

Tesis Doctoral

Dependencia en el isospín de la ecuación de estado de la materia nuclear

Alcain, Pablo N.

2018

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:

Alcain, Pablo N.. (2018). Dependencia en el isospín de la ecuación de estado de la materia nuclear. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://hdl.handle.net/20.500.12110/tesis_n6531_Alcain

Cita tipo Chicago:

Alcain, Pablo N.. "Dependencia en el isospín de la ecuación de estado de la materia nuclear". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2018.
http://hdl.handle.net/20.500.12110/tesis_n6531_Alcain

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

Dependencia en el isospin de la ecuación de estado de la materia nuclear

Tesis presentada para optar al título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas
por **Lic. Pablo N. Alcain**

Director de Tesis: Dr. Claudio O. Dorso

Consejero de Estudios: Dr. Ariel Chernomoretz

Lugar de Trabajo: Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA)

Fecha de defensa: 17 de agosto de 2018

Resumen: Dependencia en el isospin de la ecuación de estado de la materia nuclear

A lo largo de esta tesis estudiamos el comportamiento de protones y neutrones en las condiciones extremas de la corteza de las estrellas de neutrones. Los distintos modelos microscópicos para describir la materia nuclear se han utilizado sucesivamente para la descripción de fenómenos terrestres como la energía de ligadura de los núcleos o la formación de fragmentos en colisiones nucleares a altas energías. Aplicamos el modelo que más satisfactoriamente reproduce las condiciones terrestres (conocido como Classical Molecular Dynamics) en este trabajo para describir a la corteza de las estrellas de neutrones, mediante la aplicación de simulaciones de dinámica molecular. En particular estudiamos dos fenómenos fundamentales: la “pasta nuclear” y la nucleosíntesis.

La “pasta nuclear” es el nombre que toma el conjunto de estructuras que se conjetura que se forman en la corteza de las estrellas de neutrones, en condiciones de densidades de subsaturación y bajas temperaturas, que podría ser fundamental al estudiar la evolución estelar, debido a su alta opacidad a neutrinos. Su propuesta inicial se debió a consideraciones de campo medio en las que se demostró que estas estructuras eran consistentes con mínimos locales de energía. Luego de estudiar concretamente los efectos que el apantallamiento de electrones tiene sobre la interacción electrostática entre los protones, con el modelo microscópico logramos no sólo reproducir las estructuras predichas, sino también encontrar estructuras novedosas. Al caracterizar cuantitativamente el impacto que cada una de ellas tendría en la opacidad a los neutrinos, encontramos que estas estructuras novedosas son tan o más efectivas que las propuestas originalmente.

En cuanto a la nucleosíntesis, se sospecha que alrededor de la mitad de los elementos más pesados que el hierro proviene de la colisión de estrellas de neutrones y de las supernovas, a través de un proceso de captura rápida de neutrones conocido como *r-process*. Estudiamos microscópicamente la fragmentación de la materia de las estrellas de neutrones, emulando los efectos de la colisión mediante una expansión adiabática en los dominios de la simulación. De esta manera el estudio microscópico nos permitió, mediante el uso de distintos modelos de reconocimiento de fragmentos, identificar precisamente la formación de fragmentos que son consistentes con los necesarios para el *r-process*: un núcleo (llamado *semilla*) rodeado por neutrones libres.

Palabras Clave: astrofísica nuclear, nucleosíntesis, estrellas de neutrones, ecuación de estado de la materia nuclear, dinámica molecular

Abstract: Isospin dependence on the equation of state of nuclear matter

Throughout this thesis, we study the behaviour of protons and neutrons in the extreme conditions corresponding to the crust of neutron stars. The different microscopic models used to describe nuclear matter have been used for the description of Earth phenomenae, such as the binding energy of the nuclei or the fragment formation in nuclear collisions at high energy. We applied the model that yields the most satisfactory results in these conditions (known as Classical Molecular Dynamics) in this work to describe the neutron star crust through molecular dynamics simulations. In particular we study two fundamental phenomenae: the “nuclear pasta” and the nucleosynthesis.

“Nuclear pasta” is the name given to the set of structures that are thought to exist in the neutron star crust, in environments with subsaturation nuclear density and low temperature, that could be a key in studying the stellar evolution due to its high opacity to neutrinos. It has been initially proposed due to mean field considerations, which proved that these structures were consistent with local minima of energy. After studying specifically the effect that the electron screening has on the electrostatic interaction between protons, with the microscopic model we could not only reproduce the predicted structures, but also find new ones. By a quantitative characterization of the impact that each of them would have in the neutrino opacity we found that these novel structures can be as effective as the originally proposed, sometimes even slightly more.

As for nucleosynthesis, it is conjectured that around half of the elements higher than iron come from the collision of neutrons stars and supernovae, through a rapid neutron capture process known as *r-process*. We studied microscopically the fragmentation of neutron star matter, emulating the effects of a collision with an adiabatic expansion in the simulation domain. This way the study allowed us, through the usage of different fragment recognition models, identify precisely the formation of fragments consistent with the *r-process*: a nucleus (called *seed*) surrounded by free neutrons.

Keywords: nuclear astrophysics, nucleosynthesis, neutron stars, equation of state of nuclear matter, molecular dynamics

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Estrellas de neutrones	1
1.2	Dinámica de los nucleones	4
1.2.1	Evolución histórica de los modelos	5
1.2.2	Classical Molecular Dynamics	7
1.2.3	Interacción de Coulomb en el Modelo	10
1.3	Materia de estrellas de neutrones a baja densidad y temperatura	11
1.4	Choque de Estrellas de Neutrones	11
2	Efecto de Coulomb	15
2.1	Introducción	16
2.1.1	Funcionales de Minkowski	17
2.2	Longitud de apantallamiento “crítica”	18
2.3	Régimen de una pasta por celda	20
2.4	El Régimen de Transición	23
2.5	Conclusiones	23

3	Transiciones de fase	27
3.1	Introducción	27
3.2	Transición de fase	28
3.2.1	Transición de fase termodinámica	28
3.2.2	Transición de fase topológica/morfológica	28
3.3	Comportamiento de muy largo rango	31
3.4	Propiedades de transporte de neutrinos	32
3.5	Propiedades de pasta no tradicional	33
3.6	Conclusiones	36
4	Nuevas pastas	39
4.1	Introducción	39
4.2	Fragmentos	40
4.3	Opacidad de neutrinos	43
4.4	Conclusiones	48
5	Fragmentación	49
5.1	Introducción	50
5.1.1	Reconocedores de fragmentos	50
5.1.2	Identificación de Fragmentos Infinitos	52
5.1.3	Expansión	54
5.2	Fragmento infinito	55
5.3	Fragmentos asintóticos	56
5.4	Dependencia de la configuración con el potencial	58
5.5	Distribución Asintótica de Masas	60
5.6	Formación de fragmentos	60
5.7	Conclusiones	65
6	Conclusiones y Perspectiva	71
6.1	Perspectivas de futuro	74
6.1.1	Modelo para la interacción nuclear	74
6.1.2	Opacidad a neutrinos de estrellas	74

6.1.3	¿Existen las pastas tradicionales?	75
A	Dinámica Molecular	77
A.1	Integración Temporal	77
A.2	Termostatos	77
B	Funcionales de Minkowski	79
C	Reconocedores de Fragmentos	81
C.1	Fragmentos geométricos	81
C.2	Fragmentos dinámicos	82
D	Cálculo del factor de estructura	85



1. Introducción

1.1 Estrellas de neutrones

Las estrellas de neutrones aparecen en el universo como el remanente de la muerte de una estrella masiva (pero no tan masiva como para convertirse en un agujero negro). 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 suficiente presión 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 se produce el proceso mencionado: el núcleo se contrae, se calienta y comienza a consumir un nuevo combustible que, generalmente, es el producto de la fusión del anterior. Esto se conoce como la “secuencia principal” de una estrella [WJ05]. Para poder fusionar elementos cada vez más pesados, una estrella requiere mayor temperatura, y sólo estrellas muy masivas (con masa mayor a 8 veces la masa solar) 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 fusión. En la etapa del silicio (que dura apenas un par de semanas), casi toda la presión que evita el colapso es provista por un gas degenerado de electrones.

Cuando la masa del núcleo alcanza el límite de Chandrasekhar de aproximadamente $1,4M_{\odot}$, los electrones se vuelven ultra-relativistas (modificando así su ecuación de estado)

y no pueden seguir soportando el núcleo a través de la presión de degeneración. En esta etapa, el núcleo de la estrella es muy inestable. Existen dos procesos que enfrían al sistema (conocidos como refrigerantes estelares): la fotodesintegración de los núcleos y la captura de electrones. En la fotodesintegración, la energía cinética es usada para separar núcleos atómicos y en la captura de electrones la energía cinética de los electrones se transforma en energía cinética de neutrinos que escapan de la estrella, a través de un proceso conocido como Urca modificado: $n + n \rightarrow p + e + n + \bar{\nu}_e$. Estos procesos son tan efectivos que el colapso del núcleo estelar es prácticamente inevitable.

Debido a la densidad de la estrella en este estado, los electrones comienzan a ser capturados por los núcleos de hierro, aumentando la proporción de neutrones y reduciendo para el núcleo estelar la presión ejercida por el gas de electrones. Esto precipita el colapso gravitatorio del núcleo, que comienza a comprimirse violentamente a una velocidad de $0,25c$. A medida que la compresión avanza y la densidad aumenta alcanzando niveles de la densidad nuclear ($\rho \simeq 10^{14} \text{ g/cm}^3$ o $\rho \simeq \rho_0 = 0,15 \text{ fm}^{-3}$), comienzan a tomar relevancia la degeneración de neutrones y las fuerzas nucleares. Éstas resisten la compresión y detienen el colapso cuando el núcleo se vuelve dos o tres veces más denso que la materia nuclear normal. El núcleo luego rebota fuertemente y comienza una onda de choque que atraviesa el material que viajaba originalmente hacia el centro. Esta onda de choque puede revertir la caída de la materia de estrellas que envuelve al núcleo y producir una explosión llamada supernova.

La física del colapso, el rebote y la onda de choque asociada es muy compleja. No hay completa certeza sobre cómo se transfiere la energía y el momento a las capas exteriores de la estrella, y tampoco es seguro que el colapso del núcleo esté siempre acompañado por una supernova. De cualquier modo, el colapso deja un residuo del núcleo: una proto-estrella de neutrones caliente (con temperaturas de entre 20 y 50 MeV). Esa proto-estrella de neutrones va tomando material de las capas exteriores de la estrella y, si no tiene suficiente masa como para convertirse en un agujero negro, se enfría hasta estabilizarse (principalmente a través de la emisión de neutrinos) formando un núcleo rico en neutrones de aproximadamente 10 km de radio: una estrella de neutrones propiamente dicha. Durante este proceso, 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 produce la Súper Nova, a pesar de que no hay consenso sobre los detalles del mecanismo [WJ05, Bet90]. También está en discusión el proceso de Urca como mecanismo de enfriamiento [PS12, LPPH91], 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. Durante este colapso, una gran parte de los electrones y los protones se

transforman en neutrones a través de la captura de electrones, emitiendo neutrinos. Debido a esto, la masa residual tiende a tener un exceso de neutrones por sobre protones, de ahí el nombre estrellas de neutrones. Estas estrellas de neutrones entonces contienen protones y neutrones, pero además son eléctricamente neutros debido a los electrones: la carga neta es cero.

La masa de una estrella de neutrones es de entre 1 y 3 masas solares y su radio de cerca de 10 km, lo que resulta en una densidad de $\rho \simeq 10^{15} \text{ g/cm}^3$, aproximadamente 20 veces mayor que la de los núcleos usuales. Su estructura, observada esquemáticamente en la figura 1.2 puede dividirse en dos partes, de acuerdo a modelos actuales [PLPS04, GKP04]: la *corteza*, de aproximadamente 1,5 km de espesor y con una densidad de hasta la mitad de la densidad normal nuclear ρ_0 ; y el *núcleo*, donde la estructura es aún desconocida y se mantiene altamente especulativa [APR98, RPW83, Oya93, WJ05].

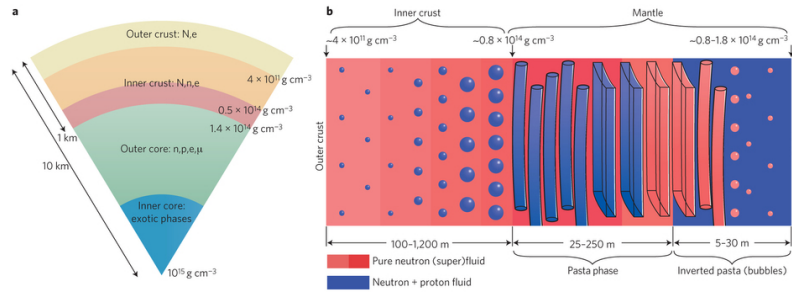


Figura 1.1: Esquema de la estructura del interior de una estrella de neutrones

La densidad de dicha corteza toma los valores de la densidad nuclear normal a una profundidad $d \simeq 1 \text{ km}$, la densidad de *neutron drip* ($\rho \simeq 4 \cdot 10^{11} \text{ g/cm}^3$) a $d \simeq 0,5 \text{ km}$, y una mezcla de núcleos ricos en neutrones con densidades decrecientes hasta ser prácticamente cero en lo que se conoce como el envoltorio de la estrella de neutrones. Ravenhall *et al.* en Ref. [RPW83] y Hashimoto *et al.* en Ref. [HSY84] propusieron que la corteza de las estrellas de neutrones está compuesta por estructuras conocidas como *pasta nuclear*.

Varios modelos han sido desarrollados para estudiar la pasta nuclear, y han mostrado que estas estructuras aparecen debido al juego competitivo entre las fuerzas nucleares y las de Coulomb en un medio infinito. De cualquier modo, la dependencia de los observables de diferentes cantidades termodinámicas no ha sido estudiado en profundidad. Los trabajos originales de Ravenhall *et al.* [RPW83] y Hashimoto *et al.* [HSY84] utilizaban un modelo de gota líquida compresible, y mostraron que las *fases de pasta* –*lasagna*, *spaghetti* y *gnocchi*– (ver figura ??) son soluciones al estado fundamental de la materia de estrellas de neutrones. De ahí en adelante, se han tomado distintos enfoques que clasificaremos en dos categorías: campo medio o microscópico.

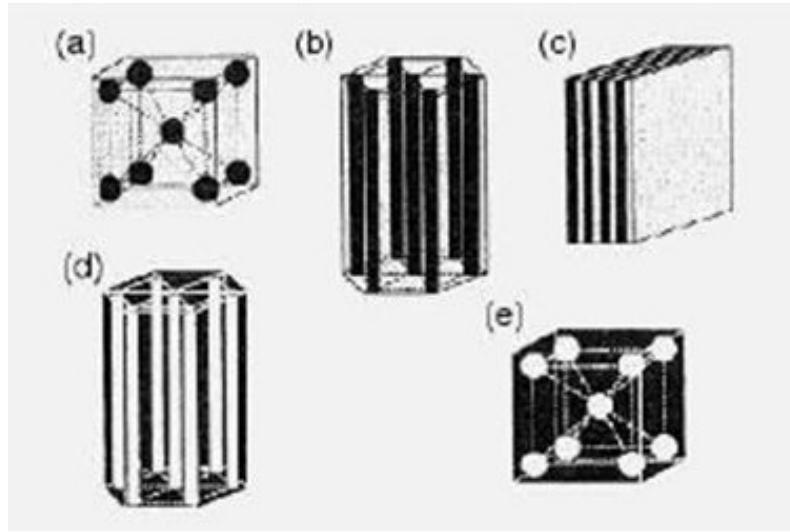


Figura 1.2: Estructura de pastas originales propuestas por Ravenhall *et al.* [RPW83] y Hashimoto *et al.* [HSY84]

Los trabajos de campo medio incluyen el modelo de la gota líquida, de Lattimer *et al.* [PLPS04], Thomas-Fermi, de Williams y Koonin [WK85], entre otros [Oya93, LRP93, CYD97, WIS00, WI03, NOY09]. Los modelos microscópicos incluyen Dinámica Molecular Cuántica (QMD por sus siglas en inglés), usado por Maruyama *et al.* [MNO⁺98, KMNC00] y por Watanabe *et al.* [WSYE03], el Potencial Simple Semiclásico (SSP), utilizado por Horowitz *et al.* [HPGC⁺04] y Dinámica Molecular Clásica (CMD), utilizado en nuestros trabajos previos [DGML12]. De todos los modelos utilizados para estudiar las estrellas de neutrones, las ventajas de los modelos clásicos o semiclásicos son la accesibilidad a las posiciones y velocidades de todas las partículas y el hecho de que no se debe especificar *a priori* ninguna morfología específica, a diferencia de la mayoría de los modelos de campo medio. Esto permite estudiar la estructura de la materia de estrellas de neutrones desde un punto de vista de las partículas. En estos modelos la repulsión de Pauli entre nucleones del mismo isospín es, o bien considerado en la interacción nuclear, o bien agregado como un término aparte [DR88].

1.2 Dinámica de los nucleones

Para estudiar la estructura nuclear de la corteza de las estrellas de neutrones es necesario comprender el comportamiento de los nucleones (es decir, protones y neutrones) a las densidades y temperaturas típicas de las capas externas de las estrellas. Este conocimiento viene de décadas de estudio de la dinámica de nucleones a través del uso de modelos

computacionales que han evolucionado, siendo cada vez más complejos. En esta sección, revisamos esta evolución de los modelos, presentando una sinopsis de los modelos existentes y terminando con el modelo utilizado a lo largo de este trabajo: Dinámica Molecular Clásica (CMD).

1.2.1 Evolución histórica de los modelos

Varios enfoques se han utilizado para simular el comportamiento de la materia nuclear, especialmente en reacciones. Los estudios iniciales, en mayor parte estadísticos, se desarrollaron hacia la década de 1980. Éstos carecían de interacciones entre fragmentos y la dinámica de fragmentos luego de la colisión. En la década del 1990 se agregaron estos efectos, resultando así en modelos más robustos [BBIM96]. Todos estos modelos, sin embargo, estaban basados en geometrías idealizadas e ignoraban importantes fluctuaciones de forma y los efectos de la cinemática en la reacción. Desde el lado de la teoría de transporte, se desarrollaron modelos hacia el fin de la década de 1990 que se basaron en modelos cuánticos, clásicos y semiclásicos. Debido a su uso actual en materia de estrellas de neutrones, es importante realizar una comparación entre estos modelos.

Comenzando con el semiclásico, una clase de modelos conocidos genéricamente como BUU está basado en la ecuación cinética de Vlasov-Nordheim [Nor28], también conocida como Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck [UU33], de quienes toma su nombre. Estos modelos siguen numéricamente la evolución de la función de Wigner $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ (densidad de un cuerpo en el espacio de fases), bajo un potencial medio $U(\mathbf{r})$ para obtener una descripción de la probabilidad de encontrar una partícula en un punto del espacio de fases. La interpretación semiclásica constituye la ventaja principal del modelo BUU, aunque la limitación de utilizar sólo un campo medio implica que los fragmentos no se desarrollan espontáneamente. Para poder producir fragmentos (como, por ejemplo, los que se producen en colisiones nucleares), deben ser agregadas fluctuaciones *ad hoc*, y aún más términos deben ser agregados para obtener características más realistas.

En el lado cuántico (que, en realidad, son modelos efectivamente semiclásicos), los modelos de dinámica molecular, llamados QMD genéricamente, resuelven las ecuaciones de movimiento de “paquetes de onda” de nucleones moviéndose dentro de campos medios (derivados de la funcional de energía de Skyrme). Este método permite la imposición de un mecanismo de bloqueo del estilo de Pauli, secciones eficaces dependientes del isospin, dependencia de la interacción con el momento relativo de las partículas, entre otras. La mayor ventaja de este modelo es que QMD es capaz de producir fragmentos, pero realiza una descripción pobre de las propiedades de los clusters y necesita métodos externos para corregir el exceso de energía a los fragmentos que se forman [PPU05]; normalmente

los fragmentos se construyen externamente a través de un modelo basado en distancias y momentos relativos. Además, al imponerle una forma a los “paquetes de onda”, el tratamiento de QMD se convierte en un potencial clásico, donde la forma del potencial termina reduciéndose a considerar a las partículas como puntuales. Por esto decimos que, a todos los efectos prácticos, este potencial es en realidad del tipo semiclásico.

También es de particular importancia para este trabajo el modelo de dinámica molecular clásico CMD, desarrollado por el grupo de Urbana [LSP90] y diseñado para reproducir las predicciones de la ecuación de Vlasov-Nordheim y proveer una descripción más completa de las reacciones de iones pesados. Este modelo se basa en el potencial de Pandharipande, que provee la interacción nuclear a través de una combinación de potenciales de tipo Yukawa seleccionados para que la materia nuclear infinita tenga valores adecuados para la densidad de equilibrio $\rho_0 = 0,16 \text{ fm}^{-3}$, energía por partícula $E(\rho_0) = 16 \text{ MeV/nucleon}$ y compresibilidad $\kappa = 250 \text{ MeV}$.

Problemas comunes tanto a BUU como a QMD son el fracaso en producir el número adecuado de fragmentos, así como el uso de parámetros externos ajustables (como el tamaño de los paquetes de onda, el número de partículas de prueba, modificaciones sobre el campo medio, masas efectivas y secciones eficaces). Estos problemas no están presentes en CMD, que sin ningún tipo de parámetro extra, es capaz de describir la dinámica de la reacción en el espacio desde el comienzo hasta el final con valores adecuados para la energía, la distribución espacial y en el espacio de momentos. Intrínsecamente incluye todas las correlaciones de partículas a todos los niveles: dos cuerpos, tres cuerpos... y puede describir sistemas nucleares que van desde núcleos fríos hasta decaimientos secundarios, pasando por transiciones de fase, flujo hidrodinámico y materia nuclear densa.

La única desventaja aparente del CMD es la falta de efectos cuánticos, como el bloqueo de Pauli, que a energías de excitación bajas no permite que se describa la estructura nuclear correctamente. Afortunadamente, en colisiones, la gran deposición de energía implica una apertura del espacio de fases disponible y así se reduce el efecto de exclusión de Pauli [LD00], mientras que en entornos estelares, las colisiones que transfieren momentos dejan de ser un factor importante al decidir la configuración estable de la materia nuclear. Independientemente de eso, el rol de los efectos cuánticos en colisiones de dos cuerpos, está incluido de forma efectiva ya que el potencial reproduce adecuadamente las secciones eficaces de colisiones nucleares. Más aún, un camino alternativo sería utilizar potenciales dependientes del momento relativo entre los fermiones (como el introducido por Dorso y Randrup [DR88]) cuando sea necesario.

A pesar de que ninguna teoría puede arrogarse una descripción perfecta de la materia nuclear, todos los enfoques tienen sus pros y contras y aparentar ser complementarios entre

sí.

1.2.2 Classical Molecular Dynamics

A lo largo de este trabajo utilizamos para modelar la dinámica de los nucleones el CMD¹. Ha sido usado en varias reacciones de iones pesados para estudiar datos experimentales [CGL⁺02]; identificar señales de transiciones de fase y otros fenómenos críticos [LD00, BDL01, DL01, BCDL03, BDL07]; y explorar la curva calórica [BRL04] y el *isoscaling* [DEIL06, DML11]. CMD usa dos potenciales de dos cuerpos para describir la interacción entre nucleones, que son una combinación de potenciales de Yukawa:

$$V_{np}^{\text{CMD}}(r) = v_r \exp(-\mu_r r)/r - v_a \exp(-\mu_a r)/r$$

$$V_{nn}^{\text{CMD}}(r) = v_0 \exp(-\mu_0 r)/r$$

donde V_{np} es el potencial entre un neutrón y un protón, mientras que V_{nn} es la interacción repulsiva tanto entre neutrones como entre protones, como se puede ver por ejemplo para la parametrización Medium en la figura 1.3. El radio de corte es $r_c = 5,4 \text{ fm}$, y para $r > r_c$ ambos potenciales se anulan, agregando una corrección constante de $V_c = V(r_c)$ al potencial, para garantizar que sea continuo. Los parámetros de Yukawa μ_r , μ_a y μ_0 fueron determinados para resultar en una densidad de equilibrio de $\rho_0 = 0,16 \text{ fm}^{-3}$, una energía de ligadura $E(\rho_0) = 16 \text{ MeV/nucleon}$ y una compresibilidad $\kappa = 250 \text{ MeV}$.

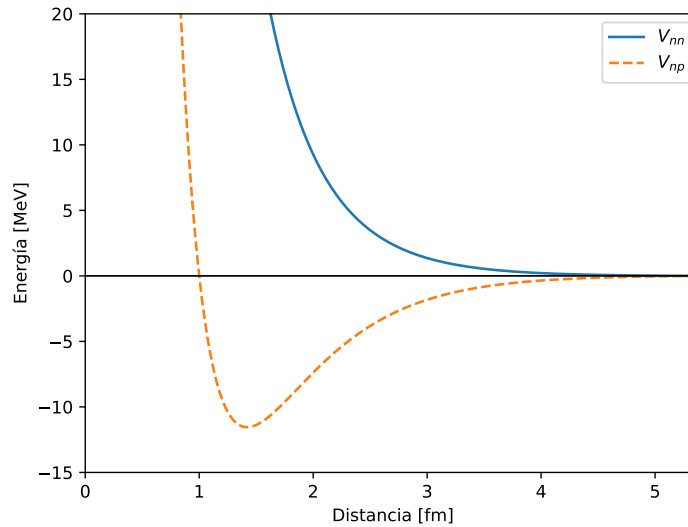


Figura 1.3: Potencial de interacción para CMD en la parametrización Medium.

¹Para detalles sobre la implementación de la dinámica molecular, ver el apéndice A.

Para simular un medio infinito, utilizamos este potencial bajo condiciones periódicas de contorno en cajas cúbicas, con distintos valores de fracción de protones, densidades y temperaturas. En trabajos anteriores [GMD15] estudiamos también el comportamiento de materia nuclear en cajas no-cúbicas. Para realizar las simulaciones, usamos LAMMPS [Pli95] con su paquete de GPU [BKPT12].

Núcleos

A pesar de que el estado a $T = 0$ de esta materia nuclear clásica a densidades normales es un sólido con estructura cúbica simple, los sistemas nucleares pueden ser obtenidos agregando energía cinética a los nucleones. Construimos estos núcleos confinando los nucleones en un potencial esférico y luego enfriándolos lentamente desde una temperatura elevada hasta que llegan a un estado de equilibrio ligado. Luego retiramos el potencial confinante y enfriamos el sistema. La figura 1.4 muestra las energías de ligadura de los estados fundamentales de los núcleos experimentales y con distintas parametrizaciones de CMD; ver [AD17a] para más detalles.

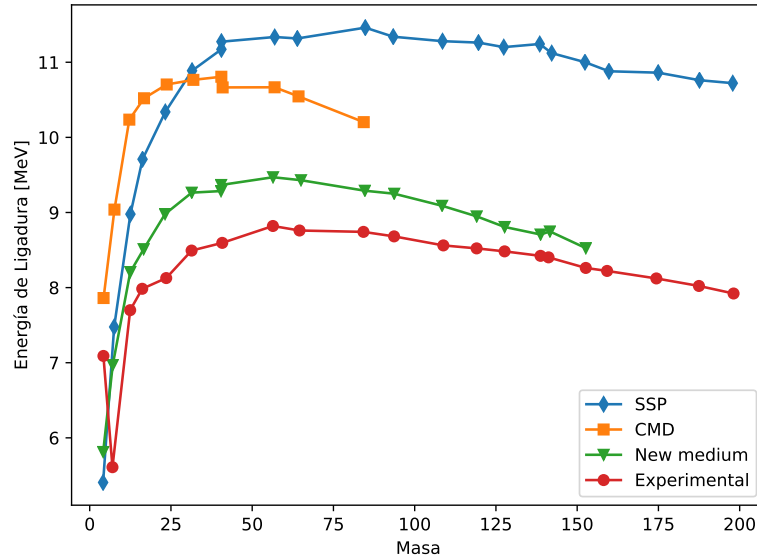


Figura 1.4: Energías de ligadura de núcleos obtenidas para SSP y distintas parametrizaciones de CMD, comparadas con la experimental extraída de Ref. [AD17a].

Colisiones Nucleares

Con respecto a las colisiones, estos potenciales reproducen las secciones eficaces de nucleon-nucleon para energías bajas e intermedias [LSP90], y fue utilizado extensivamente en el estudio de colisiones de iones pesados (ver Ref. [CGL⁺02, BDL07]). Para dichas

reacciones, dos núcleos son impulsados uno contra el otro a una energía específica. Entre colisión y colisión, el proyectil y el objetivo son rotados un con respecto al otro aleatoriamente. A cualquier punto en el tiempo la posición y momento de los nucleones es conocida y puede ser transformada en información de fragmentos y partículas libres a través de distintas técnicas de reconocimiento de fragmentos [DR93, DA95, SD97b].

Este método implica masas, momentos, energías de excitación y decaimientos secundarios comparables al experimental [BML⁺96, CGL⁺02]. La figura 1.5, por ejemplo, muestra las distribuciones de la velocidad paralela simuladas y experimentales obtenidas de la colisión de Ni+C realizadas en el *Coupled Tandem and Super-Conducting Cyclotron accelerators* de AECL en Chalk River [CGL⁺02].

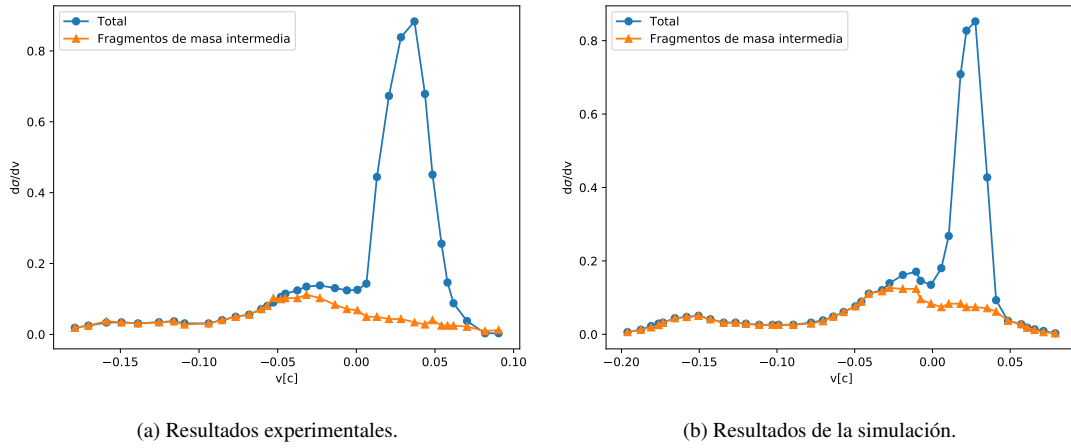


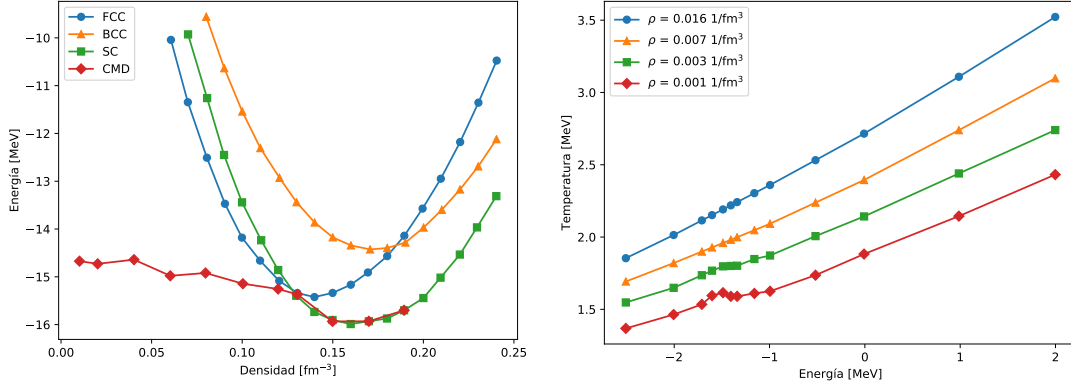
Figura 1.5: Distribuciones de velocidad paralela 1.5a experimental y 1.5b simulada para colisiones de $^{58}\text{Ni}+\text{C}$.

Propiedades termostáticas de la materia nuclear

Para estudiar las propiedades térmicas de la materia nuclear, calculamos la energía para distintos valores de temperatura. Estos valores de energía por partícula $\epsilon(\rho, T)$ pueden ser utilizados para construir ajustes analíticos, en el espíritu de los de Bertsch, Siemens y Kapusta [BJS83, Kap84, LS84]; estos ajustes, a su vez, pueden ser utilizados para encontrar otras variables termodinámicas y mecánicas, como por ejemplo la presión.

La figura 1.6a muestra los resultados de este método aplicados por Giménez-Molinelli *et al.* [GMNLD14] para materia nuclear infinita, simulada en celdas finitas con condiciones periódicas de contorno. Podemos observar que el cálculo de CMD a bajas temperaturas ($\diamond$) no coincide con la solución homogénea impuesta para distintas simetrías de los cristales ($\circ$, $\triangle$, $\square$). Esto muestra la emergencia de pseudo pastas en materia nuclear.

Para sistemas finitos, la figura 1.6b muestra el uso de CMD para estudiar las propiedades térmicas, como la curva calórica, para un sistema de 80 nucleones equilibrado a cuatro densidades diferentes; ver Ref. [DML11] para detalles completos.



(a) Energía de la materia nuclear por partícula calculada con CMD y para distintos sistemas homogéneos. (b) Curva calórica de un sistema equilibrado a cuatro densidades diferentes, calculado con CMD.

Figura 1.6: Resultados termostáticos para CMD para materia nuclear infinita y para sistemas finitos

1.2.3 Interacción de Coulomb en el Modelo

La presencia de un gas de electrones neutralizante rodea a los nucleones en la corteza de las estrellas de neutrones apantalla las fuerzas de Coulomb entre los protones. El modelo que utilizamos para este efecto de apantallamiento es la aproximación de Thomas-Fermi, utilizada en varios modelos nucleares [MNO⁺98, DGML12, HPGP04]. De acuerdo a esta aproximación, los protones interactúan a través de un potencial tipo Yukawa, con una longitud de apantallamiento λ :

$$V_{TF}(r) = q^2 \frac{e^{-r/\lambda}}{r}.$$

Estimaciones teóricas para la longitud de apantallamiento λ son $\lambda \sim 100$ fm [FW03], pero escogimos como valor $\lambda = 20$ fm. Justificamos esta elección en el capítulo 2, donde mostramos que este valor es suficiente para reproducir adecuadamente la longitud de las fluctuaciones de densidad para este modelo, mientras que valores mayores para la longitud de apantallamiento conllevarían a una dificultad computacional.

1.3 Materia de estrellas de neutrones a baja densidad y temperatura

Considerar el sistema con una interacción de Coulomb da pie a un fenómeno interesante. A densidades menores que la de saturación, el sistema exhibe una estructura inhomogénea conocida como pasta nuclear, caracterizada por la emergencia de múltiples estructura por celda de simulación. Esta pasta nuclear puede ser caracterizada como la original propuesta por Williams y Koonin (ver sección 1.1): *gnocchi*, *spaghetti*, *lasagna* y túneles. Como ejemplo, en la figura 1.7 mostramos las configuraciones de algunas de estas pastas.

Estas fluctuaciones de densidad tiene una longitud de onda del orden de los neutrinos emitidos ($\lambda \approx 15$ fm), de modo de hacer a la corteza de las estrellas de neutrones más opaca a los neutrinos. De este modo, la presencia de estas pastas podría afectar sensiblemente los tiempos de enfriamiento de las estrellas.

1.4 Choque de Estrellas de Neutrones

El 17 de agosto de 2017, LIGO observó ondas gravitacionales surgidas de la colisión de dos estrellas de neutrones [LIG17]. Son consideradas como fuentes posibles de nucleosíntesis generadas por el proceso de captura rápida de neutrones, conocido como *r-process*. Su aporte a la abundancia terrestre de núcleos terrestres aún está en discusión, pero se especula que es responsable de más de la mitad de los elementos con masa mayor a la del hierro y la única fuente de elementos más pesados que el plomo.

Este *r-process* se produce a partir de un núcleo pesado llamado *semilla* generalmente cercano al Fe. Cuando los núcleos capturan un neutrón, podrían decaer radioactivamente antes de capturar al siguiente. Para evitar que esto suceda los núcleos deberían capturar rápidamente el nucleón, de ahí el nombre *r-process*. Además, como consecuencia, para poder capturar neutrones rápidamente, es de esperar que el *r-process* se dé en condiciones en las que hay una alta densidad de neutrones libres y donde estas *semillas* sean expulsadas hacia el espacio. Estas circunstancias suceden en el caso de la colisión de estrellas de neutrones y también en el colapso del núcleo de la supernova.

La simulación con detalle microscópico de la colisión de Estrellas de Neutrones imposible en la práctica, ya que implicaría la simulación de 10^{55} partículas sólo en la corteza y la interacción de 10^{110} pares de partículas, por lo que usualmente estos estudios se realizan con un enfoque hidrodinámico más característico de las técnicas de campo medio. De este modo se intenta emular el comportamiento microscópico en la simulación detallada de la colisión.

La otra alternativa es emular los efectos de la colisión en el ambiente microscópico. Para

lograrlo sometemos a un sistema de protones y neutrones a una expansión homogénea, conocida como pequeño *big bang* [DS96], dando origen a un proceso de multifragmentación. La multifragmentación en sistemas nucleares fue estudiada antes [BBDM00, CMC⁺01], pero, a diferencia de las colisiones, fue en mayor medida con materia nuclear (sin la interacción de Coulomb). En un reciente trabajo de Caplan et al [CSHB15], se estudió la materia de estrellas de neutrones expandiéndose como posible explicación para la nucleosíntesis en colisiones de estrellas de neutrones y en otro trabajo, de este grupo [AD17a], la formación de los fragmentos en la expansión.

La compresión de la materia de estrellas de neutrones durante la colisión de dos estrellas es una posible fuente para núcleos a través del *r-process*, como fue discutido inicialmente en Ref. [LS74]. De acuerdo a modelos hidrodinámicos [GBJ11], éstos tienen coeficientes de expansión típicos de $\eta = 10^{-21} \text{ c/fm} < \eta < 4 \cdot 10^{-20} \text{ c/fm}$. Inspirados por la colisión de estrellas de neutrones, desarrollamos un estudio en la fragmentación de materia de estrellas de neutrones en expansión.

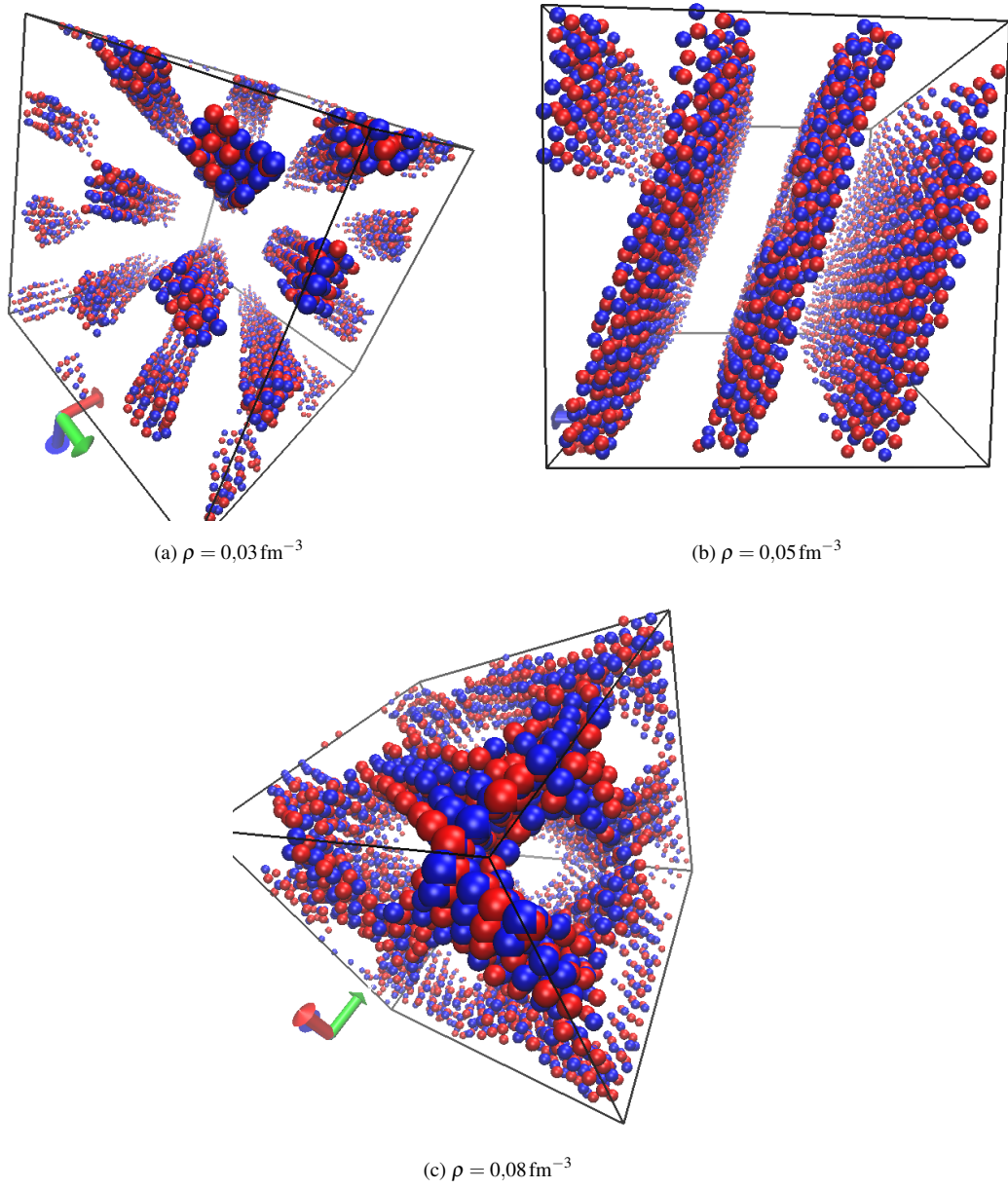


Figura 1.7: 1.7a Spaghetti, 1.7b lasagna y 1.7c túneles obtenidos con CMD, para el caso simétrico en isospín $x = 0,5$ y baja temperatura $T = 0,5 \text{ MeV}$, extraído de Ref. [AGMND14]

2. Interacción de Coulomb

En este capítulo estudiamos el rol de la interacción de Coulomb en la dinámica de los nucleones en las condiciones de la corteza de las estrellas de neutrones. Estudiamos la materia simétrica en isospín a densidades de sub-saturación ($\rho < 0,16\text{fm}^{-3}$) y temperaturas bajas ($T < 2\text{MeV}$). La interacción electrostática entre protones es incluida como un potencial de Coulomb apantallado, en el espíritu de la aproximación de Thomas-Fermi, pero variando artificialmente la longitud de apantallamiento λ para estudiar su efecto en la formación de las estructuras nucleares no homogéneas conocidas como “pasta nuclear”. A medida que aumenta la longitud de apantallamiento, podemos ver una transición de un régimen de una pasta por celda (debido exclusivamente a efectos de tamaño finito) a un régimen en el que aparecen múltiples pastas por celda. Esta diferencia cualitativa en la estructura de la materia de estrellas de neutrones a bajas temperaturas muestra que se debe tomar especial cuidado cuando la longitud de apantallamiento es estimada para simulaciones numéricas. Como observamos en trabajos previos [SHHB13, GMNLD14], en ausencia de la interacción de Coulomb (equivalente a $\lambda = 0$), estructuras tipo pastas pueden ser observadas, aunque sólo una por celda. Estas *pseudo-pastas* también tienen formas de esferas, tubos, placas, anti-tubos y anti-esferas, exactamente como la pasta con la interacción de Coulomb. La mayor diferencia es que, sin la interacción de Coulomb, encontramos siempre una única estructura por celda, lo que nos hace pensar que la estructura está relacionada con la condición periódica de contorno impuesta en la caja, La *pseudo-pasta* existe debido a efectos de tamaño finito y, si la caja no existiera, la solución sería una gota

infinita. Notamos, sin embargo, que cuando existe la interacción de Coulomb, la naturaleza competitiva de las interacciones genera una longitud característica, ya no relacionada con el tamaño de la caja sino con características físicas de la interacción. A densidades de sub-saturación esta competencia es responsable por las fases de pasta, y en el límite de densidades muy bajas le da forma a los núcleos a los que estamos acostumbrados.

Incrementar el valor de λ comenzando desde 0 fm apunta a explorar la transición de las pastas artificiales en las que se produce una estructura por celda hacia las pastas más realistas que tienen múltiples estructuras en cada celda de simulación. Más aún, esto nos permite estudiar las implicancias físicas del valor arbitrario y utilizado tradicionalmente de $\lambda = 10$ fm.

2.1 Introducción

En las estrellas de neutrones, además de los protones y neutrones, existe un gas de electrones que permea todo el espacio, haciendo que el sistema, en su conjunto, sea eléctricamente neutro. Este gas de electrones apantalla la interacción electrostática de largo rango entre los protones. Este efecto de apantallamiento es usualmente modelado con la aproximación de Thomas-Fermi, de acuerdo a la cual la interacción entre protones es un potencial del tipo Yukawa con una longitud de apantallamiento λ , conocida como longitud de Debye:

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

De acuerdo a cálculos de Teoría Cuántica de Campos [FW03, pp. 175-180], la longitud de apantallamiento a las densidades de interés es $\lambda \approx 100$ fm. Para simulaciones numéricas una interacción de rango tan largo implica un problema ya que, para realizar simulaciones correctas, el dominio de la simulación debería ser mayor que la longitud de los potenciales de interacción. El valor correcto de λ requeriría trabajar con $\approx 10^6$ partículas, y sería muy costoso de realizar computacionalmente, no tanto por el número de partículas sino por el número de pares. Al enfrentar este inconveniente, distintos autores [MWC12, HPGP04] decidieron trabajar con un valor mucho menor $\lambda = 10$ fm, con la esperanza de retener los principales aspectos cualitativos y fenomenológicos del sistema (interacciones competitivas de distinto rango) al trabajar con sistemas más pequeños. Incluso si fueran capaces de producir estructura del tipo pasta, la elección particular del valor para la longitud de apantallamiento es arbitraria y basada únicamente en detalles computacionales. Notablemente, este valor de longitud de apantallamiento fue utilizado consecutivamente

por los autores desde ese momento [MNO⁺98, HPGP04, DGML12]. En este capítulo nos centraremos en el estudio de las consecuencias físicas de esta elección arbitraria.

El rol de la longitud de apantallamiento ha sido apenas explorado en otros modelos. Por ejemplo, en un estudio del 2003 [WI03], el efecto de apantallamiento de un gas de electrones en estructuras nucleares fue investigado utilizando un modelo estático de gota líquida. En este estudio se encontró que el principal efecto del gas apantallante fue extender el rango de densidades en las que las burbujas y los fragmentos aparecían, y reducir el rango de estabilidad de fases homogéneas. A pesar de que la relevancia del apantallamiento resultó menor, es importante resaltar que el estudio no incluía ningún efecto dinámico.

Otro estudio, del 2005 [MTV⁺05], utilizó una funcional densidad para investigar el apantallamiento de la carga en estructuras nucleares a densidades menores a la nuclear, pero a temperatura cero; en particular se compararon casos con y sin apantallamiento. Los resultados principales del estudio fueron perfiles de densidad de nucleones utilizados para cuantificar el ordenamiento de las densidades de carga de protones y electrones. Nuevamente, hallaron que las regiones de densidad en las que existe la pasta se amplían cuando se considera el apantallamiento de Coulomb, especialmente debido al reordenamiento de los protones; los autores remarcan la importancia de extender este estudio a temperaturas finitas y con modelos dinámicos.

Más recientemente, algunos trabajos [SHHB13, GMNLD14] comenzaron a estudiar el efecto que tiene la interacción de Coulomb en la formación de pasta utilizando modelos dinámicos. Los hallazgos principales fueron que la pasta artificial, de una estructura por celda (*pseudo-pasta*), podía existir incluso en ausencia de interacción de Coulomb, y que existía debido a las condiciones periódicas de contorno y el tamaño finito [BBVT12].

Para caracterizar morfológicamente las estructuras utilizamos las funcionales de Minkowski [MDR01].

2.1.1 Funcionales de Minkowski

Las medidas morfológicas de un cuerpo convexo $K \in \mathcal{R}$ se definen como funcionales $\varphi : \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfacen tres propiedades:

- **Invariancia de movimiento:** $\varphi(K) = \varphi(g(K))$, donde $g(K)$ implica cualquier tipo de traslación y rotación del cuerpo K .
- **Aditividad:** $\varphi(K_1 \cup K_2) = \varphi(K_1) + \varphi(K_2) - \varphi(K_1 \cap K_2)$.
- **Continuidad:** $\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(K_n) = \varphi(K)$ si $\lim_{n \rightarrow \infty} K_n = K$, donde K_n es un conjunto de cuerpos convexos.

El teorema de Hadwiger dice que para un sistema de dimensión d hay sólo $d + 1$ funcionales independientes que satisfacen las propiedades mencionadas: las funcionales de

Minkowski. En el espacio tridimensional, las funcionales de Minkowski están asociadas al volumen, el área, la curvatura media y el número de Euler. A pesar de que no necesariamente las estructuras obtenidas en este trabajo sean convexas (es decir, las funcionales de Minkowski no las definen unívocamente), utilizamos estas medidas para caracterizarlas. En el apéndice B se puede observar detalladamente el cálculo de estas magnitudes.

2.2 Longitud de apantallamiento “crítica”

Una forma de analizar la naturaleza de la pasta obtenida es a través de la presión de las distintas configuraciones, que se puede medir a través de la fórmula del virial

$$P = \frac{N k_B T}{V} + \frac{1}{3} \frac{\sum_i^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i}{V}$$

donde N es el número de partículas en el sistema y $\mathbf{F}$ la fuerza ejercida sobre cada nucleón. Los términos en la fórmula del virial se aplican sólo a las interacciones específicas del modelo, sin contemplar la presión del gas de electrones. Esta presión no debe ser confundida con la presión real en la corteza de las estrellas de neutrones (ya que los electrones deberían ser considerados explícitamente para calcularla adecuadamente), sino simplemente una prueba de la estabilidad mecánica de las configuraciones obtenidas con este modelo. En la figura 2.1 vemos que para todo $\lambda < 10\text{fm}$ la presión es negativa.

La presión negativa es una señal de que las estructuras no-homogéneas encontradas son artificiales, y que las estructuras sólo pueden existir bajo condiciones periódicas de contorno (ver [BBVT12, GMNLD14]). Podemos pensar al sistema como la celda primitiva de la simulación bajo la tensión causada por sus réplicas periódicas. Esto significa que, para longitudes de apantallamiento tan bajas, la interacción efectiva es atractiva y las condiciones periódicas de contorno todavía juegan un rol importante en la forma del estado de mínima energía.

Para $\lambda > 10\text{fm}$ la presión se vuelve positiva, lo que quiere decir que las estructuras que se forman en estas configuraciones no se deben sólo a las condiciones periódicas de contorno, sino que la interacción de Coulomb está comenzando a jugar un rol. Las configuraciones para estos valores de λ muestran efectivamente fluctuaciones de densidad de longitud menor que el tamaño de la caja, que sólo pueden ser atribuidas a la competencia entre el término de Coulomb y el término nuclear. Sin embargo, la forma de las estructuras, caracterizadas a través de las funcionales de Minkowski, cambia drásticamente con λ .

Para clasificar las estructuras de bajas temperaturas ($T = 0,001\text{MeV}$) para cada valor de λ , estudiamos su morfología con las herramientas de análisis para la distribución espacial de partículas: las funcionales de Minkowski. En las figuras 2.2 podemos ver la

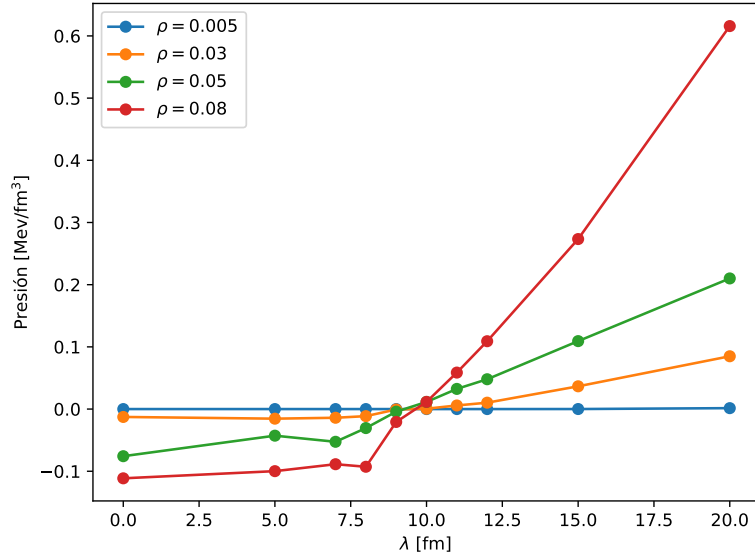


Figura 2.1: Presión como función del apantallamiento λ para distintas densidades. Podemos ver que para $\lambda < 10$ fm la presión es negativa, sugiriendo que las condiciones periódicas de contorno están afectando la morfología de la solución.

superficie, curvatura y número de Euler para los estados hallados y su dependencia con λ para distintas densidades.

Tabla 2.1: Clasificación Ancho - Euler

	Ancho < 0	Ancho ~ 0	Ancho > 0
Euler > 0	Anti-Gnocchi (Burbujas)	Lasagna	Gnocchi
Euler ~ 0	Anti-Spaghetti (Túneles)		Spaghetti
Euler < 0	Anti-Jungle Gym		Jungle Gym

Como se muestra en la tabla 2.1, esperamos que *lasagna* y *spaghetti* tengan un número de Euler $\chi = 0$. Para el caso de los *gnocchi*, sin embargo, cada uno de ellos contribuye con $\chi_{gn} = 2$. Esto significa que el número de Euler para todo el sistema de N_{gn} *gnocchi* será $\chi = 2 \cdot N_{gn}$. A medida que las configuraciones se parten en múltiples estructuras por celda al aumentar λ , esperamos que también aumente la superficie. En cuanto al ancho medio, el comportamiento descrito en la tabla 2.1 (positivo para *spaghetti* y *gnocchi*, cero para *lasagna* y negativo para túnel sólo se observa para $\lambda = 20$ fm. Entre $\lambda = 7$ fm y $\lambda = 10$ fm las tres funcionales de Minkowski cambian drásticamente antes de alcanzar valores bien definidos. Esto indica que hay un régimen de transición en el que las estructuras no

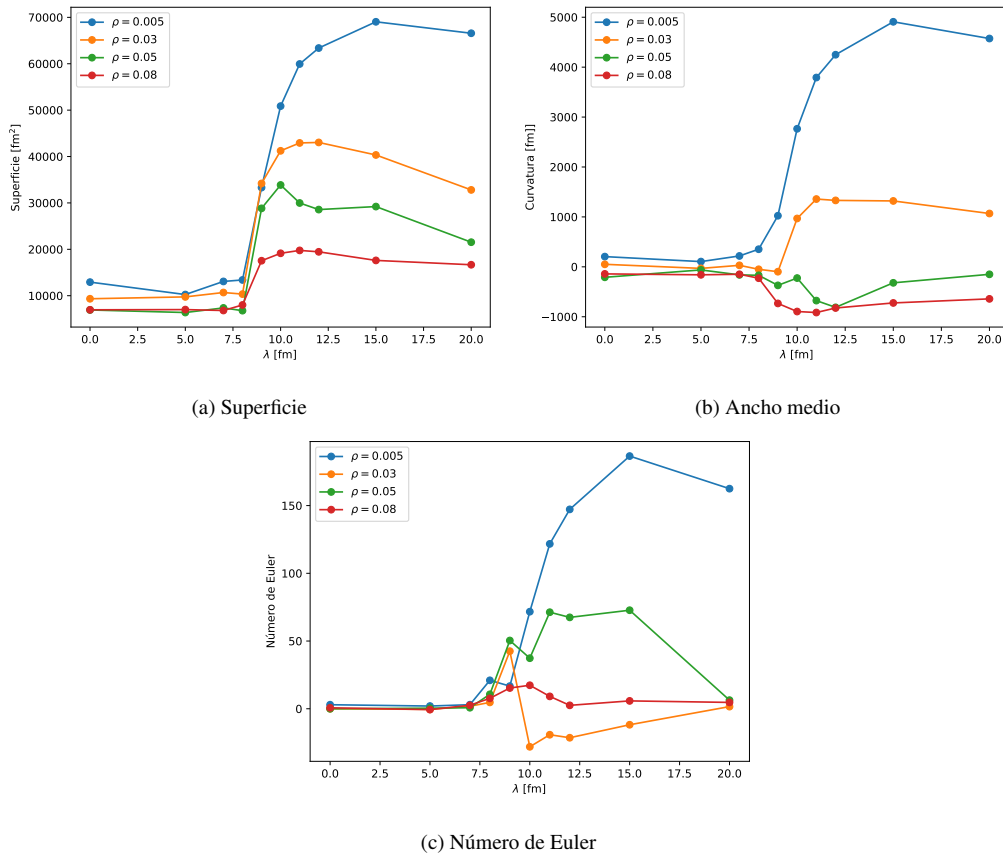


Figura 2.2: Dependencia de las funcionales de Minkowski con λ . Podemos observar un régimen de transición entre $\lambda = 7$ fm y $\lambda = 15$ fm, donde las funcionales de Minkowski cambian.

se pueden describir como cualquiera de las pastas tradicionales. Para este modelo de interacción nuclear y Coulomb, todo parece indicar que el valor usual de $\lambda = 10$ fm es demasiado bajo.

2.3 Régimen de una pasta por celda

Para comprender mejor cómo el estado de equilibrio a bajas temperaturas varía a través del régimen de transición desde la inexistencia de Coulomb hacia un apantallamiento de $\lambda = 20$ fm, mostramos en la figura 2.3 representaciones visuales de los resultados obtenidos para un conjunto de densidades elegidos, con $\lambda = 0$, $\lambda = 10$ fm y $\lambda = 20$ fm. Vemos que obtenemos estructuras exóticas para $\lambda = 10$ fm en los tres casos, que son variaciones de la estructura típica de la pasta que pueden deberse al complicado paisaje de energías para estos valores de λ .

Como ejemplo, mostramos la función distribución de pares, $g(r)$, para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$

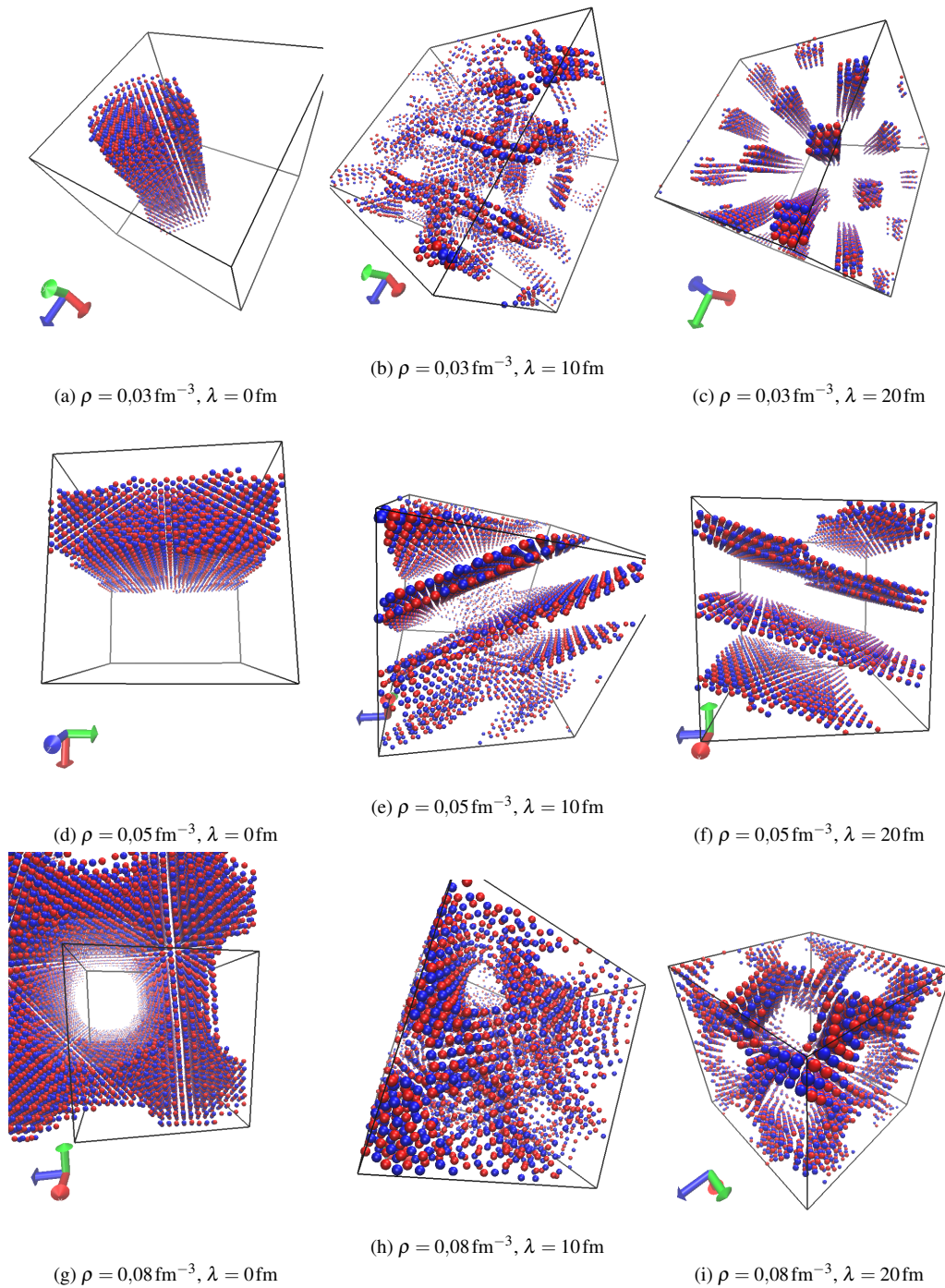


Figura 2.3: Diferencia entre pasta con y sin interacción de Coulomb. Podemos ver que la interacción de Coulomb separa la pasta, convirtiendo una estructura por celda en múltiples estructuras por celda.

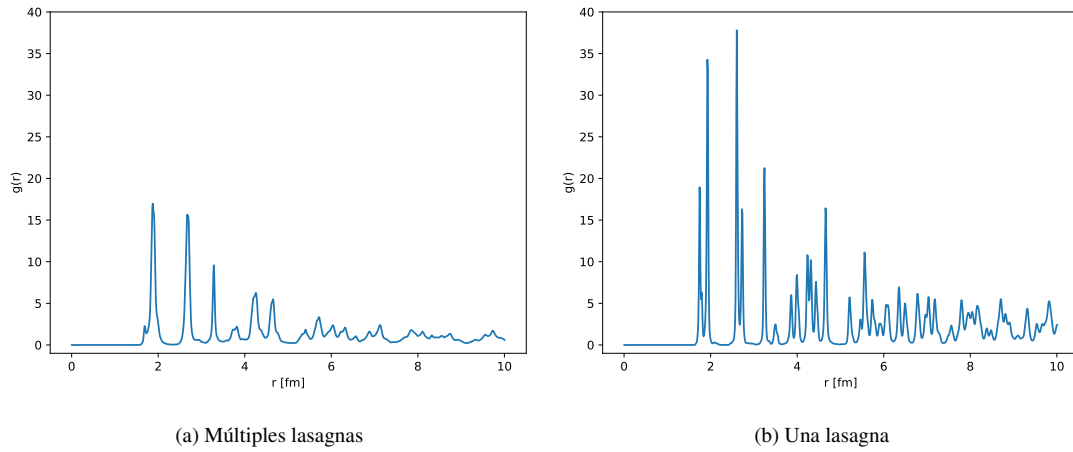


Figura 2.4: Ejemplos de la función distribución de pares para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y dos longitudes de apantallamiento: $\lambda = 20 \text{ fm}$ y $\lambda = 0 \text{ fm}$. Notar la diferencia en escalas en el eje y para los dos gráficos.

en la figura 2.4. Aquí vemos que los primeros picos de la distribución se mantienen en las mismas distancias de $r = 1,7 \text{ fm}$, $1,9 \text{ fm}$ para ambas configuraciones. Esto muestra que la estructura de rango corto está gobernada por el potencial nuclear incluso a $\lambda = 20 \text{ fm}$, evidente simplemente al comparar los órdenes de magnitud de V_{n-n} y V_{Coulomb} para esos rangos.

Para la densidad $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$, para longitudes de apantallamiento $\lambda < 10 \text{ fm}$, hay un solo *gnocchi*. Sin embargo, cuando aumentamos de $\lambda = 15 \text{ fm}$ a $\lambda = 20 \text{ fm}$ para $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$, aunque cualitativamente vemos el mismo comportamiento (ambos muestran *gnocchi*), el tamaño promedio de los fragmentos varía para estos dos valores; de ahí la diferencia observada en las funcionales de Minkowski. Para estudiar este resultado, graficamos el tamaño de los *gnocchi* como función de λ en la figura 2.5. Vemos que, cuando tenemos en cuenta la varianza en la distribución de masa, se mantiene estable para $\lambda \geq 20 \text{ fm}$.

Podemos ver que aunque todas las estructuras sin Coulomb son alguna de las pastas conocidas, una vez que agregamos la interacción de Coulomb (haciendo $\lambda \neq 0$), la *pseudo-pasta* original de $\lambda = 0$ se separa: de una estructura por celda a múltiples estructuras por celda. Para valores intermedios a bajos de $\lambda < 20 \text{ fm}$, el efecto de las condiciones periódicas de contorno es todavía observable para algunas densidades y pueden aparecer estructuras exóticas que no forman parte de las pastas usuales.

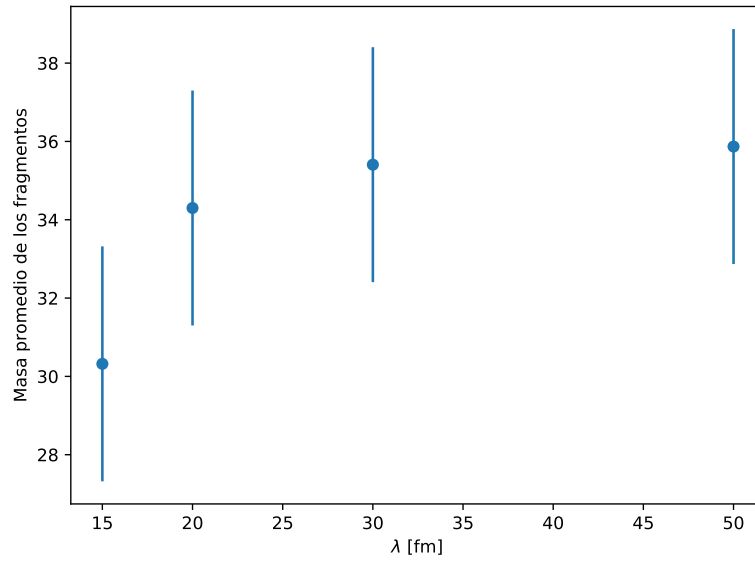


Figura 2.5: Tamaño promedio de los *gnocchi* dependiendo de la longitud de apantallamiento.

2.4 El Régimen de Transición

Vamos a estudiar ahora las estructuras halladas en el régimen de transición para los apantallamientos $8 \text{ fm} \lesssim \lambda \lesssim 15 \text{ fm}$. Tomemos, por ejemplo, la densidad más baja ($\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$). Como podemos ver de la figura 2.6, para $\lambda = 0$ sólo se forma una gota, como era de esperar. Para $\lambda = 10 \text{ fm}$ aparecen muchos *gnocchi*, pero algunos de ellos se adhieren a sus vecinos, formando estructuras proladas de diferentes tamaños. A pesar de que la interacción de Coulomb es ahora suficientemente grande como para partir la estructura monolítica hallada con $\lambda = 0$ en varias, las gotas resultantes no son los usuales *gnocchi* que se ordenan en una red regular, como sí lo son las halladas para $\lambda = 20 \text{ fm}$.

En la figura 2.3 se puede observar también que las estructuras tipo *lasagna*, *spaghetti* y túneles que están bien demarcadas para $\lambda = 20 \text{ fm}$ no se forman para $\lambda = 10 \text{ fm}$. Un ejemplo digno de atención es para la densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$, en el que se observa una estructura parecida a las *lasagnas* pero interconectada.

2.5 Conclusiones

Estudiamos el efecto de la longitud de apantallamiento de la interacción de Coulomb en las simulaciones de materia de estrellas de neutrones a densidades compatibles con las de la corteza de las estrellas de neutrones. A lo largo de la literatura podemos encontrar que el valor de la longitud de apantallamiento en la aproximación de Thomas-Fermi es

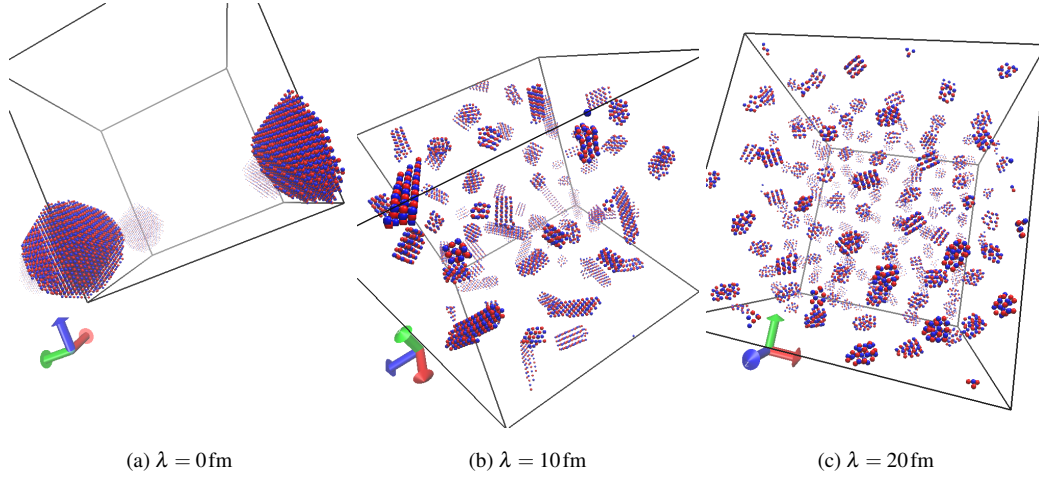


Figura 2.6: Diferentes estructuras halladas al variar la longitud de apantallamiento λ , para $\rho = 0,005 \text{ fm}^{-3}$. En el régimen de transición hallamos, para $\lambda = 10 \text{ fm}$, que la estructura se parte en varios fragmentos prolados, parecidos a *spaghetti* cortados.

$\lambda \approx 100 \text{ fm}$. Para simulaciones basadas en partículas, debido a las limitaciones computacionales, este valor fue históricamente y arbitrariamente reducido a $\lambda \approx 10 \text{ fm}$, esperando mantener la fenomenología básica cuando se estudiaban sistemas pequeños. Encontramos, sin embargo, que existe para nuestro potencial una longitud de apantallamiento crítica λ_c a la cual la estructura del estado fundamental cambia drásticamente. Para el potencial de Pandharipande en su parametrización Medium, yace entre 10 fm y 15 fm (dependiendo de la densidad). Para $\lambda < \lambda_c$, la interacción de Coulomb apenas actúa y las estructuras no homogéneas que emergen de las simulaciones se deben a efectos de tamaño finito y las condiciones periódicas de contorno, como es evidente a partir de la presión negativa de estas estructuras y el hecho de que hay sólo una estructura por celda. Para $\lambda > \lambda_c$ la presión se vuelve positiva y los sistemas presentan fluctuaciones de densidad a una escala menor que la de la celda, pero no con la forma de la pasta típica. Este régimen de transición se caracteriza por grandes fluctuaciones en la superficie, ancho medio y característica de Euler χ de las estructuras. Es recién para $\lambda = 20 \text{ fm}$ que la morfología de las estructuras se estabiliza y deja de depender de λ . Más aún, las estructuras en este régimen son las pastas usuales.

Debido a esto, consideramos que se tiene que tomar extrema precaución cuando se elige un valor arbitrario de λ , ya que, si bien algunos resultados a $\lambda = 10 \text{ fm}$ pueden ser como la pasta esperada, los resultados obtenidos para esa elección particular de λ pueden ser cualitativamente diferente de aquellos en la correcta aproximación de Thomas-Fermi. En conclusión, encontramos que la elección de un buen valor para λ que vuelve al

sistema computable computacionalmente y puede adecuadamente recuperar la física de la aproximación de Thomas-Fermi no es una tarea trivial, y se necesita un estudio riguroso antes de escogerlo. Un buen valor de λ debe ser mayor a la longitud de apantallamiento crítica λ_c , que depende del modelo utilizado para la interacción nuclear.

3. Transiciones de fase

En este capítulo tratamos las distintas escalas espaciales que aparecen en la dinámica de los nucleones en condiciones acordes a las de la corteza de las estrellas de neutrones, estudiando materia simétrica en isospín (igual cantidad de protones y neutrones) a densidades menores a la de saturación para 5000 partículas. Variando la temperatura encontramos una transición de fase sólido-líquido que se puede caracterizar también como una transición topológica. Para temperaturas más altas que la de la transición de fase estudiamos la opacidad de los neutrinos y encontramos que en la fase líquida el *scattering* de los neutrinos de bajo momento se mantiene elevado, incluso con morfologías que son significativamente diferentes a las de la pasta nuclear tradicional.

3.1 Introducción

Además de las clásicas señales termodinámicas para las transiciones de fase de primer o segundo orden, utilizamos el coeficiente de Lindemann. El coeficiente de Lindemann se basa en las fluctuaciones de las partículas alrededor del punto de equilibrio, y es utilizado especialmente para estudiar transiciones de tipo sólido-líquido en sistemas infinitos, como los cristales. Se define a partir de la desviación estándar de las posiciones de las partículas, Δr_i^2 :

$$\Delta_L = \frac{\sqrt{\sum_i \langle \Delta r_i^2 \rangle / N}}{a}$$

donde a es la constante de red del cristal y N el número total de partículas. En nuestro caso, escogemos $a = (V/N)^{1/3}$, la longitud característica del sistema.

Para estudiar la estructura utilizamos las funcionales de Minkowski descritas en el capítulo 2 y la función distribución de pares, que esta relacionada con el número promedio de neutrones a una distancia r de un neutrón, en una cáscara de ancho dr a través de la relación:

$$dn = \frac{N}{V} g(r) 4\pi r^2 dr \quad (3.1)$$

3.2 Transición de fase

3.2.1 Transición de fase termodinámica

La figura 3.1 presenta la energía como función de la temperatura (curva calórica) para distintas densidades. Cada una de estas densidades exhibe una discontinuidad en la energía para ciertas temperaturas, una señal de una transición de fase de primer orden. Esta transición puede ser confirmada y caracterizada como de sólido-líquido observando el coeficiente de Lindemann. Como ejemplo, en la figura 3.2 mostramos el coeficiente de Lindemann junto a la energía para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. Esta figura muestra que las discontinuidades en la energía y en el coeficiente de Lindemann están a la misma temperatura. Éstas dos son características de la transición de fase sólido-líquido.

En la figura 3.3 mostramos la función de distribución de pares para tres densidades distintas: $\rho = 0,03 \text{ fm}^{-3}$ (*spaghetti*), $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ (*lasagna*) y $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$ (túneles), inmediatamente sobre y bajo la temperatura de transición, así como una foto del sistema en la fase de temperatura alta. Como los primeros picos (correspondientes a los primeros vecinos) están en la misma posición más allá de la temperatura, concluimos que el orden corto está presente tanto sobre como bajo la transición. Sin embargo los los picos de los terceros vecinos, distintivos de las fases sólidas, desaparecen a medida que la temperatura aumenta más allá de la transición. El orden de muy largo rango también sobrevive a la transición, como discutimos más adelante en la sección 3.3

3.2.2 Transición de fase topológica/morfológica

Cuando observamos los funcionales de Minkowski, particularmente la característica de Euler y el ancho medio, observamos que también hay una temperatura “crítica” en la cual ambas magnitudes exhiben una transición abrupta. Mostramos, como un ejemplo, estas magnitudes como función de la temperatura para la densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ en la figura 3.4. Como esta transición está señalada por los observables morfológicos, concluimos que

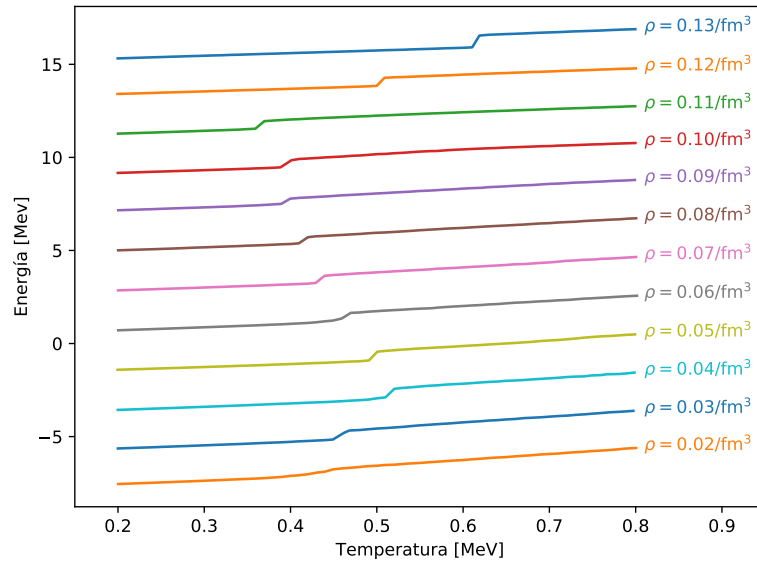


Figura 3.1: Energía como función de la temperatura para distintas densidades. Observamos una discontinuidad en el rango desde $T_l = 0,35$ MeV a $T_h = 0,65$ MeV, dependiendo de la densidad, lo que marca una transición de fase.

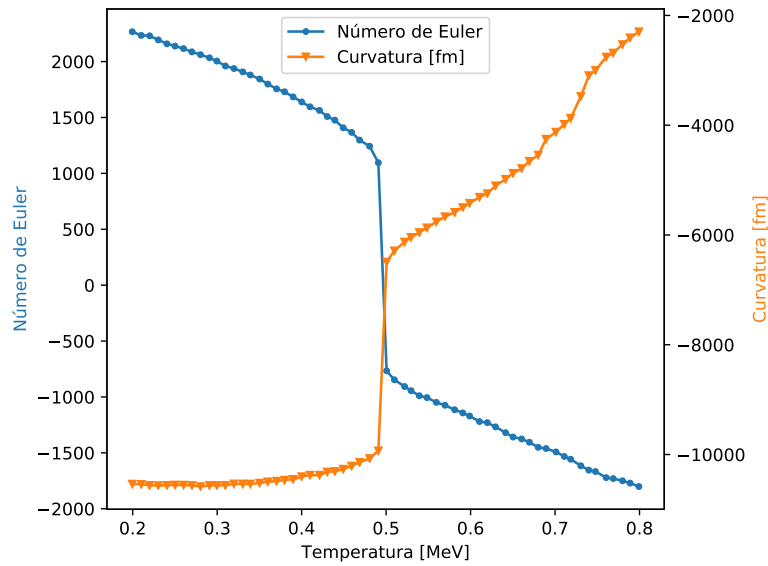
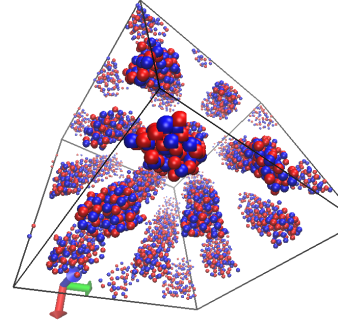
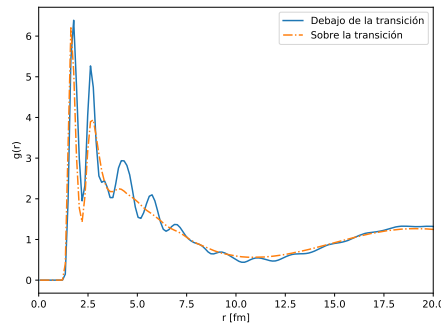


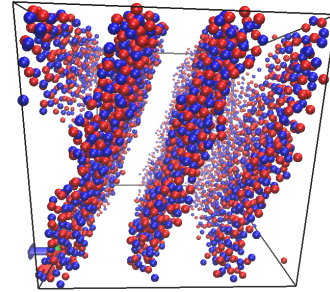
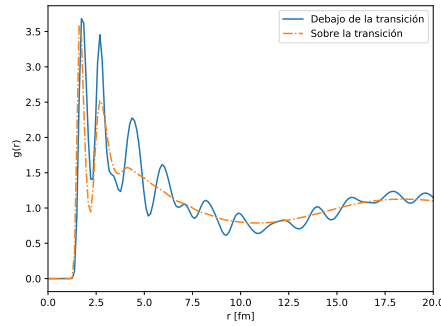
Figura 3.2: Coeficiente de Lindemann y energía como función de la temperatura para una densidad, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. El cambio abrupto en su valor es una señal de una transición de fase sólido-líquido. Podemos ver que ambas discontinuidades están a la misma temperatura.

es una transición también morfológica y topológica, que se forma porque las partículas comienzan a moverse dentro de la estructura, dejando agujeros en su interior.



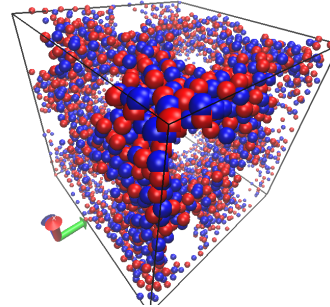
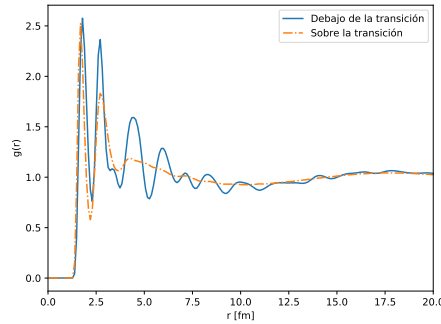
(a) Función de distribución de pares para $\rho = 0,03 \text{ fm}^{-3}$

(b) Foto del sistema en la fase líquida para $\rho = 0,03 \text{ fm}^{-3}$



(c) Función de distribución de pares para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$

(d) Foto del sistema en la fase líquida para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$



(e) Función de distribución de pares para $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$

(f) Foto del sistema en la fase líquida para $\rho = 0,08 \text{ fm}^{-3}$

Figura 3.3: Función de distribución de pares para distintas densidades, tanto debajo como sobre la temperatura de transición, y foros del sistema en la fase líquida. Aunque los primeros picos de la distribución están en las mismas posiciones para ambas temperaturas, los picos siguientes, que exhiben un orden de rango largo típico de los sólidos, sólo están presentes por debajo de la temperatura de transición.

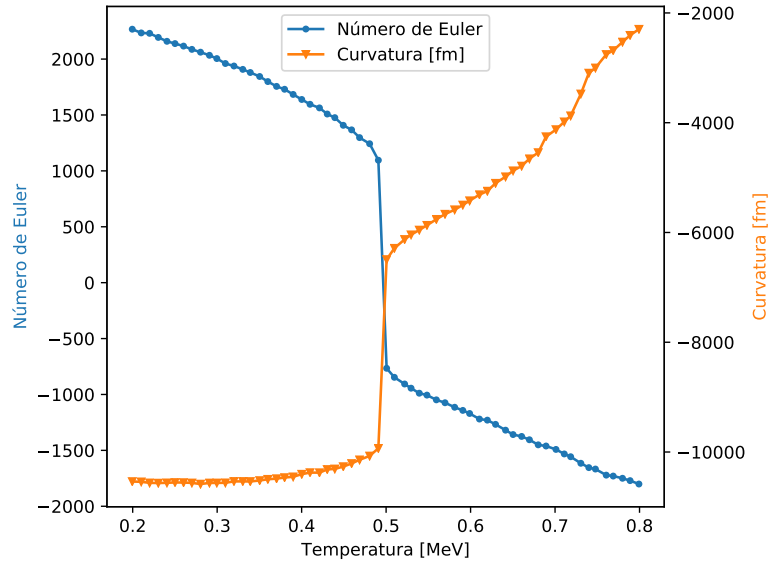


Figura 3.4: Número de Euler y ancho medio para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. Observamos una transición abrupta para ambas funcionales de Minkowski.

Estas señales de una transición sólido-líquido (discontinuidad en la energía y en el coeficiente de Lindemann) y morfológica (discontinuidad en las funcionales de Minkowski) se producen a la misma temperatura de transición, como se puede observar en el diagrama de fases de la figura 3.5. Esto significa que, a medida que el sistema es enfriado a un volumen fijo, sufre una transición termodinámica y morfológica a la misma temperatura. Un detalle importante es el valor del radio que asociamos a cada partícula para digitalizar la imagen. Aumentar el valor de este radio puede permitir que no se aprecien los huecos que se forman en el interior de la estructura, que puede ser útil si se quisiera hacer más hincapié en la forma de las estructuras que en la distribución de partículas dentro de ella.

3.3 Comportamiento de muy largo rango

Además de que desaparece el orden de corto largo característico de los sólidos, otra característica es evidente de la figura 3.3. Una modulación de muy largo en la función de distribución de pares sobrevive a través de la transición de sólido-líquido. Este orden de muy largo rango es característico de las fases de la pasta. En la figura 3.6 mostramos la configuración espacial para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$, para temperaturas tanto sobre como debajo de la temperatura de transición. En ella vemos que no sólo la fase sólida tiene la forma usual de la pasta, sino que además la fase líquida la preserva. Debajo de la transición, tenemos “pasta congelada”. Justo por sobre ella, los nucleones pueden fluir, pero confinados a cierta

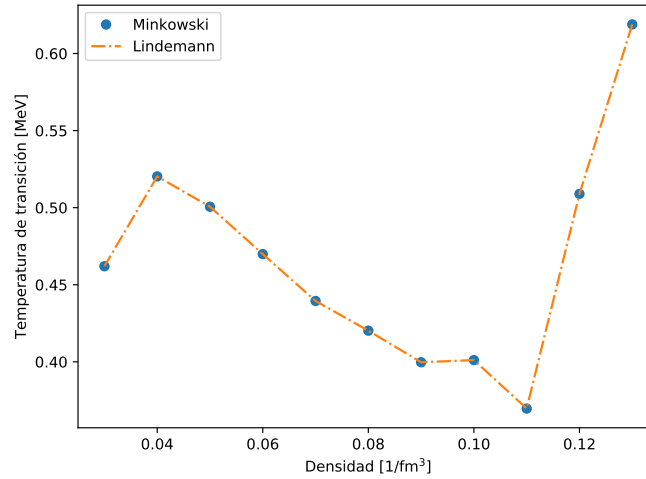


Figura 3.5: Temperatura crítica como función de la densidad. Observamos la superposición entre la temperatura crítica de las funcionales de Minkowski y el coeficiente de Lindemann.

pasta o estructura tipo pasta, como vemos en las siguientes secciones.

3.4 Propiedades de transporte de neutrinos

Este orden de muy largo rango, evidente de la figura 3.3, es responsable del pico a muy bajo momento k (longitud de onda $\lambda \gtrsim 15 \text{ fm}$) en el factor de estructura $S(k)$ (cuyo cálculo se puede encontrar en el apéndice D), proporcional a la probabilidad de scattering. Con esto en mente, ahora nos enfocamos en el orden de muy largo rango para nuestras estructuras.

En la figura 3.7 graficamos la altura del pico del factor de estructura para momentos bajos $S(k < 0,5 \text{ fm}^{-1})$ ($\lambda \gtrsim 13 \text{ fm}$) como función de la temperatura para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. La forma más intuitiva para leer esta figura es de derecha a izquierda (de temperaturas altas a bajas), reproduciendo el procedimiento de enfriado del sistema en nuestras simulaciones. Cada línea corresponde a evoluciones con distintas condiciones iniciales, pero manteniendo el mismo protocolo de enfriamiento y los mismos criterios de estabilidad.

A temperaturas suficientemente altas ($T \sim 2 \text{ MeV}$) los nucleones están distribuidos de forma bastante homogénea, y no se evidencia ninguna estructura a partir de la $S(k)$: el “pico” desaparece, tendiendo a 1 (el valor para sistemas homogéneos). A medida que la temperatura decrece aparece un pico en los momentos bajos. La transición descrita en la sección 3.2 se manifiesta en la figura 3.7 a partir de la ausencia de fluctuaciones para temperaturas menores a la de transición $T \lesssim 0,5 \text{ MeV}$. Incluso a temperaturas altas como $T = 1,0 \text{ MeV}$ aún hay un pico de absorción reconocible para momentos bajos (con altura

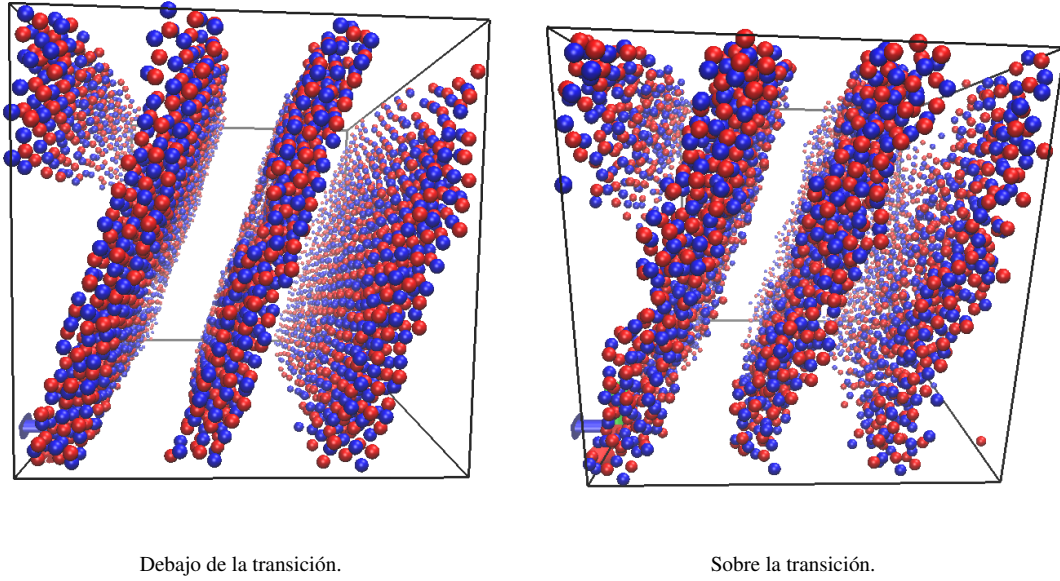


Figura 3.6: Distribución espacial para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$, tanto sobre como debajo de la temperatura de transición. Las estructuras son similares, pero mucho más desordenadas sobre la transición.

claramente mayor a 1), pero no siempre se corresponde a la forma de una pasta usual (*gnocchi*, *spaghetti* o *lasagna*) en nuestras simulaciones. A estas temperaturas, y para la mayoría de las densidades, la estructura del sistema es parecida a una “esponja” que tiene, de cualquier modo, inhomogeneidades lo suficientemente notables como para producir un pico reconocible en $S(k)$.

Es interesante notar que cuando el sistema llega a temperaturas de $T \sim 0,7 \text{ MeV}$ observamos que realizaciones de la simulación con distintas condiciones iniciales llevan a que el sistema “colapse” en distintas estructuras, además de la *lasagna* usual. Podemos observar en detalle la altura del pico de $S(k)$ para esta región de temperaturas en la figura 3.8 y las estructuras que corresponden a cada una de las simulaciones en la figura 3.9 (ver epígrafe para detalles).

3.5 Propiedades de pasta no tradicional

Las pastas usuales son estados de mínima energía potencial. Estas estructuras no tradicionales descritas en la sección anterior son, probablemente, mínimos *locales* de energía potencial, que abundan en sistemas frustrados como éste. La complejidad del paisaje de la energía (muchos mínimos locales separados por barreras de energía) hacen difícil alcanzar

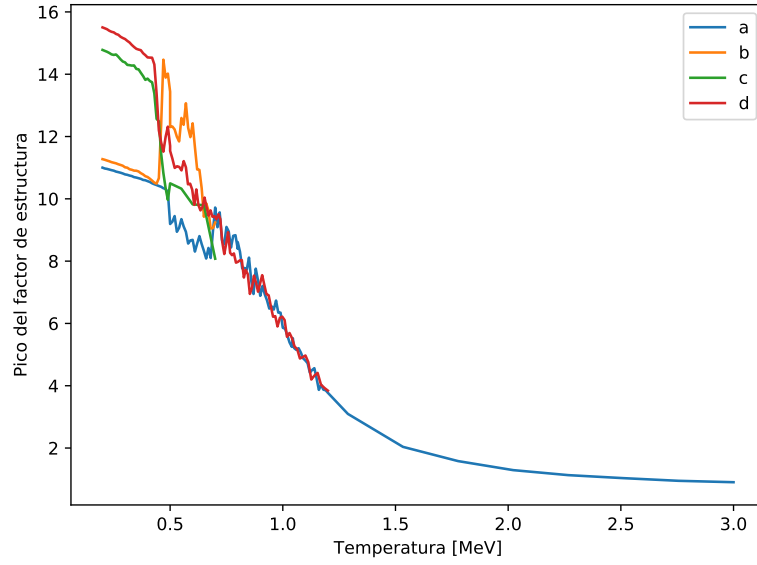


Figura 3.7: Pico de $S(k)$ para momentos bajos como función de la temperatura, para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$. Observamos dos comportamientos para $T < 0,5 \text{ MeV}$ y $T > 0,5 \text{ MeV}$.

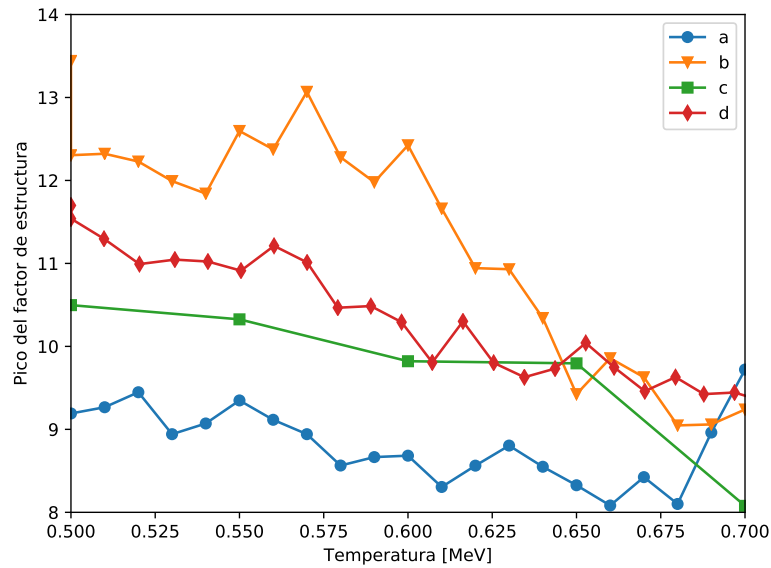


Figura 3.8: Pico de $S(k)$ para momentos bajos, en el rango de temperaturas entre $T = 0,5 \text{ MeV}$ y $T = 0,7 \text{ MeV}$. Observamos que distintas condiciones iniciales conducen a distintos picos de absorción para bajos momentos.

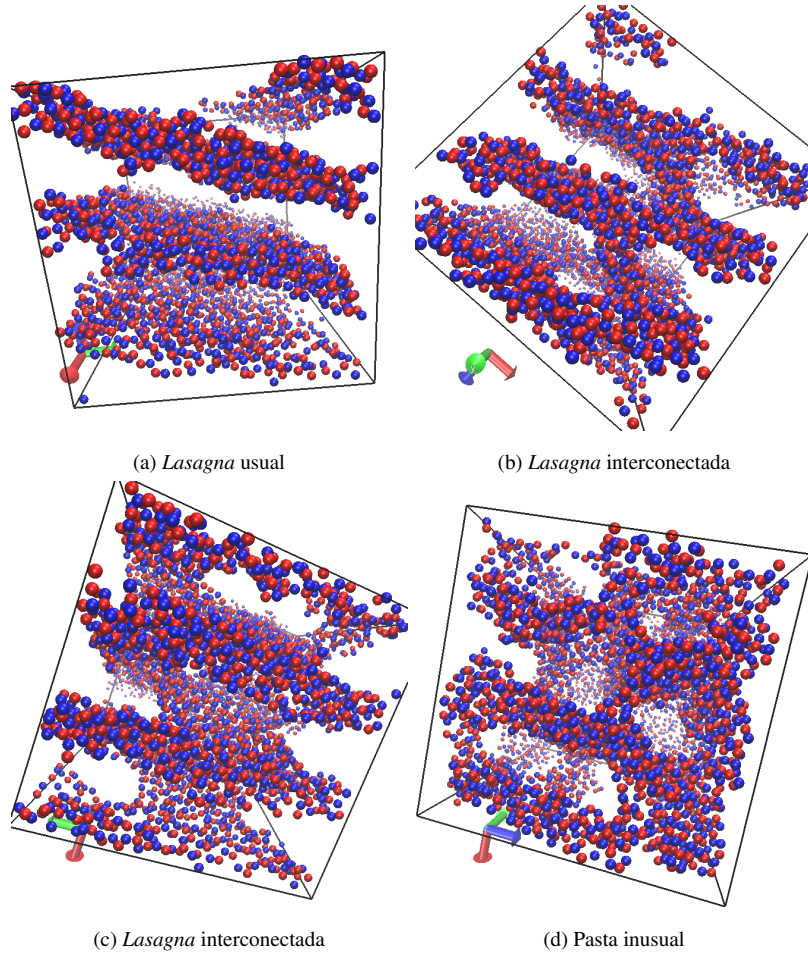


Figura 3.9: Estructuras del sistema para $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ para distintas condiciones iniciales. Podemos observar la *lasagna* usual, pero también *lasagnas* interconectadas y otras estructuras que no se parecen a la pasta usual. A pesar de ser distintas de las formas de la pasta usual, estas estructuras tienen un pico para momentos bajos en el factor de estructura.

el estado de mínima energía simplemente enfriando en simulaciones de dinámica molecular. Sin embargo, como estamos trabajando con un número fijo de partículas, volumen y temperatura (ensamble (N, V, T)), el estado de equilibrio a temperaturas finitas no es el que minimiza la energía interna, sino el que minimiza la energía libre de Helmholtz, $A = E - TS$. Todas estas estructuras, en conclusión *podrían ser* la solución de equilibrio.

Cálculos precisos de energías libres a partir de simulaciones de dinámica molecular son muy costosos computacionalmente [FS01, pp. 167-200], especialmente a bajas temperaturas, cuando sobrepasar las barreras de energía es un evento muy poco probable. Sin embargo, podemos calcular fácilmente las distribuciones de energía interna en una evolución temporal a temperatura constante. En la figura 3.10 mostramos los histogramas

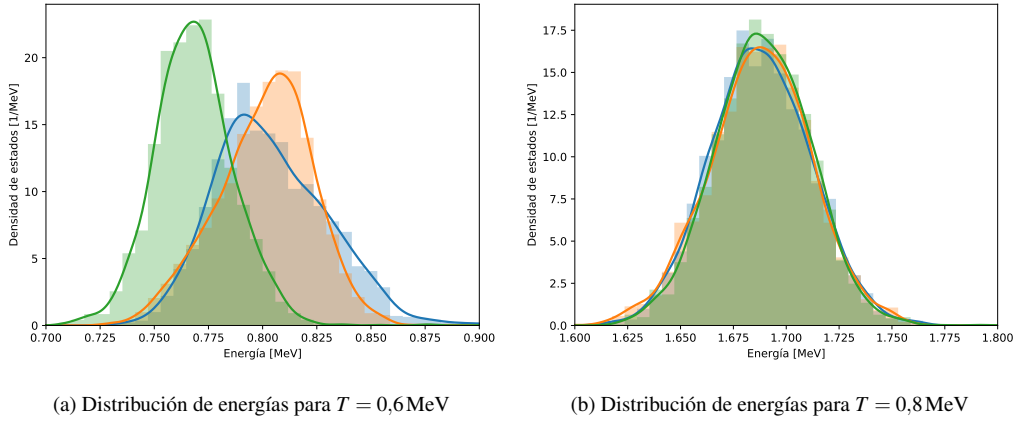


Figura 3.10: Distribución de energías para un ensamble canónico. Se puede observar que, para $T = 0.8 \text{ MeV}$, las tres distribuciones se solapan completamente. Sin embargo, para $T = 0.6 \text{ MeV}$, los histogramas, aunque aún se solapan significativamente, están separados.

de energía contruidos a partir de sistemas termalizados en una muy larga evolución, a temperatura $T = 0.6 \text{ MeV}$, utilizando tres de los sistemas mostrados en 3.9 como condiciones iniciales. Podemos ver que, a pesar de que los histogramas difieren claramente, se superponen bastante. Esto indica que el ensamble de configuraciones de equilibrio a $T = 0.6 \text{ MeV}$ (y más bajas) podría contener cualquiera de estas estructuras, no sólo *lasagna*. A la luz de esto, proponemos que a temperaturas bajas pero finitas, el estado del sistema debería ser descrito como un ensamble de pastas tradicionales y no tradicionales. Cuando calentamos el sistema hasta $T = 0.8 \text{ MeV}$ estos tres histogramas se vuelve indistinguibles, dando a suponer que, para esta temperatura, se pueden superar las barreras de energía libre y el sistema es ergódico.

Estas observaciones son relevantes porque todas estas estructuras muestran picos en $S(k)$ a la misma longitud de onda, aunque alturas distintas. Y, más importante, encontramos que estas estructuras que parecen sin forma pueden ser incluso más eficientes en el *scattering* de neutrinos que cualquier pasta usual, a pesar de que éstas son usualmente invocadas como una necesidad para el *scattering* coherente de neutrinos. Este resultado muestra que pastas inusuales también deben ser consideradas cuando estudiamos la estructura de la corteza de las estrellas de neutrones.

3.6 Conclusiones

Encontramos una transición de fase de tipo sólido-líquido para todas las densidades estudiadas a temperaturas muy bajas, que caracterizamos a través del coeficiente de

Lindemann y de una discontinuidad en las curvas calóricas. La transición también está marcada por una discontinuidad en los funcionales de Minkowski, y estos tres indicadores concuerdan en la misma temperatura de transición. Esta transición no altera la forma típica de la pasta (*lasagna* y *spaghetti* en los ejemplos mencionados): la fase líquida preserva la forma de la pasta encontrada en la fase sólida.

A medida que aumentamos la temperatura más allá de $T = 0,7 \text{ MeV}$, las formas típicas de la pasta se vuelven inestables y el sistema adopta estructuras ligeramente más desordenadas, pero aún heterogéneas. Sin embargo, el pico de absorción de bajo momento en estas estructuras se mantiene bastante elevado. Esto implica que la existencia de formas tradicionales de pasta –que sólo se obtienen a temperaturas muy bajas– *no es una condición necesaria para la absorción de neutrinos* en la corteza de las estrellas de neutrones.

Más aún, encontramos que a $T \sim 0,7 \text{ MeV}$ el sistema puede existir en varios estados estables, todos con distinta morfología –y, en consecuencia, distinto factor de estructura–, pero con energías internas muy cercanas. Partiendo de nuestras simulaciones a (N, V, T) fijos, estos estados parecen estar separados por barreras de energía relativamente altas, que hacen que la transición entre ellos sea un evento poco probable, que no se puede observar con una sola realización de la simulación. De todos modos, las distribuciones de energía obtenidas a partir de distintas condiciones iniciales se solapan considerablemente, indicando que cualquiera de ellos podría ser el estado de equilibrio a esa temperatura. A $T \sim 0,8 \text{ MeV}$ las barreras de energías pueden ser superadas y los histogramas se solapan completamente.

Todo esto indica que el estado real de estos sistemas a temperaturas bajas, pero finitas, debe ser descripto a través del estudio de un ensamble de estructuras en vez de una sola estructura tipo pasta.

4. Nuevas Pastas

En este capítulo desarrollamos un estudio sistemático de la opacidad de neutrinos para distintas condiciones termodinámicas para evaluar el impacto que tiene la estructura que se forma. Estudiamos la opacidad de neutrinos de la materia heterogénea a distintas condiciones termodinámicas para distintas densidades, fracciones de protones y temperatura, calculando la opacidad del muy largo rango y la distribución de fragmentos. La opacidad de los neutrinos es de crucial importancia para la evolución térmica de las supernovas y el scattering de neutrinos de las estrellas de neutrones.

4.1 Introducción

La materia rica de neutrones es un sistema neutro compuesto de una mezcla de protones y neutrones embebidos en un gas de electrones. Este tipo de materia puede desarrollar estructuras heterogéneas, usualmente conocidas como *pasta nuclear*. Como podemos ver en Ref. [HPGC⁺04, HPGP04], el factor de estructura estático neutrón-neutrón $S(q)$ de la pasta nuclear describe el *scattering* coherente de neutrinos. Este fenómeno se espera que tenga impacto para la opacidad de neutrinos en ciertas longitudes de onda. La sección eficaz de *scattering* está relacionada con el factor de estructura a través de

$$\sigma_{\text{total}} = \sigma_{\text{neutrón libre}} \times S(q) \quad (4.1)$$

La sección eficaz de un neutrón libre es:

$$\sigma_{\text{neutrón libre}} = \frac{G_F^2 E_\nu^2}{6\pi} \quad (4.2)$$

con G_F la constante de acoplamiento de Fermi y E_ν la energía del neutrino. Con esto en mente, la sección eficaz del sistema resulta:

$$\sigma_{\text{total}} = \frac{G_F^2 E_\nu^2}{6\pi} S(q) \quad (4.3)$$

Ya que la masa del neutrino ($m_\nu \approx 10^{-2} \text{ eV}$) es despreciable para energías en el rango de los MeV, la relación entre la energía y el número de onda es $E_\nu = \hbar q$, resultando entonces

$$\sigma_{\text{total}} = \frac{G_F^2 \hbar^2}{6\pi} q^2 S(q) \quad (4.4)$$

Para hallar la opacidad de la materia heterogénea, calculamos el factor de estructura del sistema para un amplio rango de longitudes de onda de interés relacionadas con la estructura de la pasta, y luego buscamos el máximo. Para tener una idea de la distribución espacial de las partículas, calculamos también el factor de estructura del sistema, que se define como:

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N} \left| \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \right|^2$$

El factor de estructura $S(q)$ está relacionado con la función distribución de pares a través de una transformada de Fourier:

$$S(q) = 1 + \rho \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} [g(r) - 1] \quad (4.5)$$

Esta expresión es para el promedio sobre todas las orientaciones de $S(q)$, ya que los núcleos de estrellas que colapsan son policristalinos y la orientación de cada grano del cristal es al azar [SWS⁺07]. Para un detalle de cómo se realizó el cálculo, ver apéndice D.

4.2 Fragmentos

En la figura 4.1 mostramos cuatro estructuras distintas para fracción de protones de $x = 0,4$ y $x = 0,5$, y temperatura $T = 0,5 \text{ MeV}$ y $T = 1,0 \text{ MeV}$. Claramente podemos ver que las estructuras ya no se limitan a las originalmente propuestas por Ravenhall *et al.* [RPW83]. Para estudiarlas en mayor profundidad, podemos ver en la figura 4.2 la distribución de fragmentos correspondiente al modelo MSTE (ver capítulo 5 para más detalles). En esta figura podemos ver que para una fracción de protones de $x = 0,2$ hay

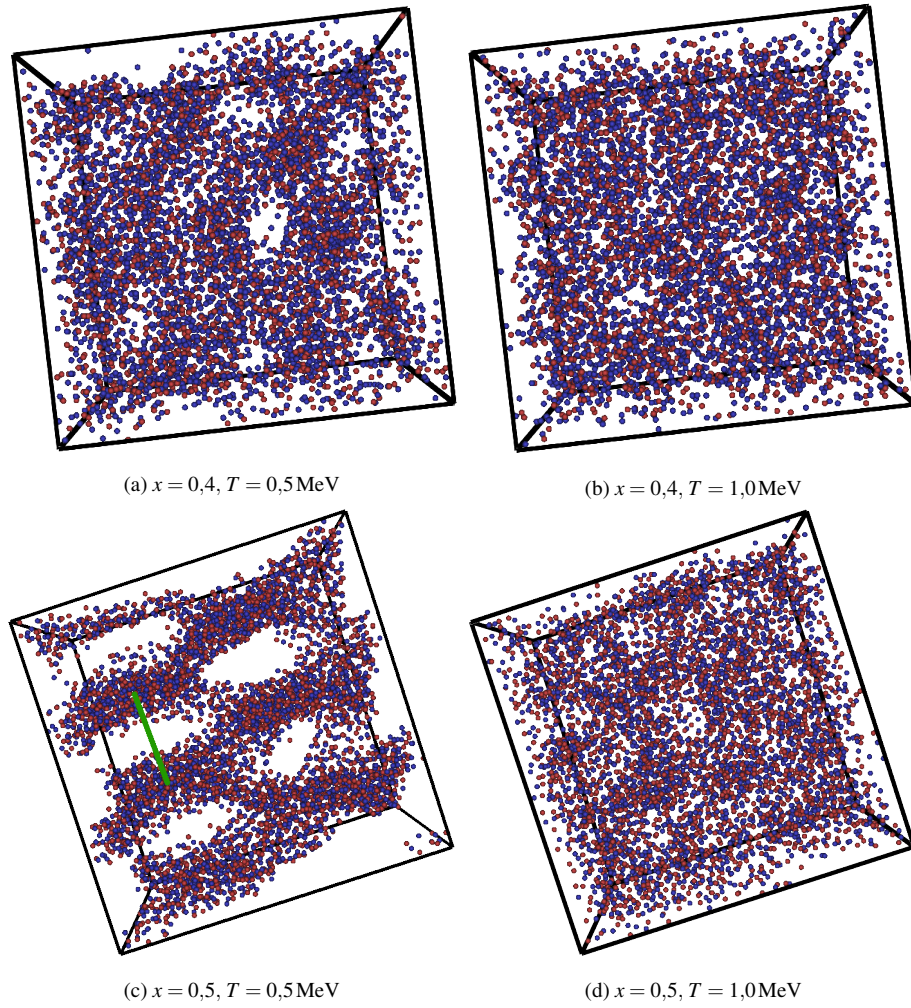


Figura 4.1: Estructuras del sistema con densidad $\rho = 0,04 \text{ fm}^{-3}$ para distintos valores de fracción de protones y temperatura. Las estructuras obtenidas a $T = 0,5 \text{ MeV}$ difieren considerablemente. Sin embargo, ambas muestran inhomogeneidades. Podemos ver en el panel 4.1c una línea verde que marca la longitud de $\approx 15 \text{ fm}$.

muchos nucleones aislados que son casi exclusivamente neutrones. Éstos funcionan como un gas de neutrones en el que se embebe la estructura de protones subyacente.

Otra consecuencia del gas de neutrones es que la fracción de protones de la estructura de pasta generalizada es ligeramente mayor que la fracción de protones original del sistema simulado. Podemos ver de la figura 4.2 que la fracción de protones en el fragmento grande es de alrededor de $x = 0,25$, mientras que la fracción de protones macroscópica es $x = 0,2$. En la figura 4.3 podemos observar la masa del fragmento más grande. Se puede ver que incluso para temperaturas muy altas ($T = 2,0 \text{ MeV}$) aparece un fragmento muy grande para todas las fracciones de protones. Todos los fragmentos más grandes contienen más

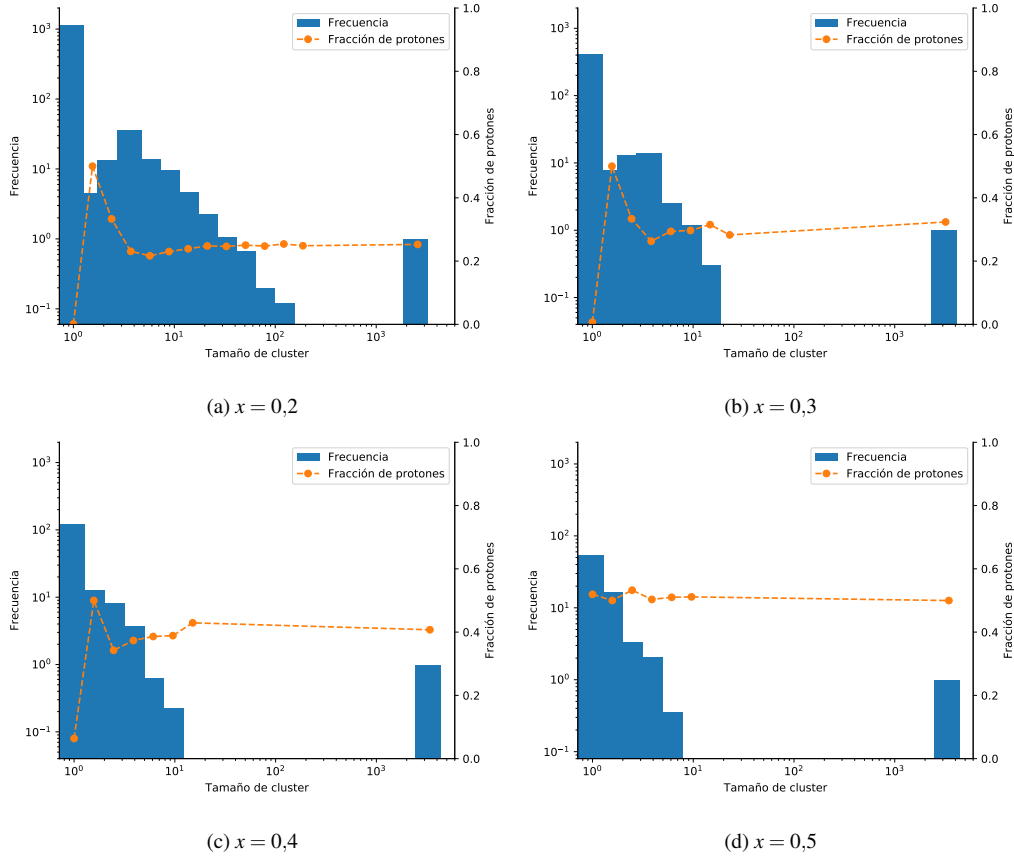


Figura 4.2: Distribución de fragmentos para el algoritmo MSTE para temperatura $T = 2,0 \text{ MeV}$, densidad $\rho = 0,04 \text{ fm}^{-3}$ y diferentes fracciones de protones. Para la fracción de protones más baja de las estudiadas, $x = 0,2$, el cluster grande tiene una fracción de protones mayor (aproximadamente 30 % más alta) y hay muchos neutrones aislados.

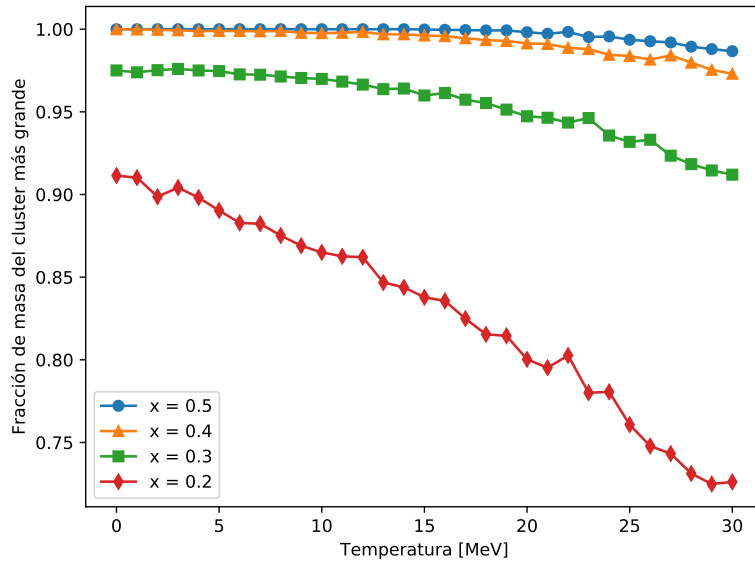


Figura 4.3: Masa del fragmento más grande para $\rho = 0,04 \text{ fm}^{-3}$ para distintos valores de x .

del 50% de la masa total del sistema.

4.3 Opacidad de neutrinos

La figura 4.4 muestra como ejemplo la función distribución de pares y el factor de estructura para la fase *gnocchi*. En la función de distribución de pares podemos identificar (marcado con ▼) el pico que pertenece a la estructura cristalina de los neutrones dentro de la pasta (correlación con los vecinos más cercanos) y también una correlación de muy largo rango (marcada con una línea discontinua - -.); este rango es el que genera el pico para los bajos momentos en el factor de estructura, relacionado con las estructuras de tipo pasta. El factor de estructura muestra un pico en $q_{\text{pico}} = 0,37 \text{ fm}^{-1}$ para los *gnocchi*, con un ancho de alrededor de $\text{FWHM} = 0,08 \text{ fm}^{-1}$, definiendo un rango de longitudes de onda en las que la estructura es considerablemente opaca.

Para cada configuración de fracción de protones, densidad y temperatura, calculamos el factor de estructura y extraemos su pico para momentos bajos. Llamaremos a este valor *pico de opacidad*.

Simulamos el sistema para un total de aproximadamente 1000 configuraciones distintas (4 fracciones de protones, 10 densidades y 30 temperaturas). Para cada combinación (x, ρ, T) calculamos la función de distribución de pares, cuya transformada de Fourier es el factor de estructura. De este factor de estructura obtenemos el pico de opacidad. Un detalle a considerar es que, como mencionamos en el capítulo 3, debajo de cierta temperatura

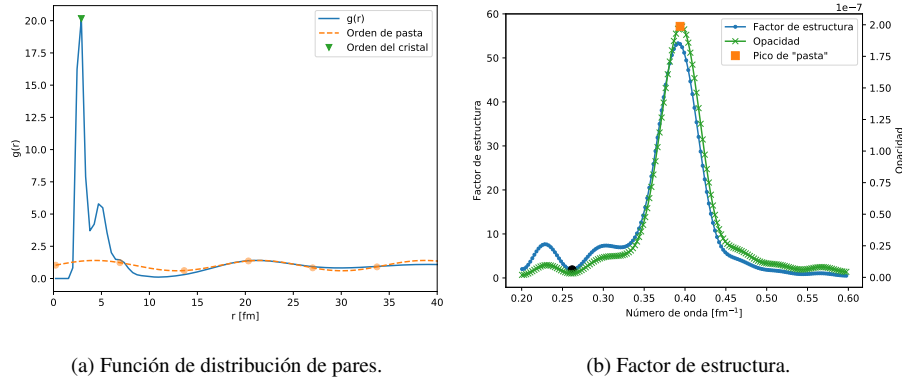


Figura 4.4: 4.4a Función de distribución de pares y 4.4b factor de estructura para un sistema con fracción de protones $x = 0,4$, densidad $\rho = 0,01 \text{ fm}^{-3}$ y temperatura $T = 0,5 \text{ MeV}$. Podemos ver la estructura cristalina y de pasta en la función de distribución de pares, así como el pico de la pasta en el factor de estructura. Este pico está localizado en $q_{\text{pico}} = 0,37 \text{ fm}^{-1}$ con un ancho de alrededor de $\text{FWHM} = 0,08 \text{ fm}^{-1}$. Las “ondas” para los bajos momentos se deben a efectos de tamaño finito.

(cerca a 1 MeV) el sistema puede “congelarse” en uno de los muchos mínimos locales. Es debido a esto que el sistema no puede ser simulado directamente a temperaturas bajas. En cambio, las temperaturas bajas deben ser obtenidas a partir de temperaturas altas, enfriando cuidadosamente el sistema y garantizando su termalización, tratando de simular así una sucesión de estados de equilibrio.

La figura 4.5 muestra la longitud de onda y la altura del *pico de opacidad* para la temperatura más baja estudiada en este trabajo ($T = 0,5 \text{ MeV}$) como función de la densidad. Podemos observar que la longitud de onda decrece a medida que aumenta la densidad, implicando que la longitud de correlación de la estructura es cada vez menor. Esto es de esperar, ya que cuanto mayor la densidad, más cercanas están las estructuras. Sin embargo, queremos enfatizar en que la estructura cambia con la densidad no sólo con transiciones en la morfología (por ejemplo de *spaghetti* a *lasagna*) sino también, por ejemplo, con fragmentos de *gnocchi* que tienen distintos tamaños para distintas densidades. Esta combinación entre el cambio de estructuras y el cambio de la distribución espacial para cada estructura resulta en la figura 4.5a. Podemos ver que la longitud de onda para máxima opacidad cambia rápidamente para densidades bajas (los *gnocchi*), pero tiende a estabilizarse para las otras pastas. Se debe considerar también que, ya que $S(q)$ tiene un cierto ancho cerca del pico, la estructura dispersaría neutrinos en un rango de longitudes de onda cercanas a dicho máximo. Es interesante notar que la altura del *pico de opacidad* toma su máximo valor para $\rho = 0,01 \text{ fm}^{-3}$, donde aún tenemos *gnocchi*, como se puede

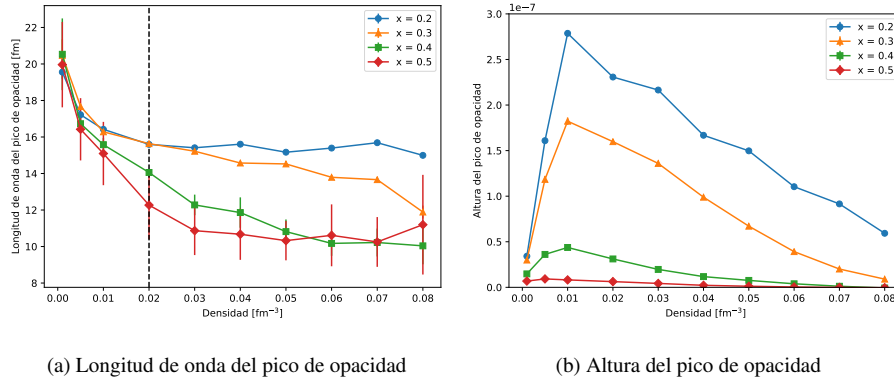


Figura 4.5: 4.5a Longitud de onda y 4.5b altura del pico de opacidad para temperaturas bajas ($T = 0,5 \text{ MeV}$) como función de la densidad para distintas fracciones de protones. Podemos observar que la longitud de onda cambia rápidamente para $\rho < 0,02 \text{ fm}^{-3}$ (fase *gnocchi*) y se estabiliza para densidades más altas.

ver por la distribución de fragmentos en la figura 4.6.

En la figura 4.7 mostramos el *pico de opacidad* para las distintas configuraciones termodinámicas. Podemos ver que a medida que decrece la fracción de protones, también decrece la opacidad. Para cada fracción de protones estudiada, la altura del pico de opacidad decae rápidamente para temperaturas mayores a $T = 0,8 \text{ MeV}$, y es aproximadamente $1/4$ de la altura del pico de opacidad para $T = 0,5 \text{ MeV}$. La opacidad del sistema decrece a medida que se reduce la fracción de protones porque la estructura del sistema se debe a la interacción de rango largo de Coulomb entre protones. Cuando hay sólo un protón por neutrón ($x = 0,5$), la estructura de neutrones sigue casi idénticamente la de los protones. Sin embargo, a medida que la proporción de neutrones aumenta, la estructura de neutrones se difumina y su correlación de muy largo rango empieza a desaparecer. Este efecto puede verse en la distribución de fragmentos para $x = 0,2$, donde tenemos muchos neutrones aislados, que forman el gas de neutrones. Estas características afectan las inhomogeneidades que aparecen en $x = 0,5$, suprimiendo su opacidad de muy largo rango.

De la figura 4.3 podemos ver que incluso para altas temperaturas ($T = 2,0 \text{ MeV}$) aparece un fragmento grande para todas las fracciones de protones. Este fragmento grande es la estructura que llamamos *Pasta Nuclear Generalizada*, responsable de la interacción de largo rango. La razón por la que la opacidad se deprime drásticamente a medida que la temperatura aumenta, en conclusión, no es porque desaparezca la estructura del fragmento grande, sino debido a cambios dentro de ella.

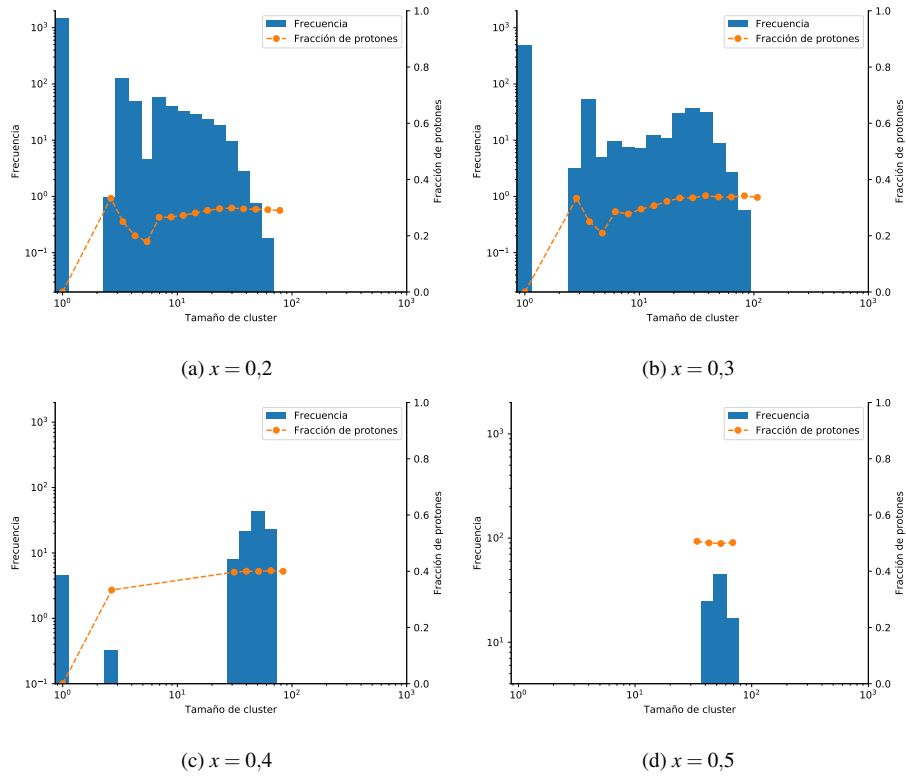


Figura 4.6: Distribución de fragmentos con el algoritmo MSTe para temperatura $T = 0,5 \text{ MeV}$, densidad $\rho = 0,01 \text{ fm}^{-3}$ y distintas fracciones de protones. Podemos ver que todas tienen distribuciones de masa tipo *gnocchi*.

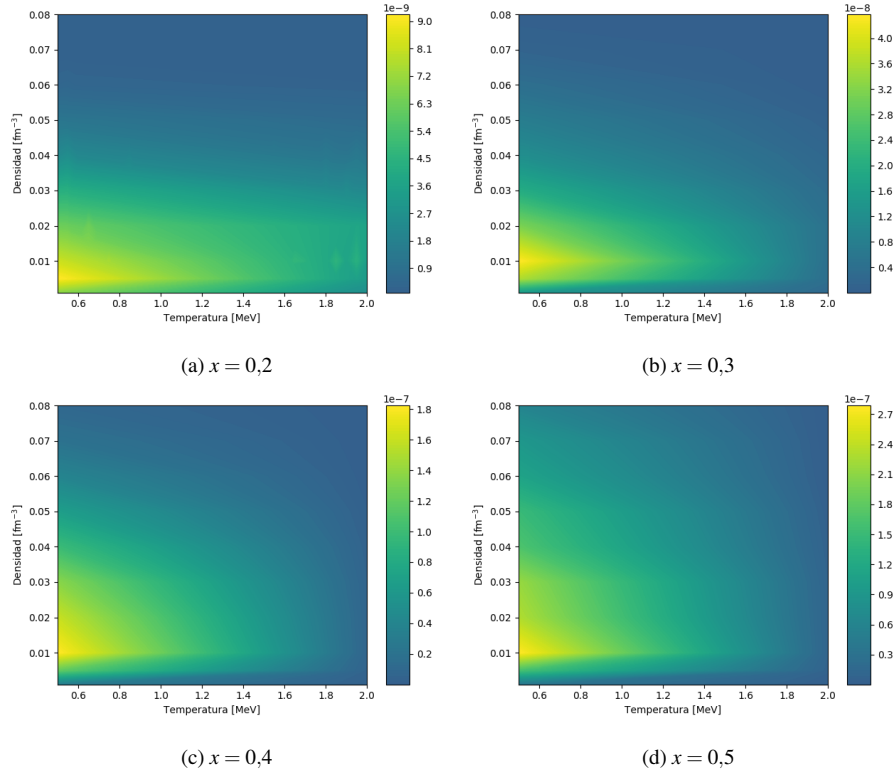


Figura 4.7: Pico de opacidad para el rango muy largo para distintas fracciones de protones como función de la temperatura y la densidad. Podemos ver que la opacidad decrece drásticamente para $T \gtrsim 0,8 \text{ MeV}$. También mostramos aquí que la opacidad se ve afectada por la fracción de protones, como se puede notar por las escalas en la barra de colores de cada gráfico. Se puede notar que en la opacidad para $x = 0,2$ y $x = 0,3$, los resultados son en mayor parte ruido.

4.4 Conclusiones

La materia rica en neutrones desarrolla estructuras no homogéneas (usualmente conocidas como pasta nuclear) que alteran considerablemente su opacidad a neutrinos. Analizando el comportamiento del factor de estructura de neutrón-neutrón y la función de distribución de pares para un gran rango de densidades, temperaturas y fracción de protones, podemos calcular la longitud de onda para la cual se produce el máximo *scattering*. Vimos que para altas densidades, donde esperamos que aparezcan fragmentos muy grandes (*spaghetti* u *lasagna*), la longitud de onda del pico de opacidad se mantiene relativamente constante, y la máxima opacidad se obtiene para neutrinos muy energéticos ($E_\nu \approx 80 \text{ MeV}$, típicos de una muy inicial etapa de evolución de las proto-estrellas de neutrones). A medida que disminuye la densidad, nos movemos hacia la fase de *gnocchi*, en la cual los fragmentos son de tamaño finito. En este caso, la máxima opacidad se mueve a energías menores. Como podemos ver en la figura 4.7, este aumento en la opacidad no sólo se produce cuando las heterogeneidades forman parte de las comúnmente conocidas como pasta nuclear, sino también cuando son bastante diferentes (la *pasta nuclear generalizada* que podemos ver en la figura 4.1). También es relevante recordar que la opacidad no se produce para una longitud de onda en particular, sino que para un espectro bastante amplio de ellas.

Es de esperar que estos resultados sean cualitativamente correctos, pero que dependan cuantitativamente del modelo escogido para describir la materia rica en neutrones. El modelo que estamos utilizando en este trabajo fue puesto a prueba extensivamente en colisiones y en física de iones pesados; es por esta razón que lo escogimos para describir cuantitativamente la materia rica de neutrones.

Los modelos hidrodinámicos para la materia rica en neutrones [RJS95, MCB⁺98, GKP04, WJ05, LRJM05] pueden sugerir fracciones de protones, densidades y temperaturas para distintas condiciones (supernovas, proto-estrellas de neutrones, estrellas de neutrones). De este trabajo podemos encontrar, para este modelo específico, la opacidad a los neutrinos para distintas condiciones termodinámicas. Consecuentemente, combinando estos dos resultados con mediciones eventuales de la opacidad de los neutrinos en estrellas de neutrones, podemos comprobar la validez de distintos modelos nucleares y, en consecuencia, avanzar hacia la ecuación de estado de la materia nuclear.

5. Fragmentación

El objetivo de este capítulo es encontrar la dinámica de la formación de los fragmentos para sistemas que se expanden de acuerdo al modelo del pequeño *big bang* [DS96], que corresponde localmente a la evolución de las colisiones de estrellas de neutrones. A partir de una configuración de equilibrio, expandimos el sistema homogéneamente hasta llegar a una configuración asintótica (correspondiente a densidades muy bajas). Estudiamos, con cuatro algoritmos reconocedores de fragmentos distintos, la distribución de fragmentos a lo largo de esta expansión y la dinámica de la formación de fragmentos.

Encontramos los típicos regímenes de la distribución de fragmentos de una expansión: U-shaped, ley de potencias y exponencial. Otra característica de nuestro cálculo es que, ya que la interacción entre protones es repulsiva de largo rango, no tenemos un fragmento infinito en toda etapa de la evolución. Como es de esperar, cuanto más rápida es la velocidad de expansión, más rápido desaparece el fragmento infinito.

Desarrollamos una herramienta basada en análisis de grafos para la identificación del fragmento infinito y encontramos una transición de distribución de fragmentos de U-shaped a exponencial a medida que aumenta la velocidad de expansión.

Estudiando la topología de los estados de equilibrio, antes de la expansión, reproducimos las pastas usuales y, además, una nueva fase que hemos llamado *pregnocchi*, que consiste de agregados de protones embebidos en un *mar de neutrones*. Identificamos distintos regímenes de fragmentación, dependiendo de la temperatura inicial y la velocidad de expansión. En particular, para los ya mencionados *pregnocchi*, una nube de neutrones

rodea a los fragmentos a lo largo de los comienzos de la expansión, resultando en sistemas con configuraciones compatibles con la emergencia del *r-process*.

Mostramos que una identificación adecuada de la distribución de fragmentos depende del algoritmo de reconocimiento de fragmentos escogido, y que el Algoritmo de Reconocimiento Temprano de Fragmentos (ECRA) fue el más estable. Este enfoque nos permitió identificar la dinámica de la formación de fragmentos. Estos cálculos pueden ser el comienzo de una comparación entre los experimentos de fragmentación terrestres y los estudios de estrellas de neutrones.

5.1 Introducción

Las estrellas de neutrones son sistemas astronómicos con nucleones sometidos a condiciones extremas. Debido a la combinación entre la atracción nuclear y la repulsión de Coulomb entre protones el sistema tiene inhomogeneidades en su estructura. Estas inhomogeneidades aparecen también en sistemas expandiéndose, donde la distribución de fragmentos depende de las condiciones termodinámicas (temperatura, fracción de protones, ...) y la velocidad de expansión.

El origen de elementos pesados (más pesados que el $^{56}_{26}\text{Fe}$) es aún una incógnita en la física. Las principales hipótesis respecto del origen de estos elementos implican que las colisiones de estrellas de neutrones serían responsables de más de la mitad de la abundancia terrestre. La reciente observación de colisiones de estrellas de neutrones y sus correspondientes ondas gravitacionales [LIG17] en LIGO representa la primera oportunidad para detectar y estudiar el impacto de éstas en la abundancia de elementos pesados. Recientes trabajos [KMB⁺17] han estudiado, mediante modelos hidrodinámicos, el rol de las colisiones de estrellas de neutrones en la generación de elementos pesados. Al producirse la colisión de dos estrellas de neutrones, la materia se fragmenta en condiciones extremas. Estas condiciones, de acuerdo a Ref. [LS74], son favorables para que se produzca el *r-process* y, en conclusión, una fuente posible para núcleos terrestres. Inspirados por la colisión de estrellas de neutrones, desarrollamos un estudio en la fragmentación de materia de estrellas de neutrones en expansión.

5.1.1 Reconocedores de fragmentos

x

En configuraciones típicas tenemos no sólo la estructura conocida como pasta nuclear, sino también, para ciertos valores de la fracción de protones x , un gas de nucleones en que aquélla está embebida. Para caracterizar adecuadamente las fases de pasta debemos saber

cuáles partículas pertenecen a las fases de pasta y cuáles al gas. Así, lo que debemos es encontrar los fragmentos que se forman a lo largo de la simulación.

Uno de los algoritmos para identificar la formación de fragmentos es el conocido como Minimum Spanning Tree (MST). En el algoritmo MST dos partículas pertenecen al mismo cluster $\{C_n^{\text{MST}}\}$ si la distancia entre ellas es menor que una distancia de corte r_{cut} :

$$i \in C_n^{\text{MST}} \Leftrightarrow \exists j \in C_n \mid r_{ij} < r_{\text{cut}}$$

Esta definición de fragmentos funciona adecuadamente para sistemas sin energía cinética y baja densidad (en general, sistemas fríos y diluidos), y está basada en la cola atractiva de la interacción nuclear. Sin embargo, si el sistema tiene una temperatura mayor a cero, podemos tener una situación en la que dos partículas están más cerca que la distancia de corte, pero con una energía cinética relativa tan grande que van a separarse indefectiblemente.

Para tratar situaciones de temperatura mayores a cero, tenemos que tener en cuenta el momento relativo entre las partículas. Uno de los métodos mas sofisticados para lograr esto es el Algoritmo de Reconocimiento Temprano de Fragmentos [DR93]. En este algoritmo, las partículas se particionan en distintos fragmentos disjuntos, C_n^{ECRA} , con la energía total para cada fragmento:

$$\epsilon_n = \sum_{i \in C_n} K_i^{\text{CM}} + \sum_{i,j \in C_n} V_{ij}$$

donde K_i^{CM} es la energía cinética relativa al centro de masa del fragmento. El conjunto de fragmentos $\{C_n\}$ es, entonces, el que minimiza la suma de todas las energías de los fragmentos $E_{\text{partición}} = \sum_n \epsilon_n$.

El algoritmo ECRA puede ser utilizado fácilmente para sistemas pequeños [DB94], pero al ser una optimización combinatoria, no puede ser utilizado en sistemas grandes. Mientras que encontrar fragmentos ECRA es muy costoso computacionalmente, utilizar simplemente fragmentos MST resulta en fragmentos excesivamente grandes e inestables. Una alternativa es el algoritmo Minimum Spanning Tree Energy (MSTE) [DGML12]. Este algoritmo es una modificación de MST, considerando la energía cinética. De acuerdo a este algoritmo, dos partículas pertenecen al mismo fragmento $\{C_n^{\text{MSTE}}\}$ si están unidas energéticamente:

$$i \in C_n^{\text{MSTE}} \Leftrightarrow \exists j \in C_n : V_{ij} + K_{ij} \leq 0$$

A pesar de que de este algoritmo no se obtienen los mismos resultados teóricamente consistentes que con ECRA, igual evita el mayor problema de MST: no considerar de ninguna manera la energía cinética.

Condiciones para *r*-process: MSTpC

Las estrellas de neutrones, al tener una gran cantidad de neutrones por sobre protones, aparenta ser un candidato ideal para la producción de *r*-process que se supone que aporta gran cantidad de los núcleos terrestres más pesados que el hierro. Para que suceda el *r*-process son necesarias dos condiciones fundamentales: un núcleo *semilla*, que es el que va a capturar los neutrones; y una gran cantidad de neutrones libres alrededor de este núcleo. Por esto es que necesitamos que nuestros reconocedores de fragmentos también traten de identificar nubes de neutrones en las que haya *neutrones libres* que puedan ser capturados por el núcleo.

Mientras que los modelos de reconocimiento de fragmentos asintóticos como ECRA nos permiten encontrar los núcleos estables, precisamos también encontrar los neutrones libres (es decir, los que no pertenecen al núcleo estable) que están en la vecindad de este fragmento. Con esto en mente desarrollamos el MSTpC, un modelo que busca con MST fragmentos de protones cercanos y luego identifica una *nube* de neutrones que lo rodea. La comparación entre la cantidad de neutrones del cluster MSTpC y el cluster ECRA asociado nos da una idea de la abundancia de neutrones libres que tiene cada núcleo *semilla*.

5.1.2 Identificación de Fragmentos Infinitos

Desarrollamos [AD17b] un algoritmo para el reconocimiento de fragmentos infinitos a través de los contornos. Explicamos aquí en detalle la implementación para fragmentos tipo MST en 2 dimensiones, mientras que la extensión a MSTe y 3 dimensiones es inmediata y, en general, a cualquier definición de clusters que cumpla con la *aditividad*. En la figura 5.1 podemos ver una representación esquemática de fragmentos 2D reconocidos en una celda periódica, etiquetados del 1 al 6 (notar que estos fragmentos no se conectan aún a través de las paredes periódicas).

Para hallar las conexiones entre estos fragmentos a través de los contornos, dibujamos un grafo de los fragmentos, donde los conectamos dependiendo de si se conectan o no a través de una pared, y etiquetamos dicha conexión con la etiqueta de la pared. Por ejemplo, comenzamos con el fragmento 1. Se conecta con el fragmento 2 a través de la pared E, por lo que agregamos una conexión $1 \rightarrow 2$ etiquetada como E. Simétricamente, agregamos una conexión $2 \rightarrow 1$ etiquetada como W. Ahora vamos por el par 1-3. Se conecta a través de la pared S, por lo que agregamos $1 \rightarrow 3$ con la etiqueta S y $3 \rightarrow 1$ con la etiqueta N. El fragmento 1 no se conecta con los 4, 5 o 6, por lo que éstas son las únicas conexiones que tenemos para dicho fragmento. Una vez que hayamos hecho eso, obtenemos el grafo de la figura 5.2.

Ahora nos preguntamos si estos subgrafos representan un fragmento infinito o no. Para tener un fragmento infinito necesitamos un ciclo cerrado (lo opuesto no es cierto:

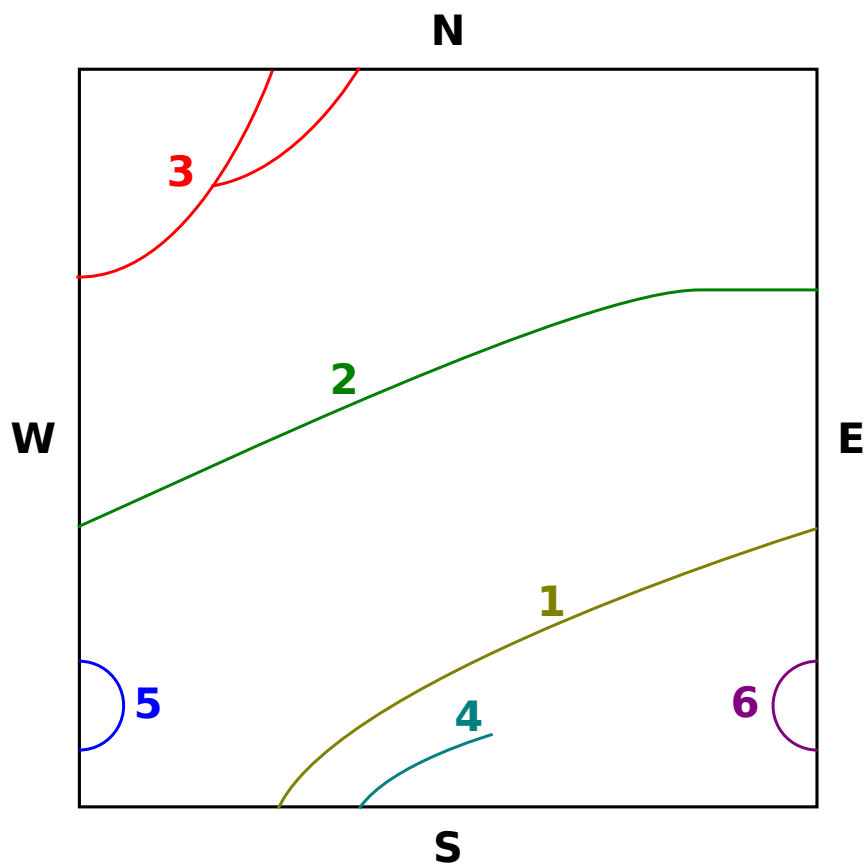


Figura 5.1: Representación esquemática de fragmentos 2D, reconocidos sólo en la celda y no a través de las paredes periódicas, etiquetadas como N, S, W y E. Los fragmentos dentro de la celda están etiquetados del 1 al 6.

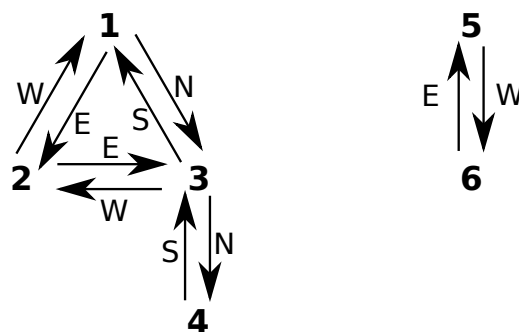


Figura 5.2: Grafo de los fragmentos con conexiones etiquetadas por la etiqueta de la pared a través de la cual se conectan. El grafo puede ser dividido en dos subgrafos que no se conectan entre ellos: 1-2-3-4 y 5-6. Cada uno de estos subgrafos es un fragmento al considerar las condiciones periódicas de contorno.

tener un circuito cerrado no es suficiente para tener un fragmento infinito, como podemos ver en el subgrafo 5–6), de modo que primero identificamos ciclos y los marcamos como candidatos para fragmentos infinitos. Cada conexión agrega un ciclo (ya que las conexiones de los fragmentos son ida y vuelta), pero sabemos de inspeccionar la figura 5.2 que el fragmento 1–2–3 es infinito. La clave para identificar en los grafos los fragmentos infinitos es identificar, en el grafo, qué hace al fragmento 1–2–3 infinito. La característica fundamental del fragmento 1–2–3 es que su ciclo 1–2–3–1 puede ser circulado a través de las paredes E–E–S, mientras que el 5–6 puede ser circulado sólo a través de E–W. Ahora, para que el fragmento sea infinito, necesitamos que se extienda infinitamente en, al menos, una dirección. De este modo, una vez que tenemos la lista de paredes del ciclo, creamos una magnitud I asociada a cada ciclo, que se crea de la siguiente manera. Comenzando con $I = 0$, agregamos un valor M_i si hay al menos una pared de tipo i . Los valores son: $M_E = 1$, $M_W = -1$, $M_N = 2$, $M_S = -2$. Si I no es cero, entonces el ciclo es infinito. Por ejemplo, el ciclo E–E–S tiene paredes E y S, de modo que $I = M_E + M_S = -1$ y el ciclo es infinito. Para el ciclo E–W, $I = M_E + M_W = 0$, y el ciclo es finito.

5.1.3 Expansión

La simulación de la colisión de dos estrellas de neutrones es impracticable computacionalmente con este nivel de detalle, ya que implicaría resolver aproximadamente 10^{30} veces la celda de simulación que utilizamos. En vez de simular la colisión de las estrellas, emulamos el efecto que ésta tiene en distintas regiones del sistema realizando expansiones locales de sistemas infinitos. Para expandir la materia rica en neutrones que simula un sistema infinito con condiciones periódicas de contorno, seguimos el método del *big bang microscópico*, explicado por Holian y Grady en Ref. [HG88] y usado por la expansión de sistemas infinitos previamente [DS96]. Consiste en una expansión de la celda de simulación a un ritmo isotrópico y constante $\dot{\eta}$:

$$L(t) = L_0 (1 + \dot{\eta} t) \quad (5.1)$$

donde L es la longitud inicial de la celda de simulación en cada dirección y L_0 es la longitud inicial. Sólo con esta modificación del tamaño de la caja, el sistema se expandiría dinámicamente. Para simular una expansión, necesitamos también que las partículas tengan una velocidad radial extra que concuerde con la de la celda en los bordes de la simulación:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \dot{\eta} \mathbf{r}_0 \quad (5.2)$$

Ya que estamos trabajando con condiciones periódicas de contorno, cuando una partícula cruza un contorno, debemos considerar la expansión original, por lo que no cambiamos

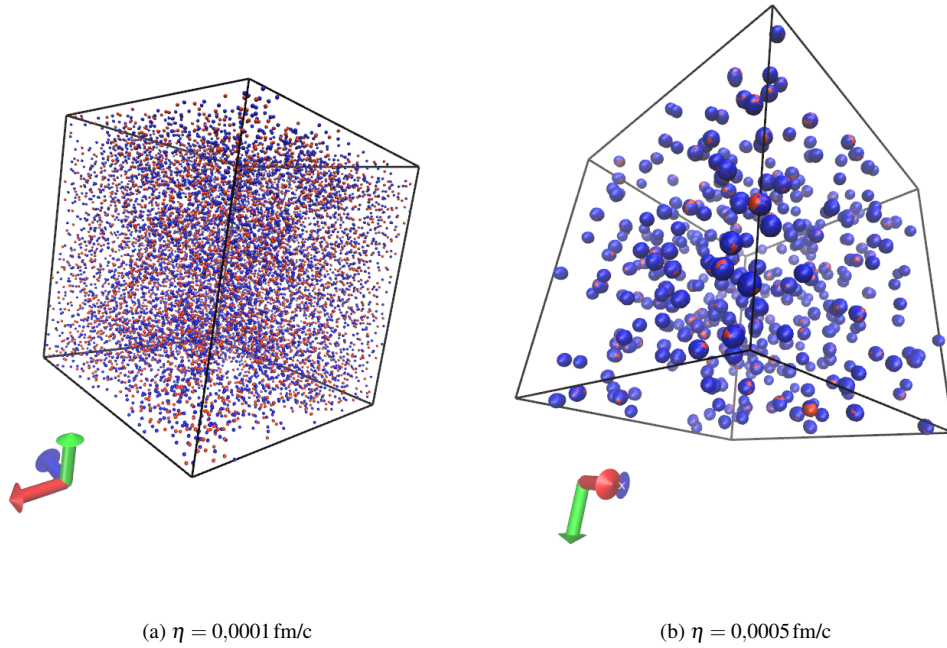


Figura 5.3: Estructuras de un sistema en su configuración inicial 5.3a y el sistema expandido final 5.3b. En el sistema expandido podemos ver que se forman fragmentos de tipo *gnocchi*.

sólo la posición de la partícula sino también la velocidad. Por ejemplo, si la partícula cruza el contorno izquierdo de la caja periódica, la velocidad de la partícula imagen $v_i^\dagger$ en el lado derecho debe ser modificada $v_i^\dagger = v_i + L_0 \dot{\eta}$. Esta prescripción para la expansión es matemáticamente equivalente a la ley de Hubble en astrofísica [CMC⁺01]. Es interesante notar que la expansión con esta prescripción es (para el sistema infinito simulado) adiabática: del momento inicial en adelante, no se agrega más energía al sistema.

5.2 Fragmento infinito

En la figura 5.3 mostramos los estados inicial y final de la expansión de la celda principal de $N = 11000$ partículas para velocidades de expansión muy bajas. Podemos ver que, más allá de que la configuración inicial muestra una distribución de partículas compacta, la configuración final consiste de *gnocchi* (casi esféricos) con una masa de alrededor de 80 partículas.

En la figura 5.4 mostramos la fracción de partículas en la celda principal que forman parte de un cluster infinito (*Fracción de Fragmento Infinito*, FFI). Podemos ver fácilmente que en las primeras etapas de la evolución, como la temperatura es baja, la mayor parte del sistema en la celda principal pertenece al fragmento infinito. Sin embargo, a medida que

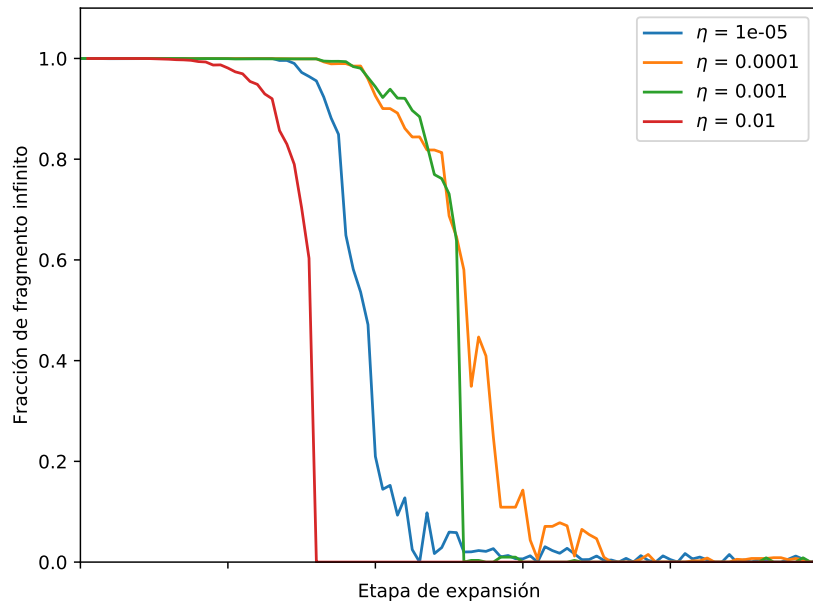


Figura 5.4: Fracción de Fragmento Infinito (ver texto) en función de la longitud de la celda principal. Para todas las velocidades de expansión mostradas el FFI va a cero en el régimen asintótico.

evoluciona el sistema de acuerdo a la velocidad de expansión, la FFI disminuye y llega a cero rápidamente, implicando que no hay fragmentos infinitos en el sistema.

5.3 Fragmentos asintóticos

La figura 5.5 muestra la distribución de fragmentos asintóticos para cuatro distintas velocidades de expansión. En este caso, el algoritmo MSTE fue aplicado sobre la celda principal, considerando las condiciones periódicas de contorno y sabiendo que no hay fragmento infinito, como se ve de la figura 5.4. Podemos ver que a medida que aumenta la velocidad de expansión, la distribución de fragmentos muestra la típica transición de U-shaped a decaimiento exponencial. Entre estas dos, aparece una distribución de tipo ley de potencias. En particular, la figura 5.5c muestra que con una expansión de $\eta = 0,009 \text{ fm/c}$ obtenemos una ley de potencias. Es interesante notar que a diferencia de casos típicos de estudios de fragmentos, como percolación o sistemas de Lennard-Jones, debido a la presencia del término de repulsión de Coulomb, no es posible ver un fragmento infinito en el régimen asintótico.

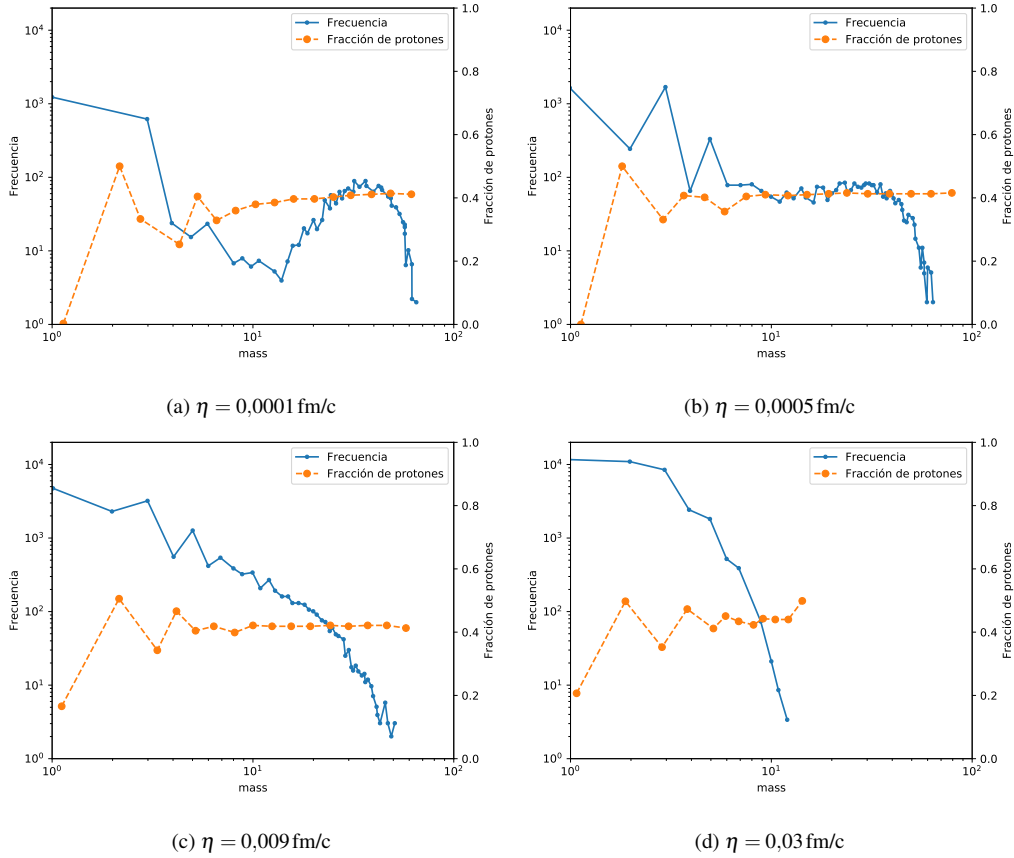


Figura 5.5: Distribución de masa de fragmentos. Las etiquetas aumentan junto a la velocidad de expansión. El sistema consiste de 11000 partículas con $x = 0,4$ y densidad inicial $\rho_0 = 0,08 \text{ fm}^{-3}$

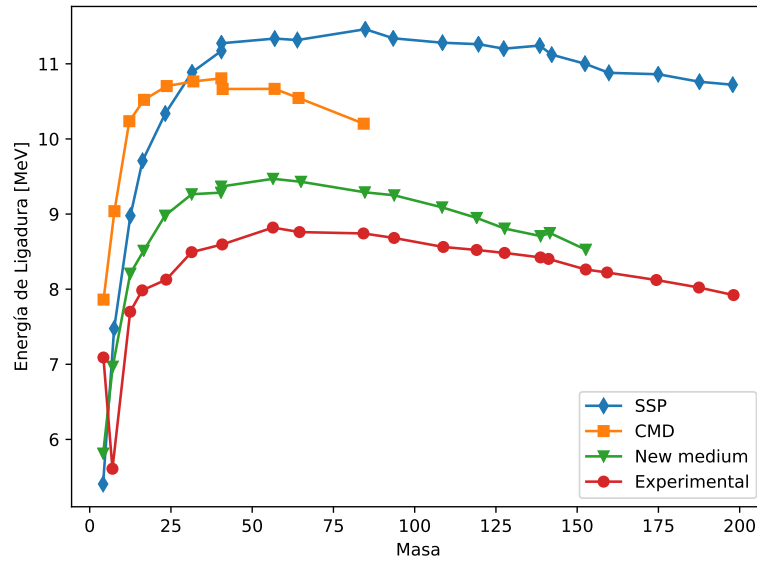


Figura 5.6: Energía de unión para las distintas parametrizaciones y datos experimentales. Podemos observar que las tres parametrizaciones reproducen cualitativamente el comportamiento de la energía de ligadura.

5.4 Dependencia de la configuración con el potencial

La forma característica de la energía de unión para los núcleos terrestres puede reproducirse con varios modelos de interacción entre las partículas. En la figura 5.6 observamos la energía de unión para tres potenciales distintos: *CMD medium*, *Simple Semiclassical Potential* y *New Medium*, una parametrización inspirada en los potenciales de Pandharipande [APR98] pero con parámetros distintos.

Estos distintos modelos de interacción resultan en distintas ecuaciones de estado y, en consecuencia, distintas distribuciones espaciales. Para comparar, mostramos en la figura 5.7 distintas imágenes para los tres modelos estudiados: *CMD medium*, *New medium* y *SSP*. Estas estructuras son cercanas al estado fundamental, con temperatura muy baja ($T = 0,1 \text{ MeV}$), densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y una fracción de protones de $x = 0,1$. Las diferencias son notorias: mientras que el potencial *CMD medium* no tienen ninguna estructura identificable, *New medium* y *SSP* muestran claramente aglomeraciones de protones (debido a la interacción atractiva que median los neutrones) embebidos en un *mar de neutrones*. Esta estructura la llamaremos *pre-gnocchi*. Esta es la primera vez que se observa este tipo de estructuras, y es también una muy interesante diferencia *cualitativa* observadas entre parametrizaciones de la ecuación de estado.

Para comparar los potenciales en otra configuración, mostramos en la figura 5.8 distintas

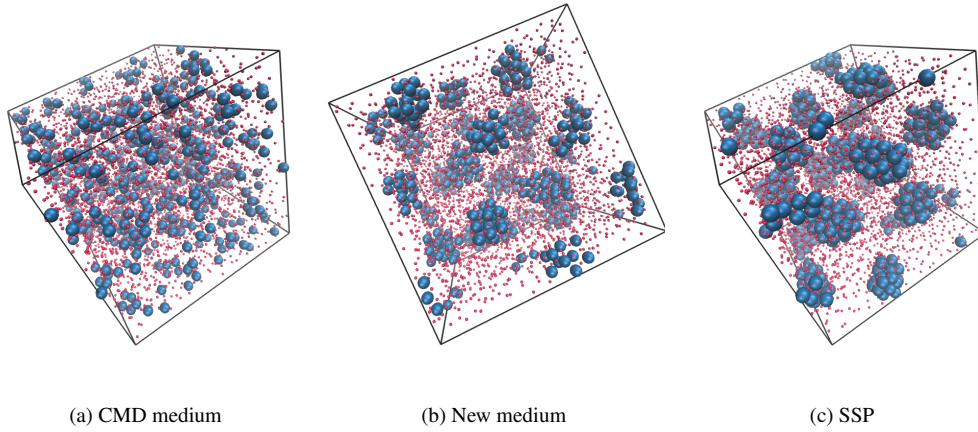


Figura 5.7: Imágenes de configuraciones para distintas parametrizaciones de la interacción nuclear, todas con las mismas condiciones termodinámicas: $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$. Las diferencias cualitativas entre el potencial tipo medio de CMD y las otras dos parametrizaciones (New Medium y SSP) son evidentes. Llamamos estas estructuras que aparecen en New Medium y SSP *pregnocchi*. Para facilitar la identificación de la estructura de protones, los neutrones están representados por puntos muy pequeños comparados con los protones.

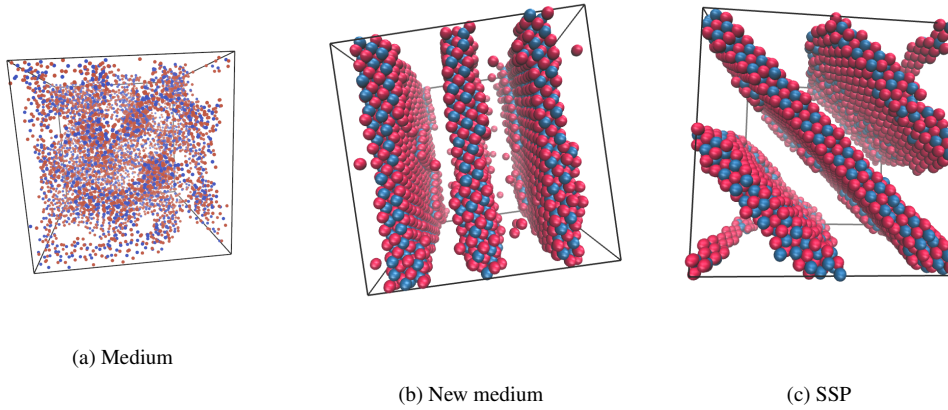


Figura 5.8: Imágenes de configuraciones para distintas parametrizaciones de la interacción nuclear, todas con las mismas condiciones termodinámicas: $x = 0,4$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$. Las diferencias cualitativas entre el potencial tipo medio de CMD y las otras dos parametrizaciones (New Medium y SSP) son evidentes. Mientras que el potencial CMD muestra una estructura de tipo *jungle gym*, tanto New Medium como SSP muestra *lasagna* que son ligeramente diferentes entre sí.

imágenes para los tres modelos que estudiamos: *CMD medium*, *New medium* y *SSP*. Estas estructuras son cercanas al estado fundamental, con temperatura muy baja ($T = 0,1 \text{ MeV}$), densidad $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y una fracción de protones de $x = 0,4$.

5.5 Distribución Asintótica de Masas

Cuando el sistema se expande, la estructura se parte en fragmentos finitos. A partir de tiempos suficientemente largos estos fragmentos permanecen estables, ya que no interactúan entre sí y se han desexcitado por emisión de partículas. Llamaremos a éstos “fragmentos asintóticos”.

Expandimos distintas configuraciones iniciales con el modelo *New medium* para encontrar la distribución asintótica de masas. Como primer ejemplo, mostramos en la figura 5.9 la distribución asintótica de masas (calculada con el algoritmo MSTE) para $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,8 \text{ MeV}$ para dos velocidades de expansión: *rápida* ($\dot{\eta} = 0,01 \text{ c/fm}$) y *lenta* ($\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$). Podemos ver aquí que la expansión lenta permite la existencia de fragmentos con masa de hasta 60 (20 de los cuales son protones) mientras que la expansión rápida produce fragmentos más pequeños de hasta 20 (6 protones). Este comportamiento es esperado, ya que cuanto más rápida la expansión, mayor la energía de excitación que se le agrega al sistema. En consecuencia, una expansión más rápida debería romper fragmentos que, de otro modo, serían estables. Un comportamiento similar se puede ver en la figura 5.10, donde expandimos el sistema para $x = 0,4$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$ para las mismas velocidades de expansión rápida y lenta. Otra característica relevante de la distribución asintótica de masas (que no se muestra en la figura debido a limitaciones de escala) es que la expansión rápida tiene una fracción no despreciable de neutrones sueltos (cerca del 4 %) mientras que la expansión lenta presenta muy pocos (0,1 %).

5.6 Formación de fragmentos

Ahora nos centramos en el análisis de algunos ejemplos de la evolución del sistema en el tiempo: cuándo y cómo se forman los fragmentos asintóticos. Tomemos primero la expansión del sistema con $x = 0,4$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,5 \text{ MeV}$. Mostramos en las primeras dos columnas de la tabla 5.11 los estados iniciales y asintótico con la expansión rápida y lenta para la *lasagna*. Mientras que la condición inicial es un cluster infinito, en el régimen asintótico tenemos una distribución de fragmentos con muchos fragmentos finitos. Es interesante notar que la expansión rápida se parece a una fractura mecánica, en la que los fragmentos se forman dentro de cada hoja de la *lasagna*, mientras que la expansión

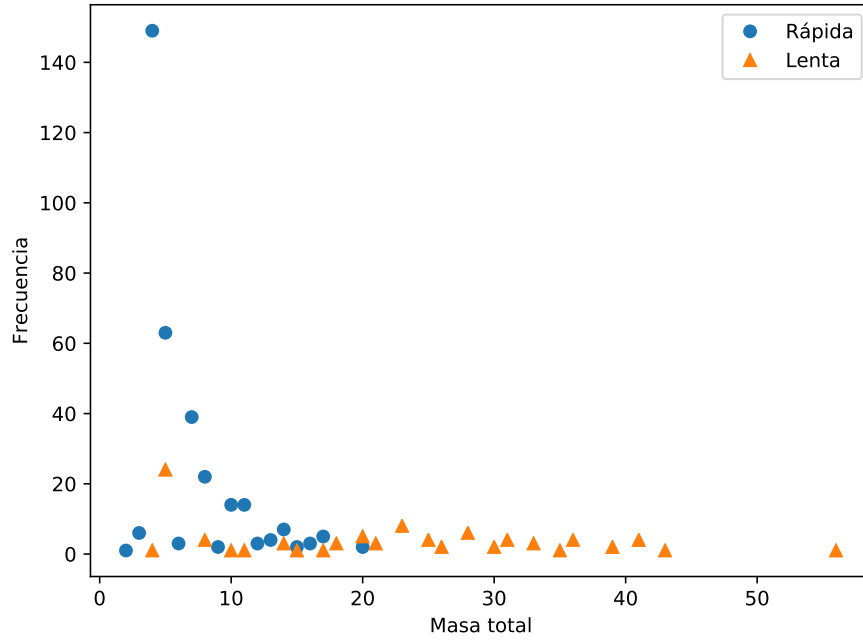


Figura 5.9: Distribución asintótica de masas para $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,8 \text{ MeV}$ y dos velocidades de expansión distintas: *rápida* $\dot{\eta} = 0,01 \text{ c/fm}$ y *lenta* $\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$.

lenta parece más una expansión térmica en la que el sistema asintótico pierde todo tipo de similitud con la estructura original. Los fragmentos se parten en muchos porque su tamaño tan grande no puede soportar la energía asociada con la expansión del sistema.

Un escenario muy interesante es la expansión del sistema con baja fracción de protones: $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$. En la tercera columna de la tabla 5.11 mostramos tanto la condición inicial como la configuración asintótica para $\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$.

A diferencia del escenario anterior, aquí hay una clara estructura de protones: hay agregados de protones inmersos en un mar de neutrones. Pueden ser identificados visualmente si dibujamos los protones con un tamaño mucho mayor que el de los neutrones, como se ve en este conjunto de figuras. A medida que el sistema se expande, se modifica. Esto genera la siguiente pregunta: ¿la distribución de fragmentos se modifica sustancialmente? La respuesta a esta pregunta requiere de un análisis profundo de la evolución temporal de la distribución de fragmentos, y no podemos confiar en una inspección visual; necesitamos usar algoritmos de reconocimiento de fragmentos. Este tipo de análisis ha sido realizado previamente para sistemas finitos, por ejemplo en Ref. [DB94, SD97a]. En la figura 5.12 mostramos las configuraciones iniciales y final con el algoritmo de MST. Podemos notar que la distribución de clusters cambia radicalmente en ambos aspectos: el tamaño y la fracción de protones. El cambio en la fracción de protones es de esperar ya que, a

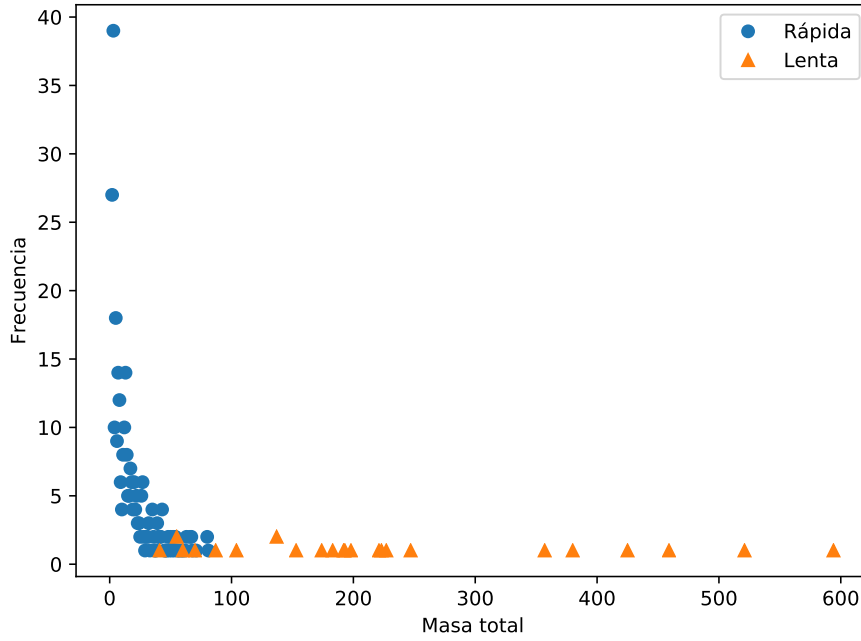


Figura 5.10: Distribución asintótica de masas para $x = 0,4$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$ y dos velocidades de expansión distintas: *rápida* $\dot{\eta} = 0,01 \text{ c/fm}$ y *lenta* $\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$.

medida que el sistema se expande, menos neutrones están en el rango del fragmento de protones. Sin embargo, este efecto solo no explica el cambio de tamaño: mientras que la condición inicial muestra un fragmento de hasta 80 protones, el fragmento más grande de la distribución asintótica tiene aproximadamente 30 protones. ¿Se rompió un cluster mientras el sistema se expandía?

Para analizar esto, estudiamos la distribución con el algoritmo MST aplicado a los protones solos, mostrados en la figura 5.13. De acuerdo a esta figura, vemos que la distribución de fragmentos de los protones no cambió sustancialmente (sólo un cluster de protones se rompió) y, efectivamente, el fragmento más grande tiene 32 protones. ¿Qué tipo de resultados se obtienen del algoritmo ECRA, teóricamente más sólido? En la figura 5.14 mostramos que de hecho el algoritmo ECRA-BFM dio buenos resultados, e identifica los pre-clusters adecuadamente, incluso encontrando el fragmento que se rompió.

Con estos resultados en mente, utilizamos tres herramientas para el reconocimiento de fragmentos: MSTe, ECRA y MSTpC. En la figura 5.15 mostramos la evolución del tamaño del fragmento más grande para las etapas iniciales de la evolución para los tres reconocedores de fragmentos: MSTe, MSTpC y ECRA. La figura muestra que el fragmento ECRA se estabiliza rápido y se mantiene relativamente estable, mientras que los otros dos algoritmos resultan en fragmentos que son siempre más grandes que los ECRA y

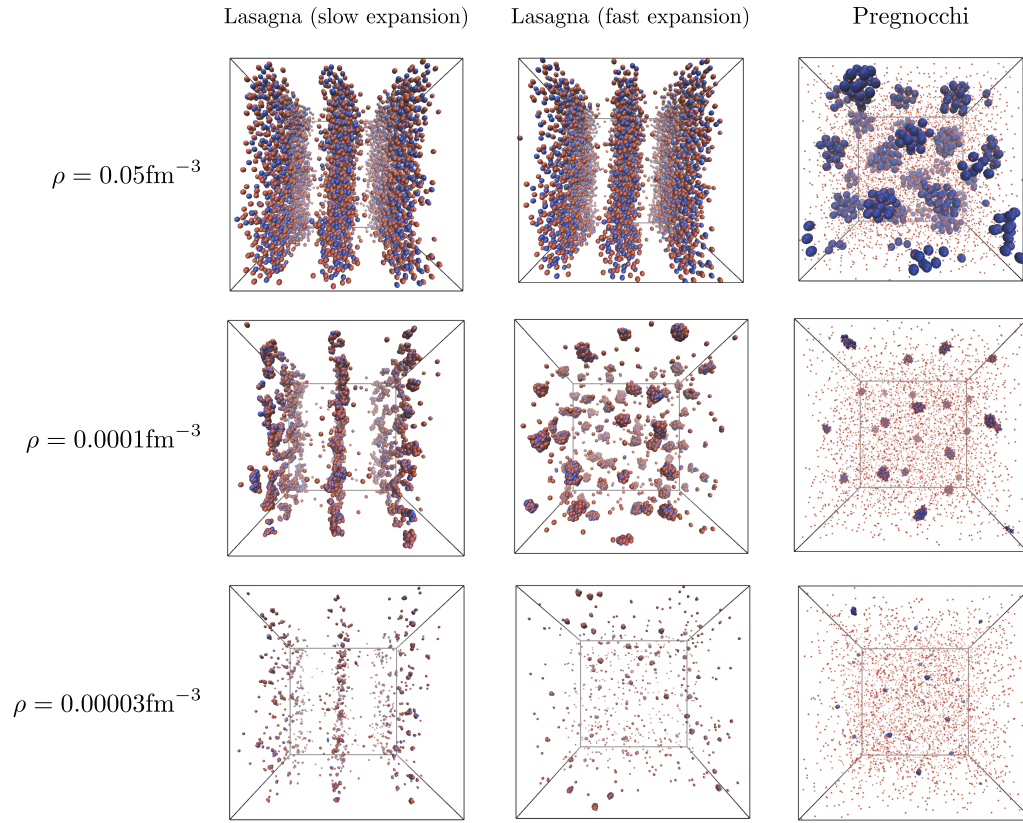


Figura 5.11: Tres distintas expansiones de materia de estrellas de neutrones: Lasagna (expansión rápida): $x = 0,4$, $\dot{\eta} = 0,01 \text{ c/fm}$, $T = 0,8 \text{ MeV}$; Lasagna (expansión lenta): $x = 0,4$, $\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$, $T = 0,8 \text{ MeV}$; Pregnocchi: $x = 0,1$, $\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$, $T = 0,1 \text{ MeV}$

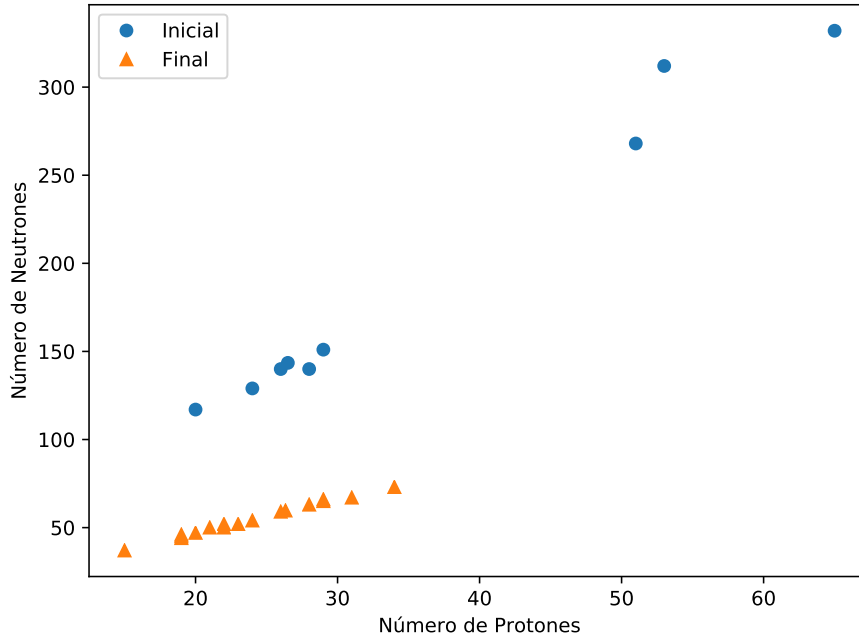


Figura 5.12: Distribución asintótica e inicial de masas para un sistema con $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$, para una expansión lenta ($\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$), con el algoritmo de reconocimiento MSTE.

se estabilizan más lentamente. También es interesante notar que el fragmento MSTpC comienza con alrededor de 100 neutrones más que el fragmento ECRA correspondiente, lo que implica que el fragmento de ECRA está en un ambiente muy rico en neutrones. Esta situación sugiere que existe la posibilidad del *r-process*, a diferencia de cálculos anteriores [CSHB15].

Por el otro lado, en la expansión de la estructura de *lasagna*, ninguno de los algoritmos reconocedores de fragmentos identifican fragmentos en tiempos muy tempranos de la evolución (ver figura 5.16). En esta etapa hay un fragmento muy grande (que, de hecho, es infinito). De cualquier modo, el análisis de ECRA muestra que este fragmento se parte tempranamente en muchos fragmentos y, como resultado, la masas del fragmento más grande decrece drásticamente con el tiempo. Es interesante notar que, a diferencia de los *pregnocchi*, en este caso el algoritmo MSTpC es el que más tiempo toma para identificar que el fragmento infinito se parte. Esto muestra que el algoritmo de ECRA es además más versátil para estudiar la formación temprana de fragmentos. También es interesante notar (no se muestra en las figuras) que la fracción de protones x de estos fragmentos es relativamente estable para el algoritmo ECRA, mientras que los otros dos resultan en una fracción de protones que decae monótonamente con el tiempo.

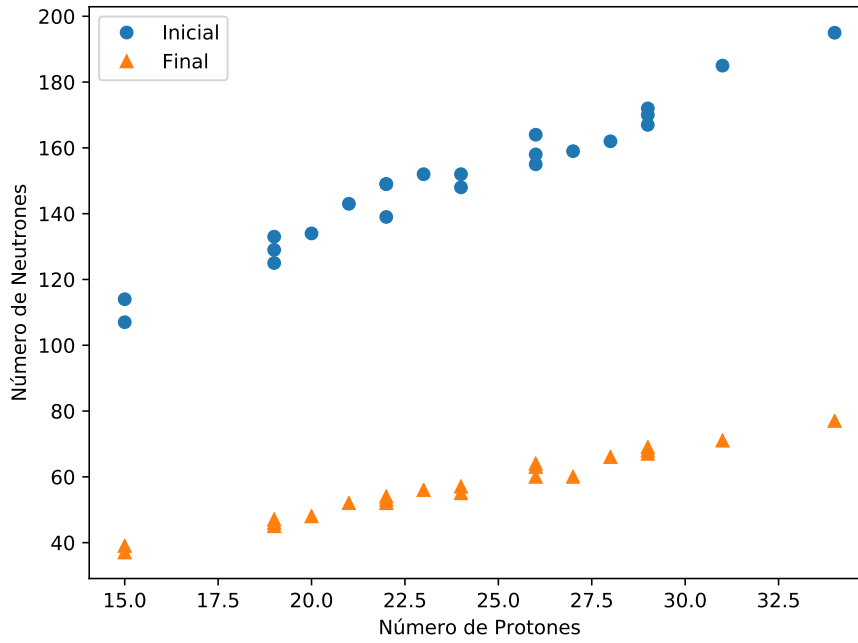


Figura 5.13: Distribución asintótica e inicial de masas para un sistema con $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$, para una expansión lenta ($\dot{\eta} = 0,0001 \text{ c/fm}$), con el algoritmo de reconocimiento MST para protones.

5.7 Conclusiones

Desarrollamos experimentos numéricos de sistemas expandidos homogéneamente y, para analizar la estructura del sistema en función del tiempo, desarrollamos una herramienta basada en análisis de grafos para identificar fragmentos infinitos para cualquier tipo de fragmentos aditivos. Una vez que este formalismo fue aplicado a las simulaciones mencionadas, pudimos identificar la región en la que se da una distribución de fragmentos de tipo ley de potencias. Esta distribución tiene formas desde U-shaped hasta decaimiento exponencial.

También estudiamos las propiedades estructurales de la corteza de estrellas de neutrones a través de tres potenciales distintos. Estos potenciales involucran un término nuclear escogido para reproducir energías de ligadura y compresibilidad de la materia nuclear, sumado a la interacción de Coulomb. Para analizar las estructuras que se forman utilizamos cuatro tipos distintos de algoritmos reconocedores de fragmentos: MST, MSTe, MSTpC y ECRA-BFM. Con estos algoritmos encontramos que de los tres potenciales, dos de ellos (New Medium y SSP) desarrollaron una estructura nueva para bajas fracciones de protones que llamamos *pregnocchi*. Esta estructura consiste en agregados de protones formados por

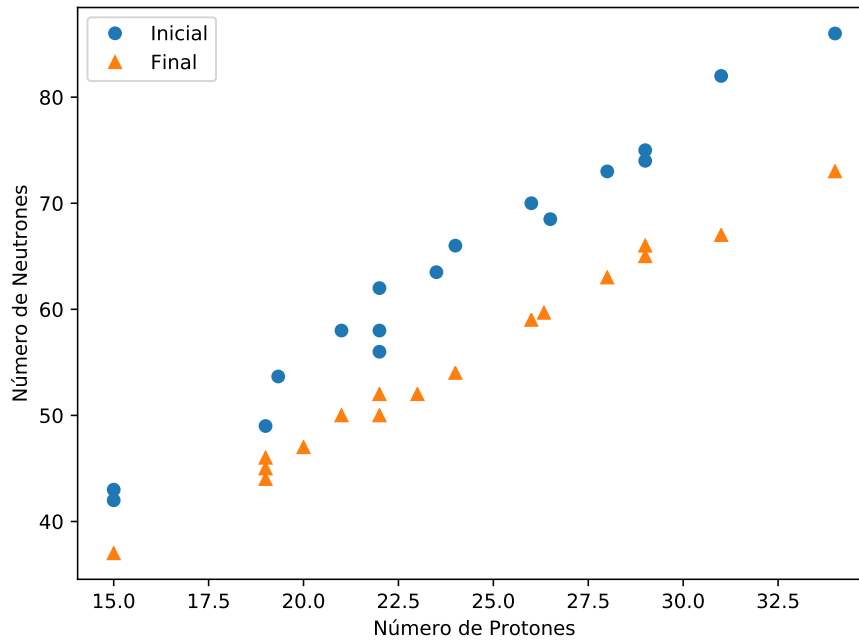


Figura 5.14: Distribución asintótica e inicial de masas para un sistema con $x = 0,1$, $\rho = 0,05 \text{ fm}^{-3}$ y $T = 0,1 \text{ MeV}$, para una expansión lenta ($\dot{\eta} = 0,0001 c/\text{fm}$), con el algoritmo de reconocimiento ECRA. Al comparar con la figura 5.13, notar la diferencia de escalas en el eje y.

la mediación del término atractivo V_{np} del potencial que resistieron la expansión.

También analizamos la expansión de materia rica en neutrones infinita descrita a través del modelo del pequeño big bang. Mostramos que, en general, la identificación adecuada de la estructura depende mucho del algoritmo escogido, siendo ECRA y MSTpC los más adecuados para encontrar las estructuras y ECRA el más estable. Este enfoque, combinado con distintos algoritmos reconocedores de fragmentos, nos permitió identificar la dinámica de la formación de fragmentos. El estado asintóticos mostró una alta dependencia con la velocidad de expansión, tanto en la distribución de masa como en la distribución espacial de los fragmentos: para velocidades suficientemente altas, la expansión era similar a una *fractura mecánica*, donde la distribución espacial estaba altamente correlacionada con el estado original. Sin embargo, para velocidades más bajas, la expansión era una *expansión térmica*, en la que el estado asintótico era relativamente homogéneo. Los fragmentos formados en la expansión más lenta eran mucho más grandes que los formados en la expansión rápida. Un análisis cuidadoso de la dinámica de formación de fragmentos mostró que se formaron muy temprano en la expansión. En particular, la novedosa estructura que llamamos *pregnocchi* es de considerable relevancia, ya que de acuerdo al análisis de ECRA estos agregados preexistentes evolucionan en una nube de neutrones, resultando en configuraciones en las que el *r-process* se puede desarrollar.

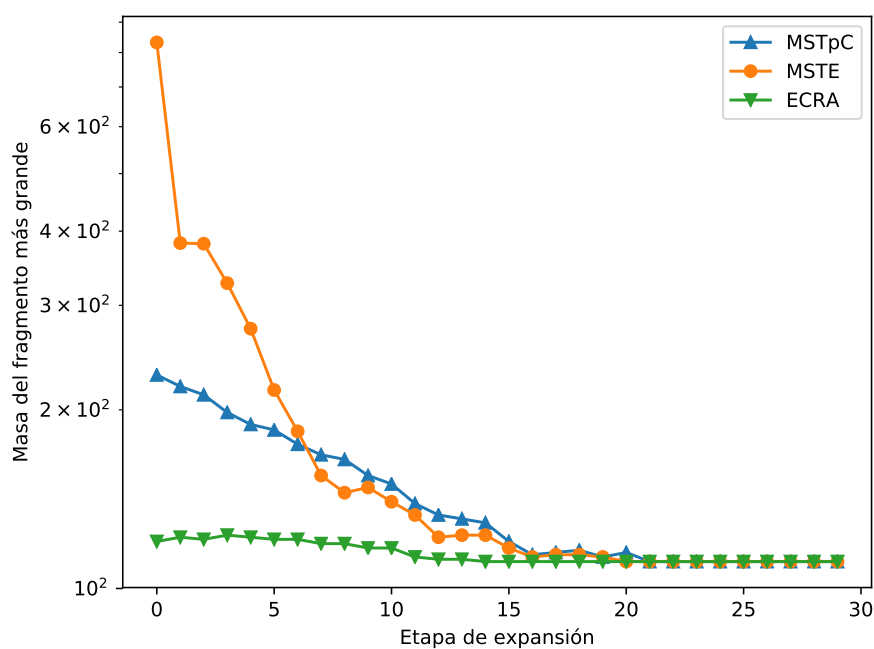


Figura 5.15: Masa del fragmento más grande para MSTE, MSTpC y ECRA para las etapas iniciales de la evolución, para la configuración *pre-gnocchi*. Se puede observar que el fragmento de ECRA identifica las estructuras que se forman tempranamente y dan lugar a los fragmentos asintóticos, mientras que los otros dos algoritmos resultan en fragmentos que son siempre más grandes y tardan más en estabilizarse.

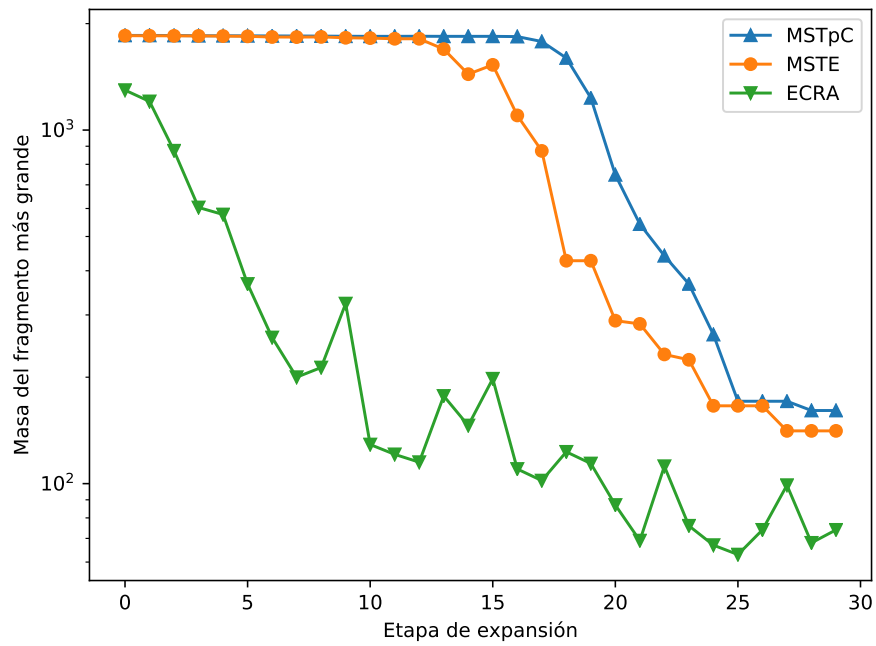


Figura 5.16: Masa del fragmento más grande para MSTE, MSTpC y ECRA para las etapas iniciales de la evolución, para la configuración *lasagna*. Aquí se puede notar que, como en el caso anterior, el algoritmo ECRA reconoce la fractura del fragmento infinito muy tempranamente. En el régimen asintótico (por tiempos muy largos, no se muestra en las figuras) estos tres algoritmos dan los mismos resultados.

6. Conclusiones y Perspectiva

A lo largo de esta tesis, dedicamos gran parte del trabajo a la ecuación de estado de la materia de estrellas de neutrones en condiciones de equilibrio a través de simulaciones computacionales de dinámica molecular, con detalle al nivel de los protones y neutrones. El primer paso para describirla fue estudiar el rol del término electrostático de Coulomb en ella. Uno de los modelos más utilizados para el término de Coulomb es el de la aproximación de Thomas-Fermi, en el que la interacción de Coulomb está apantallada con una longitud de apantallamiento λ_D que, de acuerdo a cálculos teóricos, es $\lambda \approx 100 \text{ fm}$. Sin embargo, en simulaciones con detalle a nivel de los nucleones (como las que utilizamos en este trabajo), este valor es prohibitivo y fue históricamente y arbitrariamente reducido a $\lambda \approx 10 \text{ fm}$, con la expectativa de mantener la fenomenología básica cuando se estudiaban sistemas pequeños. Encontramos, sin embargo, que existe una longitud de apantallamiento crítica λ_c a partir de la cual la estructura del estado fundamental cambia drásticamente. Para $\lambda < \lambda_c$, las estructuras no homogéneas que emergen de las simulaciones se deben a efectos de tamaño finito, efecto que se nota a partir de la presión negativa de estas estructuras y la presencia de una estructura por celda. Para $\lambda > \lambda_c$ la presión se vuelve positiva y los sistemas presentan fluctuaciones de densidad a una escala menor que la de la celda, pero no con la forma de la pasta típica. Este régimen de transición se caracteriza por grandes fluctuaciones en la superficie, ancho medio y característica de Euler χ de las estructuras. Es recién para $\lambda = 20 \text{ fm}$ que la morfología de las estructuras se estabiliza y deja de depender de λ y reproducen las pastas usuales. A partir de este resultado, utilizamos $\lambda = 20 \text{ fm}$ como valor

para la longitud de apantallamiento, ya que es factible computacionalmente y reproduce la física de la aproximación de Thomas-Fermi.

Estudiamos también la dependencia de la materia de estrellas de neutrones para temperaturas distintas de cero, y encontramos una transición de fase de tipo sólido-líquido para todas las densidades estudiadas a temperaturas muy bajas, caracterizada a través del coeficiente de Lindemann y las curvas calóricas. Además, esta transición está marcada por una discontinuidad en los funcionales de Minkowski. La transición no altera la forma típica de la pasta: la fase líquida preserva la forma de la pasta encontrada en la fase sólida.

Para temperaturas superiores a $T \approx 0,7 \text{ MeV}$, las formas típicas de la pasta se vuelven inestables y el sistema adopta estructuras más desordenadas, pero aún heterogéneas. Sin embargo, el pico del factor de estructura de bajo momento en estas estructuras se mantiene bastante elevado: las formas tradicionales de pasta no son necesarias para tener un alto factor de estructura y, en consecuencia, un alto scattering de neutrinos energéticos. De este modo, la existencia de formas tradicionales de pasta –que sólo se obtienen a temperaturas muy bajas– no es una condición necesaria para el scattering de neutrinos en la corteza de las estrellas de neutrones.

Más aún, encontramos que a $T \sim 0,7 \text{ MeV}$ el sistema puede existir en varios estados estables, todos con distinta morfología, pero con energías internas muy cercanas. A partir de nuestras simulaciones a (N, V, T) fijos, estos estados parecen estar separados por barreras de energía relativamente altas, que hacen que la transición entre ellos sea un evento poco probable, no observado a partir de una sola simulación. De todos modos, las distribuciones de energía obtenidas a partir de distintas condiciones iniciales se solapan considerablemente, indicando que cualquiera de ellos puede ser el estado de equilibrio a esa temperatura. Todo esto indica que el estado real de estos sistemas a temperaturas bajas, pero finitas, debe ser descrito a través del estudio de un ensamble de estructuras en vez de una sola estructura tipo pasta.

Para realizar un estudio más detallado de estas pastas no tradicionales y de su scattering, estudiamos el comportamiento del factor de estructura de neutrón-neutrón y la función de distribución de pares para un gran rango de densidades, temperaturas y fracción de protones. Observamos que para densidades altas $\rho > 0,03 \text{ fm}^{-3}$, donde esperamos que aparezcan fragmentos muy grandes (*spaghetti* u *lasagna*), la longitud de onda del pico de opacidad se mantiene relativamente constante, y la máxima opacidad se obtiene para neutrinos muy energéticos ($E_\nu \approx 80 \text{ MeV}$, típicos de una muy inicial etapa de evolución de las proto-estrellas de neutrones). A medida que disminuye la densidad, nos movemos hacia la fase de *gnocchi*, en la cual los fragmentos son de tamaño finito y la máxima opacidad se mueve a energías menores. Este aumento en la opacidad no sólo se produce cuando

las heterogeneidades forman parte de las comúnmente conocidas como pasta nuclear, sino también cuando son bastante diferentes (la *pasta nuclear generalizada*). También es relevante recordar que la opacidad no se produce para una longitud de onda en particular, sino que para un espectro bastante amplio de ellas.

Es de esperar que estos resultados sean cualitativamente correctos, pero que dependan cuantitativamente del modelo escogido para describir la materia rica en neutrones. El modelo que estamos utilizando en este trabajo fue puesto a prueba extensivamente en colisiones y en física de iones pesados; es por esta razón que lo escogimos para describir cuantitativamente la materia rica en neutrones.

Finalmente, pasamos a estudiar el comportamiento de la materia de estrellas de neutrones fuera del equilibrio. Específicamente, la formación de fragmentos a partir de experimentos numéricos de sistemas expandidos homogéneamente. Para analizar la estructura del sistema en función del tiempo, desarrollamos una herramienta basada en análisis de grafos para identificar fragmentos infinitos para cualquier tipo de fragmentos aditivos. Una vez que este formalismo fue aplicado a las simulaciones mencionadas, pudimos identificar la región en la que se da una distribución de fragmentos de tipo ley de potencias. Esta distribución tiene regímenes desde U-shaped hasta decaimiento exponencial.

Para poder modelar la fragmentación para diferentes parametrizaciones del potencial, estudiamos las propiedades estructurales de la corteza de estrellas de neutrones a través de tres potenciales distintos. Estos potenciales involucran un término nuclear escogido para reproducir energías de ligadura y compresibilidad de la materia nuclear, sumado a la interacción de Coulomb. Para analizar las estructuras que se forman utilizamos cuatro tipos distintos de algoritmos reconocedores de fragmentos: MST, MSTe, MSTpC y ECRA-BFM. Con estos algoritmos encontramos que de los tres potenciales, dos de ellos (New Medium y SSP) desarrollaron una estructura nueva para bajas fracciones de protones que llamamos *pregnocchi*. Esta estructura consiste en agregados de protones formados por la mediación del término atractivo V_{np} del potencial que resistieron la expansión.

También analizamos la expansión de materia rica en neutrones infinita descrita a través del modelo del pequeño *big bang*. Mostramos que, en general, la identificación adecuada de la estructura depende mucho del algoritmo escogido, siendo ECRA y MSTpC los más adecuados para encontrar las estructuras y ECRA el más estable. Este enfoque, combinado con distintos algoritmos reconocedores de fragmentos, nos permitió identificar la dinámica de la formación de fragmentos. Un análisis cuidadoso de la dinámica de formación de fragmentos mostró que se formaron muy temprano en la expansión. En particular, la novedosa estructura que llamamos *pregnocchi* es de considerable relevancia, ya que de acuerdo al análisis de ECRA estos agregados preexistentes evolucionan en

una nube de neutrones, resultando en configuraciones en las que el *r-process* se puede desarrollar.

6.1 Perspectivas de futuro

6.1.1 Modelo para la interacción nuclear

Como ya vimos en los resultados mostrados, muchos de los resultados dependen (con mayor o menor sensibilidad) del modelo elegido para la parametrización. Quizás el caso más extremo que vimos es la presencia de *pre-gnocchi* para una parametrización específica, mientras que no lo encontramos para otras. Hay otras diferencias también más sutiles: entre ellas el valor de λ_c del capítulo 2 o las temperaturas de transición sólido-líquido que vimos en el capítulo 3. Estos modelos están ajustados para poder describir apropiadamente las características de la materia nuclear infinita: la energía mínima, la densidad de equilibrio y la compresibilidad, entre otras características. Uno de los caminos para contrastar la validez del modelo es que reproduzca, a grandes rasgos, la forma de la curva de energía de ligadura de los núcleos. Hay un camino posible para realizar aquí, entonces, que consiste en desarrollar un modelo que, manteniendo las características de la materia nuclear, ajuste mejor a la curva de los núcleos conocidos.

Dentro de estos caminos posibles, uno que vale la pena analizar es el uso del potencial de Pauli [DDR87, DR88]. Éste consiste en agregar una interacción en el espacio de momentos de los fermiones a través de una gaussiana:

$$V(q_{ij}, p_{ij}) = V_0 \left(\frac{\hbar}{p_0 q_0} \right)^D \exp \left(- \frac{(p_{ij}/p_0)^2 + (q_{ij}/q_0)^2}{2} \right) \quad (6.1)$$

La gran ventaja de agregar un potencial de esta forma es que permite identificar apropiadamente la componente de energía de simetría de la ecuación de estado.

Un posible trabajo futuro entonces, para robustecer este enfoque, es el desarrollo de nuevos potenciales de interacción.

6.1.2 Opacidad a neutrinos de estrellas

Los modelos hidrodinámicos para la materia rica en neutrones [RJS95, MCB⁺98, GKP04, WJ05, LRJM05] pueden sugerir fracciones de protones, densidades y temperaturas para distintas condiciones (supernovas, proto-estrellas de neutrones, estrellas de neutrones). A partir de trabajos microscópicos podemos hallar la opacidad, distribución de neutrones (y consecuentemente probabilidad de *r-process*) en función de (ρ, T, x) e insertar las predicciones de cada modelo en los cálculos hidrodinámicos. En general, la

propia opacidad a los neutrinos es un parámetro utilizado en los modelos hidrodinámicos; así, dependiendo de la función de opacidad que se escoja, la evolución de las estrellas será distinta. Combinando la opacidad con modelos microscópicos y la evolución de modelos hidrodinámicos, podemos hallar posibles diferencias en los observables que predicen estos modelos, comprobar su validez y, en consecuencia, avanzar hacia la ecuación de estado de la materia nuclear.

6.1.3 ¿Existen las pastas tradicionales?

A lo largo de este trabajo, y desde el trabajo original de Williams y Koonin del año 1985 [WK85], se ha hecho mucho hincapié en las pastas nucleares como las fluctuaciones de densidad de largo rango. En un trabajo de este grupo [GMD15] notamos que las pastas tradicionales, en el marco de la materia nuclear (sin la interacción de Coulomb) eran un artefacto producido por las condiciones periódicas de contorno. Estas *pseudo pastas* también se producen en casos como el gas de Lennard-Jones, como estudiaron Binder *et al* [BBVT12]. En este estudio también se observó que, si bien por motivos geométricos las *pseudo pastas* son el estado de menor energía, su comportamiento es muy sensible con la temperatura a medida que aumenta el tamaño del sistema.

Esencialmente la energía de un sistema de Lennard-Jones se puede escribir con sus contribuciones de volumen y superficie $E = E_S - E_V$. De este modo, minimizar la superficie minimiza la energía total. En general, el cuerpo geométrico que minimiza la superficie es una esfera. Al existir condiciones periódicas de contorno, las partículas de Lennard-Jones pueden “pegarse” a través de las paredes de la caja, formando así un bloque o un cilindro infinito que tenga menos área que la esfera (ya que las tapas del cilindro desaparecen al pegarse sobre sí mismo). Esta característica hace que las llamemos *pseudo pastas*.

Cuando agregamos la temperatura el problema toma otra característica importante. Los sistemas a temperatura distinta de cero no minimizan su energía, sino la energía libre de Helmholtz $A = E - TS$. De este modo, hay que considerar en las variaciones en la geometría que minimicen la energía, el efecto que éstas tienen sobre la entropía. En el caso de los sistemas de Lennard-Jones, estas *pseudo pastas* existen sólo para sistemas pequeños; a medida que aumenta el número de partículas, la temperatura a la que aparecen las *pseudo pastas* disminuye hasta llegar a ser $T = 0$ para el sistema infinito.

El comportamiento del sistema de materia nuclear sin Coulomb es similar en este respecto. La pregunta que prosigue es: ¿se observa este efecto también en las pastas nucleares con la interacción de Coulomb? Algo de esto ya notamos en el capítulo 3, al encontrar un ensamble de pastas con energías muy similares a las de la pasta tradicional. Como el sistema de materia nuclear con Coulomb tiene un grado de libertad extra (la

fracción de protones), pretendemos realizar este estudio con partículas con Lennard-Jones y una interacción de Yukawa y observar cómo se comportan las estructuras que se forman al variar el número de partículas y la temperatura.

A lo largo de esta tesis hemos publicado en distintas revistas los siguientes artículos:

- **2018** P. N. Alcain, C. O. Dorso: Dynamics of fragment formation in neutron-rich matter, *Phys. Rev. C* 97 (1), 015803.
- **2017** P. N. Alcain, C. O. Dorso: Fragmentation of Neutron Star Matter. Capítulo del libro Nuclear Particle Correlation and Cluster Physics, 155–175.
- **2017** P. N. Alcain, C. O. Dorso: The neutrino opacity of neutron rich matter *Nucl. Phys. A* 961, 183–199.
- **2014** P. N. Alcain, P. A. Giménez Molinelli, C. O. Dorso: Beyond nuclear “pasta”: Phase transitions and neutrino opacity of new “pasta” phases, *Phys. Rev. C* 90 (6), 065803.
- **2014** P. N. Alcain, P. A. Giménez Molinelli, J. I. Nichols, C. O. Dorso: Effect of Coulomb screening length on nuclear “pasta” simulations, *Phys. Rev. C* 89 (5), 055801.

A. Dinámica Molecular

La dinámica molecular es una técnica de simulación computacional para estudiar la evolución temporal de un sistema sujeto a ciertas condiciones de contorno. Conociendo la expresión para la fuerza de interacción entre pares de partículas, consiste esencialmente en la solución numérica de la ecuación de Newton $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$. Dos técnicas son fundamentales para realizar las simulaciones que hemos hecho a lo largo de este trabajo.

A.1 Integración Temporal

A cada tiempo $t_i = t$ calculamos todas las fuerzas y, con la aceleración correspondiente, hallamos las posiciones y velocidades de la partícula a tiempo $t_{i+1} = t + \Delta t$. A pesar de que hay una gran multiplicidad de técnicas [HLW02] para encontrar las posiciones en el tiempo t_{i+1} , quizás una de las características más fundamentales que se buscan en estos algoritmos es que sean **simplécticos**, es decir, que conserven el volumen en el espacio de fases $dp \wedge dq$, como lo hace la evolución hamiltoniana exacta de acuerdo al teorema de Liouville. Uno de los algoritmos de evolución temporal más conocidos que cumplen el teorema de Liouville es el *velocity verlet*, que es el que utilizamos en este trabajo.

A.2 Termostatos

La integración numérica de las ecuaciones de Newton naturalmente llevan a un sistema en el que se conserva la energía (a menos de errores computacionales). Para realizar nuestro

estudio, sin embargo, nos gustaría poder controlar la *temperatura* del sistema. En términos termodinámicos, la integración temporal de las ecuaciones de Newton forma un ensamble microcanónico, en el que se conservan la energía, número de partículas y volumen; mientras que nosotros necesitamos un ensamble *canónico*, en el que se conserven la temperatura, el número de partículas y el volumen. Las técnicas utilizadas para implementar sistemas de temperatura constante son llamadas *termostatos*. A pesar de que existen una gran cantidad de técnicas para lograrlo, las más conocidas y extendidas son los termostatos de Nose-Hoover, Andersen y Liouville. En los cálculos realizados aquí utilizamos el termostato de Nose-Hoover, que tiene como característica fundamental ser un algoritmo determinístico. Uno de los mayores defectos es que, para sistemas sencillos, el termostato de Nose-Hoover no genera un sistema ergódico. Sin embargo, esta característica se puede aminorar usando los que se conocen como *chained Nose-Hoover* y su impacto en sistemas grandes y caóticos es prácticamente inexistente. Para cálculos que requiere explícitamente de la ergodicidad (como, por ejemplo, un estudio detallado de las fases de la pasta nuclear) sí sería recomendable la utilización de otros termostatos como, por ejemplo, el Braga-Travis y Patra-Bhattacharya.

B. Funcionales de Minkowski

Consideremos una red bidimensional cuadrada, donde cada uno de los casilleros puede estar o no ocupado, formando un patrón. De acuerdo a la geometría integral, existen tres funcionales aditivas (las funcionales de Minkowski) que describen el contenido morfológico de dicho patrón: el área A , el perímetro U y la característica de Euler χ , que describe la topología del patrón: en dos dimensiones, χ es el número de regiones de casilleros ocupados que están completamente conectados menos el número de regiones completamente conectadas por casilleros vacíos. Decimos que dos casilleros están “conectados” si y sólo si son primeros o segundos vecinos o pueden ser conectados a través de casilleros ocupados que son primeros o segundos vecinos.

Conceptualmente, el procedimiento para calcular estas funcionales consta de dos partes. Primero, descomponemos cada casillero en 4 vértices, 4 lados y el interior del casillero, como en la figura B.1. Luego contamos la cantidad de interiores de casilleros n_s , lados n_e y vértices n_v y calculamos el área A , perímetro U y característica de Euler χ mediante:

$$A = n_s, \quad U = 4n_s + 2n_e, \quad \chi = n_s - n_e + n_v \quad (\text{B.1})$$

Para el ejemplo de la figura B.1 hallamos $A = 8$, $U = 16$ y $\chi = 0$.

Para una red cúbica tridimensional, hay 4 funcionales de Minkowski: el volumen V , la superficie S , el ancho medio B y la característica de Euler χ . Así como en el caso bidimensional, el primer paso para calcular estos tres números es considerar cada casillero como la unión de 8 vértices, 12 lados, 6 caras y el interior del cubo. A partir de esto,

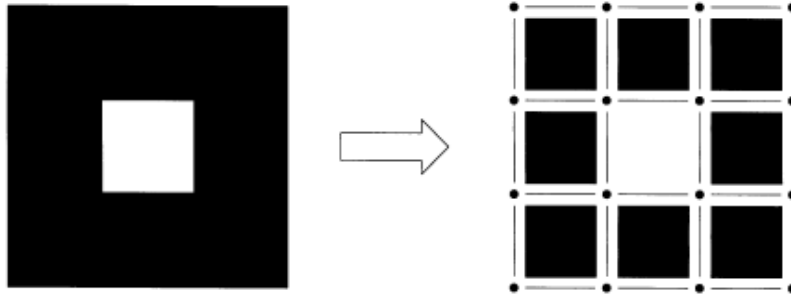


Figura B.1: Ejemplo de implementación de la digitalización y cálculo de funcionales de Minkowski en dos dimensiones, extraída de [MDR01].

análogamente con el caso 2D, las funcionales de Minkowski se pueden calcular como:

$$V = n_c, \quad S = -6n_c + 2n_f \quad 2B = 3n_c - 2n_f + n_e \quad \chi = -n_c + n_f - n_e + n_v \quad (\text{B.2})$$

donde n_c es el número de casilleros y n_f el número de caras.

El procedimiento entonces para encontrar estas funcionales de Minkowski para las estructuras que se forman es entonces el de digitalizar la estructura: a cada partícula le asignamos un radio r_p y subdividimos el espacio tridimensional en una grilla cúbica. Decimos que un sitio de esa grilla está ocupado si existe al menos una partícula a distancia $d < r_p$ de dicho sitio. Una vez que tenemos la estructura *digitalizada*, procedemos a contar cubos, caras, vértices y lados para encontrar las funcionales de Minkowski.

C. Reconocedores de Fragmentos

En escenarios como multifragmentación, colisiones e incluso reacciones químicas, una de las tareas más usuales es la identificación de fragmentos. De acuerdo a la concepción de los fragmentos, estos se dividen en dos grandes grupos: los geométricos y los dinámicos.

C.1 Fragmentos geométricos

En los fragmentos geométricos lo único relevante es la disposición espacial de las partículas. El modelo de fragmento geométrico más expandido en dinámica molecular es el llamado MST, en el que dos partículas pertenecen al mismo cluster $\{C_n^{\text{MST}}\}$ si la distancia entre ellas es menor que una distancia de corte r_{cut} :

$$i \in C_n^{\text{MST}} \Leftrightarrow \exists j \in C_n \mid r_{ij} < r_{\text{cut}}$$

Hay una gran cantidad de métodos para encontrar clusters geométricos, una rama de la clasificación computacional que ha crecido mucho gracias a su utilización en *machine learning*. La gran ventaja (y el motivo por el que es tan extendido el uso) de MST tiene un significado físico detrás: si la interacción entre las partículas es atractiva y las partículas tuvieran velocidad cero, todas las partículas que forman parte del cluster MST estarían ligadas energéticamente.

Sin embargo, si las partículas tienen velocidad no nula, varias partículas pueden formar parte de un mismo cluster MST por un lapso de tiempo muy breve. Supongamos, por ejemplo, dos partículas con una interacción atractiva que están a una distancia $r < r_{\text{cut}}$

pero que tienen una velocidad relativa tal que $K_{ij} + V_{ij} > 0$. Estas partículas forman parte del mismo cluster MST, pero luego de un tiempo t_0 su distancia va a aumentar hasta ser $r > r_{cut}$. ¿Es correcto decir que las partículas formaban un cluster a $t < t_0$ pero no lo forman a $t > t_0$? Parece más adecuado decir que las dos partículas no formaban parte del mismo cluster, sino que eran simplemente dos clusters distintos que, temporariamente, estuvieron cerca. Es por esto que muchas veces se asocian los fragmentos MST a los fragmentos *instantáneos* y no fragmentos *estables*.

C.2 Fragmentos dinámicos

Como dijimos, la definición de fragmento geométrico lleva a pensar en un fragmento espacial instantáneo. Si queremos identificar los fragmentos teniendo en cuenta su dinámica, tenemos que considerar la energía cinética y potencial relativa. El ejemplo que dimos anteriormente del sistema de dos partículas puede ser extendido a un sistema de muchas partículas. Inspirados en los cluster MST, definimos los clusters MSTE. En este caso, dos partículas pertenecen al mismo cluster $\{C_n^{\text{MSTE}}\}$ si están ligados energéticamente:

$$i \in C_n^{\text{MSTE}} \Leftrightarrow \exists j \in C_n : V_{ij} + K_{ij} \leq 0$$

A pesar de que esta definición de clusters mejora notablemente la estabilidad de los clusters con el tiempo, un simple ejemplo puede ser estudiado para ver cuán estables son los clusters MSTE. Consideremos una simple interacción del tipo pozo de potencial, en la que

$$V_{ij}(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } r \leq a \\ 0 & \text{si } r > a. \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Estudiemos ahora un conjunto de partículas de masa m con posiciones $r_i = ia$ (con $i \in \mathcal{Z}$) tal que todas las partículas están a distancia a de sus vecinos más cercanos. Si la velocidad es $v_i = iv$, cada partícula va a estar unida energéticamente con sus vecinos siempre que $v \leq \sqrt{2V_0/m}$. Para $2n+1$ partículas, con $-n \leq i \leq n$, la energía cinética del sistema será

$$K_{\text{CM}} = \sum_{i=-n}^n \frac{1}{2} m i^2 v^2 \quad (\text{C.2})$$

$$= \frac{n^3}{3} m v^2 + \mathcal{O}(n^2) \quad (\text{C.3})$$

La energía potencial es

$$V_{\text{CM}} = \sum_{i=-n}^n -iV_0 \quad (\text{C.4})$$

$$= -2n^2 V_0 \quad (\text{C.5})$$

Así, para n suficientemente grandes, este cluster va a ser claramente inestable en el tiempo, ya que su energía total es mayor a cero.

El modelo de clusters más estables de los desarrollados hasta ahora es el Algoritmo de Reconocimiento Temprano de Fragmentos [DR93], ECRA por sus siglas en inglés. En este algoritmo, las partículas se particionan en distintos fragmentos disjuntos, C_n^{ECRA} , con la energía total para cada fragmento:

$$\epsilon_n = \sum_{i \in C_n} K_i^{\text{CM}} + \sum_{i,j \in C_n} V_{ij}$$

donde K_i^{CM} es la energía cinética relativa al centro de masa del fragmento. El conjunto de fragmentos $\{C_n\}$ es, entonces, el que minimiza la suma de todas las energías de los fragmentos $E_{\text{partición}} = \sum_n \epsilon_n$.

El enfoque de este algoritmo es muy distinto a los anteriores ya que no es aditivo. Esto hace necesario que las posibles distribuciones de fragmentos tengan que ser estudiadas caso por caso, y la solución entonces pertenece al universo de la optimización combinatoria. Para encontrar soluciones aproximadas, el método propuesto originalmente es similar al Recocido Simulado [DR93]. Para sistemas grandes este método tarda mucho en converger, por lo que utilizamos el Modelo de Fusión Binaria desarrollado por Puente [Pue99]. En este modelo, partimos de una configuración con todas las partículas en un cluster distinto. Partiendo de esta situación, en la que $E_{\text{partición}}^0 = 0$, seguimos los siguientes pasos:

1. Explorar todas las posibles fusiones de dos clusters y calcular la energía de partición $E_{\text{partición}}^{i+1}$ de cada una de ellas.
2. Elegir la fusión que resulte en la menor $E_{\text{partición}}^{i+1}$.
3. Si $E_{\text{partición}}^{i+1} < E_{\text{partición}}^i$, realizar la fusión y volver al paso inicial; si no, detener la iteración.

Este método da, para sistemas grandes, resultados muy similares al resultado exacto de ECRA.¹ Justamente por la *estabilidad* de estos clusters es que identifican clusters *asintóticos*; para tiempos muy largos (una vez que la dinámica ya está resulta en gran parte y sólo queda la dinámica interna de cada cluster) todos estos modelos de clusters identifican los mismos estados.

¹ Este método es muy similar a la *2-opt* para resolver aproximadamente el problema del viajante

D. Cálculo del factor de estructura

El factor de estructura de un sistema se define desde la *amplitud de scattering* [EB03]

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \frac{1}{\langle b \rangle} \sum_i b_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (\text{D.1})$$

con $\mathbf{Q}$ el vector de difracción o transferencia de momento. $\mathbf{R}_i$ es la posición de la partícula i , y $\langle b \rangle$ es el promedio de la amplitud de scattering de cada partícula en el vacío b_i . A partir de este momento, vamos a considerar que todas las partículas son de la misma especie, $b_i = b$.

Con $\Psi(\mathbf{Q})$ definimos $S(\mathbf{Q})$ como

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N} |\Psi(\mathbf{Q})|^2$$

La conclusión *inmediata* de esta expresión es que el factor de estructura debe ser positivo siempre para todo valor de $\mathbf{Q}$. Podemos expandir la amplitud de scattering y utilizar $|z|^2 = z \cdot z^*$ y, si todos los átomos son del mismo tipo,

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{Q}) &= \frac{1}{N} \left(\sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \right) \left(\sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\
&= \frac{1}{N} \left[N + \sum_{i < j} \left(e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} + e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \right) \right] \\
&= 1 + \frac{2}{N} \sum_{i < j} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{ij}
\end{aligned}$$

Usualmente estamos interesados en el conocido como *promedio de polvo* del factor de estructura: es decir, el factor de estructura promediado para todas las posibles orientaciones del vector de difracción (ya que en un polvo tenemos muchas estructuras orientadas al azar). Calculamos entonces

$$S(q) = \frac{1}{4\pi} \int d\phi d(\cos \theta) S(\mathbf{Q})$$

Esta integral puede ser calculada fácilmente si colocamos el eje z en la dirección de $\mathbf{Q}$ e integramos rotando las distancias $\mathbf{R}_{ij}$

$$\begin{aligned}
S(q) &= \frac{1}{4\pi} \int d\phi d(\cos \theta) \left[1 + 2 \sum_{i < j} \cos(q r_{ij} \cos \theta) \right] \\
&= 1 + \frac{1}{2N} \int d(\cos \theta) 2 \sum_{i < j} \cos(q r_{ij} \cos \theta) \\
&= 1 + \frac{1}{2N} 2 \sum_{i < j} \frac{\sin(q r_{ij} u)}{q r_{ij}} \Big|_{u=-1}^{u=1} \\
&= 1 + \frac{2}{N} \sum_{i < j} \frac{\sin(q r_{ij})}{q r_{ij}}
\end{aligned}$$

Esta es la famosa fórmula de Debye y, como es el promedio de una cantidad que es siempre positiva, debe ser siempre positiva.

Uno de los problemas más usuales cuando modelamos y estudiamos sistemas en simulaciones computacionales es que no tenemos *realmente* sistemas infinitos. Usamos, para emular el comportamiento de sistemas infinitos, condiciones periódicas de contorno (CPC). Con las condiciones periódicas de contorno utilizamos la convención de la mínima imagen: de todas las posiciones posibles a través de los contornos para las partículas i y j , escogemos el par más cercano. Utilizando este método para un caso de prueba muy simple

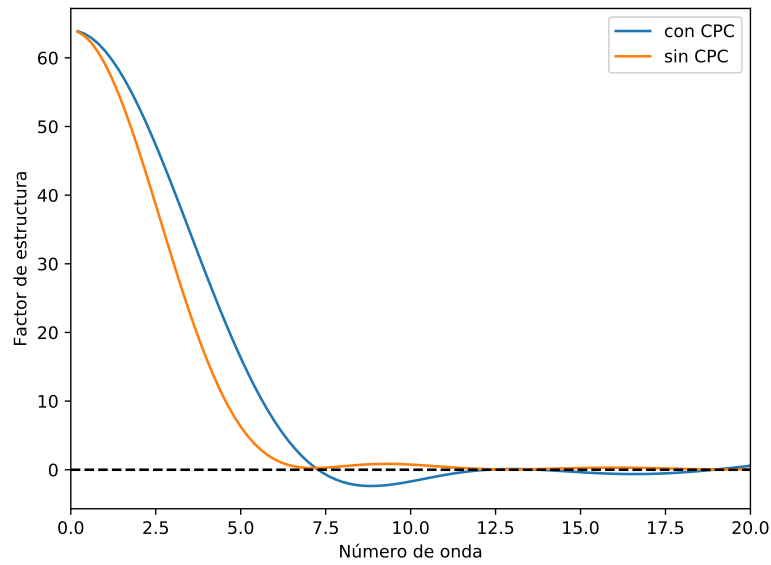


Figura D.1: Comparación del factor de estructura con y sin CPC. Es evidente que el factor de estructura calculado con CPC muestra valores negativos, que no deberían existir desde la misma definición del factor de estructura.

(una red cúbica simple tridimensional con $4 \times 4 \times 4 = 64$ partículas) calculamos el factor de estructura que se puede ver en la figura D.1.

Podemos ver que el factor de estructura calculado con CPC genera valores negativos, a pesar de que estos valores deberían estar prohibidos. La razón por la que esto sucede es la convención de mínima imagen: la distancia entre los pares ahora no es siempre $r_{ij} = r_j - r_i$, sino que depende de si utilizamos las partículas originales o sus imágenes. En consecuencia, este “nuevo” factor de estructura no es el producto de dos complejos conjugados¹. Para explorar el efecto que tiene la convención de la mínima imagen tiene en el factor de estructura, mostramos una comparación del factor de estructura con y sin condiciones de contorno (es decir, con los 64 átomos en el vacío) en la figura D.1.

Esto muestra que el factor de estructura, cuando utilizamos su definición, *sin la convención de la mínima imagen*, es (como era de esperar) siempre positivo.

La pregunta persiste: ¿cómo podemos simular un medio infinito cuando calculamos factores de estructura? La primera respuesta es que no es obvio que esto pueda ayudar en un medio realmente infinito, ya que las imágenes periódicas de la celda estarían alineadas en un cristal que puede interferir con la estructura dentro de la celda (la que queremos estudiar). Sin embargo, unas pocas réplicas podrían ser suficientes para borrar considerablemente los

¹Más aún, ahora la parte imaginaria de $S(Q)$ ya no es nula

efectos de tamaño finito. Una posibilidad es replicar explícitamente la caja, creando las partículas en las celdas vecinas, multiplicando las originales. Esto, sin embargo, implica un calculo mucho más difícil, ya que la suma para calcular la función de distribución de pares es sobre N^2 partículas, y replicarla sólo una celda a la derecha y a la izquierda en cada dirección implicaría un tiempo computacional de $(3^3 \cdot N)^2 \approx 700 \cdot N^2$. En general, la complejidad $\mathcal{O}(N^2)$ hace que el cálculo del factor de estructura sea muy costoso para sistemas grandes.

Hay una alternativa para agregar las condiciones de contorno. Comenzamos con la definición de la *amplitud de scattering* como en D.1, pero escribiendo explícitamente las imágenes que queremos considerar:

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \sum_i \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{L}_j)} \quad (\text{D.2})$$

donde $\Delta\mathbf{L}_j$ es la distancia entre una partícula y su réplica j -ésima. Como las sumas son independientes, podemos escribir:

$$\Psi(\mathbf{Q}) = \left(\sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \right) \left(\sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \Delta\mathbf{L}_j} \right) \quad (\text{D.3})$$

Multiplicando por el conjugado, obtenemos el factor de estructura

$$S(\mathbf{Q}) = \left| \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \right|^2 \left| \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \Delta\mathbf{L}_j} \right|^2 \quad (\text{D.4})$$

$$= S_{\text{celda}}(\mathbf{Q}) S_{\text{CPC}}(\mathbf{Q}) \quad (\text{D.5})$$

La ventaja de este cálculo es que es lineal en la suma del número de partículas y el número de réplicas que consideremos, $\mathcal{O}(N + M)$, mucho menor que el previo $\mathcal{O}(N^2 M^2)$. En consecuencia, si queremos concentrarnos en una región de $\mathbf{Q}$, este nuevo enfoque será útil². Quedamos con sólo un detalle, respecto del *powder average*. No es trivial cómo calcular esta integral, ya que necesitamos darle pesos adecuados a cada ángulo. En este trabajo utilizamos la cuadratura de Lebedev [Leb75], aunque otros métodos (como Muestreo por Importancia de Montecarlo) pueden ser útiles en esta situación.

²Consideremos que con este método necesitamos $\mathcal{O}(N + M)$ cálculos para cada $\mathbf{Q}$, así que no podemos utilizarlo para barrer todo el espectro de $\mathbf{Q}$

Bibliografía

- [AD17a] Pablo Alcain and Claudio Dorso. Dynamics of Fragment Formation in Neutron Rich Matter. *arXiv:1705.11084 [nucl-th]*, May 2017. arXiv: 1705.11084.
- [AD17b] Pablo N. Alcain and Claudio O. Dorso. Fragmentation of neutron star matter. In *Nuclear Particle Correlations and Cluster Physics*, pages 155–175. WORLD SCIENTIFIC, February 2017. DOI: 10.1142/9789813209350_0006.
- [AGMND14] P. N. Alcain, P. A. Giménez Molinelli, J. I. Nichols, and C. O. Dorso. Effect of Coulomb screening length on nuclear “pasta” simulations. *Phys. Rev. C*, 89(5):055801, May 2014.
- [APR98] A. Akmal, V. R. Pandharipande, and D. G. Ravenhall. Equation of state of nucleon matter and neutron star structure. *Phys. Rev. C*, 58(3):1804–1828, September 1998.
- [BBDM00] A. Bonasera, M. Bruno, C. O. Dorso, and F. Mastinu. Critical phenomena in nuclear fragmentation. 2000.
- [BBIM96] H. W. Barz, J. P. Bondorf, D. Idier, and I. N. Mishustin. Cluster production and correlations in nuclear molecular dynamics. *Physics Letters B*, 382(4):343–348, August 1996.

- [BBVT12] Kurt Binder, Benjamin J. Block, Peter Virnau, and Andreas Tröster. Beyond the Van Der Waals loop: What can be learned from simulating Lennard-Jones fluids inside the region of phase coexistence. *American Journal of Physics*, 80(12):1099–1109, December 2012.
- [BCDL03] A. Barranón, R. Cárdenas, C. O. Dorso, and J. A. López. The critical exponent of nuclear fragmentation. *APH N.S., Heavy Ion Physics*, 17(1):59–73, January 2003.
- [BDL01] A. Barranon, C. O. Dorso, and J. A. Lopez. Searching for criticality in nuclear fragmentation. *Revista mexicana de física*, 47:93–97, 2001.
- [BDL07] Armando Barrañón, Claudio O. Dorso, and Jorge A. López. Time dependence of isotopic temperatures. *Nuclear Physics A*, 791(1–2):222–231, July 2007.
- [Bet90] H. A. Bethe. Supernova mechanisms. *Rev. Mod. Phys.*, 62(4):801–866, October 1990.
- [BJS83] G. Bertsch and Philip J. Siemens. Nuclear fragmentation. *Physics Letters B*, 126(1):9–12, June 1983.
- [BKPT12] W. Michael Brown, Axel Kohlmeyer, Steven J. Plimpton, and Arnold N. Tharrington. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers – Particle–particle particle-mesh. *Computer Physics Communications*, 183(3):449–459, March 2012.
- [BML⁺96] M. Belkacem, P. F. Mastinu, V. Latora, A. Bonasera, M. D’Agostino, M. Bruno, J. D. Dinius, M. L. Fiandri, F. Gramegna, D. O. Handzy, W. C. Hsi, M. Huang, G. V. Margagliotti, P. M. Milazzo, C. P. Montoya, G. F. Peaslee, R. Rui, C. Schwarz, G. Vannini, and C. Williams. Searching for the nuclear liquid-gas phase transition in Au+Au collisions at 35 MeV/nucleon. *Phys. Rev. C*, 54(5):2435–2444, November 1996.
- [BRL04] A. Barrañón, J. Roa, and J. López. Entropy in the nuclear caloric curve. *Phys. Rev. C*, 69(1):014601, January 2004.
- [CGL⁺02] A. Chernomoretz, L. Gingras, Y. Larochelle, L. Beaulieu, R. Roy, C. St-Pierre, and C. O. Dorso. Quasiclassical model of intermediate velocity particle production in asymmetric heavy ion reactions. *Phys. Rev. C*, 65(5):054613, May 2002.

-
- [CMC⁺01] Shinpei Chikazumi, Toshiki Maruyama, Satoshi Chiba, Koji Niita, and Akira Iwamoto. Quantum molecular dynamics simulation of expanding nuclear matter and nuclear multifragmentation. *Phys. Rev. C*, 63(2):024602, January 2001.
- [CSHB15] M. E. Caplan, A. S. Schneider, C. J. Horowitz, and D. K. Berry. Pasta nucleosynthesis: Molecular dynamics simulations of nuclear statistical equilibrium. *Phys. Rev. C*, 91(6):065802, June 2015.
- [CYD97] K. S. Cheng, C. C. Yao, and Z. G. Dai. Properties of nuclei in the inner crusts of neutron stars in the relativistic mean-field theory. *Phys. Rev. C*, 55(4):2092–2100, April 1997.
- [DA95] C. O. Dorso and J. Aichelin. When and how are fragments formed in heavy ion collisions? *Physics Letters B*, 345(3):197–202, February 1995.
- [DB94] C. O. Dorso and P. E. Balonga. Fluctuation dynamics of fragmenting spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 50(2):991–995, August 1994.
- [DDR87] Claudio Dorso, Sergio Duarte, and Jørgen Randrup. Classical simulation of the Fermi gas. *Physics Letters B*, 188(3):287–294, April 1987.
- [DEIL06] C. O. Dorso, C. R. Escudero, M. Ison, and J. A. López. Dynamical aspects of isoscaling. *Phys. Rev. C*, 73(4):044601, April 2006.
- [DGML12] C. O. Dorso, P. A. Giménez Molinelli, and J. A. López. Topological characterization of neutron star crusts. *Phys. Rev. C*, 86(5):055805, November 2012.
- [DL01] C. O. Dorso and J. A. López. Selection of critical events in nuclear fragmentation. *Phys. Rev. C*, 64(2):027602, July 2001.
- [DML11] C. A. Dorso, P. A. Giménez Molinelli, and J. A. López. Isoscaling and the nuclear EoS. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.*, 38(11):115101, November 2011.
- [DR88] Claudio Dorso and Jørgen Randrup. Classical simulation of nuclear systems. *Physics Letters B*, 215(4):611–616, December 1988.
- [DR93] C. Dorso and J. Randrup. Early recognition of clusters in molecular dynamics. *Physics Letters B*, 301(4):328–333, March 1993.

- [DS96] C. O. Dorso and A. Strachan. Onset of fragment formation in periodic expanding systems. *Phys. Rev. B*, 54(1):236–243, July 1996.
- [EB03] Takeshi Egami and Simon J. L. Billinge. *Underneath the Bragg Peaks, Volume 16: Structural Analysis of Complex Materials*. Pergamon, 1 edition edition, October 2003.
- [FS01] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, October 2001.
- [FW03] Alexander L. Fetter and John Dirk Walecka. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. Courier Dover Publications, 2003.
- [GBJ11] Stephane Goriely, Andreas Bauswein, and Hans-Thomas Janka. r-process Nucleosynthesis in Dynamically Ejected Matter of Neutron Star Mergers. *ApJ*, 738(2):L32, 2011.
- [GKP04] U. Geppert, M. Küker, and D. Page. Temperature distribution in magnetized neutron star crusts. *Astronomy & Astrophysics*, 426(1):11, 2004.
- [GMD15] P. A. Giménez Molinelli and C. O. Dorso. Finite size effects in neutron star and nuclear matter simulations. *Nuclear Physics A*, 933:306–324, January 2015.
- [GMNLD14] P. A. Giménez Molinelli, J. I. Nichols, J. A. López, and C. O. Dorso. Simulations of cold nuclear matter at sub-saturation densities. *Nuclear Physics A*, 923:31–50, March 2014.
- [HG88] Brad Lee Holian and Dennis E. Grady. Fragmentation by molecular dynamics: The microscopic “big bang”. *Phys. Rev. Lett.*, 60(14):1355–1358, April 1988.
- [HLW02] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer Science & Business Media, 2002.
- [HPGC⁺04] C. Horowitz, M. Pérez-García, J. Carriere, D. Berry, and J. Piekarewicz. Nonuniform neutron-rich matter and coherent neutrino scattering. *Phys. Rev. C*, 70(6):065806, December 2004.

-
- [HPGP04] C. J. Horowitz, M. A. Pérez-García, and J. Piekarewicz. Neutrino-“pasta” scattering: The opacity of nonuniform neutron-rich matter. *Phys. Rev. C*, 69(4):045804, April 2004.
- [HSY84] Masa-aki Hashimoto, Hironori Seki, and Masami Yamada. Shape of Nuclei in the Crust of Neutron Star. *Prog. Theor. Phys.*, 71(2):320–326, February 1984.
- [Kap84] Joseph Kapusta. Deuteron and entropy production and the nuclear liquid-gas phase transition. *Phys. Rev. C*, 29(5):1735–1743, May 1984.
- [KMB⁺17] Daniel Kasen, Brian Metzger, Jennifer Barnes, Eliot Quataert, and Enrico Ramirez-Ruiz. Origin of the heavy elements in binary neutron-star mergers from a gravitational-wave event. *Nature*, 551(7678):80, October 2017.
- [KMNC00] Toshihiko Kido, Toshiki Maruyama, Koji Niita, and Satoshi Chiba. MD simulation study for nuclear matter. *Nuclear Physics A*, 663–664:877c–880c, January 2000.
- [LD00] Jorge A López and Claudio Dorso. *Lectures Notes on Phase Transformations in Nuclear Matter*. WORLD SCIENTIFIC, August 2000.
- [Leb75] V. I. Lebedev. Values of the nodes and weights of ninth to seventeenth order gauss-markov quadrature formulae invariant under the octahedron group with inversion. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 15(1):44–51, 1975.
- [LIG17] LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration. GW170817: Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral. *Phys. Rev. Lett.*, 119(16):161101, October 2017.
- [LPPH91] James M. Lattimer, C. J. Pethick, Madappa Prakash, and Pawel Haensel. Direct URCA process in neutron stars. *Phys. Rev. Lett.*, 66(21):2701–2704, May 1991.
- [LRJM05] M. Liebendörfer, M. Rampp, H.-Th Janka, and A. Mezzacappa. Supernova Simulations with Boltzmann Neutrino Transport: A Comparison of Methods. *ApJ*, 620(2):840, February 2005.
- [LRP93] C. P. Lorenz, D. G. Ravenhall, and C. J. Pethick. Neutron star crusts. *Phys. Rev. Lett.*, 70(4):379–382, January 1993.

- [LS74] J. M. Lattimer and D. N. Schramm. Black-hole-neutron-star collisions. *The Astrophysical Journal Letters*, 192:L145–L147, September 1974.
- [LS84] Jorge A. Lopez and Philip J. Siemens. Nuclear fragmentation. *Nuclear Physics A*, 431(4):728–744, December 1984.
- [LSP90] R. J. Lenk, T. J. Schlagel, and V. R. Pandharipande. Accuracy of the Vlasov-Nordheim approximation in the classical limit. *Phys. Rev. C*, 42(1):372–385, July 1990.
- [MCB⁺98] A. Mezzacappa, A. C. Calder, S. W. Bruenn, J. M. Blondin, M. W. Guidry, M. R. Strayer, and A. S. Umar. An Investigation of Neutrino-driven Convection and the Core Collapse Supernova Mechanism Using Multigroup Neutrino Transport. *ApJ*, 495(2):911, March 1998.
- [MDR01] K. Michielsen and H. De Raedt. Integral-geometry morphological image analysis. *Physics Reports*, 347(6):461–538, July 2001.
- [MNO⁺98] Toshiki Maruyama, Koji Niita, Kazuhiro Oyamatsu, Tomoyuki Maruyama, Satoshi Chiba, and Akira Iwamoto. Quantum molecular dynamics approach to the nuclear matter below the saturation density. *Phys. Rev. C*, 57(2):655–665, February 1998.
- [MTV⁺05] Toshiki Maruyama, Toshitaka Tatsumi, Dmitri N. Voskresensky, Tomonori Tanigawa, and Satoshi Chiba. Nuclear “pasta” structures and the charge screening effect. *Phys. Rev. C*, 72(1):015802, July 2005.
- [MWC12] Toshiki Maruyama, Gentaro Watanabe, and Satoshi Chiba. Molecular dynamics for dense matter. *Prog Theor Exp Phys*, 2012(1), January 2012.
- [Nor28] L. W. Nordheim. On the kinetic method in the new statistics and its application in the electron theory of conductivity. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 119(783):689–698, 1928.
- [NOY09] Ken’ichiro Nakazato, Kazuhiro Oyamatsu, and Shoichi Yamada. Gyroid Phase in Nuclear Pasta. *Phys. Rev. Lett.*, 103(13):132501, September 2009.
- [Oya93] K. Oyamatsu. Nuclear shapes in the inner crust of a neutron star. *Nuclear Physics A*, 561(3):431–452, August 1993.
- [Pl95] Steve Plimpton. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1):1–19, March 1995.

-
- [PLPS04] Dany Page, James M. Lattimer, Madappa Prakash, and Andrew W. Steiner. Minimal Cooling of Neutron Stars: A New Paradigm. *ApJS*, 155(2):623, December 2004.
- [PPU05] A. Polanski, S. Petrochenkov, and V. Uzhinsky. Development of a quantum molecular dynamic (QMD) model to describe fission and fragment production. *Radiat Prot Dosimetry*, 116(1-4):582–584, December 2005.
- [PS12] J. Piekarewicz and G. Toledo Sánchez. Proton fraction in the inner neutron-star crust. *Phys. Rev. C*, 85(1):015807, January 2012.
- [Pue99] A Puente. Efficient recognition of clusters in molecular dynamics. *Physics Letters A*, 260(3–4):234–239, September 1999.
- [RJS95] M. Ruffert, H.-Th Janka, and G. Schaefer. Coalescing Neutron Stars – a Step Towards Physical Models. I. Hydrodynamic Evolution and Gravitational-Wave Emission. *arXiv:astro-ph/9509006*, September 1995. arXiv: astro-ph/9509006.
- [RPW83] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. R. Wilson. Structure of Matter below Nuclear Saturation Density. *Phys. Rev. Lett.*, 50(26):2066–2069, June 1983.
- [SD97a] A. Strachan and C. O. Dorso. Fragment recognition in molecular dynamics. *Phys. Rev. C*, 56(2):995–1001, August 1997.
- [SD97b] A. Strachan and C. O. Dorso. Time scales in fragmentation. *Phys. Rev. C*, 55(2):775–787, February 1997.
- [SHHB13] A. S. Schneider, C. J. Horowitz, J. Hughto, and D. K. Berry. Nuclear “pasta” formation. *Phys. Rev. C*, 88(6):065807, December 2013.
- [SWS⁺07] Hidetaka Sonoda, Gentaro Watanabe, Katsuhiko Sato, Tomoya Takiwaki, Kenji Yasuoka, and Toshikazu Ebisuzaki. Impact of nuclear “pasta” on neutrino transport in collapsing stellar cores. *Phys. Rev. C*, 75(4):042801, April 2007.
- [UU33] E. A. Uehling and G. E. Uhlenbeck. Transport Phenomena in Einstein-Bose and Fermi-Dirac Gases. I. *Phys. Rev.*, 43(7):552–561, April 1933.
- [WI03] Gentaro Watanabe and Kei Iida. Electron screening in the liquid-gas mixed phases of nuclear matter. *Phys. Rev. C*, 68(4):045801, October 2003.

- [WIS00] Gentaro Watanabe, Kei Iida, and Katsuhiko Sato. Thermodynamic properties of nuclear “pasta” in neutron star crusts. *Nuclear Physics A*, 676(1–4):455–473, August 2000.
- [WJ05] Stan Woosley and Thomas Janka. The physics of core-collapse supernovae. *Nature Physics*, 1(3):147–154, December 2005.
- [WK85] R. D. Williams and S. E. Koonin. Sub-saturation phases of nuclear matter. *Nuclear Physics A*, 435(3–4):844–858, March 1985.
- [WSYE03] Gentaro Watanabe, Katsuhiko Sato, Kenji Yasuoka, and Toshikazu Ebisuzaki. Structure of cold nuclear matter at subnuclear densities by quantum molecular dynamics. *Phys. Rev. C*, 68(3):035806, September 2003.