Universidade de São Paulo
Instituto de Física

**ESTUDO DE PROPRIEDADES
NUCLEARES EM REGIME DE
DEFORMAÇÃO FORA DO EQUILÍBRIO**

Joel Mesa Hormaza

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. João Dias de Toledo Arruda Neto (orientador)
Prof. Dr. Helio Dias (IFUSP)
Prof. Dr. Roberto Vicençotto Ribas (IFUSP)
Prof. Dr. Luiz Paulo Geraldo (IPEN)
Prof. Dr. Sérgio José Barbosa Duarte (CBPF)

Tese de Doutorado apresentada ao
Instituto de Física da Universidade de
São Paulo, Departamento de Física
Experimental, sob a orientação do
Professor Doutor João Dias de Toledo
Arruda Neto

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3567
ex. 1

São Paulo
Agosto – 2001

539.762

4812 e

D

ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Hormaza, Joel Mesa

Estudo de Propriedades Nucleares em Regime de
Deformação fora do Equilíbrio. São Paulo, 2001.

Tese (Doutoramento) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física Experimental

Orientador: Prof. Dr. João Dias de T. Arruda Neto
Área de Concentração: Física Nuclear

Unitermos: 1. Núcleos Deformados; 2. Níveis Isoméricos
3. Estados de Transição; 4. Fotofissão
5. Barreira de Fissão.

USP/IF/SBI-053/2001

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

**ESTUDO DE PROPRIEDADES
NUCLEARES EM REGIME DE
DEFORMAÇÃO FORA DO EQUILÍBRIO**

Joel Mesa Hormaza

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. João Dias de Toledo Arruda Neto (orientador)
Prof. Dr. Helio Dias (IFUSP)
Prof. Dr. Roberto Vicençotto Ribas (IFUSP)
Prof. Dr. Luiz Paulo Geraldo (IPEN)
Prof. Dr. Sérgio José Barbosa Duarte (CBPF)

Tese de Doutorado apresentada ao
Instituto de Física da Universidade de
São Paulo, Departamento de Física
Experimental, sob a orientação do
Professor Doutor João Dias de Toledo
Arruda Neto

SBI-IFUSP

305M810T3567

São Paulo
Agosto – 2001

Aos meus Pais e Irmãos.
A Gréthel.
E principalmente a Elaine.

AGRADECIMENTOS

É extremamente difícil ser justo na hora de expressar agradecimento a todas as pessoas que contribuíram para que este trabalho chegasse ao fim. Mais ainda, quando o ato de valorizar a ajuda depende do sujeito que a recebe.

Gostaria de começar com uma pequena história. Em torno do ano 1994 apareceu no Instituto Superior de Ciências e Tecnologia Nucleares de Havana, um senhor de cachimbo, parecido com Luciano Pavarotti. Ele tinha uma missão importantíssima: levar a *luz* ao grupo cubano de fissão. Eu era um recém-formado em Física Nuclear, jovem e cheio de vontade de fazer coisas. No momento não percebi que aquela visita iria mudar de forma radical a minha vida.

Em abril de 1997 viajei para o Brasil para começar a trabalhar como aluno de Doutorado com aquele senhor. Quem era ele? Nada mais e nada menos que o Professor Arruda Neto (ou “Joao”, como todos os cubanos desacostumados com as normas da etiqueta o chamam). Esse fato já seria por si só, suficiente para encabeçar a lista de pessoas às quais deveria agradecer. Acontece que de orientador, virou conselheiro, amigo, quase-pai e padrinho de casamento. Graças a ele conheci também a Sonia, que passou de “a esposa do meu chefe” para a conselheira, amiga, quase-mãe e madrinha de casamento, além de corretora do meu precário português.

Comigo veio de Cuba o Francis. Boa parte da coragem que eu precisei para não desistir e voltar para Cuba veio dele. Eu acho que conseguimos formar uma boa equipe.

Já no Brasil, o Laboratório do Acelerador Linear recebeu-me de braços abertos.

Acredito que estes têm sido os melhores anos da minha vida. Por quê?

- Aqui conheci pessoas excelentes como o Professor Tiago e seus familiares, em especial a Dona Carmen, com quem compartilhamos momentos bons e momentos difíceis.

-Também trabalhei com os colegas cubanos, “que vão e voltam”, Oscar, Fermin e Guzmán.

- Trabalhei com as colegas cubanas Vicky, Grizel e Katherine.

- Interagi com excelentes colegas que já não estão mais por aqui como o Johnny, a Maria Lucia, Takiya, Pacheco e “Gibi”.

- Tive excelentes colegas no nosso grupo: Marcelo Filadelfo, Ana Cecília, Wilson, Túlio e Andreia.

- Interatuei com os professores do Linear, Airton, Likhachev, Iuda, Otaviano, Vito, Marcão e Pascholatti.

- Não consegui acabar com a paciência da Teresa, Sandra, Vera, Inês e Eliana.

- Tive os excelentes companheiros de sala Juan, Ruy, Zwinglio, Morel e Militão.

- Convivi com estudantes como Rogério, Marcelo Yamashita, Eduardo, David e Paulão, Paulo e com já doutores como Nora, a Susana e Sebastião.

- Recebi o apoio permanente dos meus amigos cubanos, tanto na ilha como espalhados pelo mundo: César, Roiz, Idalmis, Alberto, Valeri e Leandro.

- Se ainda há alguém que não ache suficientes estes motivos, posso incluir ainda que nestes anos conheci a Elaine, a minha esposa.

Também gostaria de fazer um agradecimento especial a mim mesmo, por não ter desistido:

*"Me celebro y me canto a mí mismo,
Y lo que yo diga de mí, lo digo de tí,
porque lo que yo tengo lo tienes tú
y cada átomo de mi cuerpo es tuyo también.*

Walt Whitman
“CANTO A MI MISMO”

Todas estas coisas somadas com a infra-estrutura do IFUSP, além do apoio do CNPq, contribuíram para que finalmente eu concluísse uma fase muito importante da minha vida.

Por tudo isso, obrigado.

Resumo

Foi desenvolvido, implementado e testado um formalismo que permite descrever propriedades nucleares em regimes de deformação fora do equilíbrio, utilizando o método Macroscópico-Microscópico em associação com o Método Semimicroscópico Combinado.

Esse formalismo foi utilizado para a interpretação e elucidação de alguns problemas abertos como as estruturas na seção de choque de fotofissão do ^{237}Np , distribuições angulares de fotofissão do ^{239}Pu , e a concentração de transições M1 no ^{237}Np e ^{239}Pu em baixas energias. Também, foram interpretadas informações experimentais referentes aos estados isoméricos do ^{237}Pu e ^{239}Pu .

Com relação ao potencial preditivo do formalismo, foram identificados os possíveis candidatos (*spin* e paridade) a estados isoméricos no ^{241}Pu , bem como foi calculada também pela primeira vez a distribuição de momentos de nêutrons para o ^{239}Pu fora da deformação de equilíbrio.

Abstract

It was developed, implemented and tested a formalism suitable to the description of nuclear properties at non equilibrium deformations regime, by using the Macroscopic-Microscopic method in association with the Combined Semimicroscopic Method.

This formalism was used for the interpretation and elucidation of some open problems, as the structures in the ^{237}Np photofission cross section, photofission angular distributions of ^{239}Pu , and the concentrations of low-energy M1 transitions in ^{237}Np and ^{239}Pu . Also, experimental information on ^{237}Pu and ^{239}Pu isomeric states was interpreted.

Concerning the prediction potentialities of the formalism, were identified possible candidates (spin and parity) for the ^{241}Pu isomeric states, as well as the ^{239}Pu neutron momentum distributions, at non equilibrium deformation, was also calculated for the first time.

ÍNDICE

1	Introdução -----	1
1.1	A Deformação Nuclear -----	3
1.2	A Deformação no Processo de Fissão -----	4
1.3	Relevância -----	6
1.4	Alguns Problemas Abertos -----	7
	Bibliografia -----	9
2	Objetivos -----	11
2.1	Objetivos Gerais -----	13
2.2	Objetivos Específicos -----	13
3	O Método Macroscópico-Microscópico-----	14
3.1	Introdução -----	16
3.2	O Modelo da Gota Líquida-----	18
3.3	Parametrização da Forma Nuclear-----	19
3.4	Potencial de Partícula Única-----	23
3.5	Diagonalização da Hamiltoniana -----	26
3.6	Correções de Camada -----	27
3.6	Correções de Emparelhamento -----	30
	Bibliografia -----	33
4	O Método Semimicroscópico Combinado-----	35
4.1	Introdução -----	37
4.2	Densidades de Níveis-----	37
4.3	Método Semimicroscópico Combinado-----	39
4.3.1	Modelo Combinatório-----	39
4.3.2	Modelo Quântico Estatístico-----	43
4.4	Coeficientes de Transmissão-----	47
4.4.1	Canal Gama-----	48
4.4.2	Canal de Fissão-----	48
	Bibliografia-----	51
5	Barreiras de Fissão e Deformações de Equilíbrio-----	52
5.1	Barreiras de Fissão-----	54
5.2	Deformações de Equilíbrio-----	69
5.2	Densidades de Níveis na Deformação de Equilíbrio---	71
	Bibliografia-----	74

6	Níveis Isoméricos e Distribuições de Momentos-----	75
6.1	Introdução -----	77
6.2	Estados Isoméricos do ^{237}Pu -----	78
6.3	Estados Isoméricos do ^{239}Pu -----	81
6.4	Estados Isoméricos do ^{241}Pu -----	83
6.5	Distribuição de Momentos de Nêutrons no ^{239}Pu -----	84
	Bibliografia-----	90
7	Estados de Transição-----	92
7.1	Estados de Transição do ^{239}Pu -----	94
	7.1.1 Distribuição de Níveis no Ponto de Sela-----	94
	7.1.2 Concentração de M1 Perto da Barreira-----	96
	7.1.3 Distribuição Angular de Fragmentos-----	98
7.2	Estados de Transição do ^{237}Np -----	101
	7.2.1 Seção de Choque Calculada-----	106
	Bibliografia-----	109
8	Conclusões e Perspectivas-----	111
	Bibliografia-----	114

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 : Barreira de fissão-----	5
Figura 3.1 : Ovóides de Cassini-----	20
Figura 3.2 : Parâmetros $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ em função de $\{ \beta_2, \beta_4 \}$ -----	22
Figura 5.1 : Resultado do modelo Macroscópico-Microscópico para ^{239}Pu -----	55
Figura 5.2 : Barreira de fissão do ^{233}U nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ -----	57
Figura 5.3 : Barreira de fissão do ^{237}Np nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ -----	58
Figura 5.4 : Barreira de fissão do ^{237}Pu nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ -----	59
Figura 5.5 : Barreira de fissão do ^{239}Pu nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ -----	60
Figura 5.6 : Barreira de fissão do ^{241}Pu nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_4 \}$ -----	61
Figura 5.7 : Barreira de fissão do ^{233}U nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_3 \}$ -----	62
Figura 5.8 : Barreira de fissão do ^{237}Np nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_3 \}$ -----	63
Figura 5.9 : Barreira de fissão do ^{237}Pu nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_3 \}$ -----	64
Figura 5.10 : Barreira de fissão do ^{239}Pu nas coordenadas de deformação $\{ \varepsilon, \alpha_3 \}$ -----	65

Figura 5.11 : Barreira de fissão do ^{241}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_3\}$ -----	66
Figura 5.12 : Evolução da forma do núcleo de ^{239}Pu ao longo do caminho de fissão-----	68
Figura 5.13 : Parâmetros $\{\beta_2, \beta_4\}$ calculados em função do número de massa A-----	70
Figura 5.14 : Comparação das energias das cabeças de banda calculadas com as experimentais-----	72
Figura 6.1 : Variação da energia dos níveis do ^{237}Pu em função da deformação-----	80
Figura 6.2 : Distribuição de níveis de partícula única de nêutrons do ^{237}Pu para a deformação do segundo poço-----	80
Figura 6.3 : Espectro de partícula única de nêutrons calculado e comparado com outros resultados teóricos-----	81
Figura 6.4 : Cabeças de banda e primeira banda rotacional do ^{239}Pu na região do segundo poço-----	82
Figura 6.5 : Distribuição de níveis de partícula única de nêutrons do ^{241}Pu para a deformação do segundo poço-----	83
Figura 6.6 : Número de ocupação de nêutrons no segundo poço do ^{239}Pu -----	85
Figura 6.7 : Alguns níveis selecionados para o cálculo da função de onda no espaço de momentos: a) níveis perto do nível de Fermi e b) níveis no fundo do potencial-----	86
Figura 6.8 a) : Distribuições de momentos de alguns orbitais representativos perto do nível de Fermi-----	87
Figura 6.8 b) : Distribuições de momentos de alguns orbitais representativos perto do fundo do potencial-----	88
Figura 6.9 : Distribuição total de momentos calculada-----	89

Figura 7.1 : Níveis do ponto de sela do ^{239}Pu -----	97
Figura 7.2 : Anisotropia dos fragmentos do $^{239}\text{Pu}(\gamma, f)$ analisada em conjunto com os níveis calculados-----	100
Figura 7.3 : Resultados experimentais mais representativos da seção de choque $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$ -----	103
Figura 7.4 : Agrupamentos de níveis de E1, M1 e E2 identificados com as estruturas na seção de choque $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$ -----	105
Figura 7.5 : Seção de choque calculada comparada com os resultados experimentais-----	107

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 : Parâmetros de deformação dos principais pontos do caminho de fissão-----	67
Tabela 5.2 : Parâmetros do potencial de partícula única na deformação de equilíbrio-----	73
Tabela 6.1 : Parâmetros do potencial de partícula única-----	78
Tabela 7.1 : Níveis do ponto de sela do ^{239}Pu -----	96
Tabela 7.2 : Níveis de E1, M1 e E2 calculados acima do primeiro e segundo pontos de sela do ^{237}Np -----	104

Capítulo 1

Introdução

1- Introdução.

1.1- A Deformação Nuclear.

1.2- A Deformação no Processo de Fissão.

1.3- Relevância.

1.4- Alguns Problemas Abertos.

1.1 A Deformação Nuclear

A existência de núcleos com deformações estáveis já foi estabelecida desde os primórdios da Física Nuclear. A observação de grandes momentos de quadrupólo levou a sugerir que alguns núcleos poderiam ter formas esferoidais, o que foi confirmado a posteriori a partir das estruturas das bandas rotacionais e a medição das suas propriedades. Também pode ocorrer deformação induzida, como resultado de reações nucleares (fissão, colisão de íons pesados, etc) que podem levar a movimentos massivos que culminem com a divisão do núcleo em fragmentos.

Boa parte dos modelos nucleares foram desenvolvidos para núcleos que poderíamos chamar de “oficiais”, ou seja, núcleos esféricos com a quantidade de prótons ou nêutrons próxima dos números mágicos. Acontece que, quando se descrevem as propriedades dos núcleos “não oficiais” (que, por sinal, são a maioria), estes modelos não funcionam ou funcionam mal.

As primeiras tentativas bem sucedidas de incorporar a deformação nos modelos nucleares foram feitas por Nilsson, e consistiram no estudo dos efeitos nas energias dos estados num potencial que se deforma lentamente a partir da esfericidade[1]. A distorção com respeito à forma esférica é definida através de um parâmetro de deformação $\delta = \frac{\Delta R}{R}$ (ou $\varepsilon \approx \delta(1 + \delta/2)$). Da resolução numérica da equação de Schrödinger para o potencial deformado proposto por Nilsson, obtém-se a sequência de níveis de energia em função do parâmetro de deformação δ . A representação desses níveis aparece nos chamados “diagramas de Nilsson”. Para caracterizar estes níveis, os números quânticos que descrevem os estados de núcleos esféricos não são mais válidos. Neste sentido, é necessário outro conjunto de números quânticos chamados “números quânticos assintóticos”, que descrevem de forma aproximada as constantes do movimento para altas deformações. Com a ajuda dos diagramas de Nilsson, podem-se explicar satisfatoriamente os spins e paridades do estado fundamental de muitos núcleos deformados, partindo das deformações que correspondem aos momentos quadrupolares medidos experimentalmente. A partir dos “diagramas de Nilsson” não é possível efetuar previsões sobre estados excitados, uma vez que em núcleos deformados aparecem sempre excitações coletivas.

No caso específico da fissão nuclear existe uma combinação de efeitos

coletivos e de partícula, além da influência de fatores dinâmicos e estatísticos. Muitos destes ainda hoje não têm sido totalmente esclarecidos[2].

1.2 A Deformação no Processo de Fissão

Pouco tempo depois do descobrimento da fissão, o mecanismo do processo foi explicado pela primeira vez por Bohr e Wheeler em seu clássico artigo de 1939[3], tendo por base o Modelo da Gota Líquida. Ainda que o Modelo da Gota Líquida forneça uma ferramenta teórica muito útil para descrever o processo de fissão, o conjunto de propriedades e observáveis que pode ser descrito através deste modelo é limitado. Neste sentido, propriedades como distribuição assimétrica de massas de fragmentos, a existência de isômeros de fissão e as ressonâncias sub-barreira, não podem ser explicadas nos marcos deste modelo. Para explicar estes tipos de fenômenos, é necessário considerar a influência das camadas na energia de deformação. O método de Strutinsky[4] para calcular as correções de camada na energia de deformação, tem como consequência natural a conversão da barreira simples, obtida a partir do Modelo da Gota, numa barreira dupla, na maioria dos casos, ou tripla para actínídeos mais leves[5].

Com a inclusão dos efeitos de camada no cálculo das barreiras de fissão, muitos destes fenômenos passam a ter uma explicação natural. Além disso, aparece um grande número de predições a respeito da possibilidade de existência de ilhas de núcleos superpesados. Estes fatos motivaram uma intensa pesquisa das propriedades sistemáticas da dupla barreira através dos mecanismos de excitação e dos isômeros de fissão[5]. Outra fonte importante de informações para o estudo das barreiras de fissão e dos níveis de transição é a distribuição angular de fragmentos. Para energias de excitação próximas do topo da barreira, a distribuição angular de fragmentos pode ser explicada de forma satisfatória através da teoria dos canais de fissão de Bohr [6]. Nessas deformações, quase toda a energia disponível está relacionada com a deformação nuclear. Por isso, podemos considerar que o núcleo está “termodinamicamente frio”, e que o processo de fissão acontece através dos níveis discretos acima da barreira (estados de transição). A distribuição angular de fragmentos é então determinada pelos números quânticos dos estados de transição envolvidos, considerando que: a) a fissão ocorre ao longo do eixo

de simetria do núcleo deformado, e b) a projeção no eixo de simetria K do momento angular total J do estado excitado é conservada durante o trânsito do ponto de sela até o ponto de cisão. A primeira consideração parece bem plausível. Já a segunda deve ser confirmada através de uma análise minuciosa dos dados experimentais.

A forma da barreira de fissão resultante da inclusão dos efeitos de camada tem como resultado a aparição de novos pontos importantes no caminho de fissão. Na figura 1.1 temos a conhecida representação unidimensional da barreira de fissão em função da deformação. Nela podemos identificar os seguintes pontos:

- ε_1 : deformação de equilíbrio,
- ε_2 : primeiro ponto de sela,
- ε_3 : segundo poço,
- ε_4 : segundo ponto de sela e
- ε_5 : ponto de cisão.

Figura 1.1 A barreira de fissão.

Cada um desses pontos permite explicar determinadas propriedades do processo de fissão. Nosso conhecimento empírico a respeito dos estados de transição acima da barreira de fissão (deformações ε_2 e ε_4) é bem pobre, se comparado com a informação que temos dos estados de deformação normal (entendemos por normal as deformações de equilíbrio no estado fundamental, ou seja, deformação ε_1). Essencialmente, as únicas fontes de informação são as seções de choque e as distribuições angulares de fragmentos. Para núcleos par-par assume-se que a barreira de menor energia tem $K^\pi = 0^+$, e constitui a cabeça de uma banda rotacional. Como para a barreira externa consideramos, de forma geral, a existência de assimetria com respeito à reflexão, deve-se esperar a presença da banda $K^\pi = 0^-$ para a energia de excitação zero. Para o caso de assimetria axial na barreira interna, a banda vibracional- γ com $K^\pi = 2^+$ é substituída por níveis rotacionais adicionais na banda do estado fundamental. Para núcleos ímpares e para núcleos par-par a altas energias de excitação, as predições da seqüência de níveis são somente possíveis através de teorias microscópicas, porém, a tendência pode ser descrita de forma qualitativa. As densidades de níveis de partícula única perto da energia de Fermi são maiores para as deformações fora do equilíbrio do que para deformações no equilíbrio. Isto gera dois efeitos: em primeiro lugar o gap de energia nas deformações da barreira vai ser maior que na deformação de equilíbrio e, por outro lado, a densidade de níveis para uma energia de excitação dada deve também ser maior fora da deformação de equilíbrio. Tudo isso funciona muito bem para núcleos com A par, onde o papel dos efeitos de partícula única só aparecem depois da quebra dos pares de nucleóns. Para núcleos com A ímpar ou ímpar-ímpar a realidade é bem diferente, já que os efeitos de partícula única sempre estarão presentes. Isto, como é natural, dificulta muito a interpretação dos resultados de medidas de seção de choque ou de distribuição angular[2].

1.3 Relevância

No contexto da Física Nuclear, a não existência de deformação é exceção e não regra e, ironicamente, os maiores esforços têm sido feitos na descrição de núcleos esféricos. Como já comentamos, o tratamento de núcleos deformados é feito através da extrapolação das descrições a baixas deformações para a região de altas deformações. Isto, como é óbvio, limita a interpretação,

além de provocar interpretações erradas. A maior deficiência na área, em nosso entender é a ausência de um formalismo único que permita descrever um núcleo para qualquer deformação, tanto pequena, quanto grande.

Portanto, podem ser classificados, como problemas abertos para o caso da fissão, todos os fenômenos decorrentes de altas deformações, como por exemplo isômeros de fissão, seqüências de níveis em pontos extremos da barreira de fissão, estruturas sub-barreira e pós-barreira, concentrações de intensidades multipolares diferentes de E1 (M1, E2, etc), entre outros.

1.4 Alguns Problemas Abertos

Com a corrida para altas energias de excitação, alguns fenômenos relacionados com a fissão foram explicados somente de forma parcial e aproximada. Também, a explicação de grande parte das propriedades nucleares tem sido elaborada para núcleos com A par e extrapolada de forma qualitativa para núcleos com A ímpar. Neste sentido, selecionamos para avaliar a nossa metodologia os seguintes problemas abertos:

a) **Níveis isoméricos:** para deformações na região do segundo poço, selecionamos para estudar os isótopos ímpares ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu . Todos eles têm o mesmo número de prótons, e a estrutura dos primeiros níveis na região do segundo mínimo deve ser determinada pelo nêutron desemparelhado. De todos estes núcleos, a informação experimental mais completa de energia e paridade dos níveis é a do ^{239}Pu , bem como o maior número de estudos teóricos[7, 8, 9, 10]. Porém, para o caso do ^{237}Pu calcularemos outra grandeza relacionada com os níveis de partícula única, que são os momentos magnéticos e compararemos com outros valores experimentais e calculados. Já para o ^{241}Pu , que não tem informação experimental disponível, o nosso cálculo terá somente um caráter de predição para os valores de momento angular e paridade dos seus possíveis isômeros de fissão.

b) **Distribuições de momento para deformações fora do equilíbrio:** este tipo de cálculo já tinha sido feito para núcleos na deformação de equilíbrio[11, 12, 13], com o propósito de definir a influência da deformação

nas distribuições de momento. Porém, o caráter isotrópico das distribuições de momento obtidas não permitia elucidar a sensibilidade e/ou a variabilidade destas com a deformação. Assim, seria muito interessante calcular a distribuição de momentos de nêutrons para núcleos altamente deformados.

c) **Concentrações de multipolaridades diferentes de E1 perto da energia da barreira:** o ^{239}Pu possui uma propriedade interessante: os níveis na deformação de equilíbrio até ≈ 0.4 MeV tem paridade positiva ($1/2^+$, $3/2^+$, $5/2^+$, ...), e na região de ≈ 0.4 MeV até ≈ 0.5 MeV a maior parte dos níveis tem paridade negativa[14]. Na região do ponto de sela não existe evidência experimental ou teórica da existência de agrupamentos de níveis por paridade que podem ser populados por transições de M1, E2, etc. Nossos cálculos poderiam também elucidar essa questão.

d) **Distribuição angular dos fragmentos de fotofissão:** nos núcleos ímpares as distribuições angulares dos fragmentos de fissão são muito difíceis de obter experimentalmente, em decorrência da pequena anisotropia. Isto porque a quantidade de níveis disponíveis nos pontos de sela é grande, mesmo quando a excitação é eletromagnética (fotofissão) e a transferência de momento angular é majoritariamente $1\hbar$ (E1, M1), com um pouco de $2\hbar$ (E2, M2).

O caso mais favorável entre núcleos ímpares é o do ^{239}Pu , por apresentar o menor momento angular no estado fundamental ($J^\pi = 1/2^+$). Assim, as distribuições angulares (γ, f) experimentais do ^{239}Pu seriam duplamente interessantes: (1º) ainda não foram interpretadas sem ambigüidade (é mais um problema aberto), e (2º) seriam um excelente campo de prova para a metodologia a ser desenvolvida neste trabalho.

e) **Estruturas na seção de choque (γ, f):** o ^{237}Np possui um limiar de nêutrons relativamente alto, $B_n \approx 6,25$ MeV, e tem sido sistematicamente estudado no intervalo de energias entre 5,7 e 6,0 MeV[15, 16, 17, 18]. Os resultados experimentais obtidos para este núcleo têm sido interpretados de diversas formas, relacionadas com o processo de fissão [16] e com efeitos relacionados com a absorção fotonuclear[15]. Neste trabalho, tentaremos elucidar de forma definitiva a dependência entre as estruturas observadas na seção de choque de fotofissão do ^{237}Np , e a distribuição de níveis sobre o primeiro e segundo pontos de sela.

Bibliografia

- [1] S. G. Nilsson e I. Ragnarsson, "Shapes and Shells in Nuclear Struture", Cambridge University Press, 1995.
- [2] C. Wagemans, "The Nuclear Fission Process", CRC Press, Boca Raton, 1991.
- [3] N. Bohr e J. A. Wheeler, Phys. Rev. 56, 426 (1939).
- [4] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A95** (1967) 420.
- [5] S. Bjørnholm and J. E. Lynn, Rev. Mod. Phys., **52**, 725 (1980).
- [6] A. Bohr, "Proceedings of the United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy", Vol. 2, 131 (1956).
- [7] M. C. Pauli e T. Ledergerber, Nucl. Phys. **A175** , 545 (1971).
- [8] V. Mosel e H. W. Schmitt, Nucl. Phys. **A165** , 73 (1971).
- [9] P. Moller e J. R. Nix, Nucl. Phys. **A229** , 269 (1974).
- [10] I. Hamamoto e W. Ogle, Nucl. Phys. **A240** , 54 (1975).
- [11] J. A. Caballero e E. Moya de Guerra, Nucl. Phys. **A509**, 117 (1990).
- [12] E. Garrido, J. A. Caballero, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J. M. Udias, Nucl.Phys. **A584**, 256 (1995)
- [13] E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J. A. Caballero, M. Casas, D. W. L. Sprung, Nucl.Phys. **A529**, 8 (1991).
- [14] Richard B. Firestone, "Table of Isotopes", Eighth Edition, John Wiley and Sons, New York (1996).

- [15] A.S. Soldatov, V.E. Rudnikov, G.N. Smirenkin., V.M.Andriyanov, V.A.Pilipchenko, I.V.Khimich, Phys. Atomic Nuclei **56**, 1307 (1993).
- [16] V.E. Zhuchko, Yu.B. Ostapenko, G.N. Smirenkin, A.S. Soldatov, Yu. M. Tsipenyuk., Sov.J.Nucl.Phys. **28**, 602 (1978).
- [17] B.L. Berman, J.T. Cadwell, E.J. Dowdy, S.S. Dietrich, P. Meyer, R.A. Alvarez, Phys.Rev.C **34**, 2201 (1986).
- [18] L.P. Geraldo, R. Semmler, O.L. Gonalez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, F.Garcia e O Rodriguez, Nucl.Sc.Engineering **136**, 357 (2000).

Capítulo 2

Objetivos

2.- Objetivos.

2.1- Objetivos Gerais.

2.2- Objetivos Específicos.

2.1 Objetivos Gerais

Desenvolvimento e implementação de um formalismo que permita descrever propriedades nucleares em regimes de deformação fora do equilíbrio, utilizando o método Macroscópico-Microscópico em associação com o “Método Semimicroscópico Combinado”

2.2 Objetivos Específicos

Esse formalismo será utilizado nas seguintes situações:

a) interpretação de dados experimentais precariamente analisados em decorrência de limitações no tratamento de sistemas deformados fora do equilíbrio. Seleccionamos os casos pendentes mais importantes, como o da fotofissão: ^{237}Np em baixas energias (estruturas na seção de choque) e a distribuição angular do ^{239}Pu , bem como a descrição dos níveis isoméricos observados experimentalmente em ^{237}Pu e ^{239}Pu .

b) predição de propriedades associadas aos seguintes observáveis (não estudados experimentalmente):

- (1) níveis isoméricos do ^{241}Pu ;
- (2) distribuição de momentos do ^{239}Pu fora da deformação de equilíbrio;
- (3) concentração de intensidades (“*strength*”) de M1 no processo de fotofissão do ^{239}Pu e ^{237}Np em baixas energias.

Capítulo 3

O Método Macroscópico-Microscópico

3. O Método Macroscópico-Microscópico.

3.1- Introdução.

3.2- O Modelo da Gota Líquida.

3.3- Parametrização da Forma Nuclear.

3.4- Potencial de Partícula Única.

3.5- Diagonalização da Hamiltoniana.

3.6- Correções de Camada.

3.7- Correções de Emparelhamento.

3.1 Introdução

A partir do descobrimento da fissão em dezembro de 1938, as primeiras explicações qualitativas para descrever o processo foram através de modelos de gota líquida carregada. Já em 1939, Bohr e Wheeler desenvolveram este modelo no seu sentido clássico, tornando-se a base para a descrição do processo de fissão até os dias de hoje [1].

Na atualidade, sabemos que muitos dos detalhes finos do mecanismo da fissão não podem ser explicados sem a inclusão da estrutura de camadas. A combinação dos resultados relacionados à estrutura de camadas com os resultados obtidos com o modelo da gota, através do método chamado Macroscópico-Microscópico, dá origem ao que hoje conhecemos como dupla barreira de fissão.

Este capítulo tem o objetivo de apresentar os principais aspectos relacionados com o cálculo da dupla barreira de fissão nos moldes do modelo Macroscópico-Microscópico da fissão: Modelo da Gota Líquida, parametrização da forma nuclear adotada, potencial de partícula única para núcleos deformados e correções de camada e de emparelhamento.

O cálculo das energias de deformação no método Macroscópico-Microscópico é dividido em duas etapas. Na primeira, a parte macroscópica é determinada partindo do Modelo da Gota Líquida (LDM) em sua versão mais refinada[2, 3]. Através desta aproximação, conseguimos descrever as tendências “suaves” da energia potencial, mas não as “flutuações locais”. Por isso, numa segunda fase, precisamos fazer correções do tipo microscópico.

Para o cálculo das correções microscópicas é necessário entender qual é a origem das “flutuações locais”. Elas são devidas, principalmente, a efeitos de camada e de emparelhamento. Myers e Swiatecki foram os primeiros em introduzir a idéia de considerar efeitos de camada que modificam a energia calculada através do LDM[4]. Eles propuseram um método fenomenológico simples que foi posteriormente empregado no Modelo da Gota (*Droplet Model*)[5]. Outras formas de considerar as correções de camada foram propostas [6, 7], porém, a mais amplamente aceita foi a desenvolvida por Strutinsky[8], por ser muito prática e elegante. Segundo Strutinsky, a energia média empregada como elemento básico no cálculo das correções de camada é obtida

a partir de uma densidade de níveis suavizada. O segundo tipo de correções na energia do LDM está associado ao emparelhamento nuclear, geralmente tratado mediante o modelo BCS [9, 10]. Novamente é aplicada a idéia de renormalização da parte “suave”.

De fato, os efeitos de camada e de emparelhamento estão fortemente relacionados com a densidade de níveis nas proximidades do nível de Fermi. Strutinsky verificou a forte correlação existente entre as correções de camada e a razão entre a densidade de níveis de partícula única com relação a uma distribuição uniforme na energia de Fermi. Esta correlação tem origem na pouca variação da energia de Fermi com a deformação. Além disso, a diminuição da densidade de níveis na energia de Fermi diminui também a energia de partícula única do estado em relação ao seu valor uniforme (ou seja, aumenta a energia de ligação). A compressão dos níveis provoca um efeito contrário.

Os efeitos de emparelhamento têm um comportamento oposto aos de camada: eles são negativos nas regiões de alta densidade de níveis de partícula única, e positivos para baixas densidades de níveis. A origem deste comportamento é dada pela maior ou menor disponibilidade de níveis que um par quebrado pode ter.

Portanto, para o cálculo da barreira de fissão, a idéia é considerar o comportamento médio através do Modelo da Gota e as flutuações locais através do modelo de camadas [11]:

$$V(N, Z, \beta) = E_{LD} + E_{shell} + E_{pair}. \quad (3.1)$$

As conseqüências mais importantes do método de correções de camada proposto por Strutinsky são:

a) a existência de um novo tipo de números mágicos para núcleos deformados;

b) a previsão de um segundo mínimo na energia potencial de deformação, ou seja, uma dupla barreira de fissão na região dos núcleos actínídeos.

O carácter oscilatório das correções de camada leva ao surgimento de dois pontos de sela na barreira de fissão (cada um com seu próprio espectro de

níveis de transição) e um segundo mínimo entre eles, com um conjunto de níveis quase-estacionários, que podem interagir com os níveis do primeiro poço (estado fundamental ou de deformação de equilíbrio). A ocupação e o decaimento dos níveis quase-estacionários no segundo poço são responsáveis pela fissão isomérica espontânea, e a interação desses níveis com os níveis do estado fundamental é responsável pela existência de algumas estruturas ressonantes na secção de choque de fissão na região de energias sub-barreira.

A justificativa teórica fundamental do método de Strutinsky é obtida a partir da teoria de Hartree-Fock, onde o potencial de partícula única é autoconsistente, e a matriz densidade de partícula única é gerada por esse potencial[12].

3.2 O Modelo da Gota Líquida

A energia no LDM básico E_{LD} é descrita por um termo de volume proporcional ao número de massa, o termo de superfície proporcional à área superficial ($A^{\frac{2}{3}}$ para núcleo esférico), e por um termo de energia de Coulomb (proporcional a $A^{-\frac{1}{3}}$ para núcleo esférico):

$$E_{LD} = -c_1 A + c_2 A^{\frac{2}{3}} f(\varepsilon) + \frac{3}{5} \frac{e^2 Z^2}{r_o A^{\frac{1}{3}}} g(\varepsilon). \quad (3.2)$$

onde $f(\varepsilon)$ e $g(\varepsilon)$ são funções da deformação ε .

No caso da barreira de fissão, os termos que têm maior importância são os relacionados com a energia superficial e a de Coulomb. A diferença entre estas duas contribuições e aquelas que se referem a uma gota esférica pode ser escrita como:

$$E_{LD}(\varepsilon) - E_{LD}(0) = \{[f(\varepsilon) - 1] + 2\chi [g(\varepsilon) - 1]\} E_s(0), \quad (3.3)$$

onde $E_s(0)$, que é a energia superficial do núcleo esférico, é igual a $c_2 A^{\frac{2}{3}}$ e χ , o parâmetro de fissilidade define-se como a razão entre a energia de Coulomb do núcleo esférico e $2E_s(0)$

$$\chi = \left(\frac{3}{5}\right) \left(\frac{e^2}{r_o}\right) \frac{\frac{Z^2}{A}}{2a_2 \left[1 - \kappa \left(\frac{N-Z}{A}\right)^2\right]}. \quad (3.4)$$

O parâmetro de fissilidade e os coeficientes a_2 e κ são muito importantes na determinação da dependência da energia da gota e das barreiras de fissão com a deformação. Neste sentido, diferentes conjuntos de parâmetros foram propostos por Pashkevich [13], Pauli[14] e Myers-Swiatecky [15].

3.3 Parametrização da Forma Nuclear

Um núcleo deformado pode ser descrito pela seguinte expressão:

$$R(\theta, \varphi) = R_\alpha \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \beta_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \right] \quad (3.5)$$

onde R_α é escolhido de forma tal que o volume nuclear seja conservado, $Y_{\lambda\mu}$ são os harmônicos esféricos (onde θ e φ são os ângulos polares em relação ao sistema de coordenadas fixo no núcleo) e $\alpha_{\lambda\mu}$ são os parâmetros de deformação. No caso de uma deformação com simetria axial:

$$R(\theta) = R_\alpha \left[1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} P_{\lambda}(\theta) \right], \quad (3.6)$$

onde $\beta_{\lambda} = [(2\lambda + 1) / 4\pi]^{1/2} \beta_{\lambda 0}$. Como os harmônicos esféricos $Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$ são ortogonais, os parâmetros β_{λ} correspondentes a uma forma específica numa outra parametrização podem ser obtidos por

$$\beta_{\lambda\mu} = \sqrt{4\pi} \frac{\int R(\theta, \varphi) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) d\Omega}{\int R(\theta, \varphi) Y_{00}(\theta, \varphi) d\Omega}, \quad (3.7)$$

onde $R(\theta, \varphi)$ é o raio vetor na nossa parametrização.

Existem muitas descrições multiparamétricas para a deformação nuclear. No nosso caso adotamos como parametrização da forma nuclear os ovóides de Cassini, que são obtidos a partir da rotação ao redor do eixo “ z ” da curva:

$$\rho(z, \varepsilon) = R_0 \left[\sqrt{a^4 + 4\varepsilon \frac{z^2}{R_0^2}} - \frac{z^2}{R_0^2} - \varepsilon \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.8)$$

onde z e ρ são as coordenadas cilíndricas. A constante a é definida a partir da conservação do volume nuclear, tendo por resultado uma família de curvas que só dependem de um parâmetro de deformação, ε . Como pode ser facilmente observado na equação 3.8, o valor de $\varepsilon = 0$ corresponde a uma esfera. Para $0 < \varepsilon < 0,4$, a forma nuclear é muito próxima a um esferóide com razão entre os semi-eixos dada por:

$$\frac{\text{semi-eixo menor}}{\text{semi-eixo maior}} = \frac{1 - 2\varepsilon/3}{1 + \varepsilon/3}. \quad (3.9)$$

Quando $\varepsilon \approx 0,5$ começa a aparecer um “pescoço”, e quando $\varepsilon = 1,0$, o núcleo fica separado em dois fragmentos.

Figura 3.1 : Ovóides de Cassini. Sistema curvilíneo de coordenadas (R, x) ortogonais. As linhas $R = \text{constante}$ são os ovóides de Cassini e as linhas $x = \text{constante}$ começam nos focos direito e esquerdo e vão para o infinito.

Se, no plano que contém o eixo de simetria, definirmos um sistema de coordenadas (R, x) (ver figura 3.1), de forma tal que R seja constante, então, estas linhas de R constante definem os ovóides de Cassini, onde $0 \leq R < \infty$ e $-1 \leq x \leq 1$. As coordenadas (R, x) estão relacionadas com as coordenadas cilíndricas (r, z) através das seguintes equações:

$$R(z, r) = [(z^2 + r^2)^2 - 2\varepsilon R_0^2(z^2 - r^2) + \varepsilon^2 R_0^4]^{\frac{1}{4}}, \text{ e} \quad (3.10)$$

$$x(z, r) = \frac{\text{sign}(z)}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{z^2 - r^2 - \varepsilon R_0^2}{R^2(z, r)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.11)$$

Neste sistema de coordenadas, a forma do núcleo é descrita pelas equações anteriores, com R constante (que também determina os ovóides de Cassini). Adicionalmente, a forma do núcleo pode ser definida através da curva $R(x)$, que corta a reta $x = \text{constante}$ só em um ponto. Então, podemos expandir a função $R(x)$ em multipólos,

$$R(x) = R_0 \left[1 + \sum \alpha_m Y_{m0}(x) \right]. \quad (3.12)$$

Assim, o conjunto de parâmetros (ε, α) determina a forma nuclear.

Na figura 3.2 podemos observar o conjunto de parâmetros $\{\varepsilon, \alpha_4\}$ em função de $\{\beta_2, \beta_4\}$. Mediante esta figura é possível estabelecer a conexão entre os dois tipos de parâmetros que descrevem a mesma forma nuclear. Para descrever grandes deformações e formas mais complicadas, como no caso de outras parametrizações associadas a expansões em harmônicos esféricos, é necessário incluir um grande número de coeficientes com valores grandes. No nosso caso, evitamos esse inconveniente através da inclusão do parâmetro ε , empregado na equação 3.8.

Figura 3.2 : Parâmetros $\{\varepsilon, \alpha_4\}$ em função de $\{\beta_2, \beta_4\}$.

A propriedade de incompressibilidade da matéria nuclear é levada em consideração através da relação

$$\frac{4}{3}\pi R_0^3 = \pi c^3 \int r^2 dz, \quad (3.13)$$

ou seja, o volume nuclear é conservado independentemente da deformação.

O parâmetro de escala “ c ” da transformação é definido a partir de:

$$z \rightarrow c\bar{z}, \quad r \rightarrow c\bar{r}, \quad (3.14)$$

onde z e r são obtidos da transformação inversa

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{\sqrt{2}} [p - R^2(2x^2 - 1) - \varepsilon R_0^2]^{1/2}, \text{ e} \\ z &= \frac{\text{sign}(x)}{\sqrt{2}} [p + R^2(2x^2 - 1) + \varepsilon R_0^2], \end{aligned} \quad (3.15)$$

com $p = [R^4 + 2\varepsilon R_0^2(2x^2 - 1) + \varepsilon^2 R_0^4]^{1/2}$.

Na presença de multipólos ímpares ($m = 1, 3, 5, \dots$) na expansão, o centro de massa é fixado através da transformação

$$c\bar{z} = z - z_{CM}, \quad (3.16)$$

com

$$z_{CM} = \frac{3c^3}{4R_0^3} \int z r^2 dz. \quad (3.17)$$

3.4 Potencial de Partícula Única

A teoria de campo médio fenomenológico com potencial de partícula única é uma ferramenta poderosa na descrição de fenômenos nucleares a baixa energia. Entre os potenciais fenomenológicos existentes na literatura, o de Woods-Saxon[16] é o que melhor descreve algumas propriedades nucleares como deformações de equilíbrio e momentos, raio quadrático médio, energias de ligação de nucleões, estrutura de isômeros com alto *spin*, barreiras de fissão, e grande parte dos efeitos para núcleos fortemente deformados e núcleos com rotação rápida.

Para determinar o potencial de Woods-Saxon é preciso estabelecer 12 constantes: 6 para nêutrons e 6 para prótons. São elas:

V_0 : profundidade do potencial central,
 r_0 : parâmetro de raio,
 a : parâmetro de difusividade nuclear,
 λ : coeficiente de interação *spin*-órbita,
 r_{0-SO} : parâmetro de raio do potencial *spin*-órbita,
 a_{SO} : parâmetro de difusividade da interação *spin*-órbita.

Existem vários conjuntos de parâmetros propostos para o potencial de Woods-Saxon. Estes conjuntos têm sido determinados partindo do ajuste das propriedades de núcleos β -estáveis. Alguns deles são os de Blomquist e Wahlborn[17], Chepurnov[18], Rost [19] e os denominados “novos ”[20] e “universais ” [21].

O potencial de Woods Saxon está composto pela parte central V , a parte de interação *spin*-órbita V_{SO} , e o potencial de Coulomb V_{Coul} para prótons:

$$V^{WS}(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha}) = V(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha}) + V_{so}(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha}) + V_{Coul}(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha}). \quad (3.18)$$

O potencial central nuclear $V(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha})$ é definido de forma que descreva aproximadamente a função de distribuição de densidade, então,

$$V(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha}) = \frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{\text{dist}(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha})}{a}\right]}, \quad (3.19)$$

onde $\text{dist}(r, z, \varepsilon, \hat{\alpha})$ é a distância entre um ponto qualquer e a superfície nuclear, e ε e $\hat{\alpha}$ são parâmetros de deformação.

A profundidade do potencial central é parametrizada por

$$V_0 = V_0[1 \pm \kappa(N - Z)/(N + Z)], \quad (3.20)$$

com o sinal positivo para prótons e o sinal negativo para nêutrons. O valor da constante κ é 0,63.

É evidente que a interação *spin*-órbita é de tipo superficial. Na região onde a densidade nuclear é constante, o resultado médio desta interação é

zero, devido ao fato de que a ação de um dos nucleóons em um ponto, é anulada pela de outro localizado à mesma distância e na direção oposta; portanto, não pode ser definida uma direção preferencial. Contrariamente, na região da superfície esta anulação não acontece, e um nucleón pode sentir a interação *spin*-órbita devida aos nucleóons restantes. Portanto, podemos definir uma direção preferencial dada pelo gradiente de densidade. Devido a este efeito, a intensidade da interação alcança seu valor máximo na região onde a densidade de nucleóons muda mais rapidamente.

Assim, a variação radial do termo de interação *spin*-órbita é definida de forma proporcional ao gradiente de $V(r)$, onde $V(r)$ é a função radial do potencial central (equação 3.20):

$$V_{so}(r, z, \epsilon, \hat{\beta}) = \lambda \left(\frac{h}{2Mc} \right)^2 \nabla V(r, z, \epsilon, \hat{\alpha}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}), \quad (3.21)$$

onde M é a massa do nucleón, $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e $\vec{p}$ é o operador momento linear.

O potencial de Coulomb é calculado em coordenadas cilíndricas, considerando a carga nuclear $(Z - 1)e$ uniformemente distribuída no interior do núcleo:

$$\begin{aligned} V_{Coul}(r', z') &= \pi \rho_0 \int M^{-1}(a, b) \left[f + g \frac{dr(z)}{dz} \right] dz \\ &= \pi \rho_0 \int_{-1}^1 dx M^{-1}(a, b) \left[\left(f \frac{\partial z}{\partial x} + g \frac{\partial r}{\partial z} \right) + \left(f \frac{\partial z}{\partial R} + g \frac{\partial r}{\partial R} \right) \frac{dR}{dx} \right], \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} f &= r^2(z) + r' r(z) - \frac{1}{2} Q(a, b), \\ g &= (z' - z) r(z), \\ a(r, z) &= \sqrt{(r' + r)^2 + (z' - z)^2}, \\ b(r, z) &= \sqrt{(r' - r)^2 + (z' - z)^2}, \\ \rho_0 &= \frac{3(Z - 1)e}{4\pi R_0^3}, \\ r &= \frac{\bar{r}}{c}, \quad z = \frac{\bar{z} - \bar{z}_{CM}}{c}. \end{aligned}$$

$M(a, b)$ e $Q(a, b)$ são as integrais elípticas de primeira e segunda espécie.

3.5 Diagonalização da Hamiltoniana

Para diagonalizar a hamiltoniana de partícula única, empregamos como funções base as autofunções do oscilador harmônico axialmente simétrico no sistema de coordenadas cilíndricas:

$$|n_\rho n_z \Lambda \Sigma\rangle = \Psi_{n_\rho}^\Lambda(\rho) \Psi_{n_z}(z) \Psi_\Lambda(\varphi) \chi(\Sigma),$$

onde

$$\begin{aligned} \Psi_{n_z}(z) &= C_{n_z} \left(\frac{\hbar}{m\omega_z} \right)^{\frac{2}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_{n_z}(\xi), \text{ e} \\ \Psi_{n_\rho}^\Lambda(\rho) &= C_{n_\rho}^\Lambda \left(\frac{\hbar}{m\omega_\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{|\Lambda|}{2}} e^{-\frac{\eta}{2}} F(-n_\rho, |\Lambda| + 1, \eta), \end{aligned} \quad (3.22)$$

com $C_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}}$ e $C_{n_\rho}^\Lambda = \sqrt{\frac{n_\rho!}{((n_\rho + |\Lambda|)!)^3} \frac{(|\Lambda| + n_\rho)!^2}{n_\rho! |\Lambda|!}}$. $H_{n_z}(\xi)$ são os polinômios de Hermite de ordem n_z , e $F(-n_\rho, |\Lambda| + 1, \eta)$ é a função hipergeométrica confluyente [22]. ξ e η são grandezas adimensionais dadas por $\xi = \left(\frac{\hbar}{m\omega_z} \right)^{1/2} z$ e $\eta = \left(\frac{\hbar}{m\omega_\rho} \right) \rho^2$.

O termo $\chi(\Sigma)$ denota as funções do spin

$$\chi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

$$\text{e } \phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\Lambda\varphi}.$$

$n_z - 1$ e $2n_\rho + \Lambda - 1$ são os números de nós da função base na direção z e na direção ρ , respectivamente. Λ e Σ são as projeções do momento orbital e do *spin* no eixo de simetria.

A energia de cada estado na base é

$$E_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma} = (2n_\rho + |\Lambda| + 1) \hbar \omega_\rho + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_z.$$

Para o potencial do oscilador harmônico com simetria axial, a superfície equipotencial é um elipsóide, com semi-eixos proporcionais a ω_ρ^{-1} e ω_z^{-1} . Então, o volume confinado pela superfície é proporcional a $\omega_\rho^{-2} \omega_z^{-1}$. Podemos considerar que para qualquer superfície equipotencial o volume é conservado desde que

$$\omega_\rho^2 \omega_z = \omega_0^3, \quad (3.24)$$

com ω_0 , ω_z e ω_ρ estimados por

$$\begin{aligned} \hbar \omega_0 &= r_0 \, 41 \, A^{-1/3}, \quad r_0 = 1, 2 \text{ e} \\ \frac{\omega_\rho}{\omega_z} &= \sqrt{\frac{\langle z^2 \rangle_\Sigma}{\langle \rho^2 \rangle_\Sigma}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.6 Correções de Camada

Para considerar as propriedades médias do espectro de partícula única necessitamos de uma função suave $\tilde{g}(\epsilon, \beta)$, definida a partir da função auxiliar:

$$\tilde{G}(\epsilon, \beta) = \left(\pi^{\frac{1}{2}} \tilde{\gamma} \right)^{-1} \sum_\nu \exp \left(- \left\{ \frac{\epsilon - \epsilon_\nu(\beta)}{\tilde{\gamma}} \right\}^2 \right). \quad (3.26)$$

O intervalo médio $\tilde{\gamma}$ é escolhido como

$$\tilde{\gamma} \approx \hbar\omega_0 \approx 7 - 10 \text{ MeV},$$

de forma tal que $\hbar\omega_0 \approx \frac{41}{A^{\frac{1}{3}}}$, ou seja, que a distância entre camadas coincida com a do oscilador harmônico.

Portanto, a função $\tilde{G}(\epsilon, \beta)$ é obtida distribuindo-se a energia de partícula única ϵ_ν num intervalo de energia da ordem de $\hbar\omega_0$. Como resultado obtemos uma função suavizada da energia que “destrói” a estrutura de camadas no espectro ϵ_ν .

Ao aplicar o procedimento mostrado na equação 3.26 numa distribuição uniforme de níveis, devemos reproduzir as densidades de níveis locais. Para isso introduzimos uma correção de curvatura[23] que contém termos de derivadas superiores na soma da equação 3.26. Ou seja, definimos a densidade uniforme da seguinte maneira:

$$\tilde{g}(\epsilon, \beta) = \tilde{G} - \frac{1}{4}\tilde{\gamma}^2 \left(\frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial \epsilon^2} \right) + \frac{1}{32}\tilde{\gamma}^4 \left(\frac{\partial^4 \tilde{G}}{\partial \epsilon^4} \right) - \dots + a_{2m}\tilde{\gamma}^{2m} \left(\frac{\partial^{2m} \tilde{G}}{\partial \epsilon^{2m}} \right). \quad (3.27)$$

A equação anterior pode ser escrita assim:

$$\tilde{g} = \tilde{\gamma}^{-1} \sum_{\nu} \xi \left(\frac{\epsilon - \epsilon_\nu}{\tilde{\gamma}} \right), \quad (3.28)$$

onde a função suavizada está dada por

$$\xi(x) = (\pi)^{-\frac{1}{2}} \exp(-x^2) \sum_{k=0,2}^{2m} a_k H_k(x),$$

$H_k(x)$ são os polinômios de Hermite, e os coeficientes a_k são obtidos através da relação de recorrência

$$a_k = -\frac{1}{2k} a_{k-2},$$

para $k \geq 2$ e $a_0 = 1$.

É conveniente introduzir outra função densidade, $g_{sh}(\epsilon, \beta)$, para descrever a densidade de níveis local do espectro de partícula única, definida de forma semelhante ao que foi feito nas equações 3.26 e 3.27. Como $g_{sh}(\epsilon, \beta)$ deve conter as irregularidades nas camadas, o intervalo de γ_{sh} tem que ser escolhido consideravelmente menor do que $\hbar\omega_0$. Por outro lado, $g_{sh}(\epsilon, \beta)$ deve ser uma função contínua da energia ϵ , ainda, o intervalo γ_{sh} deve conter um número grande de níveis. De onde podemos inferir que $\gamma_{sh} \approx \lambda A^{-\frac{2}{3}} \approx 1 - 2$ MeV.

Com esta escolha, $g_{sh}(\epsilon, \beta)$ pode ser considerada como uma densidade de níveis local média, que oscila em torno da densidade de níveis “uniforme” $\tilde{g}(\epsilon, \beta)$, em função da energia e dos parâmetros de deformação.

Com a definição anterior, as variações na densidade de níveis de partícula única originadas pelas camadas podem ser descritas através da função

$$\delta g(\epsilon, \beta) = g_{sh}(\epsilon, \beta) - \tilde{g}(\epsilon, \beta). \quad (3.29)$$

Aliás, a soma de energias de partícula única

$$U = 2 \sum_{\nu} \epsilon_{\nu}(\beta), \quad (3.30)$$

pode ser substituída por

$$U = 2 \int_{-\infty}^{\lambda_{sh}(\beta)} \epsilon g_{sh}(\epsilon, \beta) d\epsilon. \quad (3.31)$$

No caso limite $\gamma_{sh} \rightarrow 0$, a integral 3.31 é a soma de energias de partícula única $\epsilon_{\nu}(\beta)$ como na equação 3.30. As energias de Fermi $\lambda_{sh}(\beta)$ e $\tilde{\lambda}(\beta)$ são

determinadas a partir da condição de que o número de partículas (prótons e nêutrons) seja fixado fixado :

$$N = 2 \int_{-\infty}^{\lambda_{sh}(\beta)} g_{sh}(\epsilon, \beta) d\epsilon = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}(\beta)} \tilde{g}_{sh}(\epsilon, \beta) d\epsilon. \quad (3.32)$$

A energia de correção de camada e dada por

$$E_{shell} = 2 \left[\int_{-\infty}^{\lambda_{sh}(\beta)} \epsilon g_{sh}(\epsilon, \beta) d\epsilon - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}(\beta)} \epsilon \tilde{g}_{sh}(\epsilon, \beta) d\epsilon \right]. \quad (3.33)$$

3.7 Correções de Emparelhamento

No nosso cálculo, a energia de correlação de emparelhamento é avaliada através da aproximação do modelo de BCS[9, 10]. Novamente aplicaremos a idéia da renormalização na extração da parte suave e no cálculo das energias de emparelhamento[23]. Neste sentido, avaliamos somente a variação essencial no intervalo de energia Δ , e a energia de emparelhamento devida à estrutura de camadas. Entretanto, as mesmas grandezas para uma distribuição uniforme de estados de partícula única são avaliadas fenomenologicamente através de uma distribuição suave do parâmetro de *gap* $\tilde{\Delta}$. Como o valor de $\tilde{\Delta}$ tem pequena variação ao longo da tabela periódica, é possível achar uma boa aproximação para ele. De fato, o emprego da relação:

$$\tilde{\Delta} = \frac{12,0}{\sqrt{A}} \text{ MeV}$$

possibilita um bom acordo entre os valores calculados do gap de energia Δ em núcleos específicos, e os valores deduzidos experimentalmente[24].

Começamos com a seguinte equação do modelo BCS:

$$\frac{2}{G} = \sum_{\alpha=n-n_c}^{n+n_c} [(\epsilon_\alpha - \lambda)^2 + \Delta^2]^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.34)$$

e

$$\frac{2}{G} = \int_{\tilde{\lambda}-\Omega}^{\tilde{\lambda}+\Omega} \frac{\tilde{g}(E) dE}{\left[(E - \tilde{\lambda})^2 + \tilde{\Delta}^2\right]^{-\frac{1}{2}}} \approx 2\tilde{g}(\tilde{\lambda}) \ln\left(\frac{2\Omega}{\tilde{\Delta}}\right), \quad (3.35)$$

onde a integral é uma distribuição uniforme análoga à soma (3.34). Na integral (3.35), a energia de corte Ω está relacionada ao número de estados $2n_c$ considerados na soma (3.34), através da relação:

$$2\Omega = \frac{2n_c}{\tilde{g}(\tilde{\lambda})}, \quad (3.36)$$

onde $\tilde{g}(\tilde{\lambda})$ é a densidade de níveis média na energia de Fermi. A equação de BCS pode ser resolvida considerando que o número de partículas N deve ser conservado:

$$N = 2 \sum_{\nu} v_{\nu}^2. \quad (3.37)$$

Como resultado teremos:

$$v_{\nu} = \left(\frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\epsilon_{\nu} - \lambda}{[(\epsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}} \right\} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.38)$$

A equação (3.38), junto com a (3.34), determina os dois parâmetros Δ e λ em função da intensidade do emparelhamento e do parâmetro de corte n_c .

Em seguida definimos a energia de correlações de emparelhamento P , como a diferença entre a soma de energias de partícula única calculadas com e sem correlações de emparelhamento. Ou seja:

$$P = \sum (\epsilon_\nu - \lambda) \operatorname{sign}[\epsilon_\nu - \lambda_0] - \frac{(\epsilon_\nu - \lambda)^2 + \frac{1}{2}\Delta^2}{[(\epsilon_\nu - \lambda)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.39)$$

em analogia com a equação 9 na referência[8] onde, ainda, a alteração na energia de Fermi causada pelas correções de emparelhamento é ignorada. Na equação 3.39, λ_0 é a energia de Fermi para $\Delta = 0$, ou seja, $\lambda_0 = \frac{(\epsilon_n + \epsilon_{n+1})}{2}$. A soma na Eq. 3.39 converge e não tem problemas de truncamento.

A correção de camadas na energia de emparelhamento é então determinada por

$$E_{pair} = P - \tilde{P}, \quad (3.40)$$

onde $\tilde{P}$ é a a energia de correlação de emparelhamento para a distribuição uniforme

$$\tilde{P} = -\frac{1}{2}\tilde{g}(\tilde{\lambda})\tilde{\Delta}^2. \quad (3.41)$$

Bibliografia

- [1] N. Bohr e J. A. Wheeler, Phys. Rev. 56, 426 (1939).
- [2] W.D. Myers e W.J. Swiatecki, Ann. Phys. (N.Y.) **55**, 395 (1969).
- [3] W.D. Myers e W.J. Swiatecki, Ann. Phys. (N.Y.) **84**, 186 (1974).
- [4] W. D. Myers e W. J. Swiatecki, Nucl. Phys. **81**, 258 (1966).
- [5] W. D. Myers, At. Data Nucl. Tables **17**, 411 (1976).
- [6] H. V. Groote, E. R. Hilf e K. Takahashi, At. Data Nucl. Tables **17**, 418 (1976).
- [7] P. A. Seeger e W. H. Howard, Nucl. Phys. **A238**, 491 (1975).
- [8] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A95** (1967) 420.
- [9] F. Garcia, *et al.*, J. Phys. G, **19**, 2157 (1993).
- [10] F. Garcia, O. Rodriguez, V.A. Rubchenya e E. Garrote, Comp. Phys. Commun. **86**, 129 (1995).
- [11] M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli, V. M. Strutinsky e C. Y. Wong, Rev. Mod. Phys. **44**, 320 (1972).
- [12] P. A. Butler e W. Nazarewicz, Rev. Mod. Phys. **68**, 2, 349 (1996).
- [13] V.V. Pashkevich, Nucl. Phys. **A169**, 275 (1971).
- [14] H. C. Pauli e T. Ledergerber, Phys. Lett. **34B**, 264 (1971).
- [15] W. D. Myers e W. J. Swiatecki, Ark. Fys. **36**, 343(1967).

- [16] P. Ring e P. Schuck, "The Nuclear Many Body Problem", Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [17] J. Blomquist e S. Wahlborn, Ark. Fiz. **16**, 543 (1960).
- [18] V.A. Chepurnov, Sov. J. Nucl. Phys. **6**, 696 (1968).
- [19] E. Rost, Phys. Lett. **B26**, 184 (1968).
- [20] J. Dudek, A. Majhofer, J. Skalski, T. Werner, S. Cwiok e W. Nazarewicz, J. Phys. **G5**, 1379 (1979).
- [21] S. Cwiok, J. Dudek, W. Nazarewicz, J. Skalski e T. Werner, Comput. Phys. Commun. **46**, 379 (1987).
- [22] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications Inc. New York, 1970.
- [23] V. M. Strutinsky, Nucl. Phys. **A122**, 1 (1968).
- [24] S. G. Nilsson, C. F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymansky, S. Wycech, C. Gustafson, I. Lamm, P. Moeller e B. Nilsson, Nucl. Phys. **A131**, 1 (1969).

Capítulo 4

O Método Semimicroscópico Combinado

4. O Método Semimicroscópico Combinado

4.1- Introdução.

4.2- Densidade de Níveis.

4.3- Modelo Semimicroscópico Combinado.

4.3.1- Modelo Combinatório.

4.3.2- Modelo Quântico Estatístico.

4.4- Coeficientes de Transmissão.

4.4.1- Canal Gama.

4.4.2- Canal de Fissão.

4.1 Introdução

As propriedades estatísticas dos níveis nucleares excitados têm sido muito estudadas nos últimos 50 anos. Uma destas propriedades é a densidade de níveis. Ela é um dos ingredientes chaves no cálculo da seção de choque de uma reação nuclear.

Na descrição da densidade de níveis, são usualmente empregados o modelo de gás de Fermi e modelos de temperatura nuclear constante. Estes modelos são ajustados a partir de parâmetros obtidos experimentalmente. Porém, os fundamentos físicos que sustentam esses modelos são pouco elaborados e muito simplificados. Por isso, eles não conseguem descrever de forma satisfatória as variações da densidade de níveis para grandes intervalos de energia e deformação.

Neste capítulo trataremos sobre o papel das densidades de níveis no cálculo da seção de choque em reações de fotofissão. Primeiro faremos uma introdução sobre os métodos de cálculo baseados no modelo de gás de Fermi, posteriormente, descreveremos o Método Semimicroscópico combinado que utilizamos no cálculo das densidades de níveis em núcleos deformados e, no final, explicaremos o cálculo dos coeficientes de transmissão envolvidos na obtenção das seções de choque.

4.2 Densidades de Níveis

Um bom conhecimento da densidade de níveis nucleares num amplo intervalo de energias e deformações é essencial na compreensão do comportamento das seções de choque e em cálculos empregando o modelo estatístico.

Inúmeros esforços teóricos têm sido feitos para desenvolver métodos de cálculo da densidade de níveis. As primeiras tentativas foram através de uma descrição semi-empírica baseada na teoria de gás sem interação de Fermi e utilizaram a aproximação de densidade constante de níveis de partícula independente. Foi proposta por Bethe[1] e descreve a regularidade do aumento da densidade de níveis através das equações:

$$\begin{aligned}\rho(U, J) &= \frac{2J+1}{\sqrt{8\pi}\sigma^3} e^{-\frac{(J+\frac{1}{2})}{2\sigma^2}} \omega(U), \\ \omega(U) &= \frac{\sqrt{\pi}}{12a^{1/4}U^{5/4}} e^{2\sqrt{a}U}.\end{aligned}\tag{4.1}$$

O parâmetro de densidade de níveis a está relacionado com a densidade de níveis de partícula única nas proximidades da energia de Fermi g ($a = \frac{\pi^2 g}{6}$); e a energia de excitação efetiva U é modificada em relação à energia de excitação verdadeira E_{exc} , para considerar os efeitos de emparelhamento. De forma prática, os dois parâmetros, a e a energia do *gap* $\Delta = E_{exc} - U$, assim como os coeficientes de corte de *spin* σ , são ajustados a partir de dados experimentais.

Para baixas energias de excitação (abaixo da energia de separação do nêutron) a equação pode ser substituída pela expressão à temperatura constante:

$$\rho(U, J) = (2J+1) e^{-\frac{(J+\frac{1}{2})}{2\sigma^2}} C e^{\frac{U}{\theta}}.\tag{4.2}$$

onde θ é a temperatura nuclear.

Os procedimentos de cálculo das densidades de níveis, baseados no modelo de gás de Fermi, não levam em conta os efeitos do tipo coletivo, de camadas, e nem efeitos oriundos da composição nucleônica (tipo par-ímpar). Para poder incluí-los é necessário introduzir muitos parâmetros, os quais necessitam de grande quantidade de informação experimental sobre um amplo intervalo de energia e deformações para a sua determinação.

Estas desvantagens conduziram ao desenvolvimento de outros tipos de modelos chamados semimicroscópicos, como o quântico-estatístico[2, 3, 4] que leva em conta as paridades e considera as camadas nas bases do modelo da superfluidez do núcleo (BCS). Porém este modelo não fornece uma descrição correta da densidade de níveis a baixas energias, pois devemos considerar a estrutura discreta do espectro. Para estas energias de excitação o método combinatório do modelo quase-particular fonônico é mais adequado. Por outro lado, este modelo necessita de um grande tempo de cálculo e considerações complexas sobre a estrutura dos núcleos analisados.

Em seguida, descreveremos um método combinado [5, 6] para o cálculo da densidade de níveis dos núcleos deformados que inclui o Modelo Combinatório, para baixas energias e o Modelo Quântico Estatístico para altas energias, ambos sobre a base do modelo BCS.

4.3 Método Semimicroscópico Combinado

Baseando-se nos modelos semimicroscópicos é possível levar em consideração no cálculo da densidade de níveis a relação que existe entre as características principais do núcleo (por exemplo, parâmetros do potencial de campo médio, características quânticas do espectro de partícula única, interações de tipo residual, etc). Além disso, os parâmetros utilizados no cálculo podem ser determinados de forma independente. Tudo isso permite, no caso de núcleos actínídeos, realizar o cálculo das densidades de níveis para deformações extremas sem fazer considerações adicionais, ou seja, o tratamento do núcleo não vai ser diferente para deformações fora do equilíbrio e no estado fundamental.

A idéia essencial do Método Semimicroscópico Combinado é a seguinte: o intervalo de energias considerado para o cálculo da densidade de níveis é dividido em dois subintervalos. O primeiro parte de zero e vai até um determinado valor de energia U_d e o segundo parte de U_d e vai até o valor da energia fina U_f . No primeiro intervalo, a densidade de níveis é calculada através do modelo BCS e no segundo utilizando o modelo quântico estatístico de superfluidez. Nos dois intervalos, são empregados os mesmos parâmetros (espectros de partícula única e constantes de emparelhamento).

Ao empregar-se este método, garante-se a união suave da parte discreta com a contínua, pois em ambos intervalos o cálculo da densidade de níveis é baseado no mesmo modelo.

4.3.1 Modelo Combinatório

Para obter os estados excitados do núcleo, é necessário solucionar a equação estacionária de Schrödinger:

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n. \quad (4.3)$$

O modelo de partícula única foi o primeiro a ser empregado para obter os estados excitados. Neste modelo, a hamiltoniana expressada a partir do formalismo de segunda quantização tem a forma seguinte:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i \quad (4.4)$$

Através deste modelo consegue-se determinar o preenchimento consecutivo das camadas e os *spins* dos estados fundamentais de muitos núcleos. Porém, ao aprofundar-se no estudo dos espectros de excitação, evidenciou-se a deficiência do modelo para explicar a presença dos efeitos par-ímpar dos núcleos, assim como a existência de estados coletivos. O primeiro problema resolveu-se com o modelo nuclear de superfluidez, considerando-se interações binucleônicas do tipo supercondutivo (emparelhamento).

Por causa da sua simplicidade, o modelo BCS de emparelhamento tem sido um dos mais utilizados nos cálculos de estrutura nuclear.

A hamiltoniana $\hat{H}$ deste modelo contém uma parte de partícula única e outra de interação de emparelhamento. Se consideramos o termo de partícula única diagonal teremos:

$$\hat{H} = \hat{H}_{sp} + \hat{H}_{pair} = \sum_{i>0} \varepsilon_{\Omega i} a_i^\dagger a_i - \sum_{i,j>0} G_{ji} a_j^\dagger a_{\bar{j}}^\dagger a_{\bar{i}} a_i, \quad (4.5)$$

onde o índice i representa os números quânticos de cada estado de partícula única e $|\bar{i}\rangle$ representa o estado de inversão temporal de $|i\rangle$. Neste caso, $\hat{H}$ descreve os sistemas de prótons e nêutrons de forma separada e os estados de partícula única são desenvolvidos nas bases do modelo de Nilsson, ou seja, $|i\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha} |N n_z \Lambda \Sigma\rangle$, com $\alpha \equiv [N, n_z, \Lambda] \Omega$.

A forma usual da função do estado fundamental no modelo BCS é:

$$|BCS\rangle \equiv | \quad \rangle = \prod_i \left(u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right) |0\rangle, \quad (4.6)$$

onde $|0\rangle$ representa o vácuo de partículas e as u_i e v_i são as probabilidades de que os estados de partícula única $|i\rangle$ e seu estado correspondente de inversão temporal $|\bar{i}\rangle$ sejam ocupados ou desocupados, respectivamente. Na aproximação de emparelhamento de monopólo, todos os elementos de matriz G_{ji} são definidos iguais a G , que é a constante de emparelhamento.

O sistema de equações deste modelo para o sistema neutrônico e protônico é dado por:

$$\begin{aligned} E_\Omega^\nu &= \sum_i^\nu \varepsilon_{\Omega_i} + \sum_i^\nu \varepsilon_{\Omega_i} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\Omega_i} - \lambda_\nu}{\sqrt{(\varepsilon_{\Omega_i} - \lambda_\nu)^2 + \Delta_\nu^2}} \right) - \frac{\Delta_\nu^2}{G} \\ \frac{2}{G} &= \sum_i^\nu \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\Omega_i} - \lambda_\nu)^2 + \Delta_\nu^2}} \\ N &= \sum_i^\nu \left(1 - \frac{\varepsilon_{\Omega_i} - \lambda_\nu}{\sqrt{(\varepsilon_{\Omega_i} - \lambda_\nu)^2 + \Delta_\nu^2}} - \frac{\Delta_\nu^2}{G} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde:

ε_{Ω_i} -energia do estado de partícula única,

ν -número de quase-partículas,

λ_ν -potencial químico para um conjunto fixo de quase-partículas,

Δ_ν -função de correlação,

N -número de quase-partículas nos estados sob o nível a partir do qual realiza-se a soma nas equações do modelo.

O valor total da projeção do momento Ω é a soma algébrica dos Ω_ν dos estados bloqueados.

A energia de excitação do núcleo é:

$$U_\Omega^\nu = E_\Omega^\nu - E_0, \quad (4.8)$$

onde E_0 é a energia do estado básico do núcleo, que se calcula com o mesmo sistema de equações 4.7, com a condição $\nu = 0$, para N pares e $\nu = 1$ para N ímpares. A paridade deste estado define-se como:

$$\Pi = \prod_i^{\nu} \Pi_i \quad (4.9)$$

O sistema de equações 4.7 resolve-se para prótons e nêutrons de forma independente. Posteriormente considera-se o cálculo da energia de excitação de todas as combinações possíveis de nêutrons e prótons nos estados quase-particulares

$$\begin{aligned} U_{K\Omega} &= U_{\Omega_Z \Pi_Z} + U_{\Omega_N \Pi_N} \\ K &= \Omega_Z \pm \Omega_N \\ \Pi &= \Pi_Z \Pi_N \end{aligned} \quad (4.10)$$

Para considerar os graus de liberdade rotacionais em cada estado quase-particular, constrói-se uma banda rotacional com os valores médios experimentais das constantes A_r e B_r (para deformações onde existe informação experimental sobre níveis):

$$U_{IK\Pi} = U_{K\Pi} + A_r [I(I+1) - K^2] + B_r (I+1/2) (-1)^{I+1/2} \delta_{K,1/2}. \quad (4.11)$$

O parâmetro A_r pode ser calculado aproximadamente por:

$$A_r = \frac{\hbar^2}{2F_{\perp}}, \quad (4.12)$$

onde $F_{\perp}$ pode ser estimado como:

$$F_{\perp} = \begin{cases} \frac{F_{rig}}{3} \left(1 + 2 \frac{E}{U_{cr}} \right), & E < U_{cr} \\ F_{rig}, & E \geq U_{cr} \end{cases}, \quad (4.13)$$

Na equação 4.13, U_{cr} é o valor máximo da energia de transição do estado superfluido ao normal para o sistema neutrônico ou protônico, e $F_{rig} = 2m_0r_0^2A^{5/3}(1 - \varepsilon^2)^{-2/3}$ é o momento de inércia de corpo rígido para um núcleo com deformação elipsoidal, com m_0 a massa do nucleón, r_0 parâmetro de raio nuclear, A é o número de massa e ε é a elongação.

Os parâmetros de corte espinorial $\sigma_\perp^2$ e $\sigma_\parallel^2 \equiv K_0$ correspondentes à distribuição do momento angular I e sua projeção no eixo de simetria K podem ser estimados a partir do espectro quase-particular:

$$\begin{aligned} 2\sigma_\perp^2 &= \frac{1}{n} \sum_i^n I(I+1) \\ \sigma_\parallel^2 &= \frac{1}{n} \sum_i^n K_i^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

sendo n o número de estados no intervalo ΔU .

4.3.2 Modelo Quântico Estatístico

A densidade de níveis do ponto de vista estatístico, em função da energia e do *spin* de um núcleo deformado, é dada por:

$$\begin{aligned} \rho(U, I) &= \frac{1}{2} \sum_{K=-I}^I \rho(U - E_{rot}, K) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K=-I}^I \rho\left(U - \frac{\hbar^2}{2F_\perp} (I(I+1) - K^2), K\right) \\ &= \frac{W(U)}{\sqrt{2\pi}\sigma_\parallel} \sum_{K=-I}^I \exp\left[-\frac{I(I+1)}{2\sigma_\perp^2} - \frac{K^2}{2\sigma_{efec}^2}\right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde $\frac{1}{\sigma_{efec}^2} = \frac{1}{\sigma_{\parallel}^2} - \frac{1}{\sigma_{\perp}^2}$, $W(U)$ é a densidade total de estados no sistema de coordenadas internas do núcleo deformado. Para os actínideos na região de energias ora analisadas $\frac{K^2}{2\sigma_{efec}^2} \ll 1$, e:

$$\rho(U, I) = (2I + 1) \frac{W(U)}{\sqrt{8\pi}\sigma_{\parallel}} \sum_{K=-I}^I \exp \left[-\frac{I(I+1)}{2\sigma_{\perp}^2} \right]. \quad (4.16)$$

Nesta expressão é levada em conta a contribuição dos estados rotacionais. O coeficiente de amplificação rotacional pode ser estimado a partir da densidade de níveis para os núcleos deformados com simetria axial da seguinte maneira [7, 6] :

$$K_{rot} = \frac{\rho_{tot}(U)}{W(U)} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}\sigma_{\parallel}} \sum_{I=0}^{\infty} (2I + 1) \exp \left[-\frac{I(I+1)}{2\sigma_{\perp}^2} \right] \approx \frac{\sigma_{\perp}^2}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\parallel}}. \quad (4.17)$$

O coeficiente de amplificação rotacional tem uma forte dependência da simetria na forma do núcleo. Para outras simetrias temos as relações [8]:

$$K_{rot} = \begin{cases} 1, & \text{simetria esférica,} \\ \sigma_{\perp}^2, & \text{simetria axial e de reflexão,} \\ 2\sigma_{\perp}^2, & \text{simetria axial e assimetria de reflexão,} \\ \sqrt{2\pi}\sigma_{\perp}^2\sigma_{\parallel}, & \text{simetria elipsoidal,} \\ \sqrt{8\pi}\sigma_{\perp}^2\sigma_{\parallel}^2, & \text{nenhuma simetria.} \end{cases}$$

No Modelo Quântico Estatístico a densidade de estados internos do sistema de fermiões é:

$$W(U) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \frac{1}{\sqrt{\det(\ddot{S})}} \exp [S(U)]. \quad (4.18)$$

Na equação 4.18 $S(U)$ é a entropia, $\det(\ddot{S})$ é o determinante da matriz das segundas derivadas com respeito a $\beta = \frac{1}{T}$, $\alpha_Z = \frac{\mu_Z}{T}$ e $\alpha_N = \frac{\mu_N}{T}$, onde μ_Z

e μ_N são os potenciais químicos protônico e neutrônico, respectivamente, e T é a temperatura nuclear. A entropia de um sistema fermiônico superfluido é definida pela expressão:

$$S = 2 \sum_{\tau=N,Z} \left\{ \ln [1 + \exp(-\beta E_{\tau i})] + \frac{\beta E_{\tau i}}{1 + \exp(\beta E_{\tau i})} \right\} \quad (4.19)$$

onde as $E_{\tau i}$ são as energias quase-particulares para nêutrons ($\tau = N$) e prótons ($\tau = Z$).

As funções de correlação Δ_τ , em conjunto com β , μ_Z e μ_N , bem como os valores críticos da energia de transição do estado superfluido ao normal, são obtidas pelo sistema de equações:

$$U + E_0 = \sum_{\tau,i} \left\{ \varepsilon_{\tau i} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\tau i} - \mu_\tau}{E_{\tau i}} \text{th} \left(\frac{\beta E_{\tau i}}{2} \right) \right] - \frac{\Delta_\tau^2}{G_\tau} \right\}, \quad (4.20)$$

$$N_\tau = \sum_i \left[1 - \frac{\varepsilon_{\tau i} - \mu_\tau}{E_{\tau i}} \text{th} \left(\frac{\beta E_{\tau i}}{2} \right) \right], \quad (4.21)$$

$$\frac{2}{G_\tau} = \sum_i \frac{1}{E_{\tau i}} \text{th} \left(\frac{\beta E_{\tau i}}{2} \right), \quad (4.22)$$

onde:

$$E_{\tau i} = \sqrt{(\varepsilon_{\tau i} - \mu_\tau)^2 + \Delta_\tau^2}, \quad (4.23)$$

E_0 é a energia do estado fundamental, G é a constante de emparelhamento e $\varepsilon_{\tau i}$ são as energias uniparticulares num potencial nuclear médio.

A energia de transição do estado superfluido ao normal calcula-se segundo a relação 4.20 para $\Delta_\tau = 0$ e $T = T_{cr}$. Esta temperatura é determinada a partir das equações 4.21 e 4.22 para $\Delta_\tau = 0$ e $E_{\tau i} = \varepsilon_{\tau i} - \mu_\tau$. Para temperaturas superiores à crítica, o sistema de equações para o cálculo da entropia continua sendo o mesmo, porém $E_{\tau i} = |\varepsilon_{\tau i} - \mu_\tau|$.

Os parâmetros de corte espinorial calculam-se da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\sigma_{\parallel}^2 &= \overline{\Omega^2} g T \\ \sigma_{\perp}^2 &= \frac{F_{\perp} T}{\hbar^2}.\end{aligned}\quad (4.24)$$

g é a densidade de níveis uniparticulares na vizinhança da energia de Fermi, $\overline{\Omega^2}$ é o valor quadrático médio da projeção do momento angular de partícula única no eixo de simetria do núcleo deformado (com média obtida num intervalo $\Delta U = (3 - 4) T$) e T é a temperatura nuclear. O valor de g é calculado (ver Capítulo 2) calculando médias sobre um intervalo de energia com uma distância entre as camadas nucleares $\gamma = 41 A^{-\frac{2}{3}}$:

$$g(\lambda) = \frac{1}{\gamma} \sum_i \exp \left[-\frac{(\varepsilon_i - \lambda)^2}{\gamma^2} \right] \quad (4.25)$$

A energia de Fermi λ é definida a partir da solução da equação:

$$N = \int_{-\infty}^{\lambda} f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4.26)$$

onde $f(\varepsilon)$ é um polinômio de correção:

$$\begin{aligned}f(\varepsilon) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{m=0}^P C_m H_m(u) \\ u &= \frac{\varepsilon - \lambda}{\gamma} \\ C_m &= \begin{cases} \frac{(-1)^{\frac{m}{2}}}{2^m (\frac{m}{2})!}, & \text{m-par} \\ 0, & \text{m-ímpar} \end{cases}\end{aligned}\quad (4.27)$$

O $\overline{\Omega^2}$ é obtido com a média do espectro de partícula única num intervalo energético próximo do nível de Fermi.

$F_{\perp}$ pode ser estimado a partir da equação 4.13

As discrepâncias entre o experimento e os resultados dos cálculos com o Modelo Quântico Estatístico podem ser eliminadas introduzindo-se um coeficiente de amplificação vibracional da densidade de níveis:

$$K_{vib} = \exp \left[1.69 \left(\frac{3m_0 A}{4\pi\sigma_{GL}} \frac{C_{GL}}{C} \right)^{2/3} T^{4/3} \right] = \exp [X T^{4/3}] ,$$

onde a razão $\frac{C_{GL}}{C}$ caracteriza a diferença entre o coeficiente da força restauradora do núcleo excitado e o correspondente do Modelo da Gota Líquida, e σ_{GL} é o coeficiente de tensão superficial. Os valores de K_{vibr} e X , obtidos a partir de comparação com dados experimentais, permitem, em média, ajustar a contribuição de efeitos coletivos na densidade de níveis assim como as incertezas relacionadas com a definição dos parâmetros do potencial de partícula única empregados.

4.4 Coeficientes de Transmissão

4.4.1 Canal Gama

Os coeficientes de transmissão para raios gama $T_{\gamma}^{X\ell}$ são calculados utilizando a função de força (*strenght fuction*) radiativa:

$$f_{X\ell} = \frac{\Gamma_{\gamma X\ell}^I}{E_{\gamma}^{2\ell+1} D_I} . \quad (4.28)$$

Da conhecida definição de $T_{\gamma}^{X\ell}$ obtemos:

$$T_{\gamma}^{X\ell} = 2\pi \frac{\Gamma_{\gamma X\ell}^I}{D_I} = 2\pi f_{X\ell} E_{\gamma}^{2\ell+1} , \quad (4.29)$$

onde D_I é a distância entre níveis com spin I , e $X\ell$ define o tipo de transição elétrica E ou magnética M com multipolaridade ℓ .

A maior contribuição na transição de dipólo elétrico é proveniente do decaimento dos estados da ressonância gigante (GDR). Neste caso, utilizamos a aproximação de Axel para emissão $E1$ [9]:

$$\sigma_{\gamma E1} = 3\pi^2 \hbar^2 c^2 f_{E1} E_\gamma . \quad (4.30)$$

Considerando a dependência da GDR como a superposição de duas lorentzianas teremos:

$$\sigma_{\gamma E1}(E_\gamma) = \sum_{i=1}^2 \frac{\sigma_i}{1 + \frac{(E_\gamma^2 - E_i^2)^2}{E_\gamma^2 \Gamma_i^2}}; \quad (4.31)$$

onde σ_i , E_i e Γ_i são a altura do pico, a energia da ressonância e a largura da i -ésima curva de Lorentz, respectivamente.

No caso das emissões $E2$ e $M1$ pode ser utilizada de forma aproximada a descrição proposta por Weisskopf [10]:

$$\begin{aligned} f_{E1} &= \frac{18(\ell+1)}{\ell(\ell+3)^2 [(2\ell+1)!!]^2} \frac{(2\ell+1)}{D_0} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{R}{\hbar c} \right)^{2\ell}, \\ f_{M1} &= 10f_{E1} \left(\frac{\hbar}{McR} \right)^2 \end{aligned}$$

onde R , M , D_0 e e são o raio nuclear, a massa do próton, a distância entre dois níveis de baixa energia e a carga do elétron, respectivamente.

4.4.2 Canal de Fissão

No cálculo da energia de deformação e da barreira de fissão, supõe-se que o processo de fissão é adiabático. Aliás, para cada valor da coordenada

de deformação, a estrutura interna do núcleo é definida de forma tal que a energia total tenha um valor mínimo. Muitas outras configurações internas são, em princípio, possíveis, o que permite a existência de estados excitados. No caso dos estados excitados no topo da barreira, com números quânticos J^π e K , são chamados de estados de transição. Estes estados têm a função de “canais de fissão”, no sentido da teoria estatística das reações nucleares.

Para núcleos par-par os primeiros estados de transição são, em princípio, conhecidos: eles correspondem a movimentos coletivos como os de vibração de assimetria de massas ($K = 0^-$), a vibração γ ($K = 2^+$), a vibração de “torção” ($K = 1^-$) e combinações deles. As posições destes estados no espectro energético dependem da simetria da forma do núcleo nos pontos de sela. Para o ponto de sela externo com assimetria de reflexão, a banda $K = 0^-$ deve aparecer próxima da banda $K = 0^+$ do estado fundamental. Para o ponto de sela interno, com assimetria axial, a banda vibracional γ com $K = 2^+$ deve misturar-se com a banda $K = 0^+$ do estado fundamental.

Para energias de excitação maiores, correspondentes à quebra de um par de nucleões (~ 1.5 MeV) e para núcleos com A ímpar ou núcleos ímpar-ímpar, as excitações originadas por estados de partícula única entram no jogo. A seqüência exata destes níveis depende muito dos detalhes do potencial nuclear do modelo de camadas empregado no cálculo.

O coeficiente de transmissão através de uma barreira única de fissão é dado pela bem conhecida relação de Hill e Wheeler[11]:

$$T_F = \left[1 + e^{-2\pi \frac{E - E_F}{\hbar\omega_F}} \right]^{-1} \quad (4.32)$$

onde E_F e $\hbar\omega_F$ são a altura e a curvatura associadas à barreira. O coeficiente de transmissão total é obtido a partir da soma:

$$T_F(E, J^\pi) = T_F^{discreto}(E, J^\pi) + T_F^{contínuo}(E, J^\pi), \quad (4.33)$$

onde:

$$T_F^{discreto}(E, J^\pi) = \sum_{K=-J}^J T(E, J, K, \pi) \quad (4.34)$$

representa a contribuição dos estados coletivos discretos considerados sobre a barreira e

$$T_F^{contínuo}(E) = \int_0^E \rho_F(\epsilon, J, \pi) \left[1 + e^{-2\pi \frac{\epsilon + E_F - E}{\hbar \omega_F}} \right]^{-1} d\epsilon, \quad (4.35)$$

representa a contribuição dos estados do contínuo com densidade de níveis

ρ_F .

No cálculo da penetrabilidade através de uma dupla barreira, sabendo-se que a energia de excitação supera a altura das duas barreiras, podemos considerar o processo de fissão em dois passos. Primeiro ocorre o tunelamento através da barreira interna A e posteriormente o tunelamento da barreira externa B . Sendo assim, a independência entre as penetrabilidades é levada em consideração através de um cálculo de penetração de uma barreira equivalente:

$$T_F(E, J, \pi) = \frac{T_A(E, J, \pi) T_B(E, J, \pi)}{T_A(E, J, \pi) + T_B(E, J, \pi)}. \quad (4.36)$$

Os valores de T_A e T_B são calculados para cada barreira (a barreira A é a interna e a barreira B é externa) empregando as equações 4.33, 4.34 e 4.35.

Bibliografia

- [1] H. A. Bethe, Phys. Rev., **50**, 332 (1956).
- [2] V. A. Rubchenya, Sov. J. Nucl. Phys., **11**, 1028 (1970).
- [3] F. C. Williams, Phys. Lett., **318**, 184 (1970).
- [4] M. Herman e G. Reffo, Phys. Rev., C **45**, 2470 (1992).
- [5] F. Garcia *et al.*, J. Phys. G, **19**, 2157 (1993).
- [6] F. Garcia, O. Rodriguez, V.A. Rubchenya e E. Garrote, Comp. Phys. Commun. **86**, 129 (1995).
- [7] S. A. Egorov, V. A. Rubchenya, Nucl. Phys., A494, 75 (1989).
- [8] D. O. Eremenko *et al.*, Il Nuovo Cim., **108** A, 7, 883 (1995).
- [9] P. Axel, Phys Rev., **126**, 2, 671 (1962).
- [10] J. M. Blatt, V. F. Weisskopf, "Theoretical Nuclear Physics", Wiley, New York, 1952.
- [11] D. L. Hill e J. A. Wheeler, Phys. Rev., **89**, 1102 (1953).

Capítulo 5

Barreiras de Fissão e Deformações de Equilíbrio

5. Barreiras de Fissão e Deformações de Equilíbrio.

5.1- Barreiras de Fissão.

5.2- Deformações de Equilíbrio.

5.3- Densidades de Níveis na Deformação de Equilíbrio.

5.1 Barreiras de Fissão

A primeira parte deste capítulo será dedicada à apresentação dos resultados da aplicação do método Macroscópico-Microscópico proposto por Strutinsky ao cálculo das deformações e das barreiras de fissão dos núcleos ^{233}U , ^{237}Np , ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu . Os ingredientes principais já foram descritos no primeiro capítulo: parametrização da forma nuclear, energia de deformação do Modelo da Gota Líquida, energias de partícula única em potenciais deformados e correções de camada e de emparelhamento para prótons e nêutrons.

Para o cálculo das barreiras de fissão, devem ser consideradas as seguintes etapas (a ordem não tem que ser estritamente como a apresentada):

- 1-especificar a forma geométrica que consegue descrever satisfatoriamente a evolução do núcleo no trânsito até a cisão,

- 2- gerar os potenciais e espectros de partícula única de nêutrons e prótons para cada deformação adotada,

- 3-aplicar o método Macroscópico-Microscópico para calcular as correções de camada e de emparelhamento,

- 4-determinar o potencial macroscópico através do Modelo da Gota Líquida com parâmetros apropriados e

- 6-adicionar a parte macroscópica do potencial com a energia das camadas para obter a energia total em função da deformação.

É bem conhecida a dificuldade de considerar de forma simultânea todas as coordenadas coletivas envolvidas no processo de fissão: separação, alongação, surgimento do pescoço, não axialidade, assimetria de massas, etc. Se o número de graus de liberdade a considerar for maior que dois, a energia é minimizada para alguns dos parâmetros (analisando-os em pares), para obter um mapa no espaço bidimensional.

Se consideramos o Modelo da Gota Líquida, só temos dois pontos de equilíbrio importantes: a deformação de equilíbrio ou estado fundamental e o ponto de sela, que determina a altura da barreira de fissão (ver figura 5.1 a). As formas nucleares em cada um desses pontos são altamente simétricas: no estado fundamental é uma esfera e no ponto de sela tem simetria axial. A topologia muda de forma drástica depois que se incluem as correções de camada e de emparelhamento (figuras 5.1 b-f). A partir desta consideração

passamos a ter a conhecida dupla barreira com dois mínimos: o estado fundamental (esférico ou deformado) e o segundo poço. Teremos também dois pontos de sela correspondentes com o primeiro e o segundo poços.

Figura 5.1 Resultado do modelo Macroscópico-Microscópico para o ^{239}Pu .

- a) Energia da gota líquida.
- b) Correção de camadas total.
- c) Correção de camadas para prótons.
- d) Correção de camadas para nêutrons.
- e) Correção de emparelhamento para prótons.
- f) Correção de emparelhamento para nêutrons.

O intervalo de energias é de 1 MeV exceto para e) e f) que é de 0,50 MeV.

A partir dos mapas de contorno das correções de camada, E_{shell}^p para prótons e E_{shell}^n para nêutrons, e de emparelhamento, E_{pair}^p para prótons e E_{pair}^n para nêutrons, podemos apreciar nas figuras 5.1 c) a f) o papel predominante dos nêutrons na energia de deformação, já que as oscilações de E_{shell}^n ao redor da energia zero atingem uma amplitude de ~ 5 MeV e são claramente mais importantes que as de prótons E_{shell}^p , as quais oscilam num intervalo menor.

O caminho de menor energia para o núcleo que se fissiona (caminho de fissão) nem sempre preserva a máxima simetria. Neste sentido, é possível a existência de triaxialidade no primeiro ponto de sela e de assimetria de massas no segundo.

Para o cálculo das barreiras de fissão empregamos o código BARRIER[1], que leva em consideração o formalismo já explicado no Capítulo 3.

Nas figuras 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 e 5.6 estão representadas as energias de deformação dos núcleos ^{233}U , ^{237}Np , ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu no espaço de deformações ε (elongação) e α_4 (deformação hexadecapolar). É fácil identificar em cada um deles os pontos extremos do caminho de fissão: estado fundamental, segundo poço e os dois pontos de sela. No cálculo foram empregados os parâmetros modificados de Chepurnov para o potenciais nucleares de partícula única, para obter os melhores resultados do espectro de partícula única na deformação de equilíbrio[2]. Para os parâmetros do Modelo da Gota Líquida, adotamos os parâmetros propostos por Pashkevich[3]. Na Tabela 5.1, estão registrados os valores das coordenadas de deformação de cada um dos pontos. No caso da barreira externa, foi incluído o parâmetro α_3 de deformação octupolar, para descrever a existência de assimetria de massas dos fragmentos de fissão. Nas figuras 5.7, 5.8, 5.9, 5.10 e 5.11 estão graficadas as barreiras de fissão em função das coordenadas ε (elongação) e α_3 (deformação octupolar). Em todos os casos o intervalo de energias adotado é de 1 MeV. Com a consideração da assimetria de massas no segundo ponto de sela, diminui a altura da segunda barreira para os actínídeos mais pesados. Já para os actínídeos leves, no nosso caso representados pelo ^{233}U , começa a manifestar-se um terceiro mínimo raso na barreira de fissão.[4]

Figura 5.2 : Barreira de fissão do ^{233}U nas coordenadas de deformação $\{\varepsilon, \alpha_4\}$.

Figura 5.3 : Barreira de fissão do ^{237}Np nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_4\}$.

Figura 5.4 : Barreira de fissão do ^{237}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_4\}$.

Figura 5.5 : Barreira de fissão do ^{239}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_4\}$.

Figura 5.6 : Barreira de fissão do ^{241}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_4\}$.

Figura 5.7 : Barreira de fissão do ^{233}U nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_3\}$.

Figura 5.8 : Barreira de fissão do ^{237}Np nas coordenadas de deformação $\{\varepsilon, \alpha_3\}$.

Figura 5.9 : Barreira de fissão do ^{237}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_3\}$.

Figura 5.10 : Barreira de fissão do ^{239}Pu nas coordenadas de deformação $\{\epsilon, \alpha_3\}$.

Figura 5.11 : Barreira de fissão do ^{241}Pu nas coordenadas de deformação $\{\varepsilon, \alpha_3\}$.

^{233}U	Deformação de Equilíbrio	Primeiro Ponto de Sela	Segundo Poço	Segundo Ponto de Sela
ε	0,208	0,403	0,500	0,709
α_3	-	-	-	0,109
α_4	0,075	-0,072	0,020	0,042
^{237}Np	Deformação de Equilíbrio	Primeiro Ponto de Sela	Segundo Poço	Segundo Ponto de Sela
ε	0,242	0,369	0,502	0,682
α_3	-	-	-	0,107
α_4	0,066	-0,065	0,012	0,012
^{237}Pu	Deformação de Equilíbrio	Primeiro Ponto de Sela	Segundo Poço	Segundo Ponto de Sela
ε	0,225	0,390	0,510	0,690
α_3	-	-	-	0,110
α_4	0,07	-0,060	0,015	0,030
^{239}Pu	Deformação de Equilíbrio	Primeiro Ponto de Sela	Segundo Poço	Segundo Ponto de Sela
ε	0,237	0,380	0,505	0,690
α_3	-	-	-	0,110
α_4	0,065	-0,060	0,025	0,030
^{241}Pu	Deformação de Equilíbrio	Primeiro Ponto de Sela	Segundo Poço	Segundo Ponto de Sela
ε	0,225	0,370	0,500	0,690
α_3	-	-	-	0,110
α_4	0,065	-0,050	-0,005	0,030

Tabela 5.1 Parâmetros de deformação dos principais pontos do caminho de fissão.

As alturas das barreiras interna e externa são determinadas pela diferença entre a energia do primeiro e segundo pontos de sela e a energia do primeiro mínimo. As alturas das barreiras e a profundidade do segundo poço divergem dos valores experimentais[4]. Para obtenção de valores mais próximos seria necessário incluir no cálculo um grande número de coordenadas, o que aumentaria muito o tempo de cálculo.

Para actínídeos na deformação de equilíbrio o núcleo tem simetrias axial e de reflexão. Na região do primeiro ponto de sela aparece a não axialidade para núcleos com $A \geq 236$ [5]. A nossa parametrização é válida só para deformações com simetria axial e não consegue contemplar configurações não axiais. Com a inclusão da não axialidade a altura da barreira interna diminui. O segundo mínimo corresponde aproximadamente à forma de esferóide com razão de semi-eixos $c/a \approx 2$. Este ponto de deformação é estável com respeito às simetrias axial e de reflexão. No caminho de fissão, desde a deformação do equilíbrio até o segundo ponto de sela, o núcleo vai alongando-se sem o surgimento de um pescoço apreciável, que será desenvolvido durante o descenso dinâmico (ver figura 5.12).

Figura 5.12 : Evolução da forma do núcleo de ^{239}Pu ao longo do caminho de fissão.

5.2 Deformações de Equilíbrio

A obtenção dos parâmetros de deformação de equilíbrio a partir dos dados experimentais é, na maior parte das vezes, muito imprecisa (particularmente para o parâmetro β_4 vinculado à deformação hexadecapolar). Por exemplo, as deformações obtidas através de espalhamento coulombiano são muito maiores que aquelas obtidas mediante dados de reações nucleares. Isto pode ser devido a diferenças nos mecanismos desses processos. Porém, um outro fator contribuinte a essas discrepâncias pode ter origem na interpretação de dados experimentais a partir de modelos teóricos.

Os parâmetros de deformação $\{\varepsilon, \alpha_4\}$ no equilíbrio por nós calculados foram convertidos no conjunto de parâmetros $\{\beta_2, \beta_4\}$ através da equação 3.5 do Capítulo 3. Posteriormente, foram comparados com os resultados experimentais de Bemis *et al.*[6] e com os resultados teóricos de Gareev *et al.*[7]. As medidas relatadas na ref.[6] foram feitas através de excitação coulombiana, utilizando como projétil ${}^4\text{He}$ espalhado inelasticamente em núcleos com A par. No cálculo desenvolvido em [7], os parâmetros de deformação dependentes do modelo, β_2 e β_4 são extraídos da medida dos momentos das transições E2 e E4 para distribuições de carga nuclear deformada homogênea e de Fermi.

Na figura 5.13 pode ser observada a concordância entre nossos cálculos e os trabalhos mencionados acima. Também estão incluídos no gráfico os cálculos realizados na vizinhança dos núcleos em estudo, com a finalidade de testar a viabilidade de nossos cálculos quando da determinação de deformações de equilíbrio.

Figura 5.13 Parâmetros $\{\beta_2, \beta_4\}$ calculados em função do número de massa A , comparados com os resultados de Bemis *et al.*[6] e Gareev *et al.*[7].

5.3 Densidade de Níveis na Deformação de Equilíbrio

A partir de uma das primeiras parametrizações disponíveis na literatura[8], Dudek *et. al.* ([9] e as referências nele contidas) fizeram um ajuste dos parâmetros do potencial de Woods Saxon deformado, com o propósito de melhorar a concordância dos cálculos com as seqüências experimentais de energias, *spins* e paridade dos níveis dos núcleos deformados ímpares. As primeiras parametrizações foram realizadas através do ajuste dos parâmetros do potencial obtidos com núcleos esféricos (particularmente ^{208}Pb)[10, 11, 2].

Para descrever de forma apropriada a seqüência de *spin* e paridade dos níveis, introduzimos pequenas variações nos parâmetros λ e r_{0-so} para o potencial de prótons, no caso do ^{237}Np e de nêutrons para ^{233}U , ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu , partindo dos parâmetros de Chepurnov[2]. Os valores obtidos para cada núcleo podem ser observados na Tabela 5.2. Para o ^{239}Pu , λ e r_{0-so} são um pouco diferentes dos valores obtidos para o resto dos plutônios. Isto se deve a uma anomalia na excitação de partícula única do ^{239}Pu . Chasman *et. al*[12] demonstraram que a distribuição do espaçamento, entre níveis de partícula única num conjunto de actínídeos com Z ou N ímpares, é irregular e não tem um comportamento suave, como era de se esperar a partir do modelo de camadas. Esta irregularidade pode ter origem nas interações partícula-buraco[12, 13]. De qualquer modo, o nosso propósito não é reproduzir os detalhes finos das excitações de partícula única, mas tão somente suas propriedades gerais.

Com o espectro de partícula única gerado, podemos calcular os estados de quase-partícula do primeiro poço. Como resultado teremos *spin*, paridade e energia do estado fundamental e alguns dos primeiros níveis excitados. Para o cálculo dos estados quase-particulares empregamos o Método Semimicroscópico Combinado (já descrito no Capítulo 4). No cálculo dos níveis adotamos como parâmetros de emparelhamento $G_p = 27,5/A$ MeV e $G_n = 24,5/A$ MeV para prótons e nêutrons, respectivamente. Na Tabela 5.2 temos os parâmetros do potencial adotados para cada núcleo. Na figura 5.14 podemos ver a grande concordância entre os primeiros níveis de quase-partículas (cabecas de bandas rotacionais) calculados com seus números quânticos e os obtidos experimentalmente.

5.3. DENSIDADE DE NÍVEIS NA DEFORMAÇÃO DE EQUILÍBRIO 72

Figura 5.14 Comparação das energias das cabeças de banda calculadas com as experimentais[14] para os núcleos ^{233}U , ^{237}Np , ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu .

5.3. DENSIDADE DE NÍVEIS NA DEFORMAÇÃO DE EQUILÍBRIO 73

	$V_0[\text{MeV}]$	r_0	a	λ	r_{0-so}
$^{233}\text{U}(\nu)$	53,30	1,240	0,63	35,25	1,230
$^{237}\text{Np}(\pi)$	53,26	1,246	0,63	29,30	1,243
$^{237}\text{Pu}(\nu)$	53,30	1,240	0,63	35,25	1,230
$^{239}\text{Pu}(\nu)$	53,30	1,240	0,63	36,00	1,210
$^{241}\text{Pu}(\nu)$	53,30	1,240	0,63	35,25	1,230

Tabela 5.2 Parâmetros do potencial de partícula única na deformação de equilíbrio. ν e π referem-se a nêutrons e prótons, respectivamente.

Como já mencionamos no Capítulo 4, no cálculo estatístico das seções de choque, é importante um conhecimento profundo das densidades de níveis envolvidas num amplo intervalo de energias. No caso de reações (γ, f) , as densidades de níveis involucradas são:

- a) densidades de níveis nas deformações de equilíbrio dos núcleos composto e residual de emissão de nêutrons (isso se trabalhamos com energias acima do limiar de nêutrons),
- b) densidades de níveis nos pontos de sela e
- c) densidades de níveis no segundo poço (isso se trabalhamos em energias sub-barreira).

A densidade de níveis na deformação de equilíbrio do núcleo composto está diretamente relacionada com a emissão de γ ; para baixas energias, sob o limiar de nêutrons, é o principal concorrente do canal de fissão. Já na descrição da emissão de partículas, principalmente nêutrons, tem que ser considerada a densidade de níveis do núcleo residual na deformação de equilíbrio.

Bibliografia

- [1] F. Garcia, O. Rodriguez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, V.P.Likhachev, E. Garrote, R. Capote e F. Guzmán. *Comp. Phys. Commun.* **120**, 57 (1999).
- [2] V.A. Chepurnov, *Sov. J. Nucl. Phys.* **6**, 696 (1968).
- [3] V.V. Pashkevich, *Nucl. Phys.* **A169**, 275 (1971).
- [4] S. Bjørnholm e J. E. Lynn, *Rev. Mod. Phys.*, **52**, 725 (1980).
- [5] V. Maslov e Y. Kikuchi, *Nucl. Sci. Eng.* 124, 492 (1996).
- [6] C.E. Bemis, F.R. McGovan, J.L. Ford, *et al.* *Phys. Rev.* **C8**, 1466 (1973).
- [7] F.A. Gareev, S.P. Ivanova, V.V. Pashkevich, *Sov. J. Nucl. Phys.* **11**, 667 (1970).
- [8] V.M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* **A95**, 420 (1967).
- [9] J. Dudek, W. Nazarewicz e A. Faessler, *Nucl. Phys.* **A412**, 61 (1984).
- [10] E. Rost, *Phys. Lett.* **B26**, 184 (1968).
- [11] J. Blomqvist, e S. Wahlborn, *Ark. Fys.* **16**, 543 (1960).
- [12] R.R. Chasman, I. Ahmad, A.M. Friedman e J.R. Erskine, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 833 (1977).
- [13] F.A. Gareev, S.P. Ivanova, L.A. Malov, e V.G. Soloviev, *Nucl. Phys.* **A171**, 134 (1971).
- [14] Richard B. Firestone, "Table of Isotopes", Eighth Edition, John Wiley and Sons, New York (1996).

Capítulo 6

Níveis Isoméricos e Distribuições de Momentos

6. Níveis Isoméricos e Distribuições de Momentos.

6.1- Introdução.

6.2- Estados Isoméricos do ^{237}Pu .

6.3- Estados Isoméricos do ^{239}Pu .

6.4- Estados Isoméricos do ^{241}Pu .

6.5- Distribuição de Momentos de Nêutrons no ^{239}Pu .

6.1 Introdução

Os estudos prévios dos estados de partícula única no segundo poço da barreira de fissão, têm sido realizados, empregando-se métodos apropriados para pequenas deformações e estendidos para grandes deformações. Por exemplo, Dudek *et al.* apresentaram um trabalho sistemático de otimização dos parâmetros do potencial de Woods-Saxon para núcleos deformados na região $A \geq 100$, baseados numa parametrização da forma nuclear empregando harmônicos esféricos[1].

Geralmente, esses métodos apresentam os seguintes problemas: a parametrização empregada na descrição da forma do potencial nuclear autoconsistente é inapropriada para grandes deformações; e por outro lado, é necessário incluir parâmetros de ordem superior na expansão multipolar, na descrição adequada da forma para altas deformações. A parametrização empregada no nosso trabalho, baseada nos ovóides de Cassini (já descrita no Capítulo 3), resulta mais conveniente na hora de calcular os estados de partícula única para núcleos desde o estado fundamental até configurações muito deformadas.

Inúmeros trabalhos têm sido feitos, tanto teóricos como experimentais, para estudar as propriedades dos isômeros de fissão. Porém e até agora, *spin* e paridade de grande parte dos isômeros continuam desconhecidos. Só algumas medidas de *spin* e paridade de estados no segundo poço têm sido feitas com sucesso para os núcleos $^{236,238}\text{U}$ e ^{240}Pu [2, 3].

De fato, o estudo das propriedades espectroscópicas dos estados isoméricos pode servir como teste para os modelos de partícula única a grandes deformações. Neste sentido, o núcleo ^{239}Pu é particularmente interessante, porque entre todos os isótopos ímpares de Pu, é o único com uma banda rotacional construída sobre um nível isomérico[4]. Os outros isótopos ^{237}Pu e ^{241}Pu também têm estados isoméricos, porém com *spin* e paridade desconhecidos. Na atualidade, para o estado de menor energia do ^{239}Pu ($8 \mu\text{s}$) o *spin* é conhecido e a paridade indefinida [4]. O *spin* e a paridade do estado de maior energia continuam desconhecidos (2,6 ns). Para o ^{237}Pu , algumas tentativas têm sido feitas para determinar valores de paridade e *spin*, porém sem nenhuma conclusão definitiva. Para este isótopo, tanto o experimento como a teoria concordam com o fato de que o estado isomérico de menor

energia (122 ns) deve ter menor *spin* que o estado de maior energia (1, 1 μs). Para o estado isomérico do ^{241}Pu não há *spin* e paridade conhecidos.

No caso do ^{237}Pu , Dudek *et al.* [5] calculou os fatores g (momento magnético) dos elementos da banda rotacional $K = 1/2$: $J = 1/2$ e $J = 3/2$, e fez a comparação com o valor experimental $g = -0.45$ [6]. De acordo com o resultado, a interpretação mais adequada para a estrutura de partícula única dos valores J^π dos isômeros de fissão do ^{237}Pu é :

a) $J = 3/2$, $K = 1/2^-$ é integrante da banda rotacional $K = 1/2$, para o isômero de 122 ns.

b) $J = K = 11/2$, $\pi = -1$, para o isômero de 1, 1 μs .

Já para o isômero de maior energia do ^{239}Pu (2, 6 ns), obtém-se $J = 11/2$ com paridade indefinida.

Para o cálculo dos níveis no segundo poço, ajustamos os parâmetros do potencial nuclear da mesma forma que para a deformação de equilíbrio. Nesta região de deformação devemos reproduzir a informação experimental disponível para os isômeros de forma do ^{237}Pu e do ^{239}Pu . No caso do ^{239}Pu , a principal informação relacionada com efeitos de partícula única, vem da banda rotacional construída sobre o estado isomérico de menor energia [4]. Para o ^{237}Pu , a informação principal a considerar é obtida da medida do fator g ($g = -0,45(3)$) do isômero de menor vida média [6].

Na Tabela 6.1 estão os parâmetros do potencial de nêutrons obtidos para ^{237}Pu , ^{239}Pu e ^{241}Pu na região do segundo poço.

	V_0 [MeV]	r_0	a	λ_n	r_{0-so}
^{237}Pu	53,3	1,247	0,63	38,25	1,20
^{239}Pu	53,3	1,240	0,63	37,20	1,19
^{241}Pu	53,3	1,240	0,63	38,00	1,19

Tabela 6.1 Parâmetros do potencial de partícula única.

6.2 Estados Isoméricos do ^{237}Pu

Para um núcleo com A ímpar a partícula de valência contribui de forma significativa ao momento magnético. Para o cálculo do momento magnético

podemos empregar a seguinte expressão aproximada [7]

$$g = g_R I + \frac{g_k - g_R}{(I+1)} \left[K^2 + \frac{1}{4}(2I+1)(-1)^{I+1/2} b \delta_{k,1/2} \right], \quad (6.1)$$

onde o parâmetro de desacoplamento magnético b é definido por

$$b(g_K - g_R) = \left\{ \left\langle K = \frac{1}{2} \left| [(g_l - g_R) l_+ + (g_s - g_R) s_+] \right| K = \frac{1}{2} \right\rangle \right\}. \quad (6.2)$$

A estrutura do estado de partícula única está contida na equação anterior através da função de onda de partícula única $|K = \frac{1}{2}\rangle$ para a banda $K = \frac{1}{2}$, e nos fatores g_K que, para o caso de uma excitação de uma quase-partícula, são dados por

$$g_K = \frac{1}{K} \langle K | (g_l l_z + g_s s_z) | K \rangle. \quad (6.3)$$

O fator efetivo g_R para o movimento rotacional pode ser obtido a partir de um conjunto de dados experimentais da banda $K = 0$ de núcleos com A par. O valor estimado pode ser estabelecido como $g_R \simeq Z/A$.

A magnitude dos fatores intrínsecos de spin g_s são calculadas por

$$g_s = 0,7 g_{s,\text{livre}},$$

onde $g_{s,\text{livre}} = 5,58$ para prótons e $g_{s,\text{livre}} = -3,82$ para nêutrons.

No caso do ^{237}Pu , o nível $\frac{1}{2}^- |510\rangle$ perto da energia de Fermi é o melhor candidato para ser o isômero de menor vida média. Este resultado concorda com o obtido por Dudek *et al* [5]. O valor experimental do fator g ($g = -0,45$) é compatível com o estado rotacional ($K = 1/2$, $J = 3/2$), com $g = -0,43$.

Na figura 6.1, podemos apreciar a variação da energia do espectro de partícula única do ^{237}Pu com o parâmetro de deformação ε (elongação) e na figura 6.2 o espectro de partícula única de nêutrons obtido para a deformação do segundo poço.

Figura 6.1 : Variação da energia dos níveis do ^{237}Pu em função da deformação.

Figura 6.2: Distribuição de níveis de partícula única de nêutrons do ^{237}Pu para a deformação do segundo poço.

6.3 Estados Isoméricos do ^{239}Pu

Na figura 6.3 o espectro de partícula única de nêutrons, próximo à energia de Fermi do ^{239}Pu , é comparado com outros resultados teóricos disponíveis[8, 9, 10, 11]. Em quase todos os resultados aparece uma subcamada em $N = 148$. Porém, existem variações tanto na disposição dos níveis como no espaçamento entre eles. Neste caso, a observação experimental de que o último nêutron no Pu^{239m1} fica no estado com $I = 5/2$ é reproduzida no nosso cálculo. Os possíveis candidatos para isômeros de fissão são: $\frac{5}{2}^{+}|633\rangle$ e $\frac{5}{2}^{+}|622\rangle$. Outro fato experimental a considerar é a grande probabilidade de se ter ℓ antiparalelo a $s[4]$. Neste sentido, limita-se o número de estados possíveis. No estado $\frac{5}{2}^{+}|622\rangle$ o componente com ℓ antiparalelo a s não excede o 20 % do total da função de onda do estado no nosso cálculo. Já o estado $\frac{5}{2}^{+}|633\rangle$ tem o maior componente com ℓ antiparalelo a s na função de onda do estado.

Figura 6.3: Espectro de partícula única de nêutrons calculado e comparado com outros resultados teóricos.

A banda rotacional do ^{239}Pu , identificada mediante espectroscopia de elétron de conversão[4], é comparada com nosso cálculo na figura 6.4. A banda rotacional com spin $5/2^+$ construída sobre o estado isomérico 2,6 ns foi obtida empregando o momento de inércia “experimental” com $A = 3,36$ keV[4].

Figura 6.4 : Cabeças de banda e primeira banda rotacional do ^{239}Pu na região do segundo poço.

6.4 Estados Isoméricos do ^{241}Pu

Na região do segundo mínimo não existe informação experimental disponível para o ^{241}Pu . Adotando um procedimento semelhante ao aplicado para o ^{239}Pu , podemos obter o espectro de partícula única do ^{241}Pu . Na figura 6.5 podemos apreciar um conjunto de estados agrupados entre $-8,0$ e $-7,0$ MeV. Temos um *gap* imediatamente antes dos dois níveis muito próximos $(5/2, 7/2)$, indicando que certamente os estados $(5/2)$ e $(-3/2)$ podem estar relacionados com os estados isoméricos deste isótopo.

Figura 6.5: Distribuição de níveis de partícula única de nêutrons do ^{241}Pu para a deformação do segundo poço.

6.5 Distribuição de Momentos de Nêutrons do ^{239}Pu

A questão de como os nucleóons se movem no interior do núcleo está sendo ativamente pesquisada tanto teórica como experimentalmente. Particularmente para núcleos deformados existe muito pouca informação a respeito das distribuições de momento. No caso de distribuição de momentos na deformação de equilíbrio, tem sido amplamente discutido seu caráter isotrópico [12, 13, 14].

Para deformações fora do equilíbrio no caso da fissão não há cálculo da distribuição de momentos de nucleóons. Porém, deve-se esperar que não exista isotropia, porque o núcleo está transitando até a cisão.

De todos os isótopos de Pu, é através do ^{239}Pu que conseguimos um ajuste melhor dos parâmetros do potencial nuclear de nêutrons na deformação do segundo poço. Por isso o selecionamos para calcular, pela primeira vez, a distribuição de momentos de nêutrons para altas deformações.

Partimos da função de onda do estado de partícula única (ver Capítulo 3) desenvolvida nas bases de Nilsson:

$$\Psi_i(\vec{R}, \sigma) = \sum_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma} C_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}^i \Phi_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}(\vec{R}, \sigma). \quad (6.4)$$

A partir desta soma podemos obter a função de onda no espaço dos momentos como:

$$\widetilde{\Psi}_i(\vec{K}, \sigma) = \sum_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma} C_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}^i \widetilde{\Phi}_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}(\vec{K}, \sigma) \quad (6.5)$$

onde

$$\widetilde{\Phi}_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}(\vec{K}, \sigma) = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \int d\vec{R} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}} \Phi_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}(\vec{R}, \sigma) \quad (6.6)$$

é normalizado à unidade.

A distribuição de momentos de partícula única $n_i(\vec{K})$ é construída como:

$$n_i(\vec{K}) = n_i(k, k_z) = \left| \tilde{\Phi}_i^+(k, k_z) \right|^2 + \left| \tilde{\Phi}_i^-(k, k_z) \right|^2 \quad (6.7)$$

onde

$$\tilde{\Phi}_i^\pm(k, k_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma} \delta_{\Sigma, \pm \frac{1}{2}} \delta_{\Lambda, \pm \Lambda} C_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}^i \tilde{\Phi}_{n_\rho, n_z, \Lambda, \Sigma}(\vec{K}, \sigma). \quad (6.8)$$

A distribuição total de momentos é dada por:

$$n(\vec{K}) = \sum_i 2v_i^2 n_i(\vec{K}) \quad (6.9)$$

onde v_i^2 são as probabilidades de ocupação (número de ocupação) resultantes do modelo BCS[15](ver figura 6.6).

Figura 6.6 : Número de ocupação de nêutrons no segundo poço do ^{239}Pu .

Na figura 6.7 a) e b) estão alguns níveis mais representativos nas proximidades do nível de Fermi e do fundo do potencial, para os quais também mostramos a distribuição de momentos nas figuras 6.8 a) e b). Neste caso, observa-se uma maior semelhança com os orbitais esféricos puros, para os níveis perto do fundo do potencial. Já para os que estão próximos do nível de Fermi, observa-se maior mistura devido à contribuição de vários orbitais esféricos.

Figura 6.7: Alguns níveis selecionados para o cálculo da função de onda no espaço de momentos: a) níveis perto do nível de Fermi e b) níveis no fundo do potencial.

6.5. DISTRIBUIÇÃO DE MOMENTOS DE NÊUTRONS DO ^{239}Pu 87

Figura 6.8 a) : Distribuições de momentos de alguns orbitais representativos perto do nível de Fermi.

Figura 6.8 b) : Distribuições de momentos de alguns orbitais representativos perto do fundo do potencial.

Como já tínhamos comentado, a isotropia é uma propriedade importante das distribuições de momentos na deformação de equilíbrio. Isto é fácil de interpretar de forma intuitiva, a partir do fato de que, se a velocidade média for maior numa direção dada, a forma do núcleo muda, ou seja, o núcleo não é estável. A partir da mecânica quântica, podemos provar analiticamente que, para um potencial de uma partícula que satisfaça o Teorema do Virial (por exemplo o oscilador harmônico deformado), a isotropia no espaço de momentos é atingida de forma simultânea com a minimização do potencial[13]. Para potenciais de partícula única mais sofisticados como o potencial de Nilsen e o potencial de Hartree-Fock dependente da densidade, isto não pode ser demonstrado analiticamente, porém a condição de isotropia no espaço $\vec{p}$ na deformação de equilíbrio é confirmada. Este tipo de estudo também tem mostrado que, no caso de uma transição da forma nuclear de esférica a deformada (para o equilíbrio), $|\vec{p}|$ não muda significativamente.

A distribuição total de momentos obtida para a deformação do segundo poço pode ser observada na figura 6.9. Como era esperado, temos um claro alongamento na direção do eixo de simetria, o que indica um afastamento da simetria esférica e uma quebra da isotropia, através de um evidente favorecimento da direção do eixo de simetria para comportar maiores momentos.

Figura 6.9 : Distribuição total de momentos calculada.

Bibliografia

- [1] J. Dudek, Z. Szymànski, T. Werner, A. Faessler e C. Lima, Phys. Rev. **C26**, 1712 (1981).
- [2] P. Reiter, "Anregung und Zerfall des superdeformierten ^{238}U ", PhD Thesis, Univ. Heidelberg, (1993).
- [3] D. Pansegrau, " γ -Spektroskopie im II Minimum von ^{240}Pu ", PhD Thesis, Univ. Heidelberg, (1994).
- [4] H. Backe, L. Richter, D. Habs, V. Metag, J. Pedersen, P. Singer e H.J. Specht, Phys. Rev. Lett. **42**, 490 (1979).
- [5] J. Dudek, W. Nazarewicz e A. Faessler, Nucl. Phys. **A412**, 61 (1984).
- [6] M.H. Rafailovich, E. Dafni, G. Schatz, S.Y. Zhu, K. Dybdal, S. Vajda, C. Alonso e G.D. Sprouse, Phys. Rev. Lett. **48**, 982 (1982).
- [7] F. Garcia, E. Garrote, M.-L. Yoneama, J. D. T. Arruda Neto, J. Mesa, F. Bringas, J. F. Dias, V. P. Likhachev, O. Rodriguez e F. Guzmán, Eur. Phys. J. **A 6**, 49 (1999).
- [8] M. C. Pauli e T. Ledergerber, Nucl. Phys. **A175** , 545 (1971).
- [9] V. Mosel e H. W. Schmitt, Nucl. Phys. **A165** , 73 (1971).
- [10] P. Moller e J. R. Nix, Nucl. Phys. **A229** , 269 (1974).
- [11] I. Hamamoto e W. Ogle, Nucl. Phys. **A240** , 54 (1975).
- [12] J. A. Caballero e E. Moya de Guerra, Nucl. Phys. **A509**, 117 (1990).
- [13] E.Moya de Guerra, P.Sarriguren, J.A.Caballero, M.Casas e D.W.L.Sprung, Nucl.Phys. **A529**,8 (1991).

- [14] E.Garrido, J.A.Caballero, E.Moya de Guerra, P.Sarriguren e J.M.Udias, Nucl.Phys. **A584**, 256 (1995)
- [15] F. Garcia, O. Rodriguez, V.A. Rubchenya e E. Garrote, Comp. Phys. Commun. **86**, 129 (1995).

Capítulo 7

Estados de Transição

7.- Estados de Transição.

7.1- Estados de Transição do ^{239}Pu .

7.1.1 Concentração de M1 Perto da Barreira.

7.1.2 Distribuição Angular de Fragmentos.

7.2- Estados de Transição do ^{237}Np .

7.2.1- Seção de Choque Calculada.

7.1 Estados de Transição do ^{239}Pu

Nosso grupo realizou recentemente um trabalho de eletrofissão do ^{239}Pu na região de energia de 7 – 12 MeV[1]. Nesse trabalho, mediu-se pela primeira vez a seção de choque de eletrofissão absoluta do ^{239}Pu na região de energia 7 – 12 MeV. As seções de choque de fotofissão, associadas aos processos de excitação primária de M1 e E2(T=0), foram delineadas por meio do formalismo dos fótons virtuais e do modelo estatístico para decaimento por fissão. Assumindo-se que a intensidade E2(T=0) exaure 100% da Regra da soma (EWSR), os dados experimentais são compatíveis com uma intensidade de M1 de $19 \pm 3 \mu_N^2$, concentrado em 5,4 – 5,8 MeV, no canal de fissão.

Esse resultado sugere, portanto, a existência de um grupo de níveis de transição de paridade positiva nesse intervalo de energia. Para verificar essa possibilidade calculamos a seqüência de níveis de energia com suas respectivas paridades e *spins* no primeiro ponto de sela do ^{239}Pu utilizando o código DENCOM[2]. Esses resultados revelaram que o grupo de níveis $(J^\pi, K) = (1/2^+, 1/2)$, $(3/2^+, 1/2)$ e $(3/2^+, 3/2)$ aparece entre 5,50 e 5,85 MeV (ver Tabela 7.1). Esse resultado está em ótimo acordo com os nossos resultados experimentais.

7.1.1 Distribuição de Níveis no Ponto de Sela

Como já comentamos no Capítulo 3, a seqüência de níveis em núcleos par-par no ponto de sela é a mesma que na deformação de equilíbrio, mas com diferenças no espaçamento devidas à deformação. Sendo assim, para excitações onde as transições dominantes são E1 e E2 perto da barreira, a fissão só tem disponível um número reduzido de canais (J^π, K) : $(1^-, 0)$, $(1^-, 1)$ e $(2^+, 0)$. Já para os núcleos com A ímpar a situação é bem diferente, devido à presença de níveis de quase-partícula originados pela partícula desemparelhada.

O ^{239}Pu é um núcleo particularmente interessante, pois na deformação de equilíbrio e até ≈ 0.4 MeV todos os níveis têm paridade positiva $(1/2^+, 3/2^+, 5/2^+, \dots)$, e na região de ≈ 0.4 MeV até ≈ 0.5 MeV a maior parte dos níveis tem paridade negativa[3]. Na região do ponto de sela não existia

evidência experimental ou teórica da existência de agrupamentos de níveis por paridade. Os níveis de transição com paridade positiva são populados por excitações de E2 e/ou M1. A observação experimental de uma concentração de E2 ou M1 na vizinhança do ponto de sela, pode ser uma forte evidência da concentração de níveis com paridade positiva.

De fato, a informação experimental em distribuição angular de fragmentos de foto e eletrofissão, sistematicamente tem mostrado a existência de uma forte presença de níveis de E2 imediatamente acima da barreira de fissão[4]. Nos actínídeos com A ímpar, a informação experimental para baixas energias é pouco abundante e difícil de analisar, devido essencialmente à ausência de medidas de distribuição de fragmentos. Nos núcleos ímpares é bem conhecida a dependência da anisotropia com a projeção do momento angular no eixo de simetria K e não com J^π [5]. Mesmo no caso do ^{239}Pu , que teve medições de distribuição angular (γ, f) feitas de forma sistemática nos últimos 30 anos[6, 7], resulta praticamente impossível obter informação das transições multipolares. Entretanto, medidas de eletrofissão feitas com outros núcleos ímpares têm indicado a presença de frações substanciais do componente E2($T=0$) perto da barreira de fissão [8, 9, 10].

Experimentalmente é muito difícil obter informação confiável a respeito das transições de M1 em núcleos pesados a partir de experimentos (e, e') , mesmo no caso de serem realizadas medidas em ângulos traseiros[11]. A principal dificuldade tem origem no fato de que uma medida (e, e') manifesta a concentração desses níveis somente para $q > \omega$, e a extrapolação da medida para o ponto de fóton ($q = \omega$) nem sempre é confiável.

7.1.2 Concentração de Níveis de M1 Perto da Barreira

De todos os níveis de transição disponíveis, mostramos na Tabela 7.1 aqueles possíveis de serem populados por transições de E1, M1 ou E2 no ^{239}Pu . Os níveis foram calculados para o primeiro ponto de sela com parâmetros de deformação $\varepsilon = 0,394$ e $\alpha_4 = -0,030$.

$E(\text{MeV})$	J^π	K	$\lambda\ell$	ω (MeV)
$\gtrsim 0,01$	$3/2^-$	$3/2$	E1	5,35
0,02	$1/2^-$	$1/2$	E1	
0,06	$3/2^-$	$1/2$	E1	5,40
0,21	$1/2^+$	$1/2$	M1/E2	
0,24	$5/2^+$	$5/2$	E2	
0,25	$5/2^+$	$1/2$	E2	
$\gtrsim 0,25$	$3/2^+$	$1/2$	M1/E2	
0,54	$3/2^+$	$3/2$	M1/E2	5,85
$\gtrsim 0,58$	$5/2^+$	$3/2$	E2	
$\gtrsim 0,86$	$3/2^-$	$3/2$	E1	6,20
0,93	$1/2^-$	$1/2$	E1	
0,97	$5/2^+$	$5/2$	E2	
0,973	$5/2^+$	$5/2$	E2	
0,974	$5/2^+$	$1/2$	E2	
0,975	$3/2^+$	$1/2$	M1/E2	$\approx 6,30$
0,978	$1/2^-$	$1/2$	E1	

Tabela 7.1 : Níveis do ponto de sela do ^{239}Pu .

Para o nível mais baixo com $(J^\pi, K) = (3/2^-, 3/2)$, consideramos a energia de excitação de fóton igual a $\omega = 5,35$ MeV, depois de levar em conta a sugestão feita por Vandenbosch e Huizenga[5] na bem sucedida tentativa de ajustar a distribuição angular de fragmentos do ^{239}Pu . De fato, o melhor resultado é conseguido considerando $(3/2^-, 3/2)$ como o nível mais baixo no primeiro ponto de sela com uma energia $\omega = 5,35$ MeV.

Na figura 7.1 apresentamos os níveis de transição associados apenas com E1 e M1 para $\omega \leq 6,3$ MeV. Os níveis associados com E2 não têm uma concentração apreciável para energias menores que 7 MeV[1]. Podemos observar uma concentração de três níveis com paridade positiva para $5,5 < \omega < 5,9$ MeV que, como já discutimos, estão associados a transições de M1. Medidas feitas no ^{239}Pu indicam uma concentração de M1 no intervalo $(5,40 \pm 0,05) \leq \omega \leq (5,80 \pm 0,05)$ MeV, que concorda com o nosso cálculo teórico.

Figura 7.1 : Níveis do ponto de sela do ^{239}Pu .

7.1.3 Distribuição Angular (γ, f) do ^{239}Pu

A distribuição angular de fragmentos de fissão é um dos poucos fenômenos relacionados com o processo de fissão que têm uma explicação teórica geralmente aceita. As magnitudes envolvidas no processo são o momento total J e K , que é a projeção daquele no eixo de simetria do núcleo. As distribuições também caracterizam os estados de transição do núcleo acima do ponto de sela. Adicionalmente, assume-se que os fragmentos são emitidos na direção do eixo de simetria e que K continua sendo um bom número quântico no trânsito desde o ponto de sela até a cisão.

Uma rotação finita do sistema de referência (x', y', z') com respeito ao sistema (x, y, z) é descrita pela função esférica $D_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma)$, onde (α, β, γ) são os ângulos de Euler que definem (x', y', z') no sistema (x, y, z) . Se fixarmos o sistema (x', y', z') ao núcleo, as rotações deste podem ser descritas pela função de onda

$$\Psi_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (7.1)$$

Se tomarmos o eixo de simetria do núcleo na direção de z' , então a probabilidade de encontrá-lo no intervalo de ângulo sólido $[\Omega, \Omega + d\Omega]$ será

$$\begin{aligned} d^3P &= |\Psi_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma)|^2 d\Omega \\ &= \frac{2J+1}{8\pi^2} |D_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma)|^2 \sin(\beta) d\beta d\alpha d\gamma \\ &= \frac{2J+1}{8\pi^2} |e^{iM\alpha} d_{MK}^J(\beta) e^{iK\gamma}|^2 \sin(\beta) d\beta d\alpha d\gamma \\ &= \frac{2J+1}{8\pi^2} |d_{MK}^J(\beta)|^2 \sin(\beta) d\beta d\alpha d\gamma, \end{aligned} \quad (7.2)$$

onde

$$\begin{aligned} d_{MK}^J(\beta) &= \sqrt{\{(J+M)!(J-M)!(J+K)!(J-K)!\}} \\ &\times \sum_X \frac{(-1)^X \left[\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^{K+M+2X}}{(J-K-X)!} \frac{\left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^{2J-K+M-2X}}{(J+M-X)!(X+K-M)!X!} \end{aligned} \quad (7.3)$$

$X = 0, 1, 2, 3 \dots n$, onde n é o valor máximo de X que não torna negativo nenhum termo do denominador.

A probabilidade de que z' fique orientado no intervalo $[\beta, \beta + d\beta]$ é

$$\begin{aligned} dP(\beta) &= \int_{\alpha} \int_{\gamma} d^3P(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= \frac{2J+1}{8\pi^2} |d_{MK}^J(\beta)|^2 \sin(\beta) d\beta \int_{\alpha} d\alpha \int_{\gamma} d\gamma \\ &= \frac{1}{2} (2J+1) |d_{MK}^J(\beta)|^2 \sin(\beta) d\beta. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Se assumirmos que os fragmentos de fissão são emitidos na direção do eixo de simetria, podemos definir a função de distribuição angular como:

$$W_{M,K}^J(\beta) = \frac{1}{2} (2J+1) |d_{MK}^J(\beta)|^2, \quad (7.5)$$

com a normalização

$$\int_0^{\pi} W_{M,K}^J(\beta) \sin(\beta) d\beta = 1. \quad (7.6)$$

A função de distribuição angular de um núcleo com A ímpar $W_{M,K}^J(\theta)$, para todos os níveis de transição possíveis (J^{π}, K) e todas as possíveis combinações de J , K e M pode ser colocada como[5]:

$$W_K^J(\theta) = \sum_M W_{M,K}^J(\theta) = a + b \sin^2(\theta). \quad (7.7)$$

Nas equações anteriores, M é a projeção do momento angular no eixo z do sistema de coordenadas de laboratório (coincide com a direção do feixe incidente) e θ é o ângulo entre a trajetória do fragmento de fissão e a direção do feixe.

No ^{239}Pu temos a melhor chance de detectar anisotropia b/a em núcleos com A ímpar, por ter o menor momento angular possível, $J_0 = 1/2$. A distribuição angular de fragmentos de fotofissão do ^{239}Pu foi medida com Bremsstrahlung para energias a partir de 5,4 MeV[6, 7];

Os cálculos teóricos para ^{239}Pu ($J_0^\pi = 1/2^+$) mostram que[5]

- (a) $b < 0$, para $(J, K) = (3/2, 1/2)$,
- (b) $b > 0$, para $(J, K) = (3/2, 3/2)$,
- (c) $b = 0$, para $(J, K) = (1/2, 1/2)$.

A distribuição angular não consegue distinguir os estados de paridade positiva e negativa, porque as medidas foram realizadas com fótons não polarizados. Entretanto, a excitação das diferentes bandas K pode ser observada pelas mudanças de sinal da anisotropia b/a ($a > 0$ sempre).

Figura 7.2 : Anisotropia dos fragmentos do $^{239}\text{Pu}(\gamma, f)$ [6] analisada em conjunto com os níveis calculados.

Neste sentido, podemos ver na figura 7.2 a comparação de nosso cálculo dos níveis de transição (J^π, K) do ^{239}Pu com os resultados experimentais de b/a . Como as excitações de E2 são fortemente manifestadas apenas com fótons virtuais, pode-se considerar somente as excitações de E1 e/ou M1. Neste

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo:

3567
ex. 1

caso, o ^{239}Pu pode fissionar através dos canais: $(1/2^+, 1/2)$, $(3/2^+, 1/2)$, $(3/2^+, 3/2)$, e $(1/2^-, 1/2)$, $(3/2^-, 1/2)$, $(3/2^-, 3/2)$. A partir da figura podemos obter as seguintes conclusões:

a) a anisotropia positiva ($b/a > 0$) em $E_{max} = 5,4$ MeV pode ser associada ao nível de transição mais baixo, $K = 3/2$ (excitado por E1);

b) a mudança abrupta do sinal da anisotropia de positivo para negativo para $E_{max} = 5,65$ MeV pode ser explicada pelos dois níveis com $K = 1/2$: $(1/2^-, 1/2)$ e $(3/2^-, 1/2)$ para $\omega \approx 5,4$ MeV e pelos níveis $(1/2^+, 1/2)$ e $(3/2^+, 1/2)$ próximos do extremo E_{max} ;

c) b/a cresce muito pouco para $E_{max} = 5,9$ MeV, devido à existência do nível $(3/2^+, 3/2)$ próximo de E_{max} ;

d) finalmente, com $E_{max} = 6,4$ MeV, b/a aproxima-se de zero de forma rápida porque os níveis com $K = 3/2$, $(3/2^+, 3/2)$ e $(3/2^-, 3/2)$ são intensamente populados, e o nível $(1/2^-, 1/2)$ (que contribui com $b = 0$) também. O nível $(3/2^+, 1/2)$ está muito perto de $E_{max} = 5,65$ MeV.

Para $E_{max} > 6,4$ MeV, o número de níveis com diferentes K é suficientemente grande para manter a anisotropia perto de zero.

7.2 Estados de Transição do ^{237}Np

As irregularidades na seção de choque de fissão sub-barreira podem também ser associadas à penetração ressonante pela barreira. Em energias um pouco acima da barreira, a origem das estruturas pode ser explicada através da competição entre os canais de fissão e emissão de nêutrons. Contudo, a física mais atraente está contida nas irregularidades da seção de choque, causadas pela estrutura do espectro de transição, mas a observação de estruturas na seção de choque de fissão em baixas energias para núcleos pesados ímpares, ou pelo menos para núcleos de Z ímpar, tem sido descartada via argumentos experimentais e teóricos[12, 13, 14].

Neste sentido, o ^{237}Np constitui um núcleo de grande interesse pelos seguintes fatos:

a) o limiar de nêutrons é $B_n \approx 6,6$ MeV; entretanto, a barreira de fissão fica aproximadamente em $\sim 5,7$ MeV[15]. Assim, todas as possíveis estruturas para $\omega \leq 6,6$ MeV não podem ser associadas à competição entre a emissão de nêutrons e a fissão;

b) tem sido observada sistematicamente na fotofissão uma estrutura com $\sim 0,4$ MeV de largura ao redor de $5,7 - 5,8$ MeV[14, 16];

c) este fato experimental tem sido tentativamente atribuído a propriedades intrínsecas do processo de fissão[16, 17] ou ao processo de absorção fotonuclear [14];

d) no estudo detalhado da seção de choque (γ, f) do ^{237}Np feito por Soldatov *et al.*[14], a origem da estrutura em $5,7 - 5,8$ MeV é descartada da fissão, com base no argumento de ausência de estruturas neste intervalo de energias nas medidas de probabilidade de fissão do ^{237}Np realizadas com outros projéteis, como por exemplo a reação $^{236}\text{U} (^3\text{He}, df)$ [12, 13];

e) nesse trabalho[14] é sugerida uma explicação para a estrutura a partir de efeitos relacionados à absorção fotonuclear, que nessa região de energias deve ter uma estrutura de tipo ressonância pigméia, ou como é chamada para outros núcleos, a “anomalia de $5,5$ MeV”[18];

f) recentemente, um experimento de medida com altíssima resolução da seção de choque (γ, f) do ^{237}Np , revelou a existência de duas estruturas em $\sim 5,7$ MeV e ~ 6 MeV[19].

Na figura 7.3 aparecem os resultados mais representativos de medidas feitas no intervalo de energias de $5 - 7$ MeV, com diferentes técnicas: espectro de fótons de Bremsstrahlung[16], fótons produzidos por aniquilação de pósitrons em vôo[20], e a medida mais recente empregando o espectro gama produzido pela captura de nêutrons térmicos[19]. Em todo o intervalo de energias, pode-se apreciar uma boa compatibilidade entre os resultados. É importante frisar que a medida feita com gamas de captura de nêutrons térmicos apresenta uma resolução muito maior (de alguns eV), se comparada às outras técnicas.

Figura 7.3 : Resultados experimentais mais representativos da seção de choque $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$ obtidos por Zhuchko et al.[16], Berman et al.[20] e Geraldo et al. [19].

No cálculo dos níveis de transição do ^{237}Np , empregamos novamente o Método Semimicroscópico Combinado, descrito no Capítulo 4, através do código DENCOM[2]. Os espectros de partícula única foram calculados para as deformações do primeiro e segundo pontos de sela com os parâmetros de Chepurnov[21] através do código BARRIER[22].

Na Tabela 7.2 e na figura 7.4 são mostrados os níveis (J^π, K) calculados que podem ser populados no primeiro e no segundo pontos de sela por transições de E1, M1 ou E2, para energias $\omega \leq B_n$. Para o primeiro ponto de sela (o mais alto dos dois) tomamos uma altura de $B_A = 5,6$ MeV, como sugere a substancial anisotropia da distribuição angular de fragmentos de fotofissão em $\omega = 5,6$ MeV [23]. O valor sugerido para a segunda barreira é $B_B = 5,2$ MeV [15]. Como pode ser observado na figura 8.4, existem duas estruturas bem definidas ao redor das energias 5,7 e 6 MeV, e um *shelf* para $\omega \sim 5,3$ MeV.

Barreira A, $B_A = 5,6$ MeV				Barreira B, $B_B = 5,2$ MeV			
E (MeV)	K	$J\pi$	$\lambda\ell$	E (MeV)	K	$J\pi$	$\lambda\ell$
0,0115	1/2	3/2-	E1	0,0000	1/2	1/2	E2
0,0128	5/2	5/2	E2,M1	0,0192	1/2	3/2-	E1
0,0139	7/2	7/2	E2,M1	0,0192	1/2	3/2	E2,M1
0,0322	1/2	5/2-	E1	0,0537	1/2	5/2-	E1
0,0469	5/2	7/2	E2,M1	0,0537	1/2	5/2	E2,M1
0,0536	1/2	7/2-	E1	0,0720	3/2	3/2-	E1
0,0588	7/2	9/2	E2	0,0720	3/2	3/2	E2,M1
0,0793	5/2	9/2	E2	0,0894	1/2	7/2-	E1
0,3885	1/2	1/2	E2	0,0894	1/2	7/2	E2,M1
0,4000	1/2	3/2	E2,M1	0,1110	3/2	5/2-	E1
0,4207	1/2	5/2	E2,M1	0,1110	3/2	5/2	E2,M1
0,4421	1/2	7/2	E2,M1	0,1515	1/2	9/2	E2
0,4793	1/2	9/2	E2	0,1530	3/2	7/2-	E1
0,6196	9/2	9/2	E2	0,1530	3/2	7/2	E2,M1
0,6531	3/2	3/2-	E1	0,2070	3/2	9/2	E2
0,6646	1/2	3/2-	E1	0,2910	5/2	5/2-	E1
0,6764	3/2	5/2-	E1	0,2910	5/2	5/2	E2,M1
0,6853	1/2	5/2-	E1	0,3165	5/2	5/2-	E1
0,7016	3/2	7/2-	E1	0,3165	5/2	5/2	E2,M1
0,7067	1/2	7/2-	E1	0,3165	7/2	7/2-	E1
0,7495	3/2	3/2-	E1	0,3165	7/2	7/2	E2,M1
0,7728	3/2	5/2-	E1	0,3165	3/2	3/2-	E1
0,7980	3/2	7/2-	E1	0,3165	3/2	3/2	E2,M1

Tabela 7.2 Níveis de E1,M1 e E2 calculados acima do primeiro e segundo pontos de sela do ^{237}Np .

Figura 7.4 : Agrupamentos de níveis de E1, M1 e E2 identificados com as estruturas na seção de choque $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$.

Como resultado dos nossos cálculos observamos os seguintes fatos interessantes:

- os níveis no primeiro ponto de sela encontram-se agrupados nos intervalos de energias de 5,6 – 5,7 MeV, 6,0 – 6,1 MeV, e 6,2 – 6,35 MeV;
- existe um excelente acordo entre os agrupamentos de níveis e as estruturas observadas experimentalmente na seção de choque (γ, f) . O fato de não ser zero a seção de choque nos intervalos entre os agrupamentos de níveis deve-se à eventual população de níveis do segundo ponto de sela,
- a evidência experimental não conclusiva da estrutura sub-barreira para ω perto do de 5,2 – 5,3 MeV pode ser interpretada através do agrupamento de níveis acima do segundo ponto de sela,
- os níveis para ω perto de 6,0 – 6,1 MeV, todos com paridade positiva, podem ser populados através de transições de M1. A concentração de níveis de M1 no ^{237}Np ao redor de 6,2 MeV já tinha sido relatada em trabalhos anteriores[10],
- a possibilidade de contribuição da excitação de E1 na estrutura da seção de choque (γ, f) para $\omega \sim 6$ MeV fica excluída.

7.2.1 Seção de Choque Calculada

Supondo que E1 e E2 sejam as transições multipolares mais relevantes,

$$\sigma_f(\omega) = \sigma_\gamma^{E1}(\omega) P_f^{E1}(\omega) + \sigma_\gamma^{E2}(\omega) P_f^{E2}(\omega). \quad (7.8)$$

$\sigma_\gamma^{E1}(\omega)$ e $\sigma_\gamma^{E2}(\omega)$ correspondem, respectivamente, às caudas de baixa energia da GDR e GQR(T=0). Para o cálculo da contribuição da GDR empregamos a parametrização das duas lorentzianas proposta por Berman *et al.*[20]. Para GQR (T=0) empregamos a aproximação sugerida em [8].

Na região de energias sob o limiar de nêutrons, os únicos canais que competem são a fissão e emissão γ . Então, a probabilidade de fissão pode ser definida como:

$$P_f(J\pi, K, E) = \frac{T_f(J\pi, K, E)}{T_f(J\pi, K, E) + T_\gamma(J\pi, E)}, \quad (7.9)$$

onde $T_f(J\pi, K, E)$ e $T_\gamma(J\pi, E)$ são as transmissões de fissão e de emissão de gama do canal $(J\pi, K)$, respectivamente.

Na figura 7.5 mostramos o resultado da seção de choque calculada e comparada com os resultados experimentais. O cálculo poderia ser mais elaborado para melhorar o acordo quantitativo, mas isto estaria fora dos objetivos deste trabalho, além de não ser relevante. O mais importante foi mostrar que os níveis que calculamos geram uma seção de choque qualitativamente correta.

Figura 7.5 : Seção de choque calculada comparada com os resultados experimentais.

Com o cálculo dos níveis demonstramos que as estruturas experimentais observadas em $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$, antes da abertura do canal de nêutrons, são consequência direta da distribuição de níveis de transição acima do primeiro e segundo pontos de sela. Aliás, a seletividade de nossa ponta de prova, ou seja fótons, é evidenciada através dos agrupamentos dos níveis acessíveis. No caso das reações com outro tipo de projétil, (por exemplo $^{236}\text{U}(^3\text{He}, df)$ [12, 13]), temos um número maior de estados de transição disponíveis distribuídos de forma uniforme, o que torna praticamente inviável a manifestação de estruturas.

Outro resultado interessante foi a obtenção, em nossos cálculos, de duas estruturas (dois agrupamentos de níveis) entre 5,7 e 6,0 MeV, em excelente acordo com medidas mais recentes e de muito maior resolução[19], contrastando com os resultados de Bremsstrahlung (de resolução pobre) que por mais de 30 anos vêm obtendo uma única e larga estrutura nessa região[14, 16, 17].

Este estudo também serviu para dirimir, definitivamente, a dúvida quanto à natureza da estrutura na região 5,7 – 6,0 MeV e descartou hipóteses mais

“exóticas” como aquela que atribuía a essa estrutura a conhecida “anomalia fotonuclear”[18], associada possivelmente à existência de uma ressonância pigméia[14].

Bibliografia

- [1] J.D.T. Arruda-Neto, M.-L. Yoneama, J.F. Dias, F. Garcia, M.A.V. Reigota, V.P. Likhachev, F. Guzmán, O. Rodriguez and J. Mesa, Phys. Rev. **C55**, 2471 (1997).
- [2] F. Garcia, O. Rodriguez, V.A. Rubchenya, E. Garrote, Comp. Phys. Commun. **86**, 129 (1995).
- [3] Richard B. Firestone, "Table of Isotopes", Eighth Edition, John Wiley and Sons, New York (1996).
- [4] J.D.T. Arruda-Neto et al, Nucl.Phys. **A389**, 378 (1982)
- [5] R. Vandenbosch and J.R. Huizenga "Nuclear Fission", Academic Press, New York (1973).
- [6] N.S. Rabotnov et al., Nucl.Phys. **77**,92(1966).
- [7] A.S. Soldatov, Yu.M. Tsipenyuk and G.N. Smirenkin, Sov.J.Nucl.Phys. **11**, 552 (1970).
- [8] J.D.T. Arruda-Neto et al., Physica Scripta **40**, 735 (1989).
- [9] J.D.T. Arruda-Neto et al., J.Phys.**G11**, 649 (1985).
- [10] J.D.T. Arruda-Neto, S.L. Paschoal and S.B. Herdade, J.Phys.G: Nucl.Phys. **14** , 373 (1988).
- [11] R.S. Hicks et al., Phys.Rev. **C26**, 920 (1982).
- [12] A. Gavron, H.C.Britt, E.Konecny, J.Weber, J.B.Wilhelmy, Phys. Rev. **C 13**, 2374 (1976).

- [13] H.C. Britt, "Physics and Chemistry of Fission", Vol.**11**, IAEA, Vienna, p.3 (1980).
- [14] A.S. Soldatov, V.E. Rudnikov, G.N. Smirenkin., V.M.Andriyanov, V.A.Pilipchenko, I.V.Khimich, Phys. Atomic Nuclei **56**, 1307 (1993).
- [15] S. Bjørnholm and J. E. Lynn, Rev. Mod. Phys., **52**, 725 (1980).
- [16] V.E. Zhuchko, Yu.B. Ostapenko, G.N. Smirenkin, A.S. Soldatov, Yu. M. Tsipenyuk., Sov.J.Nucl.Phys. **28**, 602 (1978).
- [17] Yu.B.Ostapenko, G.N. Smirenkin, A.S. Soldatov, Yu. M. Tsipenyuk., Sov.J.Part.Nucl. **12**, 545 (1981).
- [18] G.A. Bartholomew, E.D. Earle, A.J. Ferguson, J.W. Knowles, M.A. Lone, Adv. Nucl. Phys. **7**, 229 (1973).
- [19] L.P. Geraldo, R. Semmler, O.L. Gonalez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, F.Garcia and O Rodriguez, Nucl.Sc.Engineering **136**, 357 (2000).
- [20] B.L. Berman, J.T. Cadwell, E.J. Dowdy, S.S. Dietrich, P. Meyer, R.A. Alvarez, Phys.Rev.C **34**, 2201 (1986).
- [21] V.A. Chepurnov, Sov. J. Nucl. Phys. **6**, 696 (1968).
- [22] F. Garcia, O. Rodriguez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, V.P.Likhachev, E. Garrote, R. Capote and F. Guzmán.Comp. Phys. Commun. **120**, 57 (1999).
- [23] L.P. Geraldo, J.Phys.G **12**, 1423 (1986).

Capítulo 8

Conclusões e Perspectivas Futuras

(1) - Foi desenvolvido e implementado um formalismo para descrever propriedades nucleares em regimes de deformação fora do equilíbrio, utilizando o método Macroscópico-Microscópico em associação com o “Método Semimicroscópico Combinado”

(2) - Este formalismo foi utilizado com sucesso na interpretação de estruturas sub e pós-barreira do $^{237}\text{Np}(\gamma, f)$, as quais tinham uma interpretação controvertida há mais de 20 anos. A origem destas estruturas foi associada com os níveis de transição acima do primeiro e do segundo ponto de selas, permitindo a exclusão de efeitos da seção de choque de fotoabsorção.

(3) - Também foram interpretadas corretamente as distribuições angulares de fotofissão do ^{239}Pu .

(4) - Foram obtidas, pela primeira vez, evidências quanto à existência de concentrações de M1 próximas à barreira para o ^{239}Pu e o ^{237}Np .

(5) - Foram interpretadas com sucesso as informações experimentais disponíveis dos níveis isoméricos dos núcleos ^{237}Pu e ^{239}Pu .

(6) - Foram identificados os possíveis candidatos a níveis isoméricos no ^{241}Pu .

(7) - Foi obtida, pela primeira vez, a distribuição de momentos de nêutrons para o ^{239}Pu fora da deformação de equilíbrio.

O formalismo aqui desenvolvido poderá ser utilizado em muitas outras aplicações envolvendo deformação além do equilíbrio, como por exemplo:

(1) Estudo da emissão de prótons por núcleos deformados: o problema do decaimento através da emissão de prótons de núcleos ímpar-ímpar é um problema ainda não resolvido. Recentemente foi proposto um formalismo que calcula os tempos de vida destas emissões através de ressonâncias dos níveis de partícula única de Nilsson[1]. Com a nossa metodologia, o cálculo pode ser feito empregando níveis obtidos de forma mais realística e considerando efeitos coletivos além dos efeitos de partícula única.

(2) Estudo dos estados hiperdeformados ou estados do terceiro mínimo da barreira de fissão: para os núcleos actínídeos leves, o segundo ponto de sela

é desdobrado, levando a configurações excitadas com assimetria de reflexão com grandes deformações quadripolares e octupolares[2]. O sucesso conseguido na descrição de estados na deformação de equilíbrio e dos isômeros de fissão com a nossa metodologia permitirá aplicá-la na descrição dos estados hiperdeformados.

(3) Estudo de propriedades de núcleos superpesados: a descrição das propriedades dos chamados núcleos superpesados, tem despertado um grande interesse tanto experimental quanto teórico[3]. O nosso formalismo poderia prognosticar algumas das propriedades destes núcleos.

(4) Dependência da interação residual de emparelhamento com a deformação: devido a sua simplicidade, o modelo de emparelhamento BCS tem sido o mais empregado nos cálculos de interação residual. Porém, uma bem conhecida deficiência do modelo BCS acontece no caso em que existam grandes espaços entre os níveis de partícula única na superfície de Fermi. Nesse caso, aparecem soluções não triviais. Essa situação não somente acontece para os números mágicos: em actínídeos deformados para os números de nêutrons $N=142$ e $N=152$ também acontece[4]. Neste caso, é melhor empregar a aproximação de Lipkin e Nogami [5] para evitar este tipo de problema. Através deste método seria necessário reavaliar as correções de emparelhamento do método Macroscópico-Microscópico e as energias de quase-partículas calculadas.

Bibliografia

- [1] L.S.Ferreira e E.Maglione, Phys.Rev.Lett. **86**, 1721 (2001).
- [2] S.Cwiok, W.Nazarewicz, J.X.Saladin, W.Plociennik e A.Johnson, Phys.Lett. **322B**, 304 (1994).
- [3] S.Hofmann, F.P.Hessberger, D.Ackermann, S.Antalic, P.Cagarda, S.Cwiok, B.Kindler, J.Kojouharova, B.Lommel, R.Mann, G.Munzenberg, A.G.Popeko, S.Saro, H.J.Schott e A.V.Yeremin, Eur.Phys.J. **A10**, 5 (2001)
- [4] P.Moller, J.R.Nix, W.D.Myers e W.J.Swiatecki, At.Data Nucl.Data Tables 59, 185 (1995).
- [5] O. Rodriguez, F. Garcia, H. Dias, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, E. Garrote e F. Guzman, Comput. Phys. Commun. **137**, 405 (2001).