 115:630–633, 2005.
- [28] L. Wilets, E.M. Henley, M. Kraft, and A.D. Mackellar. *Nucl. Phys. A*, 282:341, 1977.
- [29] C.O Dorso, S. Duarte, and J. Randrup. *Phys. Lett. B*, 188:287, 1987.
- [30] C.O Dorso and J. Randrup. *Phys. Lett. B*, 215:611, 1988.
- [31] C.O Dorso and J. Randrup. *Phys. Lett. B*, 301:328, 1993.
- [32] R.J. Lenk, T.J. Schlagel, and V.R. Pandharipande. *Phys. Rev. C*, 42:372, 1990.
- [33] A. Chernomoretz, L. Gingras, Y. Larochelle, L. Beaulieu, R. Roy, C. St-Pierre, and C.O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 65:054613, 2002.
- [34] K.A. Brueckner and J.L. Gammel. *Phys. Rev.*, 109:1023–1039, 1958.
- [35] R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 2nd edition, 1996. ISBN 0-7506-2469-8.
- [36] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 2nd edition. ISBN 0-471-81518-7.
- [37] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Statistical Physics. Vol. 5 & 9*. Pergamon Press Inc., 3d edition, 1980. ISBN 0-08-023039-3.
- [38] J.E. Finn et al. *Phys. Rev. Lett.*, 49:1321, 1982.
- [39] M.E. Fisher. *Rep. Prog. Phys.*, 30:615, 1967.

- [40] URL <http://msa.dl.ac.uk/euroball-home/>.
- [41] R.T. De Souza et al. The msu miniball 4π fragment detection array. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 295(1-2):109–122, 1990.
- [42] J. Pouthas et al. Indra, a 4π charged product detection array at {GANIL}. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 357(2–3):418 – 442, 1995.
- [43] URL <http://www-aladin.gsi.de/www/kp3/aladinhome.html>.
- [44] J. Pochodzalla et al. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1040, 1995.
- [45] Y.G. Ma et al. *Phys. Lett. B*, 390:41, 1997.
- [46] K. Kwiatkowski et al. *Phys. Lett. B*, 423:21, 1998.
- [47] J. B. Natowitz, K. Hagel, Y. Ma, M. Murray, L. Qin, R. Wada, and J. Wang. *Phys. Rev. Lett.*, 89:212701, 2002.
- [48] B. Borderie et al. *Nucl. Phys. A*, 734:495–503, 2004.
- [49] V.E. Viola. The nuclear liquid-gas phase transition: Q.e.d. *Nuclear Physics A*, 734(0):487 – 494, 2004.
- [50] M.F. Rivet et al. *Nucl. Phys. A*, 749:73c–82c, 2005.
- [51] J.B. Elliott and others for the EOS collaboration. *Phys. Lett. B*, 418:34, 1998.
- [52] M.D. D’agostino et al. *Nucl. Phys. A*, 650:329, 1999.
- [53] C.O. Dorso, V. Latora, and A. Bonasera. *Phys. Rev. C*, 60:034606, 1999.
- [54] Y.G. Ma et al. *Phys. Rev. C*, 71:054606, 2005.
- [55] W. A. Friedman and W.G. Lynch. *Phys. Rev. C*, 28:16, 1983.
- [56] F. Gulminelli and Ph. Chomaz. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1402, 1999.
- [57] A. Barrañón, C.O. Dorso, and J.A. López. *Rev. Mex. Fís*, 47:93, 2001.
- [58] M. Ison, P. Balenzuela, A. Bonasera, and C.O. Dorso. *Eur. Phys. J. A*, 14:451, 2002.
- [59] J.K. Dhawan and R.K. Puri. *Phys. Rev. C*, 75:057601, 2007.
- [60] Y.K. Vermani et al. *Jour. Phys. G*, 37:015105, 2010.

- [61] D. Stauffer and A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory*. Taylor & Francis Ltd., 2d edition, 1994. ISBN 0 7484 0253 5.
- [62] J.B. Elliott and others for the EOS collaboration. *Phys. Rev. C*, 62:64603, 2000.
- [63] H. Jaqaman et al. *Phys. Rev. C*, 29:2067, 1984.
- [64] D.H.E. Gross, A. Eckar, and X.Z. Zhang. *Ann. Physik*, 5:446, 1996. URL [arXiv:cond-mat/9607150](https://arxiv.org/abs/cond-mat/9607150).
- [65] P. Balenzuela, A. Chernomoretz, and C.O Dorso. *Phys. Rev. C*, 66:024613, 2002.
- [66] D.J. Wales and R.S. Berry. *Phys. Rev. Lett.*, 73:2875, 1994.
- [67] P. Borrmann, O. Mülken, and J. Harting. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3511, 2000.
- [68] E. Bonnet et al. *Phys. Rev. Lett.*, 103:072701, 2009.
- [69] K Binder. *Rep. Prog. Phys*, 50:783, 1987.
- [70] Ph. Chomaz, F. Gulminelli, and V. Duflot. *Phys. Rev. E*, 64:046114, 2001.
- [71] K. Binder and D.P. Landau. *Phys. Rev. B*, 30:1477, 1984.
- [72] Ph. Chomaz and F. Gulminelli. *Physica A*, 330:451, 2003.
- [73] F. Gulminelli. *Nucl. Phys. A*, 791:165, 2007.
- [74] M. Pichon and others for the INDRA & ALADIN Collaborations. *Nucl. Phys. A*, 779:267, 2006.
- [75] B. Alex Brown. *Phys. Rev. Lett.*, 85:5296, 2000.
- [76] P. Rahkila et al. *Phys. Rev. C*, 82:011303, 2010.
- [77] A. Klimkiewicz et al. *Phys. Rev. C*, 76:051603, 2007.
- [78] URL <http://www.frib.msu.edu/about>.
- [79] J.M. Lattimer and F.D. Swesty. *Nucl. Phys. A*, 535:331, 1991.
- [80] A. Ono, P. Danielewicz, W.A. Friedman, W.G. Lynch, and M.B. Tsang. *Phys. Rev. C*, 70:041604, 2004.
- [81] H. S. Xu et al. *Phys. Rev. Lett.*, 85:716–719, 2000.
- [82] M. B. Tsang, W. A. Friedman, C. K. Gelbke, W. G. Lynch, G. Verde, and H. S. Xu. *Phys. Rev. C*, 64:041603, 2001.
- [83] M. B. Tsang et al. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5023–5026, 2001.

-
- [84] A. S. Botvina, O. V. Lozhkin, and W. Trautmann. *Phys. Rev. C*, 65:044610, 2002.
- [85] G.A. Souliotis, M. Veselsky, D.V. Shetty, and S.J. Yennello. *Physics Letters B*, 588:35 – 42, 2004.
- [86] M.B. Tsang et al. *Phys. Rev. C*, 64:054615, 2001.
- [87] Ad.R. Raduta. *Eur. Phys. J. A*, 24:785–92, 2005.
- [88] L.G. Moretto, C.O. Dorso, J.B. Elliott, and L. Phair. *Phys. Rev. C*, 77:037603, 2008.
- [89] A. Ono et al. *Phys. Rev. C*, 68:051601, 2003.
- [90] Bao-an Li and Lie-Wen Chen. *Phys. Rev. C*, 74:034610, 2006.
- [91] M. Colonna and F. Matera. *Phys. Rev. C*, 71:064605, 2005.
- [92] A. Barrañón, C.O. Dorso, and J.A. López. *Nucl. Phys. A*, 791:222, 2007.
- [93] C.O. Dorso, C.R. Escudero, M. Ison, and J.A. López. *Phys. Rev. C*, 73:044601, 2006.
- [94] C.O. Dorso and J.A. López. *VI LATIN AMERICAN SYMPOSIUM ON NUCLEAR PHYSICS AND APPLICATIONS. AIP Conference Proceedings*, 884:313–317, 2007.
- [95] C.R. Escudero, J.A. López, and C.O. Dorso. *VI LATIN AMERICAN SYMPOSIUM ON NUCLEAR PHYSICS AND APPLICATIONS. AIP Conference Proceedings*, 884:299–305, 2007.
- [96] C.O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 73:034605, 2006.
- [97] D. Dávila, C.R. Escudero, J.A. López, and C.O. Dorso. *Physica A*, 374:663–668, 2007.
- [98] C.O. Dorso, C.M. Hernández, J.A. López, and J.A. Muñoz. *Phys. Rev. C*, 78:034613, 2008.
- [99] C.O. Dorso and J.A. López. *Phys. Rev. C*, 64:027602, 2001.
- [100] A. Chernomoretz, F. Gulminelli, M. Ison, and C.O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 69:034610, 2004.
- [101] M. Ison and C.O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 71:064603, 2005.
- [102] B.G. Todd-Rutel and Piekarewicz. *Phys. Rev. Lett.*, 95:122501, 2005.

- [103] U. Garg. *Nucl. Phys. A*, 731:3, 2004.
- [104] G. Colò et al. *Phys. Rev. C*, 70:024307, 2004.
- [105] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulations*. Academic Press, 2nd edition, 2002.
- [106] A. Strachan and C. O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 56:995, 1997.
- [107] C. O. Dorso and J. Aichelin. *Phys. Lett. B*, 345:197, 1995.
- [108] A. Barrañón, A. Chernomoretz, C.O. Dorso, J.A. López, and J. Morales. *Rev. Mex. Fis.*, 45:110–115, 1999.
- [109] C. O. Dorso and A. Strachan. *Rev. Mex. Fis.*, 41, Sup. 1:96–108, 1995.
- [110] A. Strachan and C. O. Dorso. *Phys. Rev. C*, 59:258–294, 1999.
- [111] S. Albergo, S. Costa, E. Costanzo, and A. Rubbino. *Il Nuovo Cimento A Series* 11, 89:1–28, 1985.
- [112] M. Bruno and othes for the INDRA & ALADIN Collaborations. *Nucl. Phys. A*, 807:48–60, 2008.
- [113] F. Gulminelli. *Phys. Rev. C*, 71:054607, 2005.
- [114] A. Le Fèvre and J. Aichelin. *Phys. Rev. Lett*, 100:042701, 2008.
- [115] C. O. Dorso and P. Balonga. *Phys. Rev. C*, 50:991, 1994.
- [116] G. Audi, A.H. Wapstra, and C. Thibault. *Nucl. Phys. A*, 729:337–676, 2003.
- [117] J.M. Rohlff. *Modern Physics from A to Z*. Wiley & Sons., New York, 1994.
- [118] C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli, and J.A. López. *J. Phys. G*, 38:115101, 2011.
- [119] C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli, and J.A. López. *Rev. Mex. Fis.*, 57:14–17, 2011.
- [120] P. Danielewicz, R. Lacey, and W. G. Lynch. *Science*, 298:1592–1596, 2002.
- [121] C.J. Horowitz. *Eur. Phys. J. A*, 30:303–310, 2006.
- [122] S. Woosley and T. Janka. *Nature Physics*, 1:147–154, 2005.
- [123] H.A. Bethe. *Rev. Mod. Phys.*, 62:801–867, 1990.
- [124] J. Piekarewikz and G. Toledo Sánchez. *Phys. Rev. C*, 85:015807, 2012.

- [125] J. M. Lattimer, C. J. Pethick, M. Prakash, and P. Haensel. *Phys. Rev. Lett.*, 66:2701–2704, 1991.
- [126] A. Akmal, V. Pandharipande, and D.G. Ravenhall. *Phys. Rev. C*, 58:1804, 1998.
- [127] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. R. Wilson. *Phys. Rev. Lett.*, 50:2066, 1983.
- [128] K. Oyamatsu. *Nucl. Phys. A*, 561:431, 1993.
- [129] Jun Xu, Lie-Wen Chen, Bao-An Li, and Hong-Ru Ma. *Phys. Rev. C*, 79:035802, 2009.
- [130] Jun. Xu, Lie-Wen Chen, Bao-An Li, and Hong-Ru Ma. *The Astrophysical Journal*, 697:1549–1568, 2009.
- [131] PREX Collaboration. *Phys. Rev. Lett.*, 108:112502, 2012.
- [132] M. Hashimoto, H. Seki, and M. Yamada. *Prog. Theor. Phys*, 71:320, 1984.
- [133] R. D. Williams and E. Koonin. *Nucl. Phys. A*, 435:844, 1985.
- [134] C. P. Lorenz, D. G. Ravenhall, and C. J. Pethick. *Phys. Rev. Lett*, 70:379, 1995.
- [135] K. S. Cheng, C. C. Yao, and Z. G. Dai. *Phys. Rev. C*, 55:2092, 1997.
- [136] T. Maruyama, K. Niita, S. Chiba, and A. Iwamoto. *Phys. Rev. C*, 57:655, 1998.
- [137] T. Kido, T. Maruyama, K. Nita, and S. Chiba. *Nucl. Phys. A*, 663-664:877, 2000.
- [138] G. Watanabe, K. Iida, and K. Sato. *Nucl. Phys. A*, 676:445, 2000.
- [139] N. Chamel and P. Haensel. *Living Rev. Relativity*, 11:10, 2008.
- [140] C. J. Horowitz, M. A. Perez-García, and J. Piekarewicz. *Phys. Rev. C*, 69:045804, 2004.
- [141] URL http://www.nvidia.com/object/cuda_home_new.html.
- [142] A. L. Fetter and J. B. , Wallecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [143] T. M. Nymand and P. Linse. *J. Chem. Phys.*, 112:14, 2000.
- [144] C.O. Dorso, P.A. Giménez Molinelli, and J.A. López. From Nuclei to Nuclear Pasta, *capítulo en Neutron Star Crust*. Nova Publishers Inc., New York, 2012. ISBN 978-1-162081-902-9. pag. 151.
- [145] E Faller, Q. Yan, and J. J. de Pablo. *Jour. Chem. Phys.*, 116(13):5419, 2011.
- [146] J. A. Elliott. *Int. Mat. Rev.*, 56(4):207, 2011.

- [147] J.D. Chodera, W.C. Swope, J. W. Pitera, C. Seok, and K. A. Dill. *Jour. Chem. Theory. Comput.*, 3:26–41, 2007.
- [148] J. Chang and S. I. Sandler. *Jour. Chem. Phys.*, 118(18):8390, 2003.
- [149] N. B. Wilding. *Am. J. Phys.*, 69(11):1147, 2001.
- [150] A. F. Voter. *J. Chem. Phys.*, 106:4665, 1996.
- [151] G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, and T. Ebisuzaki. *Phys. Rev. C*, 68:035806, 2003.
- [152] C. Dorso, P. Giménez Molinelli, and J. López. *Phys. Rev. C*, 86:055805, 2012.
- [153] L Michielsen and H De Raedt. *Phys. Reports*, 347:461, 2001.
- [154] L. A. Santalo. *Integral Geometry and Geometric Probability*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1976.
- [155] H Hadwiger. *Vorlesungen über Inhalt, Oberfläche und Isoperimetrie*. Springer, Berlin, 1957.
- [156] J. Archer, C. Ionescu, and L. Reatto. *J. Phys. Condens. Matter*, 20:415106, 2008.
- [157] S. Förster and T. Planterberg. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 41:688–714, 2002.
- [158] C Ortiz, J. Lorenzana, and C. Di Castro. *Phys. Rev. Lett.*, 100:246402, 2008.
- [159] K. Larsson and F. Tiberg. *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, 9(6):365–369, 2005.
- [160] P.A. Giménez Molinelli, J.I. Nichols, J.A. López, and C.O. Dorso. *Nucl. Phys. A*, 923:31–50, 2014.
- [161] K. Binder, B. J. Block, P. Virnau, and A. Tröster. *Am. J. Phys.*, 80:129, 2012.
- [162] L.G. MacDowell, V.K. Shen, and J.R. Errington. *Jour. Chem. Phys.*, 125:034705, 2006.
- [163] M. Schrader, P. Virnau, and K. Binder. *Phys. Rev. E*, 79:061104, 2009.
- [164] W. Götzdž and R. Holyst. *Macromolecular Theory and Simulations*, 5:321–332, 1996.
- [165] K Nakazato, K. Oyamatsu, and S. Yamada. *Phys. Rev. Lett.*, 103:132501, 2009.
- [166] W. G. Newton and J. R Stone. *Phys. Rev. C*, 79:055801, 2009.
- [167] H Pais and J. R Stone. *Phys. Rev. Lett*, 109:151101, 2012.

-
- [168] D. Adams. *CCP5 Information Quarterly*, 10:30, 1983.
- [169] W. Smith. *CCP5 Information Quarterly*, 30:37, 1989.
- [170] P.A. Giménez Molinelli and C.O. Dorso. *arXiv:1403.5777 [nucl-th]*, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1403.5777>.
- [171] P.N. Alcain, P.A. Giménez Molinelli, J.I. Nichols, and C. O. Dorso. 5, 2014. URL [arXiv:1311.5923\[nucl-th\]](http://arxiv.org/abs/1311.5923).
- [172] URL <http://chandra.harvard.edu/>.
- [173] URL <http://physics.aps.org/synopsis-for/10.1103/PhysRevC.86.055805>.
- [174] F. Gulminelli et al. *Phys. Rev. E*, 68:026119, 2003.
- [175] H. C. Andersen. *J. Chem. Phys.*, 72:2384, 1980.

Agradecimientos

Expresar en unas pocas líneas y adecuadamente mi agradecimiento hacia todas las personas e instituciones que hicieron posible el desarrollo y la culminación de esta tesis, resultó tan difícil e injusto como resumir el trabajo de 6 años en estas ciento y tantas páginas.

Lo único seguro es que en cualquier forma posible de organizar esta lista incompleta de agradecimientos, mi director Claudio Dorso está a la cabeza. A fuerza de apoyo, un entusiasmo juvenil y contagioso por el trabajo, y amenazas más o menos sutiles (que no siempre involucraron armas de filo), Claudio fue sin dudas el principal responsable de que esta tesis llegara a puerto. Más que por su incuestionable calidad académica y capacidad como director, mi agradecimiento está motivado por su calidad humana, que tanto escasea en este ámbito.

En segundo lugar, agradezco a la Universidad de Buenos Aires y al pueblo Argentino, por permitirme acceder a una educación universitaria de excelencia, de manera libre y gratuita. Asimismo, agradezco al CONICET su apoyo financiero.

Por contribuir a lograr día a día un ámbito de trabajo alegre y cordial, por las discusiones iluminadoras, las charlas delirantes (aún más iluminadoras), la ecléctica musicalización de las (largas) jornadas, el café, y un largo etcétera, agradezco a todos aquellos con quienes tuve el honor y el placer de compartir oficina: Guillermo Solovey, Inés Caridi, Guillermo Frank, Daniel Barmak, Juan Nichols y Pablo Alcain. Por supuesto, este agradecimiento se hace extensivo a los vecinos Marcelo Otero y Andrés Medus. Y especialmente a Ariel Chernomoretz y Pablo Balenzuela, los proverbiales gigantes (en el caso de Ariel muy literalmente) sobre cuyos hombros se apoya parte de esta tesis.

A mi consejero de estudios Hernán Solari, a Mariano Mayochi y a Marta Pedernera, por guiarme a través de los laberintos burocráticos.

A mis compañeros históricos y no tanto de la carrera, amigos y maestros: Pablo Fernández, Franciso Gonzalez Pinto, José Zurita, Laura López Arrieta, Diego Mayer, Tomás Teitelbaum, Leo Amarilla, Brian Wundheiler, Mariano Gabitto, Pablo Montero y muchos más.

A mis alumnos, por recordarme cotidianamente la vastedad de mi ignorancia.

Fuera del ámbito académico, agradezco a mis amigos y maestros de la vida Ignacio y Marisol Fernandez y Leandro Alassia, fuentes inagotables de sabiduría e inspiración, espíritus libres en el más puro sentido nietzscheano.

Agradezco profundamente a Pablo Allen, Magalí Bertelli, Natalia del Mauro y Tomás Teitelbaum, que en los últimos años se han vuelto, a su pesar, pilares esenciales de mi humanidad.

A los miembros de nuestra versión adolescente y de bajo presupuesto del *Club de la Serpiente*, María Paula Basílico, Leandro Alassia, Juan Pablo Barani y Gabriel Cáceres.

Al Viento, por desordenarme los papeles y obligarme a revisarlos antes de que se me perdieran definitivamente. Y a todos los que me ayudan a reordenarlos: José Posse, Leandro Alassia, Marisol Fernandez, Magdalena Candusso, Pablo Allen, Magalí Bertelli, Natalia del Mauro y Tomás Teitelbaum.

A todos los profesores y maestros que contribuyeron o contribuyen, más o menos directamente, a la formación de mi pensamiento científico y filosófico: Javier “El Chapa” Chiapparo, José María “Pepe” Arruabarrena, Salvador “Cacho” Saade, Flavio Badolatti, Juan José Caruso, Daniel Capretti, Patricia Esponda, Ian Kot, César Moreno, Maxi Lantz, y Pablo Dotro.

A Inmotus (Santiago Giménez Molinelli, Andrés Rosenberg y Mauro Piaggio), por todo el metal.

A esos locos bajitos, sobrinos y ahijados, Laura, Matías y Bernardo, por darme la coartada ideal para portarme como un niño en público.

Por último y sobre todo, por todos los motivos anteriores, por estar cuando los necesité y no estar cuando necesité que no estuvieran, a mi familia.