

Dissertação apresentada à Pró-Reitoria de Pós-Graduação e Pesquisa do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências no Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Física Nuclear.

Estevão Alves Teixeira

**MODELO MONTE CARLO PARA EMISSÃO DE
DÊUTERONS EM REAÇÕES NUCLEARES DE
PRÉ-EQUILÍBRIO**

Dissertação aprovada em sua versão final pelos abaixo assinados:



Prof. Dr. Brett Vern Carlson
Orientador

Prof. Pedro Teixeira Lacava
Pró-Reitor de Pós-Graduação e Pesquisa

Campo Montenegro
São José dos Campos, SP - Brasil
2018

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Divisão de Informação e Documentação

Teixeira, Estevão Alves
Modelo Monte Carlo para emissão de dêuterons em reações nucleares de pré-equilíbrio / Estevão Alves Teixeira.
São José dos Campos, 2018.
93f.

Dissertação de Mestrado – Curso de Física. Área de Física Nuclear – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2018. Orientador: Prof. Dr. Brett Vern Carlson.

1. Reações Nucleares. 2. Pré-equilíbrio. 3. Monte Carlo. I. Instituto Tecnológico de Aeronáutica. II. Título.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

TEIXEIRA, Estevão Alves. **Modelo Monte Carlo para emissão de dêuterons em reações nucleares de pré-equilíbrio**. 2018. 93f. Dissertação de Mestrado – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Estevão Alves Teixeira

TÍTULO DO TRABALHO: Modelo Monte Carlo para emissão de dêuterons em reações nucleares de pré-equilíbrio.

TIPO DO TRABALHO/ANO: Dissertação / 2018

É concedida ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica permissão para reproduzir cópias desta dissertação e para emprestar ou vender cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação pode ser reproduzida sem a autorização do autor.

Estevão Alves Teixeira
Rua Abolição, 87
12.245-500 – São José dos Campos-SP

MODELO MONTE CARLO PARA EMISSÃO DE DÊUTERONS EM REAÇÕES NUCLEARES DE PRÉ-EQUILÍBRIO

Estevão Alves Teixeira

Composição da Banca Examinadora:

| | | | |
|---|------------------|---|-----|
| Prof. Dr. Manuel M. B. Malheiro de Oliveira | Presidente | - | ITA |
| Prof. Dr. Brett Vern Carlson | Orientador | - | ITA |
| Prof. Dr. Carlos Alberto Bomfim Silva | Membro Interno | - | ITA |
| Prof. Dr. Rubens de Melo Marinho Junior | Suplente Interno | - | ITA |
| Prof. Dr. Leandro R. Gasques | Membro Externo | - | USP |
| Prof. Dr. Luiz C. Chamon | Suplente Externo | - | USP |

Ao avanço da ciência no Brasil.

Agradecimentos

Agradeço a todos os professores pela dedicação ao ensino.

A minha família,
pelo apoio emocional e financeiro.

A minha namorada, Renata F. Cardoso,
por me apoiar sempre.

Ao meu professor de graduação, Dr. Francisco de Araújo,
pela dedicação que teve ao me apresentar física nuclear.

Ao meu orientador, Brett V. Carlson,
por ser sempre muito paciente e atencioso.

Ao ITA, pela oportunidade.

E a CAPES,
pelo apoio financeiro.

*“Mãe, pra muita coisa eu sei que demorei
E quanto tempo isso faz eu já nem sei
Os anos insistiram em passar
E eu cresci
Foi quando aprendi voar
E o mundo inteiro quis pegar pra mim”
— JORGE E MATEUS - CICLO*

Resumo

Reações de pré-equilíbrio induzidas por núcleons são importantes em várias aplicações da física nuclear. Aproximadamente 20% da taxa de emissão de pré-equilíbrio nestas reações correspondem a partículas compostas, tais como dêuterons e partículas alfas. Dêuterons são produzidos através de emissões do núcleo composto, assim como através de dois importantes mecanismos de reação direta, “*pick-up*” e coalescência. Iwamoto e Harada desenvolveram um modelo semiclássico de pré-equilíbrio que descreve ambos mecanismos diretos como uma generalização de coalescência. Broeders e Konobeyev propuseram uma abordagem alternativa para o cálculo das distribuições de energias de pré-equilíbrio para o dêuteron, incluindo outros mecanismos de emissão, além dos mecanismos propostos por Iwamoto e Harada. Implementamos o modelo unificado de Iwamoto e Harada na extensão do modelo híbrido Monte Carlo de Blann e Chadwick para analisar dados de reações do tipo (p,d), ou seja, reações induzidas por prótons incidentes tendo dêuterons como partícula emitida. Concluimos, de forma preliminar, que possa haver outro mecanismo de emissão que tenha uma contribuição importante para a emissão de dêuterons, além dos propostos por Iwamoto e Harada. Mais estudos serão necessários para confirmar nossas suspeitas.

Abstract

Nucleon-induced pre-equilibrium reactions are important in many applications of nuclear physics. About 20% of the particles emitted in such reactions are composites, such as deuterons and alpha particles. Deuterons are produced through emission from the compound nucleus, as well as through two important direct reaction mechanisms - “pick-up” and coalescence. Iwamoto and Harada developed a semiclassical pre-equilibrium model that describes both direct mechanisms as a generalization of coalescence. Broeders and Konobeyev proposed a new approach for the calculation of preequilibrium deuteron energy distributions, including others emission mechanisms beyond those proposed by Iwamoto and Harada. We have implemented the Iwamoto and Harada unified model of deuteron emission in the Blann and Chadwick “hybrid Monte Carlo” model to analyse data of reactions of the type (p,d), that is, proton induced reactions having deuterons as emitted particles. We conclude, preliminarily, that there may be another emission mechanism that has an important contribution for deuteron emission, beyond those proposed by Iwamoto and Harada. More studies are necessary to confirm our suspicions.

Lista de Figuras

| | |
|--|----|
| FIGURA 1.1 – Representação da redefinição da superfície de Fermi, formação do núcleo pré-composto e ocupação dos níveis de energia de partícula única. (POMPEIA; CARLSON, 2007) | 18 |
| FIGURA 1.2 – Espectros de emissão de $p+^{56}\text{Fe}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973). | 19 |
| FIGURA 1.3 – Espectros de emissão de $p+^{27}\text{Al}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973). | 20 |
| FIGURA 1.4 – Espectros de emissão de $p+^{120}\text{Sn}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973). | 21 |
| FIGURA 1.5 – Espectro de energia para próton, dêuteron, trítio, ^3He e partículas alfas em reações induzidas por prótons em ^{197}Au com $E_p = 62$ MeV de Sato, Iwamoto e Harada (SATO <i>et al.</i> , 1983). As barras representam os dados experimentais, as linhas representam os resultados obtidos por eles. | 22 |
| FIGURA 1.6 – O mesmo da fig. 1.5, mas para o alvo ^{54}Fe . As linhas tracejadas representam os resultados calculados por K. Sato, Iwamoto e Harada. | 23 |

- FIGURA 1.7 – A contribuição de diferentes processos nucleares na emissão de deuteron em reações de $p+^{54}\text{Fe}$ e $p+^{197}\text{Au}$ induzida por prótons com $E_p = 61,5$ MeV. Temos: emissão de equilíbrio (EQ), *pick-up* de núcleon a partir de estados de exciton de (2p1h) (F(1,1)), coalescência de dois núcleons excitados (F(2,0)), *knock-out* (KO) e *pick-up* direta (D). Também temos a soma de todos os componentes de não-equilíbrio (NONEQ) e o espectro total (TOTAL). Os dados em círculos pretos foram retirados da ref. (BERTRAND; PEELLE, 1973). A energia do deuteron é mostrada no sistema de coordenadas de laboratório. 25
- FIGURA 2.1 – Representação do processo de equilibração como formulado no ME. A probabilidade relativa e a direção das transições estão indicadas de maneira ilustrativa pela direção e comprimento das setas. (KONING *et al.*, 1999). 29
- FIGURA 2.2 – Representação das interações subsequentes de dois corpos. (POMPEIA; CARLSON, 2007) 30
- FIGURA 2.3 – Diagrama de excitação de uma configuração 2p1h. A partícula incidente 1, com momento \vec{p}_1 , interage com uma partícula 2, com momento \vec{p}_2 abaixo do momento de Fermi. A partícula 1 é emitida com momento \vec{p}_3 e a partícula 2 é emitida com momento \vec{p}_4 , deixando um estado não preenchido, “buraco”, no sistema. 40
- FIGURA 2.4 – Diagrama de excitação de uma configuração 1p2h. Um buraco 1, com momento \vec{p}_1 , interage com a partícula 2, com momento \vec{p}_2 abaixo do momento de Fermi. A partícula 2 é excitada e emitida com momento \vec{p}_4 , deixando dois estados não preenchidos no sistema, dois buracos. 40
- FIGURA 2.5 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{27}Al 44
- FIGURA 2.6 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{56}Fe 45

- FIGURA 2.7 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{120}Sn 45
- FIGURA 2.8 – Ilustração mostrando a construção do dêuteron a partir de dois núcleons no espaço de momento. Para cada fator de formação do dêuteron, F_{lm} , temos l núcleons com momento maior que o momento de Fermi p_F e m núcleons com momento menor que p_F , com l sendo 1 ou 2 e m sendo 1 ou 0, respectivamente. 55
- FIGURA 2.9 – Superfície de energia equivalente definida pela primeira restrição para a integral que define o fator de formação. 58
- FIGURA 2.10 – Fator de formação do dêuteron para $\Delta R = 2,1$ fm como função da energia do dêuteron para dois diferentes alvos, Al^{27} e Au^{197} . A linha pontilhada e traçada representa $\sum F_{lm}$ 58
- FIGURA 2.11 – Ilustração dos processos expressos pelos fatores de formação do dêuteron. (a) $F_{0,2}$, (b) $F_{1,1}$ e (c) $F_{2,0}$ 59
- FIGURA 3.1 – Divisão dos fatores de formação F_k pelo valor total dos fatores F_{tot} , para diferentes valores de ΔR e utilizando aproximação rms, em função do momento do dêuteron. 68
- FIGURA 3.2 – O fator de formação total $F_{tot}(\Delta R) = \text{constante}$ quando $\Delta R > \sqrt{\frac{\epsilon_0}{m\omega^2}}$ (representado pela linha vertical). 68
- FIGURA 3.3 – Divisão dos fatores de formação F_k pelo valor total dos fatores F_{tot} , para o raio do dêuteron nos valores: $r_d = 2,14$ fm e $r_d = 1,96$ fm; utilizando $\Delta R = 3,0$ fm e a aproximação rms. 70
- FIGURA 3.4 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{27}Al , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos. . . 71
- FIGURA 3.5 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{56}Fe , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos. . . 71
- FIGURA 3.6 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{120}Sn , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos. . . 72

| | |
|---|----|
| FIGURA 3.7 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{27}Al | 73 |
| FIGURA 3.8 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{56}Fe | 73 |
| FIGURA 3.9 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{120}Sn | 74 |
| FIGURA 3.10 – Largura de emissão de dêuterons por <i>pick-up</i> em relação ao momento da partícula p_1 para ^{27}Al | 75 |
| FIGURA 3.11 – Largura de emissão de dêuterons por <i>pick-up</i> em relação ao momento da partícula p_1 para ^{56}Fe | 75 |
| FIGURA 3.12 – Largura de emissão de dêuterons por <i>pick-up</i> em relação ao momento da partícula p_1 para ^{120}Sn | 76 |
| FIGURA 3.13 – Razão entre a largura de emissão para dêuterons por <i>pick-up</i> sobre a largura de emissão para prótons. A linha representa a razão para o alvo ^{27}Al , a linha tracejada representa a razão para o alvo ^{56}Fe e a linha pontilhada e tracejada representa a razão para o alvo ^{120}Sn | 77 |
| FIGURA A.1 – Fator de formação do dêuteron para $\Delta R = 2, 1$ fm como função da energia do dêuteron para dois diferentes alvos, Al^{27} e Au^{197} . A linha pontilhada e traçada representa $F_{2,tot}$ | 93 |

Lista de Abreviaturas e Siglas

| | |
|-------|--|
| HMS | Modelo Híbrido Monte Carlo |
| ME | Modelo de Exciton |
| IH | Modelo Unificado de Iwamoto e Harada |
| DDHMS | <i>Double Differential Hybrid Monte Carlo Simulation</i> |
| DWBA | <i>Distorted-Wave Born Approximation</i> |

Lista de Símbolos

| | |
|----------------------------|---|
| E | Energia de excitação; |
| n | Número de excitons; |
| p | Número de partículas; |
| h | Número de buracos; |
| g | Densidade de estado de partícula única; |
| Q | Energia liberada na reação nuclear; |
| $F_{l,m}$ | Fator de formação do dêuteron com l partículas acima da energia de Fermi e m partículas abaixo da energia de Fermi; |
| $F_r(\vec{p})$ | Integral de coordenadas de $F_{l,m}$; |
| μ | Massa reduzida da partícula emitida do núcleo pré-composto; |
| E_d | Energia do dêuteron no núcleo; |
| R_d | Raio do centro de massa do dêuteron; |
| P_d | Momento do centro de massa do dêuteron; |
| ϵ_F | Energia de Fermi; |
| ϵ_S | Energia de saída imediatamente fora do núcleo; |
| ϵ_d | Energia observada do dêuteron; |
| Γ_{na} | Largura total de decaimento da configuração na ; |
| $\Gamma_{e,na}$ | Largura parcial de emissão do estado na ao estado contínuo e ; |
| $\rho_{na \rightarrow mb}$ | Densidade de transição de uma configuração na para uma mb ; |
| ϵ_0 | Energia do estado fundamental do dêuteron / oscilador; |
| e | Energia após emissão / Energia cinética assintótica; |
| σ_{abs} | Seção de choque de absorção; |
| v_f | Velocidade relativística; |
| v_d | Velocidade relativística do dêuteron; |
| ΔR | Parâmetro ajustável de IH; |

Sumário

| | | |
|-------|---|----|
| 1 | INTRODUÇÃO | 17 |
| 1.1 | Objetivo | 17 |
| 1.2 | Motivação | 17 |
| 1.3 | Organização do trabalho | 25 |
| 2 | MODELOS DE PRÉ-EQUILÍBRIO | 27 |
| 2.1 | Modelo de Exciton | 28 |
| 2.2 | Modelo Híbrido Monte Carlo | 31 |
| 2.2.1 | Densidades de estados acessíveis e taxas de transição | 35 |
| 2.2.2 | Etapas da simulação | 45 |
| 2.3 | Modelo Microscópico | 47 |
| 2.3.1 | Equação mestre | 47 |
| 2.3.2 | Emissão de partículas | 48 |
| 2.3.3 | Transições | 48 |
| 2.3.4 | O modelo híbrido Monte Carlo (HMS) | 50 |
| 2.3.5 | Mistura completa e o modelo de exciton | 50 |
| 2.3.6 | Simulação Monte Carlo | 51 |
| 2.4 | Modelo Unificado de Iwamoto e Harada de emissão de partículas compostas | 54 |

| | | |
|-------|--|----|
| 2.5 | Modelo Monte Carlo de emissão de dêuterons em reações de pré-equilíbrio | 61 |
| 2.5.1 | Taxas de emissão de dêuteron | 63 |
| 3 | CÁLCULOS E DISCUSSÕES | 67 |
| 3.1 | Larguras de emissão | 70 |
| 3.1.1 | Coalescência | 70 |
| 3.1.2 | Pick-up | 74 |
| 4 | CONCLUSÕES | 78 |
| | REFERÊNCIAS | 80 |
| | APÊNDICE A – DESCRIÇÃO DO CÁLCULO DO FATOR DE FORMAÇÃO DE PARTÍCULAS COMPOSTAS PARA O DÊUTERON | 82 |
| A.1 | Integral de coordenadas | 84 |
| A.2 | Integrais de momento | 87 |
| A.2.1 | Fator de formação para F_{20} | 87 |
| A.2.2 | Fator de formação para F_{11} | 89 |
| A.2.3 | Fator de formação para F_{02} | 90 |
| A.2.4 | Soma dos fatores de formação | 92 |

1 Introdução

1.1 Objetivo

Nosso objetivo é de implementar o modelo unificado de Iwamoto e Harada de emissão de dêuterons, (IWAMOTO; HARADA, 1982), na simulação Monte Carlo de reações de pré-equilíbrio de Blann e Chadwick, (BLANN; CHADWICK, 1998), que calcula a distribuição de emissão tanto em energia quanto em ângulo dos núcleons emitidos. No futuro, pretendemos implementar o modelo no módulo DDHMS (Double Differential Hybrid Monte Carlo Simulation) do código de reações nucleares *EMPIRE*, (HERMAN *et al.*, 2007), que executa o cálculo de reações de pré-equilíbrio dentro deste modelo, para ser utilizado em análise de dados de reações do tipo (p,d), ou seja, reações induzidas por prótons incidentes tendo dêuterons como partícula emitida.

1.2 Motivação

Reações de pré-equilíbrio induzidas por núcleons são importantes na descrição e modelagem de reatores rápidos, sistemas alimentados por aceleradores (*accelerator-driven systems*) e radioterapia com feixes de partículas. O modelo de exciton de reações de pré-equilíbrio supõe a excitação de uma sequência de estados de partícula-buraco do núcleo pré-composto que resulta da fusão da partícula incidente com o alvo (duas partículas e um buraco, três partículas e dois buracos, etc.) (KONING; DUIJVESTIJN, 2004), onde excitons refere-se ao número de partículas e buracos do sistema. Definimos *partículas* como o número de partículas acima da energia de Fermi e *buracos* como o número de lacunas abaixo da energia de Fermi, onde a energia de Fermi é o nível de energia entre a energia do último nível ocupado e o primeiro nível desocupado do sistema do núcleo no estado

fundamental. O nível de Fermi é redefinido quando uma nova partícula entra no núcleo, como representado na fig. 1.1 de (POMPEIA; CARLSON, 2007).

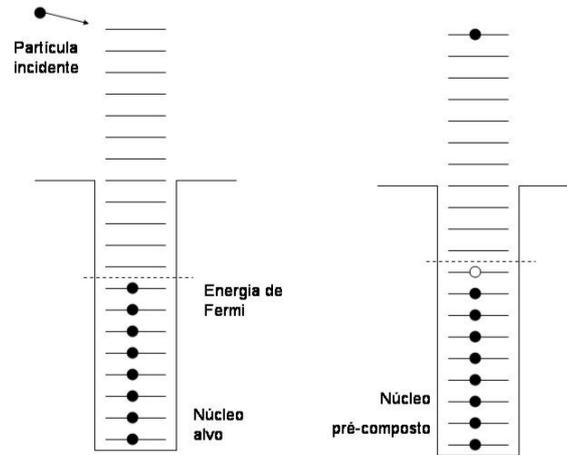


FIGURA 1.1 – Representação da redefinição da superfície de Fermi, formação do núcleo pré-composto e ocupação dos níveis de energia de partícula única. (POMPEIA; CARLSON, 2007)

Para estimar a emissão do estágio de $n + 1$ partículas e n buracos da reação, supõe-se que cada estado deste tipo é igualmente provável. Porém, Bisplinghoff demonstrou que em geral esta hipótese é satisfeita apenas para a configuração inicial da reação de 2 partículas e 1 buraco (2p1h) (BISPLINGHOFF, 1986), onde definimos uma configuração como um conjunto de partículas e buracos (p-h).

Com o objetivo de fornecer um modelo de reações de pré-equilíbrio sem este defeito, Blann desenvolveu um modelo de simulação Monte Carlo de reações de pré-equilíbrio, chamado de modelo híbrido Monte Carlo (HMS), que leva em conta as excitações de partículas e buracos através de excitações independentes de 2p1h (BLANN, 1996; BLANN; CHADWICK, 1998). Uma comparação detalhada entre os dois modelos revela que, enquanto o modelo de exciton supõe que a interação entre configurações de $n+1$ partícula e n buracos é tão forte que os estados alcancem equilíbrio antes de fazer outra transição, o modelo híbrido Monte Carlo despreza qualquer interação entre as partículas e buracos de cada configuração. Obviamente, o caso físico deve ficar entre estes dois extremos.

O estudo de (POMPEIA; CARLSON, 2007) demonstrou que uma interação fisicamente razoável entre os estados de uma configuração de $n+1$ partícula e n buracos (isto é, uma interação da mesma ordem de magnitude da interação que causa as transições) fornece

espectros de emissão muito mais parecidos com os do modelo de Blann do que com o modelo de exciton. Assim, conclui-se que o modelo híbrido Monte Carlo aproxima-se melhor à física do processo de excitação e decaimento de pré-equilíbrio do que o modelo de exciton.

Aproximadamente 20% da taxa de emissão de pré-equilíbrio induzidas por núcleons correspondem a partículas compostas, tais como dêuterons e partículas alfas. Na fig. 1.2 de (BERTRAND; PEELLE, 1973), podemos ver os espectros de emissão de $p+^{56}\text{Fe}$ a 61,5 MeV. O primeiro conjunto de pontos, localizado na parte superior da figura, na cor preta, representa o espectro de emissão de prótons, e seguindo de cima para baixo, nas cores roxo, vermelha, verde e azul, temos os espectros de emissão de partículas alfas, dêuterons, trítios, e hélio-3, respectivamente.

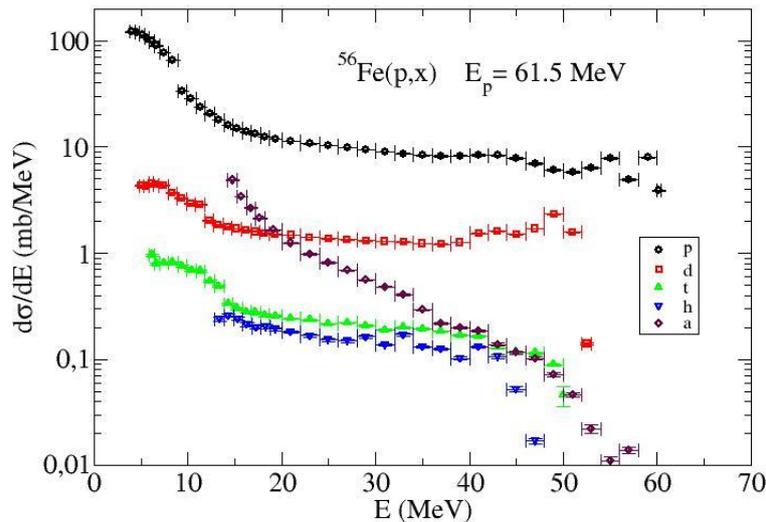


FIGURA 1.2 – Espectros de emissão de $p+^{56}\text{Fe}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973).

Observamos que o espectro de emissão de dêuterons tem magnitude de mais ou menos 20% do espectro de emissão de prótons. Tentaremos obter estimativas desta ordem para a razão das duas taxas de emissão, que serão discutidas posteriormente. Os espectros para trítio e hélio-3 têm valores mais ou menos duas ordens de magnitude abaixo dos valores para prótons, diminuindo ainda mais com o aumento da energia. Para partículas alfas, o espectro inicial, em torno de 15 MeV, tem valores maiores que os do dêuteron, com aproximadamente 4,9 mb/MeV, mas seu espectro de emissão reduz consideravelmente

com o aumento da energia. A emissão das outras partículas serão tema de um estudo posterior.

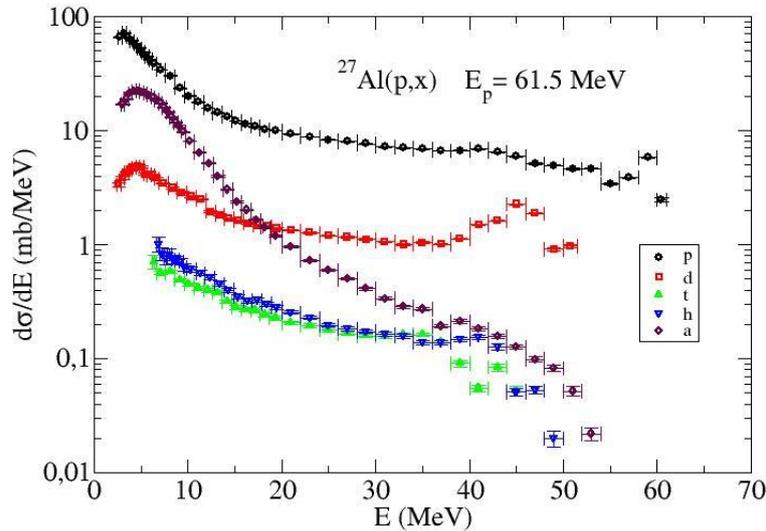


FIGURA 1.3 – Espectros de emissão de $p+^{27}\text{Al}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973).

Na fig. 1.3, mostramos os espectros de emissão de $p+^{27}\text{Al}$, um alvo com aproximadamente metade da carga e massa do ^{56}Fe . Na fig. 1.4, mostramos os espectros de emissão de $p+^{120}\text{Sn}$, um alvo com aproximadamente o dobro da massa e carga do ^{56}Fe . Vemos que em ambos os casos, o espectro de emissão de deutérios é próximo a 20% do valor do espectro de emissão de prótons, isto é, independente da massa e carga do alvo. Os espectros de emissão de outras partículas também mantêm razões com o de espectro de emissão de prótons similares as razões no caso de $p+^{56}\text{Fe}$ (com exceção de ^3He na reação $p+^{120}\text{Sn}$).

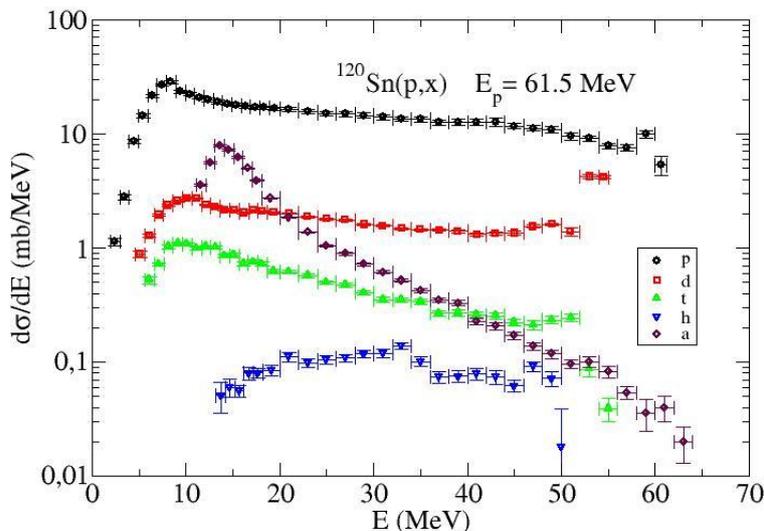


FIGURA 1.4 – Espectros de emissão de $p+^{120}\text{Sn}$ a 61,5 MeV de Bertrand e Peelle (BERTRAND; PEELLE, 1973).

Uma reação importante para produção de dêuterons é a de “pick-up”, na qual um núcleon incidente arranca um outro núcleon do núcleo alvo. Outra reação de produção de dêuterons de pré-equilíbrio é a de coalescência (BUTLER; PEARSON, 1963; SCHWARZSCHILD; ZUPANCIC, 1963; NAGLE *et al.*, 1996), na qual o dêuteron é formado de dois núcleons rápidos que são emitidos próximos um ao outro no espaço de fase. No contexto do modelo de exciton de reações de pré-equilíbrio (KONING; DUIJVESTIJN, 2004), Iwamoto e Harada desenvolveram um modelo que unifica estes dois mecanismos de emissão de dêuterons (IWAMOTO; HARADA, 1982; SATO *et al.*, 1983; KONOBOEYEV; KOROVIN, 1996). Neste trabalho, modificamos o desenvolvimento deles para aplicá-los no modelo de simulação Monte Carlo.

Sato, Iwamoto e Harada, (SATO *et al.*, 1983), apresentaram resultados de cálculos para a seção de choque integrada sobre o ângulo para emissões de pré-equilíbrio de trítio, ^3He e dêuterons. Devido ao uso da aproximação “*never come back*”, os cálculos do espectro de energia não contêm os componentes de equilíbrio e *quase*-equilíbrio. Eles iniciaram com um estado $2p1h$ e somaram as contribuições até um estado de $6p5h$, mencionando que os estados acima de $4p3h$ dão contribuições insignificantes para o espectro de alta energia. Em relação aos parâmetros relevantes ao modelo de exciton, tais como a densidade de nível de partícula única, largura de espalhamento, seção de choque de absorção de núcleon,

raio do núcleo alvo e da partícula complexa, eles utilizaram os mesmos valores que em (IWAMOTO; HARADA, 1982).

Nas figs. 1.5 e 1.6, mostramos os espectros de próton, dêuteron, trítio, ^3He e partículas alfas em reações induzidas por prótons em ^{197}Au e ^{54}Fe , respectivamente, com $E_p = 62$ MeV. K. Sato, Iwamoto e Harada concluíram que os dados foram bem reproduzidos pelos cálculos feitos por eles, mesmo relatando que havia uma discrepância na parte de altas energias, especialmente para a emissão de dêuteron.

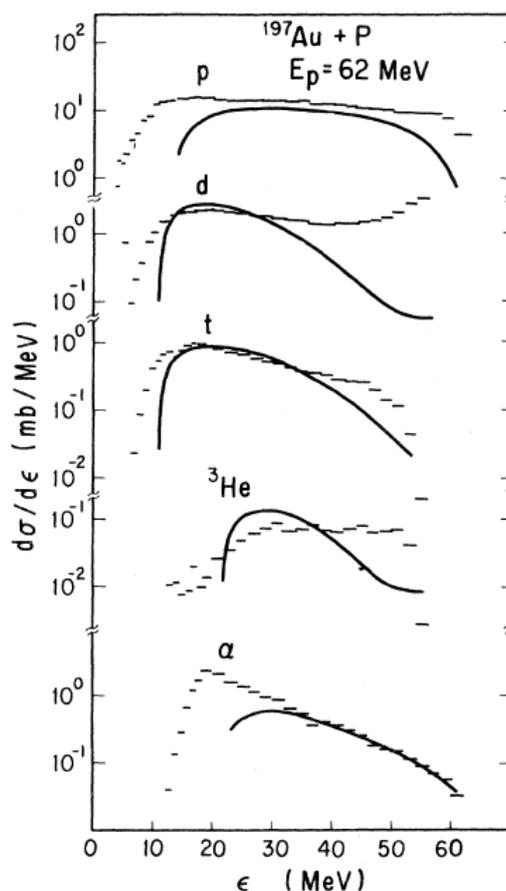


FIGURA 1.5 – Espectro de energia para próton, dêuteron, trítio, ^3He e partículas alfas em reações induzidas por prótons em ^{197}Au com $E_p = 62$ MeV de Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983). As barras representam os dados experimentais, as linhas representam os resultados obtidos por eles.

Podemos ver nos gráficos que o acordo dos resultados com os dados experimentais do núcleo pesado ^{197}Au são melhores do que para ^{54}Fe . A concordância dos resultados melhora para alvos pesados, dando suporte favorável aos cálculos, já que quanto mais pesado for o sistema, melhor será o funcionamento do modelo de gás de Fermi. Para K. Sato, Iwamoto e Harada, no caso do dêuteron, há uma dominância no componente de

formação do dêuteron do tipo “pick-up”. A subestimação do espectro de alta energia nas figs. 1.5 e 1.6 é especialmente grande para o dêuteron. As outras partículas emitidas não serão discutidas neste trabalho.

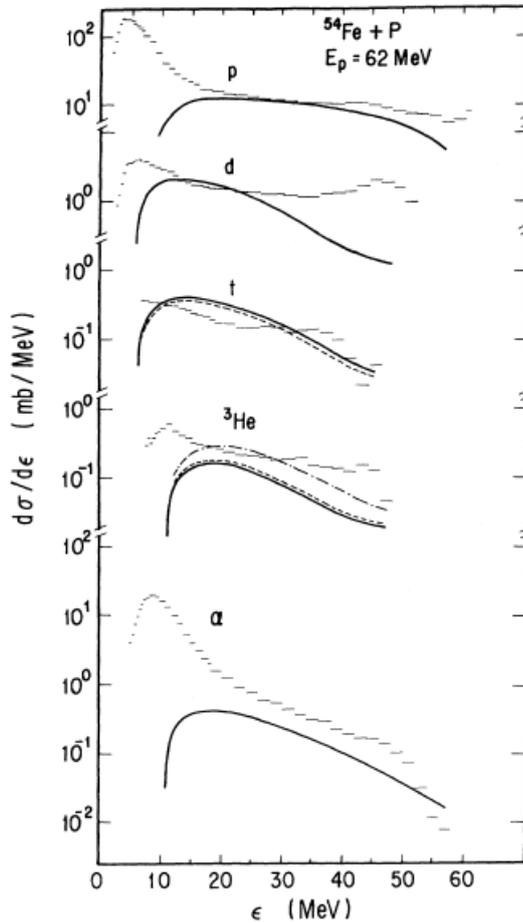


FIGURA 1.6 – O mesmo da fig. 1.5, mas para o alvo ^{54}Fe . As linhas tracejadas representam os resultados calculados por K. Sato, Iwamoto e Harada.

Broeders e Konobeyev (BROEDERS; KONOBAYEV, 2005), propuseram uma abordagem alternativa para o cálculo das distribuições de energia de pré-equilíbrio para o dêuteron em reações nucleares induzidas por núcleons de energias intermediárias, combinando modelos de “pick-up”, coalescência e *knock-out* para emissão de dêutrons. O modelo de Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983), foi usado no trabalho deles para descrever “pick-up” e coalescência de núcleons a partir da configuração de exciton iniciando de 2p1h. Já o modelo de *knock-out* foi formulado levando em conta o princípio de Pauli para a interação núcleon-dêuteron dentro de um núcleo. Portanto, eles desenvolveram uma abordagem baseada no modelo de “pick-up” e coalescência de (SATO *et al.*, 1983) (modelo de exciton) e o modelo híbrido (BLANN; VONACH, 1983).

Eles supuseram que as emissões de dêuterons de não-equilíbrio em reações induzidas por núcleons resultam a partir de: i) *pick-up* de um núcleon com energia abaixo da energia de Fermi após a formação do estado de exciton inicial (2p1h), ii) coalescência de dois núcleons excitados com energias acima da energia de Fermi, iii) *knock-out* de um dêuteron pré-formado, ou iv) processo direto resultando na formação e emissão do dêuteron. As contribuições de *pick-up* e coalescência foram calculadas usando os fatores de formação de dêuteron de Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983).

Na fig. 1.7, temos a contribuição de *pick-up* (F(1,1)), de coalescência (F(2,0)) e *knock-out* (K-O), para o espectro de emissão de dêuteron para ^{54}Fe e ^{197}Au com $E_p = 61,5$ MeV. É interessante notar que neste modelo, Broeders e Konobeyev incluíram o mecanismo de emissão de dêuterons chamado *knock-out*, além dos que Sato, Iwamoto e Harada incluíram em (SATO *et al.*, 1983). Podemos ver nesta figura que as contribuições de *pick-up* e coalescência são pequenas e que a contribuição deste novo mecanismo de emissão, *knock-out*, domina uma boa parte do espectro. Esta contribuição não foi considerada por Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983).

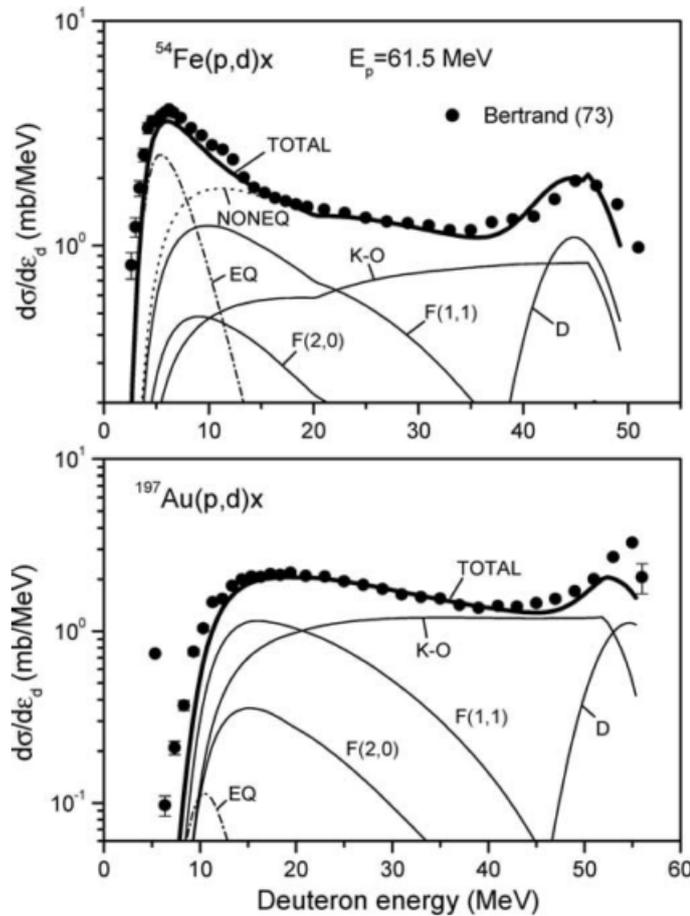


FIGURA 1.7 – A contribuição de diferentes processos nucleares na emissão de dêuteron em reações de $p+^{54}\text{Fe}$ e $p+^{197}\text{Au}$ induzida por prótons com $E_p = 61,5$ MeV. Temos: emissão de equilíbrio (EQ), *pick-up* de núcleon a partir de estados de exciton de (2p1h) (F(1,1)), coalescência de dois núcleons excitados (F(2,0)), *knock-out* (KO) e *pick-up* direta (D). Também temos a soma de todos os componentes de não-equilíbrio (NONEQ) e o espectro total (TOTAL). Os dados em círculos pretos foram retirados da ref. (BERTRAND; PELLE, 1973). A energia do dêuteron é mostrada no sistema de coordenadas de laboratório.

Vemos que o modelo Broeders e Konobeyev fornece uma descrição muito diferente de emissão de dêuterons do que o modelo de Sato, Iwamoto e Harada. Esperamos poder resolver as inconsistências sobre os mecanismos de emissão de dêuterons em reações de pré-equilíbrio no modelo que desenvolvemos.

1.3 Organização do trabalho

Este trabalho está organizado em quatro capítulos, sendo o primeiro a própria introdução. No segundo capítulo, falaremos sobre os modelos de pré-equilíbrio, iniciando pelo

modelo de exciton, que foi, basicamente, a base para os outros modelos. Depois, falaremos do modelo híbrido Monte Carlo, que é um modelo melhor elaborado e que permite ilimitadas emissões de partículas pré-compostas, do modelo microscópico, do modelo unificado de Iwamoto e Harada, que trata da emissão de partículas compostas leves, e, por fim, falaremos sobre como juntamos as ideias dos dois modelos, HMS e o modelo de Iwamoto e Harada, para criar um modelo Monte Carlo para emissão de dêuterons em reações de pré-equilíbrio. Nossos cálculos e discussões dos resultados estão no capítulo três deste trabalho, onde apresentaremos nossos resultados. No capítulo quatro, apresentamos nossas conclusões sobre nosso trabalho e discutiremos as próximas etapas para dar continuidade à pesquisa.

Além dos capítulos, inserimos um apêndice descrevendo como calculamos o fator de formação de partículas compostas, proposto por Sato, Iwamoto e Harada, (SATO *et al.*, 1983), para o dêuteron.

2 Modelos de pré-equilíbrio

A reação nuclear de uma partícula incidente com um núcleo atômico pode acontecer de diferentes maneiras. Koning e Akkermans, (KONING *et al.*, 1999), dizem que em estudos de reações nucleares de íons leves induzidos por núcleons, pode-se distinguir três diferentes mecanismos de reações nucleares: diretas, compostas e de pré-equilíbrio. Estes processos de reações podem ser divididos de acordo com a escala de tempo ou, de forma equivalente, pelo número de colisões intranucleares que acontecem antes da emissão. Além disso, cada mecanismo excita preferencialmente certas partes do espectro de níveis nucleares e é caracterizado por diferentes tipos de distribuições angulares.

Os modelos de reações nucleares de pré-equilíbrio, no qual vamos tratar neste capítulo, foram desenvolvidos para analisar dados de reações nucleares onde uma partícula rápida é emitida antes dos graus de liberdade alcançarem o equilíbrio do núcleo composto e são caracterizados por terem um número pequeno de excitons.

Nas reações de pré-equilíbrio, o composto nuclear se rompe antes de atingir o equilíbrio estatístico. Estas reações podem ser descritas em um processo dependente do tempo, no qual a população e a desocupação de diferentes classes de configurações, ou seja, conjuntos de configurações com o mesmo número de excitons, é determinado por uma equação mestre.

As emissões de reações em pré-equilíbrio acontecem logo após o primeiro estágio das reações, mas, antes do equilíbrio estatístico do núcleo composto ser atingido. É imaginado que, através de colisões núcleon-núcleon, a partícula incidente crie estados mais complexos do sistema composto e gradualmente perca sua memória da energia e direção inicial. Os processos de pré-equilíbrio fornecem uma parte considerável da seção de choque da reação para energias incidentes entre 10 e ao menos 200 MeV.

Os modelos de reações nucleares de pré-equilíbrio tem aplicações práticas bem importantes. Na região de baixas energias (entre 10 e 50 MeV), modelos de pré-equilíbrio podem fornecer dados nucleares que são necessários para cálculos de projetos de reatores de fusão. Na região acima de 50 MeV, os modelos podem fornecer dados para análises de aplicações que requerem aceleradores, tais como transmutação de resíduos radioativos (KONING *et al.*, 1999) ou radioterapia com feixes de partículas.

Desde o trabalho de Griffin, (GRIFFIN, 1966), em 1996, vários modelos de reações nucleares de pré-equilíbrio foram desenvolvidos. Os mais utilizados foram o modelo de cascata intranuclear, o modelo de exciton e o modelo híbrido. Não falaremos neste trabalho sobre o modelo de cascata intranuclear, cuja faixa de validade se restringe a energias acima de aproximadamente 200 MeV. Nas próximas subseções, faremos uma introdução breve dos modelos de reações de pré-equilíbrio, sendo eles: o modelo de exciton, modelo híbrido Monte Carlo de Blann, modelo microscópico, modelo unificado de Iwamoto e Harada de emissão de núcleos leves e, dissertarei sobre o nosso modelo Monte Carlo de emissão de dêuterons.

2.1 Modelo de Exciton

No modelo de exciton, o estado nuclear é caracterizado pela energia de excitação E , pelo número total de partículas acima da energia de Fermi p e pelos buracos abaixo da energia de Fermi h . Assume-se que todas as possíveis maneiras de compartilhar a energia de excitação entre as diferentes configurações de partículas-buracos (p-h) com o mesmo número de exciton n têm probabilidades iguais *à priori*.

A evolução do processo de espalhamento é observada pelos indícios do desenvolvimento do número de excitons, o qual muda de acordo com o tempo como um resultado de colisões intranucleares de dois corpos. Koning (KONING *et al.*, 1999) diz que as hipóteses do modelo de exciton facilitam cálculos práticos. O preço à ser pago, entretanto, é a introdução de um parâmetro livre, ou seja, o elemento de matriz médio da interação residual de dois corpos, que ocorre nas taxas de transições entre dois estados de excitons.

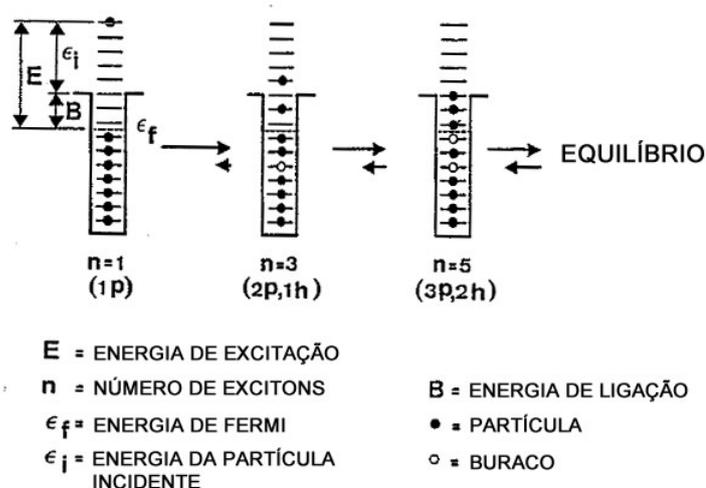


FIGURA 2.1 – Representação do processo de equilibração como formulado no ME. A probabilidade relativa e a direção das transições estão indicadas de maneira ilustrativa pela direção e comprimento das setas. (KONING *et al.*, 1999).

Qualitativamente, o processo de equilibração do núcleo excitado é concebido como na fig. 2.1. Depois que a partícula incidente entra no núcleo, ela colide com um núcleon dentro do mar de Fermi. Desse modo, um estado inicial com $n_0 = 3$ (2p1h) é formado (no caso de reações induzidas por núcleons). Interações subsequentes resultam em mudanças no número de excitons, caracterizadas por $\Delta n = +2$ (um novo par partícula-buraco) ou $\Delta n = -2$ (aniquilação de um par partícula-buraco) ou $\Delta n = 0$ (criação de uma configuração diferente com o mesmo número de exciton). A esquematização destas interações estão representadas na fig. 2.2.

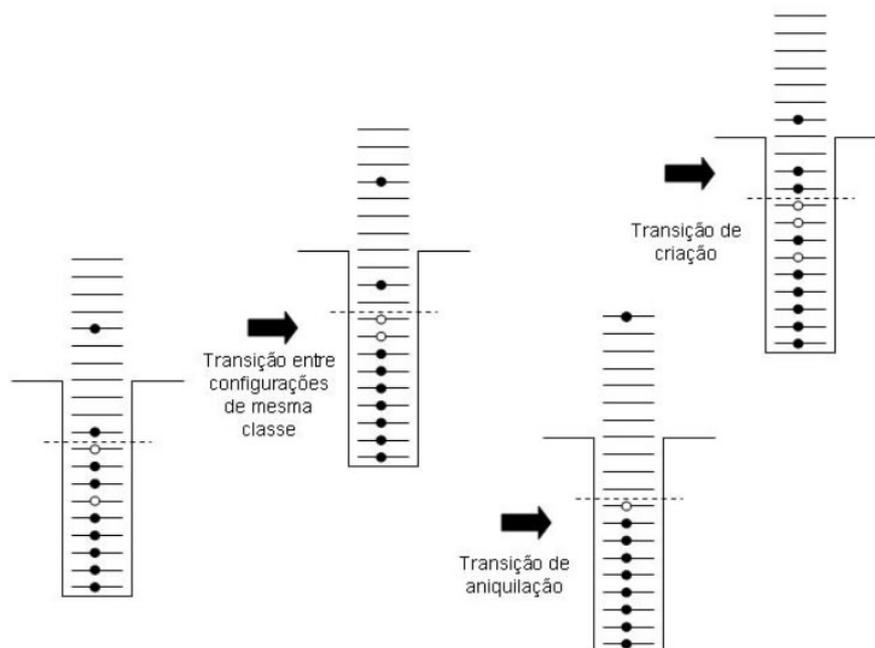


FIGURA 2.2 – Representação das interações subsequentes de dois corpos. (POMPEIA; CARLSON, 2007)

No primeiro estágio do processo, no qual o sistema tem um número pequeno de excitons, as transições de $\Delta n = +2$ são predominantes. Entretanto, em qualquer estágio há uma probabilidade não nula em que a partícula possa ser emitida. Em emissão de pré-equilíbrio, que deve acontecer na fase inicial da reação, onde, intuitivamente, temos que a partícula emitida mantém alguma “memória” da energia e direção da partícula incidente. É esperado que este estágio seja responsável pelas observações experimentais de caudas de alta energia e picos das distribuições angulares. Se não ocorrer emissão na fase inicial, o sistema eventualmente chega ao (quasi-)equilíbrio. O equilíbrio, correspondente a um número alto de excitons, é estabelecido após um grande número de excitações, no qual o sistema perde sua “memória” sobre o seu estado inicial. Por isso, o modelo de exciton permite o cálculo das seções de choque de emissão em um formalismo único, sem introduzir ajustes arbitrários entre as contribuições de pré-equilíbrio e equilíbrio. O processo de equilíbrio é descrito, em sua maior parte, semi-classicamente pela equação mestre do modelo de exciton, que descreve as distribuições das partículas emitidas. O modelo híbrido pode ser considerado como uma variação deste modelo.

2.2 Modelo Híbrido Monte Carlo

O modelo de simulação Monte Carlo de reações de pré-equilíbrio, ou, de acordo com seu proponente, Blann (BLANN, 1996), o Modelo Híbrido Monte Carlo (HMS), permite ilimitadas emissões de partículas pré-composta. A formulação do HMS foi elaborada com o intuito de reduzir as inconsistências e limitações do modelo de exciton na descrição de reações de pré-equilíbrio, pois o modelo de exciton supõe que a interação entre configurações de $n+1$ partícula e n buracos é tão forte que os estados alcancem equilíbrio antes de fazer outra transição e o HMS despreza qualquer interação entre as partículas e buracos de cada configuração. Obviamente, o caso físico deve ficar entre estes dois extremos.

Em 1986, Bisplinghoff (BISPLINGHOFF, 1986), demonstrou que, em geral, para todas as formulações de decaimentos por emissões pré-compostas, o uso de densidades parciais de partícula-buraco de alta ordem era inconsistente com os resultados esperados dos processos de espalhamento de dois corpos (duas partículas e um buraco).

O HMS usa apenas as densidades de dois e três excitons e permite ilimitadas emissões de partículas do núcleo pré-composto.

Este modelo segue, basicamente, os seguintes passos para realizar sua simulação:

- Primeiramente, é calculado a probabilidade de termos um próton ou um nêutron como o “parceiro de colisão” do núcleon incidente:
 - A probabilidade de encontrar um outro nêutron como o “parceiro de colisão” de um nêutron incidente, dependente da energia do núcleon, é

$$P_{nn}(\epsilon') = \frac{\sigma_{nn}(\epsilon')(A - Z)}{\sigma_{nn}(\epsilon')(A - Z) + \sigma_{np}(\epsilon')Z}. \quad (2.1)$$

A formulação para prótons incidentes é similar, onde ϵ' é a soma da energia do núcleon ϵ mais o valor do poço de potencial do núcleo, σ_{nn} é a seção de choque de espalhamento livre de um nêutron com outro nêutron e σ_{np} é a seção de choque de espalhamento livre de um nêutron com um próton.

- Depois de termos selecionado o “parceiro de colisão”, criamos as tabelas devidamente ponderadas para podermos selecionar as energias acima da energia de Fermi dos dois núcleons espalhados e do buraco.

Outros modelos de emissão de partículas pré-compostas baseavam-se em densidades de estados parciais, com p partículas e h buracos. Para um núcleo com energia de excitação E , e com o número de excitons $n = p + h$, a densidade de estados parciais de energia é dada por

$$\rho_n(E) = \frac{g(gE)^{n-1}}{p!h!(n-1)!}, \quad (2.2)$$

onde g é a densidade de estado de partícula única. A densidade para $n = 2$ (uma partícula e um buraco) é dada por:

$$\rho_2(E) = g(g\epsilon_F) \quad \text{se} \quad E > \epsilon_F, \quad (2.3a)$$

$$\rho_2(E) = g(gE) \quad \text{se} \quad E \leq \epsilon_F. \quad (2.3b)$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi. Em estados iniciais do desenvolvimento do núcleo pré-composto, a profundidade do buraco ϵ_F limita as densidades de estados parciais. Para três quasipartículas, duas partículas e um buraco, com $E \geq \epsilon_F$, temos:

$$\rho_3(E) = \frac{g^3[\epsilon_F(2E - \epsilon_F)]}{2}. \quad (2.4)$$

A partir das implicações de (2.3) e (2.4), podemos criar tabelas para cada caso (2p1h ou 1p2h). A probabilidade de acharmos um núcleon com energia ϵ a partir de uma distribuição de três excitons, é dada por:

$$P(\epsilon)d\epsilon = \frac{\rho_2(E - \epsilon)gd\epsilon}{\rho_3(E)}. \quad (2.5)$$

Cada intervalo de energia ϵ a $\epsilon + \Delta\epsilon$ tem peso dado por (2.5), e estes elementos darão unidade quando ϵ , iniciando em zero, é integrada até E . No HMS, os valores e pesos da energia são distribuídos em uma faixa de valores que vão de 0 a 1. Com isso, a partir do número randômico podemos identificar a energia ϵ com seus devidos pesos para um núcleon em uma configuração de três quasipartículas.

As tabelas são feitas com as seguintes equações, de Blann (BLANN, 1996):

$$T_3(\epsilon', E) = \int_{\epsilon=0}^{\epsilon'} \frac{\rho_2(E - \epsilon)g d\epsilon}{\rho_3(E)}, \quad (2.6)$$

para três quasipartículas, com ρ_2 sendo a densidade dos estados para uma partícula e um buraco, e ρ_3 para duas partículas e um buraco. Temos, analogamente, para duas quasipartículas, com $U = E - \epsilon'$:

$$T_2(\epsilon', E) = \int_{\epsilon=0}^{\epsilon'} \frac{g^2 d\epsilon}{\rho_2(U)}. \quad (2.7)$$

As energias dos núcleons emitidos (energia acima da energia de Fermi), são determinadas por um número randômico x , com intervalo entre 0 e 1, para que a energia de excitação E seja particionada entre a energia final $U = E - \epsilon$ e a energia interna de excitação do núcleo residual ϵ . Tendo este valor, x , é determinado as energias dos núcleons emitidos olhando as tabelas feitas com T_2 e T_3 .

- E por último, calcula-se se as partículas excitadas são emitidas ou espalhadas novamente dentro do núcleo.

Para um núcleon com energia ϵ acima da energia de Fermi em um poço de potencial, temos a energia após emissão:

$$e = \epsilon - Q, \quad (2.8)$$

onde Q é a energia liberada da reação e da barreira coulombiana. A taxa de emissão para que um núcleon seja emitido no contínuo, com energia e , é dada pela expressão de Weisskopf,

$$\lambda_c(e) = (\text{constante}) \frac{\sigma_{abs}(e)e(2S + 1)\mu}{g(\epsilon)}, \quad (2.9)$$

onde σ_{abs} é a seção de choque inversa correspondente à partícula emitida, e é a energia do núcleon emitido, S é o spin do núcleon, μ é a massa reduzida do núcleon e g é a densidade de estados de partícula única. A constante é definida a partir de fatores do espaço de fase.

A taxa de transição em que o núcleon se espalhe novamente dentro do núcleo é expressa por λ_+ , que leva em conta a correção de Pauli para espalhamento núcleon-núcleon dentro do núcleo, da densidade nuclear e da velocidade do núcleon dentro do núcleo. λ_+ é dado como:

$$\lambda_+(\epsilon) = \rho_{av} \sigma_{NN} \frac{v}{k_{mfp}} \quad (2.10)$$

onde ρ_{av} é a densidade média nuclear, σ_{NN} é a seção de choque inversa média, v é a velocidade da partícula e k_{mfp} é um fator de multiplicação do caminho livre médio. Podemos observar que $\frac{\rho_{av} \sigma_{NN}}{k_{mfp}} = \frac{1}{\lambda_{mfp}}$, ou seja, a densidade média nuclear vezes a seção de choque inversa média, dividido pela fator de multiplicação do caminho livre médio, é igual ao inverso do caminho livre médio λ_{mfp} . De outra forma, a eq. 2.10 nos diz que a taxa de transição λ_+ é dada por v/λ_{mfp} . Em (BLANN, 1996), Blann diz que o fator de multiplicação k_{mfp} leva em conta uma média sobre caminhos mais longos na superfície nuclear difusa. Voltaremos a falar mais sobre λ_+ no próximo tópico.

Agora, tendo as taxas de emissão e transição, podemos calcular a probabilidade em que um núcleon possa ser emitido no contínuo, e, com isso, teremos também a probabilidade de que o núcleon seja espalhado novamente.

A probabilidade em que um núcleon com energia e possa ser emitida no contínuo é dada em (BLANN, 1996) como:

$$P_\nu(e) = \frac{\lambda_e(e)}{\lambda_e(e) + \lambda_+(\epsilon)} \quad (2.11)$$

onde ν é um próton ou nêutron, $\lambda_e(e)$ é dado pela equação (2.9) e $\lambda_+(\epsilon)$ é dado pela equação (2.10).

A probabilidade de que o núcleon seja espalhado novamente dentro do núcleo, é dada por $1 - P_\nu(e)$. Um número aleatório entre 0 e 1 pode ser usado para determinar se um exciton, em uma cascata em particular, será emitido ou espalhado novamente dentro do núcleo.

Estes processos devem ser seguidos por colisões sucessivas até que o núcleo alcance a condição de relaxamento considerado suficientemente perto do equilíbrio.

2.2.1 Densidades de estados acessíveis e taxas de transição

Nessa subseção, iremos falar um pouco sobre as densidades de estados acessíveis e as taxas de transições, ou seja, a taxa de emissão e a taxa de espalhamento do núcleon dentro do núcleo, que serão derivadas a partir das larguras de emissão e espalhamento.

Em (BLANN, 1996), Blann fala sobre a taxa de emissão λ_c e apenas apresenta a taxa de espalhamento λ_+ . No subtópico abaixo, iremos iniciar falando sobre as densidades de partícula única, seguindo até as larguras de emissão e espalhamento, que nos darão as taxas de emissão e espalhamento.

É importante notar que as energias dos estados de núcleos compostos têm larguras finitas. Para entender melhor essas larguras, partiremos do princípio da incerteza, onde:

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar. \quad (2.12)$$

Um estado com tempo de duração finito, portanto, teria uma largura de energia Γ igual a $\hbar/\Delta t$. Sabendo que, a duração, *lifetime*, é dada pelo inverso da taxa de decaimento por unidade de tempo, λ , temos que:

$$\Gamma = \hbar\lambda. \quad (2.13)$$

e que o núcleo pode decair de diferentes maneiras, tendo larguras parciais diferentes para cada tipo de decaimento. A largura total é dada pela soma das larguras parciais, ou seja:

$$\Gamma = \sum_i \Gamma_i = \sum \hbar\lambda_i. \quad (2.14)$$

Agora, prosseguiremos para o cálculo da densidade de partícula única e voltaremos a discutir as larguras de emissão e espalhamento posteriormente.

2.2.1.1 Densidade de partícula única

A densidade de estados de partículas únicas de momento \vec{p} e com projeção de spin definida, é dada por:

$$g(\vec{p}) = V \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (2.15)$$

sendo V o volume de normalização,

$$V = \frac{4\pi}{3} r_0^3 A. \quad (2.16)$$

Ao somarmos (2.15) em relação ao spin e integrarmos em relação ao momento de zero até o momento de Fermi, obteremos o número de prótons e nêutrons,

$$g_s V \frac{p_{Fn}^3}{6\pi^2\hbar^3} = N \quad \text{e} \quad g_s V \frac{p_{Fp}^3}{6\pi^2\hbar^3} = Z, \quad (2.17)$$

onde $g_s = 2$ é a multiplicidade do spin. Para valores típicos de $N = Z = A/2$ e $r_0 = 1,2$ fm, teremos um momento de Fermi $p_F \approx 250$ MeV/c e uma energia de Fermi $\epsilon_F \approx 33$ MeV. Notamos que, em geral, se definirmos $A_{ef} = 2N$ ou $2Z$, teremos

$$p_F r_0 = \frac{3}{2} \hbar \left(\frac{\pi A_{ef}}{3 A} \right)^{1/3}. \quad (2.18)$$

Quando a densidade de partícula única é expressa em termos da energia, $\epsilon = p^2/2m$, temos:

$$g_s V \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = g_s \frac{2m}{3\pi} p_F \left(\frac{r_0}{\hbar} \right)^3 A \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_F}} d\epsilon \frac{d\Omega_p}{4\pi} = g(\epsilon) d\epsilon \frac{d\Omega_p}{4\pi}, \quad (2.19)$$

onde a densidade de partícula única é dada por:

$$g(\epsilon) = g_s \frac{2m}{3\pi} p_F \left(\frac{r_0}{\hbar} \right)^3 A \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_F}}. \quad (2.20)$$

2.2.1.2 Densidade de partícula única livre e densidade de nível nuclear de partícula única

Blann, (BLANN, 1996), utiliza a cinemática relativística para definir a densidade de partícula única livre, como:

$$\begin{aligned} g_{free}(e)de &= g_s \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{g_s}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{e} de \\ &\rightarrow \frac{g_s}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{e(2m+e)}(m+e)de, \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde g_s é a multiplicidade de spin, e é a energia da partícula fora do núcleo e a segunda linha da equação refere-se ao valor relativístico da densidade de partícula única livre.

Ele também usa a cinemática relativística para definir a densidade de níveis de partícula única, como o $g(\epsilon)$, descrito na eq. (2.20), como:

$$\begin{aligned} g_{lev}(\epsilon)d\epsilon &= g_s V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{g_s}{3\pi^2} \left(r_0^2 \frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} A \sqrt{\epsilon} d\epsilon \\ &\rightarrow \frac{2g_s}{3\pi} \left(\frac{r_0}{\hbar}\right)^3 A \sqrt{\epsilon(2m+\epsilon)}(m+\epsilon)d\epsilon, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde A é a massa nuclear, ϵ é a energia da partícula dentro do núcleo e a segunda linha da equação refere-se ao valor relativístico da densidade de níveis de partícula única.

2.2.1.3 Largura de emissão

A largura de emissão $\Gamma^\dagger(\vec{p})$ é dada em termos da taxa em que o fluxo escapa através da superfície do volume de normalização,

$$\frac{\Gamma^\dagger(\vec{p})}{\hbar} V \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = g_s \frac{d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r \hat{r} \cdot \frac{\vec{p}_f}{\mu} \theta(\hat{r} \cdot \hat{p}) \delta(r - R), \quad (2.23)$$

onde $R = r_0 A^{1/3}$ é o raio de normalização, μ é a massa reduzida do núcleon, e o momento final \vec{p}_f difere do momento inicial em magnitude devido ao fator Q . Podemos reescrever

esta expressão em termos de energias de partículas únicas, como:

$$\Gamma^\uparrow(\vec{p})g(\epsilon)d\epsilon\frac{d\Omega_p}{4\pi} = g_s\frac{2\mu\pi R^2}{2\pi^2\hbar^2}\epsilon_s d\epsilon_s\frac{d\Omega_p}{4\pi}. \quad (2.24)$$

Podemos ver que a energia $\epsilon_s = \epsilon - Q - V_B$ é a energia de saída imediatamente fora do núcleo, no topo da barreira coulombiana. Com isso, definimos a energia cinética assintótica como:

$$e = \epsilon_s + V_B = \epsilon - Q. \quad (2.25)$$

Usando uma aproximação bem conhecida para a seção de choque de absorção $\sigma_{abs}(e)$, temos

$$\pi R^2\epsilon_s = e\pi R^2(1 - V_B/e)\theta(e - V_B) \approx e\sigma_{abs}(e), \quad (2.26)$$

e, substituindo isso em (2.24), temos:

$$\Gamma^\uparrow(\vec{p})g(\epsilon)d\epsilon\frac{d\Omega_p}{4\pi} = g_s\frac{2\mu e\sigma_{abs}(e)}{2\pi^2\hbar^2}de\frac{d\Omega_p}{4\pi}. \quad (2.27)$$

E por fim, nossa largura de emissão é dada por:

$$\Gamma^\uparrow(\vec{p}) = g_s\frac{2\mu e\sigma_{abs}(e)}{2\pi^2\hbar^2 g(\epsilon)} \quad (2.28)$$

notando que a multiplicidade de spin, g_s , está no numerador e no denominador, portanto, se cancela e o $g(\epsilon)$ utilizado é dado pela eq. 2.20.

Em (BLANN, 1996), Blann usa a velocidade relativística,

$$v_f = p_f/\sqrt{p_f^2 + m^2} = \frac{\sqrt{e(2m + e)}}{e + m} \quad (2.29)$$

e o volume de espaço de fase, $\sqrt{e(2m + e)}(e + m)$, ao invés de usar a velocidade não-relativística com a massa reduzida, $p_f/\mu = \sqrt{2e/\mu}$ e o volume não-relativístico de espaço de fase, $\mu\sqrt{2\mu e}$.

Tendo isso, nossa largura de emissão fica:

$$\Gamma^\uparrow(\vec{p}) = g_s \frac{(2m + e)e\sigma_{abs}(e)}{2\pi^2\hbar^2 g_{lev}(\epsilon)}, \quad (2.30)$$

no qual poderíamos considerar a troca da massa reduzida μ pela massa da partícula para obter o limite correto não-relativístico. O fator $g_{lev}(\epsilon)$ é dado pela eq. (2.22).

Usando a definição de largura de energia, eq. (2.13), e a equação acima, da largura de emissão, eq. (2.30), podemos chegar na taxa de emissão, já mencionado na seção 2.2, eq. (2.9).

2.2.1.4 Largura de espalhamento

Vamos calcular a largura de espalhamento de uma partícula ou buraco de momento \vec{p}_1 , e a contribuição para a largura devido à excitação de uma configuração 2p1h (fig. 2.3) ou 1p2h (fig. 2.4). A partir da regra de ouro de Fermi, temos a largura de espalhamento para uma partícula, como:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1p}^\downarrow(\vec{p}_1) &= \frac{2\pi}{\hbar} aV^2 \int |U(\vec{q})|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \\ &\quad \times \delta(p_1^2/2m + p_2^2/2m - p_3^2/2m - p_4^2/2m) \\ &\quad \times \theta(p_{F2} - |\vec{p}_2|) \frac{d^3p_2}{(2\pi\hbar)^3} \theta(|\vec{p}_3| - p_{F1}) \frac{d^3p_3}{(2\pi\hbar)^3} \theta(|\vec{p}_4| - p_{F2}) \frac{d^3p_4}{(2\pi\hbar)^3}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde, identificamos a partícula incidente 1 com a partícula final 3 e a partícula incidente (buraco final) 2 com a partícula final 4, dando o mesmo momento de Fermi para elas. O fator a leva em conta a indistinguibilidade e é igual a 1/2 se as partículas finais forem idênticas e igual a 1 se elas forem diferentes. A interação é definida como,

$$U(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int d^3r e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} U(\vec{r}), \quad (2.32)$$

onde \vec{q} é o momento transferido, dado por:

$$\vec{q} = (\vec{p}_3 - \vec{p}_1 - \vec{p}_4 + \vec{p}_2)/2 = \vec{p}_3 - \vec{p}_1, \quad (2.33)$$

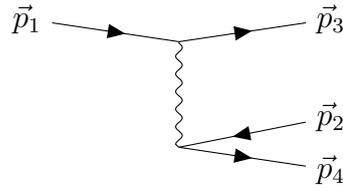


FIGURA 2.3 – Diagrama de excitação de uma configuração 2p1h. A partícula incidente 1, com momento \vec{p}_1 , interage com uma partícula 2, com momento \vec{p}_2 abaixo do momento de Fermi. A partícula 1 é emitida com momento \vec{p}_3 e a partícula 2 é emitida com momento \vec{p}_4 , deixando um estado não preenchido, “buraco”, no sistema.

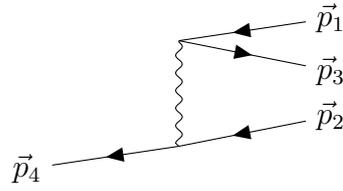


FIGURA 2.4 – Diagrama de excitação de uma configuração 1p2h. Um buraco 1, com momento \vec{p}_1 , interage com a partícula 2, com momento \vec{p}_2 abaixo do momento de Fermi. A partícula 2 é excitada e emitida com momento \vec{p}_4 , deixando dois estados não preenchidos no sistema, dois buracos.

quando a conservação de momento é levada em conta. Note que $U(\vec{q})$ tem dimensão de energia em unidade nuclear, MeV .

Para calcular a integral, assumimos que o elemento de matriz de interação ao quadrado pode ser representado por seu valor médio e, com isso, ser retirado da integral. Portanto, escrevemos para partículas:

$$\Gamma_{1p}^{\downarrow}(\vec{p}_1) = 2\pi \langle |U|^2 \rangle \rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1), \quad (2.34)$$

com

$$\begin{aligned} \rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1) = & \frac{2aV^2}{(2\pi\hbar)^6} \int \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \delta(p_1^2/2m + p_2^2/2m - p_3^2/2m - p_4^2/2m) \\ & \times \theta(p_{F2} - |\vec{p}_2|) d^3 p_2 \theta(|\vec{p}_3| - p_{F1}) d^3 p_3 \theta(|\vec{p}_4| - p_{F2}) d^3 p_4. \end{aligned} \quad (2.35)$$

A largura de espalhamento do buraco pode ser expressa, de forma similar, como:

$$\Gamma_{1h}^\downarrow(\vec{p}_1) = 2\pi \langle |U|^2 \rangle \rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1) \quad (2.36)$$

com

$$\begin{aligned} \rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1) = & \frac{2aV^2}{(2\pi\hbar)^6} \int \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \delta(p_1^2/2m + p_2^2/2m - p_3^2/2m - p_4^2/2m) \\ & \times \theta(|\vec{p}_2| - p_{F2}) d^3 p_2 \theta(p_{F1} - |\vec{p}_3|) d^3 p_3 \theta(p_{F2} - |\vec{p}_4|) d^3 p_4. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Estas densidades tem unidades nucleares de MeV^{-1} . O fator adicional de 2 na definição das densidades leva em conta a soma sobre o spin da partícula 2. A soma sobre os spins das partículas 3 e 4 foram incluídas no elemento de matriz médio ao quadrado. Isto nos permite ignorar detalhes da interação, como espalhamento sem troca de spins, ao calcular a densidade. Este cálculo é consistente com a convenção normalmente adotada para seções de choque não-polarizadas.

Quando temos $p_1 \geq p_{F2}$, a densidade de transição de $1p \rightarrow 2p1h$ produz

$$\begin{aligned} \rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1) = & \frac{2aV^2}{(2\pi)^4 \hbar^6} \frac{m}{p_1} \{ (p_1^2 - p_{F1}^2 - 2p_{F2}^2/5) p_{F2}^3/3 + 2p_{2\min}^5/15 \\ & - \theta(p_{F2} - p_{F1}) (p_{F2} - p_{F1})^3 (p_{F1}^2 + 3p_{F1}p_{F2} + p_{F2}^2)/15 \}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde $p_{2\min}^2 = \min(0, p_{F1}^2 + p_{F2}^2 - p_1^2)$.

Quando $p_1 < p_{F2}$, no caso onde, necessariamente, temos $p_{F1} < p_{F2}$, temos

$$\rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1) = \frac{2aV^2}{(2\pi)^4 \hbar^6} \frac{m}{p_1} (p_1 - p_{F1})^2 (2p_1^3 + 4p_1 p_{F1}^3 + 6p_1^2 p_{F1}^2 + 3p_{F1}^5)/15. \quad (2.39)$$

A densidade de transição de $1h \rightarrow 1p2h$ é muito similar a da distribuição de $1p \rightarrow 2p1h$.

Neste caso, a densidade de transição é dada como,

$$\begin{aligned} \rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1) &= \frac{2aV^2}{(2\pi\hbar)^6} \int \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \delta(p_1^2/2m + p_2^2/2m - p_3^2/2m - p_4^2/2m) \\ &\quad \times \theta(|\vec{p}_2| - p_{F2}) d^3p_2 \theta(p_{F1} - |\vec{p}_3|) d^3p_3 \theta(p_{F2} - |\vec{p}_4|) d^3p_4. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Quando $p_1 \leq p_{F2}$, temos

$$\begin{aligned} \rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1) &= \frac{2aV^2 m}{4(2\pi)^4 (\hbar)^6} \left\{ (p_{F1}^2 - p_1^2)^2 \right. \\ &\quad \left. - \theta(p_{F1} - p_{F2}) \left[(p_{F1}^2 - p_{F2}^2)^2 - 4p_1^2(p_{F1}^2 - p_{F2}^2)/3 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 8(p_1^4 - (p_1^2 + p_{F2}^2 - p_{F1}^2)^{5/2}/p_1) / 15 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

E, quando $p_1 > p_{F2}$, onde, necessariamente, temos $p_{F1} > p_{F2}$, temos,

$$\rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1) = \frac{2aV^2}{(2\pi)^4 \hbar^6} \frac{m}{p_1} \left\{ p_{F2}^3 (p_{F1}^2 - p_1^2) / 3 - 2 \left[p_{F2}^5 - (p_1^2 + p_{F2}^2 - p_{F1}^2)^{5/2} \right] / 15 \right\}. \quad (2.42)$$

Para estabelecermos uma relação com a largura de espalhamento que Blann usa em (BLANN, 1996), vamos usar a aproximação DWBA (*Distorted Wave Born Approximation*),

$$\frac{d\sigma_{NN}}{d\Omega} = \frac{m^2}{(2\pi\hbar)^2} |\omega|^2, \quad (2.43)$$

onde ω é o elemento de matriz de interação entre ondas planas, para associar a seção de choque integrada com o elemento de matriz médio ao quadrado, como

$$\sigma_{NN} = 4\pi \frac{m^2 V^2}{(2\pi\hbar^2)^2} a \langle |U|^2 \rangle, \quad (2.44)$$

onde assumimos que o fator de anti-simetrização está incluído na seção de choque. Com

isso, escrevemos a largura de espalhamento como:

$$\Gamma_{1p}^\downarrow(\vec{p}) = \frac{(2\pi\hbar^2)^2}{2m^2V^2} \frac{\sigma_{NN}}{a} \rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1). \quad (2.45)$$

Tendo tudo isso em mente, escrevemos nossa expressão para a largura de espalhamento, no caso de energias e momentos de Fermi iguais, da seguinte forma:

$$\rho_{1p \rightarrow 2p1h}(\vec{p}_1) = \frac{2aV^2}{(2\pi)^4\hbar^6} m p_1 \frac{p_F^3}{3} P_{p,pauli}(p_1), \quad (2.46)$$

onde

$$P_{p,pauli}(p_1) = 1 - \frac{7}{5} \frac{p_F^2}{p_1^2} + \frac{2}{5} \frac{p_{2min}^5}{p_1^2 p_F^3}, \quad (2.47)$$

com $p_{2min}^2 = \max(0, 2p_F^2 - p_1^2)$. Portanto, a largura de espalhamento para partículas é definida como:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1p}^\downarrow(\vec{p}_1) &= \frac{1}{3(2\pi\hbar)^2} p_F^3 \frac{p_1}{m} \sigma_{NN} P_{p,pauli}(p_1) \\ &= \frac{1}{4} \hbar \frac{p_1}{m} \rho_0 \sigma_{NN} P_{p,pauli}(p_1), \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde ρ_0 é a densidade de nêutrons ou prótons no núcleo. Devemos somar sobre nêutrons e prótons para obter a largura de espalhamento total.

Podemos calcular, da mesma forma, a largura de espalhamento para buracos:

$$\Gamma_{1h}^\downarrow(\vec{p}_1) = \frac{(2\pi\hbar^2)^2}{2m^2V^2} \frac{\sigma_{NN}}{a} \rho_{1h \rightarrow 1p2h}(\vec{p}_1), \quad (2.49)$$

que podemos escrever da seguinte forma:

$$\Gamma_{1h}^\downarrow(\vec{p}_1) = \frac{3}{16} \hbar \frac{p_F}{m} \rho_0 \sigma_{NN} P_{p,pauli}(p_1), \quad (2.50)$$

onde

$$P_{p,pauli}(p_1) = \left(1 - \frac{p_1^2}{p_F^2}\right)^2. \quad (2.51)$$

2.2.1.5 Análise das larguras de emissão e espalhamento para prótons

Nas figs. 2.5 a 2.7, mostramos as larguras de espalhamento $1p \rightarrow 2p1h$ (linha) e emissão (traçado) para prótons para os núcleos ^{27}Al , ^{56}Fe e ^{120}Sn . As larguras são da ordem de MeVs. A largura de espalhamento é maior para baixas energias, tendo um crescimento menor, em relação a largura de emissão, com o aumento da energia. A emissão de pré-equilíbrio se torna cada vez mais importante com o aumento da energia devido ao crescimento no valor da largura de emissão. A largura de espalhamento é aproximadamente independente da massa e carga do núcleo. A largura de emissão, por outro lado, é proporcional a $A^{-1/3}$, para energias suficientemente grandes. Assim, a largura de emissão domina a largura de espalhamento apenas a energias incidentes maiores para núcleos mais pesados, como ^{120}Sn . Esta diminuição na importância de emissão de pré-equilíbrio em núcleos pesados, relativo ao espalhamento que leva ao equilíbrio, é compensado pelo seu tamanho maior e número maior de núcleons, de tal maneira que os espectros mantêm, mais ou menos, a mesma magnitude.

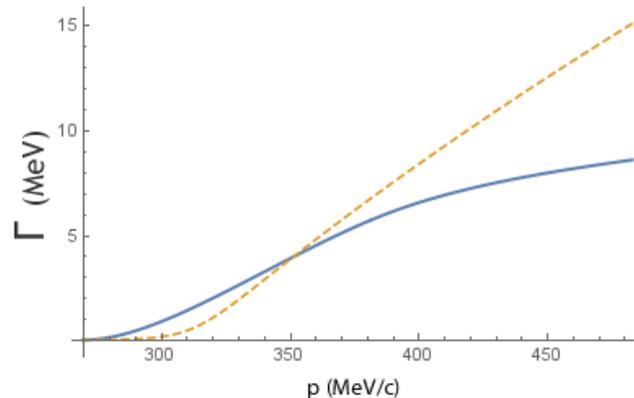


FIGURA 2.5 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{27}Al .

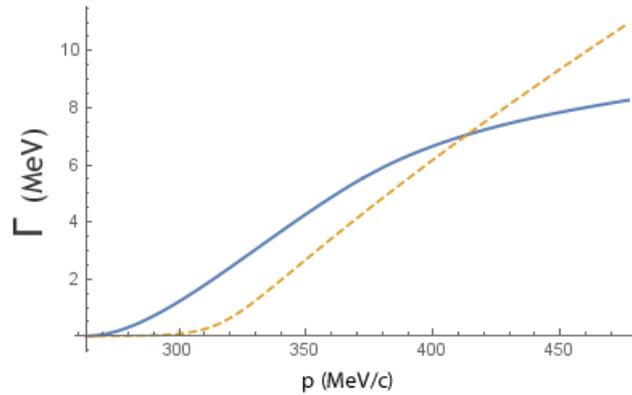


FIGURA 2.6 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{56}Fe .

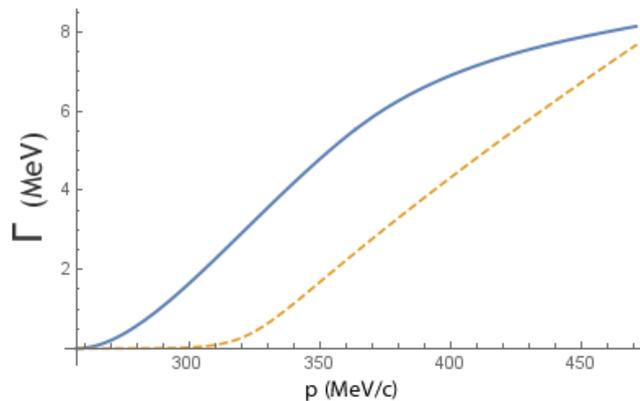


FIGURA 2.7 – Larguras de emissão (traçado) e espalhamento (linha) para prótons em relação ao momento da partícula para ^{120}Sn .

2.2.2 Etapas da simulação

Em (BLANN, 1996), as etapas para a realização da simulação das reações de pré-equilíbrio utilizando o modelo HMS para emissão de núcleons em cascata, ou para que o sistema fique em equilíbrio, são feitas do seguinte modo:

1. A seção de choque da reação total é dividida pelo número de cascatas, ou seja, o número de eventos iniciados com um estado $2p1h$ e seguidos até não poder ocorrer mais emissões, no qual entrará como parâmetro de *input* no programa, para determinar a seção de choque por cascata.
2. A probabilidade de termos um “parceiro de colisão” é calculada usando a eq. (2.1). Um número aleatório, simula a criação de um estado de três excitons com densidade parcial de estados dado pela eq. (2.2), com probabilidades iguais *a priori*.

3. Se os dois excitons forem de caráter diferente, um número aleatório será usado para determinar se o primeiro núcleon a ser selecionado será um nêutron ou um próton.
4. Um número aleatório é selecionado para determinar a energia ϵ do núcleon ν usando as tabelas baseadas em T_2 e T_3 , onde E é a energia de excitação inicial do núcleo composto.
5. Se $\epsilon \leq Q$, assume-se que a energia de excitação da partícula faz parte da excitação do núcleo equilibrado, e o problema é então considerado como sendo $1p1h$ (uma partícula e um buraco) em U . Se $\epsilon > Q$, é sorteado um número aleatório e comparado com as tabelas baseadas nas equações (T_2 e T_3) para decidir se o núcleon é emitido ou se é espalhado novamente.

Correções em relação a emissão ou espalhamento são feitas de acordo com cada caso. Se o núcleon for espalhado novamente no núcleo, volta a ser um caso de $2p1h$ com energia ϵ e os passos (2)-(5) são repetidos para esta nova configuração. Se o núcleon selecionado a partir deste estado for espalhado novamente, ele será considerado como um novo projétil. Cada núcleon poderá passar por quatro processos de espalhamento e, após cada processo, ser emitido, espalhado novamente ou se tornar parte de um núcleo em equilíbrio.

Nos resultados do trabalho de Blann (BLANN, 1996) foram aplicadas correções de emparelhamento em todos os resultados. Como dito no artigo, “o uso de correções de emparelhamento em modelos de decaimento de partículas pré-compostas é justificado empiricamente; Isso traz melhores resultados do que desprezar o emparelhamento”. Porém, observe-se que no procedimento de Blann, as emissões e colisões não ocorrem em acordo com suas larguras/taxas de transição, mas em uma maneira arbitrária, de acordo apenas com seu surgimento no cálculo. Isto é, a primeira das partículas numa excitação $2p1h$ vai decair antes da segunda, mesmo quando suas taxas de transição são muito menores, simplesmente por ser a primeira. Isto é corrigido no modelo microscópico.

2.3 Modelo Microscópico

O modelo microscópico, ou exclusivo, é um modelo semi-clássico unificado de reações nucleares de pré-equilíbrio, onde temos a configuração inicial do sistema como sendo de 1p1h, com o buraco inicial no nível da energia de Fermi e a partícula (núcleon incidente) ocupando um estado de partícula-única da energia de excitação $E = E_n + B$, onde E_n é a energia no referencial do centro de massa da partícula incidente e B é a energia de separação do núcleon incidente e o núcleo alvo.

Tratamos cada configuração de partícula-buraco explicitamente. Com isso, consideramos a configuração 1p1h consistindo de uma partícula com energia ε_{p1} e um buraco com energia ε_{h1} como distinta de uma configuração consistindo de uma partícula com energia ε_{p2} e um buraco de energia ε_{h2} se $p_1 \neq p_2$ ou $h_1 \neq h_2$. Denotamos cada configuração de partícula-buraco por uma letra a partir do início do alfabeto a, b, c, \dots assim como as classes l, m, n, \dots representando o número total de partículas e buracos. A marcação de classe é, na realidade, redundante, sendo completamente determinada pela configuração, mas é útil ao considerar o limite do modelo de exciton. Representamos a probabilidade de ocupação de uma configuração típica como $P_{n,a}$.

2.3.1 Equação mestre

A configuração das probabilidades de ocupação são governadas por uma equação mestre,

$$\hbar \frac{dP_{n,a}}{dt} = \sum_{m,b} \Lambda_{n,a;m,b} P_{m,b} - \Gamma_{n,a} P_{n,a}, \quad (2.52)$$

onde a largura total de decaimento da configuração n, a é dada em termos da largura parcial de transição $\Lambda_{l,c;n,a}$ do estado n, a ao estado l, c e largura parcial de emissão $\Gamma_{e;n,a}$ do estado n, a ao estado contínuo e por

$$\begin{aligned} \Gamma_{n,a} &= \sum_{l,c} \Lambda_{l,c;n,a} + \sum_e \Gamma_{e;n,a} \\ &= \Gamma_{n,a}^\downarrow + \Gamma_{n,a}^\uparrow, \end{aligned}$$

onde a largura total de espalhamento da configuração n, a é dada por

$$\Gamma_{n,a}^{\downarrow} = \sum_{l,c} \Lambda_{l,c;n,a} \quad (2.53)$$

enquanto a largura total de emissão é

$$\Gamma_{n,a}^{\uparrow} = \sum_e \Gamma_{e;n,a}. \quad (2.54)$$

A taxa de emissão de partículas de energia e é dada por

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,a} \Gamma_{e;n,a} P_{n,a}. \quad (2.55)$$

2.3.2 Emissão de partículas

Estimamos a emissão de partículas usando a expressão usual de Weisskopf. Pegamos a largura parcial de emissão de núcleon de energia e a partir da configuração n, a como sendo

$$\Gamma_{e;n,a} g_{n,a} = \frac{g_s \mu}{\pi^2 \hbar^2} e \sigma_{abs}(e), \quad (2.56)$$

se a configuração contém uma partícula de energia $e + B$, onde B é a energia de separação, caso contrário, ela é igual a zero. Aqui, $g_{n,a}$ é a densidade de estados de partícula-única com energia $e + B$, $g_s = 2$ é a multiplicidade de spin do núcleon, μ é a massa reduzida, $\sigma_{abs}(e)$ é a seção de choque de absorção, que podemos aproximar geometricamente como sendo $\sigma_{abs}(e) = \pi R^2 (1 - V_b/e)$ e V_B é a barreira de emissão para a partícula. A largura total de emissão de uma configuração é a soma das larguras parciais de cada uma das partículas que podem ser emitidas.

2.3.3 Transições

Consideramos transições induzidas por colisões de dois corpos onde há a conservação de energia e denotamos a largura parcial para a transição de m, b para n, a como $\Lambda_{n,a;m,b}$. Assumimos a reversibilidade microscópica, tal que $\Lambda_{n,a;m,b} = \Lambda_{m,b;n,a}$. Uma vez que as transições são devidas às interações de dois corpos, as larguras parciais de transições diferentes de zero aumentarão o número de partículas e buracos por 2, $\Lambda_{(n+2),a;n,b}$, deixarão o

mesmo número de partículas e buracos, $\Lambda_{n,a;n,b}$, ou diminuirão o número por 2, $\Lambda_{(n-2),a;n,b}$. Se a transição de uma configuração m, b para uma configuração n, a for possível, a colisão induzida de dois corpos é única. A largura parcial de qualquer transição pode então ser associada com o elemento de matriz de interação ao quadrado de dois corpos correspondente. Se assumirmos que todas as colisões de dois corpos são igualmente prováveis, no caso, que todos os elementos de matriz de interação ao quadrado de dois corpos fossem iguais, podemos então associar um valor único para todas as larguras parciais de transições diferentes de zero. Podemos escrever a largura de espalhamento para uma transição de $1p - 2p1h$, como descrito na seção 2.2.1.4, eq. (2.48), que fornece

$$\begin{aligned}\Gamma_{1p}^\downarrow(\vec{p}_1) &= \frac{1}{3(2\pi\hbar)^2} p_F^3 \frac{p_1}{m} \sigma_{NN} P_{p,pauli}(p_1) \\ &= \frac{1}{4} \hbar \frac{p_1}{m} \rho_0 \sigma_{NN} P_{p,pauli}(p_1),\end{aligned}\quad (2.57)$$

com

$$P_{p,pauli}(p_1) = 1 - \frac{7}{5} \frac{p_F^2}{p_1^2} + \frac{2}{5} \frac{p_{2min}^5}{p_1^2 p_F^3}. \quad (2.58)$$

Para a largura de buracos, temos (eq. 2.50)

$$\Gamma_{1h}^\downarrow(\vec{p}_1) = \frac{3}{16} \hbar \frac{p_F}{m} \rho_0 \sigma_{NN} P_{h,pauli}(p_1), \quad (2.59)$$

onde

$$P_{h,pauli}(p_1) = \left(1 - \frac{p_1^2}{p_F^2}\right)^2. \quad (2.60)$$

Temos discutido apenas a contribuição de um única transição $1p \rightarrow 2p1h$ ou $1h \rightarrow 1p2h$. Transições que diminuem ou mantêm o número de excitons também irão contribuir para a largura de espalhamento, mas não iremos discuti-las aqui. A largura total de espalhamento de uma configuração n, a será a soma das larguras de espalhamento de cada uma de suas partículas e buracos.

Na simulação de Monte Carlo, a largura de espalhamento e a largura de emissão serão usadas para determinar qual partícula/buraco de uma configuração irá espalhar ou ser emitida. No caso de uma colisão/espalhamento, as larguras de espalhamento e emissão de partículas/buracos que resultarão são então calculadas e levadas em conta no próximo passo da evolução do sistema.

2.3.4 O modelo híbrido Monte Carlo (HMS)

Variando as taxas de transições entre as diferentes classes de estados, podemos estudar os efeitos de vários graus de misturas de configurações. Tomando o limite $\Lambda_{n,a;n,b} \rightarrow 0$, eliminamos a mistura interna de configurações em cada classe de exciton. A falta de mistura interna é a característica distintiva básica do modelo híbrido e do HMS. Fazendo a aproximação de “*never-come-back*”, $\Lambda_{(n-2),a;n,b} \rightarrow 0$ (isto é, o número total de excitons não diminui), obtemos um modelo com propriedades fundamentais idênticas às daquelas do modelo HMS de (BLANN, 1996). Como formulado aqui, em termos da equação mestre, o limite de “*no-mixing*”, sem mistura de configuração, do modelo, fornece um espectro *exclusivo*, onde o núcleo residual da emissão pode ser determinado, ao invés dos *inclusivos*, onde não é possível determinar o núcleo residual da emissão, como é o caso no modelo original HMS.

2.3.5 Mistura completa e o modelo de exciton

Quando as larguras parciais de transição dentro de uma classe de exciton são bem maiores que aquelas entre classes,

$$\Lambda_{n,a;n,b} \gg \Lambda_{n,a;m,b}, \Lambda_{m,b;n,a} \quad m = n \pm 2, \quad (2.61)$$

as configurações dentro de cada classe de exciton tendem ao equilíbrio antes de ocorrer outras transições que mudam o número de excitons e, assim, mudam a classe de exciton. Isto é, a probabilidade de ocupação tende a

$$P_{n,a} \rightarrow \frac{1}{N_n} P_n, \quad (2.62)$$

onde N_n é o número total de configurações com energia de excitação E^* em uma classe de exciton n e $P_n = \sum_a P_{n,a}$ é a probabilidade total de ocupação da classe. Se o equilíbrio entre as configurações em cada classe for, de fato, atingida, podemos escrever a equação mestre como

$$\hbar \frac{1}{N_n} \frac{dP_n}{dt} = \sum_{m,b} \Lambda_{n,a;m,b} \frac{1}{N_m} P_m - \Gamma_{n,a} \frac{1}{N_n} P_n, \quad (2.63)$$

no qual, depois de somar sobre todas as configurações em cada classe de exciton, pode ser reescrita como

$$\hbar \frac{dP_n}{dt} = \sum_m \Lambda_{n,m} P_m - \Gamma_n P_n, \quad (2.64)$$

com

$$\Lambda_{n,m} = \sum_{a,b} \Lambda_{n,a;m,b} \frac{1}{N_m} \quad \text{e} \quad \Gamma_n = \sum_m \Lambda_{m,n} + \sum_e \Gamma_{e,n}, \quad (2.65)$$

onde

$$\Gamma_{e,n} = \sum_a \Gamma_{e;n,a} \frac{1}{N_n}. \quad (2.66)$$

A taxa de emissão de partículas de energia e pode ser, agora, reescrita como

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{\hbar} \sum_n \Gamma_{e,n} P_n. \quad (2.67)$$

Neste limite, o modelo reduz ao usual modelo de exciton, no qual a evolução do sistema e as taxas de emissões dependem somente nas populações das classes de excitons e não naquelas de configurações individuais. Note que a contribuição das transições dentro de uma classe, $\Lambda_{n,n} P_n$, cancela, de forma exata, a mesma contribuição em $\Gamma_n P_n$, para que estas transições deixem de contribuir para a evolução do sistema.

2.3.6 Simulação Monte Carlo

No modelo exclusivo, o número de configurações de partícula-buraco em um cálculo típico é, geralmente, extremamente grande. No caso de um núcleon incidente em ^{16}O a 20 MeV, temos aproximadamente 600 configurações, e com isso, aproximadamente 600 equações acopladas seriam necessárias, enquanto aproximadamente 43000 configurações estão envolvidas a 100 MeV. No caso de um núcleon incidente em ^{56}Fe a 100 MeV, o número de configurações está na ordem de 130 milhões. A solução direta da equação mestre simplesmente não é viável em geral. Ao invés disto, usamos um método de simulação Monte Carlo para obter o espectro de emissão. Este método tem suas vantagens em ser facilmente paralelizável, que permite cálculos razoavelmente rápidos do modelo em um *cluster* de computadores.

Como discutido anteriormente, a equação mestre que descreve a emissão de núcleons

em reações de pré-equilíbrio pode ser escrita como

$$\hbar \frac{dP_{n,a}}{dt} = \sum_{m,b} \Lambda_{n,a;m,b} P_{m,b}(t) - \Gamma_{n,a} P_{n,a}(t), \quad (2.68)$$

onde $P_{n,a}(t)$ é a probabilidade de ocupação instantânea de configuração n, a , $\Lambda_{n,a;m,b}$ é a taxa de transição de uma configuração m, b para uma configuração n, a e $\Gamma_{n,a}$ é a taxa total (largura total) de transições de uma configuração n, a , dada por

$$\Gamma_{n,a} = \sum_e \Gamma_{e;n,a} + \sum_{m,b} \Lambda_{m,b;n,a}, \quad (2.69)$$

onde $\Gamma_{e;n,a}$ é a largura parcial para emissão de um núcleon com energia e .

Podemos escrever a taxa instantânea para emissão de partícula em uma dada energia como uma soma sobre as taxas parciais de emissão de cada configuração vezes a sua probabilidade de ocupação,

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,a} \Gamma_{e;n,a} P_{n,a}(t). \quad (2.70)$$

O espectro de partículas emitidas é obtido integrando esta expressão no tempo,

$$S_e = \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \sum_{n,a} \Gamma_{e;n,a} P_{n,a}(t) dt = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,a} \Gamma_{e;n,a} \int_0^\infty P_{n,a}(t) dt. \quad (2.71)$$

Para calcular isto, é conveniente suprimir os índices usando uma notação de vetor-matriz. Para isso, tratamos as probabilidades de ocupação como um vetor \vec{P} , onde cada um dos componentes correspondem a probabilidade de ocupação de uma configuração. As transições $\Lambda_{n,a;m,b}$ e as larguras totais $\Gamma_{n,a}$ podem ser reescritas como matrizes, Λ e Γ , sendo, a última, diagonal. Podemos então reescrever a solução da equação mestre como

$$\vec{P}(t) = \exp[-(\Gamma - \Lambda) t / \hbar] \vec{P}_0, \quad (2.72)$$

onde \vec{P}_0 é a distribuição de probabilidade inicial.

Para escrever uma expressão para o espectro de emissão, escrevemos as larguras parciais de emissão $\Gamma_{e;n,a}$ como um vetor, $\vec{\Gamma}_e$, com $\vec{\Gamma}_e^T$ sendo sua transposta. Temos então

$$S_e = \frac{1}{\hbar} \vec{\Gamma}_e^T \int_0^\infty \exp[-(\Gamma - \Lambda)t/\hbar] \vec{P}_0 dt = \vec{\Gamma}_e^T \frac{1}{\Gamma - \Lambda} \vec{P}_0. \quad (2.73)$$

Podemos reescrever a última como

$$\begin{aligned} S_e &= \vec{\Gamma}_e^T \Gamma^{-1} \frac{1}{1 - \Lambda \Gamma^{-1}} \vec{P}_0 \\ &= \vec{\Gamma}_e^T \Gamma^{-1} (1 + \Lambda \Gamma^{-1} + \Lambda \Gamma^{-1} \Lambda \Gamma^{-1} + \dots) \vec{P}_0. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Escrevendo os índices explicitamente, temos

$$S_e = \sum_{n,a} \frac{\Gamma_{e;n,a}}{\Gamma_{n,a}} \left(P_{0;n,a} + \sum_{m,b} \frac{\Lambda_{n,a;m,b}}{\Gamma_{m,b}} P_{0;m,b} + \sum_{m,b;l,c} \frac{\Lambda_{n,a;m,b}}{\Gamma_{m,b}} \frac{\Lambda_{m,b;l,c}}{\Gamma_{l,c}} P_{0;l,c} + \dots \right). \quad (2.75)$$

A solução de Monte Carlo para a equação mestre simula esta forma. Dada a configuração n, a em qualquer iteração, pode se considerar as razões de ramificação diferenciais para emissões e para transições internas,

$$\frac{\Gamma_{e;n,a}}{\Gamma_{n,a}} \quad \text{e} \quad \frac{\Lambda_{m,b;n,a}}{\Gamma_{n,a}}, \quad (2.76)$$

observando que

$$\sum_e \frac{\Gamma_{e;n,a}}{\Gamma_{n,a}} + \sum_{m,b} \frac{\Lambda_{m,b;n,a}}{\Gamma_{n,a}} = 1. \quad (2.77)$$

Uma transição para uma nova configuração m, b ou uma emissão é escolhida aleatoriamente de acordo com sua razão de ramificação por meio dos seguintes passos:

1. Ordenando as razões de ramificações,
2. Escolhendo um número aleatório entre 0 e 1,
3. Escolhendo a nova configuração ou emissão que corresponde ao número aleatório de um conjunto ordenado de razões de ramificações.

Assim a primeira iteração fornece um dos

$$\frac{\Gamma_{e;n,a}}{\Gamma_{n,a}} \quad \text{ou} \quad \frac{\Lambda_{m,b;n,a}}{\Gamma_{n,a}}, \quad (2.78)$$

do estado inicial n, a , enquanto a segunda iteração fornece um dos

$$\frac{\Gamma_{e;m,b}}{\Gamma_{m,b}} \frac{\Lambda_{m,b;n,a}}{\Gamma_{n,a}} \quad \text{ou} \quad \frac{\Lambda_{l,c;m,b}}{\Gamma_{m,b}} \frac{\Lambda_{m,b;n,a}}{\Gamma_{n,a}}, \quad (2.79)$$

e assim por diante. Somando e normalizando um grande número de casos produzirá a solução para a equação mestre.

2.4 Modelo Unificado de Iwamoto e Harada de emissão de partículas compostas

Em 1982, Iwamoto e Harada, (IWAMOTO; HARADA, 1982), propuseram um modelo para emissões de partículas compostas leves com base no modelo de exciton. Este novo modelo, que chamaremos de modelo unificado de Iwamoto e Harada (IH), generaliza o modelo de exciton para incluir os efeitos da estrutura intrínseca da partícula emitida. Primeiramente, eles aplicaram este modelo para reações do tipo (p,α) e, depois, em 1983, juntamente com K. Sato, (SATO *et al.*, 1983), aplicaram este mesmo modelo para reações do tipo (p,d) , (p,t) e $(p,{}^3\text{He})$.

A base dos cálculos deste modelo é dado pelo fator de formação da partícula, que é, basicamente, a probabilidade que a partícula composta seja formada. Em (SATO *et al.*, 1983), eles calculam o fator de formação para o trítio, ${}^3\text{He}$ e para o dêuteron, seguindo o método quasi-clássico com o modelo de gás de Fermi descrito em (IWAMOTO; HARADA, 1982). Eles adotaram este método pelas seguintes razões:

- Pelo interesse em estudar as propriedades dos fatores de formação;
- Com este método é possível obter simples expressões analíticas para os fatores de formação, que são muito convenientes para as análises de emissões de partículas compostas leves do modelo de exciton;
- A plausibilidade do cálculo quasi-clássico com a aproximação rms (*root-mean-square*).

Como, neste trabalho, o objetivo é obter um modelo para calcular emissões de dêuterons em reações do tipo (p,d) , iremos apresentar apenas a parte do trabalho de (SATO

et al., 1983) relacionado à esse tipo de reação. Na fig. 2.8 ilustramos a construção do dêuteron a partir de dois núcleons no espaço de momento, que seria, basicamente, a integração no espaço de momento para cada fator de formação do dêuteron, que falaremos logo a seguir. Tendo isso em mente, as coordenadas do próton e do nêutron, dentro do dêuteron, são definidas como \vec{r}_1 e \vec{r}_2 . Assumimos que os dois tem massas iguais, ou seja, $m_1 = m_2 = m$. As coordenadas de centro de massa do dêuteron são dadas por:

$$\vec{R}_d = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \text{e} \quad \vec{P}_d = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (2.80)$$

tendo como coordenadas relativas:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{e} \quad \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \quad (2.81)$$

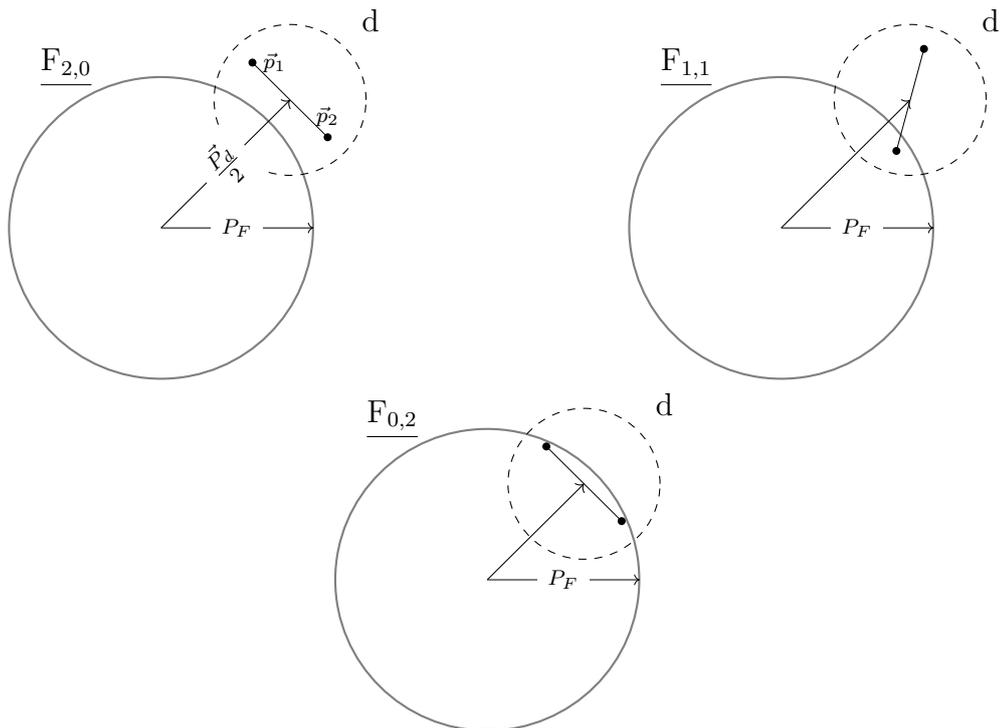


FIGURA 2.8 – Ilustração mostrando a construção do dêuteron a partir de dois núcleons no espaço de momento. Para cada fator de formação do dêuteron, F_{lm} , temos l núcleons com momento maior que o momento de Fermi p_F e m núcleons com momento menor que p_F , com l sendo 1 ou 2 e m sendo 1 ou 0, respectivamente.

O hamiltoniano de movimento interno é dado por:

$$h = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2, \quad \text{com } \mu = \frac{m}{2}. \quad (2.82)$$

A função de onda do estado fundamental é dada por:

$$\phi_d(\vec{r}) = \frac{1}{(\pi b^2)^{3/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{b}\right)^2\right], \quad \text{com } b = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}. \quad (2.83)$$

O raio rms do dêuteron pode ser calculado como,

$$\begin{aligned} 2mr_d^2 &= \int \left(m_1 (\vec{r}_1 - \vec{R}_d)^2 + m_2 (\vec{r}_2 - \vec{R}_d)^2 \right) |\phi_d|^2 d^3r \\ &= \frac{m}{2} \int r^2 |\phi_d|^2 d^3r, \end{aligned} \quad (2.84)$$

portanto, temos:

$$\begin{aligned} r_d^2 &= \frac{1}{4} \int r^2 |\phi_d|^2 d^3r \\ &= \frac{1}{4(\pi b^2)^{3/2}} \int r^2 \exp\left[-\left(\frac{\vec{r}}{b}\right)^2\right] d^3r \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} b^3} \int_0^\infty r^4 \exp\left[-\left(\frac{r}{b}\right)^2\right] dr \\ &= \frac{3}{8} b^2. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Para obtermos o fator de formação de partículas compostas consistindo de dois núcleons, calcula-se a seguinte integral restrita:

$$F_{lm}(\epsilon_d) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int' d^3p d^3r, \quad (2.86)$$

com l sendo o número de núcleons acima da energia de Fermi, m o número de núcleons abaixo da energia de Fermi, $l + m = 2$ e ϵ_d sendo a energia observada do dêuteron, que obtemos de

$$\epsilon_d = E_d - 2\epsilon_F + \frac{\epsilon_0}{2} + Q, \quad (2.87)$$

sendo Q o fator Q , ou seja, a energia liberada na reação nuclear para a emissão de dêuteron e $\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ a energia do estado fundamental do dêuteron/oscilador. A energia do dêuteron no núcleo, E_d , e a energia de Fermi, ϵ_F , são dadas por:

$$E_d = \frac{\vec{P}_d^2}{2(2m)} \quad \text{e} \quad \epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m}, \quad (2.88)$$

com p_F sendo o momento de Fermi do núcleo alvo. As restrições para a integral que define o fator de formação, eq. (2.86), são:

- 1) $\frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \leq \varepsilon_0$, a energia do oscilador no estado fundamental;
- 2) $|\vec{R}_d| = R$, a posição do centro de massa do dêuteron é fixada no raio do núcleo residual;
- 3) \vec{P}_d , o momento do dêuteron no núcleo é fixo;
- 4) As posições dos núcleons são limitadas por $|\vec{r}_i| \leq R_0 = R + \Delta R$, $i = 1, 2$; onde ΔR é um parâmetro à ser ajustado;
- 5) Os momentos dos núcleons são limitados por $|\vec{p}_i| > p_F$, $i = 1, \dots, l$,
e $|\vec{p}_j| \leq p_F$, $j = 1, \dots, m$.

As restrições aplicadas na eq. (2.86) são uma versão clássica das condições de superposição das funções de onda do nêutron e próton com a função de onda do dêuteron no modelo de coalescência. A primeira restrição define o elipsoide, representado pela fig. 2.9, com r sendo o raio do dêuteron no eixo das coordenadas e p sendo o momento do dêuteron no eixo das abscissas.

A segunda restrição nos diz que o módulo do raio do dêuteron, neste caso, é igual ao raio do núcleo residual. A terceira restrição implica que usaremos um momento fixo para o dêuteron e esse momento será inserido no programa como um *input*. A quarta restrição determina que o vetor de coordenada de cada núcleon, próton e nêutron, deve ser menor ou igual a R_0 , que é o raio do núcleo alvo mais um parâmetro ΔR . A quinta e última restrição implica que o momento do núcleon i deve ser maior que o momento de Fermi p_F , sendo que podemos ter l núcleons acima de p_F . E portanto, temos também que o momento do núcleon j deve ser menor que p_F , sendo que podemos ter m núcleons abaixo

de p_F .

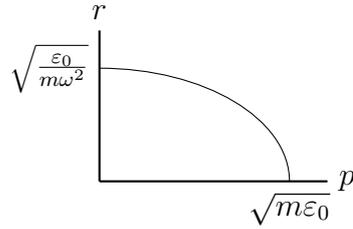


FIGURA 2.9 – Superfície de energia equivalente definida pela primeira restrição para a integral que define o fator de formação.

Em (SATO *et al.*, 1983), os autores calcularam os fatores de formação para o dêuteron analiticamente. Nós, entretanto, calculamos estes mesmos fatores numericamente. Os cálculos foram feitos para $F_{2,0}$, $F_{1,1}$, $F_{0,2}$, e a soma de todos os fatores de formação. Os resultados deste cálculo podem ser vistos na fig. 2.10. No apêndice A, encontra-se uma descrição de como calculamos os fatores de formação para o dêuteron.

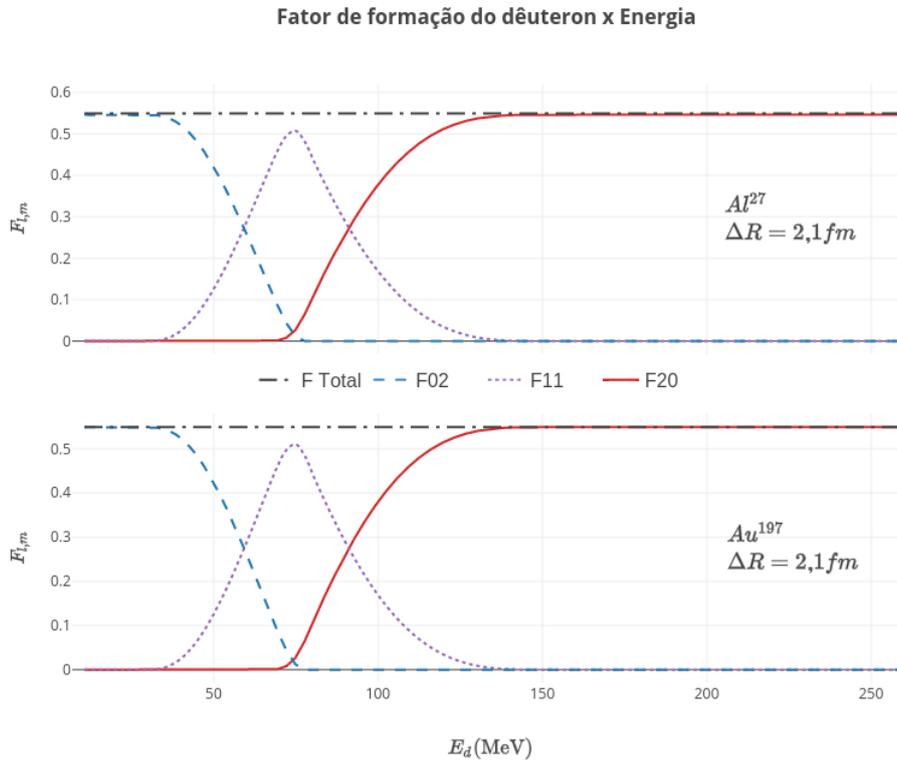


FIGURA 2.10 – Fator de formação do dêuteron para $\Delta R = 2,1$ fm como função da energia do dêuteron para dois diferentes alvos, Al^{27} e Au^{197} . A linha pontilhada e traçada representa $\sum F_{lm}$.

Pode-se notar que as restrições da integral de coordenadas são independentes de l

e m . A eq. (2.86) nos dá a probabilidade que um dêuteron seja formado a partir de núcleons com as características apropriadas em um núcleo alvo excitado. Nos resultados apresentados na fig. 2.10, usamos Al^{27} e Au^{197} como núcleos alvos.

Para o valor de $\Delta R = 2,1$ fm, a probabilidade total de formação do dêuteron no Al^{27} e no Au^{197} é constante em aproximadamente 0,6. O fator de formação é uma função sensível aos parâmetros usados. Menos sensível aos parâmetros é a divisão das taxas de formação em coalescência, *pick-up* e quasi-dêuterons no núcleo. Para energias acima de 90 MeV, podemos ver que $F_{2,0}$, correspondente ao tipo de reação definido como coalescência, é o mecanismo de reação dominante. Contudo, $F_{1,1}$, que descreve as reações de *pick-up*, é importante na região de aproximadamente o dobro da energia de Fermi. A formação de quasi-dêuterons no núcleo, $F_{0,2}$, domina em energias onde ambos os núcleons, prótons e nêutrons, estão abaixo da energia de Fermi. Para tentar ilustrar essas ideias de uma melhor maneira, mostramos, na fig. 2.11, como os fatores de formação estão relacionados aos mecanismos de emissão de dêuterons.

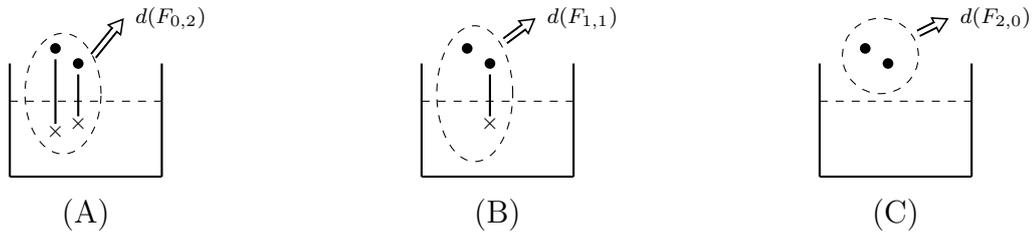


FIGURA 2.11 – Ilustração dos processos expressos pelos fatores de formação do dêuteron. (a) $F_{0,2}$, (b) $F_{1,1}$ e (c) $F_{2,0}$.

Agora, vamos formular a taxa de emissão que envolve os fatores de formação F_{lm} . No caso de *pick-up*, Iwamoto e Harada, (IWAMOTO; HARADA, 1982), consideram que a emissão ocorrem em dois passos: a formação da partícula e a emissão da mesma. O primeiro passo é expressado pelo fator de formação F_{lm} , que já calculamos. O segundo passo, eles tratavam a partícula emitida como uma partícula elementar. Temos, de (IWAMOTO; HARADA, 1982),

$$\frac{d\Gamma_{n(l,m)}}{d\epsilon} = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \mu \epsilon \sigma_{abs} F_{l,m}(\epsilon) \frac{\omega_{n(l,m)}^*(U)}{\omega(p, h, E)}, \quad (2.89)$$

para a taxa de decaimento por unidade de energia a partir de um estado de n -exciton através do componente F_{lm} . ϵ é a energia da partícula emitida, $\omega_{n(l,m)}^*(U)$ é a densidade de estados do núcleo residual, enquanto $\omega(p, h, E)$ é a densidade de estados do núcleo antes

de decair. A energia de excitação E do núcleo pai e U do núcleo residual são relacionados como

$$U = E - \epsilon - Q, \quad (2.90)$$

onde Q é o fator Q .

Se for definido um estado de exciton inicial como (p, h) , um estado de p -partícula e h -buracos, o estado final provocado pelo componente F_{lm} será $(p-l, h+m)$. A liberdade recém-criada de m buracos, entretanto, já está sendo contada na soma sobre as configurações das partículas e, portanto, não tendo necessidade de ser considerada em $\omega_{n(l,m)}^*(U)$. A ideia é de que os núcleons abaixo do nível de Fermi, no qual emergem como constituintes da partícula emitida, sairão livremente sem interações com os núcleons remanescentes. Com estes argumentos, supomos que

$$\omega_{n(l,m)}^*(U) = \omega(p-l, h, U), \quad (2.91)$$

com

$$\omega(p, h, E) = \frac{g[g(E-A)]^{p+h-1}}{p!h!(p+h-1)!}, \quad (2.92)$$

onde g é a densidade de nível de partícula única do núcleo alvo. A é dado por

$$A = \frac{1}{4}(p^2 + h^2 - p - 3h). \quad (2.93)$$

Iwamoto e Harada, (IWAMOTO; HARADA, 1982), postularam a eq (2.91) como um ansatz, ou seja, uma equação que foi colocada no trabalho como um palpite para ter seu valor analisado nos resultados. Para a seção de choque inversa, temos

$$\sigma_{abs} = \pi R^2 \left[1 - \frac{V_{Coul}}{\epsilon} \right], \quad (2.94)$$

onde V_{Coul} é a barreira Coulombiana. A seção de choque é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \hbar \sum_n \sigma_n \sum_{l+m} \frac{1}{\Gamma_n^{tot}} \frac{\Gamma_{n(l,m)}}{d\epsilon}, \quad (2.95)$$

com a soma sobre $n = 3, 5, 7, \dots$ e n sendo o número de excitons. σ_n é a seção de choque para formação de um estado de n -exciton por um núcleon incidente e Γ_n^{tot} é a largura

total de um estado de n -exciton, ou seja, a soma da largura de espalhamento e emissão. Esta é a formula que Iwamoto e Harada utilizaram nos cálculos numéricos de (IWAMOTO; HARADA, 1982).

2.5 Modelo Monte Carlo de emissão de dêuterons em reações de pré-equilíbrio

O modelo que desenvolvemos neste trabalho tem como objetivo o cálculo das emissões de dêuterons em reações de pré-equilíbrio no modelo microscópico que trata as excitações de partícula e buracos independentemente. Este modelo é uma adaptação do modelo de Iwamoto e Harada, discutido na seção anterior 2.4.

Vamos redefinir as densidades de espaço de fase do dêuteron que temos chamado de fatores de formação na seção anterior. Iniciamos com a forma comum da densidade diferencial de espaço de fase de duas partículas,

$$\frac{d^3 p_1 d^3 r_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p_2 d^3 r_2}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d^3 P_d d^3 R_d}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p d^3 r}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (2.96)$$

onde definimos

$$\vec{R}_d = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \text{e} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (2.97)$$

e

$$\vec{P}_d = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{e} \quad \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \quad (2.98)$$

As restrições comuns nas integrais que definem as densidades de espaço de fase são:

- 1) $\frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \leq \varepsilon_0$, energia do oscilador no estado fundamental;
- 2) $|\vec{R}_d| < R$, a posição do centro de massa do dêuteron é menor que o raio do núcleo residual;
- 3) \vec{P}_d , o momento do dêuteron no núcleo é fixo;
- 4) As posições dos núcleons são limitadas por $|\vec{r}_i| \leq R_0 = R + \Delta R$, $i = 1, 2$;
- 5) Os momentos dos núcleons são limitados por $|\vec{p}_j| \leq p_F$, ou $|\vec{p}_j| > p_F$, $j = 1, 2$.

Assumimos que o centro de massa do dêuteron está contido no volume nuclear (ao invés de estar em sua superfície) e que os momentos estão abaixo ou acima do momento de Fermi, dependendo da densidade em questão. Podemos escrever a densidade de espaço de fase no qual as restrições estão expressadas explicitamente como

$$\begin{aligned} \omega_{lm}(P_d)d^3P_d &= \frac{g_d}{(2\pi\hbar)^6}d^3P_d \int d^3R_d \int d^3pd^3r \theta\left(\varepsilon_0 - \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\right) \\ &\quad \times \theta(R_0 - |\vec{r}_1|)\theta(R_0 - |\vec{r}_2|) \prod_{i=1}^l \theta(|\vec{p}_i| - p_F) \prod_{j=l+1}^n \theta(p_F - |\vec{p}_j|), \end{aligned} \quad (2.99)$$

onde $l + m = n$, é o número de núcleons aglomerado, no qual é 2 aqui, e $g_d = 3$ é a multiplicidade de spin do dêuteron. Como esperamos que estas densidades sejam independentes da direção do momento do dêuteron, escrevemos elas como funções de suas magnitudes apenas. Podemos escrever a densidade total de espaço de fase do dêuteron como

$$\begin{aligned} \omega_d(P_d)d^3P_d &= \sum_{l=0}^n \omega_{ln-l}(P_d)d^3P_d \\ &= \frac{g_d}{(2\pi\hbar)^3}d^3P_d \int d^3R_d \\ &\quad \times \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3pd^3r \theta\left(\varepsilon_0 - \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\right) \theta(R_0 - |\vec{r}_1|)\theta(R_0 - |\vec{r}_2|). \end{aligned} \quad (2.100)$$

Notamos que a integral de coordenada interna de espaço de fase forneceria a soma dos fatores de formação, $F_{2,tot}(P_d)$, se R_d estivesse na superfície nuclear. Escrevemos isto aqui como

$$F_{2,tot}(P_d, R_d) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3pd^3r \theta\left(\varepsilon_0 - \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\right) \theta(R_0 - |\vec{r}_1|)\theta(R_0 - |\vec{r}_2|); \quad R_d \leq R, \quad (2.101)$$

para que

$$\omega_d(P_d)d^3P_d = \frac{g_d}{(2\pi\hbar)^3}d^3P_d \int d^3R_d F_{2,tot}(P_d, R_d). \quad (2.102)$$

Por definição, nós temos

$$F_{2,tot}(P_d, R_d) = F_{2,tot}(P_d), \quad (2.103)$$

e temos também

$$F_{2,tot}(P_d, R_d) \rightarrow F_0 = \frac{1}{6} \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar\omega} \right)^3 \quad R_d \rightarrow 0. \quad (2.104)$$

Quando R_d está contido no núcleo, a restrição devido a R_0 enfraquece e a integral aproxima-se do valor total da integral de espaço de fase interno. Temos assim uma boa aproximação

$$\omega_d(P_d)d^3P_d \approx g_d F_0 V \frac{M_d}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2M_d \varepsilon_d} d\varepsilon_d \frac{d\Omega_d}{4\pi} \equiv G_d(\varepsilon_d) d\varepsilon_d \frac{d\Omega_d}{4\pi}, \quad (2.105)$$

onde $V = 4\pi R^3/3$ é o volume nuclear e temos definido uma densidade de estados aproximada para o dêuteron como

$$G_d(\varepsilon_d) = g_d F_0 V \frac{M_d}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2M_d \varepsilon_d}, \quad (2.106)$$

onde $M_d = 2m$ é a massa do dêuteron.

2.5.1 Taxas de emissão de dêuteron

Agora, vamos definir a taxa de emissão de dêuterons para cada mecanismo de emissão, Γ_{lm}/\hbar , como a taxa no qual eles passam através da superfície nuclear. No nosso modelo, os nossos fatores de formação são parciais e, por isso, não podemos obter as taxas usando os fatores $F_{l,m}$, como Iwamoto e Harada fizeram em (IWAMOTO; HARADA, 1982).

2.5.1.1 Taxa de emissão por coalescência

No caso de emissão por coalescência, temos os momentos das duas partículas bem definidos, \vec{p}_1 e \vec{p}_2 , com $|\vec{p}_1| > p_{F1}$ e $|\vec{p}_2| > p_{F2}$. Definindo

$$\vec{P}_d = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{e} \quad \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2), \quad (2.107)$$

observamos que os dois momentos devem satisfazer a limitação em \vec{p} que determina a existência do dêuteron,

$$\left| p_1 - 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0} \right| < p_2 < p_1 + 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0}, \quad (2.108)$$

onde μ é a massa reduzida e ε_0 é a energia do estado fundamental do dêuteron/oscilador. Temos então

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma_{20}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)}{\hbar} g_s V \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} g_s V \frac{d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^3} &= \frac{\Gamma_{20}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)}{\hbar} g_s V \frac{d^3 P_d}{(2\pi\hbar)^3} g_s V \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= g_d v_d \sigma_{abs}(e_d) \frac{d^3 P_{df}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p}{(\pi\hbar)^3} F_r(|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|/2), \end{aligned} \quad (2.109)$$

com $P_{df} = \sqrt{2\mu_d e_d}$, para que

$$\frac{\Gamma_{20}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)}{\hbar} = \frac{g_d v_d \sigma_{abs}(e_d)}{g_s^2} \frac{8}{V} \frac{F_r(|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|/2)}{V} \frac{P_{df}}{P_d}, \quad (2.110)$$

onde v_d é a velocidade relativística do dêuteron, $\sigma_{abs}(e_d)$ é a seção de choque de absorção e $F_r(\vec{p})$ é a parte de coordenadas da integral do fator de formação do dêuteron, eq. (2.86). A amostragem do método de Monte Carlo é trivial no caso de coalescência. Se a largura parcial Γ_{20} for selecionada a partir da soma das larguras parciais, nada mais será necessário fazer. Os momentos \vec{p}_1 e \vec{p}_2 já estão completamente determinados, assim como \vec{P}_d .

2.5.1.2 Taxa de emissão por *pick-up*

Para o caso de *pick-up*, temos um momento bem definido, \vec{p}_1 , com $|\vec{p}_1| > p_F$ e um segundo momento no mar de Fermi, \vec{p}_2 , com $|\vec{p}_2| < p_{F2}$. O momento do centro de massa do dêuteron está sujeito a duas condições neste mecanismo,

$$\left| \vec{P}_d - \vec{p}_1 \right| = |\vec{p}_2| < \vec{p}_{F2} \quad \text{e} \quad \left| \vec{p}_1 - \vec{P}_d/2 \right| = |\vec{p}| < \sqrt{2\mu\varepsilon_0}. \quad (2.111)$$

Ambas condições são satisfeitas quando

$$\max\left(|p_1 - p_{F2}|, 2p_1 - 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0}\right) = P_{d,min} < P_d < P_{d,max} = \min\left(p_1 + p_{F2}, 2p_1 + 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0}\right). \quad (2.112)$$

Notamos que esta condição não pode ser satisfeita quando

$$2p_1 - 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0} > p_1 + p_{F2} \quad \text{ou} \quad p_1 > p_{F2} + 2\sqrt{2\mu\varepsilon_0}. \quad (2.113)$$

Neste caso, a contribuição de coalescência é zero. Se fixarmos um valor do momento do centro de massa do dêuteron de acordo com a condição acima, obtemos uma expressão

similar a integral de coalescência,

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma_{11}(\vec{p}_1, \vec{P}_d)}{\hbar} g_s V \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} &= g_d v_d \sigma_{abs}(e_d) \frac{d^3 P_d}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p_1}{(\pi\hbar)^3} \\ &\times F_r\left(\left|\vec{p}_1 - \vec{P}_d/2\right|\right) \theta\left(p_{F2} - \left|\vec{P}_d - \vec{p}_1\right|\right), \end{aligned} \quad (2.114)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d\Gamma_{11}(\vec{p}_1, \vec{P}_d)}{\hbar} = 8 \frac{g_d}{g_s^2} v_d \sigma_{abs}(e_d) \frac{F_r\left(\left|\vec{p}_1 - \vec{P}_d/2\right|\right)}{V} \frac{d^3 P_d}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(p_{F2} - \left|\vec{p}_1 - \vec{P}_d\right|\right). \quad (2.115)$$

Como a largura parcial não depende da direção do momento do centro de massa, podemos integrar sobre os ângulos entre os momentos \vec{p}_1 e \vec{P}_d para simplificar, mais ou menos, a amostragem de Monte Carlo. Tomando o limite de ΔR grande na função F_r , o limite do ângulo θ_d é dado por

$$\cos \theta_{d,min} = \max\left(\frac{p_1^2 + P_d^2 - p_F^2}{2p_1 P_d}, \frac{p_1^2 + P_d^2/4 - 2\mu\varepsilon_0}{p_1 P_d}\right), \quad (2.116)$$

onde a última condição é o valor de θ_d quando $F_r(p) = 0$ na aproximação de ΔR muito grande. Integrando ambos os lados da eq. (2.114), temos

$$\begin{aligned} \Gamma_{11}(p_1) &= \frac{g_d}{g_s^2} \frac{2}{\pi^2 \hbar^2} \int_{P_{d,min}}^{P_{d,max}} P_d^2 dP_d v_d \sigma_{abs}(e_d) \\ &\times \frac{1}{V} \int_0^{\theta_{d,min}} F_r\left(\sqrt{p_1^2 + P_d^2/4 - p_1 P_d \cos \theta}\right) \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (2.117)$$

No caso de *pick-up*, a amostragem de Monte Carlo de uma largura parcial Γ_{11} da soma das larguras requer três amostragens adicionais para determinar \vec{P}_d . A primeira destas determinará a magnitude de \vec{P}_d a partir da equação

$$G(P_d) = x_1 G(P_{d,max}), \quad (2.118)$$

onde x_1 é um número aleatório entre 0 e 1 e a função $G(P_d)$ é dada por

$$G(P_d) = \int_{P_{d,min}}^{P_d} P_d v_d \sigma_{abs}(e_d) \int_0^{\theta_{d,min}} F_r\left(\sqrt{p_1^2 + P_d^2/4 - p_1 P_d \cos \theta}\right) \sin \theta d\theta. \quad (2.119)$$

Uma vez que P_d é determinado, o ângulo de espalhamento θ_d pode ser determinado a partir da equação

$$(1 - \cos \theta_d) = x_2(1 - \cos \theta_{d,min}), \quad (2.120)$$

onde x_2 é um segundo número aleatório entre 0 e 1. Finalmente o ângulo ϕ_d de emissão do dêuteron pode ser determinado a partir de um terceiro número aleatório x_3 como

$$\phi_d = 2\pi x_3. \quad (2.121)$$

3 Cálculos e Discussões

Iniciamos nossos cálculos com a investigação do modelo unificado de Iwamoto e Harada. O estudo do modelo de Iwamoto e Harada nos forneceu a base para calcular a probabilidade de formação de dêuterons, com diferentes mecanismos de emissão, em uma reação nuclear de pré-equilíbrio. Esta base foi necessária para inserirmos a parte referente ao dêuteron no HMS, assim, expandindo-o para termos um modelo Monte Carlo de emissão tanto de núcleons quanto de partículas compostas, no caso, dêuterons.

Investigamos o uso do ΔR , que é o parâmetro ajustável de *input*, no modelo de Iwamoto e Harada, para sabermos o impacto da variação deste parâmetro nos nossos resultados e o quão sensível é a divisão das taxas de formação com a variação deste parâmetro. Na fig. 3.1, podemos conferir a razão das taxas de formação F_k pelo valor total dos fatores de formação F_{tot} , comparando essa razão com o momento total do dêuteron no núcleo P_d , para diferentes valores de ΔR e, também, com valores obtidos pela aproximação rms para o sistema de coordenadas e momento das partículas envolvidas na reação.

A curva em preto representa o componente que contribui para *knock-out*, de quasi-dêuterons no núcleo, a curva em vermelho representa a componente de *pick-up* e a curva em azul representa a taxa de formação de coalescência. Em todos os casos, para $\Delta R = 0, 1$ fm a contribuição dos fatores de formação assimila-se muito aos valores da aproximação rms.

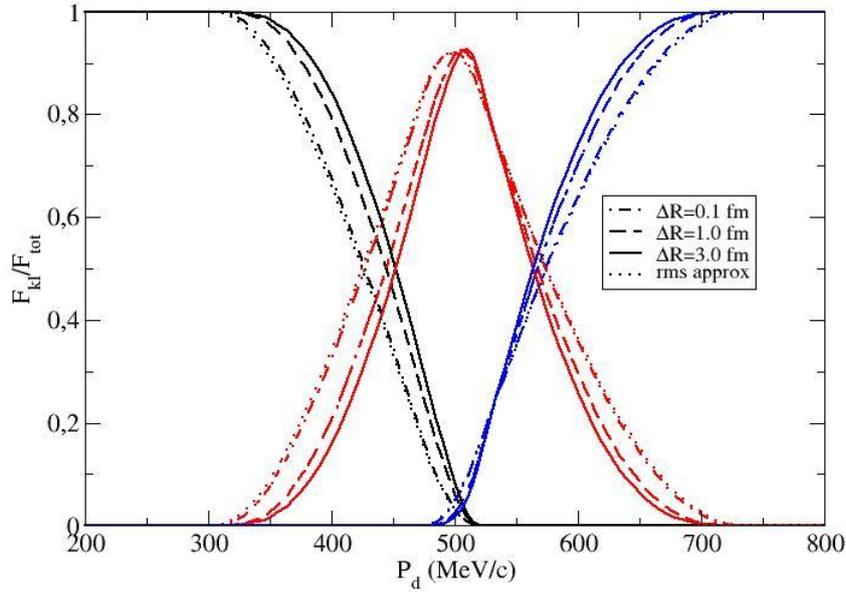


FIGURA 3.1 – Divisão dos fatores de formação F_k pelo valor total dos fatores F_{tot} , para diferentes valores de ΔR e utilizando aproximação rms, em função do momento do dêuteron.

É interessante observar que quando $\Delta R \rightarrow 0$, a função que descreve nossa integral de coordenadas da eq. (2.86), $F_r(p) \rightarrow 2\pi R(\Delta R)^2 = \text{constante}$, tal que as frações neste limite satisfazem a mesma hipótese da aproximação rms. No outro limite, quando $\Delta R > \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{m\omega^2}}$, onde $\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, a função $F_r(p)$ alcança sua forma limite com $p_0 = 0$. Isso ocorre para $\Delta R \gtrsim 2,7$ fm. Assim, $\Delta R = 3$ fm é equivalente a $\Delta R \rightarrow \infty$, como podemos ver na fig. 3.2.

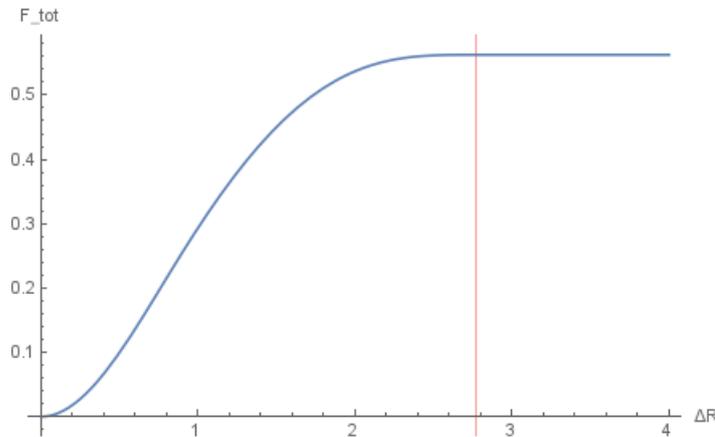


FIGURA 3.2 – O fator de formação total $F_{tot}(\Delta R) = \text{constante}$ quando $\Delta R > \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{m\omega^2}}$ (representado pela linha vertical).

É possível observar também, na fig. 3.1, que temos um deslocamento da curva, de aproximadamente 20 MeV/c, em P_d , entre $\Delta R = 0,1$ fm e $\Delta R = 1,0$ fm, mas para as curvas com $\Delta R = 1,0$ fm e $\Delta R = 3,0$ fm, essa diferença em P_d é bem menor.

Para *pick-up*, podemos notar que para $\Delta R = 0,1$ fm, a razão entre F_k/F_{tot} se inicia com menos momento do que a razão dos outros ΔR 's, mas, após o pico, em aproximadamente 500 MeV/c, a razão se anula com momento maior do que a dos outros ΔR 's, fazendo com que sua curva seja mais larga do que as outras, neste mesmo mecanismo de emissão. As curvas para $\Delta R = 1,0$ fm e $\Delta R = 3,0$ fm estão bem próximas uma da outra, significando que a diferença entre os dois valores do parâmetro não causam grandes mudanças nos nossos resultados para este mecanismo de emissão, tendo uma curva mais fechada, em relação à curva produzida pelo $\Delta R = 0,1$ fm e pela aproximação rms. Os valores de F_k/F_{tot} são maiores, em sua grande maioria, para os valores de ΔR menores para este mecanismo de emissão.

No caso de coalescência, temos, novamente, que as curvas de $\Delta R = 1,0$ fm e $\Delta R = 3,0$ fm estão bem próximas uma da outra, mantendo um valor maior de F_k/F_{tot} com $\Delta R = 3,0$ fm do que com $\Delta R = 0,1$ fm para P_d maiores que 530 MeV/c.

Por fim, é conclusivo que as frações F_k/F_{tot} não são extremamente sensíveis a ΔR . Ao mesmo tempo que tem-se um ΔR pequeno com sua curva deslocada para esquerda, no caso de *knock-out*, em relação as outras curvas, temos uma curva deslocada para a direita no caso de coalescência. Também é possível notar que, quanto maior for o ΔR , a curva se torna mais estreita em relação ao seu início e fim em P_d e que a razão entre F_k/F_{tot} , na maioria dos valores de P_d , se torna maior para *knock-out* e coalescência, e menor para emissões por *pick-up*.

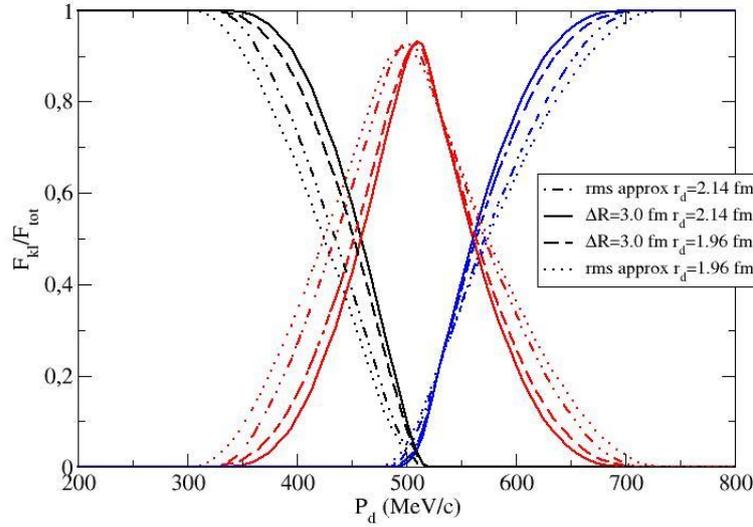


FIGURA 3.3 – Divisão dos fatores de formação F_k pelo valor total dos fatores F_{tot} , para o raio do deuteron nos valores: $r_d = 2,14$ fm e $r_d = 1,96$ fm; utilizando $\Delta R = 3,0$ fm e a aproximação rms.

Na fig. 3.3 analisamos a diferença de valores da divisão das taxas de formação de deuteron em relação a P_d para os casos onde usamos a aproximação rms e $\Delta R = 3,0$ fm, com o raio do deuteron igual a $r_d = 1,96$ fm e $r_d = 2,14$ fm. O aumento de r_d leva a um estreitamento da curva de *pick-up* e uma leve extensão das curvas de quase-deuteron e de coalescência tanto para o uso de ΔR quanto para a aproximação rms.

3.1 Larguras de emissão

Em relação as larguras de emissão de deuteron, fizemos estudos separados dos mecanismos de emissão, *pick-up* e de coalescência, para analisar a contribuição de cada um em relação aos nossos dados experimentais. O estudo da largura de emissão do mecanismo de emissão *knock-out* não será discutido neste trabalho.

3.1.1 Coalescência

No caso de emissão por coalescência, temos os dois momentos de \vec{p}_1 e \vec{p}_2 bem definidos, com $|\vec{p}_1| > p_{F1}$ e $|\vec{p}_2| > p_{F2}$. Na fig. 3.4 podemos ver a largura de emissão de deuteron

por coalescência em relação aos momentos \vec{p}_1 e \vec{p}_2 , para o alvo ^{27}Al , quando \vec{p}_1 e \vec{p}_2 são paralelos.

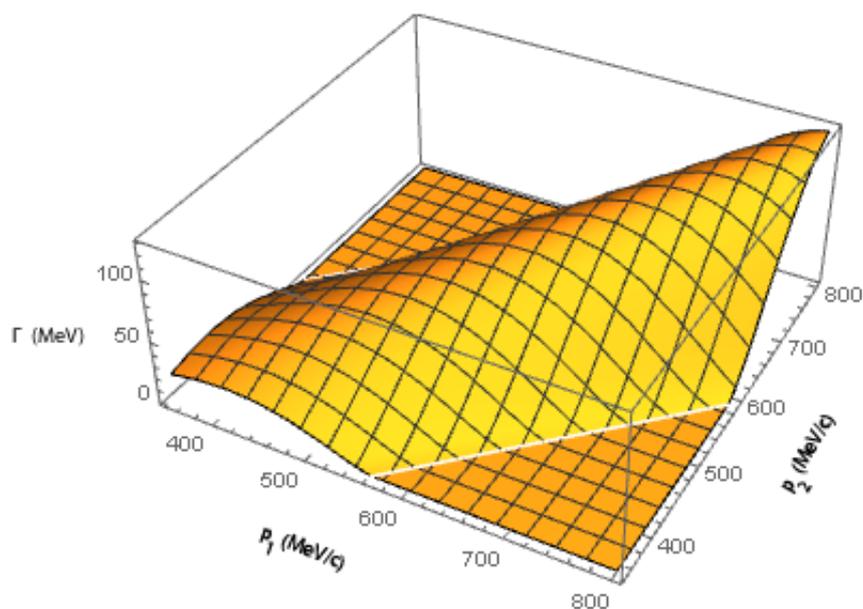


FIGURA 3.4 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{27}Al , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos.

Na fig. 3.5 podemos ver a largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação aos momentos \vec{p}_1 e \vec{p}_2 , para o alvo ^{56}Fe , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos.

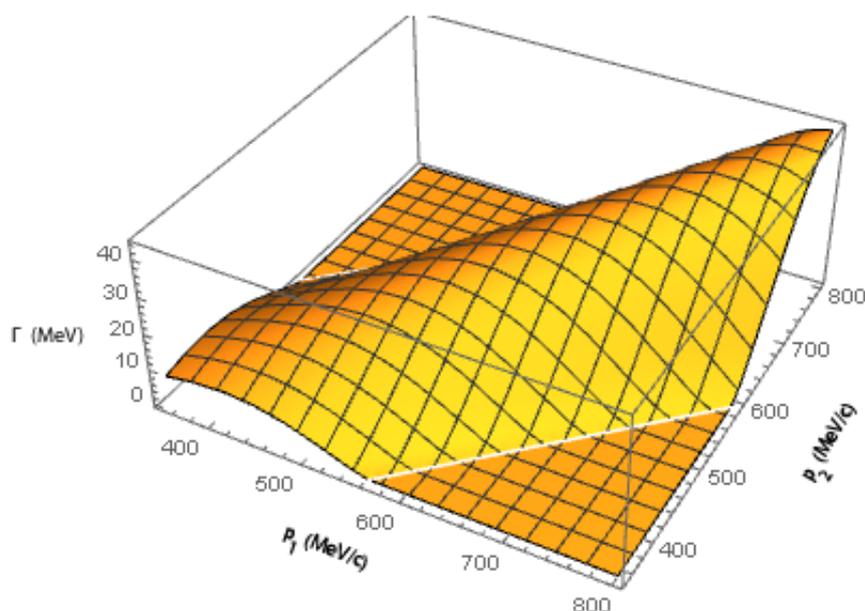


FIGURA 3.5 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{56}Fe , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos.

Na fig. 3.6 podemos ver a largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação

aos momentos \vec{p}_1 e \vec{p}_2 , para o alvo ^{120}Sn , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos.

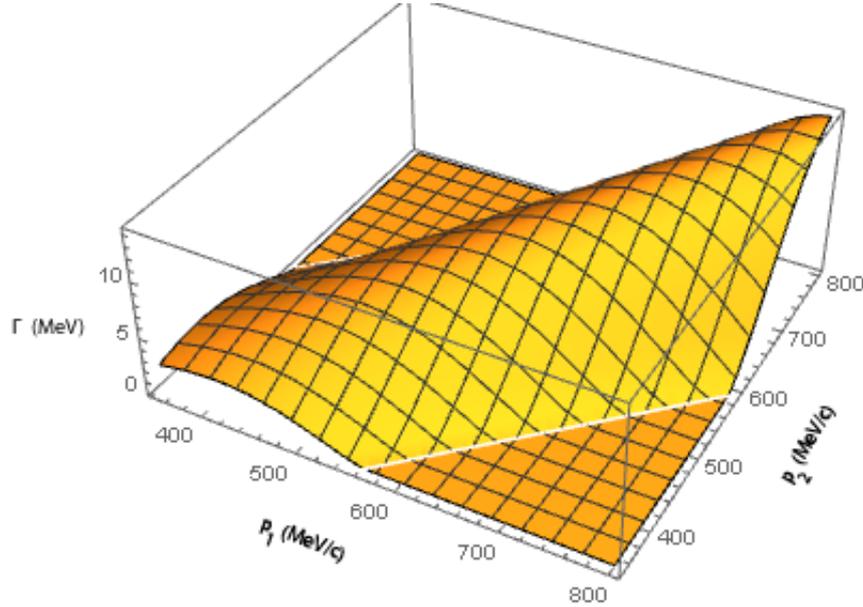


FIGURA 3.6 – Largura de emissão de dêuterons por coalescência em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{120}Sn , com \vec{p}_1 e \vec{p}_2 paralelos.

Mostramos apenas figuras da largura de coalescência $\Gamma(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ correspondentes a \vec{p}_1 paralelo a \vec{p}_2 devido a forte restrição no espaço dos momentos introduzido pela função de onda do dêuteron, que entra na largura através do fator $F_r(\vec{p})$. Coalescência ocorre apenas para momentos \vec{p}_1 e \vec{p}_2 restritos por um p_{\max} definido pela região do espaço de fase permitido, com $|\vec{p}_1 - \vec{p}_2| < p_{\max}$. A restrição a esta região de momentos é visível nas figuras 3.4, 3.5 e 3.6. Não mostramos figuras correspondentes a outros ângulos entre \vec{p}_1 e \vec{p}_2 por estes serem restritos a uma região pequena de valores de \vec{p}_1 e \vec{p}_2 .

Observamos nas figs. 3.4 a 3.6 que a largura de emissão de dêuterons por coalescência diminui com o aumento da massa do núcleo alvo. Nas figs. 3.7 a 3.9, que representam a razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons para ^{27}Al , ^{56}Fe e ^{120}Sn , respectivamente, vemos a mesma tendência de diminuição. Neste caso, a razão entre a emissão de dêuteron por coalescência pela largura de emissão de próton diminui com o aumento da massa do núcleo alvo.

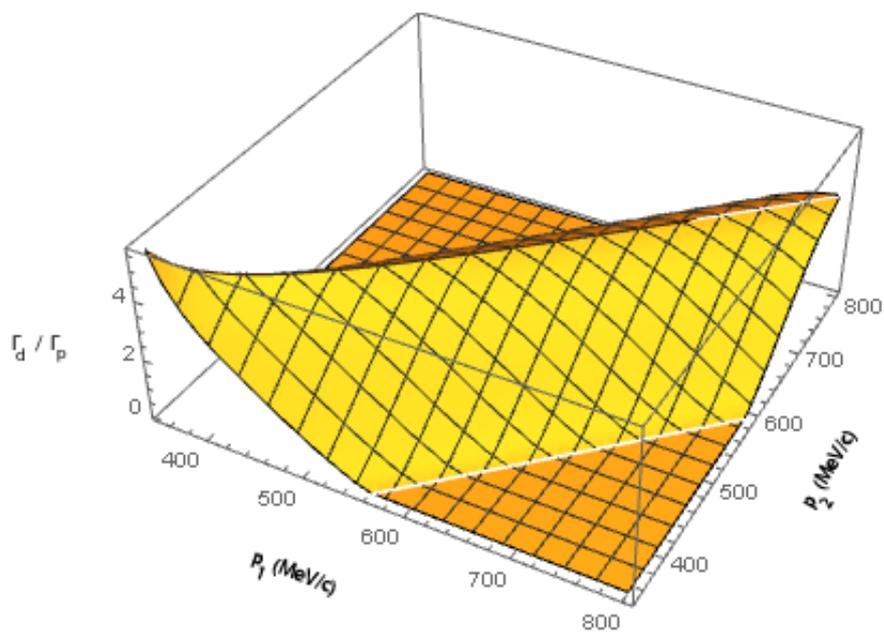


FIGURA 3.7 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{27}Al .

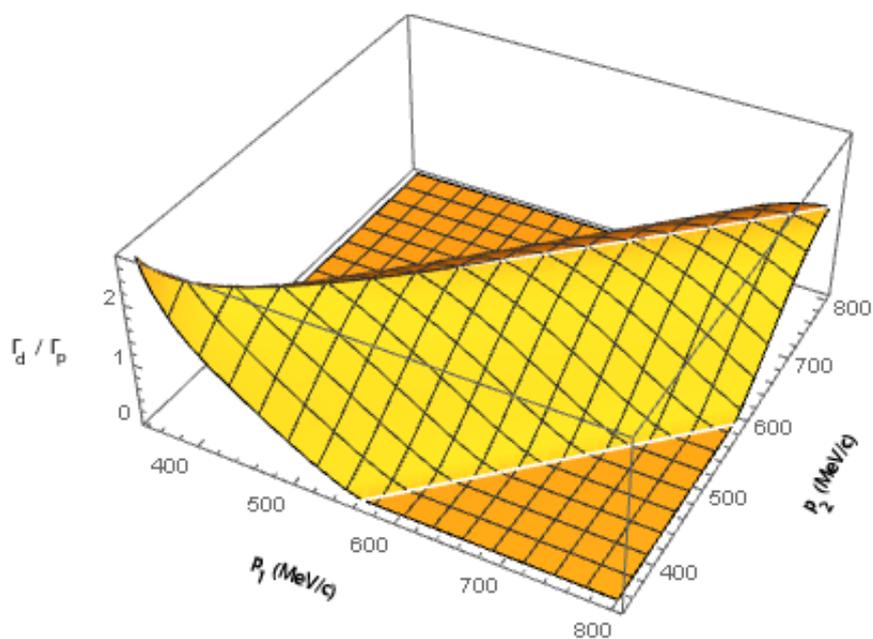


FIGURA 3.8 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas \vec{p}_1 e \vec{p}_2 para ^{56}Fe .

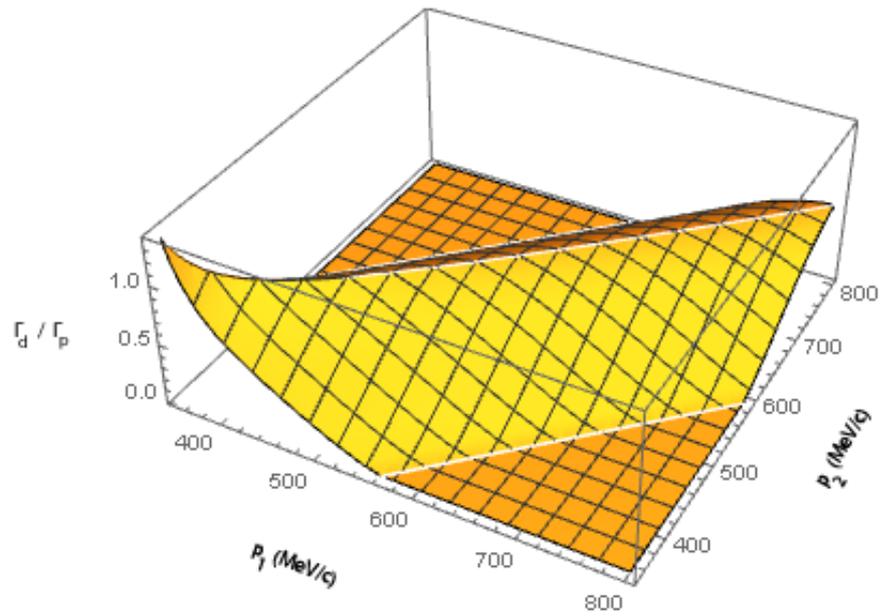


FIGURA 3.9 – Razão da largura de emissão de dêuterons por coalescência pela largura de emissão de prótons em relação ao momento das partículas p_1 e p_2 para ^{120}Sn .

3.1.2 Pick-up

Na fig. 3.10 temos a largura de emissão de dêuterons do mecanismo *pick-up* pelo momento da partícula p_1 , onde $|\vec{p}_1| > p_F$, tendo ^{27}Al como alvo. Na fig. 3.11 temos a largura de emissão por *pick-up* para o alvo ^{56}Fe , tendo uma carga e massa de aproximadamente o dobro da carga e massa de ^{27}Al . Na fig. 3.12, temos a largura de emissão por *pick-up* para o alvo ^{120}Sn , com uma carga e massa de aproximadamente o dobro da massa e carga de ^{56}Fe .

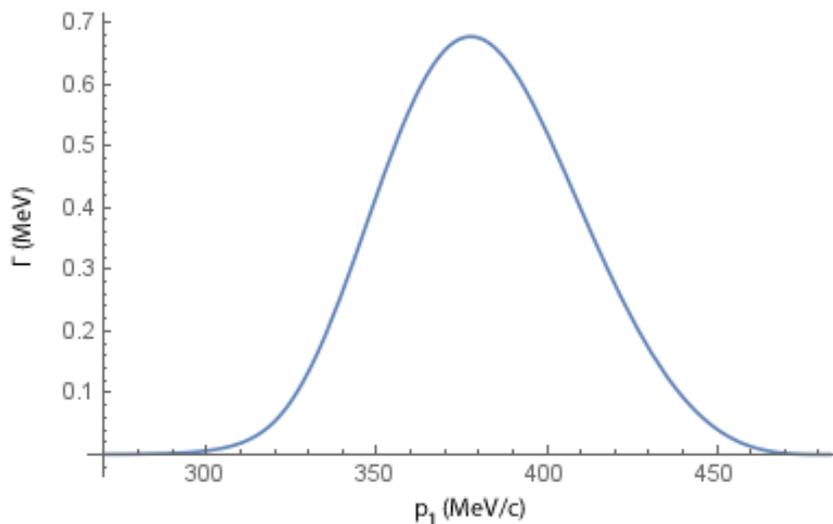


FIGURA 3.10 – Largura de emissão de dêuterons por *pick-up* em relação ao momento da partícula p_1 para ^{27}Al .

É interessante notar que a largura de emissão de dêuterons, neste mecanismo de emissão, decresce com o aumento da carga do alvo e fica ainda menor para núcleos mais pesados, como pode ser visto ao comparar os valores da largura para ^{27}Al , ^{56}Fe e ^{120}Sn . Além disso, podemos ver nas figuras que o pico da largura de emissão de dêuterons, para este mecanismo de emissão, se encontra em aproximadamente 380 MeV/c.

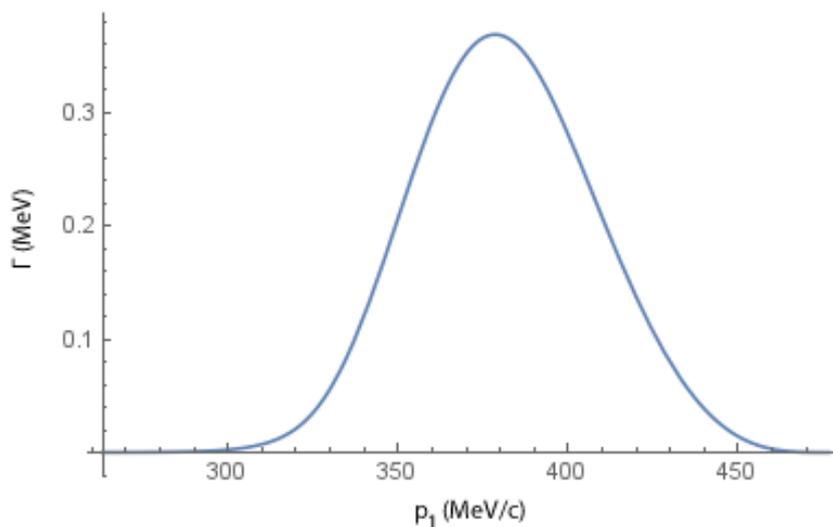


FIGURA 3.11 – Largura de emissão de dêuterons por *pick-up* em relação ao momento da partícula p_1 para ^{56}Fe .

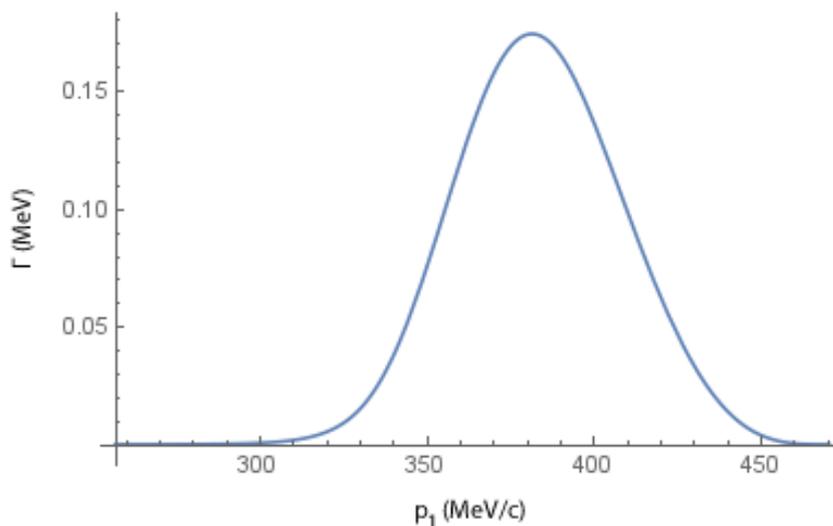


FIGURA 3.12 – Largura de emissão de dêuterons por *pick-up* em relação ao momento da partícula p_1 para ^{120}Sn .

Estes resultados para *pick-up* estão a um fator de 5 a 10 abaixo da magnitude necessária para explicar o espectro de emissão de dêuterons. Tendo isso e o fato de que a largura de emissão diminui com o aumento da carga do alvo, ficando ainda menor para núcleos mais pesados, estes resultados estão em contradição com os dados experimentais. Isto pode ser devido ao fato de termos outro mecanismo de emissão mais importante, que tenha uma maior contribuição na largura de emissão total, no caso o *knock-out*, ou uma falha nos nossos cálculos para este mecanismo.

Em resumo, temos que tanto para coalescência quanto para *pick-up*, a taxa de emissão de dêuterons diminui, em relação a taxa de emissão de prótons, sugerindo que nossa descrição destes dois mecanismos ainda não está correta ou que outros mecanismos, tal como *knock-out*, devem ser incluídos. Por outro lado, o processo de incluir outros mecanismos é suficientemente complicado, devido a competição com colisões e emissão de nêutrons. Devemos implementar os mecanismos de emissão de dêuterons no módulo DDHMS para obter dados para confirmar nossas suspeitas.

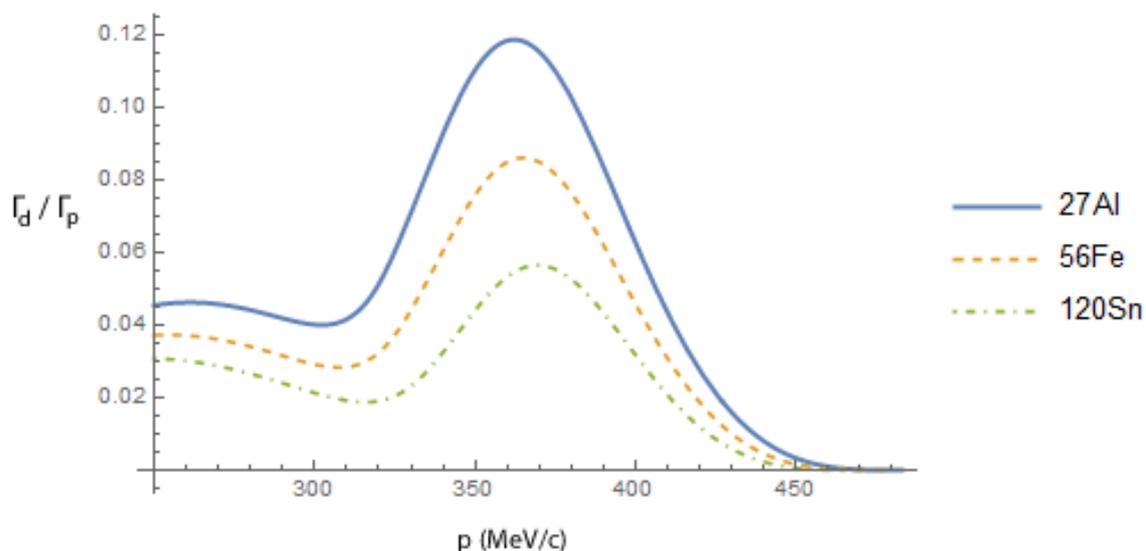


FIGURA 3.13 – Razão entre a largura de emissão para dêuterons por *pick-up* sobre a largura de emissão para prótons. A linha representa a razão para o alvo ^{27}Al , a linha tracejada representa a razão para o alvo ^{56}Fe e a linha pontilhada e tracejada representa a razão para o alvo ^{120}Sn .

Podemos ver que a largura de emissão de dêuterons por *pick-up* representa menos de 10% da largura de emissão para prótons na maior parte da fig. 3.13, onde temos a razão entre a largura de emissão de dêuterons por *pick-up* pela largura de emissão de prótons em função do momento da partícula incidente. Além disso, podemos ver com maior clareza a mudança que temos em relação as larguras de emissão e a massa do núcleo alvo, onde no alvo ^{120}Sn , temos que a razão entre as duas larguras de emissões é menor do que para os núcleos alvos ^{27}Al e ^{56}Fe , que têm massa menores que ^{120}Sn .

4 Conclusões

Tendo em conta as diferenças entre o modelo de exciton e o modelo híbrido de Monte Carlo, implementamos o modelo unificado de emissão de dêuterons de Sato, Iwamoto e Harada, (SATO *et al.*, 1983), no modelo híbrido Monte Carlo de Blann e Chadwick, (BLANN; CHADWICK, 1998). Esta implementação foi feita com o intuito de obter uma descrição mais física de emissões de dêuterons em reações de pré-equilíbrio.

Um detalhe importante que devemos ressaltar sobre nossa pesquisa é que encontramos algumas inconsistências nos coeficientes calculados no modelo unificado de Iwamoto e Harada. Nós fizemos nossos cálculos, descritos no apêndice A, e corrigimos tais inconsistências antes de implementar o modelo unificado no modelo híbrido Monte Carlo.

Nosso trabalho também estende o modelo microscópico, (POMPEIA; CARLSON, 2007), pelo fato de que nosso modelo distingue prótons de nêutrons nos nossos cálculos de reações de pré-equilíbrio. Além disso, pelo fato de que estudamos emissões de dêuterons, nosso modelo leva em conta a coalescência de núcleons para emissão de partículas compostas, que o modelo microscópico não o faz.

Nosso modelo pode ser caracterizado como um aprimoramento dos modelos de Iwamoto e Harada e de Blann e Chadwick para que possamos obter resultados mais consistentes com a necessidade científica de obter dados mais reais em reações nucleares de pré-equilíbrio. Obviamente que este modelo foi apenas o primeiro passo para uma descrição mais física das emissões de partículas compostas em reações de pré-equilíbrio. Iniciamos com o dêuteron mas temos como perspectivas futuras a extensão deste modelo para calcular as emissões de outras partículas compostas, tais como: partículas alfa e trítios.

Vimos que no trabalho de Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983), eles conside-

ravam que o mecanismo com maior contribuição para emissão de dêuterons em reações nucleares de pré-equilíbrio era o de *pick-up*. No caso de Broeders e Konobeyev em (BROEDERS; KONOBEYEV, 2005), eles utilizaram os cálculos de Sato, Iwamoto e Harada (base do modelo de exciton) com a base do modelo híbrido, incluindo outro mecanismo de emissão de dêuteron, o *knock-out*, no qual Sato, Iwamoto e Harada não incluíram no trabalho deles em (SATO *et al.*, 1983). Portanto, obtemos resultados para definir as contribuições dos mecanismos de *pick-up* e coalescência de emissão de dêuteron. Nossa conclusão preliminar é de que as contribuições por coalescência e *pick-up* apresentam valores muito diferentes dos dados experimentais, desde que as contribuições dos cálculos parecem diminuir, em relação a contribuição de emissão de prótons, com a massa, enquanto os espectros experimentais se mantêm na mesma razão. Ainda pode ser que exista outro mecanismo de emissão de dêuteron que tem uma maior contribuição para a emissão de dêuteron, o caso de *knock-out*, por exemplo.

Para averiguar melhor a correspondência de nossos cálculos com os dados experimentais, os próximos passos neste estudo serão desenvolver uma expressão para a largura de emissão por *knock-out* e incluir os três mecanismos de emissão de pré-equilíbrio de dêuteron no módulo DDHMS. Uma vez que estamos satisfeitos com a descrição da emissão de dêuterons, pretendemos estendê-lo ao cálculo da emissão de trítios, hélio-3 e partículas alfas.

Referências

BERTRAND, F. E.; PEELLE, R. W. Complete hydrogen and helium particle spectra from 30- to 60-mev proton bombardment of nuclei with $a = 12$ to 209 and comparison with the intranuclear cascade model. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 8, p. 1045–1064, Sep 1973. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.8.1045>>.

BISPLINGHOFF, J. Configuration mixing in preequilibrium reactions: A new look at the hybrid-exciton controversy. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 33, p. 1569–1580, May 1986. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.33.1569>>.

BLANN, M. New precompound decay model. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 54, p. 1341–1349, Sep 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.54.1341>>.

BLANN, M.; CHADWICK, M. B. New precompound decay model: Angular distributions. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 57, p. 233–243, Jan 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.57.233>>.

BLANN, M.; VONACH, H. K. Global test of modified precompound decay models. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 28, p. 1475–1492, Oct 1983. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.28.1475>>.

BROEDERS, C. H. M.; KONOBEYEV, A. Y. Phenomenological model for non-equilibrium deuteron emission in nucleon induced reactions. **Kerntechnik**, Hanser Verlag, v. 70, n. 5-6, p. 260–269, Nov 2005. ISSN 0932-3902. Disponível em: <<https://doi.org/10.3139/124.100254>>.

BUTLER, S. T.; PEARSON, C. A. Deuterons from high-energy proton bombardment of matter. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 129, p. 836–842, Jan 1963. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.129.836>>.

GRIFFIN, J. J. Statistical model of intermediate structure. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 17, p. 478–481, Aug 1966. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.478>>.

HERMAN, M.; CAPOTE, R.; CARLSON, B. V.; OBLOŽINSKÝ, P.; SIN, M.; TRKOV, A.; WIENKE, H.; ZERKIN, V. EMPIRE: Nuclear Reaction Model Code System for Data Evaluation. **Nuclear Data Sheets**, v. 108, p. 2655–2715, dez. 2007.

IWAMOTO, A.; HARADA, K. Mechanism of cluster emission in nucleon-induced preequilibrium reactions. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 26, p. 1821–1834, Nov 1982. Disponível em:
<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.26.1821>>.

KONING, A.; AKKERMANS, J.; GANDINI, A. Pre-equilibrium nuclear reactions: An introduction to classical and quantum-mechanical models. **Proceedings of the workshop on nuclear reaction data and nuclear reactors: Physics, design and safety**, World Scientific Publishing, p. 143–158, 1999. Disponível em:
<https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:31024058>.

KONING, A.; DUIJVESTIJN, M. A global pre-equilibrium analysis from 7 to 200 mev based on the optical model potential. **Nuclear Physics A**, v. 744, n. Supplement C, p. 15 – 76, 2004. ISSN 0375-9474. Disponível em:
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037594740400870X>>.

KONOBOEYEV, A. Y.; KOROVIN, Y. A. Calculation of deuteron spectra for nucleon induced reactions on the basis of the hybrid exciton model taking into account direct processes. **Kerntechnik**, v. 61, p. 45–49, 1996.

NAGLE, J. L.; KUMAR, B. S.; KUSNEZOV, D.; SORGE, H.; MATTIELLO, R. Coalescence of deuterons in relativistic heavy ion collisions. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 53, p. 367–376, Jan 1996. Disponível em:
<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.53.367>>.

POMPEIA, C. S.; CARLSON, B. Configuration mixing in nucleon-induced pre-equilibrium reactions. **Nuclear Physics A**, v. 787, n. 1, p. 211 – 218, 2007. ISSN 0375-9474. Proceedings of the Ninth International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions. Disponível em:
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947406010153>>.

SATO, K.; IWAMOTO, A.; HARADA, K. Pre-equilibrium emission of light composite particles in the framework of the exciton model. **Phys. Rev. C**, American Physical Society, v. 28, p. 1527–1537, Oct 1983. Disponível em:
<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.28.1527>>.

SCHWARZSCHILD, A.; ZUPANCIC, C. Production of tritons, deuterons, nucleons, and mesons by 30-gev protons on a1, be, and fe targets. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 129, p. 854–862, Jan 1963. Disponível em:
<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.129.854>>.

Apêndice A - Descrição do cálculo do fator de formação de partículas compostas para o dêuteron

O fator de formação da partícula $F_{lm}(\epsilon)$ é a probabilidade em que uma partícula composta seja formada com energia observada ϵ , com l núcleons acima da energia de Fermi e m núcleons abaixo da energia de Fermi. No nosso caso, trabalhamos com o fator de formação do dêuteron, tendo então $l + m = 2$, em uma reação do tipo (p,d). Sato, Iwamoto e Harada, (SATO *et al.*, 1983), calcularam o fator de formação analiticamente. Nós, entretanto, calculamos este fator numericamente. Neste apêndice, vamos descrever como obtivemos as equações para calcular os fatores para cada caso: F_{02} , F_{11} , F_{20} e $F_{2,total}$.

As coordenadas do próton e do nêutron, dentro do dêuteron, são definidas como \vec{r}_1 e \vec{r}_2 . Assumimos que os dois têm massas iguais, ou seja, $m_1 = m_2 = m$. As coordenadas de centro de massa do dêuteron são dadas por:

$$\vec{R}_d = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \text{e} \quad \vec{P}_d = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (\text{A.1})$$

tendo como coordenadas relativas:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{e} \quad \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \quad (\text{A.2})$$

O hamiltoniano de movimento interno é dado por:

$$h = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2, \quad \text{com } \mu = \frac{m}{2}. \quad (\text{A.3})$$

A função de onda do estado fundamental é dada por:

$$\phi_d(\vec{r}) = \frac{1}{(\pi b^2)^{3/4}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{b} \right)^2 \right], \quad \text{com } b = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}. \quad (\text{A.4})$$

O raio rms do dêuteron pode ser calculado como,

$$\begin{aligned} 2mr_d^2 &= \int \left(m_1 \left(\vec{r}_1 - \vec{R}_d \right)^2 + m_2 \left(\vec{r}_2 - \vec{R}_d \right)^2 \right) |\phi_d|^2 d^3r \\ &= \frac{m}{2} \int r^2 |\phi_d|^2 d^3r, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

portanto, temos:

$$\begin{aligned} r_d^2 &= \frac{1}{4} \int r^2 |\phi_d|^2 d^3r \\ &= \frac{1}{4(\pi b^2)^{3/2}} \int r^2 \exp \left[-\left(\frac{\vec{r}}{b} \right)^2 \right] d^3r \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} b^3} \int_0^\infty r^4 \exp \left[-\left(\frac{r}{b} \right)^2 \right] dr \\ &= \frac{3}{8} b^2. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Para obtermos o fator de formação do dêuteron, calculamos a seguinte integral restrita:

$$F_{lm}(\epsilon_d) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int' d^3p d^3r, \quad (\text{A.7})$$

com ϵ_d sendo a energia observada do dêuteron, que obtemos de

$$\epsilon_d = E_d - 2e_F + \frac{\epsilon_0}{2} + Q, \quad (\text{A.8})$$

sendo Q o fator Q , ou seja, a energia liberada na reação nuclear, para a emissão de dêuteron e $\epsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ a energia do estado fundamental do dêuteron/oscilador. A energia do dêuteron no núcleo, E_d , e a energia de Fermi, e_F , são dadas por:

$$E_d = \frac{\vec{P}_d^2}{2(2m)} \quad \text{e} \quad e_F = \frac{p_F^2}{2m}, \quad (\text{A.9})$$

com p_F sendo o momento de Fermi do núcleo alvo. As restrições para a integral que define

o fator de formação para o dêuteron, são:

- 1) $\frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \leq \varepsilon_0$, energia do oscilador no estado fundamental;
- 2) $|\vec{R}_d| = R$, a posição do centro de massa do dêuteron é fixada no raio do núcleo residual;
- 3) \vec{P}_d , o momento do dêuteron no núcleo é fixo;
- 4) As posições dos núcleons são limitadas por $|\vec{r}_i| \leq R_0 = R + \Delta R$, $i = 1, 2$;
- 5) Os momentos dos núcleons são limitados por $|\vec{p}_i| > p_F$, $i = 1, \dots, l$,
e $|\vec{p}_j| \leq p_F$, $j = 1, \dots, m$.

A.1 Integral de coordenadas

Definimos as coordenadas das partículas em termos do centro de massa e da coordenada relativa como

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \vec{R}_d + \frac{1}{2}\vec{r} \equiv \vec{R}_d + \vec{\rho} \\ \vec{r}_2 &= \vec{R}_d - \frac{1}{2}\vec{r} \equiv \vec{R}_d - \vec{\rho}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

onde, para simplificar, definimos $\vec{\rho} = \vec{r}/2$. Reescrevemos a integral do fator de formação como

$$F_{lm}(\epsilon_d) = \frac{8}{(2\pi\hbar)^3} \int' d^3p d^3\rho. \quad (\text{A.11})$$

A primeira restrição limita a variável ρ entre

$$0 \leq \rho \leq \rho_0(p) = \sqrt{\frac{1}{m\omega^2} \left(\varepsilon_0 - \frac{p^2}{m} \right)}. \quad (\text{A.12})$$

A quarta restrição nos fornece

$$\begin{aligned} r_1^2 &= R^2 + \rho^2 + 2\rho R \cos \alpha \leq R_0^2 \\ r_2^2 &= R^2 + \rho^2 - 2\rho R \cos \alpha \leq R_0^2, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

onde α é o ângulo entre os vetores \vec{R}_d e $\vec{\rho}$. Invertendo os dois, temos que

$$-\chi_\rho \leq \cos \alpha \leq \chi_\rho, \quad (\text{A.14})$$

onde

$$\chi_\rho = \frac{R_0^2 - R^2 - \rho^2}{2\rho R}. \quad (\text{A.15})$$

A partir da soma

$$r_1^2 + r_2^2 = 2R^2 + 2\rho^2 \leq 2R_0^2, \quad (\text{A.16})$$

podemos ver que nós devemos ter

$$R^2 + \rho^2 \leq R_0^2 \quad \text{para que} \quad \chi_\rho \geq 0. \quad (\text{A.17})$$

Isto limita os valores possíveis de ρ para

$$\rho^2 \leq R_0^2 - R^2 = \Delta R(2R + \Delta R). \quad (\text{A.18})$$

Comparando χ_ρ com o valor máximo de $\cos \alpha = 1$, encontramos que

$$\chi_\rho = \frac{R_0^2 - R^2 - \rho^2}{2\rho R} < 1 \quad (\text{A.19})$$

implicando que

$$R_0^2 - (R + \rho)^2 = (R + \Delta R)^2 - (R + \rho)^2 < 0 \quad \text{ou} \quad \rho > \Delta R. \quad (\text{A.20})$$

Temos, portanto, a parte angular da integral de coordenadas,

$$\int d\Omega_\rho = \begin{cases} 4\pi, & \rho \leq \Delta R \\ 4\pi\chi_\rho, & \sqrt{\Delta R(2R + \Delta R)} > \rho > \Delta R \\ 0, & \rho > \sqrt{\Delta R(2R + \Delta R)}, \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

e, para toda a integral de coordenadas, com $(\rho_{0m} = \min(\rho_0(p), \sqrt{\Delta R(2R + \Delta R)})$,

$$\begin{aligned}
 \int' d^3\rho &= 4\pi \int_0^{\min(\rho_{0m}, \Delta R)} \rho^2 d\rho + 4\pi \int_{\Delta R}^{\max(\rho_{0m}, \Delta R)} \frac{R_0^2 - R^2 - \rho^2}{2\rho R} \rho^2 d\rho \\
 &= \frac{4\pi}{3} (\min(\rho_{0m}, \Delta R))^3 + 4\pi \left(\frac{R_0^2 - R^2}{4R} \rho^2 - \frac{\rho^4}{8R} \right) \Big|_{\Delta R}^{\max(\rho_{0m}, \Delta R)} \\
 &= \begin{cases} 4\pi \rho_{0m}^3, & \rho_{0m} \leq \Delta R \\ \pi \frac{\Delta R(2R + \Delta R)}{R} \rho_{0m}^2 - \pi \frac{1}{2R} \rho_{0m}^4 - \frac{2\pi}{3} \Delta R^3 - \pi \frac{1}{2R} \Delta R^4, & \rho_{0m} > \Delta R \end{cases}
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983) escreveram a equação acima como

$$\int' d^3\rho = \begin{cases} \frac{4\pi}{3} \rho_{0m}^3, & \rho_{0m} \leq \Delta R \\ C_0 + C_2 \rho_{0m}^2 + C_4 \rho_{0m}^4, & \rho_{0m} > \Delta R \end{cases} \tag{A.23}$$

entretanto, as expressões deles para os coeficientes estão incorretas. Nós achamos

$$\begin{aligned}
 C_0 &= -\frac{2\pi}{3} \Delta R^3 - \pi \frac{1}{2R} \Delta R^4 \\
 C_2 &= \pi \Delta R \left(2 + \frac{\Delta R}{R} \right) \\
 C_4 &= -\pi \frac{1}{2R}.
 \end{aligned} \tag{A.24}$$

Para calcular as integrais de momento, vamos reescrever a integral de coordenadas em termos do momento relativo p . Temos

$$\rho_0(p) = \Delta R \quad \text{quando} \quad p = p_0 = \sqrt{m(\varepsilon_0 - m\omega^2 \Delta R^2)}, \tag{A.25}$$

com $\rho_0 \leq \Delta R$ quando $p \geq p_0$ e $\rho_0 > \Delta R$ quando $p < p_0$. O valor máximo do momento relativo é dado por $p_{max} = \sqrt{m\varepsilon_0}$. Portanto, temos

$$\int' d^3\rho = \begin{cases} \frac{4\pi}{3} \rho_{0m}^3, & p_0 \leq p \leq p_{max} \\ C_0 + C_2 \rho_{0m}^2 + C_4 \rho_{0m}^4, & p < p_0. \end{cases} \tag{A.26}$$

Reescrevemos isto como

$$F_r(p) = \int' d^3\rho = \frac{4\pi}{3} \rho_{0m}^3 \theta(p - p_0) + (C_0 + C_2 \rho_{0m}^2 + C_4 \rho_{0m}^4) \theta(p_0 - p). \tag{A.27}$$

Esta integral será utilizada em todos os casos: F_{02} , F_{11} e F_{20} . Portanto, vamos agora para o cálculo de cada integral de momento.

A.2 Integrais de momento

Para calcular as integrais de momento, começamos escrevendo

$$\begin{aligned}\vec{p}_1 &= \frac{\vec{P}_d}{2} + \vec{p} \equiv \vec{\Pi} + \vec{p} \\ \vec{p}_2 &= \frac{\vec{P}_d}{2} - \vec{p} \equiv \vec{\Pi} - \vec{p},\end{aligned}\tag{A.28}$$

onde, para simplificar, definimos $\vec{\Pi} = \vec{P}_d/2$. Para continuar, devemos considerar cada caso do fator de formação separadamente.

A.2.1 Fator de formação para F_{20}

Vamos começar com o caso de F_{20} onde ambas partículas estão acima do mar de Fermi. Temos

$$\begin{aligned}p_1^2 &= \Pi^2 + p^2 + 2p\Pi \cos \beta > p_F^2 \\ p_2^2 &= \Pi^2 + p^2 - 2p\Pi \cos \beta > p_F^2,\end{aligned}\tag{A.29}$$

onde β é o ângulo entre $\vec{\Pi}$ e \vec{p} . Invertendo os dois, temos

$$-\chi_p < \cos \beta < \chi_p,\tag{A.30}$$

onde

$$\chi_p = \frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi}.\tag{A.31}$$

A partir da soma das duas equações de (A.29), temos

$$p_1^2 + p_2^2 = 2\Pi^2 + 2p^2 > 2p_F^2,\tag{A.32}$$

verificamos que devemos ter

$$\Pi^2 + p^2 > p_F^2 \quad \text{para que} \quad \chi_p > 0. \quad (\text{A.33})$$

Se este não for o caso, ambas as partículas não estarão acima do mar de Fermi. Neste caso, devemos restringir p para

$$p^2 \geq \max(0, p_F^2 - \Pi^2). \quad (\text{A.34})$$

Em contrapartida, comparando χ_p com o valor máximo de $\cos\beta = 1$, encontramos que

$$\chi_p = \frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi} < 1, \quad (\text{A.35})$$

implicando que

$$(\Pi - p)^2 - p_F^2 \leq 0 \quad \text{ou} \quad \max(\Pi - p_F, 0) < p < \Pi + p_F. \quad (\text{A.36})$$

Como o momento relativo p também é limitado em magnitude pela função de onda do estado fundamental, $p \leq p_{\max}$, o limite superior dado aqui pode ser abandonado, para que nós tenhamos

$$\chi_p < 1 \quad \text{quando} \quad \max(\Pi - p_F, 0) < p. \quad (\text{A.37})$$

Uma vez que a parte angular da integral de momento é dependente da integral de coordenadas, temos

$$\int d\Omega_p = \begin{cases} 4\pi, & p \leq \max(\Pi - p_F, 0) \\ 4\pi\chi_p, & p > \max(\Pi - p_F, 0). \end{cases} \quad (\text{A.38})$$

Podemos incluir todas as condições da integral escrevendo-a da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 F_{20,p}(p) &= \theta(\Pi - p_F - p) + \max(\chi_p, 0)\theta(p + p_F - \Pi) \\
 &= \theta(\Pi - p_F - p) + \max\left(\frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi}, 0\right)\theta(p + p_F - \Pi).
 \end{aligned} \tag{A.39}$$

Agora, podemos escrever $F_{20}(\epsilon_d)$ como

$$F_{20}(\epsilon_d) = \frac{4\pi}{(\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} F_r(p) F_{20,p}(p) p^2 dp. \tag{A.40}$$

Embora esta equação possa ser calculada analiticamente, como Sato, Iwamoto e Harada demonstraram em (SATO *et al.*, 1983), a forma analítica revela muito pouco e a expressão pode ser calculada mais rapidamente numericamente.

A.2.2 Fator de formação para F_{11}

Agora, vamos analisar o caso de F_{11} , onde somente uma das partículas está acima do mar de Fermi, no qual definimos que será a primeira das duas partículas. Com isto, temos:

$$\begin{aligned}
 p_1^2 &= \Pi^2 + p^2 + 2p\Pi \cos \beta > p_F^2 \\
 p_2^2 &= \Pi^2 + p^2 - 2p\Pi \cos \beta \leq p_F^2,
 \end{aligned} \tag{A.41}$$

onde β é o ângulo entre $\vec{\Pi}$ e \vec{p} . Juntos, nos fornecem

$$\cos \beta > |\chi_p| \quad \text{com} \quad \chi_p = \frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi}, \tag{A.42}$$

como antes. Quando $|\chi_p| \rightarrow 1$, a integral angular tende à zero,

$$\int d\Omega_p = 2\pi(1 - |\chi_p|) \rightarrow 0. \tag{A.43}$$

O limite do momento da integral angular deve ser dado pela condição:

$$|\chi_p| = \left| \frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi} \right| \leq 1, \tag{A.44}$$

no qual, implica que

$$(\Pi - p)^2 - p_F^2 \leq 0 \quad \text{e} \quad (\Pi + p)^2 - p_F^2 \geq 0, \quad (\text{A.45})$$

$$\max(\Pi - p_F, 0) < p < \Pi + p_F \quad \text{e} \quad \max(p_F - \Pi, 0) < p. \quad (\text{A.46})$$

Podemos, novamente, desprezar o limite superior do momento quando comparamos $p \leq p_{\max}$. Definindo então

$$\begin{aligned} F_{11,p}(p) &= (1 - |\chi_p|)\theta(p - |p_F - \Pi|) \\ &= \left(1 - \left|\frac{\Pi^2 + p^2 - p_F^2}{2p\Pi}\right|\right)\theta(p - |p_F - \Pi|), \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

podemos escrever o fator de formação $F_{11}(\epsilon_d)$ como

$$F_{11}(\epsilon_d) = \frac{4\pi}{(\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} F_r(p) F_{11,p}(p) p^2 dp, \quad (\text{A.48})$$

onde incluímos um fator de 2 para levar em conta os dois casos: $p_1 > p_F$, $p_2 < p_F$ e $p_1 < p_F$, $p_2 > p_F$.

Novamente, esta expressão pode ser calculada muito mais rapidamente quando feita numericamente do que analiticamente.

A.2.3 Fator de formação para F_{02}

Finalmente, vamos analisar o caso de F_{02} , onde ambas as partículas estão abaixo do mar de Fermi. Temos

$$\begin{aligned} p_1^2 &= \Pi^2 + p^2 + 2p\Pi \cos \beta < p_F^2 \\ p_2^2 &= \Pi^2 + p^2 - 2p\Pi \cos \beta < p_F^2, \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

onde β é o ângulo entre $\vec{\Pi}$ e \vec{p} . Juntos, nos fornecem

$$-\chi_p < \cos \beta < \chi_p, \quad (\text{A.50})$$

onde

$$\chi_p = \frac{p_F^2 - \Pi^2 - p^2}{2p\Pi}. \quad (\text{A.51})$$

A soma das duas equações de (A.49) nos dá

$$p_1^2 + p_2^2 = 2\Pi^2 + 2p^2 < 2p_F^2, \quad (\text{A.52})$$

onde verificamos que devemos ter

$$\Pi^2 + p^2 < p_F^2 \quad \text{para que} \quad \chi_p > 0. \quad (\text{A.53})$$

Se este não for o caso, ambas as partículas não estarão abaixo do mar de Fermi. Neste caso, devemos restringir p para

$$p^2 < p_F^2 - \Pi^2. \quad (\text{A.54})$$

Em contrapartida, comparando χ_p com o valor máximo de $\cos\beta = 1$, encontramos que

$$\chi_p = \frac{p_F^2 - \Pi^2 - p^2}{2p\Pi} < 1, \quad (\text{A.55})$$

implicando que

$$p_F^2 - (\Pi + p)^2 \leq 0 \quad \text{ou} \quad p_F - \Pi < p. \quad (\text{A.56})$$

Nós, portanto, temos

$$\chi_p < 1 \quad \text{quando} \quad p_F - \Pi < p < \sqrt{p_F^2 - \Pi^2}. \quad (\text{A.57})$$

Desde que a parte angular da integral de momento é independente da integral de coordenadas, temos

$$\int d\Omega_p = \begin{cases} 4\pi, & p \leq p_F - \Pi \\ 4\pi\chi_p, & p_F - \Pi < p < \sqrt{p_F^2 - \Pi^2}. \end{cases} \quad (\text{A.58})$$

Podemos expressar todas essas condições escrevendo a integral do momento da seguinte

forma:

$$\begin{aligned}
 F_{02,p}(p) &= \theta(p_F - \Pi - p) + \max(\chi_p, 0)\theta(p - p_F + \Pi) \\
 &= \theta(p_F - \Pi - p) + \max\left(\frac{p_F^2 - \Pi^2 - p^2}{2p\Pi}, 0\right)\theta(p - p_F + \Pi).
 \end{aligned}
 \tag{A.59}$$

E, por fim, escrevemos o fator de formação para $F_{02}(\epsilon_d)$ como

$$F_{02}(\epsilon_d) = \frac{4\pi}{(\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} F_r(p) F_{02,p}(p) p^2 dp.
 \tag{A.60}$$

Embora isto também pudesse ser calculado analiticamente, Sato, Iwamoto e Harada (SATO *et al.*, 1983) não o fizeram. Esta expressão certamente poderia ser calculada muito mais rapidamente numericamente.

A.2.4 Soma dos fatores de formação

Desde que as três funções F_{20} , F_{11} e F_{02} consideram todas as combinações possíveis de momentos, dentro ou fora da esfera de Fermi, esperamos que

$$F_{20,p}(p) + F_{11,p}(p) + F_{02,p}(p) = 1.
 \tag{A.61}$$

Também podemos definir o valor total do fator de formação para o dêuteron, como

$$F_{2,tot}(\epsilon_d) = \frac{4\pi}{(\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} F_r(p) p^2 dp,
 \tag{A.62}$$

com

$$F_{2,tot}(\epsilon_d) = F_{20}(\epsilon_d) + F_{11}(\epsilon_d) + F_{02}(\epsilon_d).
 \tag{A.63}$$

Podemos ver na fig. A.1 os valores de $F_{2,0}$, $F_{1,1}$, $F_{0,2}$, e que, de fato, $F_{2,tot}$ representa a soma destes outros valores.

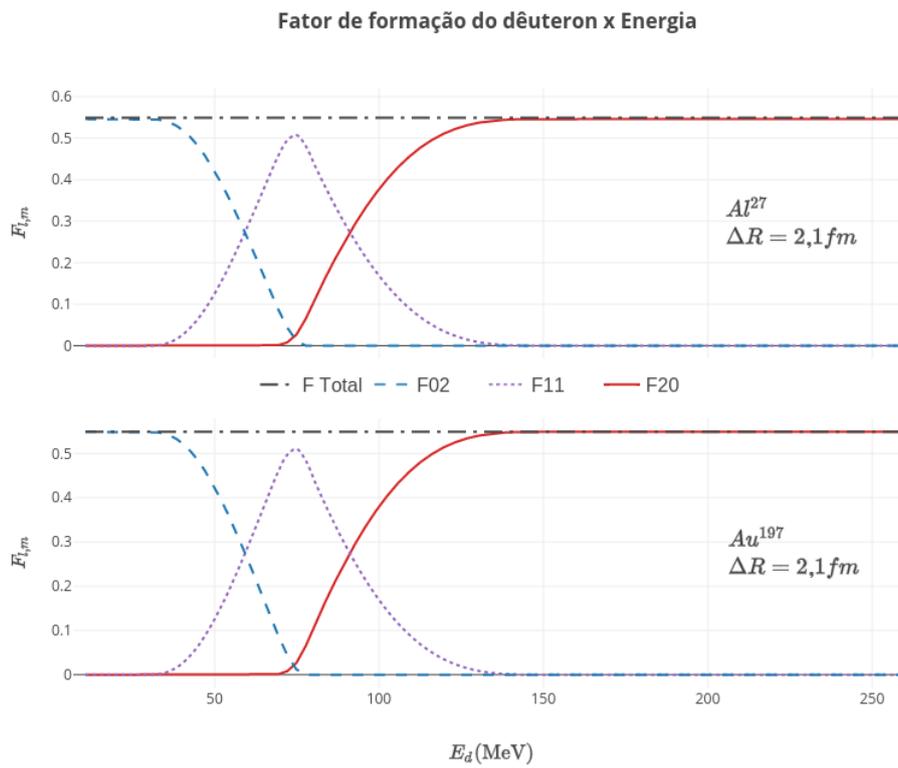


FIGURA A.1 – Fator de formação do dêuteron para $\Delta R = 2,1$ fm como função da energia do dêuteron para dois diferentes alvos, Al^{27} e Au^{197} . A linha pontilhada e traçada representa $F_{2,tot}$.

FOLHA DE REGISTRO DO DOCUMENTO

| | | | |
|---|------------------------------------|---|------------------------|
| 1. CLASSIFICAÇÃO/TIPO DM | 2. DATA 15 de fevereiro de 2018 | 3. DOCUMENTO N° DCTA/ITA/DM-001/2018 | 4. N° DE PAGINAS 93 |
| 5. TÍTULO E SUBTÍTULO: Modelo Monte Carlo para emissão de dêuterons em reações nucleares de pré-equilíbrio | | | |
| 6. AUTOR(ES): Estevão Alves Teixeira | | | |
| 7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ORGÃO(S) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES): Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA | | | |
| 8. PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELO AUTOR: Reações Nucleares; Pré-equilíbrio; Monte Carlo; | | | |
| 9. PALAVRAS-CHAVE RESULTANTES DE INDEXAÇÃO: Reações nucleares; Método de Monte Carlo; Equilíbrio; Reações por dêuteron; Partículas alfa; Física nuclear; Física. | | | |
| 10. APRESENTAÇÃO: <input checked="" type="checkbox"/> Nacional <input type="checkbox"/> Internacional ITA, São José dos Campos. Curso de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Física; Área de Física Nuclear. Orientador: Prof. Dr. Brett Vern Carlson. Defesa em 05/02/2018. Publicada em 2018. | | | |
| 11. RESUMO: Reações de pré-equilíbrio induzidas por núcleons são importantes em várias aplicações da física nuclear. Aproximadamente 20% da taxa de emissão de pré-equilíbrio nestas reações correspondem a partículas compostas, tais como dêuterons e partículas alfas. Dêuterons são produzidos através de emissões do núcleo composto, assim como através de dois importantes mecanismos de reação direta, “ <i>pick-up</i> ” e coalescência. Iwamoto e Harada desenvolveram um modelo semiclássico de pré-equilíbrio que descreve ambos mecanismos diretos como uma generalização de coalescência. Broeders e Konobeyev propuseram uma abordagem alternativa para o cálculo das distribuições de energias de pré-equilíbrio para o dêuteron, incluindo outros mecanismos de emissão, além dos mecanismos propostos por Iwamoto e Harada. Implementamos o modelo unificado de Iwamoto e Harada na extensão do modelo híbrido Monte Carlo de Blann e Chadwick para analisar dados de reações do tipo (p,d), ou seja, reações induzidas por prótons incidentes tendo dêuterons como partícula emitida. Concluímos, de forma preliminar, que possa haver outro mecanismo de emissão que tenha uma contribuição importante para a emissão de dêuterons, além dos propostos por Iwamoto e Harada. Mais estudos serão necessários para confirmar nossas suspeitas. | | | |
| 12. GRAU DE SIGILO: <input checked="" type="checkbox"/> OSTENSIVO <input type="checkbox"/> RESERVADO <input type="checkbox"/> SECRETO | | | |