

GUILHERME GRAMS

**EQUAÇÕES DE ESTADO
PARA SUPERNOVAS E
ESTRELAS DE NÊUTRONS**

**FLORIANÓPOLIS
2018**

GUILHERME GRAMS

**EQUAÇÕES DE ESTADO
PARA SUPERNOVAS E ESTRELAS DE NÊUTRONS**

Tese submetida ao Curso de Pós
Graduação em Física da Universidade
Federal de Santa Catarina para a
obtenção do Grau de Doutor em Física

Orientadora: Débora Peres Menezes

FLORIANÓPOLIS
2018

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Grams, Guilherme

Equações de estado para supernovas e estrelas de
nêutrons / Guilherme Grams ; orientadora, Débora
Peres Menezes, 2018.

183 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis,
2018.

Inclui referências.

1. Física. 2. Equação de estado. 3. Supernova. 4.
Estrela de nêutrons. I. Peres Menezes, Débora. II.
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de
Pós-Graduação em Física. III. Título.

Guilherme Grams

Equações de estado para supernovas e estrelas de nêutrons

Esta Tese foi julgada adequada para a obtenção do título de DOUTOR EM FÍSICA, na área de concentração Física Nuclear e de Hádrons e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis, 6 de agosto de 2018.



Ivan Helmuth Bechtold
(Coordenador do Programa)

Banca Examinadora:



Prof.^a. Dr.^a. Débora Peres Menezes
(presidente - UFSC)



Prof. Dr. Celso de Camargo
Barros Junior
(membro titular - UFSC/FSC)



Prof. Dr. Rodrigo Picanço
Negreiros
(membro externo - UFF)



Prof. Dr. Alexandre Magno Silva
Santos
(membro titular - UFSC/FSC)

"If I knew what I was doing, it wouldn't be called research."

(A. Einstein, segundo a Internet).

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar à minha família, mãe, irmã e pai (*in memoriam*), os quais me apoiaram em todas as etapas da minha vida acadêmica e pessoal.

À minha orientadora, Dra. Débora Menezes, pela orientação paciente nestes últimos anos.

À minha coorientadora no exterior, Dra. Francesca Gulminelli, pela orientação e atenção no período em que estive em Caen, França.

Ao professor e amigo, Dr. Alexandre Magno, pela crucial colaboração e ajuda no desenvolvimento do trabalho.

Aos inúmeros colegas e amigos que passaram pelo departamento de Física da UFSC nos últimos quatro anos, em especial aos que dividiram o Laboratório de Física Nuclear e de Hádrons.

Ao Antônio, secretário da pós graduação, pela dedicação e ajuda durante todo o doutorado.

Ao CNPq e à CAPES pelo suporte financeiro, e ao programa de pós graduação em Física da UFSC, pela estrutura e oportunidade de realização deste trabalho.

Ao Laboratório de Física Corpuscular de Caen, e todos os seus membros, pelo acolhimento durante meu estágio sanduíche.

Resumo da Tese apresentada à UFSC como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Física

Equações de estado para supernovas e estrelas de nêutrons

Guilherme Grams

Orientadora: Débora Peres Menezes, Dra.

FSC/UFSC.

Área de Concentração: Física nuclear e de hádrons.

Palavras-chave: Equação de estado, supernova, estrela de nêutrons.

Nesta tese são mostradas duas equações de estado (EoS) nucleares para aplicação em objetos estelares compactos. Primeiramente apresentamos uma EoS para simulações de supernovas baseada no modelo da gota líquida modificada com forças de Skyrme. Para essa EoS foi criado um formalismo que possibilita a construção de uma distribuição nuclear associada a qualquer EoS a temperatura finita. Além disso, exploramos o efeito da inclusão de efeitos de camada, e consideramos modelos microscópicos que descrevem as massa nucleares, durante a trajetória do colapso de uma supernova. Apresentamos nos capítulos subsequentes uma equação de estado (EOS) para estrelas de nêutrons. Tratamos a matéria homogênea feita de nucleons usando um modelo de acoplamento de mésons e quarks, o *quark-meson-coupling* (QMC). Mostramos uma tabela com uma variedade de quantidades termodinâmicas, as quais cobrem os valores de fração de prótons $Y_p = 0 - 0.65$ com o espaçamento linear $\Delta Y_p = 0.01$ (66 pontos) e os valores de densidade $\rho_B = 10^{14} - 10^{16} \text{ g.cm}^{-3}$ com o espaçamento logarítmico $\Delta \log_{10} \rho_B / [\text{g.cm}^{-3}] = 0.1$ (21 pontos). Além de um trabalho preliminar que foi realizado a temperatura zero com os nossos resultados comparados com

as equações de estado usadas e já disponíveis na literatura, acrescentamos no modelo uma interação entre os mésons $\omega - \rho$, e verificamos que essa modificação diminui o valor do *slope* da energia de simetria e consequentemente o raio da estrela de nêutrons de 1.4 massas solares. Para a EoS com o modelo QMC foi investigado a presença da fase pasta na região de baixas densidades, analisamos as estruturas presentes a fração de prótons fixa e em equilíbrio beta, assim como o efeito da fase pasta nas estrelas de nêutrons.

Abstract of Thesis presented to UFSC as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Physics.

Equations of state for supernovae and neutron stars

Guilherme Grams

Advisor: Débora Peres Menezes, Dra.

FSC/UFSC.

Área de Concentration: Nuclear and hadron physics.

Keywords: Equation of state, supernova, neutron star.

In this thesis two nuclear equations of state (EoS) for possible use in core-collapse supernova simulations are presented. First, we show an EoS based on a modified liquid-drop model with Skyrme interactions. For this EoS we create a formalism in which one can construct a nuclear distribution associated to any finite temperature EoS. Also, we explore the effect of including shell structure, and consider microscopic models which describe the nuclear masses, during the supernova collapse. We show in the following chapters an EoS for neutron stars. We treat uniform matter made of nucleons using the quark-meson coupling (QMC) model. We display a table with a variety of thermodynamic quantities, which covers the proton fraction range $Y_p = 0 - 0.65$ with the linear grid spacing $\Delta Y_p = 0.01$ (66 points) and the density range $\rho_B = 10^{14} - 10^{16} \text{ g.cm}^{-3}$ with the logarithmic grid spacing $\Delta \log_{10} \rho_B / [\text{g.cm}^{-3}] = 0.1$ (21 points). Besides the preliminary work, which was performed at zero temperature and compared with some of the widely used EoSs already available in the literature, we also added in the model an interaction between the $\omega - \rho$ mesons, and verify that this modification decreases the slope of the model, and thereafter the 1.4 solar mass neutron star radius. For the EoS with the QMC model, we investigate the existence of pasta phases on the low densities region, analyze the structures at fixed proton fractions and in beta equilibrium, as well as the pasta phase effect on the neutron star crust.

Lista de Figuras

1.1	Tabela fusão nuclear	11
1.2	Colapso estelar	13
2.1	Contribuição nuclear para energia livre de Gibbs, $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$, com e sem a contribuição do termo de rearranjo, para duas condições termodinâmicas diferentes, como função de $A = A^{(j)}$. A fração de prótons x_i é fixa como sendo a mesma do núcleo mais provável de LS. Os quadrados (pontos) correspondem aos núcleos mais prováveis obtidos com (sem) o termo de rearranjo; os X s indicam o A do núcleo médio obtido com a EoS de LS. Mais detalhes no texto.	36
2.2	Fração de prótons dentro do núcleo $x_i = Z/A$ correspondente ao m	38

- 2.3 Número de densidade bariônica dentro do núcleo, n_i , versus A para três condições termodinâmicas: (1) $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.43$, (2) $n_B = 2 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.3 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.34$, e (3) $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.31$. Linhas sólidas correspondem a solução da Eq. (2.45), pontos correspondem a n_i para o núcleo (médio) predito pela EoS de LS, e as linhas pontilhadas representam a distribuição nuclear (em unidades arbitrárias). 40
- 2.4 Distribuição de núcleos preditos pelo modelo NSE para a condição termodinâmica $n_B = 8.6 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.83 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.36$. No painel (b) são mostradas as probabilidades dos *clusters* (vermelho para azul, de mais pra menos abundante), enquanto o ponto preto corresponde ao núcleo médio ($Z = 38$, $N = 62$) obtido com a EoS de LS. O painel (a) mostra as distribuições de probabilidades para cortes em $Z = 32$, 38, e 41 (da curva da esquerda para direita), enquanto o painel (c) mostra as distribuições de probabilidades para $N = 40$, 62, e 80 (da curva de cima para baixo). 53
- 2.5 Z (acima) e N (abaixo) durante a trajetória do colapso (em unidades de tempo arbitrárias), no centro da estrela. Linhas pontilhadas correspondem ao núcleo mais provável utilizando o funcional de massa de LS, enquanto linhas sólidas correspondem à variância. Pontos representam o núcleo mais provável quando o modelo de massa HFB 24 é implementado. As caixas pequenas mostram um zoom na parte final das curvas. 54

2.6	Distribuição de núcleos (Z, N) para quatro condições termodinâmicas que acontecem durante a trajetória do colapso no centro da estrela: (a) $n_B = 3.86 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.79 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (b) $n_B = 3.35 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.51 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.38$, (c) $n_B = 3.01 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.68 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.33$, e (d) $n_B = 5.85 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 3.33 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. As cores representam as probabilidades normalizadas dos <i>clusters</i> (vermelho para azul, mais para menos provável). Distribuições bimodais representam as probabilidades com o modelo de massa HFB24 e distribuições gaussianas representam as probabilidades com o funcional de massa usado por LS. Pontos correspondem ao núcleo médio previsto pela EoS original de LS.	55
2.7	Carta de nucl	56
2.8	Comparação da energia de separação de dois modelos microscópicos com massas experimentais. Fonte: Raduta, A. <i>et. al.</i> PRC 93 025803 (2016).	57
2.9	Energia de separação próxima da região $N = 50$ para modelo da gota l.	58
2.10	Energia de separação próxima da região $N = 50$ para modelo da gota l.	59
2.11	Salto do número mágico $N = 50$ para o modelo da gota l	60
3.1	Massa efetiva do modelo QMC, e os três modelos de QHD.	68
3.2	Equação de estado do modelo QMC, e os três modelos de QHD.	68
3.3	Equação de estado em equil	73

3.4	Relação massa raio para o modelo QMC ₁ e os três modelos de QHD.	74
3.5	Energia de ligação dos nucleons como função da densidade bariônica com as frações de prótons $Y_p = 0, 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .	75
3.6	Módulo de compressão como função da densidade bariônica com as frações de prótons $Y_p = 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .	76
3.7	Relação entre pressão e ρ_B para $Y_p = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .	76
3.8	Alguns valores fixos de fração de prótons para os potenciais qu	77
4.1	Energia por bárion no modelo QMC como função da densidade bariônica para matéria nuclear simétrica e diferentes escolhas de a . O termo hm no gráfico significa matéria homogênea de prótons, nêutrons e elétrons.	95
4.2	Fit da tensão superficial para os modelos QMC e QMC $\omega\rho$.	96
4.3	Coefficiente de tensão superficial como função da densidade bariônica para matéria em equil	98
4.4	Energia livre por bárion como função da densidade bariônica calculada com o modelo QMC $\omega\rho$ e $a = 0.023$ para matéria homogênea (hm) e não homogênea (nhm) com $Y_p = 0.5$ (painel superior) e $Y_p = 0.3$ (painel inferior).	101
4.5	Energia livre por part	102
4.6	Diagramas de fase a temperatura zero obtidos com a aproximação CP para o QMC $\omega\rho$ com $L = 69$ MeV: (A) $Y_p = 0.5$, (B) $Y_p = 0.3$, (C) equil	103
4.7	Relação massa raio para fam	105

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Supernovas e equações de estado para supernovas	9
1.1.1	Supernovas	9
1.1.2	Relação EoS - Supernova	12
2	Distribuição nuclear a partir de uma célula de Wigner Seitz	16
2.1	Introdução ao formalismo	17
2.2	NSE a partir de uma energia livre de Wigner Seitz	19
2.3	Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty	28
2.4	Resultados	37
2.4.1	Inclusão de um modelo de massa nuclear microscópico	40
2.5	Perspectivas futuras	44
2.5.1	Desaparecimento dos números mágicos	45
2.6	Considerações finais	50
3	Modelo Quark Meson Coupling	61
3.1	Revisão do modelo	62

3.1.1	Propriedades da matéria nuclear(bulk)	65
3.1.2	Propriedades das estrelas de nêutrons	69
3.2	Resultados	75
3.2.1	Tabela de EOS a temperatura zero	75
3.3	Considerações finais	82
4	Fase pasta no modelo QMC e QMC$\omega\rho$	84
4.1	Introdução	85
4.2	Modelo QMC $\omega\rho$	87
4.3	Aproximação da coexistência de fases	89
4.3.1	Coeficiente de tensão superficial	93
4.4	Resultados	99
4.5	Considerações finais	106
5	Conclusões e perspectivas	108
A	Potenciais químicos	112
B	EoS de LS no <i>ensemble</i> canônico	115
	Referências Bibliográficas	120
C	Publicações	133

Capítulo 1

Introdução

Explosões de supernovas são eventos extraordinários da natureza, o que torna seu estudo de grande interesse, por ser um excelente laboratório de testes para física em condições extremas. O estudo de supernovas obteve grande progresso nas últimas décadas, porém, ainda existem muitas questões sem respostas. A queda catastrófica do núcleo de uma estrela massiva acionando uma poderosa ejeção do manto estelar em uma explosão de supernova, foi identificado como tendo um papel crucial na síntese dos núcleos pesados. No entanto, como, quando e porquê isso ocorre é um problema fundamental em astrofísica estelar que continua sem explicação. A implosão do caroço estelar também foi identificado como um possível cenário para o fim da vida das estrelas [1, 2].

Supernovas formadas do colapso do núcleo estelar acontecem em média a cada $\sim 30 - 50$ anos em nossa galáxia e infelizmente a maior parte desses eventos é escondida pela poeira existente na Via Láctea [3], o que faz o seu estudo observacional muito complicado. Devido a isso, as simulações de explosão de supernova têm tido um papel fundamental nos estudos de explosões de supernovas e seus

possíveis remanescentes. As simulações de supernova precisam de uma grande variedade de quantidades termodinâmicas como *input*. A equação de estado (EoS, do inglês *equation of state*) da física nuclear é um ingrediente fundamental para essas simulações. Durante a explosão de uma supernova acredita-se que a temperatura possa variar de zero até mais de 100 MeV, a densidade de 10^5 até mais de 10^{15} g.cm⁻³ e a fração de prótons de zero até mais de 0.6. Obedecer todas essas condições, faz a construção de uma equação de estado para simulação de supernova muito difícil, principalmente em baixas densidades, onde a matéria não é necessariamente homogênea.

Até o momento, existem poucas equações de estado construídas com esse propósito. As mais conhecidas foram desenvolvidas por Lattimer e Swesty [4], Shen *et al.* [5, 6] e Hempel *et al.* [7, 8, 9]. A primeira EoS feita para simulações de supernova foi a de Lattimer e Swesty, baseada no modelo da gota líquida e utiliza uma força de Skyrme para as interações entre os nucleons. Esta EoS é uma das mais usadas até hoje em simulações de supernova. No Capítulo 2 mostramos nosso aprimoramento desta EoS, no qual desenvolvemos um formalismo para o tratamento dos núcleos atômicos presentes a baixas densidades. Em 1998 Shen construiu a primeira EoS para simulação de supernova baseada em um modelo relativístico. Essa EoS utiliza a parametrização TM1 do modelo de Walecka não linear [10, 11], numa aproximação de campo médio e leva em conta tanto matéria homogênea, como não homogênea.

O modelo de Walecka não linear [10], também conhecido como modelo da hadrodinâmica quântica (QHD, do inglês *Quantum Hadrodynamics*), é baseado em uma teoria de campos relativísticos e descreve a interação entre bárions mediada por mésons escalares e vetoriais. Esse modelo foi originalmente proposto por

Walecka em 1974 para descrever o comportamento da matéria nuclear simétrica e de núcleos finitos com igual número de prótons e nêutrons. O modelo original continha apenas o méson escalar σ e o méson vetorial ω , os quais são suficientes para descrever a saturação nuclear. Posteriormente foi acrescentado ao modelo o méson isovetorial ρ , que possibilita a descrição da matéria nuclear assimétrica. Por fim, para melhor reproduzir valores da compressibilidade, massa efetiva e energia de simetria, foram introduzidos termos não lineares no campo escalar e no campo vetorial na lagrangiana do modelo [11]. Para mais detalhes desse modelo ver [10, 12].

O trabalho de Shen foi aperfeiçoado em 2011 [6]. As melhorias da EoS foram: (i) a adição de mais pontos de temperatura na tabela, com a intenção de atingir temperaturas maiores que 100 MeV; (ii) o aumento do número de pontos na densidade, e assim aumentar o limite superior de ρ_B ; (iii) o uso de um espaçamento linear na fração de prótons e não logarítmico como em sua EoS anterior, com a intenção de atingir maiores valores de Y_p ; (iv) a inclusão dos híperons Λ , por acreditar se que a grandes densidades híperons devem surgir. Foi adicionado somente o híperon Λ por esse ser o primeiro a aparecer com o aumento da densidade, assim como, ser o híperon com mais informações experimentais disponíveis.

A equação de estado construída por Hempel [7, 8, 9] é baseada nas parametrizações TM1, TMA, FSUgold, NL3, SFHo, SFHx, IU FSU e DD2 do mesmo modelo de hadrodinâmica quântica usado por Shen, e utiliza o modelo de equilíbrio estatístico nuclear de Hempel e Schaffner Bielich [13] para tratar a matéria não homogênea.

Uma interessante análise das diferentes parametrizações dos modelos de ha

drodinâmica quântica foi feita por Dutra *et al.* [14], onde os autores analisaram 263 modelos de QHD diferentes, sob vários vínculos relacionados a matéria nuclear simétrica e matéria de nêutrons pura. Com relação somente a matéria nuclear simétrica (SM, do inglês *symmetric matter*), os autores analisaram os seguintes vínculos:

- SM1: relacionado a incompressibilidade, K_0 , da matéria nuclear infinita na densidade de saturação, onde foi analisado se os modelos obedeciam ao vínculo $K_0 = 230 \pm 40$ MeV.
- SM3a: relacionado aos valores da pressão $P(\rho)$ em valores de densidade maiores de $4.6\rho_0$.
- SM3b: relacionado aos valores da pressão $P(\rho)$ nos valores $2 < \frac{\rho}{\rho_0} < 4.6$, onde ρ/ρ_0 é a densidade bariônica com relação a densidade de saturação da matéria nuclear, ρ_0 .
- SM4: relacionado aos valores da pressão $P(\rho)$ nos valores $1.2 < \frac{\rho}{\rho_0} < 2$.

Vínculos que envolvem tanto matéria nuclear simétrica como matéria pura de nêutrons, uma mistura (MIX), são:

- MIX1a: relacionado a energia de simetria na densidade de saturação J , $25 \leq J \leq 35$ MeV.
- MIX1b: relacionado a energia de simetria na densidade de saturação J , $30 \leq J \leq 35$ MeV.
- MIX2a: relacionado ao *slope*, L_0 , da energia de simetria em ρ_0 , $25 \leq L_0 \leq 115$ MeV. (essa grandeza mede como a energia de simetria varia com a den

	TM1	TMA	FSU _{gold}	NL3	IU FSU	DD2
SM1	não	não	ok	não	ok	ok
SM3a	ok	ok	ok	não	ok	não
SM3b	não	não	ok	não	não	não
SM4	ok	ok	ok	não	ok	ok
MIX1a	não	ok	ok	não	ok	ok
MIX1b	não	ok	ok	não	ok	ok
MIX2a	ok	ok	ok	não	ok	ok
MIX2b	não	não	ok	não	ok	ok
MIX3	ok	não	não	ok	não	ok
MIX4	não	não	ok	não	ok	não

Tabela 1.1: Relação dos modelos usados por Shen (TM1) e Hempel (TMA, FSU gold, NL3, IU FSU e DD2) com os vínculos analisados no trabalho da Ref. [14]. As parametrizações SFHo e SFHx não foram analisadas nesse trabalho.

sidade bariônica, visto que ela é dada pela derivada da energia de simetria com relação a densidade).

- MIX2b: relacionado ao *slope* da energia de simetria em ρ_0 , $30 \leq L_0 \leq 80$ MeV.
- MIX3: relacionado aos limites de $K_{\tau,v}^0$, o qual representa a part e volumétrica da incompressibilidade de isospin, $K_\tau = -550 \pm 150$ MeV.
- MIX4: relacionado a razão da energia de simetria em $\rho_0/2$ pelo seu valor em ρ_0 , $0.57 \leq \frac{S(\rho_0/2)}{J} \leq 0.86$.

Na Tabela 1.1 mostramos a relação dos modelos usados por Shen (TM1) e Hempel (TMA, FSUgold, NL3, IU FSU e DD2) com os vínculos analisados no trabalho da Ref. [14]. Modelos sinalizados com "ok" foram aprovados e "não" não foram aprovados nos vínculos experimentais analisadas em [14]. As parametrizações SFHo e SFHx não foram analisadas nesse trabalho.

Os trabalhos de Lattimer, Shen e Hempel foram muito úteis e bem sucedidos em muitas aplicações [15, 16, 17, 18, 19, 20], porém, existem simulações nas quais a supernova não explode [21]. Um dos elementos responsáveis por essas falhas são as equações de estado obtidas de modelos da física nuclear. Mais detalhes sobre essa relação entre as EoSs com o sucesso de uma simulação é discutido na seção 1.1.2.

Note que dessas equações de estado citadas, uma foi construída com um modelo não relativístico, e as outras duas com modelos hadrônicos relativísticos. Sendo assim, nós escolhemos o modelo Quark Meson Coupling (QMC)[22] para a construção da nossa equação de estado. No QMC os nucleons são descritos por um sistema de sacolas tipo MIT [23] que não se superpõem e que interagem por meio de mésons escalares e vetoriais. Os graus de liberdade de quarks são levados em conta explicitamente e os acoplamentos são determinados em nível dos quarks e não dos nucleons, o que identifica um modelo efetivo com uma física mais realista.

A maioria dos métodos usados para calcular a equação de estado (EoS) na crosta de estrelas de nêutrons e em supernovas (SN) se baseia na aproximação de Wigner Seitz (WS). Nessa abordagem, a matéria é dividida em células, cada uma eletricamente neutra, com um núcleo no seu centro, cercado por um gás de nucleons livres (nêutrons e, a temperatura finita, também prótons livres) e elétrons. Isto é, nesta aproximação para cada condição termodinâmica (conjunto de temperatura, fração de prótons e densidade bariônica) temos um único núcleo representando o núcleo mais provável de existir na dada condição termodinâmica. Para a física de estrelas de nêutrons, onde o sistema é considerado a temperatura zero, essa aproximação é correta (na ausência de transições de fase). À tempera

tura finita a aproximação de uma única configuração, a qual é mais favorável do ponto de vista termodinâmico, deve ser visto como uma maneira de considerar as propriedades da distribuição termodinâmica na média. Essa aproximação não modifica consideravelmente as propriedades termodinâmicas da matéria [24], ou seja, relações como $P = P(\rho)$ não se alteram significativamente. Entretanto, diferenças quantitativas aparecem com relação a composição da matéria. Portanto, isso altera os cálculos de taxas de reações em núcleos e assim, afeta processos dinâmicos que dependem dessas taxas, como por exemplo a formação da onda de choque [25, 26, 27, 28]. Com isso, notamos a importância de considerar todos os estados possíveis para matéria nuclear à temperatura finita, ou seja, trabalhar a cada condição termodinâmica com uma distribuição de possíveis núcleos, e não somente com um núcleo representativo.

Esta tese de doutorado contempla o desenvolvimento de um formalismo que nos permite construir uma distribuição nuclear associada a qualquer EoS a temperatura finita. Mostramos a aplicação deste formalismo para a EoS mais usada até hoje na literatura, a EoS de Lattimer e Swesty, onde também aperfeiçoamos a descrição das massas nucleares no modelo. Resumindo, no Capítulo 2 desta tese é apresentado além do formalismo supracitado, uma EoS completa para a fase do colapso da supernova, a qual acontece até o ricochete da estrela.

Em seguida mostramos uma EoS para uso em estrelas de nêutrons, baseada no modelo relativístico QMC. Mostramos duas versões do modelo, com e sem a interação entre os mésons ω e ρ , assim como investigamos a existência de fases pasta no modelo, e seu efeito na matéria estelar.

Esta EoS com modelo QMC será estendida para possível uso em simulações de supernovas. Para isto, já estudamos o modelo com fração de prótons fixa, e

o passo inicial para esse trabalho foi a construção de uma tabela contendo uma EoS a temperatura zero, sem a região de baixas densidades. Essa tabela inicial é apresentada no Capítulo 3.

O passo seguinte é a construção da tabela com temperatura finita e, completar o trabalho computando os cálculos em baixas densidades. Nesta região núcleos podem coexistir com nucleons livres ou, nucleons podem formar aglomerados leves de modo a minimizar a energia livre. Para trabalhar nessa região não uniforme da EoS, Shen usou uma aproximação de Thomas Fermi. Hempel e Bielech criaram um método estatístico para tratar a região subnuclear da EoS [13] e utilizaram esse método em sua respectiva EoS. Nossos cálculos em baixas densidades serão realizados através da inclusão da *fase pasta* [29, 30], a qual já foi aplicada em nossa EoS para estrelas de nêutrons como pode ser visto no Capítulo 4. A fase pasta é um sistema frustrado, ou seja, é um sistema em que existe mais de uma configuração de baixa energia. Abaixo da densidade de saturação, a matéria nuclear homogênea pode se tornar instável e alguns tipos de estruturas complexas podem ser formadas como resultado da competição entre as interações forte e eletromagnética. As formas dessas estruturas complexas foram nomeadas como tipos de queijos e massas [31]: fase nhoque, fase espaguete, fase lasanha, fase pene, de modo a representar estruturas de uma, duas e três dimensões. A fase pasta será a configuração do estado fundamental se sua energia livre por partícula for menor que a energia livre correspondente da fase homogênea na mesma densidade. Espera-se que a fase pasta exista em algum lugar entre a fase líquida e fase sólida, podendo ser um cristal líquido [32]. Esse método de calcular a região subnuclear da matéria densa nunca havia sido utilizado com o modelo QMC, tampouco em uma tabela de EoS, por isso acreditamos que esse será mais

um diferencial positivo em nosso trabalho.

1.1 Supernovas e equações de estado para supernovas

Apresentamos aqui uma breve revisão sobre supernovas e simulações computacionais de supernovas, as quais são a motivação dos trabalhos mostrados na tese. Falaremos também sobre as equações de estado, sua relação e importância para o sucesso de uma simulação de supernova. Nossa contribuição efetiva para o melhor entendimento das supernovas vem a ser a construção de duas novas equações de estado.

1.1.1 Supernovas

A grosso modo, uma supernova é a explosão de uma estrela massiva cujo brilho pode rivalizar com o brilho de uma galáxia por meses [3]. Essa explosão marca o fim de uma estrela massiva ($>8 M_{sol}$), com o nascimento de uma estrela de nêutrons ou, a destruição completa de uma anã branca devido a uma explosão por queima de carbono. Os interesses para o estudo de supernovas são muitos, dentre os principais exemplos temos: evolução estelar, perda de massa estelar, hidrodinâmica radioativa, estrutura galáctica e evolução química e, cosmologia. Muitos dos elementos mais pesados que o ferro são criados em explosões de supernovas [3] e o processo de criação desses elementos em uma supernova é alvo de investigação até os dias de hoje. Devido ao seu brilho intenso, supernovas do tipo IA em galáxias distantes podem ser tratadas como velas padrões para medir

grandes distâncias no Universo [33, 34].

Existem dois mecanismos possíveis para explosão de supernovas. Em um sistema binário de uma anã branca com uma estrela massiva, a anã branca, por ser muito mais densa, começa a 'ganhar' massa da estrela companheira. Com o tempo, a anã branca não consegue mais suportar a força gravitacional da massa adquirida, o que leva a uma explosão termonuclear da anã branca, a qual é conhecida como Supernova do tipo Ia. Esse tipo de supernova não deixa remanescentes. A outra opção ocorre quando uma estrela massiva chega ao final da sua vida. A figura 1.1 exemplifica a vida de uma estrela desse tipo. Essas estrelas passam a maior parte de suas vidas fundindo hidrogênio em hélio. Quando o hidrogênio se esgota, elas passam a fundir hélio em carbono, e assim seguindo a elementos mais pesados até chegar no ferro, o qual não é capaz de fundir em elementos mais pesados e, com isso, a estrela não consegue gerar uma pressão nuclear suficiente para equilibrar a pressão gravitacional. Isso leva ao colapso do núcleo em supernovas do tipo II, Ib ou Ic. Analisando se as supernovas contêm hidrogênio e hélio nas camadas externas antes da explosão é possível diferenciá-las. As estrelas progenitoras das supernovas tipo II permanecem com as camadas de hidrogênio e hélio no seu envelope, as progenitoras das supernovas tipo Ib perderam hidrogênio mas permanecem com hélio, enquanto as progenitoras das supernovas tipo Ic perderam tanto hidrogênio como hélio antes do colapso do núcleo [35].

Após a fusão do silício, a estrela forma um núcleo de ferro no seu centro, porém, a partir do ferro a fusão nuclear passa a ser endotérmica, isto é, a reação vai absorver energia do meio, ao invés de fornecer energia como acontecia nos elementos mais leves. Com isso, após alguns segundos, a pressão gravitacional vence a batalha contra a pressão nuclear, e o núcleo colapsa sobre si mesmo. Du

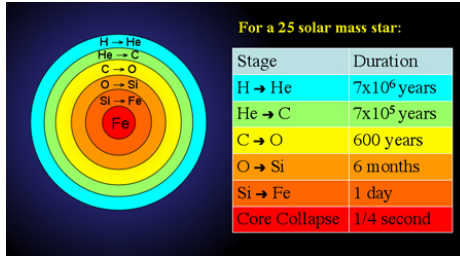


Figura 1.1: Antes do colapso do núcleo, o interior de uma estrela massiva parece uma cebola, com camadas de sucessivos elementos leves fundindo em elementos mais pesados ao redor de um núcleo de ferro. Essa fusão se torna mais rápida conforme os elementos químicos mais pesados começam o processo de fusão nuclear. Créditos imagem <http://astronomy.swin.edu.au/cosmos/>.

rante esse segundo final, o colapso faz com que a temperatura no núcleo cresça muito rapidamente, e com isso libera raios gama de alta energia. Esses fótons quebram os núcleos de ferro levando a um estágio onde o núcleo estelar contrai além do ponto de degenerescência do elétron, continua contraindo, e prótons e elétrons são obrigados a se combinar formando nêutrons. Esse processo libera uma grande quantidade de neutrinos carregados de muita energia, contraindo e resfriando ainda mais o núcleo. Essa contração é interrompida quando a densidade do núcleo excede a densidade em qual prótons e nêutrons são ligados no núcleo atômico, chegando assim ao ponto onde a força nuclear se torna repulsiva. Assim, quando a região mais interna do núcleo estelar alcança essa densidade, ele diminui em sua contração até acontecer o ricochete. Este ricochete cria uma onda de choque direcionada para fora do núcleo, a qual reverte o movimento de queda do material da estrela e o acelera para fora da mesma [3]. A figura 1.2 representa a sequência de eventos que ocorre durante a explosão de colapso do núcleo em uma supernova.

Nessas condições extremas do núcleo da estrela, neutrinos são criados em grandes quantidades, o que auxilia a propagação dessa onda de choque. Sob circunstâncias normais os neutrinos interagem muito fracamente com a matéria, porém, sob as condições extremas do núcleo colapsando, uma pequena fração desses neutrinos fica presa atrás da onda de choque enquanto ela se expande. A energia desses neutrinos presos aumenta a temperatura e a pressão atrás da onda de choque, e com isso dá força a essa onda de choque enquanto ela se move através da estrela.

A passagem dessa onda choque comprime o material na estrela até uma densidade na qual as reações de nucleossíntese acontecem. É nessa fase da explosão da supernova que muitos elementos da nossa tabela periódica, inclusive os mais pesados que o ferro, são criados. Quando a onda de choque chega à superfície da estrela, ela ejeta material estelar e novamente cria elementos dentro do meio interestelar. Por fim, dependendo da massa da estrela, essa supernova deixa como seu remanescente uma estrela de nêutrons ou um buraco negro.

1.1.2 Relação EoS - Supernova

Um dos maiores desafios na física de supernovas é a completa compreensão do mecanismo do colapso do núcleo em uma supernova. Esse estudo exige simulações numéricas em que se deve levar em conta hidrodinâmica de radiação de neutrinos com o mais sofisticado da física de partículas e física nuclear. Com isso vemos a importância de uma equação de estado realista obtida a partir de modelos da física nuclear para essas simulações. A EoS da matéria densa determina a estrutura estelar, a hidrodinâmica e as taxas de reação através da determinação

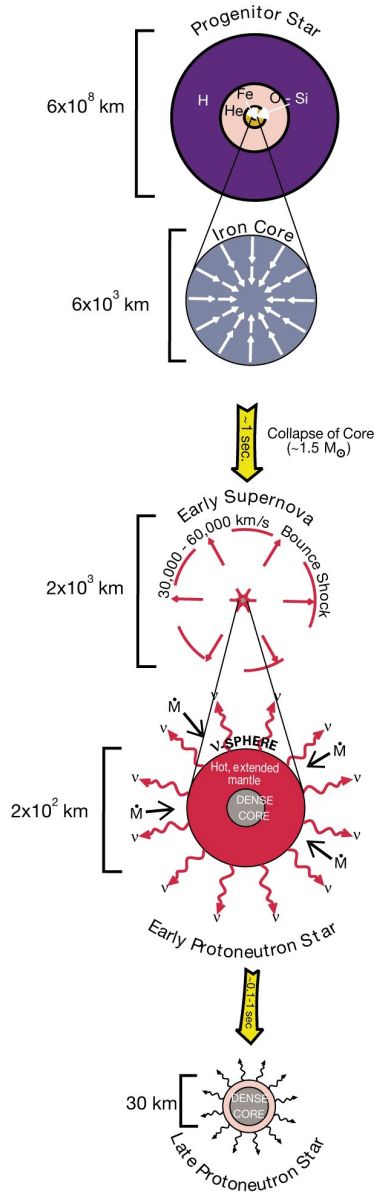


Figura 1.2: Sequência de eventos no colapso de um núcleo estelar até o nascimento de uma proto estrela de nêutrons. Créditos imagem [3].

da pressão, entropia e composições químicas [36, 37]. As quantidades termodinâmicas da EoS são encontradas através de cálculos numéricos para valores de temperatura entre zero até cerca de 100 MeV, densidade de 10^5 até mais de 10^{15} g.cm⁻³ e fração de prótons de zero (densidade de prótons relativo ao número total de bárions, $Y_P = n_P/n_B$) até mais de 0.6, o que significa abranger matéria muito rica em nêutrons até uma região com mais prótons que nêutrons, passando pela matéria simétrica.

Um trabalho interessante sobre o uso da tabela de equação de estado em simulações de supernova foi feito por Sumiyoshi *et al.* [36], onde os autores realizaram simulações do colapso do núcleo de supernova para examinar a influência da EoS na evolução das ondas de choque em sua fase tardia e a evolução termal resultante das protoestrelas de nêutrons. Nesse trabalho os autores não encontraram explosões do núcleo da supernova para as duas EoS utilizadas (EoSs de Shen98 e Lattimer). Os autores identificaram que a diferença na composição de prótons livres e núcleos atômicos na supernova, assim como a energia de simetria da EoS, influencia diretamente na supernova, através de mudança nas taxas de captura de elétrons e no ricochete do núcleo. Também foi identificado que as diferenças de composição devido as EoSs devem contribuir para a onda de choque nos mecanismos determinados pelos neutrinos, também chamados de *neutrino driven*. Quando o núcleo central contrai para se tornar uma proto estrela de nêutrons, diferenças devido a EoSs aparecem. A densidade central se torna muito alta e a EoS escolhida certamente influencia a dinâmica de choque. A subsequente evolução do resfriamento da protoestrela de nêutrons ou a formação de buraco negro também são afetados pela escolha de equação de estado [36, 38].

A parte da equação de estado construída a baixas densidades (10^5 até 10^{13} g

cm^{-3}) é fundamental para o sucesso de uma simulação de explosão de supernova. Em primeiro lugar, a maior parte do tempo computacional é gasto nesse regime de baixas densidades. Posteriormente, as camadas de neutrinos estão localizadas aproximadamente nas densidades $10^{11} \text{ g cm}^{-3}$. O espectro dos neutrinos, o qual é um dos observáveis mais importantes de uma supernova, é formado nessa região e, portanto, carrega informações sobre as propriedades da matéria em baixas densidades. A onda de choque que inicialmente se dirige para fora da supernova, depois do ricochete perde energia devido à dissociação nuclear e emissão de neutrinos e, finalmente, é barrada em densidades próximas à 10^9 g cm^{-3} [39, 40, 13].

Com isso vemos o quanto é fundamental para o sucesso de uma simulação computacional de explosão de supernova uma equação de estado completa construída a partir da física nuclear conhecida. É com esse intuito que esse trabalho está sendo desenvolvido. Como já foi dito na seção anterior, existem poucas tabelas de EoSs prontas para esse uso. Nossa primeira EoS, apresenta um aperfeiçoamento da EoS de LS na região de baixas densidades da matéria estelar. A diferença que estamos buscando para nossa segunda EoS já nasce do modelo escolhido, com uma física mais realista que a existente nos modelos utilizados nas outras EoSs, e também, quando trabalharmos a baixas densidades utilizando a fase pasta e o formalismo de equilíbrio estatístico nuclear, o que deverá trazer resultados novos e importantes para essa parte fundamental da EoS.

Capítulo 2

Distribuição nuclear a partir de uma célula de Wigner-Seitz

Apresentamos nesse capítulo um formalismo original criado para possibilitar a construção de uma distribuição nuclear associada a qualquer equação de estado à temperatura finita. A energia livre de Gibbs em diferentes configurações é explicitamente calculada, onde mostramos um cuidado especial no cálculo de termos de rearranjo, garantindo a consistência termodinâmica. Mostramos o formalismo em duas aplicações diferentes. Primeiramente, construímos a distribuição de núcleos com o formalismo "Equilíbrio Estatístico Nuclear" na equação de estado (EoS) de Lattimer e Swesty (LS) [41]. Posteriormente, estudamos o efeito da inclusão de modelos microscópicos que descrevem as massas nucleares de forma mais realista, de forma a incluir efeitos de emparelhamento e camadas, o que não acontece no modelo de LS. Com isso, mostramos que núcleos mágicos (núcleos com número de prótons e/ou nêutrons presentes nas camadas chamadas de *mágicas* pois serem mais fortemente ligados que as outras) dominam toda a trajetória

do colapso da supernova, demonstrando a importância da construção de distribuições nucleares com modelos que descrevem as massas dos núcleos de forma realista. Por fim, exploramos a possibilidade de existência de *quenching* da magicidade em regiões ricas em nêutrons, onde não temos informação experimental das massas nucleares e modelos teóricos são necessários.

2.1 Introdução ao formalismo

A maioria dos métodos usados para calcular a equação de estado (EoS) na crosta de estrelas de nêutrons e em supernovas (SN) se baseia na aproximação de Wigner Seitz (WS). Nessa abordagem, a matéria é dividida em células, cada uma eletricamente neutra, com um núcleo no seu centro, cercado por um gás de nucleons livres (nêutrons e, à temperatura finita, também prótons livres) e elétrons. A maneira padrão de calcular a EoS é minimizar a energia livre do sistema com respeito ao núcleo atômico, Z , e ao número de massa, A , o volume da célula (ou seu raio), e às densidades dos nucleons livres, sob conservação de número bariônico e de carga (ver Refs. [42, 43]). Se estruturas adicionais, como fases “pasta” são incluídas, a minimização é também feita com relação a forma da célula [44, 45].

Diferentes EoSs foram desenvolvidas na hipótese de Wigner Seitz, também conhecida como aproximação de núcleo único (SNA do inglês *Single Nucleus Approximation*). Algumas dessas usam o método da gota líquida compressível [42, 43, 46, 41, 47, 48], a abordagem de Thomas Fermi estendida [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56], ou modelos de Hartre Fock e Hartre Fock Bogoliubov microscópicos auto consistentes [57, 58, 59, 60, 61]. Em particular, as duas EoSs mais usadas

atualmente em simulações de supernovas, as EoSs de Lattimer e Swesty (LS) [41], e de Shen *et al.* [49, 51], utilizam o conceito da célula de WS, na qual existe somente uma única configuração associada a cada condição termodinâmica, dada pela densidade bariônica n_B , temperatura T , e fração de prótons Y_p (ou, equivalentemente, fração de elétrons Y_e).

Para a física de estrelas de nêutrons, onde o sistema é considerado à temperatura zero, essa aproximação é correta (na ausência de transições de fase). À temperatura finita a aproximação de uma única configuração, a qual é mais favorável do ponto de vista termodinâmico, deve ser vista como uma maneira de considerar as propriedades da distribuição termodinâmica na média.

Essa aproximação não modifica consideravelmente as propriedades termodinâmicas da matéria [24], ou seja, relações como $P = P(\rho)$ não se alteram significativamente. Entretanto, diferenças quantitativas aparecem com relação a composição da matéria. Portanto, isso altera os cálculos de taxas de reações em núcleos e assim, afeta processos dinâmicos que dependem dessas taxas, como por exemplo a formação da onda de choque [25, 26, 27, 28].

Recentemente, inspirados pelo trabalho de pioneiro de Hillebrandt *et al.* [62], muitos grupos têm se esforçado para construir uma EoS para matéria de SN baseada no método do equilíbrio estatístico nuclear (NSE, do inglês *Nuclear Statistical Equilibrium*) estendido. Enquanto modelos baseados em NSE tradicionais tratam os constituintes da matéria como uma mistura não interagente de gases ideais governados pela equação de Saha, negligenciando interações e efeitos do meio [63, 64], na abordagem de NSE estendida a distribuição dos *clusters* é obtida de maneira auto consistente sob condições de equilíbrio estatístico e interações são levadas em conta. Correções devido a interações com o meio são conhecidas

por ter uma particular importância em altas densidades. Porém, as EoS baseadas no modelo de NSE existentes no mercado são dadas na forma de tabelas. Isso acaba trazendo limitações práticas (cálculos numéricos muito lentos), tornando difíceis as investigações sistemáticas em simulações variando um ou outro *input* nuclear. Dessas limitações que surge a motivação do nosso trabalho, que é criar uma EoS com NSE mas que seja suficientemente rápida quando usada em simulações de supernovas.

Apresentamos então um formalismo geral, baseado no trabalho da Ref. [65], para incluir um modelo de NSE estendido à temperatura finita em qualquer abordagem, tanto não relativístico como relativístico, baseado na aproximação de Wigner Seitz, começando com uma densidade de energia livre arbitrária e incluindo explicitamente os graus de liberdade dos *clusters*.

2.2 NSE a partir de uma energia livre de Wigner-Seitz

Vamos considerar um modelo arbitrário no qual é dada a energia livre em uma célula de WS, F_{WS} , como função dos parâmetros variacionais. Enquanto à temperatura zero uma única realização da célula de WS é esperada, à temperatura finita diferentes configurações da célula de WS são possíveis [65]. Se consideramos um volume muito grande $V_{\text{tot}} \rightarrow \infty$, contendo um grande número de células de WS, cada uma com um volume $V_C^{(j)}$, tal que

$$V_{\text{tot}}(k) = \sum_j N_j(k) V_C^{(j)}, \quad (2.1)$$

$N_j(k)$ sendo o número de ocorrências da célula (j) em uma configuração $k = \{N_j(k), j = 1, \dots, \infty\}$, a energia livre total do sistema é dada por

$$F_{\text{tot}}(k) = \sum_j N_j(k) F_{\text{WS}}^{(j)}. \quad (2.2)$$

Aqui, $F_{\text{WS}} = F_{\text{WS}}(\{\mathbf{x}_k\})$ é a energia livre da célula, que depende do conjunto $\{\mathbf{x}_k\}$ de parâmetros variacionais. No caso de uma EoS com os graus de liberdade dos *clusters*, uma escolha típica para este conjunto é: $\{A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C\}$, A (Z) sendo o número de bárions (prótons) no *cluster* e n_{ng} (n_{pg}) o número densidade dos nêutrons (prótons) no gás, e assim temos $F_{\text{WS}} = F_{\text{WS}}(A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C)$. A nota ção $F_{\text{WS}}^{(j)}$ então indica o valor de F_{WS} quando as grandezas variacionais tomam os valores característicos da célula (j), $F_{\text{WS}}^{(j)} = F_{\text{WS}}(A^{(j)}, Z^{(j)}, n_{ng}^{(j)}, n_{pg}^{(j)}, V_C^{(j)})$. Outras escolhas para o conjunto $\{\mathbf{x}_k\}$ também são possíveis. Na sequência desse capítulo esse problema será expresso explicitamente nos termos das grandezas variacionais da EoS de LS. No caso de EoSs baseadas em teorias de funcional de densidade, onde as grandezas variacionais são funções de onda de partícula única, a definição das variáveis desses *clusters* deve ser derivada do modelo. Tipicamente, pode se tomar $n_{qq} = n_{qq}(r = R_C)$ onde ($q = n, p$), $A = V_C(n_B - n_{ng} - n_{pg})$, e $Z = V_C(n_B Y_p - n_{pg})$, com R_C sendo o raio da célula.

A energia livre da célula de WS, $F_{\text{WS}}^{(j)}$, fica:

$$F_{\text{WS}} = F_{\text{nuc}} + F_g + F_{\text{lept}} + F_\gamma, \quad (2.3)$$

e leva em conta a contribuição do *cluster*, do gás, dos léptons (elétrons e possivelmente pósitrons e neutrinos), e os fótons, respectivamente. Léptons e fótons

podem ser descritos como um gás uniforme relativístico, e são tratados separadamente. Portanto, a partir de agora, analisaremos apenas a contribuição bariônica (*cluster* + gás), cuja energia livre total pode ser escrita como:

$$F_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) \left[F_{\text{nuc,vac}}^{(j)} + \mathcal{F}_g^{(j)} V_C^{(j)} + \delta F^{(j)} \right], \quad (2.4)$$

onde \mathcal{F}_g é a densidade de energia livre da matéria nuclear homogênea contendo as densidades dos nêutrons e prótons (n_n, n_p), $F_{\text{nuc,vac}}$ é a energia livre de um *cluster* (A, Z) no vácuo, e δF considera as contribuições do meio, o qual pode incluir termos de blindagem de Coulomb e de superfície e, possíveis contribuições devido a aproximações de volume excludente se o modelo original utiliza esse esquema. Incluindo todos os termos de efeitos do meio na contribuição do *cluster*, pode se definir $F_{\text{nuc}} = F_{\text{nuc,vac}} + \delta F$. Na SNA, para cada condição termodinâmica (n_B, T, Y_p), os parâmetros variacionais são determinados minimizando a densidade de energia livre total sob os vínculos de conservação de massa e carga. Os valores associados de A e Z devem, portanto, ser interpretados como o núcleo contido na célula mais provável entre as diferentes possibilidades (j) nas condições termodinâmicas dadas, e será escrito como ($\langle A \rangle_j = A_{SNA}, \langle Z \rangle_j = Z_{SNA}$). Entretanto, no tratamento termodinâmico completo da eq.(2.4), as grandezas variacionais são dadas pelo conjunto $N_j(k)$, e a variação dá a ocupação média $\langle N_j \rangle_k$ sob as diferentes ocupações k , ou equivalentemente a probabilidade $\langle p_j \rangle_k \equiv p_j$. Como resultado, tem se não um único valor $A = A_{SNA}, Z = Z_{SNA}$, mas uma distribuição de possíveis configurações de $A^{(j)}, Z^{(j)}$ com probabilidades p_j .

Para calcular a probabilidade p_j , é conveniente trabalhar no *ensemble* grã

canônico. Nesse tratamento, pode se construir a função de partição grã canônica associada à energia livre F_{tot} , começando pela energia livre de Gibbs da componente bariônica

$$G_{\text{bar}}(k) = F_{\text{bar}}(k) - \sum_j N_j(k) (\mu_n N_{\text{WS}}^{(j)} + \mu_p Z_{\text{WS}}^{(j)}), \quad (2.5)$$

onde μ_n (μ_p) é o potencial químico do nêutron (próton). Provamos no Apêndice A que os potenciais químicos dos nêutrons e prótons correspondem aos potenciais químicos do gás, *i.e.* $\mu_n = \mu_{ng}$ e $\mu_p = \mu_{pg}$, e não dependem da realização (k), visto que o gás é homogêneo em todo o volume. O número total de nêutrons e prótons na célula de WS (j), $N_{\text{WS}}^{(j)}$ e $Z_{\text{WS}}^{(j)}$, é dado por:

$$N_{\text{WS}}^{(j)} = N^{(j)} + n_{ng} V_C^{(j)}, \quad (2.6)$$

$$Z_{\text{WS}}^{(j)} = Z^{(j)} + n_{pg} V_C^{(j)}. \quad (2.7)$$

Note que as densidades do gás não dependem da célula (j). Se essa condição não fosse satisfeita, descontinuidades nas densidades do gás apareceriam na interface da célula. Portanto, os potenciais químicos do gás, μ_n e μ_p , também não dependem da célula (j). As equações de conservação (2.6) e (2.7) devem ser modificadas se a EoS considerada utiliza efeitos de volume excludente. Isso é feito facilmente introduzindo o número de nucleons na região densa do espaço, N_r e Z_r e substituindo em todas as equações $N \rightarrow N_r - n_{ng} V_N$, $Z \rightarrow Z_r - n_{pg} V_N$, com V_N sendo o volume do *cluster*. Trabalharemos nisso explicitamente na próxima seção no exemplo do modelo de Lattimer e Swesty.

Substituindo as equações de conservação na Eq. (2.5), temos:

$$G_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) [F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)}] + V [\mathcal{F}_g - \mu_n n_{ng} - \mu_p n_{pg}] . \quad (2.8)$$

Em princípio as densidades do gás n_{ng}, n_{pg} , apesar de uniformes no volume total V , poderiam depender na realização (k) através da ocupação $N_j(k)$. Entretanto, é fácil checar que isso não pode ser o caso se mantivermos a hipótese que cada célula (j) é eletricamente neutra, como deve ser para evitar interações de Coulomb entre as diferentes células.

A Eq.(2.8) define a energia livre de Gibbs para o *cluster* e a densidade de energia livre de Gibbs do gás

$$G_{\text{nuc}}^{(j)} = F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)} , \quad (2.9)$$

$$\mathcal{G}_g = \mathcal{F}_g - \mu_n n_{ng} - \mu_p n_{pg} . \quad (2.10)$$

As expressões explícitas de \mathcal{F}_g e $F_{\text{nuc}}^{(j)}$, dependem do modelo utilizado. Em particular, se a EoS é obtida através de um modelo de funcional de densidade, $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ é dependente da densidade. Nesse caso, devido às leis de conservação de número bariônico e de carga,

$$n_B = \frac{\sum_j N_j(k) A^{(j)}}{V} + n_g \quad (2.11)$$

$$n_p = \frac{\sum_j N_j(k) Z^{(j)}}{V} + n_{pg} , \quad (2.12)$$

n_p sendo o número densidade total dos prótons, $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ depende implicitamente de

$N_j(k)$ através da sua dependência na densidade. Isso introduz um problema de auto consistência, o qual não aparece por exemplo se $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ é obtido pelo modelo tradicional (*i.e.* não compressível) da gota líquida sem nenhuma dependência na densidade. No caso geral de uma energia livre dependente da densidade, um termo de rearranjo deve ser adicionado. A energia livre equivalente efetiva de um corpo é dada por:

$$\tilde{F}_{\text{nuc}}^{(j)} = \frac{\partial \langle F_{\text{bar}} \rangle_k}{\partial \langle N_j \rangle_k} = F_{\text{nuc}}^{(j)} + \langle N_j \rangle_k \frac{\partial F_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \Bigg|_{n_{ng}, n_{pg}, \langle N_i \rangle_k, i \neq j}, \quad (2.13)$$

com $\langle F_{\text{bar}} \rangle_k = F_{\text{bar}}(\{\langle N_j \rangle_k\})$. Note que na derivada parcial a componente do gás não aparece, pois o termo $\sum_j N_j(k) \mathcal{F}_g V_C^{(j)} = V \mathcal{F}_g$ na Eq.(2.4) não depende de $N_j(k)$, visto que o gás é homogêneo em todas as diferentes células.

A energia livre efetiva total de Gibbs se torna:

$$\tilde{G}_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} + \mathcal{G}_g V, \quad (2.14)$$

com

$$\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} = \frac{\partial \langle G_{\text{bar}} \rangle_k}{\partial \langle N_j \rangle_k} = G_{\text{nuc}}^{(j)} + \langle N_j \rangle_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \Bigg|_{n_{ng}, n_{pg}, \langle N_i \rangle_k, i \neq j}, \quad (2.15)$$

Introduzindo a função de partição grã canônica associada ao problema do *cluster* (+ gás),

$$\tilde{\mathcal{Z}}_{\beta \mu_n \mu_p} = \sum_k \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{bar}}(k)) \quad (2.16)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B sendo a constante de Boltzmann. No limite termodinâmico a função de partição do *cluster*, $\tilde{\mathcal{Z}}_{\text{nuc}}$, e do gás, $z_{\beta \mu_n \mu_p}$, pode ser fatorizada

como

$$\tilde{\mathcal{Z}}_{\beta\mu_n\mu_p} = \tilde{\mathcal{Z}}_{\text{nuc}} (z_{\beta\mu_n\mu_p})^V . \quad (2.17)$$

A função de partição do *cluster* pode ser escrita então, como

$$\tilde{\mathcal{Z}}_{\text{nuc}} = \sum_k \exp \left(-\beta \sum_j N_j(k) \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} \right) , \quad (2.18)$$

e, devido a essa fatoração, segue se a derivação padrão da termodinâmica de um gás ideal clássico para a componente do cluster:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{Z}}_{\text{nuc}} &= \prod_j \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}) \right)^n}{n!} \\ &= \prod_j \exp(w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)}) , \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde $w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)} \equiv \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})$. Então, da mesma forma que na Eq. (110) na Ref. [65], é possível recuperar a expressão do tipo NSE para as multiplicidades do *cluster*

$$\langle N_j \rangle_k = \frac{\partial \ln \tilde{\mathcal{Z}}_{\text{nuc}}}{\partial \beta \mu_j} = w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)} = \exp \left(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} \right) , \quad (2.20)$$

onde $\mu_j = (\mu_n + \mu_p)A^{(j)}$. Finalmente, podemos expressar a probabilidade do *cluster* como:

$$p_j = \frac{\langle N_j \rangle_k}{\sum_j \langle N_j \rangle_k} = \frac{\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})}{\sum_j \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})} . \quad (2.21)$$

Vamos calcular agora o termo de rearranjo. Como já discutido na Sec. IIIC da Ref. [65], espera se que esse termo seja pequeno, e por isso ele foi negligenciado na Ref. [65]. No entanto, como mostraremos na Sec. 2.3, o efeito do termo de rearranjo pode não ser desprezível. Na realidade, esse termo é necessário para

recuperar os resultados corretos da SNA em todos os domínios de densidade.

Como já discutido, a dependência de $G_{\text{nuc}}^{(j)}$ em $\langle N_j \rangle_k$ acontece devido a dependência na densidade total, a qual leva a um vínculo nas variáveis $\langle N_j \rangle_k$, veja Eq. (2.12). Em virtude da condição de neutralidade de carga em cada célula, $n_p = Z^{(j)}/V_C^{(j)} + n_{pg}$, isso pode ser visto como uma dependência no volume da célula $V_C^{(j)}$.

O termo de rearranjo pode então ser expresso como:

$$\langle N_j \rangle_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} = -V_C^{(j)} \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \frac{\langle N_j \rangle_k V_C^{(j)}}{V}. \quad (2.22)$$

Podemos ver que $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$ depende explicitamente de $\langle N_j \rangle_k$, o que significa que a Eq.(2.21) é na realidade uma equação auto consistente. Uma vez que o termo de rearranjo é supostamente pequeno (iremos quantificar essa afirmação na próxima seção no exemplo específico da EoS de LS), fazemos uma aproximação para evitar as complicações numéricas de uma resolução auto consistente da Eq. (2.21). Primeiramente notamos da Eq.(2.9) que $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$ deveria ser proporcional à $A^{(j)}$. Isolamos a dependência em $A^{(j)}$ de Eq.(2.22), e fazemos a média sob as diferentes células no restante da expressão. Usando $V_C^{(j)} = A^{(j)}/(n_B - n_g)$, e observando que $\langle \langle N_j \rangle_k V_C^{(j)} \rangle_j = V$, temos:

$$\langle N_j \rangle_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \approx -V_C^{(j)} \left\langle \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \right\rangle_j = -\frac{A^{(j)}}{n_B - n_g} \left\langle \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \right\rangle_j. \quad (2.23)$$

Nessa expressão, $\langle \partial G_{\text{nuc}}^{(j)} / \partial V_C^{(j)} \rangle_j$ é o valor mais provável da função $\partial G_{\text{nuc}} / \partial V_C$, e deve ser retirado do modelo original de SNA.

A expressão final para energia livre efetiva de Gibbs, Eq.(2.15), é então:

$$\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} = G_{\text{nuc}}^{(j)} - \frac{A^{(j)}}{n_B - n_g} \left(\frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial V_C} \right)_{\text{SNA}}, \quad (2.24)$$

a qual juntamente com as Eqs. (2.9) e (2.21) completa o modelo.

Com a escolha $\{\mathbf{x}_k\} = \{A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C\}$, a Eq.(2.21) se torna a distribuição de probabilidades para os diferentes *clusters* de tamanho (A, Z) como:

$$p(A, Z) = \frac{\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z))}{\sum_{A, Z} \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z))}, \quad (2.25)$$

onde as variáveis do gás n_{ng}, n_{pg} são retiradas to modelo SNA, e o volume da célula é obtido para cada *cluster* da condição de neutralidade:

$$V_C = \frac{Z}{n_B Y_p - n_{pg}}. \quad (2.26)$$

Na Ref. [65] é discutido que pode se recuperar a expressão do modelo de SNA minimizando a densidade de energia livre sob os vínculos de conservação de carga e massa, usando uma função auxiliar. Não iremos refazer a demonstração geral aqui, mas mostraremos no Apêndice B, para o caso específico da EoS de LS, que o *cluster* mais provável que maximiza p_j (ou, equivalentemente minimiza \tilde{G}_{nuc}), coincide com o único *cluster* previsto pelas equações de LS.

2.3 Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty

A EoS de LS [41] modela a matéria como uma mistura de uma única espécie de núcleo pesado (representando a média de um conjunto completo de núcleos pesados), partículas α (representando núcleos leves), e nêutrons e prótons livres, submersos em um gás de léptons e fótons não interagentes e uniforme. A densidades baixas, os núcleos são considerados esféricos, e cercados por uma célula esférica e eletricamente neutra constituída de um vapor menos denso de nêutrons, prótons e partículas α , assim como elétrons, na aproximação de WS. O volume de cada célula é $V_C \equiv V_{WS}$. Para os nucleons, tanto dentro do núcleo como no gás, uma interação nucleon nucleon simplificada tipo Skyrme é empregada. Partículas alfa são descritas como esferas sólidas de volume $v_\alpha = 24 \text{ fm}^{-3}$ as quais obedecem uma estatística de Boltzmann de gás ideal. Interações entre núcleos pesados e o gás de partículas α e nucleons são tratados numa abordagem de volume excludente. Conforme a densidade aumenta, deformações na forma dos núcleos (núcleos não esféricos e fases bolhas) são consideradas modificando as energias de Coulomb e de superfície, e a transição para matéria uniforme é descrita por uma construção de Maxwell [41]. A rotina original da EoS de LS, a qual também foi usada na tese, está disponível em <http://www.astro.sunysb.edu/dswesty/lseos.html> (EoSs mais recentes em formas de tabelas são dadas em <http://www.astro.sunysb.edu/lattimer/EOS/main.html>) Existem três possibilidades de parametrização para a rotina da EoS de LS, de acordo com o valor da incompressibilidade da interação nuclear ($K = 180, 220$ e 375 MeV). Recentemente uma pequena correção foi feita com relação ao código

292.3. Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty original. Na Ref. [66] foi visto que a EoS original de LS subestima a fração de partículas alfa, visto que a energia de ligação das partículas α , B_α , deve ser calculada com respeito a massa do nêutron, como todas as outras energias [67].

Para cada densidade bariônica n_B , temperatura T , e fração de elétrons (ou prótons) Y_e , a EoS é obtida minimizando a densidade de energia livre de Helholtz da célula. Como discutido na Sec. 2.2, os componentes não bariônicos da densidade de energia livre podem ser tratados separadamente e, portanto, não participam das equações de equilíbrio. Na EoS de LS as sete variáveis independentes escolhidas para o sistema são $\{x_k\} = \{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{no}, n_{po}\}$, onde n_i e x_i são, respectivamente, a densidade e fração de prótons dos nucleons dentro do núcleo, $u = V_N/V_C$ é a fração da célula de WS ocupada pelos núcleos (V_N sendo o volume do núcleo), r_N é o raio nuclear (tal que $V_N = 4\pi r_N^3/3$), n_α , n_{no} e n_{po} são, respectivamente, os números densidade das partículas alfa, e dos nêutrons e prótons do gás que cerca o núcleo na célula. Entretanto, devido a neutralidade de carga e conservação bariônica, o número de variáveis independentes é reduzido a cinco. A minimização é feita realizando as derivadas parciais da energia livre com relação às cinco variáveis independentes, levando então a um sistema de equações de equilíbrio (Eqs. (3.2) em [41]). Esse procedimento é equivalente a minimização da densidade de energia livre em todas as grandezas variacionais aplicando os vínculos canônicos como multiplicadores de Lagrange, como mostrado no Apêndice B.

Contudo, para construir um NSE com uma distribuição de núcleos a partir da densidade de energia livre de LS, deve se trabalhar no *ensemble* grã canônico. Seguindo o procedimento explicado na Sec. 2.2 e no Apêndice A, e notando que a contribuição para a densidade de energia livre pode ser dividida na contribuição

devido às partículas α e aos nucleons fora do núcleo, a energia livre de Gibbs do *cluster*, Eq. (2.9), e a energia livre de Gibbs do gás, Eq. (2.10), em cada célula (j), são

$$G_{\text{nuc}}^{(j)} = F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)}, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{G}_o = \mathcal{F}_o - \mu_n n_{no} - \mu_p n_{po}, \quad (2.28)$$

$$\mathcal{G}_\alpha = \mathcal{F}_\alpha - \mu_\alpha n_\alpha. \quad (2.29)$$

Usando as variáveis de LS¹, a energia livre do *cluster* F_{nuc} , que contém as correções do meio (incluindo os termos de volume excludente), pode ser escrita como

$$F_{\text{nuc}} = V_N [n_i (f_b + f_{sc} + f_H) - f_\alpha n_\alpha - (1 - n_\alpha v_\alpha) n_o f_o] - n_\alpha v_\alpha n_o f_o V_C, \quad (2.30)$$

onde f_b , f_{sc} , e f_H são as contribuições de *bulk*, núcleo finito (superfície e Coulomb), e de translação, respectivamente, e $n_o = n_{no} + n_{po}$. Nessa expressão, a dependência da célula é dada pelas variáveis do *cluster*, *i.e.* $\{n_i, x_i, V_N, u\} = \{n_i^{(j)}, x_i^{(j)}, V_N^{(j)}, u^{(j)}\}$ e o volume da célula $V_C = V_C^{(j)}$, visto que as partículas α e os nucleons livre são considerados uniformes sob todas as diferentes células.

Os números de nêutrons e prótons dos *clusters* $N^{(j)}, Z^{(j)}$ obedecendo as equa

¹Note que diferente da Ref [41] nós usamos letras maiúsculas para as energias isto é F para a energia livre \mathcal{F} para as densidades de energia livre e letras minúsculas *e.g.* f para as energias por bárion

312.3. Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty

ções de conservação:

$$n_B = \frac{A^{(j)}}{V_C^{(j)}} + 4n_\alpha + n_o \quad (2.31)$$

$$n_p = \frac{Z^{(j)}}{V_C^{(j)}} + 2n_\alpha + n_{po} , \quad (2.32)$$

são dadas por:

$$N^{(j)} = V_N^{(j)} \left[(1 - x_i^{(j)})n_i^{(j)} - n_{no} - 2n_\alpha - n_{no}v_\alpha n_\alpha \frac{1 - u^{(j)}}{u^{(j)}} \right] , \quad (2.33)$$

$$Z^{(j)} = V_N^{(j)} \left[x_i^{(j)}n_i^{(j)} - n_{po} - 2n_\alpha - n_{po}v_\alpha n_\alpha \frac{1 - u^{(j)}}{u^{(j)}} \right] , \quad (2.34)$$

com $A^{(j)} = N^{(j)} + Z^{(j)}$. Note que devido ao volume excludente, esses números não correspondem ao número de nucleons na fase densa, esses últimos sendo dados, para cada célula (j), por $A_r = n_i V_N$, $Z_r = x_i n_i V_N$.

Para calcular o termo de rearranjo, nós trabalhamos explicitamente a expressão da Eq.(2.22). A lei de conservação de carga é escrita para as variáveis de LS como:

$$n_p = \frac{\sum_j \langle N_j \rangle_j V_N^{(j)} (x_i^{(j)} n_i^{(j)} - n_{pg})}{V} + n_{pg} , \quad (2.35)$$

com a notação reduzida $n_{pg} = 2n_\alpha + n_{po}(1 - n_\alpha v_\alpha)$.

Como na derivação geral, a definição de n_p Eq.(2.35) quebra a independência entre as ocupações da célula $N_j(k)$, isso gera um problema de autoconsistência pois a energia livre G_{nuc} depende em n_p através dos termos de Coulomb e de superfície. Escrevendo a conservação de carga em uma única célula de Wigner Seitz:

$$n_p = u (x_i n_i - n_{pg}) + n_{pg} , \quad (2.36)$$

podemos ver que é mais conveniente mudar as variáveis na Eq. (2.22) de $V_{WS} \equiv V_C$ para $u = V_N/V_C$.

O termo de rearranjo então fica:

$$\langle N_j \rangle_j \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_j} = \langle N_j \rangle_j \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial u^{(j)}} \frac{\partial u^{(j)}}{\partial n_p} \frac{\partial n_p}{\partial \langle N_j \rangle_j} \quad (2.37)$$

Usando $n_i = A_r/V_N$, podemos retirar dessa expressão a dependência no tamanho do *cluster*, e fazer a média do restante da expressão com respeito às diferentes células. A energia livre de Gibbs de um corpo, Eq. (2.24), pode finalmente ser escrita como

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} &= G_{\text{nuc}}^{(j)} + A_r^{(j)} \left\langle \frac{\langle N_j \rangle_j}{n_i^{(j)} V} \frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial u} \right\rangle_j \\ &= G_{\text{nuc}}^{(j)} + A_r^{(j)} \left(\frac{u}{n_i V_N} \frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial u} \right)_{SNA}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde as quantidades entre $\langle \rangle_j$ devem ser calculadas para o mais provável núcleo como dado pela solução padrão das equações de LS (ver Apêndice B).

Para verificar a consistência termodinâmica dessa abordagem podemos verificar que a configuração mais provável dada pelo NSE coincide com o único *cluster* representativo de LS. Para isso, devemos minimizar o expoente na Eq. (2.20), *i.e.*, a energia livre de Gibbs, Eq. (2.38). As equações de LS definindo a configuração representativa na SNA são derivadas explicitamente no Apêndice B.

Lembramos que no *ensemble* grã canônico, o sistema está em contato com um reservatório de partículas, ou seja, com potencial químico fixo, e assim temos que a densidade do gás externo, *i.e.*, a densidade das partículas alfa e dos nêutrons e

332.3. Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty

prótons livres, são fixas por seus potenciais químicos (ver Apêndice A):

$$n_{qo} = \frac{\partial g_o}{\partial \mu_{qo}} ; \quad n_\alpha = \frac{\partial g_\alpha}{\partial \mu_\alpha} , \quad (2.39)$$

onde $q = n, p$. Além disso, notamos que o modelo requer que n_B (assim como n_p , ver Eq.(2.35)) seja o mesmo em cada célula de WS. Portanto, diferentes íons na célula, na abordagem de NSE, podem ter diferentes números bariônicos $A^{(j)}$ (sendo o número bariônico do gás uniforme em todo o volume e em cada célula) e diferentes volumes $V_N^{(j)}$, mantendo constante

$$n_B = \frac{A^{(j)}}{V_C^{(j)}} + 4n_\alpha + n_o , \quad (2.40)$$

com $A^{(j)} = N^{(j)} + Z^{(j)}$. A equação (2.40) então fixa V_C , ou equivalentemente u . Com esses vínculos, Eqs. (2.35),(2.39) e (2.40), as sete variáveis independentes nas quais a minimização deve ser realizada são reduzidas a três (n_i, x_i, r_N). Calculando as derivadas parciais da energia livre efetiva de Gibbs, temos

$$\bullet \quad \left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{mic}}^{(j)}}{\partial n_i} \right|_{x_i, r_N} = 0 , \text{ que pode ser escrita como}$$

$$\mu_{bi} + \frac{2}{3} \frac{\mathcal{D}\beta}{n_i u} + \frac{1-u}{A_0} h \mu_H = \mu_{no}(1-x_i) + \mu_{po} x_i , \quad (2.41)$$

onde

$$\mu_{bi} = (1-x_i)\mu_{ni} + x_i\mu_{pi} , \quad (2.42)$$

μ_{ni} e μ_{pi} sendo os potenciais químicos dos nêutrons e prótons dentro do núcleo, e $\beta\mathcal{D} = \mathcal{F}_c + \mathcal{F}_s$ sendo a soma da densidade de energia livre de superfície e Coulomb (veja Eq. (2.39) em [41]). A constante A_0 no termo

da energia livre translacional foi tomado igual a 60 em [41], $h \equiv h(x_i, T)$ é uma função dependente da temperatura que entra na energia livre de superfície (ver Eq. (2.28) em [41]), e μ_H é a contribuição translacional para o potencial químico.

- $\left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{mnc}}^{(j)}}{\partial x_i} \right|_{n_i, r_N} = 0$, que leva a

$$\mu_{ni} - \mu_{pi} - \frac{2 \mathcal{D} \beta}{3 n_i u} \left(\frac{1}{x_i} + \frac{\sigma'}{\sigma} \right) - \frac{1-u}{A_0} h'(\mu_H - T) = \mu_{no} - \mu_{po}, \quad (2.43)$$

onde a tensão superficial $\sigma \equiv \sigma(x_i, T)$ que entra no termo de superfície da energia livre é definido na Eq. (2.27) de LS [41], $\sigma' \equiv \partial \sigma / \partial x_i$, e $h' \equiv \partial h / \partial x_i$. Note que combinando as Eqs. (2.41) (2.43) obtemos as Eqs. (3.2b) (3.2c) em [41], (veja Apêndice B).

- $\left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{mnc}}^{(j)}}{\partial r_N} \right|_{n_i, x_i} = 0$. Notando que minimizando $\tilde{G}_{\text{mnc}}^{(j)}$ com respeito a r_N é equivalente a minimizar com respeito ao volume nuclear V_N temos

$$\frac{\partial(\mathcal{F}_s + \mathcal{F}_c)}{\partial V_N} = 0 \quad \& \quad \frac{G_{\text{mnc}}^{(j)}}{V_N} + \left\langle \frac{u}{V_N} \frac{\partial G_{\text{mnc}}^{(j)}}{\partial u} \right\rangle = 0. \quad (2.44)$$

A primeira condição dá a equação de equilíbrio para r_N , ou, equivalente mente, para n_i (ver Eq. (2.38) em LS, e Apêndice B, Eq. (B.9)),

$$n_i = \frac{5}{2} \frac{A \sigma}{Z^2 e^2} \left(\frac{u(1-u)}{\mathcal{D}} \right)^3, \quad (2.45)$$

e sendo a carga elementar. Usando Eq. (2.41), junto com a relação termo dinâmica entre a pressão P , a densidade de energia livre \mathcal{F} , e o potencial

352.3. Distribuição nuclear a partir da equação de estado de Lattimer e Swesty

químico μ de uma espécie com densidade n , $P = -\mathcal{F} + \mu n$, aplicado à pressão do gás, P_o , das partículas alfa, P_α , e dos nucleons dentro do núcleo, p_j , a segunda condição se torna

$$p_j + \beta \left(\frac{2\mathcal{D}}{3u} - \mathcal{D}' \right) + \frac{n_{iu}}{A_0} h\mu_H = P_o + P_\alpha, \quad (2.46)$$

com $\mathcal{D}' \equiv \partial\mathcal{D}/\partial u$. Essa expressão é equivalente a Eq. (3.2e) de LS [41], veja Apêndice B Eq.(B.11). Note que B_α não é incluído nas nossas equações pois os potenciais químicos na nossa definição incluem a massa de repouso do nêutron. A introdução do termo de rearranjo é, de fato, requerida de modo a obter a equivalência dos resultados obtidos no *ensemble* canônico e grã canônico e, conseqüentemente, a consistência termodinâmica da abordagem.

O efeito do termo de rearranjo é analisado na Fig. 2.1, onde plotamos a parte nuclear da energia livre de Gibbs, Eq. (2.38), para duas condições típicas de densidade, temperatura e fração de prótons encontradas durante o colapso do núcleo de uma supernova. O mínimo de cada curva representa o *cluster* mais provável obtido com e sem o termo de rearranjo. Os X s correspondem ao único núcleo (médio) calculado na EoS de LS, enquanto os pontos (quadrados) marcam o núcleo mais provável calculado com o método NSE sem (com) o termo de rearranjo. Vemos que o termo de rearranjo atua de maneira mais significativa à altas densidades e temperaturas. Note que enquanto nenhuma diferença é notada a baixas densidades (primeira figura), apenas incluindo esse termo é possível reproduzir corretamente o núcleo mais provável de LS para altas densidades (segunda figura).

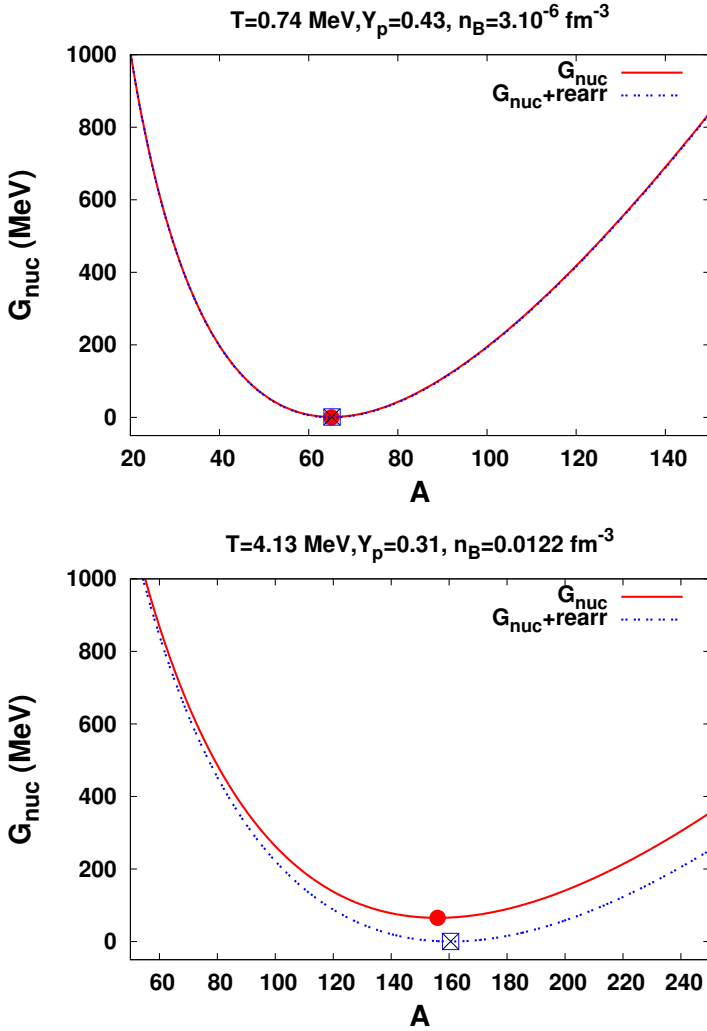


Figura 2.1: Contribuição nuclear para energia livre de Gibbs, $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$, com e sem a contribuição do termo de rearranjo, para duas condições termodinâmicas diferentes, como função de $A = A^{(j)}$. A fração de prótons x_i é fixa como sendo a mesma do núcleo mais provável de LS. Os quadrados (pontos) correspondem aos núcleos mais prováveis obtidos com (sem) o termo de rearranjo; os X s indicam o A do núcleo médio obtido com a EoS de LS. Mais detalhes no texto.

2.4 Resultados

Nessa seção são apresentados os resultados obtidos com o modelo SNE estendido, implementado de forma perturbativa a partir da equação de estado de LS. Isso significa que, para uma dada condição termodinâmica, o cálculo da EoS e da composição é feito em duas etapas:

(i) primeiro, rodamos a rotina analítica de LS e assim obtemos os resultados SNA,

(ii) variando A e Z^2 , calculamos $\tilde{G}_{\text{nuc}}(A,Z)$, Eq. (2.38), como explicado na Sec. 2.2, e então a probabilidade $p(A,Z)$ associada a cada *cluster* (A,Z) .

Dessa forma, podemos também comparar o núcleo mais provável no modelo NSE (*i.e.* o que minimiza $\tilde{G}_{\text{nuc}}(A,Z)$) com o único núcleo da SNA.

Começamos mostrando, na Fig. 2.2, o $x_i = Z/A$ correspondente ao mínimo de \tilde{G}_{nuc} como função de A . Como um exemplo ilustrativo, escolhemos duas condições termodinâmicas possíveis de serem encontradas durante a fase inicial (antes do ricochete) do colapso do núcleo de uma supernova: $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.43$ (linha sólida) e $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13$, $Y_p = 0.31$ (linha pontilhada). Esses números, assim como outras condições exploradas abaixo, são retirados de uma trajetória de colapso seguindo a região central da estrela. Essas condições termodinâmicas foram obtidas com um código de hidrodinâmica unidimensional com relatividade geral e um esquema de dispersão de neutrinos [68, 69, 70], começando de uma estrela progenitora de $40M_\odot$ de Woosley *et al.* [71]. A trajetória de colapso considerada termina antes do ricochete, antes que os núcleos sejam dissociados em matéria homogênea.

²Nessa seção no espírito da EoS de LS definimos A e Z como o número bariônico e de prótons da fase densa $A = V_N n_i$ $Z = A x_i$

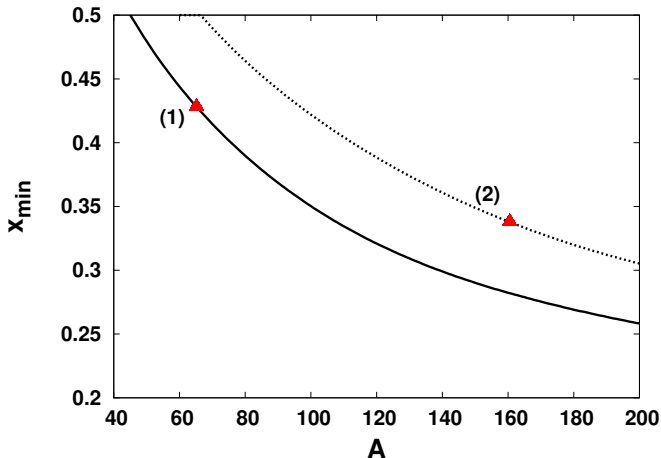


Figura 2.2: Fração de prótons dentro do núcleo $x_i = Z/A$ correspondente ao mínimo de \tilde{G}_{nuc} com A fixos, como função de A , para duas condições termodinâmicas: $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.43$ (linha sólida) e $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13$, $Y_p = 0.31$ (linha pontilhada). Triângulos indicam os valores obtidos com a EoS de LS.

Triângulos indicam os valores de (x_i, A) obtidos a partir do modelo original de LS (isso é: com SNA) para as mesmas condições termodinâmicas: $x_{i,\text{LS}} = 0.43$, $A_{\text{LS}} = 65$ e $x_{i,\text{LS}} = 0.34$, $A_{\text{LS}} = 161$, respectivamente. Note que o comportamento de x_i é sensível à distribuição nuclear, mudando cerca de 50% quando A varia de aproximadamente 50 para 200, e pode ser bem diferente do valor predito por LS para as mesmas condições termodinâmicas (n_B, T, Y_p) , quando a massa nuclear é diferente da massa nuclear de LS.

Na Fig. 2.3, plotamos o número densidade dentro do núcleo, n_i , calculado a partir da Eq. (2.45), versus A , para um $x_i = (x_i)_{\text{SNA}}$ fixo, sendo igual ao x_i obtido pela EoS de LS, para três condições termodinâmicas representativas tiradas da

trajetória do colapso da supernova: (1) $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.43$, (2) $n_B = 2 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.3 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.34$, e (3) $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.31$. linhas pontilhadas representam a distribuição nuclear (em unidades arbitrárias), enquanto pontos correspondem ao $(n_i)_{SNA}$ para o núcleo único (médio) predito pela EoS de LS. Note que o núcleo mais provável, o qual é identificado pelo pico da distribuição nuclear, coincide com o único núcleo predito pela EoS de LS, ambos tendo a mesma densidade n_i , para as três condições termodinâmicas. Podemos ver também que a densidade dentro do núcleo diminui com A ; devido a conservação da massa, Eqs. (B.6), isso é compensado por um aumento na densidade do gás externo n_o e alfa n_α . Além disso, aumentar a densidade e temperatura, da condição (1) para (3), leva a um aumento do número de massa do núcleo médio, e da largura da distribuição.

Para fazer uma melhor comparação dos resultados do modelo SNE com os do SNA, mostramos na Fig. 2.4 a distribuição dos *clusters* Z versus N (painel b), para uma dada condição termodinâmica: $n_B = 8.6 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.83 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.36$. O gráfico principal mostra as probabilidades dos *clusters* (vermelho para azul, maior para menor abundância), enquanto o ponto preto corresponde ao núcleo médio da EoS original de LS, $Z_{SNA} = 38$, $N_{SNA} = 62$. Isso mostra que nosso SNE estendido reproduz os resultados da SNA, tendo a vantagem de levar em conta uma distribuição completa de núcleos. A distribuição suave dos *clusters* com um único pico central também mostra a ausência de efeitos de camada. Os painéis (a) e (c) ilustram a distribuição de probabilidade, $p(A, Z)$ (em unidades arbitrárias), para diferentes cortes em $Z = 32, 38, 41$ (painel (a), da esquerda para direita), e $N = 40, 62, 80$ (painel (c), de cima para baixo), respectivamente. A curva central (verde) nos painéis (a) e (c) correspondem ao

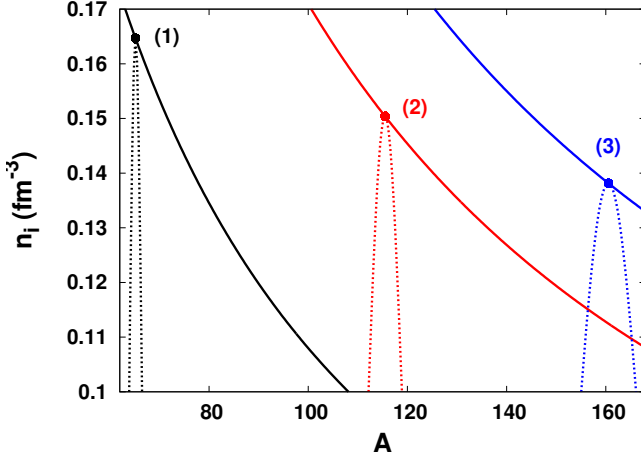


Figura 2.3: Número de densidade bariônica dentro do núcleo, n_i , versus A para três condições termodinâmicas: (1) $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.43$, (2) $n_B = 2 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.3 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.34$, e (3) $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_p = 0.31$. Linhas sólidas correspondem a solução da Eq. (2.45), pontos correspondem a n_i para o núcleo (médio) previsto pela EoS de LS, e as linhas pontilhadas representam a distribuição nuclear (em unidades arbitrárias).

núcleo mais provável, o qual coincide novamente com o resultado SNA.

2.4.1 Inclusão de um modelo de massa nuclear microscópico

Um dos limites do modelo da gota líquida compressível empregado na EoS de LS é a ausência de emparelhamento e efeitos de camada, que são responsáveis pela ocorrência dos números mágicos e afeta a distribuição nuclear, especialmente em densidades e temperaturas relativamente baixas [65, 72]. Na realidade, se espera que efeitos de camada e emparelhamento sejam descartados apenas à

temperaturas de alguns MeV. Para considerar esses efeitos, modelos de massa experimentais ou teóricos devem ser implementados. Entretanto, no colapso do núcleo de supernovas, a captura de elétrons leva os núcleos para o lado rico em nêutrons da carta nuclear, onde medições de massas experimentais não são mais disponíveis e extrapolações teóricas devem ser consideradas. Com isso, incluímos em nosso modelo perturbativo estendido de NSE as energia de ligação de um modelo de massa teórico. Para isso, redefinimos a energia livre de Gibbs do *cluster*, substituindo a contribuição da energia de ligação nuclear correspondente no modelo da gota líquida compressível, G_{LS}^0 , pela energia de ligação calculada teoricamente no modelo de massa, E_{bind} :

$$\tilde{G}_{\text{nuc}} = \tilde{G}_{\text{nuc,LS}} - G_{\text{nuc,LS}}^0 + E_{\text{bind}}, \quad (2.47)$$

onde $\tilde{G}_{\text{nuc,LS}}$ corresponde à contribuição nuclear para a energia livre de Gibbs como calculada em Eq. (2.38), e $G_{\text{nuc,LS}}^0$ é a mesma quantidade calculada com $T = 0$ e $n_o = n_\alpha = n_e = 0$ (n_e sendo o número densidade dos elétrons), *i.e.* o termo de *bulk* mais superfície (à temperatura zero) e Coulomb (com as correções de blindagem). Com relação ao modelo de massa teórico, utilizamos o modelo de massa microscópico de Bruxelas Montreal³ HFB 24 [73]. Esse modelo, baseado no método auto consistente de Hartree Fock Bogoliubov usando uma interação nucleon nucleon efetiva de Skyrme de 16 parâmetros com uma força de emparelhamento realista [realistic contact pairing force], fita as 2353 massas medidas de núcleos com N e $Z \geq 8$ que aparecem nos cálculos de massa atômica (AME do inglês *Atomic Mass Evaluation*) de 2012 [74] com um desvio quadrático médio

³A tabela de massa para esse modelo está disponível na base de dados BRUSLIB <http://www.astro.ulb.ac.be/bruslib/>

de 0.5 MeV. Além disso, esse modelo também é compatível com muitos outros vínculos experimentais e astrofísicos [75]. Note que, na tabela de massa, são tabuladas o excesso de massa, M_{cal} , o qual é a diferença entre sua massa real M_{at} medida experimentalmente e a sua massa indicada por seu número de massa A em unidades de massa atômica m_u , ou seja

$$M_{cal} = M_{at} - Am_u. \quad (2.48)$$

Da Eq. 2.48 conseguimos isolar a massa atômica M_{at} , e assim calcular as massas nucleares com

$$M_{nuc}(A,Z) = M_{at} - Zm_e c^2 + B_{el}(Z), \quad (2.49)$$

onde m_e é a massa do elétron e $B_{el}(Z)$ é energia de ligação total de todos os Z elétrons removidos [76].

Para ilustrar o efeito de empregar esse tipo de tabela de massa em vez do funcional simplificado de LS durante o colapso do núcleo da supernova, plotamos na Fig. 2.5 a evolução do Z (acima) e N (abaixo) para condições termodinâmicas dadas durante a trajetória do colapso (o tempo é dado em unidades arbitrárias). As linhas pontilhadas correspondem ao núcleo mais provável calculado com o modelo de NSE estendido construído a partir da EoS original de LS; as linhas sólidas representam a variância de Z e N e dão a largura da distribuição nuclear. Os pontos em ambas as figuras correspondem aos resultados obtidos quando o modelo de massa HFB 24 é considerado no lugar do modelo original de LS. Podemos notar claramente a ocorrência de estruturas de camadas e números

mágicos: na primeira fase do colapso, *clusters* com $Z = 28$ dominam, enquanto nos estágios subsequentes do colapso dominam, primeiro *clusters* com N cerca de 50 e então $N = 82$ e $N = 126$ prevalecem. Nesse ponto do colapso, maiores diferenças na composição podem ser observadas quando um ou outro modelo é usado. Também notamos que a largura na distribuição nuclear aumenta com o tempo, *i.e.* com densidade e temperatura.

Mostramos na Fig. 2.6 a carta de núcleos exibindo as probabilidades dos *clusters* normalizadas (vermelho para azul, núcleos mais pra menos prováveis), para quatro condições termodinâmicas diferentes tiradas da trajetória do colapso no centro da estrela: (a) $n_B = 3.86 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.79 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (b) $n_B = 3.35 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.51 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.38$, (c) $n_B = 3.01 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.68 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.33$, e (d) $n_B = 5.85 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 3.33 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. Distribuições bimodais representam as probabilidades com o modelo de massa HFB24 e distribuições gaussianas representam as probabilidades com o funcional de massa usado por LS. Os pontos correspondem ao núcleo médio previsto pela EoS de LS. Dessa figura também é claro o aparecimento de números mágicos. Note que a distribuição bimodal não pode ser reproduzida no caso de um SNA de pico único. Enquanto para condições termodinâmicas no começo do colapso (a) núcleos próximos a $Z = 28$ e $N = 50$ são populados, adiante em (b), a distribuição tem seu pico cerca de $N = 50$ e $N = 82$, em (c) cerca de $N = 82$ e $N = 126$; no fim da fase do colapso (antes do ricochete) (d), os núcleos mais prováveis estão situados nas proximidades de $N = 184$. Porém, a última condição termodinâmica mostrada está próxima do fim da tabela de massas teóricas, então nenhuma composição mais pesada pode ser explorada. Podemos notar também que, durante o colapso, os núcleos mais prováveis se tornam maiores (*i.e.* A

umenta), e a distribuição fica mais larga. Esses efeitos são uma consequência do aumento da densidade e da temperatura, respectivamente.

Por fim, uma importante diferença é observada nos painéis (c) e (d) entre o núcleo médio previsto pela EoS original de LS (pontos) e o núcleo mais provável previsto usando o modelo de massa HFB 24. Isso implica que nossos cálculos, contrariamente à aplicação anterior onde o modelo de massa foi tirado da EoS de LS, não é completamente consistente. Para alcançar consistência, devemos calcular os potenciais químicos μ_{qo} e o funcional \tilde{G}_{nuc} completo, diretamente do modelo HFB. Esse aperfeiçoamento é deixado para trabalhos futuros.

2.5 Perspectivas futuras

Como continuação do trabalho pretendemos:

- Modificar a energia dos núcleos de forma a usar as massas nucleares conhecidas experimentalmente sempre que possível, e uma interpolação entre um modelo microscópico que contém efeitos de camadas com um modelo simples que não tenha essa propriedade e com isso “brincar” com a existência ou não de magicidade em regiões mais ricas em nêutrons.
- Realizar uma simulação do colapso de supernova usando um código com relatividade geral e aproximação da estrela para um dimensão, ou seja, uma estrela progenitora perfeitamente esférica onde variamos somente o raio.

Para o primeiro item, foi iniciado o estudo da fórmula para interpolação, e apresentamos nossos resultados preliminares a seguir.

Para o segundo, iremos comparar quantidades de composição e termodinâmicas durante a evolução do colapso e no instante do ricochete utilizando o modelo de Lattimer e Swesty original com o nosso modelo de NSE com o modelo de massa HFB24. Apresentamos no fim dessa seção os resultados preliminares.

2.5.1 Desaparecimento dos números mágicos

A possibilidade de que efeitos de camada desapareçam conforme núcleos ricos em nêutrons sejam analisados, é estudada há muito tempo [77, 78], e fortes evidências já foram encontradas para o desaparecimento do número mágico $N = 20$ [79].

Durante a fase inicial do colapso, antes do ricochete, reações nucleares como decaimento beta inverso acontecem. Nessa reação um próton livre, ou preso em um núcleo, captura um elétron criando assim um nêutron. Com isso, é possível calcular a taxa de captura de elétrons devida a essa reação e a consequente modificação na estrutura da matéria na estrela.

Uma consequência direta é que teremos núcleos mais ricos em nêutrons. Podemos ver na Fig. 2.7, em verde, os elementos criados durante o processo de captura de elétrons em supernovas.

A região ao redor do número mágico $N = 50$ tem especial importância durante o colapso da supernova como podemos ver na Fig. 2.7. Agora, o interessante desse estudo é que temos na distribuição de prováveis núcleos durante o colapso, núcleos muito ricos em nêutrons e cujas massas ainda não foram medidas experimentalmente. Portanto devemos recorrer a modelos teóricos para encontrar um valor numérico para essas massas. Entretanto, apesar de sabermos da importância da magicidade em modelos de massa, como foi dito no começo dessa seção,

sabe se que algumas camadas de números mágicos podem desaparecer conforme nos afastamos do vale de estabilidade da carta nuclear.

A ideia dessa seção é analisar a possibilidade de termos (ou não) desaparecimento de números mágicos conforme nos aproximamos da *neutron drip line*⁴.

Para isso primeiro revisamos como encontramos essas camadas de números mágicos. Isso pode ser feito calculando a energia de separação de dois núcleos, $S_{2n}(Z,A)$, que é a diferença entre a energia de ligação de um núcleo por outro com dois nêutrons a menos, ou seja

$$S_{2n}(Z,A) = B(Z,A-2) - B(Z,A), \quad (2.50)$$

onde os valores das energias de ligação $B(Z,A-2)$ e $B(Z,A)$ são retirados de tabelas de massa quando se deseja estudar modelos microscópicos, como é o caso dos modelos DZ10 e HFB24, ou de funcionais de energia, como no caso do modelo da gota líquida modificada, que analisaremos a seguir.

Podemos plotar $S_{2n}(Z,A)$ com relação ao número de nêutrons N para vários isotopos (família de núcleos com o mesmo número de prótons Z). No trabalho [78], as autoras mostram o gráfico da Fig. 2.8, onde vemos um queda no valor de $S_{2n}(Z,A)$ na região de $N = 50$ o que marca a presença de uma camada de número mágico. Nessa figura vemos em preto as massas experimentais e em vermelho as predições de dois modelos teóricos diferentes. Note que ambos os modelos representam muito bem as massas experimentais, mas divergem quanto a extra polação para a região não conhecida. Nessa região mais rica em nêutrons onde não temos valores experimentais, o modelo DZ10 considera que o número $N = 50$

⁴A zona de fronteira que delimita os núcleos estáveis para os núcleos que decaem por emissão de um próton

continua sendo mágico enquanto o modelo HFB22 considera um *quenching* dessa magicidade. Por existir essa divergência com relação às predições teóricas para regiões desconhecidas experimentalmente, em nosso trabalho resolvemos utilizar uma fórmula que nos permite “experimentalmente” com a existência ou não do *quenching*. Ou seja, faremos uma interpolação de um modelo que contém magicidade sempre, com um que nunca leva em conta essa propriedade, e posteriormente, modificando um parâmetro, podemos analisar a existência ou não do efeito de camadas na região de núcleos mais ricos em nêutrons e, com isso analisar esse efeito no colapso da supernova.

Utilizamos como modelo microscópico que contém magicidade em todas as camadas, o modelo de massa de Duflo Zucker [80]. E para representar o *quenching* faremos a interpolação com um modelo que nunca contém magicidade, que será um modelo da gota líquida modificado (GLM). Podemos escrever a energia de ligação por nucleon do modelo de gota líquida modificado como

$$\frac{E_{GLM}(Z,A)}{A} = a_v + \frac{a_s(\delta)}{A^{1/3}} + A_{sym} \left(\frac{A - 2Z}{A} \right)^2 + a_c \frac{Z^2}{A^{4/3}} \pm \frac{12}{A^{3/2}}, \quad (2.51)$$

com essa equação modelamos o núcleo como sendo uma gota líquida onde $a_v = -16.048$ MeV é o termo de volume, o qual é o termo dominante da Eq. 2.51, o segundo termo contabiliza energia da superfície do núcleo e também considera as diferentes composições do núcleo (número de prótons e nêutrons) com $a_s(\delta) = a_{s0} + a_{ssym}\delta^2$ onde $\delta = (N - Z)/A$, $a_{s0} = 18.2326$ MeV, o terceiro termo é de assimetria (mede quão rico em nêutrons, *i.e.* quantos nêutrons a mais que prótons o núcleo possui) e $a_{ssym} = -29.7356$ MeV, $a_{sym} = 30$, o quarto termo leva em

conta a interação coulombiana onde

$$a_c = \frac{3\alpha\hbar c}{5r_0} \quad (2.52)$$

com $\alpha = 1/137$, $\hbar c = 197.3269788$ MeV fm, $r_0 = [3/(4\pi\rho_0)]^{1/3}$ e $\rho_0 = 0.1578$ fm⁻³ e, o último termo é o termo de emparelhamento, que considera o fato de os núcleos serem mais fortemente ligados quando possuem números pares de prótons e nêutrons.

Na Fig. 2.9 comparamos a energia de separação de dois núcleos dos modelos DZ10 (quadrados) e GLM (triângulos) com as massa conhecidas experimentalmente (pontos). Note que a fórmula de massa DZ10 reproduz muito bem os valores das massas experimentais e mantém a magicidade de $N = 50$ quando não se tem mais valores experimentais, já o modelo simples GLM se aproxima dos valores experimentais mas não contém magicidade.

Agora, para fazer a interpolação utilizamos uma fórmula proposta por Pearson *et. al.* em [81], que é escrita como

$$E_{int}(Z,A) = E_{GLM} + \frac{1}{q(Z,A)} (E_{mic} - E_{GLM}), \quad (2.53)$$

onde E_{GLM} é a energia de ligação calculada com a Eq. 2.51 e em E_{mic} utilizamos a tabela de massas DZ10. O fator de *quenching* é dado pela expressão

$$q(Z,A) = 1 + \exp\left[\left(\frac{a}{Z} + b\right)N + \frac{c}{Z} + d\right], \quad (2.54)$$

onde os parâmetros $b = -0.086$, $c = -300.0$ e $d = -14.4$ foram retirados do trabalho original [81] e o parâmetro a escolheremos de forma a ter ou não *quenching*.

Note que quando $a \rightarrow \infty$, $q \rightarrow \infty$ temos $E_{int} \rightarrow E_{GLM}$, e quando $a \rightarrow 0$, $q \rightarrow 1$ temos $E_{int} \rightarrow E_{mic}$. Portanto, modificando esse parâmetro podemos ter uma energia de ligação com magicidade onde sabemos empiricamente que ela exista, e na região desconhecida podemos ter um pequeno ou grande *quenching*, conforme podemos ver na Fig. 2.10. Nessa figura usamos dois valores para esse parâmetro, $a = 17.0$ e $a = 18.5$. Note que em ambos os casos mantivemos a magicidade nos valores de massas conhecidas, e na região mais rica em nêutrons, temos para o maior valor de a um sinal de magicidade levemente maior que para $a = 18.5$ onde a curva de E_{int} se aproxima mais de E_{GLM} na região de $N = 50$.

Outra maneira de ver o *quenching* dos efeitos de camadas é através do salto (*gap*) dos números mágicos, que é definido em termos das energias de separação de dois nêutrons S_{2n} :

$$\Delta(N_0) = S_{2n}(N_0) - S_{2n}(N_0 + 2), \quad (2.55)$$

onde N_0 é o número mágico cujo salto queremos analisar. Na Fig. 2.11 plotamos o salto do número mágico $N = 50$ com relação ao número de prótons Z . Nessa figura comparamos o modelo DZ10, GLM e a interpolação entre os dois. Note a existência constante de um salto para DZ10, com um valor maior do salto quando temos dupla magicidade (*i.e.* além de $N = 50$, $Z = 28$ e $Z = 50$). Para o modelo GLM o valor do salto está sempre próximo a zero. E quando fazemos a interpolação, temos um *quenching* dessa magicidade conforme nos aproximamos da região mais rica em nêutrons, sendo que para o maior valor de a , na figura, $a = 18.5$ esse *quenching* começa antes que para $a = 17.0$. Comparando com a Fig. 2.10 vemos que o valor de a que faz o maior *quenching* de S_{2n} na Fig. 2.10

é o mesmo que primeiramente “some” com o salto na Fig. 2.11.

Construída essa energia de ligação com a interpolação de um modelo realista de massa e o simples modelo da gota líquida, que nos permite analisar a existência ou não do *quenching*, vamos modificar a Eq. 2.47, colocando E_{int} no lugar da energia de ligação do modelo microscópico E_{bind} , ou seja, teremos assim a nossa nova energia livre de Gibbs:

$$\tilde{G}_{nuc} = \tilde{G}_{nuc,LS} - G_{nuc,LS}^0 + E_{int}. \quad (2.56)$$

A fórmula final para \tilde{G}_{nuc} a ser usada nos cálculos da taxa de captura de elétrons no colapso terão também a informação das massas experimentais, ou seja, utilizaremos a energia de ligação das massas experimentais sempre que elas existirem, e a da interpolação quando não tivermos essa informação.

2.6 Considerações finais

Nesse capítulo, desenvolvemos um formalismo geral que permite calcular a distribuição nuclear encontrada na matéria estelar em equilíbrio, associado à qualquer EoS arbitrária unificada, o qual faz uma modelagem nuclear à temperatura finita capaz de descrever tanto matéria nuclear homogênea quanto inhomogênea e assimétrica. As probabilidades dos *clusters* são dadas por fatores de Boltzmann simples, Eq. (2.25), com quatro modificações importantes:

- o tamanho do *cluster* que entra nas transformações de Legendre da energia livre de Helmholtz para Gibbs deve ser devidamente definido tal que as conservações de massa e carga são respeitadas, veja Eqs. (2.6) (2.7);

- o potencial químico do *cluster* é dado pelo potencial químico dos nucleons livres, ver Eqs. (A.8) (A.9), multiplicado pelo tamanho do *cluster* efetivo;
- todas as modificações eventuais devido ao meio devem ser consideradas dentro da energia livre do *cluster*, veja Eq. (2.4) e a discussão que disso segue;
- um termo de rearranjo garantindo a consistência termodinâmica deve ser adicionado, ver Eq. (2.24).

Esse formalismo pode ser aplicado de forma direta em qualquer EoS relativística ou não relativística que trata da matéria nuclear a densidades de subsaturação baseada na Aproximação de Núcleo Único (SNA). Aplicamos esse formalismo ao caso específico da EoS de LS, a qual é amplamente usada em simulações do colapso do núcleo de supernovas. Esse exemplo mostrou explicitamente que o núcleo mais provável coincide com a predição da EoS de LS, mas muitos outros núcleos são possíveis, e a largura da distribuição nuclear é uma função crescente da densidade e temperatura.

Exploramos também o efeito de utilizar um modelo de massa mais realista, substituindo o funcional de gota líquida simples de LS pelo modelo de massa microsscópico de Bruxelas Montreal HFB 24, o qual fornece uma ótima reprodução das massas nucleares para toda a carta de nuclídeos.

Por fim, utilizando um modelo simples GLM juntamente com o modelo microsscópico DZ10, criamos uma energia de ligação que interpola esses dois modelos, o que nos permitiu explorar a existência ou não do *quenching* de números mágicos.

Considerando condições termodinâmicas que ocorrem em uma trajetória típica do colapso do núcleo de supernovas, mostramos que a distribuição de isótopos desvia consideravelmente dos resultados médios de LS, e números mágicos dominam durante toda a trajetória. Visto que as taxas de captura de elétrons em núcleos pode variar de ordens de magnitude entre núcleos vizinhos, esperamos que um cálculo consistente dessas taxas sob essa distribuição mais realista pode modificar a taxa de deleptonização, e então a dinâmica do colapso que disso resulta, com relação a cálculos de colapso típicos onde a SNA é empregada.

A implementação das taxas de captura de elétrons na distribuição nuclear, e a avaliação desse efeito na trajetória do colapso, serão deixadas para trabalhos futuros.

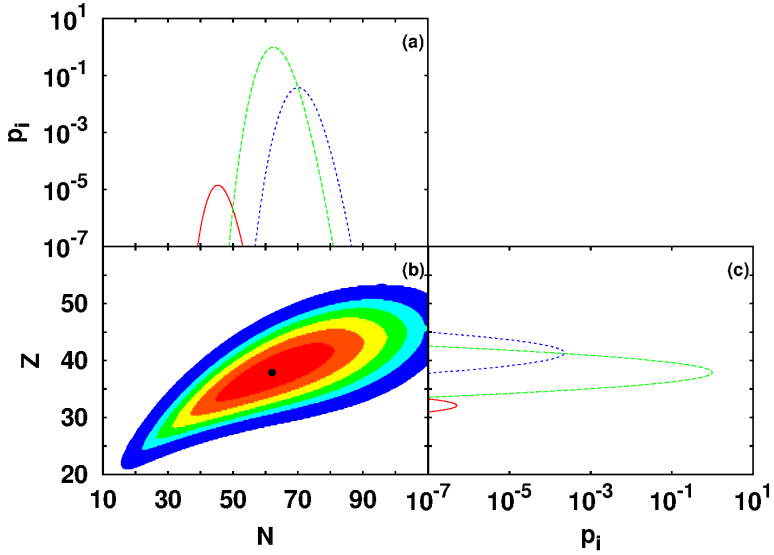


Figura 2.4: Distribuição de núcleos preditos pelo modelo NSE para a condição termodinâmica $n_B = 8.6 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.83 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.36$. No painel (b) são mostradas as probabilidades dos *clusters* (vermelho para azul, de mais pra menos abundante), enquanto o ponto preto corresponde ao núcleo médio ($Z = 38$, $N = 62$) obtido com a EoS de LS. O painel (a) mostra as distribuições de probabilidades para cortes em $Z = 32$, 38, e 41 (da curva da esquerda para direita), enquanto o painel (c) mostra as distribuições de probabilidades para $N = 40$, 62, e 80 (da curva de cima para baixo).

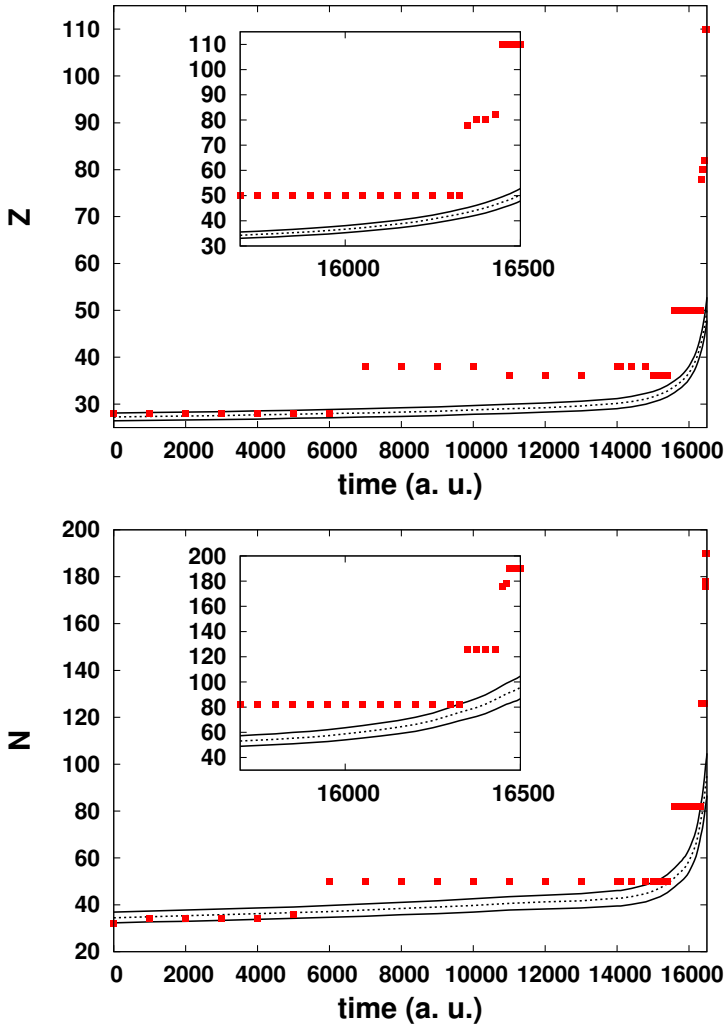


Figura 2.5: Z (acima) e N (abaixo) durante a trajetória do colapso (em unidades de tempo arbitrárias), no centro da estrela. Linhas pontilhadas correspondem ao núcleo mais provável utilizando o funcional de massa de LS, enquanto linha sólida correspondem à variância. Pontos representam o núcleo mais provável quando o modelo de massa HFB 24 é implementado. As caixas pequenas mostram um zoom na parte final das curvas.

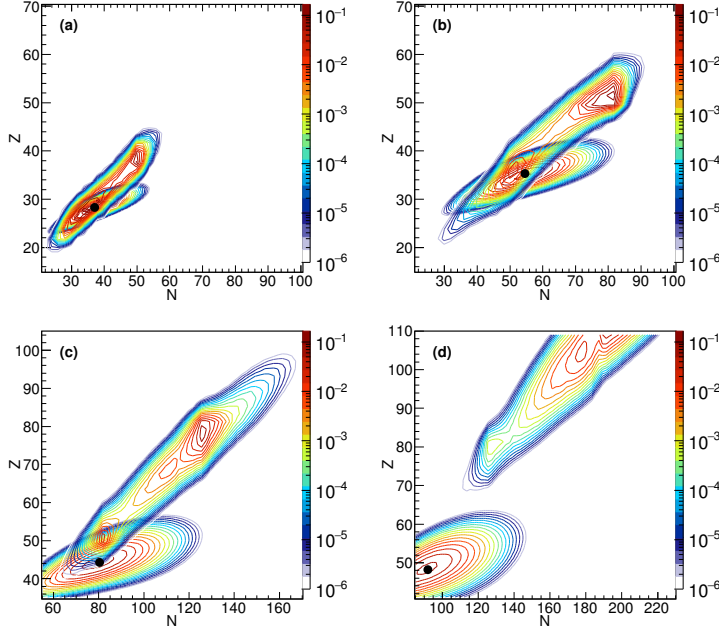


Figura 2.6: Distribuição de núcleos (Z, N) para quatro condições termodinâmicas que acontecem durante a trajetória do colapso no centro da estrela: (a) $n_B = 3.86 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.79 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (b) $n_B = 3.35 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.51 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.38$, (c) $n_B = 3.01 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.68 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.33$, e (d) $n_B = 5.85 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 3.33 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. As cores representam as probabilidades normalizadas dos *clusters* (vermelho para azul, mais para menos provável). Distribuições bimodais representam as probabilidades com o modelo de massa HFB24 e distribuições gaussianas representam as probabilidades com o funcional de massa usado por LS. Pontos correspondem ao núcleo médio previsto pela EoS original de LS.

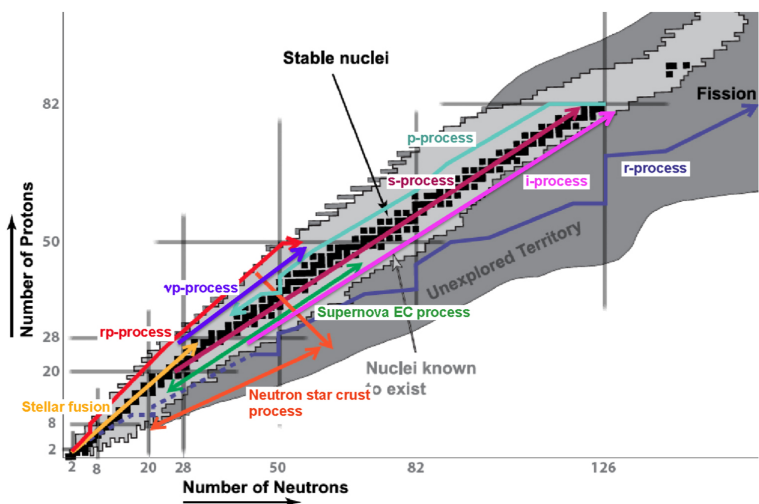


Figura 2.7: Carta de núclídeos contendo processos. Fonte: H. Schatz, J. Phys. G. 43 (2016) 0664001.

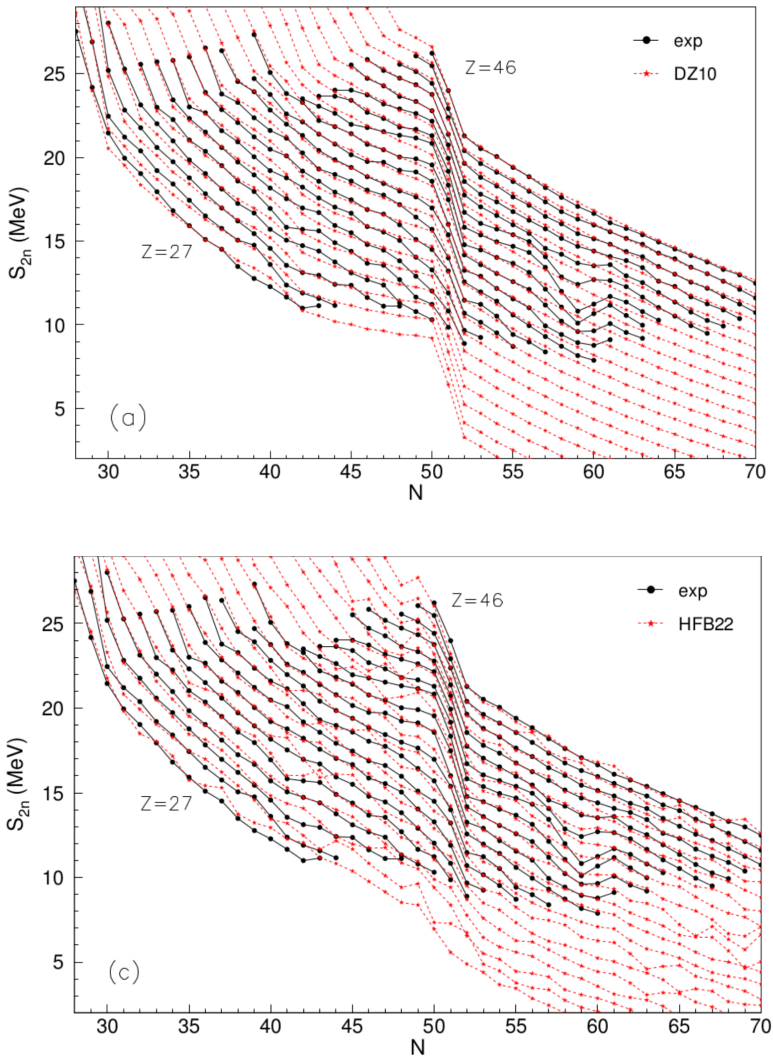


Figura 2.8: Comparação da energia de separação de dois modelos microscópicos com massas experimentais. Fonte: Raduta, A. *et. al.* PRC 93 025803 (2016).

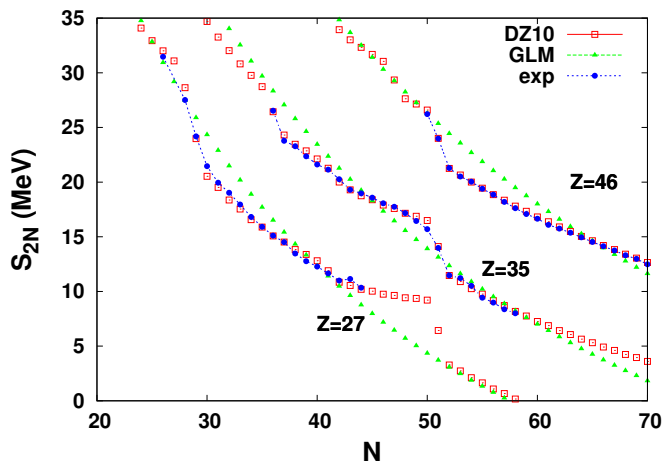


Figura 2.9: Energia de separação próxima da região $N = 50$ para modelo da gota líquida modificado (triângulos), DZ10 (quadrados) e massas experimentais (pontos).

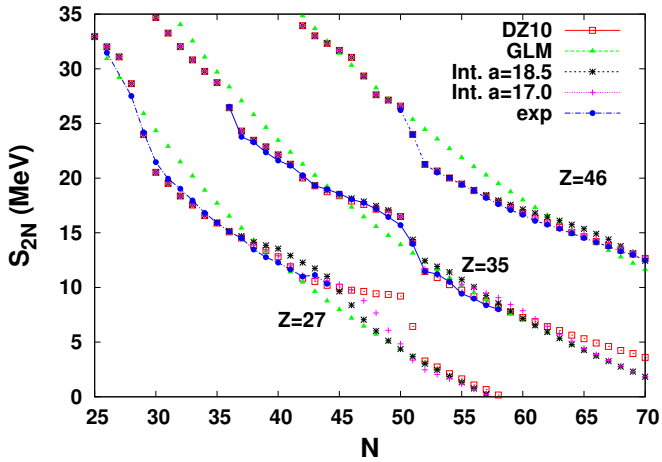


Figura 2.10: Energia de separação próxima da região $N = 50$ para modelo da gota líquida modificado (triângulos), DZ10 (quadrados) e massas experimentais (pontos), e interpolação entre esses modelos com $a = 17.0$ e $a = 18.5$.

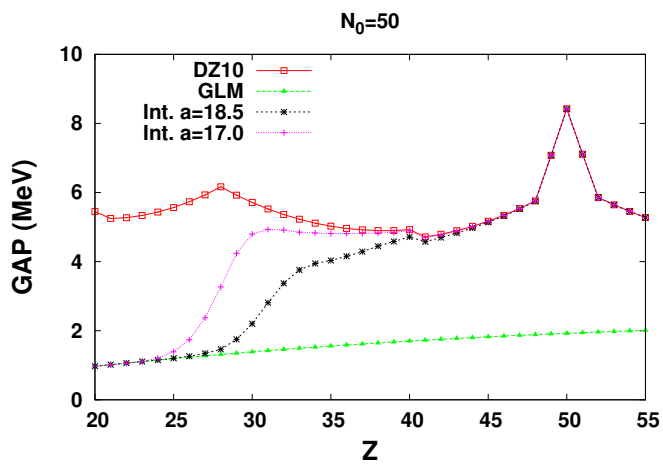


Figura 2.11: Salto do número mágico $N = 50$ para o modelo da gota líquida modificado (GLM), DZ10 e para a interpolação entre esses dois modelos, usando dois possíveis valores de a .

Capítulo 3

Modelo Quark-Meson-Coupling

A física nuclear é descrita com os graus de liberdade dos nucleons e mésons há muitos anos. Devido ao grande sucesso de vários modelos de hadrodinâmica quântica [10, 11] descreverem a matéria densa, acredita-se que esses sejam os graus de liberdade necessários em um modelo nuclear relativístico. Entretanto, o sucesso do modelo de quarks para explicar a física de partículas elementares, assim como os experimentos de colisões de partículas à altas energias [82, 83, 84, 85], não deixa dúvidas de que os nucleons são formados de três quarks. O problema está em definir quando isto é importante para a dinâmica do núcleo.

Para investigar esse problema, Guichon [22] criou a primeira versão do modelo QMC em 1988. Esse modelo continuou sendo investigado e passou por melhorias nos anos que se seguiram [86, 87, 88, 89, 90]. Nesse capítulo apresentamos o modelo Quark Meson Coupling, mostramos como ele descreve as propriedades da matéria nuclear comparando com algumas parametrizações dos modelos de QHD, verificamos as propriedades das estrelas de nêutrons e, por fim, analisamos o modelo QMC a temperatura finita.

3.1 Revisão do modelo

A proposta do modelo Quark Meson Coupling é fazer a estrutura, ou movimento, de quarks do nucleon ser modificada pelos campos mesônicos. Essa modificação, apesar de pequena, é suficiente para gerar um novo mecanismo para saturação nuclear.

Assumimos que a matéria nuclear infinita à densidades moderadas (até poucas vezes a densidade de saturação) é uma distribuição uniforme de nucleons, os quais são "sacolas" esféricas e estáticas do tipo MIT [23] que não se sobrepõem, onde os próprios quarks dentro dessa sacola interagem através da troca de mésons com os quarks de outra sacola. Os campos mesônicos são tratados através da aproximação de campo médio. Nessa aproximação consideramos os campos mesônicos estáticos e homogêneos, ou seja, não variam com o tempo e nem no espaço [91]. Os méson considerados são o méson escalar σ , e os mésons vetoriais ω e ρ . Na aproximação de campo médio, esses campos, que a princípio dependeriam das quatro coordenadas do espaço tempo, são constantes. Da mesma maneira que nos modelos de hadrodinâmica quântica, no QMC o méson σ é responsável pela parte atrativa do potencial nuclear, o méson ω pela parte repulsiva e o méson ρ pela interação de isospin, isto é, o méson ρ nos permite distinguir prótons de nêutrons.

O campo dos quarks, ψ_{qN} , dentro da sacola satisfaz a seguinte equação de movimento:

$$\left[i \not{\partial} - (m_q^0 - g_\sigma^q) - g_\omega^q \omega \gamma^0 + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_{03} \gamma^0 \right] \psi_{qB}(x) = 0, \quad q = u, d$$

onde m_q^0 é a massa nua do quark, τ_z é a projeção do spin cujo valor é $+1$ para o próton e -1 para o nêutron e, g_σ^q , g_ω^q e g_ρ^q denotam as constantes de acoplamento quark meson. O estado fundamental normalizado para o quark na sacola é dado por

$$\psi_{q_B}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{N}_{q_B} \exp(-i\epsilon_{q_B} t/R_B) \times \begin{pmatrix} j_{0_B}(x_{q_B} r/R_B) \\ i\beta_{q_B} \vec{\sigma} \cdot \hat{r} j_{1_B}(x_{q_B} r/R_B) \end{pmatrix} \frac{\chi_q}{\sqrt{4\pi}},$$

onde j_{0_B} e j_{1_B} são funções de Bessel,

$$\epsilon_{q_B} = \Omega_{q_B} + R_B \left(g_\omega^q \omega + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_{03} \right), \quad (3.1)$$

e,

$$\beta_{q_B} = \sqrt{\frac{\Omega_{q_B} - R_B m_q^*}{\Omega_{q_B} + R_B m_q^*}}, \quad (3.2)$$

com o fator de normalização dado por

$$\mathcal{N}_{q_B}^{-2} = 2R_B^3 j_0^2(x_q) [\Omega_{q_B}(\Omega_{q_B} - 1) + R_B m_q^*/2] / x_q^2, \quad (3.3)$$

onde $\Omega_{q_B} \equiv \sqrt{x_{q_B}^2 + (R_B m_q^*)^2}$, $m_q^* = m_q^0 - g_\sigma^q \sigma$, R_B é o raio da sacola do bárion B e χ_q é o espinor do quark. O autovalor da sacola por nucleon N , x_{q_B} , é determinado pelas condições de contorno na superfície da sacola

$$j_{0_B}(x_{q_B}) = \beta_{q_B} j_{1_B}(x_{q_B}). \quad (3.4)$$

A energia da sacola estática, a qual descreve o bárion B formado por três quarks,

no estado fundamental é expressa como

$$E_B^{\text{bag}} = \sum_q n_q \frac{\Omega_{qB}}{R_B} - \frac{Z_B}{R_B} + \frac{4}{3} \pi R_B^3 B_B, \quad (3.5)$$

onde Z_B é um parâmetro do modelo que carrega informação sobre o movimento de ponto zero do bárion B , e B_B é a constante da sacola. O conjunto de parâmetros usados neste trabalho é determinado impondo a estabilidade do nucleon (aqui, a "sacola"), de tal forma que exista um único valor para as massas do próton e do nêutron [90]. A massa efetiva do nucleon é definida como $M_B^* = E_B^{\text{bag}}$.

A condição de equilíbrio para a sacola é obtida minimizando a massa efetiva, M_B^* em relação ao raio da sacola

$$\frac{dM_B^*}{dR_B^*} = 0, \quad B = p, n. \quad (3.6)$$

Fixando o raio da sacola $R_B = 0.6$ fm e a massa nua do nucleon $M = 939$ MeV, os parâmetros até então desconhecidos $Z_B = 4.0050668$ e $B_B^{1/4} = 210.85$ MeV são obtidos. Com isso, os valores de $B/A \equiv \epsilon/\rho - M = -16.4$ MeV na saturação $n = n_0 = 0.15$ fm⁻³ são encontrados fazendo $g_\sigma^q = 5.9810$, $g_\omega = 8.9817$, onde $g_\omega = 3g_\omega^q$ e $g_\rho = 3g_\rho^q$. Todos os parâmetros usados nesse trabalho podem ser vistos na tabela 3.1. Com uma pequena modificação no valor da constante da sacola, *i.e.* $B_B^{1/4} = 211.033$ MeV, a energia de ligação se torna -15.7 MeV e a energia de simetria e seu *slope* ficam 33.4 MeV e 92.56 MeV respectivamente. Os resultados discutidos nessa tese são muito similares para ambas constantes da sacola e conjunto de parâmetros.

A densidade de energia total da matéria nuclear é obtida através da seguinte

equação:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_0^2 + \frac{1}{2}m_\rho^2\rho_{03}^2 + \sum_B \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_B} k^2 dk [k^2 - M_B^{*2}]^{1/2},$$

e a pressão por

$$p = -\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_0^2 + \frac{1}{2}m_\rho^2\rho_{03}^2 + \sum_B \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{k_B} k^4 dk / [k^2 - M_B^{*2}]^{1/2}.$$

Os campos mesônicos ω_0 e ρ_{03} são determinados através das relações abaixo,

$$\omega_0 = \frac{g_\omega(n_p + n_n)}{m_\omega^2}, \quad \rho_{03} = \frac{g_\rho(n_p - n_n)}{m_\rho^2}, \quad (3.7)$$

onde

$$n_B = \sum_B \frac{2k_B^3}{3\pi^2}, \quad B = p, n. \quad (3.8)$$

é a densidade bariônica.

Por fim, o campo médio σ é fixo impondo

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} = 0. \quad (3.9)$$

3.1.1 Propriedades da matéria nuclear(bulk)

Sempre que se apresenta um modelo efetivo para física nuclear é fundamental verificar as propriedades da matéria nuclear a temperatura zero e na densidade de saturação, isto é, numa densidade na qual a pressão é zero e na qual a matéria permanecerá estática até alguma força externa agir sobre ela. Matéria simétrica e uniforme é uma idealização, mas essa idealização possui propriedades bem de

Modelo	QMC	NL3	GM1	TW
M	939.0	939.0	939.0	939.0
m_q	5.5			
m_σ	550	508.19	550	550
m_ω	783	782.501	783	783
m_ρ	770	763	770	763
g_σ	5.9810*	10.217	9.5684	10.728 [†]
g_ω	8.9817	12.868	10.608	13.2901 [†]
g_ρ	8.6510	8.9480	8.1945	7.32196 [†]
$B_N^{1/4}$	210.85			
TNL	não	sim	sim	não
PDD	não	não	não	sim

Tabela 3.1: Parâmetros usados no modelo QMC e nas diferentes parametrizações dos modelos de QHD. * g_σ^q é o acoplamento quark meson no modelo QMC. [†] valores obtidos na densidade de saturação para as parametrizações dependentes da densidade TNL= termos não lineares. PDD= parâmetros dependentes da densidade. Todas as massas são dadas em MeV.

finidas relacionadas aos núcleos finitos.

Um interessante e extenso trabalho nessa questão foi feito em [14], mas o modelo QMC não foi analisado. Assim, comparamos o modelo QMC com duas parametrizações do modelo de QHD não linear [10, 11]: GM1 [12] e NL3 [92] e o modelo dependente da densidade (DDP) TW [93]. Escolhemos comparar nossos resultados com GM1, por essa parametrização dar um bom valor da massa efetiva do nucleon, com NL3 por ser uma parametrização padrão e muito usada na literatura e TW por essa ser uma parametrização confiável segundo [14]. Com relação ao estudo realizado em [14] e já mencionado no capítulo 1, os autores verificaram que GM1 falha sob os vínculos SM1, SM3a, SM3b, SM4, MIX2b e MIX4, a parametrização NL3 falhou sob SM1, SM3a, SM3b, SM4, MIX1a, MIX1b, MIX2a, MIX2b e MIX4 e o modelo dependente da densidade TW não satisfaz apenas MIX3.

Na tabela 3.2 mostramos as propriedades da matéria nuclear na densidade de saturação nuclear e a temperatura zero. A primeira coluna mostra a energia de ligação por nucleon, a segunda mostra a densidade bariônica dos nucleons no ponto de saturação e a terceira a massa efetiva relativa a massa nua do nucleon. Na quarta coluna temos a energia de simetria, a qual calculamos através da seguinte equação

$$\varepsilon_{sym} = \left(\frac{g_\rho}{m_\rho}\right)^2 \frac{k_F^3}{12\pi^2} + \frac{k_F^2}{6(k_F^2 + M^*)^{1/2}}. \quad (3.10)$$

Na quinta coluna temos o *slope* da energia de simetria, o qual calculamos através da equação abaixo

$$L_0 = 3n_0 \frac{\partial \varepsilon_{sym}}{\partial n_B}, \quad (3.11)$$

onde n_0 representa a densidade bariônica no ponto de saturação. A última coluna mostra o módulo de compressão nuclear. Analisando essas propriedades com relação aos vínculos de [14], vemos que com relação a energia de simetria, o modelo QMC é aprovado nos vínculos MIX1a, e MIX1b, com relação a L_0 o modelo é aprovado em MIX2a, e possui um valor um pouco maior que o ideal no vínculo mais restritivo MIX2b ($30 \leq L_0 \leq 80$), e com relação a compressibilidade o modelo não satisfaz o vínculo SM1 com apenas 9% de erro, pouco a mais dos 5% de tolerância usados por [14]. Essas propriedades, somadas ao ótimo valor obtido para a massa efetiva, fazem do modelo QMC um modelo efetivo confiável para trabalhar com a matéria nuclear.

Na figura 3.1 plotamos a relação entre a massa efetiva e densidade bariônica para o QMC e os diferentes modelos de QHD. Podemos ver que a massa efetiva para o QMC tem sempre um valor maior que os outros modelos, o que é uma

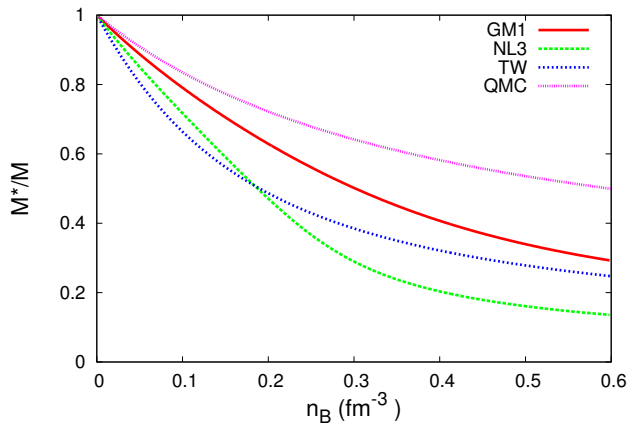


Figura 3.1: Massa efetiva do modelo QMC, e os três modelos de QHD.

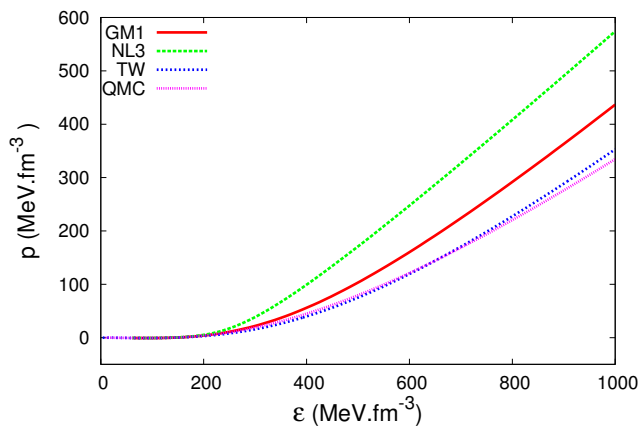


Figura 3.2: Equação de estado do modelo QMC, e os três modelos de QHD..

Modelo	B/A (MeV)	n_0 (fm ⁻³)	M^*/M	\mathcal{E}_{sym} (MeV)	L_0 (MeV)	K (MeV)
QMC	16.4	0.150	0.77	32.6	90	295
NL3	16.2	0.148	0.60	37.4	118.5	272
GM1	16.3	0.153	0.70	32.5	94	300
TW	16.2	0.153	0.56	32.6	55.3	240

Tabela 3.2: Propriedades da matéria nuclear obtidas com o modelo QMC e três modelos de QHD. Todas as quantidades obtidas na saturação e com temperatura igual a zero.

importante característica se incluirmos híperons no futuro. Como pode ser visto em [94] a massa efetiva de alguns modelos de QHD tendem a zero, mesmo em baixas densidades, quando todos os bárions do octeto são incluídos. Por essa razão, parametrizações com valores para a massa efetiva maiores foram propostas por Glendenning [12] (GM1, GL, etc) com o objetivo específico de aplicações para matéria estelar. O modelo QMC possui $M^*/M = 0.77$ na densidade de saturação, o que está em bom acordo com os resultados de análises de espalhamento de nêutrons em núcleos de chumbo [95].

Na Fig. 3.2 mostramos a pressão *versus* densidade de energia para matéria nuclear infinita e temperatura zero, onde vemos que a curva obtida pelo QMC é similar a obtida pelo TW e mais suave que as outras duas aqui analisadas.

3.1.2 Propriedades das estrelas de nêutrons

Além das propriedades da matéria nuclear na saturação e temperatura zero, também é interessante testar o QMC no estudo de propriedades das estrelas de nêutrons. Na matéria estelar temos que implementar as condições de neutralidade de carga e equilíbrio químico. Nesta condição, os níveis de energia das partículas

são preenchidos de tal maneira que haja equilíbrio beta

$$n \rightarrow e^- + p + \bar{\nu}_{e^-}. \quad (3.12)$$

Para que isto ocorra, deve se ter igualdade de potenciais químicos em ambos os lados da equação

$$\mu_n = \mu_p + \mu_{e^-} + \mu_{\nu_{e^-}} \quad (3.13)$$

ou

$$\mu_n = \mu_p + \mu_{e^-}, \quad (3.14)$$

onde tomamos $\mu_{\nu_{e^-}}$ como nulo, pois consideramos as estrelas de nêutrons na fase onde os neutrinos não estão mais presentes.

Também ocorre na matéria estelar a reação:

$$e^- \rightleftharpoons \mu^- + \nu_{e^-} + \bar{\nu}_{\mu^-} \quad (3.15)$$

a qual leva a relação de equilíbrio entre os potenciais químicos abaixo

$$\mu_{e^-} = \mu_{\mu^-}. \quad (3.16)$$

A neutralidade de carga de um sistema estável exige

$$n_p = n_{e^-} + n_{\mu^-}. \quad (3.17)$$

Os léptons serão aqui tratados como um gás de férmions livres não interagen

tes. Assim, a lagrangiana do QMC na matéria estelar será acrescida do termo

$$\mathcal{L}_{leptons} = \sum_l \bar{\psi}_l (i\gamma_\mu - m_l) \psi_l, \quad (3.18)$$

onde $l = e^-, \mu^-$. Esse termo considera a presença dos léptons elétron e múon, possibilitando descrever um sistema em equilíbrio beta. Com isso, temos que as expressões para densidade de energia e pressão da matéria em equilíbrio químico e de carga no interior da estrela de nêutrons são dadas por

$$\begin{aligned} \varepsilon = \sum_B \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_B} k^2 dk [k^2 - M_B^{*2}]^{1/2} + \sum_l \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_l} k^2 dk [k^2 - m_l^2]^{1/2} \\ + \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_0^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_{03}^2, \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} p = \sum_B \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{k_B} k^4 dk / [k^2 - M_B^{*2}]^{1/2} + \sum_l \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{k_l} k^4 dk / [k^2 - m_l^2]^{1/2} \\ - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_0^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_{03}^2, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde $B = p, n$ e $l = e^-, \mu^-$. Dessa forma, plotamos na Fig. 3.3 a equação de estado para matéria estelar. Vemos que a curva para o QMC é mais suave que a curva dos outros modelos. Curvas suaves na EOS, em geral, representam uma falha no modelo em que estamos trabalhando, visto que essas curvas suaves levam a menores massas máximas das estrelas de nêutrons. Apesar de vermos na Tabela 3.3 que conseguimos obter com o modelo QMC uma massa máxima maior que duas massas solares, em bom acordo com os resultados de [96, 97], sabemos que se incluirmos híperons no modelo, o que é nossa intenção, essa massa máxima será menor. Entretanto, existem maneiras de controlar esses problemas. Um

método usual de deixar a EOS mais dura, sem alterar suas propriedades abaixo da densidade de saturação, é utilizar mésons estranhos na densidade lagrangiana e escolher os acoplamentos dos híperons com os mésons tal que os híperons só apareçam em altas densidades [98, 99, 100]. Recentemente outra alternativa foi proposta por [101], onde os autores forçam o potencial de auto interação do méson σ crescer abruptamente em densidades um pouco maiores que a densidade de saturação nuclear, o que resulta em uma EOS mais dura e, conseqüentemente, numa maior massa máxima possível.

É importante notar que esse trabalho preliminar tem a intenção de ser usado em simulações de supernovas. De acordo com [8], o conceito de EOS *mole* ou *dura*, normalmente usado em estudos de estrelas de nêutrons, talvez não se aplique aqui. Os autores ressaltaram que, visto que explosões de supernovas exploram uma grande faixa de valores de densidades e temperaturas, uma EOS que possui um alto valor para a pressão em determinada densidade e temperatura, pode ter uma menor pressão em outra densidade e temperatura.

As estrelas de nêutrons são sustentadas contra a pressão gravitacional através da pressão de degenerescência nuclear. Para descrever a estrutura de massa e raio destas estrelas utilizamos as equações de Tolman Oppenheimer Volkof (TOV) [102, 103]. Estas equações são deduzidas da relatividade geral, a partir de uma métrica para um objeto esfericamente simétrico. As equações TOV possuem a seguinte forma:

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{[p(r) + \varepsilon][M(r) + 4\pi r^3 p(r)]}{r(r - 2M(r))}, \quad (3.21)$$

$$M(r) = 4\pi \int_0^r \varepsilon(r)r^2 dr, \quad (3.22)$$

onde p corresponde à pressão, ε à densidade de energia, r à distância entre o

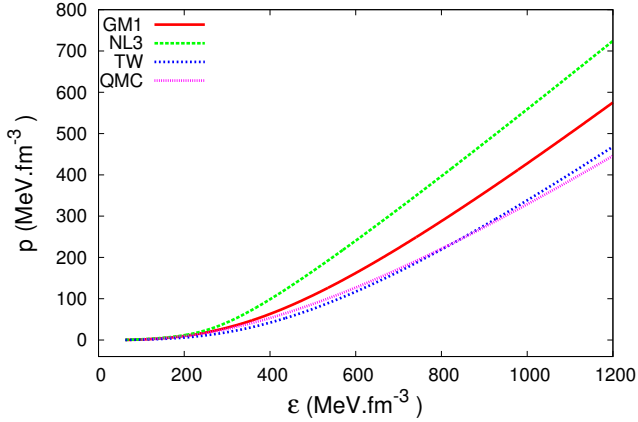


Figura 3.3: Equação de estado em equilíbrio beta para o modelo QMC, e os três modelos de QHD.

centro da estrela e uma camada em seu interior e $M(r)$ à massa contida na região interior desse raio. Resolvemos essas equações numericamente usando como *input* a equação de estado em equilíbrio beta dada pelas equações 3.19 e 3.20. O resultado desse cálculo é plotado na figura 4.7 onde vemos a relação massa x raio de uma família de estrelas de nêutrons para o modelo QMC e para os três modelos de QHD usados aqui como comparação. Nesta figura e na tabela 3.3, podemos observar que a massa máxima para uma estrela de nêutrons obtida com o modelo QMC é maior que duas massas solares, em bom acordo com os recentes resultados observacionais vistos em [96, 97].

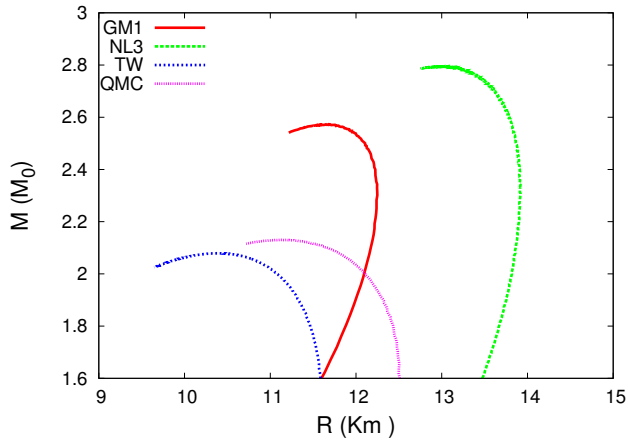


Figura 3.4: Relação massa raio para o modelo QMC, e os três modelos de QHD.

Modelo	$M_{max} (M_0)$	$R (Km)$	$\varepsilon_0 (fm^{-4})$
QMC	2.14	11.51	6.33
GM1	2.57	11.67	5.12
NL3	2.79	12.99	4.39
TW	2.07	10.61	6.27

Tabela 3.3: A primeira coluna de dados mostra a massa máxima de cada modelo. A segunda os raios respectivos. A terceira, a densidade de energia central para cada conjunto de massa máxima e raio.

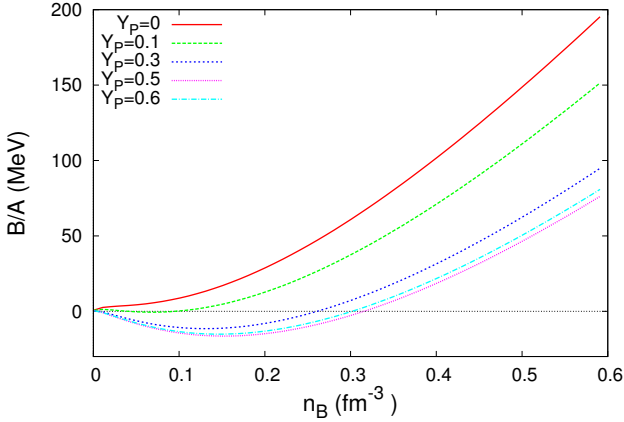


Figura 3.5: Energia de ligação dos nucleons como função da densidade bariônica com as frações de prótons $Y_p = 0, 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .

3.2 Resultados

Neste capítulo mostramos os resultados obtidos até o momento para a construção da tabela de equação de estado. Na primeira seção estão os gráficos e a tabela obtida utilizando o modelo QMC a temperatura zero.

3.2.1 Tabela de EOS a temperatura zero

Neste trabalho foi construída uma tabela contendo uma equação de estado, a qual cobre uma grande faixa de fração de prótons Y_p e densidade bariônica n_B . Mostramos nesta seção alguns resultados sobre as propriedades da matéria com o QMC, assim como parte da tabela EOS e indicamos o *website* no qual a tabela completa está disponível.

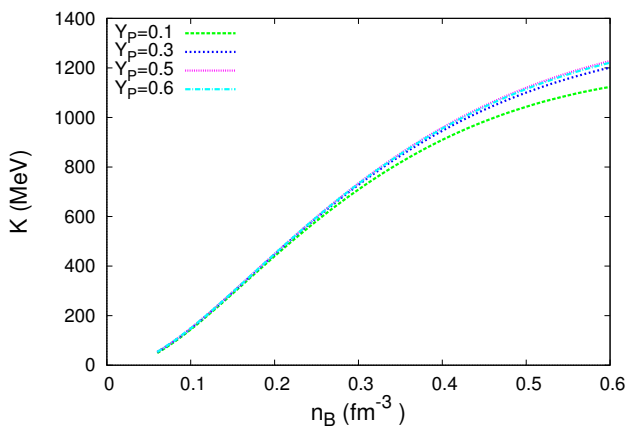


Figura 3.6: Módulo de compressão como função da densidade bariônica com as frações de prótons $Y_p = 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .

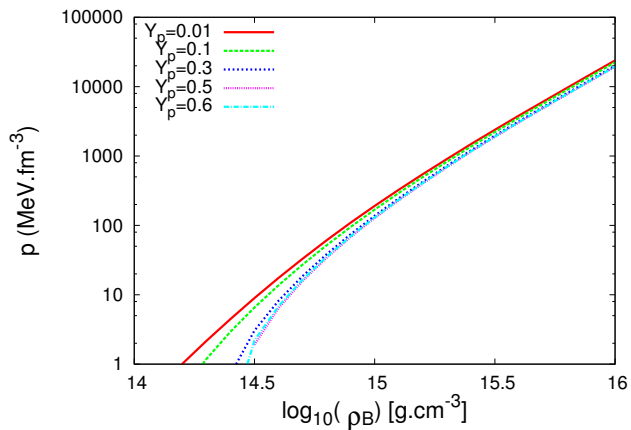


Figura 3.7: Relação entre pressão e ρ_B para $Y_p = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 .

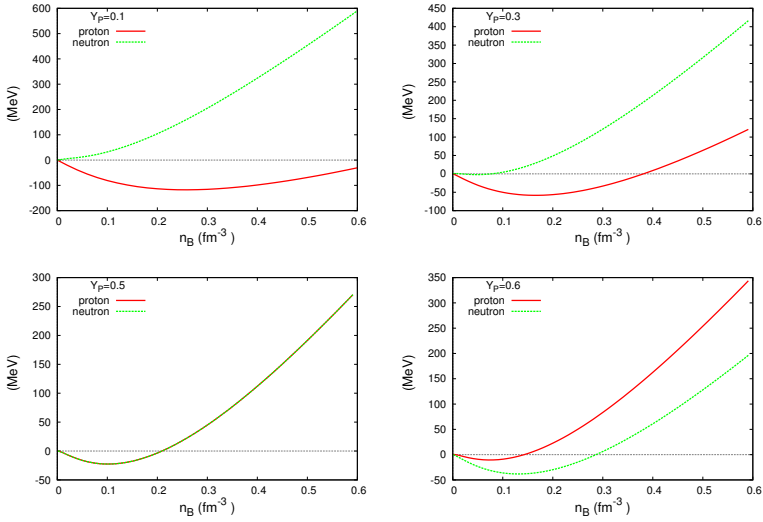


Figura 3.8: Alguns valores fixos de fração de prótons para os potenciais químicos como função da densidade bariônica. A linha contínua representa μ_p e a linha tracejada representa μ_n .

Na figura 3.5 podemos ver a energia de ligação para matéria nuclear a temperatura zero com relação a densidade bariônica para diferentes valores da fração de prótons. Para matéria de nêutrons pura e baixos valores da fração de prótons, não há estados ligados, como esperado. Esse resultado está em bom acordo com Walecka [10] e Shen [5]. Na figura 3.6 temos o módulo de compressão em função

da densidade bariônica, onde a expressão para K é

$$K = 9 n_B^2 \frac{d^2}{dn_B^2} \left(\frac{\varepsilon}{n_B} \right), \quad (3.23)$$

n_B é o número densidade bariônica, *i. e.*, a quantidade de bárions por volume. A densidade de energia total dos nucleons é representada por ε . Nesta figura vemos que nas proximidades da densidade de saturação nuclear, o módulo de compressão é independente da fração de prótons e, com o aumento da densidade, o módulo de compressão cresce de forma diferente para cada Y_p , mostrando valores maiores para matéria simétrica.

Na figura 3.7 plotamos a pressão p como função da densidade de matéria bariônica ρ_B . Note que a pressão varia mais com a fração de prótons para menores valores de ρ_B , resultado que está em bom acordo com o trabalho de Shen [5].

Na figura 3.8 mostramos os potenciais químicos do próton e do nêutron, μ_p e μ_n , como função da densidade bariônica para as frações de prótons $Y_p = 0.1, 0.3, 0.5$ e 0.6 . Nesses gráficos vemos que para $Y_p = 0.1$ o potencial químico dos nêutrons é maior que dos prótons. Com o aumento da fração de prótons, as curvas se aproximam, até se sobreporem em $Y_p = 0.5$, e para $Y_p = 0.6$ o potencial químico do próton é maior do que o potencial químico do nêutron. Este é um resultado esperado e conhecido, mas como os potenciais químicos são quantidades muito importantes na tabela de equação de estado, eles também são apresentados graficamente.

Visto que as propriedades da matéria nuclear mostraram resultados esperados e apresentam importantes diferenças quando comparadas com outros modelos, continuamos para a construção da tabela de equação de estado preliminar com o

modelo QMC, com matéria homogênea e temperatura zero, a qual está disponível no *website* abaixo

http://debora.fsc.ufsc.br/eos_qmc.t0.

Na tabela 3.4 mostramos as quantidades termodinâmicas descritas conforme [6].

1. Temperatura: T [MeV].
2. Logaritmo da densidade de massa bariônica: $\log_{10}(\rho_B)$ [g.cm⁻³].
3. Densidade de bárions: n_B [fm⁻³].
4. Fração de prótons: Y_p .

A fração de prótons Y_p de matéria uniforme de prótons e nêutrons, é definida por

$$Y_p = \frac{n_p}{n_n + n_p}$$

onde n_p e n_n são os densidade de prótons e nêutrons, respectivamente.

5. Energia livre por bárion: F [MeV].

A energia livre por bárion é calculada através da equação abaixo,

$$f = \varepsilon - Ts.$$

Esta tabela foi construída apenas a temperatura zero, portanto $f = \varepsilon$. E a

energia livre por bárion é definida relativa a massa do nucleon como:

$$F = \frac{\varepsilon}{n_B} - M = B/A.$$

6. Energia interna por bárion: E_{int} [MeV].

A energia interna por bárion é definida relativa a massa atômica unitária $m_u = 931.49432$ MeV como

$$E_{int} = \frac{\varepsilon}{n_B} - m_u.$$

7. Entropia por bárion: $S[k_B]$.

O caso em que trabalhamos aqui é para temperatura zero, assim $S = 0$.

8. A massa efetiva do nucleon: M_B^* [MeV].

A massa efetiva do nucleon é obtida no modelo QMC para matéria uniforme através da relação $M_B^* = E_B^{bag}$, onde $B = p, n$, e a energia da sacola é obtida através da Eq. (3.5).

9. Fração de nêutrons livre: X_n .

Nesta fase preliminar temos somente matéria homogênea, com isso X_n é simplesmente $Y_n = n_n/n_B$.

10. Fração de prótons livre: X_p .

Nesta fase preliminar temos somente matéria homogênea, com isso

$$X_p = Y_p = n_p/n_B.$$

11. Pressão: p [MeV.fm⁻³].

A pressão é calculada através da Eq. 4.2.

$\log_{10}(\rho_B)$ ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)	n_B (fm^{-3})	Y_p	F (MeV)	E_{int} (MeV)	M^*_N (MeV)	X_n	X_p	ρ (MeV/fm ³)	μ_n (MeV)	μ_p (MeV)
14.0	0.0602	0	4.890	12.40	838.9	1	0	0.2371	23.43	68.43
14.1	0.0758	0	6.090	13.60	816.9	1	0	0.5103	31.20	82.21
14.2	0.0954	0	8.133	15.64	791.2	1	0	1.0890	42.68	97.63
14.3	0.1201	0	11.56	19.07	761.5	1	0	2.2780	59.66	114.3
14.4	0.1512	0	17.19	24.70	728.8	1	0	4.6550	84.64	131.4

Tabela 3.4: Tabela EOS com $T = 0$. Esta tabela cobre os valores de fração de prótons $Y_p = 0 - 0.65$ com espaçamento linear $\Delta Y_p = 0.01$ (66 pontos), e de densidades $\rho_B = 10^{14} - 10^{16} \text{ g cm}^{-3}$ com espaçamento logarítmico $\Delta \log_{10}(\rho_B / [\text{g cm}^{-3}]) = 0.1$ (21 pontos). Estas são apenas as primeiras linhas da tabela, sua versão completa está disponível no *website* http://debora.fsc.ufsc.br/eos_qmc.t0.

12. Potencial químico do nêutron: μ_n [MeV].

Para o caso de temperatura zero, o potencial químico do nêutron relativo a massa nua do nucleon M é calculada através da seguinte equação

$$\mu_n = [k_n^2 + M^{*2}]^{1/2} + g_\omega \omega_0 - \frac{g_\rho}{2} \rho_{03} - M.$$

13. Potencial químico do próton: μ_p [MeV].

Para o caso de temperatura zero, o potencial químico do próton relativo a massa nua do nucleon M é calculada através da seguinte equação

$$\mu_p = [k_p^2 + M^{*2}]^{1/2} + g_\omega \omega_0 + \frac{g_\rho}{2} \rho_{03} - M.$$

3.3 Considerações finais

Neste capítulo apresentamos uma revisão teórica sobre supernovas, sobre o formalismo do QMC e nossos resultados preliminares. No capítulo 2 mostramos uma revisão sobre supernovas e uma discussão sobre o efeito da EOS nas simulações de explosão de supernova. Neste capítulo discutimos a importância do estudo de supernovas e vimos quão importante é uma tabela de EOS realista para o sucesso de uma simulação de supernova. Posteriormente apresentamos uma revisão do modelo *quark meson coupling*, assim como uma comparação do modelo QMC com alguns modelos de QHD com relação às propriedades *bulk* da física nuclear e das estrelas de nêutrons. No capítulo de resultados mostramos o trabalho já feito até o momento. Nele o modelo QMC foi usado pela primeira vez para a construção de uma equação de estado preliminar que no futuro poderá ser usada para estudos envolvendo esfriamento (ou *cooling*) de estrelas de nêutrons e simulações de supernovas. Acreditamos que com os graus de liberdade dos quarks presentes no modelo QMC, essa EOS pode contribuir com parte da física que está faltando para as simulações de supernova explodirem.

O próximo passo do trabalho, já em andamento, é a construção da tabela de equação de estado com a inclusão dos híperons Λ . Paralelamente a isto, também está em andamento a construção da EOS com temperatura finita, a qual é essencial para simulações de supernovas.

Após isso, estudaremos a região de densidades muito baixas, onde a matéria nuclear não é mais uniforme. Isso será feito com a *fase pasta*. Acreditamos que o uso da fase pasta para a descrição da parte não uniforme da matéria que compõe a tabela de EOS nas simulações de supernovas certamente terá efeitos nas

simulações de supernovas e nos estudos de esfriamentos de estrelas de nêutrons.

Por fim, pretendemos incluir nossa EOS completa na base de dados CompOSE (*CompStar Online Supernovae Equations of State*) <http://compose.obspm.fr>. Com a base de dados CompOSE, astrofísicos terão acesso a uma grande diversidade de EOSs, prontas para uso e todas no mesmo formato.

Capítulo 4

Fase pasta no modelo QMC e

QMC $\omega\rho$

Neste capítulo continuamos o estudo da matéria nuclear aplicada à astrofísica no contexto do modelo QMC. Além disso, acrescentamos no modelo uma interação entre os mésons $\omega\rho$, e verificamos que essa modificação diminui o valor do seu *slope*. Diferentemente do capítulo anterior, aqui abordamos regiões de baixas densidade, mais precisamente na região de interface da matéria homogênea com matéria formada por núcleos. Acredita-se que nessas regiões os núcleos podem se deformar de diferentes maneiras até serem completamente dissolvidos em matéria nuclear homogênea. Assim, analisamos essas estruturas internas chamadas de fase pasta, no modelo QMC, assim como seu efeito no estudo de estrelas de nêutrons.

4.1 Introdução

Nas regiões de baixas densidades da matéria nuclear, acontece uma competição entre as interações forte e eletromagnética [104, 105], levando a matéria nuclear a uma configuração na qual sua energia livre pode ser menor do que a correspondente da matéria homogênea na mesma densidade. Essas configurações podem conter formas exóticas como hastes, barras, cilindros e bolhas, (também chamadas de spaghetti, lasanha, pene, queijo suíço,) e receberam o nome de *fase pasta* [31]. Essas estruturas são as formas mais favoráveis para existir nessas densidades [31, 106, 107, 29], e espera-se que elas existam tanto na crosta de estrelas de nêutrons (temperatura zero, baixa fração de prótons, matéria em equilíbrio β) como em supernovas (temperatura finita, fração de prótons cerca de 0.3) [108, 109]

Os autores de [110] analisaram *glitches* provenientes do pulsar Vela e relacionaram a fração do momento de inércia contido na crosta desse pulsar com a massa e o raio da estrela de nêutrons e a pressão e densidade da interface crosta núcleo. A partir de EoS realistas esse estudo previu uma faixa de valores esperada para a pressão na borda interna da crosta e, portanto, também uma relação entre o raio e a massa do pulsar. Esse trabalho mostra a importância de se entender os exatos limites de densidade da fase pasta e as consequências na escolha apropriada das equações de estado. Mais recentemente, foi mostrado que a existência da fase pasta na crosta das estrelas de nêutrons altera consideravelmente o livre caminho médio dos neutrinos a seus coeficientes de difusão comparado com resultados da matéria homogênea. As consequentes diferenças em opacidades de neutrinos certamente influenciam a fase Kelvin Helmholtz da evolução estelar. [111, 112].

Ao mesmo tempo, devido às dificuldades observacionais, simulações do colapso

do núcleo de supernovas têm tido um papel muito importante no estudo de explosões de supernovas e da evolução de seus possíveis remanescentes, e assim, a obtenção de EoS apropriadas para simulações de supernovas tem sido um grande desafio para a comunidade envolvida com astrofísica nuclear. Como já comentado anteriormente nesta tese, até agora nos modelos usados para a construção de uma EoS completa com o propósito de ser testada em simulações de supernovas, a matéria não homogênea que se acredita existir a baixas densidades, foi considerada apenas com a inclusão de *clusters* [5, 6, 7, 8, 9]. Entretanto, de acordo com os trabalhos de [113, 114] a fase pasta pode formar 10 – 20% da massa do núcleo da supernova, portanto seu papel não deveria ser negligenciado. As fases pasta têm sido estudadas no contexto de muitos modelos [104, 114, 115, 116, 117] e todos esses preveem sua existência sob as condições esperadas na crosta interna de objetos compactos, apesar de seus perfis serem diferentes em muitos aspectos [115, 109].

O modelo de acoplamento entre mésons e quarks (QMC) [22, 87, 88] descrito no capítulo anterior contém graus de liberdade mais fundamentais do que os modelos de hadrodinâmica quântica usuais, que até o momento têm sido usados para o estudo da fase pasta [104, 115, 111, 118].

Nesse capítulo investigamos a possível existência de estruturas típicas de fase pasta com o modelo QMC a temperatura zero e sua dependência com o coeficiente da energia superficial. Também estudamos as propriedades das estrelas de nêutrons utilizando quatro diferentes EoS, a partir do modelo QMC para descrição da matéria homogênea, sendo que duas incluem também a fase pasta para a crosta interna.

4.2 Modelo QMC $\omega\rho$

No capítulo anterior o modelo QMC foi apresentado, onde comparamos as propriedades da matéria nuclear de estrelas de nêutrons com outros modelos da hadrodinâmica quântica conhecidos. Não repetiremos as equações do modelo QMC aqui. Entretanto seguimos a discussão do modelo com a inclusão de uma nova interação entre os mésons ω e ρ .

As propriedades do modelo QMC na saturação, dadas na primeira linha da tabela 4.1 e discutidas no capítulo anterior, estão dentro dos valores aceitos [14, 119], exceto L_0 que mostra um valor considerado grande. Entretanto J e L_0 podem ser facilmente controlados através da inclusão de uma interação $\omega\rho$ como discutido em [120, 121, 122]. Quanto maior o valor dessa interação, menor será o valor da energia de simetria e seu *slope*. A seguir, incluímos uma interação $\omega\rho$ que resulta em uma energia de simetria igual de 22 MeV à 0.1 fm^{-3} com uma consequente mudança na constante de acoplamento g_ρ . Os novos valores da energia de simetria e seu *slope* na saturação também são dados na tabela 4.1. Nesse trabalho, estudamos o quanto a escolha da parametrização afeta as estruturas da fase pasta e influencia a matéria estelar. Outras parametrizações também são possíveis, como o modelo QMC modificado, onde os parâmetros são ajustados de forma que os quarks que constituem o hádron são confinados a um potencial independente de sabor, onde correções piônicas e gluônicas são consideradas [123, 124]. Esses estudos serão realizados em futuras investigações. Abaixo temos a densidade de energia total da matéria nuclear na parametrização que escolhemos:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_0^2 + \frac{1}{2}m_\rho^2\rho_{03}^2 + 3\Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \omega_0^2 \rho_{03}^2 + \sum_N \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_N} k^2 dk [k^2 + M_N^{*2}]^{1/2}, \quad (4.1)$$

e a pressão,

$$p = -\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_0^2 + \frac{1}{2}m_\rho^2\rho_{03}^2 + \Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \omega_0^2 \rho_{03}^2 + \sum_N \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_N} k^4 dk / [k^2 + M_N^{*2}]^{1/2}. \quad (4.2)$$

Os campos vetoriais médios ω_0 e ρ_{03} são determinados através de

$$\omega_0 = \frac{g_\omega(n_p + n_n)}{m_\omega^{*2}}, \quad \rho_{03} = \frac{g_\rho(n_p - n_n)}{2m_\rho^{*2}}, \quad (4.3)$$

onde

$$n_B = n_p + n_n = \sum_N \frac{2k_N^3}{3\pi^2}, \quad N = p, n. \quad (4.4)$$

é a densidade bariônica, e m_ω^* , m_ρ^* são as massas efetivas dos campos mesônicos dadas por $m_\omega^{*2} = m_\omega^2 + 2\Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \rho_{03}^2$ e $m_\rho^{*2} = m_\rho^2 + 2\Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \omega_0^2$.

Finalmente, da mesma forma que no capítulo anterior, o campo médio σ é fixado impondo que

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} = 0. \quad (4.5)$$

Como mencionado na introdução desse capítulo, estamos interessados em matéria com fração de prótons fixa dada por $Y_p = n_p/n_B$ assim como em matéria estelar em condições de equilíbrio β , as quais para o sistema feito por prótons,

Model	B/A (MeV)	n_0 (fm ⁻³)	Λ_v	g_ρ (MeV)	M^*/M (MeV)	J (MeV)	L_0	K
QMC	16.4	0.15	0.0	8.6510	0.77	34.5	90	295
QMC $\omega\rho$	16.4	0.15	0.03	9.0078	0.77	30.92	69.17	295

Tabela 4.1: Propriedades da matéria nuclear obtida com o modelo QMC. Todas as quantidades tomadas na saturação.

nêutrons e elétrons são:

$$\mu_p = \mu_n - \mu_e. \quad (4.6)$$

Esse sistema também requer neutralidade de carga, a qual é dada por:

$$n_p = n_e. \quad (4.7)$$

Nesse trabalho estudamos a região de baixas densidades das estrelas de nêutrons, na qual os múons não estão presentes.

4.3 Aproximação da coexistência de fases

Nessa aproximação a matéria é organizada em regiões de baixas densidades, geralmente com um gás neutro de fundo, e regiões de altas densidades. Para uma dada densidade total n_B e fração de prótons fixa Y_p , as estruturas pasta são construídas a partir de formas geométricas diferentes. As formas geralmente são chamadas de: esferas (bolhas), cilindros (tubos), e placas, em três, duas e uma dimensão, respectivamente. Isso é obtido calculando a densidade e fração de prótons da fase pasta e do gás de fundo a partir das condições de Gibbs, o que impõe que ambas as fases possuem a mesma pressão e mesmos potenciais químicos

cos dos prótons e nêutrons. Com isso, as equações seguintes devem ser resolvidas simultaneamente:

$$P^I = P^{II}, \quad (4.8)$$

$$\mu_p^I = \mu_p^{II}, \quad (4.9)$$

$$\mu_n^I = \mu_n^{II}, \quad (4.10)$$

$$n_p = n_B Y_p = f n_p^I + (1 - f) n_p^{II}, \quad (4.11)$$

onde I (II) indica a fase de alta (baixa) densidade, n_p é a densidade global dos prótons, f é a fração de volume da fase I ,

$$f = \frac{n_B - n_B^I}{n_B^I - n_B^{II}}. \quad (4.12)$$

Se consideramos matéria estelar, as equações acima são levemente modificadas, tal que:

$$\mu_n^I = \mu_n^{II}, \quad (4.13)$$

$$\mu_e^I = \mu_e^{II} \quad (4.14)$$

e

$$f(n_p^I - n_e^I) + (1 - f)(n_p^{II} - n_e^{II}) = 0. \quad (4.15)$$

juntamente com Eq. (4.8). Aqui a densidade dos elétrons não é mais uniforme como no caso de frações de prótons fixa, mas aparece como solução das equações acima. Depois que o estado de mínima energia é atingido, a energia para matéria

hadrônica é obtida através da seguinte equação:

$$\varepsilon_{matter} = f\varepsilon^I + (1 - f)\varepsilon^{II} + \varepsilon_e, \quad (4.16)$$

à qual os termos de superfície e Coulomb são adicionados de modo a considerarmos a densidade de energia total do sistema, que se torna:

$$\varepsilon = \varepsilon_{matter} + \varepsilon_{surf} + \varepsilon_{Coul}. \quad (4.17)$$

Minimizando a soma $\varepsilon_{surf} + \varepsilon_{Coul}$ com respeito ao tamanho da gota/bolha, cilindros/tubos ou barras obtemos [29] $\varepsilon_{surf} = 2\varepsilon_{Coul}$ onde

$$\varepsilon_{Coul} = \frac{2\alpha}{A^{2/3}} (e^2 \pi \Phi)^{1/3} [\mathcal{S}D(n_p^I - n_p^{II})]^{2/3}, \quad (4.18)$$

com $\alpha = f$ para gotas, tubos e barras, e $\alpha = 1 - f$ para tubos e bolhas. \mathcal{S} é a tensão superficial, que será discutida na próxima subseção, e Φ é dado por

$$\Phi = \begin{cases} \left(\frac{2-D\alpha^{1-2/D}}{D-2} + \alpha \right) \frac{1}{D+2}, & D = 1, 3 \\ \frac{\alpha-1-\ln\alpha}{D+2}, & D = 2 \end{cases} \quad (4.19)$$

Visto que estamos trabalhando apenas em regiões de baixas densidades, seguimos a parametrização proposta em [125] para a massa efetiva do nucleon, como uma função não linear da massa do méson σ :

$$M_N^* = M_N - g_{\sigma N}(\sigma)\sigma \quad (4.20)$$

com

$$g_{\sigma N}(\sigma) = \left(1 + \frac{b}{2}\sigma + \frac{c}{3}\sigma^2\right)g_{\sigma N} \quad (4.21)$$

onde $g_{\sigma N} = 3g_{\sigma}^q S_N(0) = 8.6157$, $b = -0.000714196 \text{ MeV}^{-1}$ e $c = 9.84481 \times 10^{-8} \text{ MeV}^{-2}$. Para obter esses parâmetros, nós plotamos a massa efetiva exata na densidade de subsaturação e fitamos a curva com uma expressão polinomial. Nosso melhor *fitting* nos dá os termos mencionados na Eq.(4.21) e pode se ver que o valor c é pequeno, o que significa que um termo cúbico em σ é apenas uma correção que optamos por manter em nossos cálculos. Note que esses valores são válidos somente para esta parametrização específica.

Antes de entrarmos na discussão do coeficiente de tensão superficial, é importante lembrar que o método da coexistência de fases (CP) não considera a interação de Coulomb e os efeitos de núcleo finito de uma maneira auto consistente. Uma prescrição alternativa nos limites do modelo da gota líquida compressível (CLD do inglês, *Compressible Liquid Drop*) incorpora esses importantes efeitos minimizando a energia livre total, onde os termos de Coulomb e superfície são explicitamente incluídos de maneira auto consistente [126]. A pressão e o potencial químico dos prótons resultantes são levemente diferentes dos obtidos acima. As diferenças entre essas duas prescrições (CP e CLD) pode ser facilmente vista em [127] e as resultantes propriedades da pasta diferem a baixas densidades [126, 127], geralmente abaixo de 10^{-3} fm^{-3} onde a ligação com a EoS da crosta externa é realizada. Como será mostrado na sequência, nossos cálculos dependem também de um parâmetro livre, o qual será fitado de acordo com valores aceitos para a tensão superficial.

4.3.1 Coeficiente de tensão superficial

Quando as condições de Gibbs são usadas na aproximação de coexistência de fases, o coeficiente de tensão superficial é sempre um ponto complicado e sutil, visto que a existência da fase pasta depende do seu valor. Diferentes considerações já foram feitas sobre esse coeficiente [29, 104, 115, 128, 129, 118] e a escolha mais comum é a de fixar a energia de superfície de acordo com os resultados de Thomas Fermi. Uma vez que não há cálculos de Thomas Fermi para o modelo QMC para nos guiar, nós optamos por usar um método com mais ingredientes físicos do que simplesmente escolher um valor específico para \mathcal{S} , como é feito em muitos trabalhos, tanto para matéria de quarks quanto de hádrons. Alguns cálculos baseados em fórmulas de massa nuclear produzem resultados na faixa de 1.06 até 1.34 MeV fm⁻² [4] e esses valores tem sido usados aleatoriamente. No trabalho aqui apresentado, para encontrar um valor numérico para o coeficiente de tensão superficial, a abordagem geométrica apresentada em [130] é usada. Em [131], esse método foi usado para computar a tensão superficial na matéria de quarks, mas recentemente esse método também foi usado para obter o coeficiente de tensão superficial para matéria hadrônica [118]. As ideias principais desse método são discutidas em seguida.

O coeficiente de tensão superficial, \mathcal{S} , o qual mede a energia por unidade de área necessária para criar uma interface planar entre as duas fases é dada por

$$\mathcal{S} = \frac{a}{n_g} \sqrt{2\varepsilon_g} \int_{n_1}^{n_2} \sqrt{\Delta\varepsilon} dn, \quad (4.22)$$

onde $n_g = \frac{n_1+n_2}{2}$, $\varepsilon_g = \frac{\varepsilon(n_1)+\varepsilon(n_2)}{2}$, n_1 e n_2 são os dois pontos de densidades

bariônicas coexistentes e $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{hm} - \varepsilon_{nhm}$ é a diferença entre a densidade de energia da matéria homogênea e não homogênea. As densidades de energia para ambas as fases são obtidas a partir das Eqs.(4.1) e (4.16) e então são fitadas para um funcional dado por $\varepsilon_i = \alpha_i n^2 + \beta_i n + \gamma_i$, $i = hm, nhm$. Gráficos mostrando essa construção para matéria hadrônica podem ser encontrados em [118] e não são reproduzidos aqui. Nessa abordagem geométrica, a largura da região de interface e a magnitude de \mathcal{S} são controladas pelo parâmetro ajustável a presente na Eq.(4.22). Em [131] os autores usaram $a = 1/m_\sigma = 0.33$ fm onde $m_\sigma = 600$ MeV é a massa do méson σ , uma escala natural para matéria de quarks. Como estamos tratando matéria hadrônica nesse trabalho, nossa tentativa inicial foi $a = 1/M_N = 0.21$ fm, onde $M_N = 939$ MeV é a massa do nucleon. Por outro lado, os autores de [118] seguiram essa receita para encontrar a tensão superficial da matéria hadrônica com uma versão estendida do modelo de Nambu Jona Lasino, onde $a = 0.1$ fm foi adotado para reproduzir o valor do coeficiente de tensão superficial para o modelo NL3 [92] em cálculos de Thomas Fermi [128]. Testamos também $a = 0.023$ fm, de modo a reproduzido o valor $\mathcal{S} = 1.123$ MeV fm⁻² para $Y_p = 0.5$ como em [128, 129, 118]. Note que esse valor é o mesmo para todos os valores da interação Λ_ν porque ele foi escolhido para matéria nuclear simétrica, onde a interação $\omega\rho$ não atua. Na Fig. 4.1 comparamos as três escolhas de a na procura por fases pasta, *i.e.*, $a = 0.023$ fm, $a = 0.1$ fm e $a = 1/M_N = 0.21$ fm, para $Y_p = 0.5$. Note que existe uma maior região de fase pasta para $a = 0.023$ fm. Vemos também que para $Y_p = 0.5$ não são encontradas fases pasta para $a = 0.1$ fm e $a = 0.21$ fm. Portanto, escolhemos $a = 0.023$ fm para ser usado em nossos cálculos.

É importante enfatizar que o coeficiente de tensão superficial varia com o

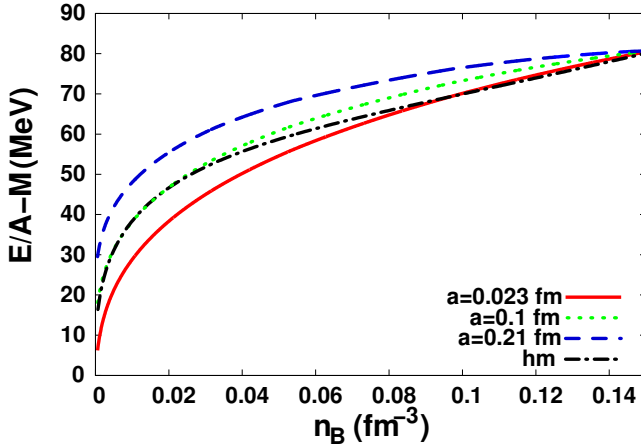


Figura 4.1: Energia por bárion no modelo QMC como função da densidade bariônica para matéria nuclear simétrica e diferentes escolhas de a . O termo hm no gráfico significa matéria homogênea de prótons, nêutrons e elétrons.

isospin para um dado valor de a . Na Tabela 4.2 mostramos os valores de \mathcal{S} usados com $a = 0.023$ fm, para sete diferentes frações de prótons. Para obter as fases pasta para matéria em equilíbrio β , esses valores de \mathcal{S} foram ajustados com funcional exponencial. Para o modelo QMC, uma função da forma $\mathcal{S} = d(1 - e^{-\frac{(x-c)^2}{f}})$, com $d = 1.58647$, $e = 0.0746702$ e $f = 0.265407$ é obtida. Para o QMC $\omega\rho$, utilizamos a mesma função, com $d = 1.41403$, $e = 0.0725015$ e $f = 0.206082$. Em ambos os casos, x é a fração de prótons global Y_p e as funções são mostradas na Fig. 4.2. Note que em alguns trabalhos a fração de prótons usadas nos cálculos da tensão superficial é a da fase densa.

Alguns trabalhos anteriores [29, 120, 104, 115, 128, 129, 118] mostraram que a tensão superficial a temperatura zero, não apenas varia com a fração de prótons, mas apresenta valores entre 1.0 e 1.2 MeV fm⁻² para $Y_p = 0.5$. Se limitarmos

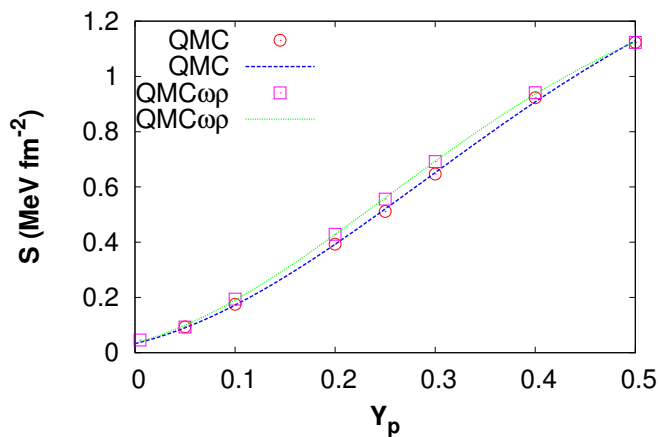


Figura 4.2: Fit da tensão superficial para os modelos QMC e QMC $\omega\rho$.

Y_p	QMC \mathcal{S} (MeV fm $^{-2}$)	QMC $\omega\rho$ \mathcal{S} (MeV fm $^{-2}$)
0.05	0.093	0.093
0.1	0.175	0.194
0.2	0.393	0.429
0.25	0.511	0.556
0.3	0.647	0.692
0.4	0.923	0.941
0.5	1.123	1.123

Tabela 4.2: Tensão superficial para os modelos QMC e QMC $\omega\rho$ e diferentes frações de prótons.

Y_p	\mathcal{S} (MeV fm ⁻²)	a (fm)	ρ_t (fm ⁻³)
0.5	1.00	0.020	0.100
0.5	1.12	0.023	0.097
0.3	0.58	0.020	0.094
0.3	0.65	0.023	0.096
0.1	0.16	0.020	0.065
0.1	0.17	0.023	0.058
β eq	plot	0.020	0.062
β eq	plot	0.023	0.062

Tabela 4.3: Coeficiente de tensão superficial para diferentes frações de prótons para o modelo QMC, com $L=90$ MeV, e os valores de a considerados. ρ_t é a densidade de transição que separa a pasta da fase homogênea.

o parâmetro a de modo a reproduzir esses valores, obtemos $a = 0.020 - 0.025$ fm. O valor $a = 0.020$ fm leva à $\mathcal{S} = 1.0$ MeV fm⁻² e $a = 0.025$ fm resulta em $\mathcal{S} = 1.2$ MeV fm⁻² para $Y_p = 0.5$. Escolhendo $a = 0.025$ fm aumentaria a energia de superfície em 8.7% tendo um efeito muito pequeno na transição núcleo crosta para matéria em equilíbrio beta. Portanto nós procedemos com a comparação dos resultados obtidos com $a = 0.020$ fm e com $a = 0.023$ fm, o qual produz $\mathcal{S} = 1.123$ MeV fm⁻² para $Y_p = 0.5$. Na Tabela 4.3 comparamos o coeficiente de tensão superficial \mathcal{S} e a densidade de transição ρ_t para dois valores de a . Vemos que ρ_t é praticamente independente de a na faixa $[0.020, 0.023]$, não apenas para matéria em equilíbrio β mas também para matéria com fração de prótons fixa. O coeficiente de tensão superficial como função da densidade bariônica é plotado na Fig. 4.3 para matéria em equilíbrio β , onde notamos que \mathcal{S} diminui com a densidade. Vemos que o coeficiente de tensão superficial é levemente maior para $a = 0.023$ fm tanto na Tabela 4.3 como na Fig. 4.3.

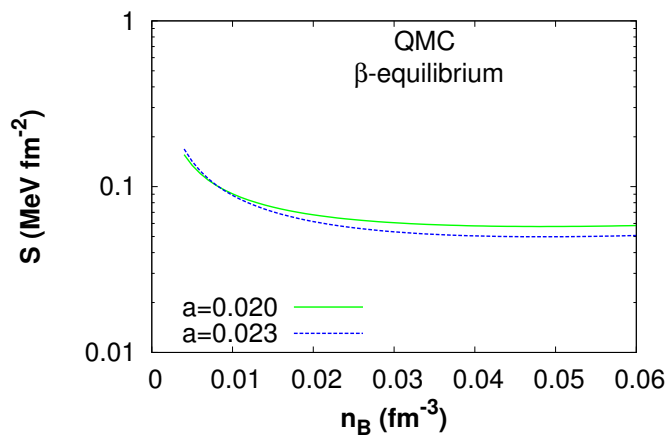


Figura 4.3: Coeficiente de tensão superficial como função da densidade bariônica para matéria em equilíbrio β obtida com o modelo QMC, $L=90$ MeV, e duas escolhas de a .

4.4 Resultados

Apresentamos aqui os resultados obtidos na procura de fases pasta com o modelo QMC a temperatura zero, com a aproximação de coexistência de fases. Relembramos que a pasta somente existe quando sua energia livre por bárion é menor do que a da matéria *npe* (nêutron próton elétron) homogênea.

Na Fig. 4.4 plotamos a energia livre por bárion para $Y_p = 0.5$ e $Y_p = 0.3$. As curvas para matéria em equilíbrio β são mostradas na Fig. 4.5. Os três casos mostram a presença de fases pasta, a qual é maior para maiores valores de fração de prótons, como já visto em outros trabalhos. Na Fig. 4.6 vemos a distribuição de densidades das estruturas pasta. Para $Y_p = 0.5$ três estruturas diferentes estão presentes: gotas (3D), cilindros (2D) e barras (1D). Para $Y_p = 0.3$ aparece uma pequena porção de tubos (2D), além das três estruturas presentes para matéria simétrica. Os autores de [132] obtiveram um resultado semelhante a este usando diferentes modelos, e explicaram a razão para isso devido ao tratamento não consistente da força de Coulomb a qual evita uma redistribuição dos prótons. Como resultado, o método CP prediz menores extensões de fases pasta como um todo e para matéria simétrica a maior fração de prótons gera efeitos de blindagem de Debye mais fortes, e com isso, dificulta o aparecimento de tubos. Embora a assimetria de isospin afete as estruturas e distribuição da fase pasta, a diferença na dependência na densidade da energia de simetria do QMC e do $QMC\omega\rho$ não é forte o suficiente para mostrar qualquer efeito. Em [?], gotas e barras estão presentes na matéria em equilíbrio β , entretanto a EoS da matéria estelar foi calculada com modelos com um menor *slope* L , em particular, $L \leq 60$ MeV.

A fase pasta diminui conforme a fração de prótons decresce, e para matéria

em equilíbrio β apenas gotas são presentes. A densidade de transição entre as fases pasta e matéria homogênea mostra o mesmo comportamento que todos os modelos, *i.e.* decresce para a menor fração de prótons e seu menor valor é obtido para matéria em equilíbrio beta. Os cálculos realizados com o método CP em [104] e [115] utilizaram duas prescrições diferentes para o coeficiente de tensão superficial, baseados em um fit dos resultados de Thomas Fermi para modelos de Skyrme e relativísticos, respectivamente. Exceto esses detalhes nos cálculos que podem trazer pequenas modificações quantitativas nos resultados, as conclusões qualitativas gerais não se diferem.

Notamos no painel inferior da Fig. 4.5, que a transição núcleo crosta da estrela de nêutrons acontece em $n_B = 0.062 \text{ fm}^{-3}$ para o modelo QMC e a uma densidade um pouco maior, $n_B = 0.066 \text{ fm}^{-3}$, se a interação $\omega\rho$ é incluída, como visto no painel superior da Fig. 4.5. Uma correlação entre as densidades de transição e o *slope* foi identificada em muitos trabalhos (por exemplo em [115, 133]). Visto que o modelo QMC original possui um *slope* da energia de simetria maior que o QMC $\omega\rho$, uma menor transição da crosta núcleo já era esperada para esse modelo.

Finalmente, analisamos a influência das fases pasta em algumas propriedades das estrelas de nêutrons. Na Fig. 4.7 mostramos a relação massa raio. As curvas $M(R)$ são construídas com quatro equações de estado, a partir das quais podemos ver a influência da fase pasta e da interação $\omega\rho$ nas propriedades estelares. Veja em detalhes essas propriedades na Tabela 4.4. As equações de estado EoS1 e EoS1 $\omega\rho$ contém a fase pasta enquanto EoS2 e EoS2 $\omega\rho$ não contém. Usamos as EoS homogêneas do QMC e QMC $\omega\rho$ para o núcleo da estrela, as EoS QMC e QMC $\omega\rho$ com pasta e a EoS Baym Bethe Pethick (BBP) [134] para a crosta interna e a EoS Baym Pethick Sutherland (BPS) [135] para a crosta externa.

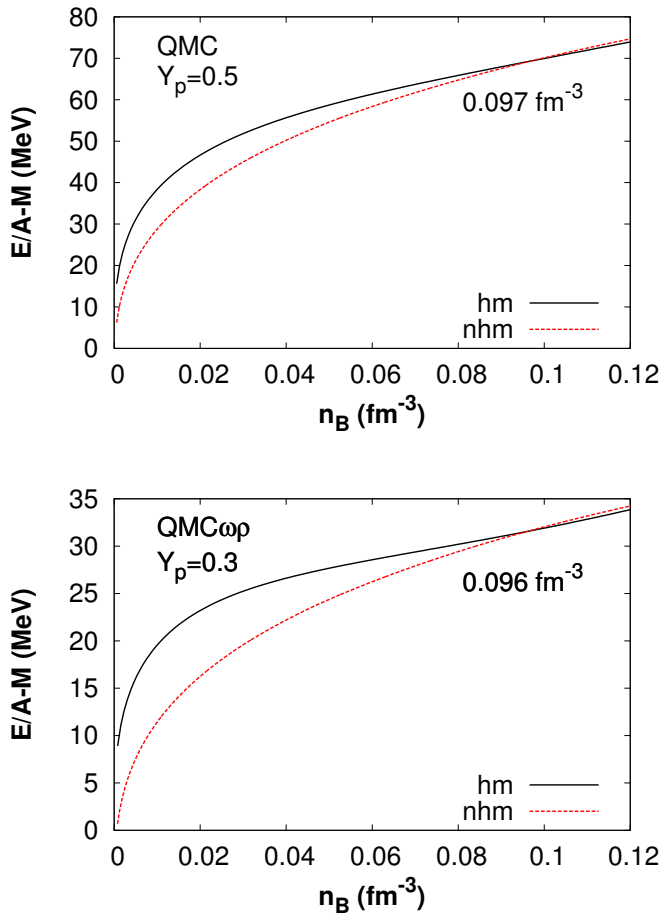


Figura 4.4: Energia livre por bárion como função da densidade bariônica calculada com o modelo QMC $\omega\rho$ e $a = 0.023$ para matéria homogênea (hm) e não homogênea (nhm) com $Y_p = 0.5$ (painel superior) e $Y_p = 0.3$ (painel inferior).

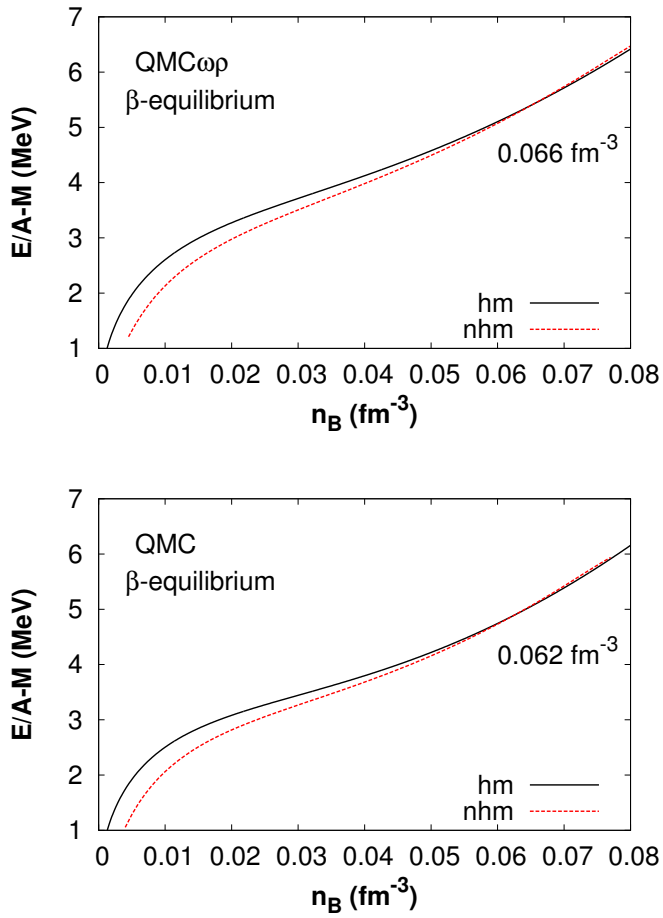


Figura 4.5: Energia livre por partícula obtida para matéria em equilíbrio beta com o modelo QMC $\omega\rho$ com $L = 69$ MeV (painel superior) e modelo QMC com $L = 90$ MeV (painel inferior).

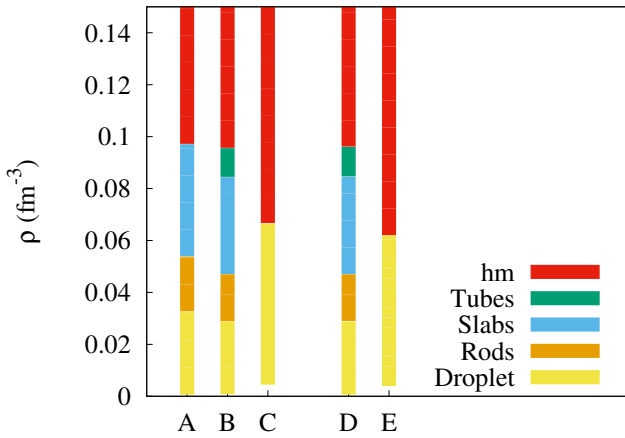


Figura 4.6: Diagramas de fase a temperatura zero obtidos com a aproximação CP para o QMC $\omega\rho$ com $L = 69$ MeV: (A) $Y_p = 0.5$, (B) $Y_p = 0.3$, (C) equilíbrio β e para o QMC com $L = 90$ MeV: (D) $Y_p = 0.3$, (E) equilíbrio β .

A seguir descrevemos as quatro EoSs usadas para calcular as propriedades das estrelas de nêutrons, o número 1(2) após "EoS" significa com pasta (sem pasta). Também incluímos a sigla $\omega\rho$ nas EoSs onde essa interação é considerada. Para EoS1, a EoS BPS + BBP é usada até $n_B = 3.7 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, entre $n_B = 0.4 - 7.0 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$ temos a fase pasta e após isso a EoS para o núcleo é usada. Para EoS2, anexamos a EoS BPS + BBP diretamente na EoS do núcleo para densidades menores que $8.9 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$. Quando consideramos a interação $\omega\rho$, ou seja, para o modelo QMC $\omega\rho$, temos a EoS1 $\omega\rho$, onde a EoS BPS + BBP é usada até $n_B = 3.7 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, a fase pasta está entre $n_B = 0.45 - 6.0 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$ quando a EoS para o núcleo aparece. Por fim, combinamos a EoS BPS + BBP diretamente a EoS do núcleo para densidades menores que $8.9 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$ para a EoS2 $\omega\rho$. Note que as massa máximas não se modificam pela existência das fases pasta, e com ambos os modelos $M_{max} = 2.14 M_\odot$ (QMC) e $M_{max} = 2.07 M_\odot$ (QMC $\omega\rho$), satisfazem os vínculos impostos pelas recentes medidas dos pulsares de $2M_\odot$ PSR J1614 2230 e PSR J0348+0432 [96, 97].

Uma das diferenças entre os resultados obtidos com a EoS com e sem a fase pasta aparece quando comparamos o raio da uma estrela de nêutrons típica de 1.4 massas solares. O raio quando a fase pasta é incluída é um pouco maior do que o raio obtido com a EoS BPS+BBP+homogênea, corroborando trabalhos passados [118]. Todas as EoS reproduzem raios para a estrela de $1.4 M_\odot$ dentro da faixa proposta em [136], onde os autores restringem o raio da estrela de nêutrons canônica de $1.4 M_\odot$ em $R = 9.7 - 13.9 \text{ km}$, assim como na faixa de raios obtida em [137]. Entretanto, ambas EoS estão fora da faixa determinada em [138] a partir da análise da espectroscopia de medidas de raio durante explosões termonucleares ou em quiescência ou em [139] a partir de vínculos experimentais e restrições

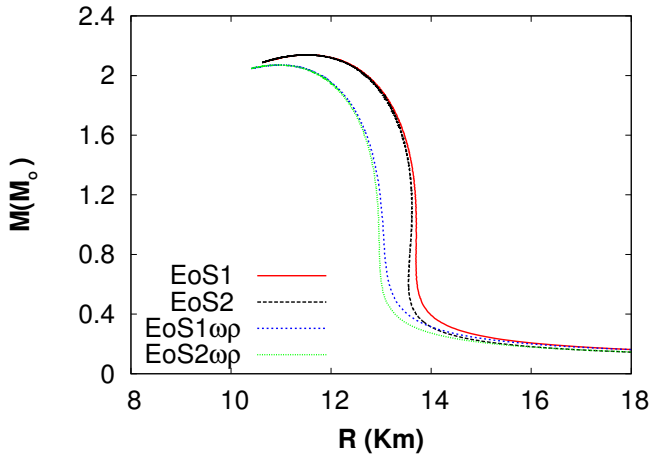


Figura 4.7: Relação massa raio para famílias de estrelas de nêutrons descritas com os modelos QMC e QMC $\omega\rho$ com (EoS1 e EoS1 $\omega\rho$) e sem (EoS2 e EoS2 $\omega\rho$) a fase pasta.

de causalidade. A faixa de valores propostos em [136] inclui a possibilidade de uma transição de fase para outra forma da matéria dentro da estrela. Se transições de fase são excluídas a densidades duas vezes menores que da saturação nuclear, os raios nucleares aceitos se modificam para 10.7 – 13.1 km, de acordo com [140, 141]. Se esse valor é aceito, os resultados obtidos com EoS1 $\omega\rho$ e EoS2 $\omega\rho$, construídas com o modelo QMC $\omega\rho$ estão dentro dessa nova faixa de valores proposta. Entretanto, os autores de [142] realizaram uma compilação de estimativas de raios de estrelas de nêutrons utilizando observações de estrelas de $1.4 M_{\odot}$ e obtiveram, levando em conta um erro de 2σ , valores acima de 14 km. Nesse caso, todos os modelos predizem raios satisfazendo essa condição.

EoS	Pasta	L (MeV)	$M_{max}(M_{\odot})$	R (km)	$R_{M=1.4M_{\odot}}$ (km)
EoS1	sim	90	2.14	11.53	13.61
EoS1 $\omega\rho$	sim	69	2.07	10.97	12.88
EoS2	não	90	2.14	11.51	13.55
EoS2 $\omega\rho$	não	69	2.07	10.96	12.83

Tabela 4.4: Propriedades de uma família de estrela de nêutrons obtida com o modelo QMC. Comparamos aqui equações de estado, com e sem a fase pasta, e com e sem a interação $\omega\rho$.

4.5 Considerações finais

Neste capítulo analisamos a existência da fase pasta usando um modelo com os graus de liberdade dos quarks, o modelo QMC. A determinação das fases não homogêneas foi possível fazendo uma parametrização da massa efetiva do nucleon abaixo da densidade de saturação como uma função não linear do méson σ como já feito anteriormente em [125]. Parte dos resultados mostrados aqui farão parte de uma grade de EoS completa que está sendo construída para ser usada em estudos do resfriamento de estrelas de nêutrons e simulações de supernovas.

Nossos resultados dependem quantitativamente de um parâmetro necessário para o cálculo do coeficiente de tensão superficial. Nós fitamos esse parâmetro com a energia de superfície nuclear e mostramos que mesmo mudando isso em um largo intervalo a extensão da pasta quase não foi modificada.

As conclusões gerais relacionadas ao tamanho das fases pasta, sua estrutura interna e as densidades transições da pasta para matéria homogênea estão de acordo com trabalhos anteriores [104, 115].

Quando fizemos o trabalho aqui apresentado, em 2016, o valor de L obtido com a parametrização original do QMC, $L = 90$ MeV, era maior do que as restrições exigiam: os autores de [140] assumem 63.6 MeV como o maior valor aceitável, mas

maiores valores são indicados em [14], onde $L < 80$ MeV e [119], com $L < 86.8$ MeV, onde ambos estudos consideraram vínculos extras que não foram incluídos em [140]. Para aperfeiçoar o modelo de modo a obter um menor valor de L , uma interação entre os mésons ω e ρ foi adicionada à densidade Lagrangiana, como já feito em trabalhos anteriores com diferentes parametrizações do modelo de Walecka não linear [143, 122] e também para o modelo QMC [121]. Esse novo termo na densidade Lagrangiana modifica a dependência na densidade da energia de simetria e nos permite calibrar os parâmetros do modelo de forma que um menor *slope* da energia de simetria é obtido na saturação. Nossos resultados mostram que essa interação é obrigatória em modelos nucleares relativísticos se queremos conciliar as massas máximas com raios pequenos em estrelas de nêutrons descritas pelo modelo QMC. No entanto, no recente trabalho [144] os autores analisaram dados de reações troca de carga (p, n) elásticas e quaseelásticas e encontraram $90 < L < 101$ MeV, portanto nessa nova restrição somente o modelo original do QMC satisfaz o vínculo experimental.

Os resultados apresentados neste capítulo estão publicados na Ref. [145].

Como continuação desse trabalho pretendemos incluir efeitos de núcleo finito através da implementação da prescrição CLD [126, 127]. O CLD (gota líquida compressível, do inglês, *Compressible Liquid Drop*) apresenta menores descontinuidades a baixas densidades, e assim pode ser um tratamento útil para obter todos os valores necessários para uma grade de EoS completa. A inclusão de partículas α [128] e outros núcleos leves [129] também podem modificar ligeiramente a estrutura interna das fases pasta.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Nesta tese, mostramos duas abordagens para o estudo da matéria nuclear com aplicação em objetos compactos e simulações de supernovas. Primeiramente abordamos o estudo de uma equação de estado com equilíbrio estatístico nuclear para ser usada em simulações de explosão do colapso do núcleo de supernovas. Esse trabalho, mostrado no Capítulo 2, apresenta o formalismo desenvolvido, o qual torna possível, a partir de qualquer EoS baseada na aproximação de Wigner Seitz, a construção de uma equação de estado contendo uma distribuição nuclear. Aplicamos esse formalismo à EoS de Lattimer e Swesty (LS), a qual é uma das mais usadas no estudo de supernovas. Fizemos também uma modificação na energia dos núcleos, substituindo o funcional de energia tipo Skyrme de LS por um modelo de massa realista de modo que temos efeitos de camada e uma melhor descrição das massas nucleares. Este trabalho foi publicado no *Physical Review C* [146] e está no Apêndice C.

A conclusão geral deste estudo mostra que considerando condições termodinâmicas que ocorrem em uma trajetória típica do colapso do núcleo de supernovas,

nota-se que a distribuição de isótopos desvia consideravelmente dos resultados médios de LS, e números mágicos dominam durante toda a trajetória. Visto que as taxas de captura de elétrons em núcleos pode variar de ordens de magnitude entre núcleos vizinhos, esperamos que um cálculo consistente dessas taxas sob essa distribuição mais realista pode modificar a taxa de depletonização, e então a dinâmica do colapso que disso resulta, com relação a cálculos de colapso típicos onde a SNA é empregada.

Como sequência deste trabalho temos o estudo do possível desaparecimento dos efeitos de magicidade em núcleos muito ricos em nêutrons, cujos resultados preliminares são mostrados no final do Capítulo 2. A aplicação dessas EoS em uma simulação do colapso do núcleo de supernova em uma aproximação 1D, que será a continuação desse trabalho, nos permitirá analisar o efeito da distribuição nuclear e dos modelos nucleares empregados na taxa de captura do elétrons e na formação da onda de choque da supernova.

No Capítulo 3 apresentamos o formalismo de um modelo nuclear relativístico que contém os graus de liberdade dos quarks, o QMC. Apresentamos as suas propriedades e comparamos com modelos conhecidos e com vínculos experimentais, onde vimos a viabilidade de utilizar esse modelo para o estudo de estrelas de nêutrons e supernovas. Com isso montamos uma grade com a EoS do QMC a temperatura zero, a qual cobre os valores de fração de prótons $Y_p = 0 - 0.65$ com espaçamento linear $\Delta Y_p = 0.01$ (66 pontos), e de densidades $\rho_B = 10^{14} - 10^{16}$ g cm⁻³ com espaçamento logarítmico $\Delta \log_{10} (\rho_B / [\text{g cm}^{-3}]) = 0.1$ (21 pontos). Esta parte do trabalho foi publicado no *Brazilian Journal of Physics* [147] e está no Apêndice C. Dando sequência ao estudo do modelo QMC, no Capítulo 4 incluímos uma interação $\omega\rho$ na densidade de lagrangiana de forma a obtermos um

menor valor do *slope* da energia de simetria e satisfazeremos os vínculos experimentais. Com o modelo QMC original e com o QMC $\omega\rho$ analisamos a existência de fases pasta na matéria nuclear a fração de prótons fixa e equilíbrio beta. Para isso usamos o método da coexistência de fases e uma abordagem geométrica para o cálculo do coeficiente de tensão superficial que separa as fases de densidade alta e baixa. Por fim analisamos o efeito da inclusão do termo $\omega\rho$ e da fase pasta nas propriedades das estrelas de nêutrons. Este trabalho foi publicado no *Physical Review C* [145] e está incluído no Apêndice C.

Podemos sumarizar as conclusões gerais para a EoS com o QMC da seguinte forma:

- Nossas EoS com o QMC reproduzem o vínculo observacional da massa máxima de $2M_{\odot}$.
- A inclusão da interação $\omega\rho$ diminui o *slope* e conseqüentemente o raio das estrelas de nêutrons, e também diminui a sua massa máxima.
- As conclusões gerais relacionadas ao tamanho das fases pasta, sua estrutura interna e densidades de transições estão de acordo com trabalhos anteriores.
- A fase pasta aumenta levemente o raio da estrela de $1.4M_{\odot}$, e não altera a massa máxima.

A continuação natural deste trabalho será a inclusão de efeitos de temperatura finita na EoS com os modelos QMC e QMC $\omega\rho$ com a fase pasta. Além disso, pretendemos trabalhar com o modelo QMC a densidades mais baixas, onde núcleos estão presentes e utilizaremos o formalismo apresentado no Capítulo 2 da

tese de modo a termos a matéria nuclear a baixas densidade com equilíbrio estatístico nuclear. Dessa forma uma EoS completa para simulações de supernovas com o modelo QMC terá sido construída.

Apêndice A

Potenciais químicos

Nesse apêndice, mostramos que é possível identificar os multiplicadores de Lagrange, introduzidos explicitamente para impor os vínculos de conservação de massa e carga, e os potenciais químicos introduzidos na expressão da energia livre de Gibbs, com os potenciais químicos da matéria homogênea (*i.e.* do gás uniforme). Vamos considerar o caso onde a matéria é modelada com apenas um tipo de célula de WS, por simplicidade. Começando da energia livre dos bárions na célula de WS,

$$F_{\text{bar}} = F_{\text{nuc}} - TV_C \ln z_\beta , \quad (\text{A.1})$$

onde a densidade de energia livre do gás é $\mathcal{F}_g = -T \ln z_\beta$, z_β sendo a função de partição de campo médio da matéria homogênea. Pode se escrever a componente bariônica da energia livre de Gibbs operando uma transformação de Legendre com respeito aos números bariônicos do nêutron e do próton (ou, equivalentemente, o número bariônico total e o isospin). Assim,

$$G_{\text{bar}} = F_{\text{bar}} - \mu_1 N_{\text{WS}} - \mu_2 Z_{\text{WS}} , \quad (\text{A.2})$$

onde introduzimos os potenciais químicos auxiliares μ_1 e μ_2 . Usando Eqs. (2.6) (2.7) (onde retiramos (j) da notação por conveniência), obtemos

$$G_{\text{bar}} = F_{\text{bar}} - \mu_1(N + n_{ng}V_C) - \mu_2(Z + n_{pg}V_C). \quad (\text{A.3})$$

Usando as relações de campo médio da matéria nuclear uniforme,

$$\ln z_{\beta\mu_n\mu_p} = \ln z_{\beta} + \beta\mu_1 n_{ng} + \beta\mu_2 n_{pg}, \quad (\text{A.4})$$

pode se ver que as densidades dos prótons e nêutrons no gás são dadas por

$$n_{ng} = T \left. \frac{\partial z_{\beta\mu_n\mu_p}}{\partial \mu_1} \right|_{\mu_2}, \quad (\text{A.5})$$

$$n_{pg} = T \left. \frac{\partial z_{\beta\mu_n\mu_p}}{\partial \mu_2} \right|_{\mu_1}. \quad (\text{A.6})$$

Dessa forma, as densidades do gás são determinadas unicamente pelos potenciais químicos e, independente da realização (k) , i.e. $n_{ng}^{(k)} = n_{ng}$ e $n_{pg}^{(k)} = n_{pg}$. A energia livre de Gibbs é finalmente dada por

$$\begin{aligned} G_{\text{bar}} &= F_{\text{nuc}} - \mu_1 N - \mu_2 Z - TV_C \ln z_{\beta\mu_n\mu_p} \\ &= G_{\text{nuc}} + V_C \mathcal{G}_g, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

com \mathcal{G}_g sendo a energia livre de Gibbs do gás, e

$$\mu_1 = \left. \frac{\partial z_{\beta}}{\partial n_{ng}} \right|_{n_{pg}} = \mu_{ng}, \quad (\text{A.8})$$

$$\mu_2 = \left. \frac{\partial z_{\beta}}{\partial n_{pg}} \right|_{n_{ng}} = \mu_{pg}, \quad (\text{A.9})$$

onde reconhecemos que os potenciais químicos auxiliares coincidem com os potenciais químicos dos nêutrons e prótons do gás homogêneo, $\mu_n \equiv \mu_{ng}$ e $\mu_p \equiv \mu_{pg}$.

Apêndice B

EoS de LS no *ensemble* canônico

Nesse Apêndice vamos rederivar as equações de equilíbrio, Eqs. (3.2) em LS [41], que resultam da minimização da densidade de energia livre do sistema. Esse procedimento é equivalente a minimizar a função auxiliar construída a partir da densidade de energia livre sob vínculos de conservação (veja também Ref. [65]), produzindo os resultados de SNA. Visto que a contribuição dos léptons (e fótons) para a densidade de energia livre pode ser tratada separadamente, e não entra na minimização, vamos considerar aqui somente a densidade bariônica de energia livre. Na EoS de LS, o conjunto de variáveis independentes escolhido é $\{x_k\} = \{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{no}, n_{po}\}$, onde $n_i = A/V_N$ e $x_i = Z/A$ são, respectivamente, a densidade do nucleons e a fração de prótons dentro do núcleo na célula, $u = V_N/V_C$ é a fração do volume da célula de WS que é ocupada por núcleos (V_N sendo o volume do núcleo), r_N é o raio nuclear (tal que $V_N = 4\pi r_N^3/3$), n_α , n_{no} e n_{po} são os números densidade das partículas alfa, e dos nêutrons e prótons do gás externo, respectivamente. Para simplicidade de notação, omitiremos nessa seção o índice (j) referindo a célula. Usando essas variáveis de LS, a densidade

de energia livre bariônica pode ser escrita como

$$\mathcal{F}_{\text{bar}} = \mathcal{F}_{\text{nuc}} + \mathcal{F}_o + \mathcal{F}_\alpha . \quad (\text{B.1})$$

A contribuição nuclear é dada pela soma das densidades de energia livre do *bulk*, superfície, Coulomb e translacional,

$$\mathcal{F}_{\text{nuc}} = n_i u [f_b(n_i, x_i) + f_s(x_i, u, r_N) + f_c(x_i, n_i, u, r_N)] + n_i u (1-u) f_H(n_i, x_i, u) , \quad (\text{B.2})$$

onde deixamos em evidência as dependências nas variáveis independentes (ver Ref. [41] para as expressões detalhadas dos diferentes termos). Note que nessa notação, f corresponde a energia livre por bárion, enquanto \mathcal{F} à densidade de energia livre. Para os nucleons no gás externo e as partículas alfa, temos

$$\mathcal{F}_o = n_o f_o(n_o)(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha) , \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{F}_\alpha = n_\alpha f_\alpha(n_\alpha)(1-u) , \quad (\text{B.4})$$

com $n_o = n_{no} + n_{po}$.

Da conservação de massa e carga, temos

$$n_B = \frac{A_{\text{WS}}}{V_C} = u n_i + 4n_\alpha(1-u) + (n_{no} + n_{po})(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha) , \quad (\text{B.5})$$

$$n_p = n_e = \frac{Z_{\text{WS}}}{V_C} = x_i n_i u + 2n_\alpha(1-u) + n_{po}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha) , \quad (\text{B.6})$$

onde A_{WS} e Z_{WS} são os números bariônico e de prótons totais na célula, respectivamente (o número total de nêutrons na célula é então $N_{\text{WS}} = A_{\text{WS}} - Z_{\text{WS}}$, e a conservação para n_n também pode ser derivada). Com isso podemos construir a

função auxiliar à ser minimizada:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & \mathcal{F}_{\text{bar}} - \lambda_1 [n_p - x_i n_i u - 2n_\alpha(1-u) - n_{po}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha)] \\ & - \lambda_2 [n_n - (1-x_i)n_i u - 2n_\alpha(1-u) - n_{no}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha)] , \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

onde λ_1 e λ_2 são os multiplicadores de Lagrange. A minimização da função auxiliar, Eq. (B.7), com respeito as sete variáveis:

- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial r_N} \right|_{n_i, x_i, u, n_\alpha, n_{no}, n_{po}} = 0$. Notando que somente os termos de superfície e Coulomb dependem de r_N , *i.e.* $\partial(\mathcal{F}_s + \mathcal{F}_c)/\partial r_N = 0$, recuperamos o teorema do virial, $\mathcal{F}_s = 2\mathcal{F}_c$, o que dá a equação à ser resolvida separadamente para o raio nuclear, Eq. (3.2a) em [41],

$$r_N = \frac{9\sigma}{2\beta} \left(\frac{s(u)}{c(u)} \right)^{1/3} , \quad (\text{B.8})$$

onde $s(u)$ e $c(u)$ são parâmetros de forma usados para reproduzir a transição de núcleos para fase bolha [41]. Equivalentemente, pode se escrever a Eq. (B.8) em termos de n_i ,

$$n_i = \frac{5}{2} \frac{A\sigma}{Z^2 e^2} \frac{s(u)}{c(u)} . \quad (\text{B.9})$$

Note que na rotina de LS, $s(u)/c(u) = [u(1-u)/\mathcal{D}]^3$.

- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial n_{qo}} \right|_{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{-qo}} = 0$, com $q = n, p$ e $-q = p, n$. Essa condição identifica os multiplicadores de Lagrange como os potenciais químicos dos nêutrons e prótons,

$$\lambda_1 = -\mu_{po} \quad \& \quad \lambda_2 = -\mu_{no} \quad (\text{B.10})$$

- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial n_\alpha} \right|_{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{np}, n_{po}} = 0$. Usando a relação termodinâmica entre a pressão P , a densidade de energia livre \mathcal{F} , e o potencial químico μ de uma espécie de densidade n , $P = -\mathcal{F} + \mu n$, essa condição dá Eq. (3.2e) de LS¹,

$$\mu_\alpha = 2(\mu_{no} + \mu_{po}) - v_\alpha P_o, \quad (\text{B.11})$$

onde P_o é a pressão do gás de nêutrons e prótons.

- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial x_i} \right|_{n_i, u, r_N, n_\alpha, n_{np}, n_{po}} = 0$, que leva à Eq. (3.2b) de LS,

$$\mu_{ni} - \mu_{pi} - \frac{2}{3} \frac{\beta \mathcal{D}}{n_i u} \left(\frac{1}{x_i} + \frac{\sigma'}{\sigma} \right) - \frac{1-u}{A_0} h'(\mu_H - T) = \mu_{no} - \mu_{po}, \quad (\text{B.12})$$

com $\sigma' \equiv \partial \sigma / \partial x_i$ e $h' \equiv \partial h / \partial x_i$.

- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial n_i} \right|_{x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{np}, n_{po}} = 0$,
- $\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial u} \right|_{x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{np}, n_{po}} = 0$.

Combinando as duas últimas condições com Eq. (B.12), e notando que $\mu_{b,i} = (1-x_i)\mu_{ni} + x_i\mu_{pi}$ depois de operar a mudança de variáveis $(n_{ni}, n_{pi}) \rightarrow (n_i, x_i)$, com $n_{ni} = n_i(1-x_i)$ e $n_{pi} = n_i x_i$, leva às Eqs. (3.2c) (3.2d) de LS:

$$\mu_{ni} - \frac{2}{3} \frac{x_i \beta \mathcal{D}}{n_i u} \frac{\sigma'}{\sigma} + \frac{1-u}{A_0} [h\mu_H - h'x_i(\mu_H - T)] = \mu_{no}, \quad (\text{B.13})$$

$$P_i + \beta \left(\frac{2\mathcal{D}}{3u} - \mathcal{D}' \right) + \frac{n_i h}{A_0} \mu_H u = P_o + P_\alpha, \quad (\text{B.14})$$

¹Note que em Eq (3.2e) o sinal de menos entre os potenciais químicos dos nêutrons e prótons deve ser substituído por um sinal positivo Além disso B_α não foi incluído em Eq (B.11) por que as massas são incluídas nos potenciais químicos

onde $\mathcal{D}' \equiv \partial\mathcal{D}/\partial u$.

Referências Bibliográficas

- [1] Hans Thomas Janka. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 62:407, 2012.
- [2] F. Hoyle and W. A. Fowler. *Astrophys. J.*, 132:565, 1960.
- [3] A. Burrows. *Nature*, 403:727, 2000.
- [4] J. M. Lattimer and F. D. Swesty. *Nucl. Phys. A*, 535:331, 1991.
- [5] H. Shen et al. *Nucl. Phys. A*, 637:435, 1998.
- [6] H. Shen et al. *Astrophys. J. Suppl.*, 197:20, 2011.
- [7] M. Hempel et al. *Astrophys. J.*, 748:70, 2012.
- [8] A. W. Steiner, M. Hempel, and T. Fischer. *Astrophys. J.*, 774:17, 2013.
- [9] Sarmistha Banik, Matthias Hempel, and Debades Bandyopadhyay. *The Astrophysical J. Supplement S.*, 214(2):22, 2014.
- [10] B. D. Serot and J. D. Walecka. *Adv. Nucl. Phys.*, 16:1, 1986.
- [11] J. Boguta and A. R. Bodmer. *Nucl. Phys. A*, 292:431, 1977.
- [12] N. K. Glendenning. *Compact Stars*, Springer Verlag, New York, 2000.

- [13] M. Hempel and J. Schaffner Bielich. *Nucl. Phys. A*, 837:210, 2010.
- [14] M. Dutra et al. *Phys. Rev. C*, 90:055203, 2014.
- [15] Y. Sekiguchi et al. *Phys. Rev. D*, 91:064059, 2015.
- [16] S. Nasu et al. *Astrophys. J.*, 801:78, 2015.
- [17] E. Abdikamalov et al. *Phys. Rev. D*, 90:044001, 2014.
- [18] C. L. Fryer and A. Heger. *Astrophys. J.*, 541:1033, 2000.
- [19] T. A. Thompson, A. Burrows, and P. A. Pinto. *Astrophys. J. Suppl.*, 592:434, 2003.
- [20] O. Pejcha and T. A. Thompson. *Astrophys. J.*, 801:90, 2015.
- [21] R. Buras et al. *Phys. Rev. Lett.*, 90:241101, 2003.
- [22] P. A. M. Guichon. *Phys. Lett. B*, 200:235, 1988.
- [23] A. Chodos et al. *Phys. Rev. D*, 9:3471, 1974.
- [24] A. Burrows and J. M. Lattimer. On the accuracy of the single nucleus approximation in the equation of state of hot, dense matter. *The Astrophysical Journal*, 285:294–303, October 1984.
- [25] A. Juodagalvis, K. Langanke, W. R. Hix, G. Martinez Pinedo, and J. M. Sampaio. Improved estimate of electron capture rates on nuclei during stellar core collapse. *Nuclear Physics A*, 848:454–478, December 2010.

- [26] C. Sullivan, E. O'Connor, R. G. T. Zegers, T. Grubb, and S. M. Austin. The Sensitivity of Core collapse Supernovae to Nuclear Electron Capture. , 816:44, January 2016.
- [27] A. R. Raduta, F. Gulminelli, and M. Oertel. Stellar electron capture rates on neutron rich nuclei and their impact on stellar core collapse. , 95(2):025805, February 2017.
- [28] S. Furusawa, H. Nagakura, K. Sumiyoshi, C. Kato, and S. Yamada. Dependence of weak interaction rates on the nuclear composition during stellar core collapse. , 95(2):025809, February 2017.
- [29] T. Maruyama et al. *Phys. Rev. C*, 72:015802, 2005.
- [30] C. Providência et al. *Eur. Phys. J. A*, 50:44, 2014.
- [31] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. R. Wilson. *Phys. Rev. Lett.*, 50:2066, 1983.
- [32] C. J. Pethick and A. Y. Potekhin. *Phys. Lett. B*, 427:7, 1998.
- [33] S. A. Colgate. *Astrophys. J.*, 232:404, 1979.
- [34] S. Permuter et al. *Nature*, 391:51, 1998.
- [35] G. Gilmore. *Science*, 304:1915, 2004.
- [36] K. Sumiyoshi et al. *Astrophys. J.*, 629:922, 2005.
- [37] J. M. Lattimer and M. Prakash. *Phys. Reports*, 333 334:121, 2000.
- [38] K. Sumiyoshi et al. *Nucl. Phys. A*, 730:227, 2004.

- [39] A Burrows and J. M. Lattimer. *Astrophys. J.*, 299:L19, 1985.
- [40] T. A. Thompson, A. Burrows, and P. A. Pinto. *Astrophys. J.*, 592:434, 2003.
- [41] J. M. Lattimer and F. Douglas Swesty. A generalized equation of state for hot, dense matter. *Nuclear Physics A*, 535:331–376, December 1991.
- [42] G. Baym, C. Pethick, and P. Sutherland. The Ground State of Matter at High Densities: Equation of State and Stellar Models. , 170:299+, December 1971.
- [43] G. Baym, H. A. Bethe, and C. J. Pethick. Neutron star matter. *Nuclear Physics A*, 175:225–271, November 1971.
- [44] S. S. Avancini, C. C. Barros, Jr., L. Brito, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência. Light clusters in nuclear matter and the “pasta” phase. , 85(3):035806, March 2012.
- [45] B. K. Sharma, M. Centelles, X. Viñas, M. Baldo, and G. F. Burgio. Unified equation of state for neutron stars on a microscopic basis. , 584:A103, December 2015.
- [46] J. M. Lattimer, C. J. Pethick, D. G. Ravenhall, and D. Q. Lamb. Physical properties of hot, dense matter: The general case. *Nuclear Physics A*, 432:646–742, January 1985.
- [47] F. Douchin and P. Haensel. Inner edge of neutron star crust with SLy effective nucleon nucleon interactions. *Physics Letters B*, 485:107–114, July 2000.

- [48] F. Douchin and P. Haensel. A unified equation of state of dense matter and neutron star structure. , 380:151–167, December 2001.
- [49] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi. Relativistic equation of state of nuclear matter for supernova and neutron star. *Nuclear Physics A*, 637:435–450, July 1998.
- [50] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi. Relativistic Equation of State of Nuclear Matter for Supernova Explosion. *Progress of Theoretical Physics*, 100:1013–1031, November 1998.
- [51] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi. Relativistic Equation of State for Core collapse Supernova Simulations. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 197:20, December 2011.
- [52] A. K. Dutta, M. Onsi, and J. M. Pearson. Proton shell effects in neutron star matter. , 69(5):052801, May 2004.
- [53] M. Onsi, A. K. Dutta, H. Chatri, S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson. Semi classical equation of state and specific heat expressions with proton shell corrections for the inner crust of a neutron star. , 77(6):065805+, June 2008.
- [54] K. Oyamatsu and K. Iida. Symmetry energy at subnuclear densities and nuclei in neutron star crusts. , 75(1):015801, January 2007.
- [55] Z. W. Zhang and H. Shen. Relativistic Equation of State at Subnuclear Densities in the Thomas Fermi Approximation. , 788:185, June 2014.

- [56] H. Pais, S. Chiacchiera, and C. Providência. Light clusters, pasta phases, and phase transitions in core collapse supernova matter. , 91(5):055801, May 2015.
- [57] J. W. Negele and D. Vautherin. Neutron star matter at sub nuclear densities. *Nuclear Physics A*, 207:298–320, June 1973.
- [58] M. Baldo, E. E. Saperstein, and S. V. Tolokonnikov. A realistic model of superfluidity in the neutron star inner crust. *European Physical Journal A*, 32:97–108, April 2007.
- [59] P. Gögelein and H. Mütter. Nuclear matter in the crust of neutron stars. , 76(2):024312, August 2007.
- [60] F. Grill, J. Margueron, and N. Sandulescu. Cluster structure of the inner crust of neutron stars in the Hartree Fock Bogoliubov approach. , 84(6):065801, December 2011.
- [61] A. Pastore. Superfluid properties of the inner crust of neutron stars. II. Wigner Seitz cells at finite temperature. , 86(6):065802, December 2012.
- [62] W. Hillebrandt, K. Nomoto, and R. G. Wolff. Supernova explosions of massive stars – The mass range 8 to 10 solar masses. *Astronomy and Astrophysics*, 133:175–184, April 1984.
- [63] Christian Iliadis. *Nuclear Physics of Stars*. Wiley VCH, 2007.
- [64] A. C. Phillips. *The Physics of Stars, 2nd Edition*. July 1999.
- [65] F. Gulminelli and A. R. Raduta. *Phys. Rev. C*, 92:055803, 2015.

- [66] R. Buras, M. Rampp, H. T. Janka, and K. Kifonidis. Two dimensional hydrodynamic core collapse supernova simulations with spectral neutrino transport. I. Numerical method and results for a 15 M star. *Astronomy & Astrophysics*, 447:1049–1092, March 2006.
- [67] M. Oertel, A. F. Fantina, and J. Novak. Extended equation of state for core collapse simulations. , 85(5):055806, May 2012.
- [68] J. V. Romero, J. M. A. Ibanez, J. M. A. Marti, and J. A. Miralles. A New Spherically Symmetric General Relativistic Hydrodynamical Code. , 462:839, May 1996.
- [69] J. V. Romero, J. M. Ibáñez, J. A. Miralles, and J. A. Pons. General relativistic collapse of hot stellar cores. In J. A. Miralles, J. A. Morales, and D. Sáez, editors, *Some Topics on general relativity and gravitational radiation*, page 289, 1997.
- [70] A. F. Fantina. *Supernovae theory: study of electro weak processes during gravitational collapse of massive stars*. PhD thesis, Université Paris XI, Orsay, France, and Università degli Studi di Milano, Milano, Italy, 2010.
- [71] S. E. Woosley, A. Heger, and T. A. Weaver. The evolution and explosion of massive stars. *Reviews of Modern Physics*, 74:1015–1071, November 2002.
- [72] M. Hempel and J. Schaffner Bielich. A statistical model for a complete supernova equation of state. *Nuclear Physics A*, 837:210–254, June 2010.

- [73] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson. Further explorations of Skyrme Hartree Fock Bogoliubov mass formulas. XIII. The 2012 atomic mass evaluation and the symmetry coefficient. , 88(2):024308, August 2013.
- [74] G. Audi, M. Wang, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. The ame2012 atomic mass evaluation. *Chinese Physics C*, 36(12):1287, 2012.
- [75] J. M. Pearson, N. Chamel, A. F. Fantina, and S. Goriely. Symmetry energy: nuclear masses and neutron stars. *European Physical Journal A*, 50:43, February 2014.
- [76] D. Lunney, J. M. Pearson, and C. Thibault. Recent trends in the determination of nuclear masses. *Reviews of Modern Physics*, 75:1021–1082, August 2003.
- [77] F. Tondeur. *Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei*, 288:97, 1978.
- [78] Ad. R. Raduta, F. Gulminelli, and M. Oertel. *Phys. Rev. C*, 93:025803, 2016.
- [79] O. Sorlin and M. G. Poquet. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 61:602, 2008.
- [80] J. Duflo and A.P. Zuker. *Phys. Rev. C*, 52:R23, 1995.
- [81] J. M. Pearson, R. C. Nayak, and S. Goriely. *Phys. Lett. B*, 387:455, 1996.
- [82] M. Gell Mann. *Phys. Lett.*, 8:214, 1964.
- [83] G. Zweig. *CERN Rep.*, No.8181/Th 8419, 1964.

- [84] E. D. Bloom et al. *Phys. Rev. Lett.*, 23:930, 1969.
- [85] M. Breidenbach et al. *Phys. Rev. Lett.*, 23:935, 1969.
- [86] S. Fleck et al. *Nucl. Phys. A*, 510:731, 1990.
- [87] K. Saito and A. W. Thomas. *Phys. Lett. B*, 327:9, 1994.
- [88] K. Saito and A. W. Thomas. *Phys. Rev. C*, 52:2789, 1995.
- [89] S. Pal et al. *Phys. Rev. C*, 60:015802, 1999.
- [90] A. M. Santos and C. Providência. *Phys. Rev. C*, 79:045805, 2009.
- [91] J. D. Walecka. *Theoretical Nuclear and Subnuclear Physics*. Imperial College Press, London, 2004.
- [92] G. A. Lalazissis, J. König, and P. Ring. *Phys. Rev. C*, 55:540, 1997.
- [93] S. Typel and H. H. Wolter. *Nucl. Phys. A*, 656:331, 1999.
- [94] A. M. S. Santos and D. P. Menezes. *Phys. Rev. C*, 69:045803, 2004.
- [95] C. H. Johnson, D. J. Horen, and C. Mahaux. *Phys. Rev. C*, 36:2252, 1987.
- [96] P. Demorest et al. *Nature*, 467:1081, 2010.
- [97] J. Antoniadis et al. *Science*, 26:6131, 2013.
- [98] S. Weissenborn, D. Chatterjee, and J. Schaffner Bielich. *Phys. Rev. C*, 85:065802, 2012.
- [99] S. Weissenborn, D. Chatterjee, and J. Schaffner Bielich. *Nucl. Phys. A*, 881:62, 2012.

- [100] L. L. Lopes and D. P. Menezes. *Phys. Rev. C*, 89:025805, 2014.
- [101] K. A. Maslov, E.E. Kolomeitsev, and D. M. Voskresensky. *arXiv:1508.03771*, astro-ph:1, 2015.
- [102] R. C. Tolman. *Phys. Rev.*, 55:364, 1939.
- [103] J. R. Oppenheimer and G. M. Volkoff. *Phys. Rev.*, 55:374, 1939.
- [104] S. S. Avancini, D. P. Menezes, M. D. Alloy, J. R. Marinelli, M. M. W. Moraes, and C. Providência. *Phys. Rev. C*, 78:015802, 2008.
- [105] J. Xu, L. Chen, B. Li, and H. Ma. *arXiv:0807.4477v3*, nucl-ph:1, 2009.
- [106] C. J. Horowitz, M. A. Pérez García, and J. Piekarewicz. *Phys. Rev. C*, 69:045804, 2004.
- [107] C. J. Horowitz, M. A. Pérez García, D. K. Berry, and J. Piekarewicz. *Phys. Rev. C*, 72:035801, 2005.
- [108] C. J. Pethick and A. Y. Potekhin. *Phys. Lett. B*, 427:7, 1998.
- [109] Carlos Bertulani and Jorge Piekarewicz. *Neutron Star Crust*. Nova Science Publishers, Inc., 2012.
- [110] Bennett Link, Richard I. Epstein, and James M. Lattimer. *Phys. Rev. Lett.*, 83:3362, 1999.
- [111] M. D. Alloy and D. P. Menezes. *Phys. Rev. C*, 83:035803, 2011.
- [112] U.J. Furtado, S.S. Avancini, J.R. Marinelli, W. Martarello, and C. Providência. *Eur. Phys. J. A*, 52:290, 2016.

- [113] Hidetaka Sonoda, Gentaro Watanabe, Katsuhiko Sato, Tomoya Takiwaki, Kenji Yasuoka, and Toshikazu Ebisuzaki. *Phys. Rev. C*, 75:042801, 2007.
- [114] Hidetaka Sonoda, Gentaro Watanabe, Katsuhiko Sato, Kenji Yasuoka, and Toshikazu Ebisuzaki. *Phys. Rev. C*, 77:035806, 2008.
- [115] S. S. Avancini, L. Brito, J. R. Marinelli, D. P. Menezes, M. M. W. de Moraes, C. Providência, and A. M. Santos. *Phys. Rev. C*, 79:035804, 2009.
- [116] Gentaro Watanabe, Hidetaka Sonoda, Toshiki Maruyama, Katsuhiko Sato, Kenji Yasuoka, and Toshikazu Ebisuzaki. *Phys. Rev. Lett.*, 103:121101, 2009.
- [117] Helena Pais and Jirina R. Stone. *Phys. Rev. Lett.*, 109:151101, 2012.
- [118] Helena Pais, Débora P. Menezes, and Constanca Providência. *Phys. Rev. C*, 93:065805, Jun 2016.
- [119] M. Oertel, M. Hempel, T. Klahr, and S. Typel. *arXiv:1610.03361v1*, astro-ph:1, 2016.
- [120] Constanç Providência et al. *Eur. Phys. J. A*, 50:44, 2014.
- [121] Prafulla K. Panda, Alexandre M. S. Santos, Débora P. Menezes, and Constanç Providência. *Phys. Rev. C*, 85:055802, 2012.
- [122] Rafael Cavagnoli, Debora P. Menezes, and Constanç Providência. *Phys. Rev. C*, 84:065810, 2011.
- [123] N. Barik, R. N. Mishra, D. K. Mohanty, P. K. Panda, and T. Frederico. *Phys. Rev. C*, 88:015206, 2013.

- [124] R. N. Mishra, H. S. Sahoo, P. K. Panda, N. Barik, and T. Frederico. *Phys. Rev. C*, 92:045203, 2015.
- [125] P. A. M. Guichon et al. *Nucl. Phys. A*, 601:349, 1996.
- [126] Hu J.N. Zhang Z.W. Bao, S.S. and Shen H. *Phys. Rev. C*, 90:045802, 2014.
- [127] Helena Pais, Silvia Chiacchiera, and Constanca Providência. *Phys. Rev. C*, 91.
- [128] S. S. Avancini, C. C. Barros, D. P. Menezes, and C. Providência. *Phys. Rev. C*, 82:025808, 2010.
- [129] S. S. Avancini, C. C. Barros, L. Brito, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência. *Phys. Rev. C*, 85:035806, 2012.
- [130] Jørgen Randrup. *Phys. Rev. C*, 79:054911, 2009.
- [131] Marcus B. Pinto, Volker Koch, and Jørgen Randrup. *Phys. Rev. C*, 86:025203, 2012.
- [132] S. S. Avancini, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência. *Phys. Rev. C*, 82:055807, 2010.
- [133] I. Vidana, C. Providencia, A. Polls, and A. Rios. *Phys. Rev. C*, 80:045806, 2009.
- [134] G. Baym, H. A. Bethe, and C. J. Pethick. *Nucl. Phys. A*, 175:225, 1971.
- [135] G. Baym, C. Pethick, and P. Sutherland. *Astrophys. J.*, 170:299, 1971.

- [136] K. Hebeler, J. M. Lattimer, C. J. Pethick, and A. Schwenk. *Phys. Rev. Lett.*, 105:161102, 2010.
- [137] V. F. Suleimanov, J. Poutanen, D. Klochkov, and K. Wener. *Eur. Phys. J. A*, 52:20, 2016.
- [138] F. Ozel, D. Psaltis, T. Guver, G. Baym, C. Heinke, and S. Guillot. *Astrophys. J*, 820:28, 2016.
- [139] A. W. Steiner, J. M. Lattimer, and E.F. Brown. *Eur. Phys. J*, 52:18, 2016.
- [140] James M Lattimer and Yeunhwan Lim. *The Astrophysical Journal*, 771(1):51, 2013.
- [141] James M Lattimer and Madappa Prakash. *Physics Reports*, 621:127–164, 2016.
- [142] M. Fortin, J. L. Zdunik, P. Haensel, and M. Bejger. *Astron. Astrophys.*, 576:A68, 2015.
- [143] C. J. Horowitz and J. Piekarewicz. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5647, 2001.
- [144] P. Danielewicz, P. Singh, and J. Lee. *Nucl. Phys. A*, 958:147, 2017.
- [145] Guilherme Grams, Alexandre M. Santos, Prafulla K. Panda, Constança Providência, and Débora P. Menezes. *Phys. Rev. C*, 95:055807, 2017.
- [146] G. Grams, S. Giraud, A. F. Fantina, and F. Gulminelli. *Phys. Rev. C*, 97:035807, 2018.
- [147] G. Grams, A. M. Santos, and D. P. Menezes. *Braz. J. Phys.*, 46:111, 2016.

Apêndice C

Publicações

Distribution of nuclei in equilibrium stellar matter from the free-energy density in a Wigner-Seitz cell

G. Grams,¹ S. Giraud,² A. F. Fantina,² and F. Gulminelli³

¹Universidade Federal de Santa Catarina, Brazil

²Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), CEA/DRF - CNRS/IN2P3, Bvd Henri Becquerel, 14076 Caen, France

³LPC (CNRS/ENSICAEN/Université de Caen Normandie), UMR6534, 14050 Caen Cédex, France



(Received 27 September 2017; revised manuscript received 22 December 2017; published 29 March 2018)

The aim of the present study is to calculate the nuclear distribution associated at finite temperature to any given equation of state of stellar matter based on the Wigner-Seitz approximation, for direct applications in core-collapse simulations. The Gibbs free energy of the different configurations is explicitly calculated, with special care devoted to the calculation of rearrangement terms, ensuring thermodynamic consistency. The formalism is illustrated with two different applications. First, we work out the nuclear statistical equilibrium cluster distribution for the Lattimer and Swesty equation of state, widely employed in supernova simulations. Secondly, we explore the effect of including shell structure, and consider realistic nuclear mass tables from the Brussels-Montreal Hartree-Fock-Bogoliubov model (specifically, HFB-24). We show that the whole collapse trajectory is dominated by magic nuclei, with extremely spread and even bimodal distributions of the cluster probability around magic numbers, demonstrating the importance of cluster distributions with realistic mass models in core-collapse simulations. Simple analytical expressions are given, allowing further applications of the method to any relativistic or nonrelativistic subsaturation equation of state.

DOI: 10.1103/PhysRevC.97.035807

I. INTRODUCTION

Most of the methods used to calculate the equation of state (EoS) in the (proto)neutron-star crust and in supernova cores rely on the Wigner-Seitz (WS) approximation. In this framework, matter is divided into cells, each one charge neutral, with a nucleus at the center, surrounded by a gas of free nucleons (neutrons and, at finite temperature, free protons) and electrons. The standard way to calculate the EoS is then to minimize the (free) energy of the system with respect to the atomic and mass number of the nucleus, the volume of the cell (or its radius), and the free nucleon densities, under baryon number and charge conservation (see, e.g., the pioneer works of Refs. [1,2]). If additional structures, like the so-called “pasta” phases, are included, the minimization is also performed on the shape of the cell (see, e.g., the pioneer works of Refs. [3,4]).

Within this WS hypothesis, that is within the single nucleus approximation (SNA), different models to calculate the EoS of clustered matter at finite temperature have been developed, using the (compressible) liquid-drop method (see, e.g., Refs. [5–9]), the (extended) Thomas-Fermi approach (see, e.g., Refs. [10–21]), or more microscopic self-consistent mean-field Hartree-Fock and Hartree-Fock-Bogoliubov models (see, e.g., Refs. [22–27]); see also Ref. [28] for a review. In particular, the two currently most employed EoSs in supernova simulations, namely the Lattimer and Swesty (LS) [8] and the Shen *et al.* [12,14] EoSs, both make use of this WS concept of a unique configuration associated to each thermodynamic condition, given by the baryon density n_B , the temperature T , and the proton fraction Y_p (or, equivalently, the electron fraction Y_e ; because of charge conservation, $Y_e = Y_p$). While for the physics

of “cold” (catalyzed) neutron stars this assumption is correct (in the absence of phase transitions), at finite temperature the approximation of a unique configuration, which is the most favorable from the thermodynamic point of view, has to be seen as an average way to account for the properties of a statistical distribution. Despite this approximation does not change considerably the thermodynamic properties of matter [29], quantitative differences arise in the matter composition, in particular concerning the contribution of light and intermediate mass nuclei. In turn, this impacts the calculation of reaction rates on individual nuclei thus affecting the dynamical processes depending on these rates (see, e.g., Refs. [30–33]).

Recently, efforts have been made to construct EoSs for supernova matter including an ensemble of nuclei, based on the (extended) nuclear statistical equilibrium (NSE) approach, starting with the pioneer works of El Eid, Hillebrandt *et al.* [34,35] (see, e.g., Refs. [36–49]). While standard NSE-based models treat the matter constituents as a mixture of noninteracting ideal gases governed by the Saha equation, neglecting interactions and in-medium effects (see, e.g., the classical textbooks [50,51]), in extended NSE approaches the distribution of clusters is obtained self-consistently under conditions of statistical equilibrium and interactions are taken into account. Indeed, in-medium corrections are known to be particularly important at high density. The way of treating these corrections, as well as other model assumptions such as the choice of the nuclear masses and/or level densities, are also responsible for affecting the thermodynamic quantities and the nuclear composition predicted by different NSE models (see, e.g., Ref. [52]). Moreover, a limitation of the current available EoSs based on the NSE model is that they are given in the form of

tables, thus systematic investigations in numerical simulations varying one or the other nuclear input are difficult to perform.

In this work, we derive a general formalism, based on the work of Ref. [47], to include an extended NSE model at subsaturation density and finite temperature in any approach, either nonrelativistic or relativistic, based on the WS cell approximation, starting from an arbitrary free energy density and including explicit cluster degrees of freedom. In Sec. II we introduce the formalism and the particular application to the LS EoS is presented in Sec. III. Details on the formal derivations are given in Appendices A and B. In Sec. IV we discuss the results obtained employing this formalism in a perturbative way, on the top of the LS EoS, using both the original compressible liquid-drop model and including more microscopic nuclear mass table for the calculation of the nuclear binding energies (Sec. IV A). Finally, in Sec. V, we draw our conclusions and future outlooks.

II. NSE FROM A WIGNER-SEITZ FREE ENERGY

Let us consider an arbitrary model giving the free energy in a WS cell, F_{WS} , as a function of the variational parameters. While at zero temperature a unique realization of the WS cell is expected, at finite temperature different realizations of the WS cell are possible (see, e.g., Ref. [47]). If we consider a very large volume $V \rightarrow \infty$, containing a large number of WS cells, each one with volume $V_C^{(j)}$, such that

$$V(k) = \sum_j N_j(k) V_C^{(j)}, \quad (1)$$

$N_j(k)$ being the number of occurrences of the cell (j) in a configuration $k = \{N_j(k), j = 1, \dots, \infty\}$, the total free energy of the system is given by

$$F_{\text{tot}}(k) = \sum_j N_j(k) F_{WS}^{(j)}. \quad (2)$$

Here, $F_{WS} = F_{WS}(\mathbf{x}_k)$ is the cell free energy, depending on a set $\{\mathbf{x}_k\}$ of variational variables. In the case of an EoS model with cluster degrees of freedom, a typical choice for this set is $\{A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C\}$, A (Z) being the number of baryons (protons) in the cluster and n_{ng} (n_{pg}) the number density of neutrons (protons) in the gas, so that we have $F_{WS} = F_{WS}(A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C)$. The notation $F_{WS}^{(j)}$ thus indicates the value of F_{WS} when the variational variables take the values characteristic of the cell (j), $F_{WS}^{(j)} = F_{WS}(A^{(j)}, Z^{(j)}, n_{ng}^{(j)}, n_{pg}^{(j)}, V_C^{(j)})$. Other choices for the $\{\mathbf{x}_k\}$ set are also possible, and we will explicitly express the problem in terms of the variational variables of the LS EoS subsequently in the paper. In the case of EoSs based on the density functional theory, where the variational variables are the single-particle wave functions, the definition of these cluster variables has to be derived from the model. Typically, one can take $n_{qg} = n_{qg}(r = R_C)$ ($q = n, p$), $A = V_C(n_B - n_{ng} - n_{pg})$, and $Z = V_C(n_B Y_p - n_{pg})$, with R_C the cell radius.

The WS cell free energy, F_{WS} , reads

$$F_{WS} = F_{\text{nuc}} + F_g + F_{\text{lept}} + F_\gamma, \quad (3)$$

and accounts for the contribution of the cluster, the gas, the leptons (electron and possibly positrons and neutrinos), and the photons, respectively. Leptons and photons can be described as a uniform (relativistic) gas, and can be treated separately (see, e.g., Refs. [8, 53, 54] for complete expressions). Therefore, from now on, we will focus only on the (cluster plus gas) baryon contribution, whose total free energy can be written as

$$F_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) [F_{\text{nuc, vac}}^{(j)} + \mathcal{F}_g^{(j)} V_C^{(j)} + \delta F^{(j)}], \quad (4)$$

where \mathcal{F}_g is the free energy density of homogeneous nuclear matter with neutron and proton density (n_{ng}, n_{pg}), $F_{\text{nuc, vac}}$ is the free energy of a cluster (A, Z) in vacuum, and δF accounts for the in-medium contributions. The latter may include Coulomb screening and surface terms, and possibly contributions due to the excluded-volume approximation if the original model employs this scheme. Including all in-medium effects in the cluster contribution, one can define $F_{\text{nuc}} = F_{\text{nuc, vac}} + \delta F$. In the SNA, for each thermodynamic condition (n_B, T, Y_p), the variational variables are determined by minimizing the total free energy density under the constraints of mass and charge conservation. The associated values of A and Z have therefore to be interpreted as the nucleus contained in the most probable cell among the different possibilities (j) at the given thermodynamic conditions, and will be noted ($(A)_j = A_{\text{SNA}}, (Z)_j = Z_{\text{SNA}}$). However, in a full thermodynamic treatment of Eq. (4), the variational variables are given by the set $N_j(k)$, and the variation gives the average occupation $\langle N_j \rangle_k$ over the different configurations k , or equivalently the probability $\langle p_j \rangle_k \equiv p_j$. As a result, one does not get a single $A = A_{\text{SNA}}, Z = Z_{\text{SNA}}$ value, but a distribution of possible ($A^{(j)}, Z^{(j)}$) configurations with probability p_j .

In order to calculate the probability p_j , it is convenient to work in the grand-canonical ensemble. In this framework, one can construct the grand-canonical partition sum associated to the free energy F_{bar} , starting from the Gibbs free energy of the baryon component

$$G_{\text{bar}}(k) = F_{\text{bar}}(k) - \sum_j N_j(k) (\mu_n N_{WS}^{(j)} + \mu_p Z_{WS}^{(j)}), \quad (5)$$

where μ_n (μ_p) is the neutron (proton) chemical potential. We refer to Appendix A for the proof that the neutron and proton chemical potentials correspond in fact to those of the gas, i.e., $\mu_n = \mu_{ng}$ and $\mu_p = \mu_{pg}$, and do not depend on the realization (k). The total numbers of neutrons (protons) in the WS cell (j), $N_{WS}^{(j)}$ ($Z_{WS}^{(j)}$), are given by

$$N_{WS}^{(j)} = N^{(j)} + n_{ng} V_C^{(j)}, \quad (6)$$

$$Z_{WS}^{(j)} = Z^{(j)} + n_{pg} V_C^{(j)}. \quad (7)$$

Notice that the gas densities do not depend on the cell (j), since the gas is uniform over the whole volume. If this condition were not satisfied, discontinuities in the gas densities would arise at the cell interface. Therefore, also the chemical potentials of the gas, μ_n and μ_p , do not depend on the cell (j). The conservation equations, Eqs. (6),(7), have to be modified if the considered EoS employs excluded-volume effects. This is easily done by introducing the number of nucleons in the dense region of

space, N_r and Z_r , and by replacing in all equations $N \rightarrow N_r - n_{ng} V_N$, $Z \rightarrow Z_r - n_{pg} V_N$ (thus $A_r = N_r + Z_r$), with V_N the cluster volume. This will be explicitly worked out in the next section on the example of the LS model.

Replacing the conservation equations into Eq. (5), we get

$$G_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) [F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)}] + V[\mathcal{F}_g - \mu_n n_{ng} - \mu_p n_{pg}]. \quad (8)$$

In principle the gas densities n_{ng}, n_{pg} , though uniform throughout the total volume V , could depend on the realization (k) through the occupation $N_j(k)$. It is however easy to check that this cannot be the case if we keep the hypothesis that each cell (j) is electrically neutral, as it has to be to avoid Coulomb interactions between the different cells.

Equation (8) defines the Gibbs free energy of the cluster and the Gibbs free energy density of the gas

$$G_{\text{nuc}}^{(j)} = F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)}, \quad (9)$$

$$\mathcal{G}_g = \mathcal{F}_g - \mu_n n_{ng} - \mu_p n_{pg}. \quad (10)$$

The explicit expressions of \mathcal{F}_g and $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ depend on the particular model employed. In particular, if the EoS is obtained through a density functional model, $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ depends on the density. In that case, because of the baryon number and charge conservation laws,

$$n_B = \frac{\sum_j N_j(k) A^{(j)}}{V} + n_g, \quad (11)$$

$$n_p = \frac{\sum_j N_j(k) Z^{(j)}}{V} + n_{pg}, \quad (12)$$

n_p being the total proton number density and $n_g = n_{ng} + n_{pg}$, $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ implicitly depends on $N_j(k)$ through its density dependence. This introduces a self-consistency problem, which does not arise for instance if $F_{\text{nuc}}^{(j)}$ is obtained through a standard (i.e., noncompressible) liquid-drop model without any density dependence. In the general case of a density-dependent free energy, a rearrangement term has to be added. The effective one-body equivalent free energy is given by

$$\tilde{F}_{\text{nuc}}^{(j)} = \frac{\partial \langle F_{\text{bar}} \rangle_k}{\partial \langle N_j \rangle_k} = F_{\text{nuc}}^{(j)} + \langle N_j \rangle_k \left. \frac{\partial F_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \right|_{n_{ng}, n_{pg}, \langle N_i \rangle_{k, i \neq j}} \quad (13)$$

with $\langle F_{\text{bar}} \rangle_k = F_{\text{bar}}(\{\langle N_j \rangle_k\})$. Notice that in the partial derivative the gas component does not appear, because the term $\sum_j N_j(k) \mathcal{F}_g V_C^{(j)} = V \mathcal{F}_g$ in Eq. (4) does not depend on $N_j(k)$, since the gas is homogeneous over the different cells.

The total effective Gibbs free energy of the baryon component becomes

$$\tilde{G}_{\text{bar}}(k) = \sum_j N_j(k) \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} + \mathcal{G}_g V \quad (14)$$

with

$$\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} = \frac{\partial \langle G_{\text{bar}} \rangle_k}{\partial \langle N_j \rangle_k} = G_{\text{nuc}}^{(j)} + \langle N_j \rangle_k \left. \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \right|_{n_{ng}, n_{pg}, \langle N_i \rangle_{k, i \neq j}}. \quad (15)$$

Introducing the grand-canonical partition function associated to the independent cluster problem (plus gas),

$$\tilde{Z}_{\beta\mu_n\mu_p} = \sum_k \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{bar}}(k)), \quad (16)$$

where $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B being the Boltzmann constant, shows that in the thermodynamic limit the partition sum of the cluster, \tilde{Z}_{nuc} , and that of the gas, $z_{\beta\mu_n\mu_p}$, can be factorized as

$$\tilde{Z}_{\beta\mu_n\mu_p} = \tilde{Z}_{\text{nuc}}(z_{\beta\mu_n\mu_p})^V. \quad (17)$$

The partition sum of the cluster thus reads

$$\tilde{Z}_{\text{nuc}} = \sum_k \exp\left(-\beta \sum_j N_j(k) \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}\right), \quad (18)$$

and, thanks to this factorization, one can follow the standard derivation of thermodynamics of an ideal classical gas for the cluster component:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{\text{nuc}} &= \prod_j \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}))^n}{n!} \\ &= \prod_j \exp(w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)}), \end{aligned} \quad (19)$$

where $w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)} \equiv \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})$. In this way, similarly to Eq. (110) in Ref. [47], one recovers a NSE-like expression for the cluster multiplicities

$$\langle N_j \rangle_k = \frac{\partial \ln \tilde{Z}_{\text{nuc}}}{\partial (\beta \mu_j)} = w_{\beta\mu_n\mu_p}^{(j)} = \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}), \quad (20)$$

where $\mu_j = (\mu_n + \mu_p) A^{(j)}$. Finally, we can express the cluster probability as

$$P_j = \frac{\langle N_j \rangle_k}{\sum_j \langle N_j \rangle_k} = \frac{\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})}{\sum_j \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)})}. \quad (21)$$

Note that the functional form of Eq. (20) is formally equivalent to the classical grand-canonical formulation (see, e.g., Refs. [51, 55]). However, it has to be stressed that the correspondence between the canonical and grand-canonical formulation is only possible if one writes the Gibbs free energy as Eq. (15).

We turn now to the calculation of the rearrangement term. As already noticed in Sec. III C of Ref. [47], this term is expected to be small and was neglected in Ref. [47]. However, as we will show in Sec. III, the effect of the rearrangement term can be non-negligible and, indeed, this term is necessary to recover the correct SNA results in all density domains.

As we have already noticed, the dependence of $G_{\text{nuc}}^{(j)}$ on $\langle N_j \rangle_k$ arises from the dependence on the total density, which induces a constraint among the $\langle N_j \rangle_k$ variables, see Eq. (12). Because of the condition of charge neutrality in each cell, $n_p = Z^{(j)}/V_C^{(j)} + n_{pg}$, this can be seen as a dependence on the cell volume $V_C^{(j)}$.

The rearrangement term can thus be expressed as

$$\langle N_j \rangle_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} = -V_C^{(j)} \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \frac{\langle N_j \rangle_k V_C^{(j)}}{V}. \quad (22)$$

We can see that $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$ explicitly depends on $\langle N_j \rangle_k$, meaning that Eq. (21) is in reality a self-consistent equation. Since the rearrangement correction is supposed to be small (we will quantify this statement in the next section on the specific example of the LS EoS), we make an approximation in order to avoid the complication of a self-consistent resolution of Eq. (21). We first remark from Eqs. (9) and (15) that $\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)}$ should be proportional to $A^{(j)}$. We therefore single out the $A^{(j)}$ dependence from Eq. (22) and average the rest of the expression over the different cells. Using $V_C^{(j)} = A^{(j)}/(n_B - n_g)$, and observing that $\langle (N_j)_k V_C^{(j)} \rangle_j = V$, we get

$$\langle N_j \rangle_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial \langle N_j \rangle_k} \approx -V_C^{(j)} \left\langle \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \right\rangle_j = -\frac{A^{(j)}}{n_B - n_g} \left\langle \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial V_C^{(j)}} \right\rangle_j. \quad (23)$$

In this expression, $\langle \partial G_{\text{nuc}}^{(j)} / \partial V_C^{(j)} \rangle_j$ is the most probable value of the function $\partial G_{\text{nuc}} / \partial V_C$ among the different cells, and should be taken from the original SNA model.

The final expression for the effective Gibbs energy, Eq. (15), is then

$$\tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} = G_{\text{nuc}}^{(j)} - \frac{A^{(j)}}{n_B - n_g} \left(\frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial V_C} \right)_{\text{SNA}}, \quad (24)$$

which together with Eqs. (9) and (21) completes the model.

With the choice $\{\mathbf{x}_k\} = \{A, Z, n_{ng}, n_{pg}, V_C\}$, Eq. (21) becomes a probability distribution for the different clusters of size (A, Z) as

$$p(A, Z) = \frac{\exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z))}{\sum_{A, Z} \exp(-\beta \tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z))}, \quad (25)$$

where the gas variables n_{ng}, n_{pg} are taken from the SNA model, and the cell volume is obtained for each cluster from the neutrality condition

$$V_C = \frac{Z}{n_B Y_p - n_{pg}}. \quad (26)$$

It has been already discussed in Ref. [47] that one can recover the SNA expression by minimizing the free energy density under the mass and charge conservation constraints, by using an auxiliary function. We will not redo the general demonstration here, but we will apply this procedure in Appendix B for the specific case of the LS EoS, thus showing that the most probable cluster which maximizes p_j (or, equivalently, minimizes \tilde{G}_{nuc}), coincides with the (unique) cluster predicted by the LS equations.

III. DISTRIBUTION OF NUCLEI FROM THE LATTIMER AND SWESTY EQUATION OF STATE

The LS EoS [8] models matter as a mixture of a single species of heavy nuclei (representing the average of a full ensemble of heavy nuclei), α particles (representative of light nuclei), and free neutrons and protons, immersed in a uniform noninteracting gas of leptons and photons. At low density, nuclei are considered as spherical, at the center of a charge-neutral spherical cell and surrounded by a less dense vapor of neutrons, protons, and α particles,

as well as electrons, positrons, and photons, in the WS approximation. For nucleons, either inside the nucleus or in the gas, a simplified nucleon-nucleon interaction of Skyrme type is employed. α particles are described as hard spheres of volume $v_\alpha = 24 \text{ fm}^3$ obeying an ideal Boltzmann gas statistics. Interaction between heavy nuclei and the gas of α particles and nucleons are treated in an excluded-volume approach. With increasing density, shape deformations of nuclei (nonspherical nuclei and bubble phases) are taken into account by modifying the Coulomb and surface energies, and the transition to uniform matter is described by a Maxwell construction (see Ref. [8] for more details). The original LS EoS routine, which is also used in the present paper, is available at <http://www.astro.sunysb.edu/dswesty/leos.html> (more recent EoSs in tabular form are given at <http://www.astro.sunysb.edu/lattimer/EOS/main.html>). There exist three parametrizations of the LS EoS routine, according to the value of the incompressibility of the underlying nuclear interaction ($K = 180, 220$, and 375 MeV). For the numerical applications done in the present paper, we use the parametrization with $K = 220 \text{ MeV}$. Note that a minor correction has been done with respect to the original code. Indeed, it has been recognized (see, e.g., Ref. [56]) that the original LS EoS underestimated the fraction of α particles, because the α particle binding energy, B_α , has to be measured with respect to the neutron mass, as all other energies (see, e.g., Ref. [57]).

For every baryon density n_B , temperature T , and electron (or proton) fraction Y_e , the EoS is obtained by minimizing the cell Helmholtz free energy density. As discussed in Sec. II, the nonbaryonic components of the free energy density can be treated separately, and have no role in the equilibrium equations. The chosen seven independent variables of the system in the LS EoS are $\{x_k\} = \{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{no}, n_{po}\}$, where n_i and x_i are the nucleon density and proton fraction inside the nucleus, respectively, $u = V_N/V_C$ is the fraction of the WS cell volume occupied by nuclei (V_N being the volume of the nucleus), r_N is the nuclear radius (such that $V_N = 4\pi r_N^3/3$), n_α, n_{no} , and n_{po} are the number density of the α particles, and of the neutrons and protons in the outside gas, respectively. However, because of charge neutrality and baryon conservation, the number of independent variables is reduced to five. The minimization is done by taking partial derivatives of the free energy with respect to the remaining five independent variables, thus yielding a system of equilibrium equations (see Eqs. (3.2) in Ref. [8]). This procedure is equivalent to the minimization of the free energy density with respect to all variational variables applying the canonical constraints as Lagrange multipliers, as shown in Appendix B.

However, to construct a NSE with a distribution of nuclei starting from the free energy density of the LS EoS, one has to work in the grand-canonical ensemble. Following the procedure explained in Sec. II and in Appendix A, and noting that the gas contribution to the free energy density can be divided into the contribution coming from α particles, \mathcal{F}_α , and that of the nucleons outside the nucleus, \mathcal{F}_o , the Gibbs free energy of the cluster, Eq. (9), and the Gibbs free energy density of the gas (that of the nucleons in the gas, \mathcal{G}_o , and that

of α particles, \mathcal{G}_α , Eq. (10), in each cell (j), read

$$G_{\text{nuc}}^{(j)} = F_{\text{nuc}}^{(j)} - \mu_n N^{(j)} - \mu_p Z^{(j)}, \quad (27)$$

$$\mathcal{G}_o = \mathcal{F}_o - \mu_n n_{no} - \mu_p n_{po}, \quad (28)$$

$$\mathcal{G}_\alpha = \mathcal{F}_\alpha - \mu_\alpha n_\alpha, \quad (29)$$

where μ_α is the chemical potential of α particles. Using the LS variables,¹ the free energy of the cluster, F_{nuc} , that contains the in-medium corrections (including the excluded-volume terms), can be written as

$$F_{\text{nuc}} = V_N [n_i (f_b + f_{sc} + f_H) - f_\alpha n_\alpha - (1 - n_\alpha v_\alpha) n_o f_o] - n_\alpha v_\alpha n_o f_o V_C, \quad (30)$$

where f_b , f_{sc} , and f_H are the bulk, the finite size (surface and Coulomb), and the translational contributions to the free energy per baryon, respectively, and $n_o = n_{no} + n_{po}$. In this expression, the dependence on the cell is given by the cluster variables, i.e., $\{n_i, x_i, V_N, u\} = \{n_i^{(j)}, x_i^{(j)}, V_N^{(j)}, u^{(j)}\}$ and the cell volume $V_C = V_C^{(j)}$, since α particles and free nucleons are assumed uniform in the different cells.

The cluster neutron and proton numbers in each cell (j), $N^{(j)}$ and $Z^{(j)}$, fulfilling the conservation equations

$$n_B = \frac{A}{V_C} + 4n_\alpha + n_o, \quad (31)$$

$$n_p = \frac{Z}{V_C} + 2n_\alpha + n_{po}, \quad (32)$$

are given by

$$N = V_N \left[(1 - x_i) n_i - n_{no} - 2n_\alpha - n_{no} v_\alpha n_\alpha \frac{1-u}{u} \right], \quad (33)$$

$$Z = V_N \left[x_i n_i - n_{po} - 2n_\alpha - n_{po} v_\alpha n_\alpha \frac{1-u}{u} \right] \quad (34)$$

with $A = N + Z$. Notice that because of the excluded volume, these numbers do not represent the number of nucleons in the dense phase, the latter being given, for each cell (j), by $A_r = n_i V_N$, $Z_r = x_i n_i V_N$.

To calculate the rearrangement term, we work out explicitly the expression of Eq. (22). The charge conservation law is written for LS variables as

$$n_p = \frac{\sum_j (N_j)_k V_N^{(j)} (x_i^{(j)} n_i^{(j)} - n_{pg})}{V} + n_{pg} \quad (35)$$

with the short-hand notation $n_{pg} = 2n_\alpha + n_{po}(1 - n_\alpha v_\alpha)$.

As in the general derivation, the definition of n_p , Eq. (35), breaks the independence among the cell occupations $N_j(k)$. In turn, this induces a self-consistency problem because the Gibbs free energy G_{nuc} depends on n_p through the Coulomb and surface term. Writing the charge conservation in the single WS cell:

$$n_p = u(x_i n_i - n_{pg}) + n_{pg}, \quad (36)$$

we can see that it is more convenient to change variables in Eq. (22) from V_C to $u = V_N/V_C$.

The rearrangement term then reads

$$\langle (N_j)_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial (N_j)_k} = \langle (N_j)_k \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial u^{(j)}} \frac{\partial u^{(j)}}{\partial n_p} \frac{\partial n_p}{\partial (N_j)_k} \rangle. \quad (37)$$

Using $n_i = A_r/V_N$, we can single the dependence on the cluster size out of this expression, and average the rest of this term with respect to the different cells. The one-body Gibbs free energy, Eq. (24), can finally be written as

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z) &= G_{\text{nuc}}(A, Z) + A_r^{(j)} \left\langle \frac{(N_j)_k}{n_i^{(j)} V} \frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial u} \right\rangle_j \\ &= G_{\text{nuc}}(A, Z) + A_r^{(j)} \left(\frac{u}{n_i V_N} \frac{\partial G_{\text{nuc}}}{\partial u} \right)_{\text{SNA}}, \end{aligned} \quad (38)$$

where the quantities within the brackets $\langle \rangle_j$ have to be calculated for the most probable nucleus as given by the standard solution of the LS equations (see Appendix B).

To verify the thermodynamic consistency of the approach we can check that the most probable configuration given by the NSE coincides with the LS representative cluster. To this aim, one has to minimize the exponent in Eq. (20), i.e., the Gibbs free energy, Eq. (38). For a better readability of the paper, the LS equations defining the representative configuration in the SNA are explicitly rederived in Appendix B.

Note that, in the grand-canonical ensemble, the density of the outside gas, i.e., that of the free neutrons and protons and that of alpha particles, are fixed by their chemical potentials (see Appendix A):

$$n_{qo} = \frac{\partial g_o}{\partial \mu_{qo}}; \quad n_\alpha = \frac{\partial g_\alpha}{\partial \mu_\alpha}, \quad (39)$$

where $q = n, p$ and g_o (g_α) is the Gibbs free energy per baryon of the nucleons in the outside gas (of the α particles). Moreover, we further notice that the model requires n_B [as well as n_p , see Eq. (32)] to be the same in each WS cell. Therefore, different ions in the cell, in the NSE approach, can have different baryon number A (the gas baryon number being uniform in the whole volume and the same in each cell) and different volume V_N , keeping n_B , Eq. (31), constant. Equation (31) thus fixes V_C , or equivalently u . With these constraints, Eqs. (31), (32), and (39), the seven independent variables on which the minimization has to be done are reduced to three, namely, (n_i, x_i, r_N) . Calculating the partial derivatives of the effective Gibbs free energy yields

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{nuc}}}{\partial n_i} \right|_{x_i, r_N} &= 0, \text{ that can be written as} \\ \mu_{bi} &+ \frac{2}{3} \frac{\beta \mathcal{D}}{n_i u} + \frac{1-u}{A_0} h \mu_H = \mu_{no}(1-x_i) + \mu_{po} x_i, \end{aligned} \quad (40)$$

where $\mu_{bi} = (1-x_i)\mu_{ni} + x_i\mu_{pi}$, μ_{ni} and μ_{pi} are the chemical potentials of the neutrons and protons inside the nucleus, and $\beta \mathcal{D} = \mathcal{F}_c + \mathcal{F}_s$ is the sum of the Coulomb and surface free energy density (see Eq. (2.39) in [8]). The constant A_0 in the translational free energy term has been taken equal to 60 in [8], $h \equiv$

¹Note that, unlike Ref. [8], we use capital letters for the energy, e.g., F for the free energy, \mathcal{F} for the free energy density, and small letters for the energy per baryon, e.g., f for the free energy per baryon.

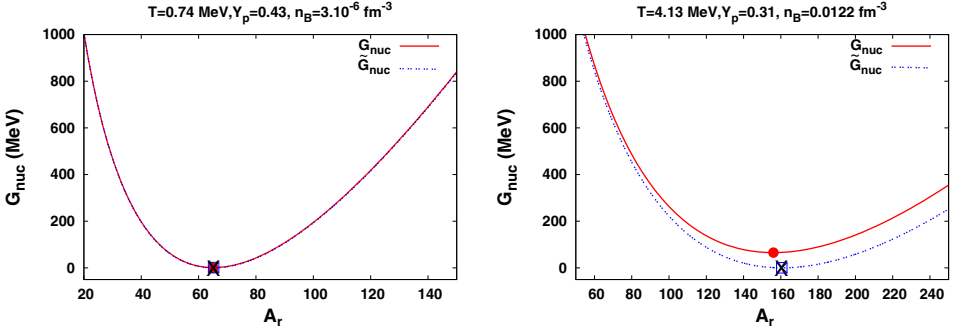


FIG. 1. Nuclear contribution to the Gibbs free energy, with and without the rearrangement term, for two different thermodynamic conditions, as a function of the number of nucleons in the dense phase A_r : $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_e = Y_p = 0.43$ (left panel) and $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_e = Y_p = 0.31$ (right panel). The fraction $x_i = Z_i/A_r$ is fixed to the one of the most probable nucleus. The dots (squares) correspond to the most probable nucleus obtained without (with) the rearrangement term; the crosses indicate the A_r of the average nucleus obtained with the LS EoS. See text for details.

$h(x_i, T)$ is a temperature-dependent function entering in the surface free energy (see Eq. (2.28) in [8]), and μ_H is the translational contribution to the chemical potential (see Eq. (2.43) in [8]).

$$(ii) \left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{nuc}}}{\partial x_i} \right|_{n_i, r_N} = 0, \text{ that gives}$$

$$\begin{aligned} \mu_{ni} - \mu_{pi} - \frac{2}{3} \frac{\mathcal{D}\beta}{n_i u} \left(\frac{1}{x_i} + \frac{\sigma'}{\sigma} \right) - \frac{1-u}{A_0} h'(\mu_H - T) \\ = \mu_{no} - \mu_{po}, \end{aligned} \quad (41)$$

where $\sigma \equiv \sigma(x_i, T)$ entering the surface term of the free energy is defined in Eq. (2.27) in LS [8], $\sigma' \equiv \partial \sigma / \partial x_i$, and $h' \equiv \partial h / \partial x_i$. Note that combining Eqs. (40) and (41) yields Eqs. (3.2b),(3.2c) in [8], see Appendix B.

$$(iii) \left. \frac{\partial \tilde{G}_{\text{nuc}}}{\partial r_N} \right|_{n_i, x_i} = 0. \text{ Noting that minimizing } \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} \text{ with respect to } r_N \text{ is equivalent to minimize } \tilde{G}_{\text{nuc}}^{(j)} \text{ with respect to the nuclear volume } V_N \text{ yields}$$

$$\frac{\partial (\mathcal{F}_s + \mathcal{F}_c)}{\partial V_N} = 0 \quad \& \quad \frac{G_{\text{nuc}}}{V_N} + \left\langle \frac{u}{V_N} \frac{\partial G_{\text{nuc}}^{(j)}}{\partial u} \right\rangle = 0. \quad (42)$$

The first condition in Eq. (42) gives the equilibrium equation for r_N , or, equivalently, for n_i [see Eq. (2.38) in LS [8] and Appendix B, Eq. (B9)],

$$n_i = \frac{5}{2} \frac{A_r \sigma}{Z_r^2 e^2} \left(\frac{u(1-u)}{\mathcal{D}} \right)^3, \quad (43)$$

e being the elementary charge. Using Eq. (40) and the expression for μ_α , Eq. (B11), together with the thermodynamic relation among the pressure P , the free energy density \mathcal{F} , and the chemical potential μ of a species with density n , $P = -\mathcal{F} + \mu n$, applied to

the pressure of the gas, P_o , that of the alpha particles, P_α , and that of the nucleons inside the nucleus, P_i , the second condition in Eq. (42) becomes

$$P_i + \beta \left(\frac{2\mathcal{D}}{3u} - \mathcal{D}' \right) + \frac{n_i u}{A_0} h \mu_H = P_o + P_\alpha \quad (44)$$

with $\mathcal{D}' \equiv \partial \mathcal{D} / \partial u$. This expression is equivalent to Eq. (3.2d) of LS [8], see Appendix B, Eq. (B14). Note that the term accounting for the binding energy of α particles, B_α , does not appear in our Eq. (B11) since the chemical potentials in our definition include the rest mass. The introduction of the rearrangement term is indeed required to get the equivalence of the results obtained in the canonical and grand-canonical approach, and therefore the thermodynamic consistency of the approach.

The effect of the rearrangement term is analyzed in Fig. 1, where we display the nuclear part of the Gibbs free energy, Eq. (38), for two typical conditions of density, temperature, and proton fraction encountered in the collapsing core of a supernova. The minimum of each curve represents the most probable cluster, obtained with or without the rearrangement term. The crosses correspond to the average single nucleus calculated in the LS EoS, while the dot (square) symbols mark the most probable nucleus calculated with the NSE approach without (with) the rearrangement term. The latter acts in a more significant way at higher density and temperature. Indeed, while no noticeable difference is observed at lower densities (left panel), only including this term allows one to correctly reproduce the LS most probable nucleus for higher densities (right panel).

IV. RESULTS

We present in this section the results obtained with the extended NSE model, implemented in perturbation on the top

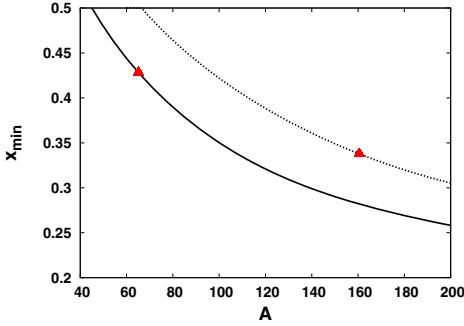


FIG. 2. Ratio $x_i = Z/A$ corresponding to the minimum of \tilde{G}_{nuc} at a fixed A , as a function of A , for two thermodynamic conditions: $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$ (solid line) and $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$ (dashed line). Triangles indicate the values obtained with the LS EoS.

of the LS EoS. This means that, for a given thermodynamic condition, the calculation of the EoS and composition is done in two steps: (i) first, we run the LS analytical routine thus obtaining the SNA results, (ii) then, varying A and Z , we calculate n_i solving Eq. (43) and $\tilde{G}_{\text{nuc}}(A, Z)$, Eq. (38), as explained in Sec. II, thus the probability $p(A, Z)$, Eq. (25), associated to each cluster (A, Z) .² In this way, we can also compare the most probable nucleus in the NSE model (i.e., the one that minimizes \tilde{G}_{nuc}) with the SNA one. The resolution of Eq. (43) for n_i is done using the root finder routine `broyn` from the Numerical Recipes [58], which employs the Broyden's method.³

We start by showing, in Fig. 2, the $x_i = Z/A$ ratio corresponding to the minimum of \tilde{G}_{nuc} , as a function of A . As an illustrative example, we have chosen two thermodynamic conditions likely to be met during the infall phase of the supernova core collapse: $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$ (solid line) and $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$ (dashed line). These numbers, as well as other conditions explored below, are taken from a collapse trajectory followed by the innermost region of the star. The thermodynamic conditions for the latter have been obtained with a one-dimensional hydrodynamic code in general relativity with a neutrino leakage-type scheme [59–61], starting from a $40M_{\odot}$ progenitor from Woosley *et al.* [62]. The considered collapse trajectory stops before bounce, before nuclei dissociate in favor of homogeneous matter. Triangles indicate the (x_i, A) values

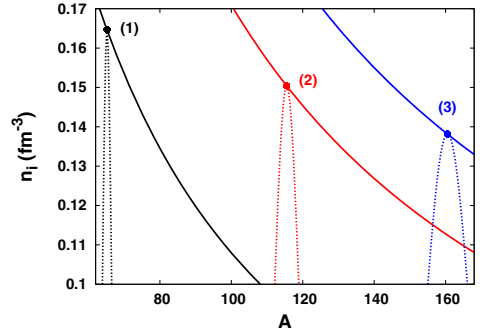


FIG. 3. Baryon number density inside the nucleus, n_i , versus A for three thermodynamic conditions: (1) $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (2) $n_B = 2 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.3 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.34$, and (3) $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. Solid lines correspond to the solution of Eq. (43), dots correspond to n_i for the average nucleus predicted by the LS EoS, and dashed lines represent the cluster distribution (in arbitrary units).

obtained from the original LS model (that is, within the SNA) for the same thermodynamic conditions: $x_{i,\text{LS}} = 0.43$, $A_{\text{LS}} = 65$ and $x_{i,\text{LS}} = 0.34$, $A_{\text{LS}} = 161$, respectively. One can notice that the behavior of x_i is sensitive to the nuclear distribution, changing of about 50% when A varies from about 50 to 200, and it can be quite different from the value predicted by the LS for the same input variables (n_B, T, Y_e), when the nuclear mass number A is different from the LS one.

In Fig. 3, we plot the number density inside the nucleus, n_i , as calculated by solving Eq. (43), versus A , for a fixed $x_i = (x_i)_{\text{SNA}}$ equal to that obtained by the LS EoS, for three representative thermodynamic conditions taken from the collapse trajectory: (1) $n_B = 3 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.74 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (2) $n_B = 2 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.3 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.34$, and (3) $n_B = 1.22 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$, $T = 4.13 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. Dashed lines represent the cluster distribution (in arbitrary units), while dots correspond to $(n_i)_{\text{SNA}}$ for the average single nucleus predicted by the LS EoS. We notice that the most probable nucleus, which is identified by the peak of the cluster distribution, coincides with that predicted by the LS EoS, both having the same density n_i , for the three conditions. We also note that the density inside the nucleus decreases with A ; because of mass conservation, Eq. (B5), this is compensated by an increase of the density of the outside gas, n_o , and that of α particles, n_α . Moreover, increasing density and temperature, from condition (1) to (3), yields to an increase of the average cluster mass number and of the width of the distribution.

To better compare the NSE results with the SNA ones, we show in Fig. 4 the cluster Z versus N distribution (panel b), for a chosen thermodynamic condition: $n_B = 8.6 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.83 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.36$. The contour plot displays the cluster probabilities (red to blue, more to less abundant), while the black dot corresponds to the LS average nucleus, $Z_{\text{SNA}} = 38$, $N_{\text{SNA}} = 62$. This shows

²In this section, in the spirit of the LS EoS, we define A and Z as the baryon and proton numbers of the dense phase, $A = V_N n_i$, $Z = A x_i$.

³Note that the solution may be sensitive to the convergence criterion, thus the numerical precision required in the root finder. Although we have found that the resulting value of the most probable Z or N may vary up to two units for a few of the thermodynamic conditions explored below, the robustness of our results is not affected and our conclusions remain unchanged.

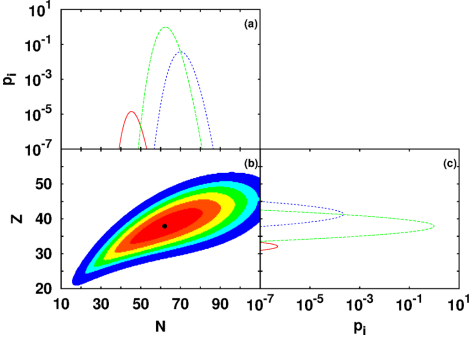


FIG. 4. Distribution of nuclei predicted by the NSE model for the thermodynamic condition $n_B = 8.6 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.83 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.36$. (b) shows the contour plot of the cluster probabilities (red to blue, from more to less abundant), while the black dot corresponds to the average nucleus ($Z_{\text{SNA}} = 38$, $N_{\text{SNA}} = 62$) obtained with the LS EoS. (a) displays the probability distributions for $Z = 32, 38$, and 41 (from left to right curve), while (c) displays the probability distribution for $N = 40, 62$, and 80 (from bottom to top curve).

that our extended NSE reproduces the SNA results, having the advantage to take into account a full distribution of nuclei. The smooth cluster distribution with a single-centered peak also points out the absence of shell effects. Panels (a) and (c) illustrate the probability distribution, $p(A, Z)$ (in arbitrary units), for different cuts in $Z = 32, 38, 41$ [panel (a), from left to right], and $N = 40, 62, 80$ [panel (c), from bottom to top], respectively. The center (green) curves in panels (a) and (c) correspond to the most probable nucleus, which coincides again with the SNA result.

A. Inclusion of a microscopic nuclear mass model

One of the limit of the compressible liquid-drop model employed in the LS EoS is the absence of pairing and shell effects, that are responsible for the emergence of magic numbers and impact the cluster distribution, especially at relatively low density and temperature (see, e.g., Refs. [38,47,52]). Indeed, shell and pairing effects are expected to be washed out only at a temperature of a few MeV. To take these effects into account, either experimental or theoretical mass models have to be implemented. However, in core-collapse supernovae, the electron capture drives nuclei towards the neutron-rich side, where experimental mass measurements are no longer available and theoretical extrapolations need to be considered. Therefore, we have included in our perturbative extended NSE nuclear binding energies from a theoretical mass model. To this aim, we have redefined the cluster Gibbs free energy, replacing the contribution corresponding to the nuclear binding energy in the compressible liquid-drop model, G_{LS}^0 , with the theoretical calculated binding energy, E_{bind} :

$$\tilde{G}_{\text{nuc}} = \tilde{G}_{\text{nuc,LS}} - G_{\text{nuc,LS}}^0 + E_{\text{bind}}, \quad (45)$$

where $\tilde{G}_{\text{nuc,LS}}$ corresponds to the nuclear contribution to the Gibbs free energy as calculated in Eq. (38), and $G_{\text{nuc,LS}}^0$ is the same quantity evaluated at $T = 0$ and with $n_\alpha = n_\alpha = n_e = 0$ (n_e being the electron number density), i.e., the bulk plus surface (at zero temperature) and Coulomb (without the screening correction) term. As for the theoretical mass model, we have employed the Brussels-Montreal microscopic mass model⁴ HFB-24 [63]. This model, based on the self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov method using a 16-parameter generalized Skyrme effective nucleon-nucleon interaction with a realistic contact pairing force, fits the 2353 measured masses of

⁴The mass table for this model is available on the BRUSLIB database at <http://www.astro.ulb.ac.be/bruslib/>.

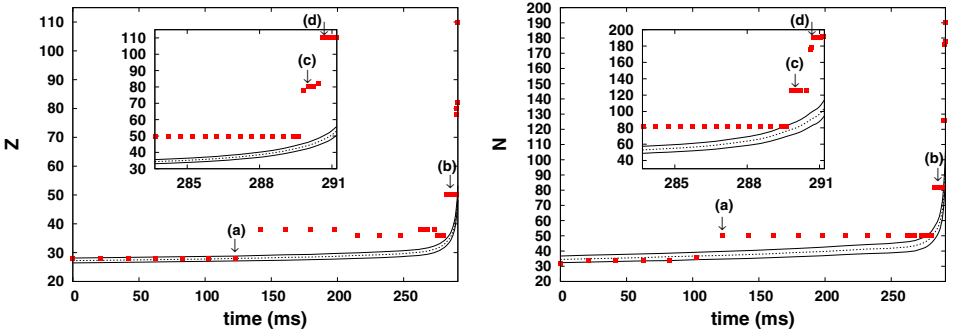


FIG. 5. Z (left panel) and N (right panel) along the collapse trajectory (time is given in milliseconds), at the center of the star. Dashed lines correspond to the most probable Z (left panel) and N (right panel) obtained with the LS mass functional, while solid lines correspond to the variance. Red dots represent the most probable Z (left panel) and N (right panel) obtained implementing the HFB-24 mass model. Insets show a zoom of the final part of the plot. Arrows indicate four chosen points along the trajectory before the core bounce. See text for details.

nuclei with N and $Z \geq 8$ appearing in the 2012 Atomic Mass Evaluation (AME) [64] with a root-mean square deviation of 0.5 MeV. Moreover, it is also compatible with other various experimental and astrophysical constraints [65]. Note that, in the mass table, atomic mass excess are tabulated; once atomic masses, $M_{\text{at}}(A, Z)$, are known, nuclear masses, M_{nuc} , can be calculated as

$$M_{\text{nuc}}(A, Z) = M_{\text{at}} - Zm_e c^2 + B_{\text{el}}(Z), \quad (46)$$

where m_e is the electron mass and $B_{\text{el}}(Z)$ is the total binding energy of all Z removed electrons (see Appendix A in Ref. [66]).

To illustrate the effect of employing such a mass table instead of the simplified LS functional on the composition during the supernova core collapse, we have plotted in Fig. 5 the evolution of Z (left panel) and N (right panel) for given thermodynamic conditions along the collapse trajectory in the center of the star; the increasing time (given in milliseconds) on the x axis corresponds to a simultaneous increase of density

and temperature. The dashed lines correspond to the most probable Z (left panel) and N (right panel) calculated with the extended NSE model built on the top of the original LS EoS, thus keeping the nuclear masses as in the original compressible liquid-drop model; solid lines represent the variance of Z and N and give the width of the distribution. We note that the spread in the nuclear distribution increases with time, i.e., with density and temperature. The most probable Z (N) obtained when the HFB-24 mass model is employed instead of the original mass model implemented in the LS EoS are displayed by dots in the left (right) panel. We can clearly notice the emergence of shell structure and magic numbers: in the first phase of collapse, clusters with $Z = 28$ dominate, while in subsequent stages of collapse, clusters with N around 50 first and then with $N = 82, 126$ prevail. At this point of collapse, remarkable differences in the composition can be observed when one or the other model is used. Indeed, as already noticed, e.g., in Ref. [52], the use of different mass models and the presence (or absence) of shell effects impact

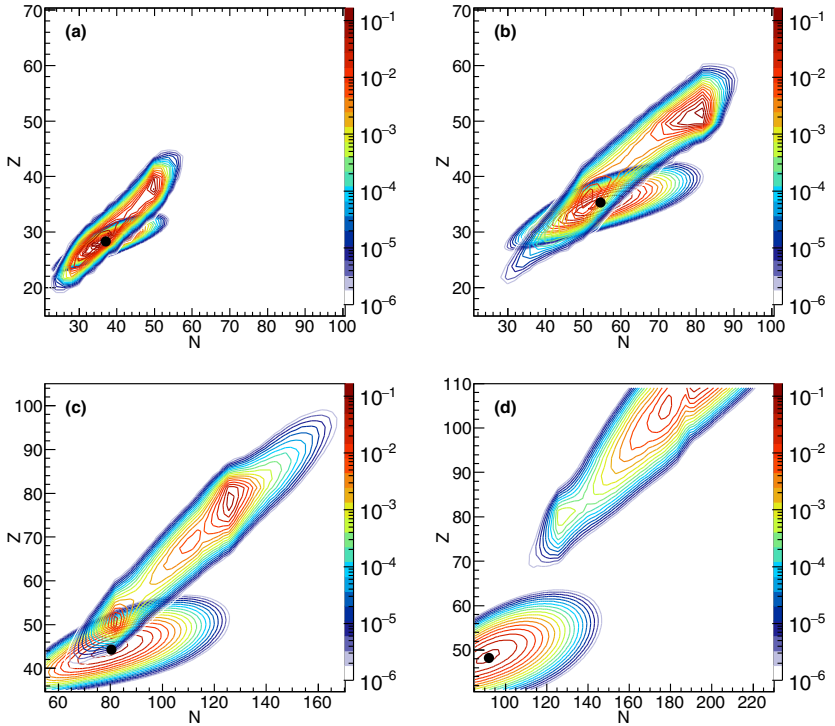


FIG. 6. Distribution of nuclei (N, Z) for four chosen thermodynamic conditions along a collapse trajectory at the center of the star: (a) $n_B = 3.86 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.79 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (b) $n_B = 3.35 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.51 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.38$, (c) $n_B = 3.01 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.68 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.33$, and (d) $n_B = 5.85 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 3.33 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. Contour lines correspond to the cluster normalized probabilities (red to blue, more to less probable) for the original LS model and for the HFB-24 nuclear mass model. Dots correspond to the average single nucleus predicted by the LS EoS. See text for details.

in a considerable way the prediction of the composition in NSE models. The four arrows in Fig. 5 labeled from (a) to (d) point at four chosen instants along the trajectory, before bounce, whose thermodynamic conditions (n_B, T, Y_e) correspond to the nuclear distributions shown in the four panels of Fig. 6: (a) $n_B = 3.86 \times 10^{-6} \text{ fm}^{-3}$, $T = 0.79 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.43$, (b) $n_B = 3.35 \times 10^{-4} \text{ fm}^{-3}$, $T = 1.51 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.38$, (c) $n_B = 3.01 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 2.68 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.33$, and (d) $n_B = 5.85 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, $T = 3.33 \text{ MeV}$, $Y_e = 0.31$. The colored contour lines in Fig. 6 (red to blue, more to less probable nuclei) represent the cluster normalized probability, Eq. (25), obtained (i) with the original LS model, where the nuclear masses are taken from the original compressible liquid-drop model employed in the LS EoS (note that the oval-shaped distributions are indeed centered on the SNA results, represented by the black dots) and (ii) with the HFB-24 mass model. It is also clear from this figure the appearance of magic numbers when the HFB-24 mass model is employed. Indeed, in this case, a bimodal distribution, which cannot be reproduced in the single-peaked SNA picture, emerges. While for thermodynamic conditions at the beginning of the collapse (panel a) nuclei around $Z = 28$ and $N = 50$ are populated, later on (panel b), the distribution is peaked around $N = 50$ and $N = 82$, and subsequently (panel c) around $N = 82$ and $N = 126$; towards the end of the infall phase (panel d), the most probable nuclei are probably situated around $N = 184$. We can also notice that, along the collapse, the most probable nuclei become bigger (i.e., A increases), and the distributions become larger. These effects are a consequence of the increasing density and temperature, respectively.

Finally, an important difference is observed in panels (c) and (d) between the average nucleus predicted by the original LS EoS (dots) and the most probable nuclei predicted using the HFB-24 nuclear mass models. This indicates that the latter application with the HFB model, contrary to the previous one where the mass model was taken from the LS EoS, is not fully consistent. To achieve consistency, we should calculate the chemical potentials $\mu_{q\sigma}$ and the full \bar{G}_{nuc} functional directly from the same energy-density functional as the one used to compute the nuclear masses. This improvement is left for future work.

V. CONCLUSIONS

In this paper, we have worked out a general formalism allowing to calculate the nuclear distribution encountered in equilibrium stellar matter, associated to any arbitrary unified EoS, that is a finite temperature nuclear modeling able to describe both homogeneous and inhomogeneous asymmetric nuclear matter. The cluster probabilities are given by simple Boltzmann factors, Eq. (25), with four important modifications:

- (1) the cluster size entering in the Legendre transformation from Helmholtz to Gibbs free energy must be properly defined such as to ensure mass and charge conservation, see Eqs. (6),(7);
- (2) the cluster chemical potential is given by the chemical potential of the unbound nucleons, see Eqs. (A8),(A9), multiplied by the effective cluster size;

- (3) all eventual in-medium modifications must be considered inside the cluster free energy, see Eq. (4) and the following discussion;
- (4) a rearrangement term insuring thermodynamical consistency must be added, see Eq. (24).

This general formalism can be straightforwardly applied to any relativistic or nonrelativistic subsaturation EoS based on the WS approximation, that is within the SNA. We have applied it to the specific case of the LS EoS, which is widely used in core-collapse simulations. This example has explicitly shown that the most probable nucleus coincides with the prediction of the LS EoS, but many other nuclei are populated with a non-negligible probability, and the width of the nuclear distribution is an increasing function of the density and temperature.

We have also explored the effect of using a more realistic mass model, by replacing the simpler compressible liquid-drop like functional for nuclear masses in the LS EoS with the more microscopic Brussels-Montreal HFB-24 mass model, which provides an excellent reproduction of nuclear masses all over the nuclear chart.

Considering thermodynamic conditions followed by a typical core-collapse trajectory, we have shown that the isotopic distribution considerably deviates from the average LS results, and magic nuclei dominate the whole trajectory. Since the electron-capture rates on nuclei may vary of orders of magnitude among neighboring nuclei, we expect that a consistent calculation of the rates over this more realistic distribution may change the deleptonization rates, and thus the resulting dynamics of the collapse, with respect to standard collapse calculations where the SNA is employed. We emphasize that, especially for high densities and temperatures where the contribution of the gas surrounding the clusters increases, the neutron and proton chemical potentials of the gas should be calculated from the same theoretical model used to compute the nuclear masses. This is indeed necessary to achieve full consistency in the model. These calculations, as well as the implementation of the electron-capture rates on the nuclear distribution and the evaluation of the effect on the collapse trajectory, is left for future work.

ACKNOWLEDGMENTS

G.G. was supported by CAPES/COFECUB agreement no. Ph 853-15. Partial support from the COST Action MP1304 “NewCompStar” is gratefully acknowledged.

APPENDIX A: CHEMICAL POTENTIALS

In this appendix, we show that it is possible to identify the Lagrange multipliers, introduced to impose the constraints on the mass and charge conservation, and the chemical potentials introduced in the expression of the Gibbs free energy, with the chemical potentials of the homogeneous matter (i.e., of the uniform gas). Let us consider the case where matter is modeled with only one type of WS cells, for simplicity. Starting from the baryon free energy in the WS cell,

$$F_{\text{bar}} = F_{\text{nuc}} - k_B T V_C \ln z_{\sigma}, \quad (\text{A1})$$

where k_B is the Boltzmann constant and the free energy density of the gas is $\mathcal{F}_g = -k_B T \ln z_\beta$, z_β being the mean-field partition sum for homogeneous matter, one can write the Gibbs free energy of the baryon component operating a Legendre transformation with respect to the neutron and proton baryon numbers (or, equivalently, the total baryon number and isospin). One thus gets

$$\bar{G}_{\text{bar}} = \bar{F}_{\text{bar}} - \mu_1 N_{\text{WS}} - \mu_2 Z_{\text{WS}}, \quad (\text{A2})$$

where we have introduced the auxiliary chemical potentials μ_1 and μ_2 . Using Eqs. (6),(7) [where we have dropped the (j) in the notation for convenience], we obtain

$$\bar{G}_{\text{bar}} = \bar{F}_{\text{bar}} - \mu_1(N + n_{ng}V_C) - \mu_2(Z + n_{pg}V_C). \quad (\text{A3})$$

Using the mean-field relations of uniform nuclear matter,

$$\ln z_{\beta\mu_n\mu_p} = \ln z_\beta + \beta\mu_1 n_{ng} + \beta\mu_2 n_{pg}, \quad (\text{A4})$$

with $\beta = (k_B T)^{-1}$, one can see that the neutron and proton gas densities are given by

$$n_{ng} = k_B T \left. \frac{\partial \ln z_{\beta\mu_n\mu_p}}{\partial \mu_1} \right|_{\mu_2}, \quad (\text{A5})$$

$$n_{pg} = k_B T \left. \frac{\partial \ln z_{\beta\mu_n\mu_p}}{\partial \mu_2} \right|_{\mu_1}. \quad (\text{A6})$$

Therefore, the gas densities are uniquely determined by the chemical potentials, and independent on the realization (k), i.e., $n_{ng}^{(k)} = n_{ng}$ and $n_{pg}^{(k)} = n_{pg}$. The Gibbs free energy is finally given by

$$\begin{aligned} \bar{G}_{\text{bar}} &= F_{\text{nuc}} - \mu_1 N - \mu_2 Z - k_B T V_C \ln z_{\beta\mu_n\mu_p} \\ &= G_{\text{nuc}} + V_C \mathcal{G}_g \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

with \mathcal{G}_g the Gibbs free energy density of the gas, and

$$\mu_1 = -k_B T \left. \frac{\partial \ln z_\beta}{\partial n_{ng}} \right|_{n_{pg}} = \mu_{ng}, \quad (\text{A8})$$

$$\mu_2 = -k_B T \left. \frac{\partial \ln z_\beta}{\partial n_{pg}} \right|_{n_{ng}} = \mu_{pg}, \quad (\text{A9})$$

where one recognizes that the auxiliary chemical potentials coincide with the neutron and proton chemical potentials of the homogeneous gas, $\mu_n \equiv \mu_{ng}$ and $\mu_p \equiv \mu_{pg}$.

APPENDIX B: LS EOS IN THE CANONICAL ENSEMBLE

In this appendix we rederive the equilibrium equations, Eqs. (3.2) in LS [8], that result from the minimization of the total free energy density of the system. The procedure is equivalent to minimize the auxiliary function constructed from the free energy density under conservation constraints (see also Ref. [47]), yielding the SNA results. Since the lepton (and photon) contribution to the total free energy density can be treated separately, and does not enter in the minimization, we only consider here the (total) baryon free energy density. In the LS EoS, the chosen set of independent variables are $\{x_k\} = \{n_i, x_i, u, r_N, n_\alpha, n_{no}, n_{po}\}$, where $n_i = A_r/V_N$ and $x_i = Z_r/A_r$ are the nucleon density and proton fraction inside the nucleus in the cell, respectively, $u = V_N/V_C$ is the fraction of the WS

cell volume occupied by nuclei (V_N being the volume of the nucleus), r_N is the nuclear radius (such that $V_N = 4\pi r_N^3/3$), n_α , n_{no} , and n_{po} are the number density of the α particles, and of the neutrons and protons in the outside gas, respectively. For simplicity of notation, we omit in this section the superscript (j) referring to the cell. Using these LS variables, the baryon free energy density can be written as

$$\bar{\mathcal{F}}_{\text{bar}} = \bar{\mathcal{F}}_{\text{nuc}} + \mathcal{F}_o + \bar{\mathcal{F}}_\alpha. \quad (\text{B1})$$

The nuclear contribution is given by the sum of the bulk, surface, Coulomb, and translational free energy density,

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{F}}_{\text{nuc}} &= n_i u [f_b(n_i, x_i) + f_s(x_i, u, r_N) + f_c(x_i, n_i, u, r_N)] \\ &\quad + n_i u (1-u) f_H(n_i, x_i, u), \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

where we have put in evidence the dependences on the independent variables (see Ref. [8] for the detailed expressions of the different terms). Note that, in the present notation, f corresponds to free energy per baryon, while $\bar{\mathcal{F}}$ to free energy density. For the nucleons in the outside gas and the alpha particles, we have

$$\mathcal{F}_o = n_o f_o(n_o)(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha), \quad (\text{B3})$$

$$\bar{\mathcal{F}}_\alpha = n_\alpha f_\alpha(n_\alpha)(1-u) \quad (\text{B4})$$

with $n_o = n_{no} + n_{po}$.

The mass and charge conservations read

$$\begin{aligned} n_B &= \frac{A_{\text{WS}}}{V_C} = un_i + 4n_\alpha(1-u) \\ &\quad + (n_{no} + n_{po})(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha), \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

$$\begin{aligned} n_p &= n_e = \frac{Z_{\text{WS}}}{V_C} = x_i n_i u + 2n_\alpha(1-u) \\ &\quad + n_{po}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha), \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

where A_{WS} and Z_{WS} are the total baryon and proton number in the cell, respectively (the total neutron number in the cell is thus $N_{\text{WS}} = A_{\text{WS}} - Z_{\text{WS}}$, and a conservation for n_n can be derived, too) and $v_\alpha = 24 \text{ fm}^3$ is the volume occupied by each α particle. One can then construct the auxiliary function to be minimized:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \bar{\mathcal{F}}_{\text{bar}} - \lambda_1 [n_p - x_i n_i u - 2n_\alpha(1-u) \\ &\quad - n_{po}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha)] \\ &\quad - \lambda_2 [n_n - (1-x_i) n_i u - 2n_\alpha(1-u) \\ &\quad - n_{no}(1-u)(1-n_\alpha v_\alpha)], \end{aligned} \quad (\text{B7})$$

where λ_1 and λ_2 are the Lagrange multipliers. The minimization of the auxiliary function, Eq. (B7), with respect to the seven variables yields

$$\text{(i)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial r_N} \right|_{n_i, x_i, u, n_\alpha, n_{no}, n_{po}} = 0. \text{ Noting that only the sur-}$$

face and Coulomb terms depend on r_N , i.e., $\partial(\bar{\mathcal{F}}_\alpha + \mathcal{F}_c)/\partial r_N = 0$, one recovers the virial theorem, $\bar{\mathcal{F}}_s = 2\bar{\mathcal{F}}_c$, that gives the equation to be solved separately for the nuclear radius, Eq. (3.2a) in [8],

$$r_N = \frac{9\sigma}{2\beta} \left(\frac{s(u)}{c(u)} \right)^{1/3}, \quad (\text{B8})$$

where $s(u)$ and $c(u)$ are shape parameters aiming to mimic the transition from nuclei to the bubble phase [8]. Equivalently, one can write Eq. (B8) in terms of n_i ,

$$n_i = \frac{5}{2} \frac{A_r \sigma}{Z_r^2 e^2} \frac{s(u)}{c(u)}. \quad (\text{B9})$$

Note that in the LS routine, $s(u)/c(u) = [u(1-u)/\mathcal{D}]^3$.

$$\text{(ii)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial n_{qo}} \right|_{n_i, x_i, u, r, N, n_{no}, n_{po}} = 0, \quad \text{with } q = n, p \text{ and } -q = p, n. \text{ This condition identifies the Lagrange multipliers as the neutron and proton chemical potentials,}$$

$$\lambda_1 = -\mu_{po} \quad \text{and} \quad \lambda_2 = -\mu_{no}. \quad (\text{B10})$$

$$\text{(iii)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial n_\alpha} \right|_{n_i, x_i, u, r, N, n_{no}, n_{po}} = 0. \text{ Using the thermodynamic relation between the pressure } P, \text{ the free energy density } \mathcal{F}, \text{ and the chemical potential } \mu \text{ of a species of density } n, P = -\mathcal{F} + \mu n, \text{ this condition gives Eq. (3.2e) of LS,}^5$$

$$\mu_\alpha = 2(\mu_{no} + \mu_{po}) - v_\alpha P_o, \quad (\text{B11})$$

where P_o is the pressure of the neutron and proton gas.

$$\text{(iv)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial x_i} \right|_{n_i, u, r, N, n_{no}, n_{po}} = 0, \text{ that gives Eq. (3.2b) of LS,}$$

$$\mu_{ni} - \mu_{pi} - \frac{2}{3} \frac{\beta \mathcal{D}}{n_i u} \left(\frac{1}{x_i} + \frac{\sigma'}{\sigma} \right) - \frac{1-u}{A_0} h'(\mu_H - T)$$

$$= \mu_{no} - \mu_{po}, \quad (\text{B12})$$

with $\sigma' \equiv \partial \sigma / \partial x_i$ and $h' \equiv \partial h / \partial x_i$.

$$\text{(v)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial n_i} \right|_{x_i, u, r, N, n_{no}, n_{po}} = 0.$$

$$\text{(vi)} \quad \left. \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial u} \right|_{x_i, r, N, n_{no}, n_{po}} = 0.$$

Combining the last two conditions with Eq. (B12), and noting that $\mu_{bi} = (1-x_i)\mu_{ni} + x_i\mu_{pi}$ after operating the change of variables $(n_{ni}, n_{pi}) \rightarrow (n_i, x_i)$, with $n_{ni} = n_i(1-x_i)$ and $n_{pi} = n_i x_i$, gives Eqs. (3.2c), (3.2d) of LS

$$\mu_{ni} - \frac{2}{3} \frac{x_i \beta \mathcal{D}}{n_i u} \frac{\sigma'}{\sigma} + \frac{1-u}{A_0} [h\mu_H - h'x_i(\mu_H - T)]$$

$$= \mu_{no}, \quad (\text{B13})$$

$$P_i + \beta \left(\frac{2}{3} \frac{\mathcal{D}}{u} - \mathcal{D}' \right) + \frac{n_i h}{A_0} \mu_H u$$

$$= P_o + P_\alpha, \quad (\text{B14})$$

where $\mathcal{D}' \equiv \partial \mathcal{D} / \partial u$.

⁵Note that in Eq. (3.2e) in [8] the minus sign between the neutron and proton chemical potentials should be replaced with a plus sign. Moreover, B_o is not included in Eq. (B11) because masses are included in the chemical potentials.

- [1] G. Baym, C. Pethick, and P. Sutherland, *Astrophys. J.* **170**, 299 (1971).
- [2] G. Baym, H. A. Bethe, and C. J. Pethick, *Nucl. Phys. A* **175**, 225 (1971).
- [3] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. R. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2066 (1983).
- [4] M. Hashimoto, H. Seki, and M. Yamada, *Prog. Theor. Phys.* **71**, 320 (1984).
- [5] H. A. Bethe, G. E. Brown, J. Applegate, and J. M. Lattimer, *Nucl. Phys. A* **324**, 487 (1979).
- [6] J. Cooperstein, *Nucl. Phys. A* **438**, 722 (1985).
- [7] J. M. Lattimer, C. J. Pethick, D. G. Ravenhall, and D. Q. Lamb, *Nucl. Phys. A* **432**, 646 (1985).
- [8] J. M. Lattimer and F. Douglas Swesty, *Nucl. Phys. A* **535**, 331 (1991).
- [9] A. da Silva Schneider, L. F. Roberts, and C. D. Ott, *Phys. Rev. C* **96**, 065802 (2017).
- [10] M. Lassaut, H. Flocard, P. Bonche, P.-H. Heenen, and E. Suraud, *Astron. Astrophys.* **183**, L3 (1987).
- [11] M. Onsi, H. Przyzieciak, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **55**, 3139 (1997).
- [12] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi, *Nucl. Phys. A* **637**, 435 (1998).
- [13] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi, *Prog. Theor. Phys.* **100**, 1013 (1998).
- [14] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **197**, 20 (2011).
- [15] M. Onsi, A. K. Dutta, H. Chatri, S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **77**, 065805 (2008).
- [16] S. S. Avancini, D. P. Menezes, M. D. Alloy, J. R. Marinelli, M. M. W. Moraes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **78**, 015802 (2008).
- [17] S. S. Avancini, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **82**, 055807 (2010).
- [18] S. S. Avancini, C. C. Barros, Jr., L. Brito, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **85**, 035806 (2012).
- [19] F. Grill, H. Pais, C. Providência, I. Vidaña, and S. S. Avancini, *Phys. Rev. C* **90**, 045803 (2014).
- [20] Z. W. Zhang and H. Shen, *Astrophys. J.* **788**, 185 (2014).
- [21] H. Pais, S. Chiacchiera, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **91**, 055801 (2015).
- [22] P. Bonche and D. Vautherin, *Nucl. Phys. A* **372**, 496 (1981).
- [23] P. Bonche and D. Vautherin, *Astron. Astrophys.* **112**, 268 (1982).
- [24] P. Gögelein, E. N. E. van Dalen, C. Fuchs, and H. Mütter, *Phys. Rev. C* **77**, 025802 (2008).
- [25] N. Sandulescu, *Phys. Rev. C* **70**, 025801 (2004).
- [26] H. Pais and J. R. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 151101 (2012).
- [27] A. Pastore, *Phys. Rev. C* **86**, 065802 (2012).
- [28] M. Oertel, M. Hempel, T. Klähn, and S. Typel, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015007 (2017).

- [29] A. Burrows and J. M. Lattimer, *Astrophys. J.* **285**, 294 (1984).
- [30] A. Juodagalvis, K. Langanke, W. R. Hix, G. Martínez-Pinedo, and J. M. Sampaio, *Nucl. Phys. A* **848**, 454 (2010).
- [31] C. Sullivan, E. O'Connor, R. G. T. Zegers, T. Grubb, and S. M. Austin, *Astrophys. J.* **816**, 44 (2016).
- [32] Ad. R. Raduta, F. Gulminelli, and M. Oertel, *Phys. Rev. C* **95**, 025805 (2017).
- [33] S. Furusawa, H. Nagakura, K. Sumiyoshi, C. Kato, and S. Yamada, *Phys. Rev. C* **95**, 025809 (2017).
- [34] M. F. El Eid and W. Hillebrandt, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **42**, 215 (1980).
- [35] W. Hillebrandt, K. Nomoto, and R. G. Wolff, *Astron. Astrophys.* **133**, 175 (1984).
- [36] S. Heckel, P. P. Schneider, and A. Sedrakian, *Phys. Rev. C* **80**, 015805 (2009).
- [37] A. S. Botvina and I. N. Mishustin, *Nucl. Phys. A* **843**, 98 (2010).
- [38] M. Hempel and J. Schaffner-Bielich, *Nucl. Phys. A* **837**, 210 (2010).
- [39] Ad. R. Raduta and F. Gulminelli, *Phys. Rev. C* **82**, 065801 (2010).
- [40] S. I. Blinnikov, I. V. Panov, M. A. Rudzsky, and K. Sumiyoshi, *Astron. Astrophys.* **535**, A37 (2011).
- [41] S. Furusawa, S. Yamada, K. Sumiyoshi, and H. Suzuki, *Astrophys. J.* **738**, 178 (2011).
- [42] M. Hempel, T. Fischer, J. Schaffner-Bielich, and M. Liebendörfer, *Astrophys. J.* **748**, 70 (2012).
- [43] S. Furusawa, K. Sumiyoshi, S. Yamada, and H. Suzuki, *Astrophys. J.* **772**, 95 (2013).
- [44] A. W. Steiner, M. Hempel, and T. Fischer, *Astrophys. J.* **774**, 17 (2013).
- [45] N. Buyukcizmeci, A. S. Botvina, and I. N. Mishustin, *Astrophys. J.* **789**, 33 (2014).
- [46] Ad. R. Raduta, F. Aymard, and F. Gulminelli, *Eur. Phys. J. A* **50**, 24 (2014).
- [47] F. Gulminelli and A. R. Raduta, *Phys. Rev. C* **92**, 055803 (2015).
- [48] S. Burrello, F. Gulminelli, F. Aymard, M. Colonna, and Ad. R. Raduta, *Phys. Rev. C* **92**, 055804 (2015).
- [49] S. Furusawa, K. Sumiyoshi, S. Yamada, and H. Suzuki, *Nucl. Phys. A* **957**, 188 (2017).
- [50] C. Iliadis, *Nuclear Physics of Stars* (Wiley-VCH, New York, 2007).
- [51] A. C. Phillips, *The Physics of Stars* (Wiley & Sons, Chichester, UK, 1999).
- [52] N. Buyukcizmeci, A. S. Botvina, I. N. Mishustin *et al.*, *Nucl. Phys. A* **907**, 13 (2013).
- [53] A. Weiss, W. Hillebrandt, H.-C. Thomas, and H. Ritter, *Cox and Giuli's Principles of Stellar Structure*, extended 2nd ed. (Cambridge Scientific Publishers, Cambridge, 2004).
- [54] P. Haensel, A. Y. Potekhin, and D. G. Yakovlev, *Neutron Stars 1: Equation of State and Structure* (Springer, Berlin, 2007).
- [55] J. P. Bondorf, A. S. Botvina, A. S. Iljinov, I. N. Mishustin, and K. Sneppen, *Phys. Rep.* **257**, 133 (1995).
- [56] R. Buras, M. Rampp, H.-T. Janka, and K. Kifonidis, *Astron. Astrophys.* **447**, 1049 (2006).
- [57] M. Oertel, A. F. Fantina, and J. Novak, *Phys. Rev. C* **85**, 055806 (2012).
- [58] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing*, 2nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [59] J. V. Romero, J. M. A. Ibáñez, J. M. A. Martí, and J. A. Miralles, *Astrophys. J.* **462**, 839 (1996).
- [60] J. V. Romero, J. M. Ibáñez, J. A. Miralles, and J. A. Pons, in *Some Topics on general relativity and gravitational radiation*, edited by J. A. Miralles, J. A. Morales, and D. Sáez (Editions Frontieres, Paris, 1997), p. 289.
- [61] A. F. Fantina, *Supernovae theory: Study of electro-weak processes during gravitational collapse of massive stars*, Ph.D. thesis, Université Paris XI, Orsay, France, and Università degli Studi di Milano, Milano, Italy (2010).
- [62] S. E. Woosley, A. Heger, and T. A. Weaver, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1015 (2002).
- [63] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **88**, 024308 (2013).
- [64] G. Audi, M. Wang, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer, *Chin. Phys. C* **36**, 1287 (2012).
- [65] J. M. Pearson, N. Chamel, A. F. Fantina, and S. Goriely, *Eur. Phys. J. A* **50**, 43 (2014).
- [66] D. Lunney, J. M. Pearson, and C. Thibault, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1021 (2003).

Equation of State Grid with the Quark-Meson-Coupling Model

Guilherme Grams¹ · Alexandre M. Santos¹ · Débora P. Menezes¹

Received: 20 August 2015 / Published online: 17 November 2015
© Sociedade Brasileira de Física 2015

Abstract In this work, we present the preliminary results of an equation of state (EoS) grid for possible use in core-collapse supernova simulations. We treat uniform matter made of nucleons using the quark-meson coupling (QMC) model. We show a table with a variety of thermodynamic quantities, which covers the proton fraction range $Y_p = 0-0.65$ with the linear grid spacing $\Delta Y_p = 0.01$ (66 points) and the density range $\rho_B = 10^{14} - 10^{16} \text{ g cm}^{-3}$ with the logarithmic grid spacing $\Delta \log_{10}(\rho_B / [\text{g cm}^{-3}]) = 0.1$ (21 points). This preliminary study is performed at zero temperature, and our results are compared with the widely used EoS already available in the literature.

Keywords Equation of state · Quark-meson-coupling · Nuclear · Supernova

1 Introduction

Although the theory related to supernova (SN) has made a remarkable progress in the past decade, there are many questions that remain unanswered. The catastrophic infall of the core of a massive star, reversed to trigger the powerful ejection of the stellar mantle and envelope in a supernova explosion, plays a crucial role in the synthesis of heavy elements. But when, why, and how it happens is a fundamental problem of stellar astrophysics that remains to be explained. The implosion of stellar cores was also proposed as part of the scenario of the stellar death [1, 2].

There are no doubts that supernovae explosions are an unique phenomenon in nature and an excellent laboratory to test extreme physics conditions. Core-collapse SNe tend to happen once every $\sim 30 - 50$ years in our galaxy and unfortunately most part of them are shrouded from view by the dust that pervades the Milk Way [3] which makes the study of these *great labs* very difficult. Due to this observational difficulty, simulations of core-collapse supernova have played an important role in the study of supernovae explosions and their possible remnants. The equation of state (EoS) of nuclear physics is a fundamental ingredient in the simulation of SN explosion. Simulations of core-collapse supernovae depend on the EoS obtained for a wide range of thermodynamic conditions. Moreover, extremely high density and temperature may be achieved when black holes are formed by failed supernovae. The temperatures of interest vary from zero to more than 100 MeV, densities range go from 10^5 to more than $10^{15} \text{ g cm}^{-3}$ and the proton fraction can reach 0.6. Fulfilling these conditions makes the construction of a complete EoS a very hard work, mainly at low densities, where a variety of sub-structures and light clusterization are possible. For these reasons, there are only few complete EoS available in the literature. The most commonly used EoS are those of Lattimer and Swesty (hereafter LS) [4], Shen et al. (hereafter STOS) [5, 6] and Hempel and Schaffner-Bielich (hereafter HS) [7].

The LS [4] EoS is based on a compressible liquid drop model with a Skyrme force for nucleon interactions. The STOS EoS from 1998 [5] was the first equation of state for supernova simulations using a relativistic nuclear model. The upgrade to STOS's work was published in 2011 [6] with more points in the table and the inclusion of the Λ hyperons. Both works developed by STOS were constructed with the TM1 [8] parameterization of the relativistic nonlinear

✉ Guilherme Grams
grams.guilherme@gmail.com

¹ Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brazil

Walecka model, developed in [9, 10] and also called Boguta-Bodmer type model, in a mean field approximation.

HS’s EoS [7] is based on the NL3 [11], TM1, TMA [12], FSUgold [13], SFHo and SFHx [14], IU-FSU [15] and DD2 [16] parameterizations of the same quantum hydrodynamics model and use the nuclear statistical equilibrium model of HS and Schaffner-Bielich [17], which takes into account excluded volume effects.

An interesting analysis of the different parameterizations of the relativistic-mean-field (RMF) models was made by Dutra et al. [18], where the authors analyzed 263 different RMF models under several constraints related to the symmetric nuclear matter (SNM) and pure neutron matter (PNM). The TM1 parameterization used by STOS failed under six of this constraints. The parameterizations used by HS: TMA, FSUgold, NL3, IU-FSU, and DD2 failed under five, one, nine, two, and three constraints, respectively. The parameterizations SFHo and SFHx were not analyzed in [18].

The works of HS, LS, and STOS were successful and very useful in many calculations in the last decade [19–24], but there are some simulations of SN in which the supernova does not explode [25].

One of the problems that can cause these failures is the use of an inadequate or incomplete nuclear EoS. The EoS of dense matter determines the stellar structure, the hydrodynamics, and the reaction rates through the calculation of pressure, entropy, and chemical compositions [26, 27]. Sumiyoshi et al. [28] performed numerical simulations of core-collapse supernovae. They examined the influence of the equation of state on the postbounce evolution of shock waves in the late phase and the resulting thermal evolution of protoneutron stars with two different EoS, namely LS and STOS. None of them resulted in a successful explosion of the supernova core. When the central core contracts to become a protoneutron star, differences due to different EoSs appear. The central density becomes very high and the chosen EoS may influence the shock dynamics and the consequent evolution to a protoneutron star cooling or to the formation of a black hole [28].

In the present work, we present our preliminary results for the construction of an EoS grid for core-collapse supernova simulations, with the quark-meson coupling (QMC) model [29]. In the QMC model, nuclear matter is described as a system of non-overlapping MIT bags [30] that interact through the exchange of scalar and vector meson fields. Many applications and extensions of the model have been made in the last years [31–35]. It is well known that the EoS for infinite nuclear matter at zero temperature derived from the QMC model is softer than many of the EoS obtained with quantum hydrodynamical models with non-linear terms [9]. This might be a problem if one wants to describe very massive compact objects [36, 37], and we

tackle how to circumvent this problem after our results are presented. However, as far as SN simulations are concerned, it is worth testing the QMC model because of its underlying quark substructure. Moreover, the effective nucleon mass obtained with the QMC model lies in the range 0.7–0.8 of the free nucleon mass, which agrees with the results derived from the non-relativistic analysis of scattering of neutrons from lead nuclei [38] and is larger in comparison with the effective mass obtained with some of the different parameterizations of the Boguta-Bodmer models. A low effective mass at saturation can be a problem when hyperons are included in the calculation, as discussed in the next section.

In the relativistic EoS mentioned in the beginning of this section that were obtained to be used in SN simulations, the nucleons interact among themselves through the exchange of mesons. We believe that with the quarks degree of freedom present in the QMC model, a more fundamental physics not present in the other models, can be tested and possibly contribute for the SN simulations to explode.

Another possible use of this preliminary EoS obtained with the QMC model is the study of the cooling of compact stars, which serve as an important window on the properties of super-dense matter and neutron star structure, and is very sensitive to the nuclear equation of state [39–42].

This paper is structured as follows: in the second section, we present a review of the quark-meson coupling model. In the third section, we present our results for the EoS. The last section is reserved for the final remarks and conclusions.

2 The Quark-Meson Coupling Model

In the QMC model, the nucleon in nuclear medium is assumed to be a static spherical MIT bag in which quarks interact with the scalar (σ) and vector (ω, ρ) fields, and those are treated as classical fields in the mean field approximation (MFA) [29]. The quark field, ψ_{qN} , inside the bag then satisfies the equation of motion:

$$[i \not{\partial} - (m_q^0 - g_\sigma^q) - g_\omega^q \omega \gamma^0 + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_0 \gamma^0] \psi_{qN}(x) = 0, \quad q = u, d \tag{1}$$

where m_q^0 is the current quark mass, and $g_\sigma^q, g_\omega^q,$ and g_ρ^q denote the quark-meson coupling constants. The normalized ground state for a quark in the bag is given by

$$\psi_{qN}(\mathbf{r}, t) = N_{qN} \exp(-i\epsilon_{qN}t/R_N) \times \left(\begin{matrix} j_{0N}(x_{qN}r/R_N) \\ i\beta_{qN} \vec{\sigma} \cdot \hat{r} j_{1N}(x_{qN}r/R_N) \end{matrix} \right) \frac{\chi_q}{\sqrt{4\pi}}, \tag{2}$$

where

$$\epsilon_{qN} = \Omega_{qN} + R_N \left(g_\omega^q \omega + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_0 \right), \tag{3}$$

and,

$$\beta_{qN} = \sqrt{\frac{\Omega_{qN} - R_N m_q^*}{\Omega_{qN} + R_N m_q^*}}, \tag{4}$$

with the normalization factor given by

$$\mathcal{N}_{qN}^{-2} = 2R_N^3 j_0^2(x_q) \left[\Omega_q(\Omega_q - 1) + R_N m_q^*/2 \right] / x_q^2, \tag{5}$$

where $\Omega_{qN} \equiv \sqrt{x_{qN}^2 + (R_N m_q^*)^2}$, $m_q^* = m_q^0 - g_\sigma^q \sigma$, R_N is the bag radius of nucleon N and χ_q is the quark spinor. The bag eigenvalue for nucleon N , x_{qN} , is determined by the boundary condition at the bag surface

$$j_0(x_{qN}) = \beta_{qN} j_1(x_{qN}). \tag{6}$$

The energy of a static bag describing nucleon N consisting of three quarks in ground state is expressed as

$$E_N^{\text{bag}} = \sum_q n_q \frac{\Omega_{qN}}{R_N} - \frac{Z_N}{R_N} + \frac{4}{3} \pi R_N^3 B_N, \tag{7}$$

where Z_N is a parameter which accounts for zero-point motion of nucleon N and B_N is the bag constant. The set of parameters used in the present work is determined by enforcing stability of the nucleon (here, the “bag”), like in [43], so there is a single value for proton and neutron

masses. The effective mass of a nucleon bag at rest is taken to be $M_N^* = E_N^{\text{bag}}$.

The equilibrium condition for the bag is obtained by minimizing the effective mass, M_N^* with respect to the bag radius

$$\frac{dM_N^*}{dR_N^*} = 0, \quad N = p, n, \tag{8}$$

By fixing the bag radius $R_N = 0.6$ fm and the bare nucleon mass $M = 939$ MeV, one can set the values for the unknowns Z_N and $B^{1/4}$. In our calculations, we have found $Z_N = 4.0050668$ and $B_N^{1/4} = 210.85$ MeV. Furthermore, the desired values of $B/A \equiv \epsilon/\rho - M = -15.7$ MeV at saturation $n = n_0 = 0.15$ fm⁻³ are achieved by setting $g_\sigma^q = 5.9810$, $g_\omega = 8.9817$, where $g_\omega = 3g_\rho^q$ and $g_\rho = 3g_\rho^q$. All the parameters used in this work are shown in Table 1.

The total energy density of the nuclear matter reads

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_0^2 \\ &+ \sum_N \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_N} k^2 dk [k^2 - M_N^{*2}]^{1/2}, \end{aligned} \tag{9}$$

Table 1 Parameters used in the QMC model and different parameterizations of the Boguta-Bodmer type models

Model	M (MeV)	m_q (MeV)	m_σ (MeV)	m_ω (MeV)	m_ρ (MeV)	g_ρ	g_ω	g_σ	$B_N^{1/4}$ (MeV)	NLT	DDP
QMC	939.0	5.5	550	783	770	8.651	8.9817	5.9810*	210.85	no	no
NL3	939.0	–	508.194	782.501	763	8.9480	12.868	10.217	–	yes	no
GM1	939.0	–	550	783	770	8.1945	10.608	9.5684	–	yes	no
TM1	938.0	–	511.197	783	770	4.6321	12.613	10.028	–	yes	no
FSUgold	939.0	–	491.5	782.5	763	11.7673	14.301	10.592	–	yes	no
SFHo	939.0	–	467.94	726.5	770	11.443	10.8144	15.123	–	yes	no
SFHx	939.0	–	470.51	726.5	770	11.5153	12.2438	16.1868	–	yes	no
IU-FSU	939.0	–	491.5	782.5	763	8.92188	12.8679	10.217	–	yes	no
TMA [†]	938.9	–	519.151	781.95	768.1	3.800	12.842	10.055	–	yes	no
DD2	939.0	–	546.212	783	763	3.62694**	13.3424**	10.687**	–	no	yes
TW	939.0	–	550	783	763	7.32196**	13.2901**	10.728**	–	no	yes

In the first line we present the parameters used in the present work for the QMC model. The NL3, GM1, and TW parameterizations are used here for a comparison of bulk matter properties. TM1 is the parameterization used in STOS’s work. The FSUgold, SFHo, SFHx, IU-FSU, TMA, and DD2 were used in HS’s work.

* g_σ^q is the quark-meson coupling in the QMC model.

** values taken at saturation for the DDP parameterizations.

TMA[†]: the coupling parameters g_i of the set TMA are chosen to be mass-number dependent such that $g_i = a_i + b_i/A^{0.4}$, with a_i and b_i being constants [12]; for infinite matter as in the stellar matter, one has an infinite nucleus, and then the limit $A \mapsto$ infinity is taken so that $g_i = a_i$. NLT= Nonlinear terms. DDP= Density dependent parameters

Table 2 Nuclear matter bulk properties obtained with the QMC model, two different parameterizations of the Boguta-Bodmer model and one density dependent model we use in this paper, and the seven

parameterizations used in the works of HS and STOS. All quantities are taken at saturation

Model	B/A (MeV)	n_0 (fm ⁻³)	M^*/M	\mathcal{E}_{sym} (MeV)	K (MeV)
QMC	-15.7	0.150	0.77	34.5	295
NL3	-16.2	0.148	0.60	37.4	272
GM1	-16.3	0.153	0.70	32.5	300
TM1	-16.3	0.145	0.63	36.8	281
FSUgold	-16.3	0.148	0.62	32.6	230
SFHo	-16.2	0.158	0.76	31.6	245
SFHx	-16.2	0.160	0.72	28.7	239
IU-FSU	-16.4	0.155	0.61	31.3	231
TMA	-16.0	0.147	0.63	30.7	318
DD2	-16.0	0.149	0.56	31.7	243
TW	-16.2	0.153	0.56	32.6	240

and the pressure is

$$p = -\frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_0^2 + \frac{1}{2}m_\rho^2\rho_0^2 + \sum_N \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_N} k^4 dk / [k^2 - M_N^{*2}]^{1/2}. \tag{10}$$

The vector mean field ω_0 and ρ_0 are determined through

$$\omega_0 = \frac{g_\omega(n_p + n_n)}{m_\omega^2}, \quad \rho_0 = \frac{g_\rho(n_p - n_n)}{m_\rho^2}, \tag{11}$$

where

$$n_B = \sum_N \frac{2k_N^3}{3\pi^2}, \quad N = p, n. \tag{12}$$

is the baryon density.

Finally, the mean field σ is fixed by imposing that

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \sigma} = 0. \tag{13}$$

It is always important to check the behavior of the models in the symmetric nuclear matter at saturation density and zero temperature, i.e., the bulk nuclear matter properties. A comprehensive work in this direction is found in [18], but the QMC model was not analyzed. Therefore, we compare the QMC model with two parameterizations of the well known hydrodynamical models [9, 44], namely, GM1 [45] and NL3 [11] and the density-dependent parameter (DDP) model TW [46]. In this work, we have chosen GM1 for being a parameterization which gives reasonable stellar macroscopic properties, NL3 because it is commonly used parameterization in the literature and TW because it is a very good density-dependent parameterization according to [18]. In [18], it was found that GM1 fails in the comparison with six constrains related to the symmetric nuclear matter

(SNM) and pure neutron matter (PNM), NL3 fails in nine of them and TW satisfies all constraints but one.

In Table 1, we can see the different parameters here analyzed and the ones used in the works of STOS [5, 6] and HS [7].

In Table 2, we show the properties of nuclear matter at saturation density and zero temperature. The first column shows the binding energy per nucleon, the second shows the baryonic density of the nucleons at the saturation point, and the third shows the effective mass relative to the free nucleon mass, the symmetry energy, and the compression modulus of the nucleons.

In Fig. 1, we show the relation of the effective mass as function of the baryonic density. We can see that the effective mass for the QMC model has always a larger value than the other models, which is an important characteristic

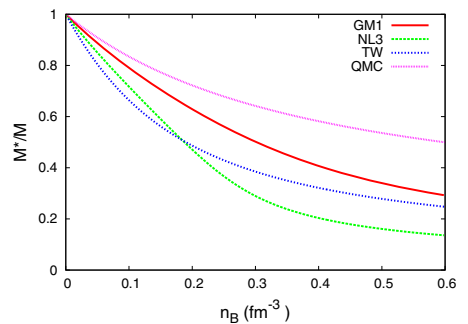


Fig. 1 The effective mass of the QMC model, the two Boguta-Bodmer parameterizations and the DDP model

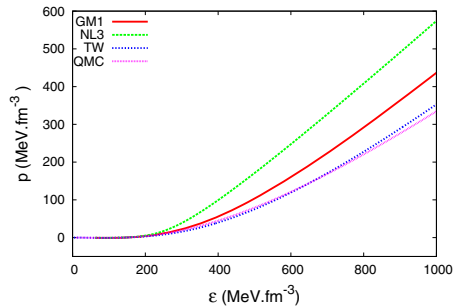


Fig. 2 Equations of state for symmetric matter obtained with the QMC model, the two Boguta-Bodmer parameterizations and the DDP model

if hyperons are to be included. As can be seen in [47], the effective mass of some of the Boguta-Bodmer-type models tend to zero at still low densities when all the baryons of the octet are included. For this reason, parameterizations with larger effective masses were proposed by Glendenning [45] (GM1, GL, etc) with the specific purpose of applications to stellar matter. The QMC model gives $M^*/M = 0.77$ at the saturation density, which agrees with the results derived from the non-relativistic analysis of scattering of neutrons from lead nuclei [38]. This result is larger in comparison with the effective masses obtained from many of the quantum hydrodynamical models, as can be seen in Table 2.

In Fig. 2, we show the pressure versus the energy density for infinite nuclear matter at $T = 0$, where we see that the curve obtained within the QMC model is similar to the one for TW and softer than the ones obtained with the GM1 and NL3 parameterizations.

Besides the bulk nuclear matter, it is also interesting to test the QMC model in the study of neutron star properties. In stellar matter, charge neutrality and beta equilibrium have to be enforced. Thereafter, we plot in Fig. 3 the equation of state for stellar matter. We can see that the curve for the QMC is softer than the others. However, as seen in Table 3, the QMC model gives a maximum mass for a neutron star bigger than two solar masses, in agreement with recent observational results of [36, 37].

We are aware that if we include hyperons in the EoS the maximum mass will be lowered. However, there are some ways to control this shortcoming. One usual method to make the EoS stiffer, without altering its properties below the nuclear saturation density, is to consider strange meson fields in the Lagrangian density and choose the hyperon-meson couplings such as that the appearance of strange hyperons are pushed toward high densities [48–50]. Recently, another alternative was proposed by [51], where

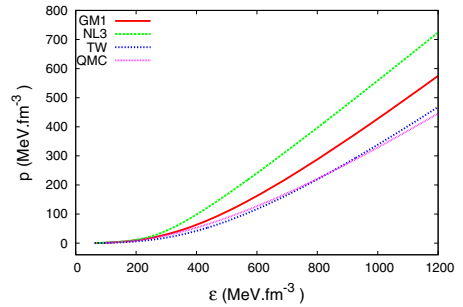


Fig. 3 Equations of state in beta equilibrium obtained from the QMC model, the two Boguta-Bodmer parameterizations and the DDP model

the authors force the σ self-interaction potential to rise abruptly in densities a bit larger than the nuclear saturation density, which results in a stiffer EoS, and consequently, the maximum possible stellar mass increases.

It is important to notice that this is a preliminary work towards the construction of a complete equation of state that in the future can be used to simulate core-collapse supernova explosions. According to [14], the concept of *soft* or *stiff* EoS, normally used in neutron star studies, may not apply here. The authors pointed out that as core-collapse SN explores a large range of densities and temperatures, an EoS which has a higher pressure at one density and temperature may have a lower pressure at another density and temperature.

3 Results and Discussions

We next construct an EoS table covering a wide range of proton fractions Y_p and baryon densities n_B . We show only some of the results related to the properties of matter with the QMC model and indicate the website from where the full table can be download.

We show in Fig. 4 the binding energy of homogeneous nuclear matter at zero temperature as a function of the baryon density for different proton fractions. For pure neutron matter and low proton fractions, there are no binding states, as expected. This result is in good agreement with Walecka [44] and STOS [5]. In Fig. 5, we show the compression modulus versus the baryonic density, where K is given by:

$$K = 9 n_B^2 \frac{d^2}{dn_B^2} \left(\frac{\epsilon}{n_B} \right), \tag{14}$$

n_B is the baryon number density and ϵ the total energy density of the nucleons. One can see that up to two times

Table 3 The first column of data shows the maximum star mass of each model. The second shows the respective radii. The third, the central energy density for such maximum mass and respective radius

Model	$M_{max} (M_{\odot})$	$R (Km)$	$\varepsilon_0 (fm^{-4})$
QMC	2.13	11.12	6.33
GM1	2.35	12.09	4.43
NL3	2.79	12.99	4.39
TW	2.07	10.61	6.27

nuclear saturation density, the compression modulus is practically independent of the proton fraction. It increases with the increase of the proton fraction only at higher densities.

In Fig. 6, the pressure p as a function of ρ_B is displayed. The baryon number density is related to the baryon mass density as $\rho_B = m_u n_B$ where $m_u = 931.49432$ MeV is the atomic mass unit. The pressure varies more with the Y_p for low values of p and lower densities, a result which is in good agreement with STOS’s work [5].

In Fig. 7, we show the proton and neutron chemical potentials, μ_p and μ_n , as function of the baryon density for different proton fractions. We see that for $Y_p = 0.1$, the chemical potential of the neutron is bigger than the one of the proton. As the proton fraction gets bigger, the curves approach each other, until they are the same in $Y_p = 0.5$, and for $Y_p = 0.6$ the chemical potential of the proton is bigger than the one of the neutron. This is an obvious result, but as the chemical potentials are very important quantities in the EoS tables, they are also presented graphically.

Once bulk nuclear matter properties are shown to behave as expected and present some important differences as compared with the other works, we proceed toward building

a preliminary EoS table with the QMC model, for homogeneous matter and zero temperature, which is available on the Web at http://deborafsc.ufsc.br/eos_qmc.t0.

In Table 4, we show the thermodynamic quantities described as in [5, 6]

1. Temperature: T [MeV].
2. Logarithm of baryon mass density: $\log_{10}(\rho_B)$ [$g\ cm^{-3}$].
3. Baryon number density: n_B [fm^{-3}].
4. Proton fraction: Y_p .

The proton fraction Y_p of uniform matter made of protons and neutrons is defined by

$$Y_p = \frac{n_p}{n_n + n_p}$$

where n_p and n_n are the number density of protons and neutrons, respectively.

5. Free energy per baryon: F [MeV].

The free energy per baryon reads,

$$f = \varepsilon - Ts.$$

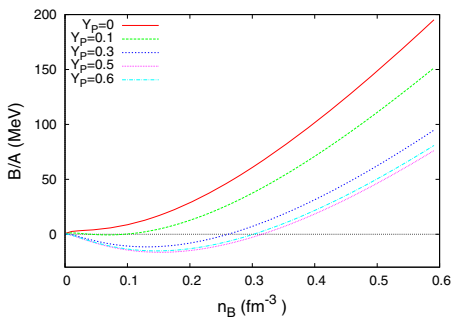


Fig. 4 Binding energy of the nucleons as function of the baryon density with proton fractions $Y_p = 0, 0.1, 0.3, 0.5,$ and 0.6

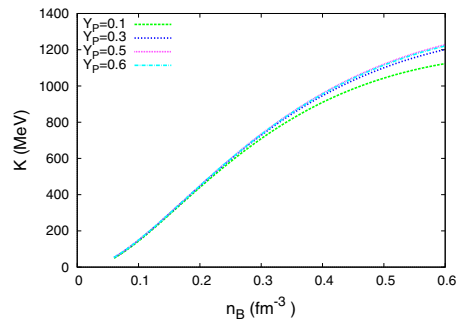


Fig. 5 Compression modulus as function of the baryon density with proton fractions $Y_p = 0.1, 0.3, 0.5,$ and 0.6

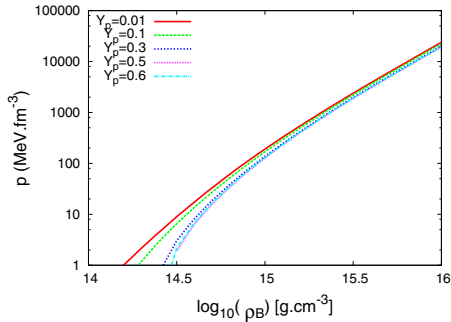


Fig. 6 Pressure as a function of the baryonic density for $Y_p = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5,$ and 0.6 proton fractions

This work is for zero temperature only, hence $f = \varepsilon$. The free energy per baryon is defined relative to the nucleon mass as,

$$F = \frac{\varepsilon}{n_B} - M = B/A.$$

- Internal energy per baryon: E_{int} [MeV].
The internal energy per baryon is defined relative to the atomic mass unit $m_u = 931.49432$ MeV as

$$E_{int} = \frac{\varepsilon}{n_B} - m_u.$$

- Entropy per baryon: $S[k_B]$.
In the present work, temperature is zero and therefore $S = 0$.
- Effective nucleon mass: M_N^* [MeV].
The effective nucleon mass is obtained in the QMC model for uniform matter with the relation $M_N^* = E_N^{bag}$, where $N = p, n$, and the bag energy is obtained through (7).
- Free neutron fraction: X_n .
- Free proton fraction: X_p .
- Pressure: p [MeV.fm⁻³].
The pressure is calculated from (10).
- Neutron chemical potential: μ_n [MeV].
For the zero temperature case, the chemical potential of the neutron relative to the free nucleon mass M reads:

$$\mu_n = [k_n^2 + M^{*2}]^{1/2} + g_\omega \omega_0 - \frac{g_\rho}{2} \rho_{03} - M.$$

- Proton chemical potential: μ_p [MeV].
For the zero temperature case, the chemical potential of the proton relative to the free nucleon mass M is:

$$\mu_p = [k_p^2 + M^{*2}]^{1/2} + g_\omega \omega_0 + \frac{g_\rho}{2} \rho_{03} - M.$$

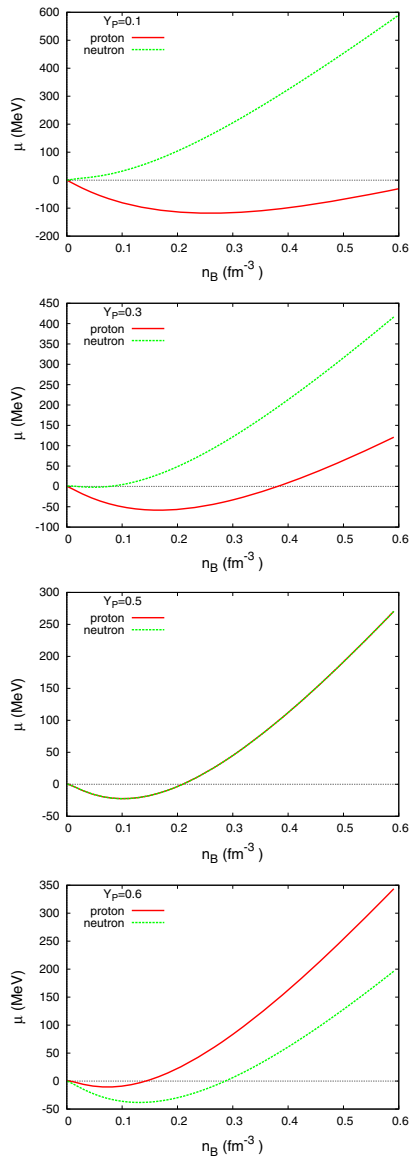


Fig. 7 Neutron and proton chemical potentials as function of the baryonic density. The continuous line represents μ_p and the dashed line represents μ_n

Table 4 EoS table at $T = 0$. It covers the proton fraction range $Y_p = 0-0.65$ with the linear grid spacing $\Delta Y_p = 0.01$ (66 points), and the density range $\rho_B = 10^{14} - 10^{16} \text{ g cm}^{-3}$ with the logarithmic grid

spacing $\Delta \log_{10}(\rho_B/[gcm^{-3}]) = 0.1$ (21 points). This table is available in the website http://deborafsc.ufsc.br/eos_qmc.0. An excerpt of it is shown here for guidance

T (MeV)	$\log_{10}(\rho_B)$ ($g.cm^{-3}$)	n_B (fm^{-3})	Y_p	F (MeV)	E_{int} (MeV)	S (k_B)	M^*_N (MeV)	X_n	X_p	p ($MeVfm^{-3}$)	μ_n (MeV)	μ_p (MeV)
0	14.0	0.0602	0	4.890	12.40	0	838.9	1	0	0.2371	23.43	-68.43
0	14.1	0.0758	0	6.090	13.60	0	816.9	1	0	0.5103	31.20	-82.21
0	14.2	0.0954	0	8.133	15.64	0	791.2	1	0	1.0890	42.68	-97.63
0	14.3	0.1201	0	11.56	19.07	0	761.5	1	0	2.2780	59.66	-114.3
0	14.4	0.1512	0	17.19	24.70	0	728.8	1	0	4.6550	84.64	-131.4

4 Conclusion and Future Works

In this work, we have used the QMC model for the first time to construct an equation of state grid, that in the future can be useful for the studies involving neutron star cooling and supernova simulations. We believe that with the quarks degree of freedom present in the QMC model, the EoS can contribute with part of the physics lacking for SN simulations to explode.

The next step, already under development, is the computation of the EoS grid at finite temperature. Thereafter, we will also study the very low density regions, where nuclear matter is no longer uniform. This will be done with the *pasta phase* approach [52, 53]. We believe that the use of the pasta phase for the description of the non-uniform part of matter that compose the EoS table in the SN simulations will certainly affect SN and cooling simulations.

Finally, we intend to include our complete EoS table in the CompOSE (CompStar Online Supernovae Equations of State) <http://compose.obspm.fr> data base. With the CompOSE data base, astrophysicists will be able to access a wide range of different EoS, ready for use and all in the same format.

Acknowledgments The authors would like to thank CNPq, grants 300602/2009-0 and 470366/2012-5 and FAPESC under the project 2716/2012, TR 2012000344 for the financial support.

References

1. H.T. Janka, Part. Ann. Rev. Nucl.Sci **62**, 407 (2012)
2. F. Hoyle, W.A. Fowler, Astrophys. J **132**, 565 (1960)
3. A. Burrows, Nature **403**, 727 (2000)
4. J.M. Lattimer, F.D. Swesty, Nucl. Phys. A **535**, 331 (1991)
5. H. Shen et al., Nucl. Phys. A **637**, 435 (1998)
6. H. Shen et al., Astrophys. J. Suppl **197**, 20 (2011)
7. M. Hempel et al., Astrophys. J **748**, 70 (2012)
8. Y. Sugahara, H. Toki, Nucl. Phys. A **579**, 557 (1994)

9. J. Boguta, A.R. Bodmer, Nucl. Phys. A **292**, 431 (1977)
10. J. Boguta, H. Stocker, Phys. Lett **120B**, 289 (1983)
11. G.A. Lalazissis, J. König, P. Ring, Phys. Rev. C **55**, 540 (1997)
12. H. Toki et al., Nucl. Phys. A **588**, 357c (1995)
13. B.G. Todd-Rutel, J. Piekarewics, Phys. Rev. Lett **95**, 122501 (2005)
14. A.W. Steiner, M. Hempel, T. Fischer, Astrophys. J **774**, 17 (2013)
15. F.J. Fattoyev et al., Phys. Rev. C **82**, 055803 (2010)
16. S. Typel et al., Phys. Rev. C **81**, 015803 (2010)
17. M. Hempel, J. Schaffner-Bielich, Nucl. Phys. A **837**, 210 (2010)
18. M. Dutra et al., Phys. Rev. C **90**, 055203 (2014)
19. Y. Sekiguchi et al., Phys. Rev. D **91**, 064059 (2015)
20. S. Nasu et al., Astrophys. J **801**, 78 (2015)
21. E. Abdikamalov et al., Phys. Rev. D **90**, 044001 (2014)
22. C.L. Fryer, A. Heger, Astrophys. J **541**, 1033 (2000)
23. T.A. Thompson, A. Burrows, P.A. Pinto, Astrophys. J. Suppl **592**, 434 (2003)
24. O. Pejcha, T.A. Thompson, Astrophys. J **801**, 90 (2015)
25. R. Buras et al., Phys. Rev. Lett **90**, 241101 (2003)
26. K. Sumiyoshi et al., Nucl. Phys. A **730**, 227 (2004)
27. J.M. Lattimer, M. Prakash, Phys. Reports **333-334**, 121 (2000)
28. K. Sumiyoshi et al., Astrophys. J **629**, 922 (2005)
29. P.A.M. Guichon, Lett. Phys. B **200**, 235 (1988)
30. A. Chodos et al., Phys. Rev. D **9**, 3471 (1974)
31. S. Fleck et al., Nucl. Phys. A **510**, 731 (1990)
32. K. Saito, A.W. Thomas, Phys. Lett. B **327**, 9 (1994)
33. K. Saito, A.W. Thomas, Phys. Rev. C **52**, 2789 (1995)
34. P.A.M. Guichon et al., Nucl. Phys. A **601**, 349 (1996)
35. P.K. Panda, D.P. Menezes, C. Providência, Phys. Rev. C **69**, 025207 (2004)
36. P. Demorest et al., Nature **467**, 1081 (2010)
37. J. Antoniadis et al., Science **340**, 6131 (2013)
38. C.H. Johnson, D.J. Horen, C. Mahaux, Phys. Rev. C **36**, 2252 (1987)
39. D. Page, U. Geppert, F. Weber, Nucl. Phys. A **777**, 497 (2006)
40. R. Negreiros, S. Schramm, F. Weber, (2013). arXiv:1307.7692v1 astro-ph 1
41. M. Fortin et al., Phys. Rev. C **82**, 065804 (2010)
42. S.M. de Carvalho et al., (2014). arXiv:1411.5316v1 astro-ph 1
43. A.M. Santos, C. Providência, Phys. Rev. C **79**, 045805 (2009)
44. B.D. Serot, J.D. Walecka, Adv. Nucl. Phys **16**, 1 (1986)
45. N.K. Glendenning, *Compact Stars* (Springer-Verlag, New York, 2000)
46. S. Typel, H.H. Wolter, Nucl. Phys. A **656**, 331 (1999)

47. A.M.S. Santos, D.P. Menezes, Phys. Rev. C **69**, 045803 (2004)
48. S. Weissenborn, D. Chatterjee, J. Schaffner-Bielich, Phys. Rev. C **85**, 065802 (2012)
49. S. Weissenborn, D. Chatterjee, J. Schaffner-Bielich, Nucl. Phys. A **881**, 62 (2012)
50. L.L. Lopes, D.P. Menezes, Phys. Rev. C **89**, 025805 (2014)
51. K.A. Maslov, E. Kolomeitsev, D.M. Voskresensky, (2015). arXiv:1508.03771 astro-ph 1
52. T. Maruyama et al., Phys. Rev. C **72**, 015802 (2005)
53. C. Providência et al., Eur. Phys. J. A **50**, 44 (2014)

Nuclear pasta phases within the quark-meson coupling model

Guilherme Grams,¹ Alexandre M. Santos,¹ Prafulla K. Panda,² Constança Providência,³ and Débora P. Menezes¹

¹*Departamento de Física, CFM, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brazil*

²*Department of Physics, Utkal University, Bhubaneswar-751 004, India*

³*CFisUC, Department of Physics, University of Coimbra, P-3004-516 Coimbra, Portugal*

(Received 4 November 2016; revised manuscript received 21 March 2017; published 19 May 2017)

In this work, the low-density regions of nuclear and neutron star matter are studied. The search for the existence of nuclear pasta phases in this region is performed within the context of the quark-meson coupling (QMC) model, which incorporates quark degrees of freedom. Fixed proton fractions are considered, as well as nuclear matter in β equilibrium at zero temperature. We discuss the recent attempts to better understand the surface energy in the coexistence phases regime and we present results that show the existence of the pasta phases subject to some choices of the surface energy coefficient. We also analyze the influence of the nuclear pasta on some neutron star properties. The equation of state containing the pasta phase will be part of a complete grid for future use in supernova simulations.

DOI: [10.1103/PhysRevC.95.055807](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.95.055807)

I. INTRODUCTION

At very low nuclear matter density, a competition between the strong and the electromagnetic interactions takes place [1,2], leading to a configuration in which its free energy per particle may be lower than that corresponding to the homogeneous phase at the same density. The so-called *pasta phases* are therefore the preferred shapes of some systems at these densities [3–6]. These structures look like droplets, bubbles, rods, tubes, and slabs [3] and are expected to exist [7,8] both in the crust of neutron stars (zero temperature, very low proton fraction, matter in β equilibrium) and in supernova (finite temperature, proton fraction around 0.3).

From analysis of these glitches, the authors of Ref. [9] have related the fraction of the moment of inertia contained in the crust of the Vela pulsar with the mass and the radius of the neutron star and the pressure and density at the crust-core interface. From realistic equations of state (EoS), they have obtained an expected range of values for the pressure at the inner edge of the crust and therefore also a relation between the radius and mass of the pulsar. This work shows the importance of understanding the exact density limits of the pasta phases and its consequences on the choice of appropriate equations of state. More recently, the existence of the pasta phase in the neutron star crust was shown to considerably alter the neutrino mean-free paths and its diffusion coefficients as compared with the homogeneous matter results. The consequent differences in neutrino opacities certainly influence the Kelvin-Helmholtz phase of the star evolution [10,11].

On the other hand, due to well-known observational difficulties, simulations of core-collapse supernova have played an important role in the study of supernovae explosions and the evolution of their possible remnants. Hence, obtaining appropriate equations of state (EoS) for core-collapse supernova simulations has been a very challenging task. For this class of EoS, one needs a grid of thermodynamic quantities with densities ranging from 10^5 to more than 10^{15} g cm⁻³, proton fractions up to about 0.6, and temperatures varying from zero to more than 100 MeV. So far, in almost all models used for the obtainment of a complete grid with the aim of being tested

in supernova simulations, inhomogeneous matter believed to be present at low densities has been considered only with the inclusion of clusters [12–16]. The EoS of Lattimer and Swesty [17] takes into account the presence of bubbles besides the clusters and allows for the existence of different shapes in a phenomenological construction. However, according to Refs. [18,19], the pasta phase may form 10–20% of the mass of the supernova core, and therefore its role should not be disregarded. The pasta phase has been studied in the context of several models [1,19–22] and all of them predict its existence under the conditions expected to be found in the inner crust of compact objects, although the profiles show that it varies in many aspects [8,20].

The quark-meson coupling (QMC) model [23–25] describes nuclear matter as a system of nonoverlapping MIT-like bags, interacting with each other by interchanging meson fields. Hence, it contains more fundamental degrees of freedom than the usual quantum hydrodynamic models, so far used in the study of the pasta phases [1,10,20,26]. With the aim of constructing a complete grid for supernova simulations, a preliminary work at zero temperature, $\rho = 10^{14}$ – 10^{16} g cm⁻³ and $Y_p = 0$ – 0.65 , was done [27] where a comparison with other models revealed that the QMC is a promising model.

In the present work, we study the possible existence of the pasta structures within the QMC model at zero temperature and its dependence on the surface energy coefficient. The work is organized as follows: In Sec. II, the QMC model is briefly reviewed and the method of the coexisting phases used to build the pasta phase is presented in Sec. III, where a detailed study of the surface tension coefficient is performed. In Sec. IV, we present our results and draw the conclusions. In the last section, we make some final remarks.

II. THE QUARK-MESON COUPLING MODEL

In the QMC model, the nucleon in nuclear medium is assumed to be a static spherical MIT bag in which quarks interact with the scalar (σ) and vector (ω , ρ) fields, and those are treated as classical fields in the mean field approximation

(MFA) [23]. The quark field, ψ_{qN} , inside the bag then satisfies the equation of motion:

$$[i\partial - (m_q^0 - g_\sigma^q) - g_\omega^q \omega \gamma^0 + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_{03} \gamma^0] \psi_{qN}(x) = 0, \\ q = u, d, \quad (1)$$

where m_q^0 is the current quark mass and g_σ^q , g_ω^q , and g_ρ^q denote the quark-meson coupling constants. The normalized ground state for a quark in the bag is given by

$$\psi_{qN}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{N}_{qN} \exp(-i\epsilon_{qN} t / R_N) \\ \times \left(\begin{array}{c} j_{0N}(x_{qN} r / R_N) \\ i\beta_{qN} \vec{\sigma} \cdot \hat{r} j_{1N}(x_{qN} r / R_N) \end{array} \right) \frac{\chi_q}{\sqrt{4\pi}}, \quad (2)$$

where

$$\epsilon_{qN} = \Omega_{qN} + R_N (g_\omega^q \omega + \frac{1}{2} g_\rho^q \tau_z \rho_{03}) \quad (3)$$

and

$$\beta_{qN} = \sqrt{\frac{\Omega_{qN} - R_N m_q^*}{\Omega_{qN} + R_N m_q^*}}, \quad (4)$$

with the normalization factor given by

$$\mathcal{N}_{qN}^{-2} = 2R_N^3 j_0^2(x_q) [\Omega_q (\Omega_q - 1) + R_N m_q^* / 2] / x_q^2, \quad (5)$$

where $\Omega_{qN} \equiv \sqrt{x_{qN}^2 + (R_N m_q^*)^2}$, $m_q^* = m_q^0 - g_\sigma^q \sigma$, R_N is the bag radius of nucleon N , and χ_q is the quark spinor. The bag eigenvalue for nucleon N , x_{qN} , is determined by the boundary condition at the bag surface

$$j_{0N}(x_{qN}) = \beta_{qN} j_{1N}(x_{qN}). \quad (6)$$

The energy of a static bag describing nucleon N consisting of three quarks in ground state is expressed as

$$E_N^{\text{bag}} = \sum_q n_q \frac{\Omega_{qN}}{R_N} - \frac{Z_N}{R_N} + \frac{4}{3} \pi R_N^3 B_N, \quad (7)$$

where Z_N is a parameter which accounts for zero-point motion of nucleon N and B_N is the bag constant. The set of parameters used in the present work is determined by enforcing stability of the nucleon (here, the ‘‘bag’’), much like in Ref. [28], so there is a single value for proton and neutron masses. The effective mass of a nucleon bag at rest is taken to be $M_N^* = E_N^{\text{bag}}$.

The equilibrium condition for the bag is obtained by minimizing the effective mass, M_N^* , with respect to the bag radius

$$\frac{dM_N^*}{dR_N} = 0, \quad N = p, n. \quad (8)$$

By fixing the bag radius $R_N = 0.6$ fm and the bare nucleon mass $M = 939$ MeV, the unknowns $Z_N = 4.0050668$ and $B_N^{1/4} = 210.85$ MeV are then obtained. Furthermore, the desired values of $B/A \equiv \epsilon/\rho - M = -16.45$ MeV at saturation $n = n_0 = 0.15$ fm $^{-3}$ are achieved by setting $g_\sigma^q = 5.9810$, $g_\omega = 8.9817$, $g_\rho = 8.6510$, where $g_\omega = 3g_\omega^q$ and $g_\rho = g_\rho^q$. The meson masses are $m_\sigma = 550$ MeV, $m_\omega = 783$ MeV, and $m_\rho = 770$ MeV. With this parameterization, some of the bulk properties at saturation density, such as the

TABLE I. Nuclear matter bulk properties obtained with the QMC model. All quantities are taken at saturation.

Model	B/A (MeV)	n_0 (fm $^{-3}$)	Λ_v	g_ρ	M^*/M	J (MeV)	L_0 (MeV)	K (MeV)
QMC	-16.4	0.15	0.0	8.6510	0.77	34.5	90	295
QMC $\omega\rho$	-16.4	0.15	0.03	9.0078	0.77	30.9	69	295

the compressibility, the symmetry energy, and the slope of the symmetry energy, are given in Table I. For a slightly different bag value, i.e., $B_N^{1/4} = 211.033$ MeV, the binding energy is -15.7 MeV and the symmetry energy and its slope become respectively 92.56 and 33.4 MeV. The results which we discuss next are very similar for both bag values and relevant parameter sets, i.e., the one just mentioned and the one shown in Table I. The properties at saturation of the QMC model, given in the first line of Table I, are within the accepted values (see Refs. [29,30], for instance), except for L_0 that presents a value which is already considered too large. However, J and L_0 can be easily controlled by the inclusion of a $\omega\rho$ interaction, as discussed in Refs. [31–33]. As the value of this interaction gets larger, the values of the symmetry energy and its slope become lower. We have next also included an $\omega\rho$ interaction strength that results in a symmetry energy equal to 22 MeV at 0.1 fm $^{-3}$ with a consequent change in the g_ρ coupling constant. The new values of the symmetry energy and its slope at saturation are also given in Table I. In this work, we study how much the choice of the parameterization affects the pasta phase structure and influences stellar matter. Other parametrizations are also possible. Of particular interest is the modified QMC model, where the parameters are adjusted so that the constituent quarks are confined to a flavor-independent potential where pionic and gluonic corrections are taken into account [34,35]. These studies will be performed in future investigations. Within the parameterization we have chosen, the total energy density of the nuclear matter reads

$$\epsilon = \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_{03}^2 + 3\Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \omega_0^2 \rho_{03}^2 \\ + \sum_N \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_N} k^2 dk [k^2 + M_N^{*2}]^{1/2}, \quad (9)$$

and the pressure is

$$p = -\frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \rho_{03}^2 + \Lambda_v g_\omega^2 g_\rho^2 \omega_0^2 \rho_{03}^2 \\ + \sum_N \left(\frac{1}{3\pi^2} \right) \int_0^{k_N} k^4 dk / [k^2 + M_N^{*2}]^{1/2}. \quad (10)$$

The vector mean fields ω_0 and ρ_{03} are determined through

$$\omega_0 = \frac{g_\omega(n_p + n_n)}{m_\omega^2}, \quad \rho_{03} = \frac{g_\rho(n_p - n_n)}{2m_\rho^2}, \quad (11)$$

where

$$n_B = n_p + n_n = \sum_N \frac{k_N^3}{3\pi^2}, \quad N = p, n, \quad (12)$$

is the baryon density and m_{ω}^*, m_{ρ}^* are the effective masses of the meson fields given by $m_{\omega}^* = m_{\omega}^2 + 2\Lambda_v g_{\omega}^2 g_{\rho}^2 \rho_0^2$ and $m_{\rho}^* = m_{\rho}^2 + 2\Lambda_v g_{\omega}^2 g_{\rho}^2 \omega_0^2$.

Finally, the mean field σ is fixed by imposing that

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \sigma} = 0. \quad (13)$$

As mentioned in the introduction, our interest lies in matter at fixed proton fraction given by $Y_p = n_p/n_B$ as well as in stellar matter in β -equilibrium conditions, which for the system made up of protons, neutrons, and electrons is

$$\mu_p = \mu_n - \mu_e. \quad (14)$$

Charge neutrality requires that

$$n_p = n_e. \quad (15)$$

In this article, we work with the low-density regions of the neutron stars and in this region muons are not present.

III. COEXISTING PHASES APPROXIMATION

In this approximation, matter is organized in regions of lower density, generally with a neutron gas in the background and regions of higher density. For a given total density n_B and proton fraction Y_p , the pasta structures are built with different geometrical forms. The forms are usually called sphere (bubble), cylinder (tube), and slab, in three, two, and one dimensions, respectively. This is achieved by calculating the density and the proton fraction of the pasta and of the background gas from the Gibbs conditions, that impose that both phases have the same pressure and proton and neutron chemical potentials, so that the following equations must be solved simultaneously:

$$P^I = P^{II}, \quad (16)$$

$$\mu_p^I = \mu_p^{II}, \quad (17)$$

$$\mu_n^I = \mu_n^{II}, \quad (18)$$

$$n_p = n_B Y_p = f n_p^I + (1-f)n_p^{II}, \quad (19)$$

where I (II) label the high- (low-) density phase, n_p is the global proton density, and f is the volume fraction of phase I ,

$$f = \frac{n_B - n_B^{II}}{n_B^I - n_B^{II}}. \quad (20)$$

If stellar matter is considered, the above equations are slightly altered in such a way that

$$\mu_n^I = \mu_n^{II}, \quad (21)$$

$$\mu_e^I = \mu_e^{II}, \quad (22)$$

and

$$f(n_p^I - n_e^I) + (1-f)(n_p^{II} - n_e^{II}) = 0, \quad (23)$$

along with Eq. (16). Here, the density of electrons is no longer uniform as in the fixed proton fraction case. It appears as the

solution of the above equation. After the lowest energy state is achieved, the energy obtained for hadronic matter is given by

$$\varepsilon_{\text{matter}} = f \varepsilon^I + (1-f) \varepsilon^{II} + \varepsilon_e, \quad (24)$$

to which the surface and Coulomb terms are added to account for the total energy density of the system, which becomes

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{matter}} + \varepsilon_{\text{surf}} + \varepsilon_{\text{Coul}}. \quad (25)$$

By minimizing the sum $\varepsilon_{\text{surf}} + \varepsilon_{\text{Coul}}$ with respect to the size of the droplet (bubble), rod (tube), or slab, we get [6] $\varepsilon_{\text{surf}} = 2\varepsilon_{\text{Coul}}$, where

$$\varepsilon_{\text{Coul}} = \frac{2\alpha}{4^{2/3}} (e^2 \pi \Phi)^{1/3} [SD(n_p^I - n_p^{II})]^{2/3}, \quad (26)$$

where $\alpha = f$ for droplets, rods, and slabs, and $\alpha = 1 - f$ for tubes and bubbles. \mathcal{S} is the surface tension discussed in the next subsection and Φ is given by

$$\Phi = \begin{cases} \left(\frac{2-D\alpha^{1-2/D}}{D-2} + \alpha \right) \frac{1}{D+2}, & D = 1, 3 \\ \frac{\alpha-1-\ln\alpha}{D+2}, & D = 2 \end{cases}. \quad (27)$$

As we are treating only the low-density region, we follow the parametrization prescription proposed in Ref. [36] for the effective nucleon mass as a nonlinear function of the σ meson:

$$M_N^* = M_N - g_{\sigma N}(\sigma)\sigma \quad (28)$$

with

$$g_{\sigma N}(\sigma) = \left(1 + \frac{b}{2}\sigma + \frac{c}{3}\sigma^2 \right) g_{\sigma N}, \quad (29)$$

where $g_{\sigma N} = 3g_{\sigma}^d S_N(0) = 8.6157$, $b = -0.0007141$ 96 MeV^{-1} , and $c = 9.84481 \times 10^{-8} \text{ MeV}^{-2}$. To obtain these parameters, we have plotted the exact effective mass at subsaturation density and fitted the curve with a polynomial expression. Our best fitting gives only the terms mentioned in Eq. (29) and one can see that the c value is small, which means that a cubic term in σ is only a correction that we have opted to keep in our calculation. Notice that these values are valid only for this specific parameterization.

Before we proceed to the discussion of the surface tension coefficient, it is important to point out that the coexistence phase (CP) method does not take into account the Coulomb interaction and finite-size effects in a self-consistent way. An alternative prescription within the compressible liquid drop (CLD) model incorporates these important effects by minimizing the total free energy, where surface and Coulomb terms are explicitly included [37] self-consistently. The resulting pressure and proton chemical potential equilibrium conditions are slightly different from the ones above. The differences between both prescriptions (CP and CLD) can be easily seen in Ref. [38] and the resulting pasta properties differ at very low densities [37,38], generally lower than 10^{-3} fm^{-3} when the matching to the outer crust EoS is performed. As will be shown next, our calculation depends also on a free parameter, that is fitted according to accepted values of the surface tension.

A. The surface tension coefficient

When Gibbs's conditions are used in the coexistence phases approximation, the surface tension coefficient is always a

tricky point, since the existence of the pasta phase depends on its value. Different considerations on this coefficient have been made in the literature [1,6,20,26,39,40] and a choice generally employed is to fit the surface energy according to the Thomas-Fermi results. Since there are no Thomas-Fermi calculations for the QMC model to guide us, we have opted to use a method with more physical ingredients than simply choosing one specific value for S , as done in many papers both for quark and hadronic matter. Some calculations based on nuclear mass formula fits produce results ranging from 1.06 to 1.34 MeV fm⁻² [17] and these values have been used randomly. In the present work, to achieve a numerical value for the surface tension coefficient, the geometrical approach introduced in Ref. [41] is used next. In Ref. [42], this method was used to compute the surface tension in quark matter but recently it was also used to obtain the surface tension coefficient for hadronic matter [26]. The main ideas are also discussed next.

The surface tension coefficient, S , which measures the energy per unit area necessary to create a planar interface between the two phases, is given by

$$S = \frac{a}{n_g} \sqrt{2\varepsilon_g} \int_{n_1}^{n_2} \sqrt{\Delta\varepsilon} dn, \quad (30)$$

where $n_g = \frac{n_1+n_2}{2}$, $\varepsilon_g = \frac{\varepsilon(n_1)+\varepsilon(n_2)}{2}$, n_1 , and n_2 are the two coexistence baryonic density points and $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{hm} - \varepsilon_{nhm}$ is the difference between the energy density of the homogeneous and the nonhomogeneous matter. The energy densities for both phases are obtained from Eqs. (9) and (24) and then fitted to a functional form given by $\varepsilon_i = \alpha_i n^2 + \beta_i n + \gamma_i$, $i = hm, nhm$. Graphs showing this construction for hadronic matter can be found in Ref. [26] and we do not reproduce them here. In this geometrical approach, the width of the interface region and the magnitude of S are controlled by the adjustable parameter a present in Eq. (30). In Ref. [42] the authors used $a = 1/m_\sigma = 0.33$ fm, where $m_\sigma = 600$ MeV is the mass of the σ meson, a natural scale for quark matter. As we are treating hadronic matter in the present work, our initial guess was $a = 1/M_N = 0.21$ fm, where $M_N = 939$ MeV is the nucleon mass. Another attempt followed the recipe used to find the surface tension of hadronic matter in Ref. [26] with an extended version of the Nambu-Jona-Lasinio model, where $a = 0.1$ fm was adopted to reproduce the value of the surface tension coefficient for the NL3 model [43] within a Thomas-Fermi calculation [39]. Our final choice was $a = 0.023$ fm, so that the value $S = 1.123$ MeV fm⁻² for $Y_p = 0.5$ was reproduced as in Refs. [26,39,40]. Note that this value is the same for all values of the interaction strength Λ_v because it was chosen for symmetric nuclear matter, where the $\omega\rho$ interaction plays no role. In Fig. 1 we compare the three choices of a in the search for the pasta phases, i.e., $a = 0.023$ fm, $a = 0.1$ fm, and $a = 1/M_N = 0.21$ fm, for $Y_p = 0.5$. We can see that there is a larger region of the pasta phase for $a = 0.023$ fm. In fact, for $Y_p = 0.5$ no pasta phases were found with either $a = 0.1$ or $a = 0.21$ fm. Therefore, we have chosen $a = 0.023$ fm to be used throughout our calculations.

It is important to stress that the surface tension coefficient varies with the isospin for a given value of a . In Table II, we

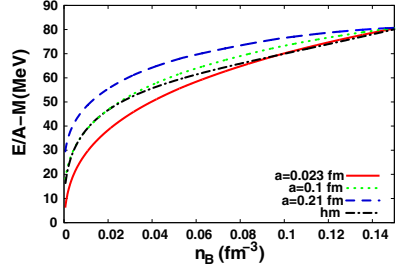


FIG. 1. QMC energy per baryon as a function of the baryon density for proton fraction 0.5 and different choices of a . hm stands for homogeneous npe matter.

show the values of S for seven different proton fractions and $a = 0.023$. In order to obtain the pasta phases in β -equilibrium matter, we have fitted these values of S to an exponential functional. For the QMC model, a function of the form $S = d(1 - e^{-\Lambda_v \rho^x})$, with $d = 1.58647$, $e = 0.0746702$, and $f = 0.265407$ is obtained. For the QMC $\omega\rho$, we have used the same function, with $d = 1.41403$, $e = 0.0725015$, and $f = 0.206082$. In both cases, x is the global proton fraction Y_p and the functions are shown in Fig. 2. We note that there are some works where the proton fraction used in the calculation of the surface tension is the one of the denser phase.

Previous works [1,6,20,26,39,40] have shown that the surface tension at zero temperature not only varies with the proton fraction but presents values in between 1.0 and 1.2 MeV fm⁻² for $Y_p = 0.5$ (see Fig. 5 in Ref. [31], for instance). If we constrain the parameter a so that these values are reproduced, we obtain $a = 0.020$ – 0.025 fm. The value $a = 0.020$ fm yields $S = 1.0$ MeV fm⁻² and $a = 0.025$ fm results in $S = 1.2$ MeV fm⁻² for $Y_p = 0.5$. Choosing $a = 0.025$ would increase the surface energy in 8.7%, having a very small effect on the crust-core transition of β -equilibrium matter. Therefore, we proceed with the comparison of the results obtained with $a = 0.020$ and with $a = 0.023$, which entails $S = 1.123$ MeV fm⁻² for $Y_p = 0.5$. In Table III, we compare the surface tension coefficient S and the transition density ρ_t for the two values of a . We see that ρ_t is practically

TABLE II. Surface tension coefficient for QMC and QMC $\omega\rho$ models and different proton fractions.

Y_p	QMC S (MeV fm ⁻²)	QMC $\omega\rho$ S (MeV fm ⁻²)
0.05	0.093	0.093
0.1	0.175	0.194
0.2	0.393	0.429
0.25	0.511	0.556
0.3	0.647	0.692
0.4	0.923	0.941
0.5	1.123	1.123

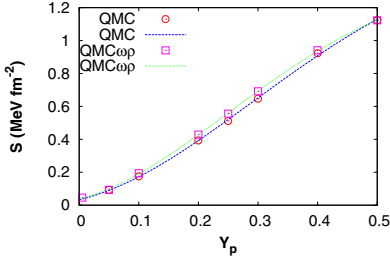


FIG. 2. Surface tension fit for the QMC and QMCop models.

independent of a in the range $[0.020, 0.023]$, not only for β -equilibrium matter but also for matter with fixed proton fractions. The surface tension coefficient as a function of the baryon density is displayed in Fig. 3 for matter in β equilibrium, from where we note that S decreases with the density. We can see that the surface tension coefficient is only slightly larger for $a = 0.023$ fm both from Table III and Fig. 3.

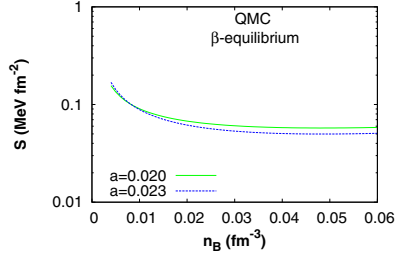
IV. RESULTS AND CONCLUSIONS

Finally, we present our results for the pasta phases obtained with the QMC model at zero temperature, within the coexisting phases approximation. We remark that pasta is only predicted when its free energy per baryon is lower than the homogeneous npe (neutron-proton-electron) matter.

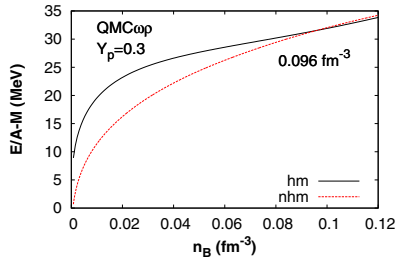
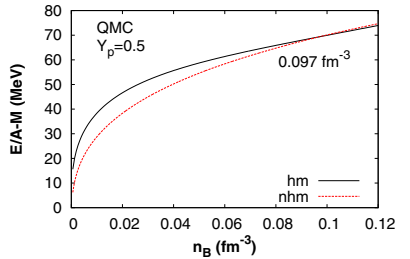
In Fig. 4, we display the free energy per baryon for $Y_p = 0.5$ and $Y_p = 0.3$. The curves for β -equilibrium matter are shown in Fig. 5. The three cases show the presence of pasta phases, which are bigger for larger proton fractions, as already seen in other works. In Fig. 6, we can see the density distribution of the pasta structures. For $Y_p = 0.5$, three different structures are present: droplets (3D), rods (2D), and slabs (1D), while for $Y_p = 0.3$, a small amount of tubes (2D) also appear. A similar behavior was obtained in Ref. [44] for different models. The reason was pointed out to the non-self-consistent treatment of the Coulomb force, which prevents a redistribution of protons.

TABLE III. Surface tension coefficient for different proton fractions for the QMC model, $L=90$ MeV, and the a values considered. ρ_t is the transition density that separates the pasta from the homogeneous phase.

Y_p	S (MeV fm $^{-2}$)	a (fm)	ρ_t (fm $^{-3}$)
0.5	1.00	0.020	0.100
0.5	1.12	0.023	0.097
0.3	0.58	0.020	0.094
0.3	0.65	0.023	0.096
0.1	0.16	0.020	0.065
0.1	0.17	0.023	0.058
β -eq	plot	0.020	0.062
β -eq	plot	0.023	0.062


 FIG. 3. Surface tension coefficient as a function of the baryon density for β -equilibrium matter obtained with the QMC model, $L = 90$ MeV, and two choices of a .

As a result, the CP method predicts smaller extensions of the pasta phases as a whole and for symmetric matter the larger electron fraction originates stronger Debye screening effects and therefore hinders the appearance of tubes. Although the isospin asymmetry affects the structures and distribution of the pasta phases, the difference on the density dependence of the symmetry energy of QMC and QMCop is not strong enough to show any effect. In Ref. [45], rods and slabs were present in β -equilibrium matter; however, the stellar matter


 FIG. 4. Free energy per baryon as function of the baryon density calculated with the QMCop model and $a = 0.023$ for homogeneous matter (hm) and nonhomogeneous matter (nhm) with (a) the proton fraction 0.5 and (b) proton fraction 0.3.

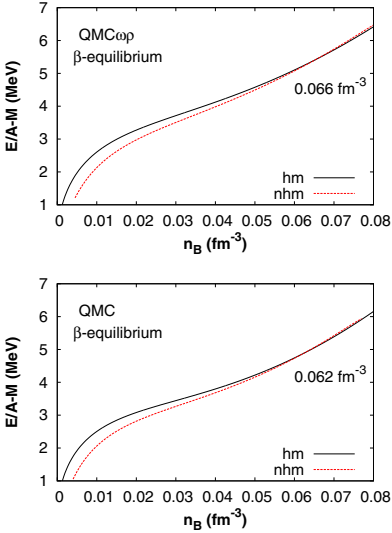


FIG. 5. Free energy per particle for homogeneous (hm) and non-homogeneous (nhm) matter obtained in β equilibrium with $\text{QMC}_{\omega\rho}$ with $L = 69$ MeV (top) and QMC with $L = 90$ MeV (bottom).

EoS was calculated with models with a smaller slope L , in particular, $L \leq 60$ MeV.

The pasta phases shrink with the decrease of the proton fraction and for β -equilibrium matter only droplets are present. The transition density between the pasta phases and homogeneous matter shows the same behavior as in all models; i.e., it decreases for lower proton fraction and the lowest value is obtained for matter in β equilibrium. The calculations performed in Refs. [1] and [20] with the CP method used two different prescriptions for the surface tension coefficient, based

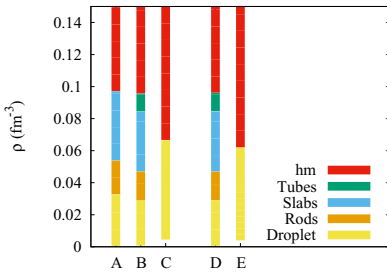


FIG. 6. Phase diagrams at $T = 0$ obtained with CP approximation for $\text{QMC}_{\omega\rho}$ with $L = 69$ MeV: (A) $Y_p = 0.5$, (B) $Y_p = 0.3$, (C) β equilibrium, and for QMC with $L = 90$ MeV: (D) $Y_p = 0.3$, (E) β equilibrium. hm stands for homogeneous matter.

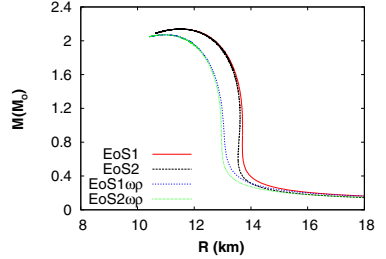


FIG. 7. Mass-radius relation for a family of neutron stars described with the QMC and $\text{QMC}_{\omega\rho}$ models with (EoS1 and EoS1 $\omega\rho$) and without (EoS2 and EoS2 $\omega\rho$) the pasta phases.

on a fitting of the Thomas-Fermi results to a Skyrme and to relativistic models respectively. Apart from these details in the calculations that can modify slightly the quantitative results, the qualitative conclusions do not differ in general.

We note that in Fig. 5(bottom), the transition core-crust of a neutron star takes place at $n_B = 0.062$ fm^{-3} for the QMC model and at a slightly bigger density, $n_B = 0.066$ fm^{-3} , if the $\omega\rho$ interaction is included, as seen in Fig. 5(top). A correlation between the transition densities and the slope has been identified in Refs. [20,46] and in many other works. Since the original QMC model has a symmetry energy slope larger than the $\text{QMC}_{\omega\rho}$, a lower crust-core transition density was already expected for that model.

Finally, we analyze the influence of the pasta phases on some neutron star properties. In Fig. 7 we show the mass-radius relation. The $M(R)$ curves are built with four equations of state, from where we can see the influence of the pasta phase and of the $\omega\rho$ interaction on the neutron star properties; see Table IV. EoS1 and EoS1 $\omega\rho$ contain the pasta phase while EoS2 and EoS2 $\omega\rho$ do not. We have used the homogeneous QMC and $\text{QMC}_{\omega\rho}$ EoS for the core, QMC and $\text{QMC}_{\omega\rho}$ with pasta, and the Baym-Bethe-Pethick (BBP) [47] EoS for the inner crust and the Baym-Pethick-Sutherland (BPS) [48] EoS for the outer crust.

If the QMC interaction is considered, EoS1, the BPS + BBP EoS goes up to $n_B = 3.7 \times 10^{-3}$ fm^{-3} , and the pasta phases lie in between $n_B = 0.4 - 6.2 \times 10^{-2}$ fm^{-3} above this density range the core EoS starts. We match the BPS + BBP EoS directly to the core EoS for densities below 8.9×10^{-3} fm^{-3} for EoS2. When the $\omega\rho$ interaction is included,

TABLE IV. Properties of a family of neutron stars obtained with the QMC model. Comparison between equations of state, with and without pasta phase and with and without $\omega\rho$ term.

EoS	Pasta	L (MeV)	$M_{max}(M_{\odot})$	R (km)	$R_{M=1.4M_{\odot}}$ (km)
EoS1	Yes	90	2.14	11.53	13.61
EoS1 $\omega\rho$	Yes	69	2.07	10.97	12.88
EoS2	No	90	2.14	11.51	13.55
EoS2 $\omega\rho$	No	69	2.07	10.96	12.83

i.e., for QMC $\omega\rho$, EoS1 $\omega\rho$, the BPS + BBP EoS goes up to $n_B = 3.7 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$, and the pasta phases lie in between $n_B = 0.45 - 6.6 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-3}$ when the core EoS takes on. We match the BPS + BBP EoS directly to the core EoS for densities below $8.9 \times 10^{-3} \text{ fm}^{-3}$ for EoS2 $\omega\rho$. Note that the maximum masses do not change upon the existence of the pasta phases, and both cases $M_{max} = 2.14 M_\odot$ (QMC) and $M_{max} = 2.07 M_\odot$ (QMC $\omega\rho$), satisfy the constraints imposed by the recent measurements of the $2M_\odot$ pulsars PSR J16142230 and PSR J0348+0432 [49,50].

One of the differences between the results obtained with the EoS with and without the pasta phases appears when we compare the radii of typical 1.4-solar-mass neutron stars. The radii when the pasta phase are included is slightly bigger than the radii obtained with the BPS+BBP+homogeneous EoS, in accordance with previous findings [26]. All EoS predict radii for a $1.4 M_\odot$ star, inside the radius range proposed in Ref. [51], where the authors constrained the canonical $1.4 M_\odot$ neutron star radii to $R = 9.7\text{--}13.9 \text{ km}$, or the radius range obtained in Ref. [52] for x-ray bursting NS. However, both are outside the range determined in Ref. [53] from the analysis of spectroscopic radius measurements during thermonuclear bursts or in quiescence or in Ref. [54] from experimental constraints and causality restrictions. The range values proposed in Ref. [51] include the possibility of a phase transition to another form of matter inside the star. If phase transitions are excluded below twice saturation density, the accepted neutron star radii change to $10.7\text{--}13.1 \text{ km}$, according to Refs. [55,56]. If this value is accepted, the results obtained with EoS1 $\omega\rho$ and EoS2 $\omega\rho$, built from the QMC $\omega\rho$ model, are inside the new proposed range. However, the authors of Ref. [57] have made a compilation of neutron star radii estimations from observations for a $1.4 M_\odot$ star and have obtained, taking into account a 2σ error, values above 14 km . In this case, all models predict radii satisfying this condition.

V. FINAL REMARKS

In the present work, we have revisited the calculation of the pasta phases now using a model with quark degrees of freedom, the QMC model. The determination of the inhomogeneous phases was possible by parameterizing the effective nucleon mass at subsaturation density as a nonlinear function of the σ meson as already done before in Ref. [36]. Part of the results shown in the present work will take part in a more comprehensive EoS grid that is being built for star cooling and supernova simulations.

Our results depend quantitatively on a parameter necessary for the calculation of the surface tensor coefficient. We have fitted this parameter to the nuclear surface energy and showed that when even changing it in a broad interval the pasta extension was only slightly affected. In other words, the prescription we have used allows us to determine the dependence of the surface energy on the proton fraction, except for the overall normalization that we fix to the usual surface energy.

The general conclusions related to the size of the pasta phases, its internal structure, and the transition density from the pasta to homogeneous matter go in line with the ones obtained in previous works [1,20].

It is important to stress that the value of L obtained with the original QMC parametrization, $L = 90 \text{ MeV}$, is larger than present constraints impose: The one established in Ref. [55] assumes 63.6 MeV as the largest acceptable value, but larger values are indicated in Ref. [29], where $L < 80 \text{ MeV}$, and Ref. [30], with $L < 86.8 \text{ MeV}$, where both studies take into account extra constraints not included in the study of Ref. [55]. To improve the model so that a lower value of L is obtained, we have added a $\omega\rho$ interaction to the Lagrangian density, as already done in previous works for different parametrizations of the nonlinear Walecka model [33,58] and also for the QMC model [32]. This new term in the Lagrangian density changes the density dependence of the symmetry energy and allows the calibration of the model parameters so that a smaller slope of the symmetry energy is obtained at saturation. Our results show that this interaction is mandatory in relativistic mean field models if one wants to conciliate large maximum masses with low radii in neutron stars described by the QMC model.

We intend to incorporate finite-size effects through the implementation of the CLD prescription [37,38] as well. The CLD presents smaller discontinuities at very low densities, so it can be a useful treatment to obtain all the values that will be needed for a complete EoS grid. The inclusion of α particles [39] and other light clusters [40] can also slightly modify the internal structure of the pasta phases.

ACKNOWLEDGMENTS

D.P.M. (Grant No. 300602/2009-0) and G.G. (doctorate scholarship) acknowledge support from CNPq and Capes. C.P. acknowledges partial support from FCT (Portugal) under project UID/FIS/04564/2016, and by “NewCompStar” COST Action MP1304.

-
- [1] S. S. Avancini, D. P. Menezes, M. D. Alloy, J. R. Marinelli, M. M. W. Moraes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **78**, 015802 (2008).
 - [2] J. Xu, L. Chen, B. Li, and H. Ma, *Phys. Rev. C* **79**, 035802 (2009).
 - [3] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. R. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2066 (1983).
 - [4] C. J. Horowitz, M. A. Pérez-García, and J. Piekarewicz, *Phys. Rev. C* **69**, 045804 (2004).
 - [5] C. J. Horowitz, M. A. Pérez-García, D. K. Berry, and J. Piekarewicz, *Phys. Rev. C* **72**, 035801 (2005).
 - [6] T. Maruyama, T. Tatsumi, D. N. Voskresensky, T. Tanigawa, and S. Chiba, *Phys. Rev. C* **72**, 015802 (2005).
 - [7] C. J. Pethick and A. Y. Potekhin, *Phys. Lett. B* **427**, 7 (1998).

- [8] C. Bertulani and J. Piekarewicz, *Neutron Star Crust* (Nova Science Publishers, New York, 2012), p. 337.
- [9] B. Link, R. I. Epstein, and J. M. Lattimer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3362 (1999).
- [10] M. D. Alloy and D. P. Menezes, *Phys. Rev. C* **83**, 035803 (2011).
- [11] U. Furtado, S. Avancini, J. Marinelli, W. Martarello, and C. Providência, *Eur. Phys. J. A* **52**, 290 (2016).
- [12] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi, *Nucl. Phys. A* **637**, 435 (1998).
- [13] H. Shen, H. Toki, K. Oyamatsu, and K. Sumiyoshi, *Astrophys. J. Suppl.* **197**, 20 (2011).
- [14] M. Hempel, T. Fischer, J. Schaffner-Bielich, and M. Liebendörfer, *Astrophys. J.* **748**, 70 (2012).
- [15] A. W. Steiner, M. Hempel, and T. Fischer, *Astrophys. J.* **774**, 17 (2013).
- [16] S. Banik, M. Hempel, and D. Bandyopadhyay, *Astrophys. J. Suppl.* **214**, 22 (2014).
- [17] J. M. Lattimer and F. D. Swesty, *Nucl. Phys. A* **535**, 331 (1991).
- [18] H. Sonoda, G. Watanabe, K. Sato, T. Takiwaki, K. Yasuoka, and T. Ebisuzaki, *Phys. Rev. C* **75**, 042801(R) (2007).
- [19] H. Sonoda, G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, and T. Ebisuzaki, *Phys. Rev. C* **77**, 035806 (2008).
- [20] S. S. Avancini, L. Brito, J. R. Marinelli, D. P. Menezes, M. M. W. de Moraes, C. Providência, and A. M. Santos, *Phys. Rev. C* **79**, 035804 (2009).
- [21] G. Watanabe, H. Sonoda, T. Maruyama, K. Sato, K. Yasuoka, and T. Ebisuzaki, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 121101 (2009).
- [22] H. Pais and J. R. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 151101 (2012).
- [23] P. A. M. Guichon, *Phys. Lett. B* **200**, 235 (1988).
- [24] K. Saito and A. W. Thomas, *Phys. Lett. B* **327**, 9 (1994).
- [25] K. Saito and A. W. Thomas, *Phys. Rev. C* **52**, 2789 (1995).
- [26] H. Pais, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **93**, 065805 (2016).
- [27] G. Grams, A. M. Santos, and D. P. Menezes, *Braz. J. Phys.* **46**, 111 (2016).
- [28] A. M. Santos, C. Providência, and P. K. Panda, *Phys. Rev. C* **79**, 045805 (2009).
- [29] M. Dutra, O. Lourenço, S. S. Avancini, B. V. Carlson, A. Delfino, D. P. Menezes, C. Providência, S. Typel, and J. R. Stone, *Phys. Rev. C* **90**, 055203 (2014).
- [30] M. Oertel, M. Hempel, T. Klähr, and S. Typel, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015007 (2017).
- [31] C. Providência, S. S. Avancini, R. Cavagnoli, S. Chiacchiera, C. Ducoin, F. Grill, J. Margueron, D. P. Menezes, A. Rabhi, I. Vidaña, *Eur. Phys. J. A* **50**, 44 (2014).
- [32] P. K. Panda, A. M. S. Santos, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **85**, 055802 (2012).
- [33] R. Cavagnoli, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **84**, 065810 (2011).
- [34] N. Barik, R. N. Mishra, D. K. Mohanty, P. K. Panda, and T. Frederico, *Phys. Rev. C* **88**, 015206 (2013).
- [35] R. N. Mishra, H. S. Sahoo, P. K. Panda, N. Barik, and T. Frederico, *Phys. Rev. C* **92**, 045203 (2015).
- [36] P. A. M. Guichon, K. Saito, E. Rodionov, and A. W. Thomas, *Nucl. Phys. A* **601**, 349 (1996).
- [37] S. S. Bao, J. N. Hu, Z. W. Zhang, and H. Shen, *Phys. Rev. C* **90**, 045802 (2014).
- [38] H. Pais, S. Chiacchiera, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **91**, 055801 (2015).
- [39] S. S. Avancini, C. C. Barros, Jr., D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **82**, 025808 (2010).
- [40] S. S. Avancini, C. C. Barros, L. Brito, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **85**, 035806 (2012).
- [41] J. Randrup, *Phys. Rev. C* **79**, 054911 (2009).
- [42] M. B. Pinto, V. Koch, and J. Randrup, *Phys. Rev. C* **86**, 025203 (2012).
- [43] G. A. Lalazissis, J. König, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **55**, 540 (1997).
- [44] S. S. Avancini, S. Chiacchiera, D. P. Menezes, and C. Providência, *Phys. Rev. C* **82**, 055807 (2010).
- [45] F. Grill, C. Providência, and S. S. Avancini, *Phys. Rev. C* **85**, 055808 (2012).
- [46] I. Vidaña, C. Providência, A. Polls, and A. Rios, *Phys. Rev. C* **80**, 045806 (2009).
- [47] G. Baym, H. A. Bethe, and C. J. Pethick, *Nucl. Phys. A* **175**, 225 (1971).
- [48] G. Baym, C. Pethick, and P. Sutherland, *Astrophys. J.* **170**, 299 (1971).
- [49] P. B. Demorest, T. Pennucci, S. M. Ransom, M. S. E. Roberts, and J. W. T. Hessels, *Nature (London)* **467**, 1081 (2010).
- [50] J. Antoniadis *et al.*, *Science* **340**, 123232 (2013).
- [51] K. Hebeler, J. M. Lattimer, C. J. Pethick, and A. Schwenk, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 161102 (2010).
- [52] V. F. Suleimanov, J. Poutanen, D. Klochkov, and K. Wener, *Eur. Phys. J. A* **52**, 20 (2016).
- [53] F. Özel, D. Psaltis, T. Güver, G. Baym, C. Heinke, and S. Guillot, *Astrophys. J.* **820**, 28 (2016).
- [54] A. W. Steiner, J. M. Lattimer, and E. Brown, *Eur. Phys. J.* **52**, 18 (2016).
- [55] J. M. Lattimer and Y. Lim, *Astrophys. J.* **771**, 51 (2013).
- [56] J. M. Lattimer and M. Prakash, *Phys. Rep.* **621**, 127 (2016).
- [57] M. Fortin, J. L. Zdunik, P. Haensel, and M. Bejger, *Astron. Astrophys.* **576**, A68 (2015).
- [58] C. J. Horowitz and J. Piekarewicz, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5647 (2001).