**Reações Nucleares de Alta energia ("Spallation") e Sua Aplicação
em calculo de Sistemas Nucleares Acionados por Fonte.**

Pedro Carlos Russo Rossi

TESE APRESENTADA AO
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Orientador: Prof. Dr. José Rubens Maiorino

**Reações Nucleares de Alta energia ("Spallation") e Sua Aplicação
em calculo de Sistemas Nucleares Acionados por Fonte.**

Agradecimentos

Gostaria, inicialmente, de agradecer as instituições que contribuíram para que este trabalho fosse realizado.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio durante o decorrer deste trabalho.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) pelo fornecimento das instalações e do curso de Pós-Graduação.

A Agência Internacional de Energia Atômica pela possibilidade de participação em seus projetos.

Ao Prof. Doutor José Rubens Maiorino, meu orientador, que me incentivou em minha Pós-Graduação.

Ao Prof. Doutor Airtton Deppman, pela paciência, incentivo, sugestões e companheirismo.

A todos os colegas pelo companheirismo, especialmente ao Thiago Carluccio e Douglas Borges Domingos grandes amigos.

Aos Professores D. K. S. Ting e A. Santos sempre dispostos a sanar minhas dúvidas.

A minha esposa Lubianka e minha filha Sarah que me suportaram e apoiaram no decorrer deste trabalho.

A minha mãe que me suportou e apoiou no decorrer da minha vida.

Em fim, a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho e cujos nomes injustamente omito.

Reações Nucleares de Alta energia ("Spallation") e Sua Aplicação em calculo de Sistemas Nucleares Acionados por Fonte.

Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo das reações nucleares de alta energia que são fundamentais na definição do termo fonte dos reatores nucleares subcríticos acionados por fonte externa. Estas reações nucleares, também conhecidas como "spallation", consistem na interação de hádrons de alta energia com os núcleons do núcleo atômico.

A fenomenologia destas reações consiste em duas etapas, sendo que à primeira, o próton interage através de espalhamentos múltiplos, em um processo denominado cascata intra-nuclear seguido da etapa na qual o núcleo excitado oriundo da cascata intranuclear ou evapora partículas de forma a atingir estados energéticos moderados ou fissiona, em um processo conhecido como competição entre evaporação e fissão.

Neste trabalho os principais modelos nucleares, os modelos de Bertini e Cugnon, são revistos, pois estes modelos são fundamentais para propósito de projeto devido à falta de dados nucleares avaliados para estas reações.

A implementação e validação dos métodos de cálculo para o projeto destas

fontes são realizadas. A implementação da metodologia é realizada utilizando o programa MCNPX ("Monte Carlo N-Particle eXtended"), dedicado para cálculos de transporte destas partículas e a validação é realizada mediante uma cooperação internacional junto a um projeto coordenado de pesquisa da Agencia Internacional de Energia Atômica e trabalhos disponíveis. O objetivo é qualificar os cálculos relacionados às reações nucleares e os canais de des-excitação envolvidos.

O CRISP, um código nacional para a descrição da fenomenologia das reações envolvidas, também foi estudado e os modelos implementados no código foram revistos e melhorados de forma a dar continuidade ao seu processo de qualificação.

Devido às limitações dos principais modelos na descrição de produção de núclídeos leves, a reação de multi-fragmentação foi estudada. As discrepâncias nos cálculos de produção destes núclídeos são atribuídas à falta do canal de multi-fragmentação estatística do núcleo. A implementação deste canal foi realizada para a aplicação em reações de altas energias junto ao código CRISP de forma a reproduzir a produção de núclídeos leves, bem como sua validação mediante a comparação com dados experimentais disponíveis para este fenômeno, obtendo com isso uma melhor reprodução de todo o espectro de produção de núclídeos do processo.

Palavras-chave: Física de Reatores, Física Nuclear, Reações Nucleares, Spallation, Reatores Subcríticos Acionados por Fonte, Multi-fragmentação Nuclear.

High Energy Nuclear Reactions ("Spallation") and Their Application in Calculation of The Acceleration Driven Systems(ADS).

Abstract

This work presents a study of high energy nuclear reactions which are fundamental to define the source term in accelerator driven systems.

These nuclear reactions, also known as spallation, consist in the interaction of high energetic hadrons with nucleons in the atomic nucleus.

The phenomenology of these reactions consist in two step. In the first, the proton interacts through multiple scattering in a process called intra-nuclear cascade. It is followed by a step in which the excited nucleus, coming from the intranuclear cascade, could either, evaporates particles to achieve a moderate energy state or fission. This process is known as competition between evaporation and fission.

In this work the main nuclear models, Bertini and Cugnon are reviewed, since these models are fundamental for design purposes of the source term in ADS, due to lack of evaluated nuclear data for these reactions.

The implementation and validation of the calculation methods for the design

of the source is carried out to implement the methodology of source design using the program MCNPX (Monte Carlo N-Particle eXtended), devoted to calculation of transport of these particles and the validation performed by an international cooperation together with a Coordinated Research Project (CRP) of the International Atomic Energy Agency and available jobs, in order to qualify the calculations on nuclear reactions and the de-excitation channels involved, providing a state of the art of design and methodology for calculating external sources of spallation for source driven systems.

The CRISP, is a brazilian code for the phenomenological description of the reactions involved and the models implemented in the code were reviewed and improved to continue the qualification process.

Due to failure of the main models in describing the production of light nuclides, the multifragmentation reaction model was studied. Because the discrepancies in the calculations of production of these nuclides are attributes to the lack of reaction channel and the implementation of this channel was carried out for applications in high energy reactions with the CRISP code to reproduce the production of light nuclides, as well, as its validation by comparison with experimental data available for this phenomenon. Thus, obtaining a better reproduction of the whole spectrum of production of nuclides in the process.

Keywords: Reactor Physics, Nuclear Physics, Nuclear Reactions, Spallation Source, Accelerator Driven System, Nuclear Multifragmentation.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xxi
1 Introdução	1
1.1 Considerações Preliminares	8
1.2 Objetivos	8
1.3 Contribuições	9
1.4 Organização do Trabalho	9
2 Reações Nucleares de altas energias (“Spallation”)	11
2.1 Modelos	12
2.2 Cascata Intranuclear	13
2.2.1 Cascata Intranuclear de Bertini	14
2.2.2 Cascata Intranuclear de Cugnon	19
2.3 Fase de pré-equilíbrio	21
2.4 Fase de Evaporação e Fissão	22
3 Implementação do Calculo do Termo Fonte (Alvos Grossos)	29
3.1 Fundamentos	29
3.1.1 Especificação	31
3.1.2 Resultados	33
3.1.3 Conclusão Parcial	44

4	Cascata Intranuclear, evaporação e fissão no CRISP	47
4.1	MCMC	47
4.2	Monte Carlo Evaporation Fission (MCEF)	52
4.3	Fragmentos de Fissão	58
4.3.1	Inclusão da Produção de Nêutrons Prontos	61
4.3.2	Distribuição de Cargas dos Produtos de Fissão	64
4.3.3	Conclusão Parcial	69
5	Multi-fragmentação do Núcleo	71
5.1	Multi-fragmentação Estatística do Núcleo	72
5.1.1	Termo de Volume	75
5.1.2	Termo de Superfície	78
5.1.3	Termo de Coulomb	80
5.1.4	Termo de Assimetria	83
5.1.5	Função Distribuição e Função Partição	83
5.1.6	Fragmentos Leves e Núcleons	85
5.1.7	O algoritmo (Simplificado)	86
5.2	Resultados	87
5.2.1	Reação: $Fe + p(500MeV)$	88
5.2.2	Reação: $Fe + p(750MeV)$	91
5.2.3	Reação: $Fe + p(1000MeV)$	94
5.2.4	Reação: $Fe + p(1500MeV)$	98
5.2.5	Reação: $^{238}U + p(1000MeV)$	101
5.2.6	Conclusão Parcial	104
6	Conclusões	107
6.1	Sugestões para Trabalhos Futuros	110
A	Modelo do gás de Fermi	111

B O MCNPX	117
B.1 Da precisão	122
B.2 Simulação Monte Carlo analógica e não analógica	123
B.3 Técnicas de redução de variância.	123
B.4 Entrada de dados do MCNPX	124
B.4.1 Unidades	124
B.4.2 Superfícies	125
B.4.3 Células	126
B.4.4 Materiais	130
B.4.5 Fonte	131
B.4.6 Quantidades Físicas e Grupos	132
B.4.7 Multiplicadores	133
B.4.8 Cálculo da reatividade	136
B.5 Entrada de Dados Usadas nas Simulações	137
B.5.1 Entrada de Dados - H5b	137
B.5.2 Entrada de Dados - Alvo Pb 660 MeV Dubna	157
C H5b	173
C.1 Introdução	173
C.1.1 Resultados para o núcleo	179
C.1.2 Conclusão	185
D Decaimento dos Produtos de Spallation	187
D.0.3 Solução com o Método de Matriz Exponencial	188
E Função Partição P	227
E.1 Aspectos computacionais da função P restritiva	231
E.2 Algoritmo para geração das diversas funções partições restritivas.	232

F	Cabeçalhos do código fonte do MCSMM e diagramas	233
F.1	Makefile	233
F.2	definedvalues.h	234
F.3	PamClass.h	235
F.4	TCanonical.h	240
F.5	TFragment.h	253
F.6	TPartitionHelper.h	258
F.7	TPartition.h	259
F.8	TRandomi.h	267
F.9	TSMM.h	269
F.10	TStorage.h	275
F.11	Gráficos de relacionamento das classes	284
	Referências Bibliográficas	291

Lista de Figuras

1.1	Esquema representativo de um ADS.	2
2.1	Descrição esquemática da reação de spallation seguido de evaporação e/ou fissão.	12
2.2	Divisão de regiões do núcleo consideradas no modelo de Bertini.	15
2.3	Esquema da cascata segundo Bertini.	16
2.4	Esquema do atravessar de uma superfície separadora das regiões de densidades diferentes.	16
2.5	Esquema de colisão entre partículas.	18
2.6	Esquema da cascata segundo Cugnon.	20
3.1	Estrutura simplificada do alvo de chumbo (diâmetro - 80 mm, comprimento - 308 mm). Amostras de espessura de 1 mm.	31
3.2	Perfil dos feixes de próton incidente na superfície do alvo (Retirada da ref. [55]).	33
3.3	Posicionamento das amostras e monitores por trás do alvo.	33
3.4	Distribuição da atividade específica dos radionuclídeos ao longo do alvo de <i>Pb</i> irradiados com prótons de 660 MeV.	34
3.5	Fluxo de prótons em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.	35
3.6	Fluxo de nêutrons em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.	35

3.7	Fluxo de pions em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.	35
3.8	Fluxo de alphas em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.	36
3.9	Atividade instantânea integrada do ^{185}Os para diversos participantes [65].	37
3.10	Atividade instantânea integrada do ^{85}Sr para diversos participantes [65].	37
3.11	Atividade integrada instantânea do ^{46}Sc para diversos participantes [65].	38
3.12	Atividade integrada do ^{207}Bi para diversos participantes [65]. . .	38
3.13	Atividade integrada do ^{60}Co para diversos participantes [65]. . .	38
3.14	Atividade integrada do ^{59}Fe para diversos participantes [65]. . .	39
3.15	Atividade integrada do ^{175}Hf para diversos participantes [65]. .	39
3.16	Atividade integrada do ^{203}Hg para diversos participantes [65]. .	39
3.17	Atividade integrada do ^{173}Lu para diversos participantes [65]. .	40
3.18	Atividade integrada do ^{183}Os para diversos participantes [65]. .	40
3.19	Atividade integrada do ^{83}Rb para diversos participantes [65]. . .	40
3.20	Atividade integrada do ^{183}Re para diversos participantes [65]. .	41
3.21	Atividade integrada do ^{88}Y para diversos participantes [65]. . .	41
3.22	Atividade integrada do ^{65}Zn para diversos participantes [65]. . .	41
3.23	Atividade integrada do ^{95}Zr para diversos participantes [65]. . .	42
3.24	Distribuição da atividade do ^{95}Nb ao longo do Alvo para diversos participantes [65].	42
3.25	Distribuição da atividade do ^{183}Re ao longo do Alvo para diversos participantes [65].	43

4.1	Ocupação média em função dos níveis de prótons para diversos instantes da cascata juntamente com um ajuste da função partição na temperatura.	51
4.2	Ocupação média em função dos níveis de prótons para diversos instantes comparadas entre si.	52
4.3	Ocupação média em função dos níveis de nêutron para diversos instantes da cascata juntamente com um ajuste da função partição na temperatura.	52
4.4	Ocupação média em função dos níveis de nêutrons para diversos instantes comparadas entre si.	53
4.5	Chi-quadrado das distribuições de níveis em função do tempo. .	53
4.6	Secção de choque de fotofissão calculada com o CRISP comparada com dados experimentais [76, 77, 78, 79] para ^{237}Np ^{208}Pb ^{235}U e ^{238}U	57
4.7	Parábolas de evaporação obtidas com o CRISP para a reação de Spallation com próton de 1000MeV no Chumbo comparadas com dados experimentais [80].	58
4.8	Parábolas de evaporação obtidas com o CRISP para a reação de Spallation com próton de 800MeV no Ouro comparadas com dados experimentais [81].	59
4.9	Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação de fotofissão no ^{238}U (50MeV a 3500MeV) obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.	60
4.10	Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação de fotofissão no Am e Np (50MeV) obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.	60
4.11	Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{197}\text{Au} + p(800\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.	61

4.12	Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{208}\text{Pb} + p(500\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.	61
4.13	Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{208}\text{Pb} + p(1000\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.	62
4.14	esquema do processo de fissão.	63
4.15	Volume da região estrangulada.	63
4.16	Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 18$ a $Z = 26$, comparadas com dados experimentais [81].	66
4.17	Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 27$ a $Z = 35$, comparadas com dados experimentais [81].	67
4.18	Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 36$ a $Z = 45$, comparadas com dados experimentais [81].	67
4.19	Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 46$ a $Z = 49$, comparadas com dados experimentais [81].	68
5.1	Processo de Multi-fragmentação.	74
5.2	Diagrama de Fase do sistema nuclear, a região gasosa consiste de um sistema composto somente de núcleons livres e a região do liquido de um sistema composto de núclídeos pesados	76
5.3	Esquemática da energia em função do raio e barreira de Fragmentação.	81
5.4	Algoritmo do processo.	87
5.5	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{10}Ne e ^{11}Na	88

5.6	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{12}Mg$, $_{13}Al$, $_{14}Si$ e $_{15}P$ comparadas com dados experimentais.	88
5.7	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{16}S$, $_{17}Cl$, $_{18}Ar$ e $_{19}K$ comparadas com dados experimentais.	89
5.8	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{20}Ca$, $_{21}Sc$, $_{22}Ti$ e $_{23}V$ comparadas com dados experimen- tais.	89
5.9	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{24}Cr$, $_{25}Mn$, $_{26}Fe$ e $_{27}Co$ comparadas com dados experi- mentais.	90
5.10	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{8}O$, $_{9}F$, $_{10}Ne$ e $_{11}Na$	91
5.11	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{12}Mg$, $_{13}Al$, $_{14}Si$ e $_{15}P$ comparadas com dados experimentais.	92
5.12	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{16}S$, $_{17}Cl$, $_{18}Ar$ e $_{19}K$ comparadas com dados experimentais.	92
5.13	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{20}Ca$, $_{21}Sc$, $_{22}Ti$ e $_{23}V$ comparadas com dados experimen- tais.	93
5.14	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{24}Cr$, $_{25}Mn$, $_{26}Fe$ e $_{27}Co$ comparadas com dados experi- mentais.	93
5.15	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{3}Li$, $_{4}Be$, $_{5}B$ e $_{6}C$	94
5.16	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{7}N$, $_{8}O$, $_{9}F$ e $_{10}Ne$ comparadas com dados experimentais . .	95

5.17	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{11}Na$, $_{12}Mg$, $_{13}Al$ e $_{14}Si$ comparadas com dados experimentais.	95
5.18	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{15}P$, $_{16}S$, $_{17}Cl$ e $_{18}Ar$ comparadas com dados experimentais.	96
5.19	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{19}K$, $_{20}Ca$, $_{21}Sc$ e $_{22}Ti$ comparadas com dados experimentais.	96
5.20	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{23}V$, $_{24}Cr$, $_{25}Mn$, $_{26}Fe$ comparadas com dados experimentais.	97
5.21	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{8}O$, $_{9}F$, $_{10}Ne$ e $_{11}Na$ comparadas com dados experimentais.	98
5.22	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{12}Mg$, $_{13}Al$, $_{14}Si$ e $_{15}P$ comparadas com dados experimentais.	99
5.23	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{16}S$, $_{17}Cl$, $_{18}Ar$ e $_{19}K$ comparadas com dados experimentais.	99
5.24	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{20}Ca$, $_{21}Sc$, $_{22}Ti$ e $_{23}V$ comparadas com dados experimentais.	100
5.25	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{24}Cr$, $_{25}Mn$, $_{26}Fe$ e $_{27}Co$ comparadas com dados experimentais.	100
5.26	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para $_{7}N$, $_{8}O$, $_{9}F$ e $_{10}Ne$ comparadas com dados experimentais.	101
5.27	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para $_{11}Na$, $_{12}Mg$, $_{13}Al$ e $_{14}Si$ comparadas com dados experimentais.	102
5.28	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para $_{15}P$, $_{16}S$, $_{17}Cl$ e $_{18}Ar$ comparadas com dados experimentais.	102

5.29	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para $_{19}K$, $_{20}Ca$, $_{21}Sc$ e $_{22}Ti$ comparadas com dados experimentais.	103
5.30	Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para $_{23}V$, $_{24}Cr$, $_{25}Mn$ e $_{26}Fe$ comparadas com dados experimentais.	103
5.31	Secção de choque de produção em função do número de massa obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM comparativamente com os resultados obtidos via simulação MCNPX/ISABEL/ABLA para a reação $Fe + p(750MeV)$ e com dados experimentais.	105
5.32	Secção de choque de produção em função do número de massa obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM comparativamente com os resultados obtidos via simulação MCNPX/BERTINI/DESNER para a reação $Fe + p(1000MeV)$ e com dados experimentais. . .	105
A.1	Níveis de Fermi em relação ao poço de Potencial.	115
B.1	Esquema do transporte das partículas no MCNPX.	119
B.2	Probabilidades de reação.	120
B.3	Geometria exemplo 1.	127
B.4	Geometria exemplo 2.	128
C.1	Cortes horizontal e vertical da modelagem de arranjo (LEU AD-SRF (H5b)) do núcleo no nível do alvo.	174
C.2	Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos obtidos por este trabalho(IPEN) e pelo VINCA Institute, utilizando o feixe de dêuterons.	178
C.3	Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos obtidos por este trabalho(IPEN) e pelo VINCA Institute, utilizando o feixe de prótons.	178

C.4	Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos de Urânio e Chumbo obtidos por este trabalho(IPEN) e pelo VINCA Institute.	178
C.5	Espectro de nêutrons na célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.	180
C.6	Espectro de nêutrons ao lado célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.	181
C.7	Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o núcleo na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.	181
C.8	Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o tanque na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.	182
C.9	Espectro de nêutrons na célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.	183
C.10	Espectro de nêutrons ao lado célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.	183
C.11	Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o núcleo na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.	184
C.12	Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o tanque na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.	184
D.1	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{110}Ag	191
D.2	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{194}Au	192
D.3	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{195}Au	193
D.4	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{207}Bi	194
D.5	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{139}Ce	195
D.6	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{60}Co	196
D.7	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{59}Fe	197
D.8	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{172}Hf	198

D.9	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{175}Hf .	199
D.10	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{203}Hg .	199
D.11	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{194}Ir .	200
D.12	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{172}Lu .	201
D.13	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{173}Lu .	202
D.14	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{95}Nb .	203
D.15	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{195}Os .	204
D.16	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{83}Rb .	205
D.17	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{183}Re .	206
D.18	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{102}Rh .	206
D.19	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{46}Sc .	207
D.20	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{75}Se .	207
D.21	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{85}Sr .	208
D.22	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{121}Te .	209
D.23	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{88}Y .	210
D.24	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{65}Zn .	211
D.25	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{88}Zr .	212
D.26	Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{95}Zr .	213
E.1	Descrição da figura mostrada.	229
F.1	relacionamento e chamadas de <code>definedvalues.h</code> .	284
F.2	relacionamento e chamadas de <code>MCSMM.cpp</code> .	285
F.3	relacionamento e chamadas de <code>TCanonical.cpp</code> .	285
F.4	relacionamento e chamadas de <code>TFragment.h</code> .	286
F.5	relacionamento e chamadas de <code>TRandom.h</code> .	286
F.6	relacionamento e chamadas de <code>TSMM.cpp</code> .	287
F.7	relacionamento e chamadas de <code>TSMM.cpp</code> .	288
F.8	relacionamento e chamadas de <code>TStorage.cpp</code> .	289

Lista de Tabelas

3.1	Distribuição relativa da corrente (em unidades relativas) - Retirada da ref. [55]	32
3.2	Tabela comparativa para a atividade total do alvo levando em conta a o decaimento e ativação [Valor calculado por dado experimental](da Ref. [66])	45
4.1	Comparação do modelo de nêutrons prontos e dados avaliados para diversas reações e alvos.	65
B.1	Principais unidades usadas no MCNPX	124
B.2	Principais superfícies	126
B.3	Reações mais importantes.	134
C.1	Características dos feixes - Energia do Feixe, Intercidades Máxima e Numero de íons injetada para o acelerador TESLA.	175
C.2	As especificações dos alvos a serem calculados.	175
C.3	Composições dos alvos.	176
C.4	Multiplicidade de nêutrons para diferentes alvos obtidas com o feixe de prótons.	177
C.5	Multiplicidade de nêutrons para diferentes alvos obtidas com o feixe de dêuterons.	177
C.7	Multiplicação (k_{source}) em função do feixe e do alvo obtidos pelo VINCA Institute.	179

C.8	Multiplicação (k_{eff}) e tempo de geração (Λ)	179
C.6	Multiplicação (k_{eff}) e tempo de geração (Λ)	179

Capítulo 1

Introdução

Um sistema nuclear subcrítico acionado por fonte ("Accelerator Driven System- ADS) é um reator inovador, idealizado com o propósito de ser um reator dedicado à transmutação (ou queima) de resíduos de alta (transurânicos: Pu , Am , Np , entre outros e produtos de Fissão de Longa Meia Vida tais como: ^{99}Tc , ^{129}I , ^{135}Cs) [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Um ADS consiste, basicamente, de um sistema rápido, subcrítico, mantido em estado estacionário por uma fonte externa de nêutrons.

Um acelerador de prótons (Ciclotron ou Linac) produz um feixe (~ 1 GeV; poucos mA) que incide sobre um alvo (Chumbo, Chumbo-Bismuto) onde os nêutrons são produzidos por reação de "spallation". Estes nêutrons são usados como fonte externa no núcleo subcrítico ($k_{eff} \sim 0,95 - 0,97$), constituído de combustíveis em forma metálica, óxido, ou nitreto, como material nuclear (U , Th , Pu , actínídeos menores, Am , Np , Co , entre outros). A energia é gerada com um ganho positivo e a incineração do plutônio e dos Actínídeos menores é possível, além de uma possível regeneração (U/Pu ; Th/U). O refrigerante ("loop" ou piscina) pode ser constituído de sódio, chumbo ou chumbo-bismuto - fundidos, ou gás (hélio). O sistema está esquematizado na Figura 1.1.

Atualmente os reatores térmicos comerciais (LWR, CANDU) operam utilizando ciclo de combustível aberto, e armazenando os resíduos em instalações

Figura 1.1: Esquema representativo de um ADS.

interinas. Alguns países, como França e Japão, reprocessam os materiais físséis para a reutilização em reatores térmicos. Está ocorrendo, atualmente, um grande acúmulo de elementos radioativos, uma vez que durante a vida útil de um reator PWR são descarregados toneladas de combustível.

Alguns isótopos produzidos (elementos transurânicos (TRU) e produtos de fissão de meia vida longa (LLFF)) são extremamente radiotóxicos, e dado sua grande meia vida, são necessários milhares de anos para que sua radiotoxicidade decaia ao nível da radioatividade natural. A questão de armazenagem de combustíveis queimados tem servido de argumento para a oposição à Energia Nuclear.

Desta forma se faz necessário o gerenciamento desses resíduos ou pelo decaimento natural, através do isolamento destes da biosfera pela instalação de barreiras naturais e/ou de engenharia, com capacidade de isolamento por milhares de anos, os denominados repositórios, ou pela transmutação dos resíduos de longa vida em resíduos de média ou pequena meia vida de maneira a reduzir os requisitos de tempo de isolamento.

Nesse panorama entra o conceito de Partição e Transmutação (P&T). Um relatório da NEA OECD - "Comparative study on ADS and FR in Advanced Nuclear Fuel Cycles" [7], concluiu que embora a utilização de reatores dedicados

à transmutação não elimine a necessidade de repositórios apropriados, estes sistemas reduzirão os requisitos no tempo de armazenagem por um fator 100. Além disso, na conferência anual da AIEA de 2004, este tópico foi tema em dois fóruns científico da Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA) [8].

O ADS é o candidato mais cotado para transmutador de resíduos dedicado, pois além de ser intrinsecamente seguro em relação a acidentes de criticidade, pois sendo subcrítico pode conter grande quantidade de elementos transurânicos. Estes sistemas são eficientes na transmutação, regeneração de combustível e geram energia. As características inovadoras do ADS tem motivado um esforço internacional no desenvolvimento de diferentes conceitos de ADS. O estado da arte tem sido relatada por vários autores [1, 4, 6, 9]. Vale a pena ressaltar que as atenções internacionais se voltaram, efetivamente ao conceito de ADS após a proposta de C. Rubbia [10, 11, 12], de um sistema amplificador de energia rápido ("Fast Energy Amplifier"), seguida da proposta de um conceito com modificações, enfatizando a transmutação [13], mostrando a capacidade do conceito de eliminar o inventário de TRU do parque instalado na Espanha (9 PWR) [14].

O alvo de "spallation" é o termo-fonte de nêutrons para o ADS e constitui a interface física e funcional entre o acelerador e o núcleo subcrítico, portanto o conhecimento do número de nêutrons emitidos por próton incidente (multiplicidade), a distribuição de energia e angular destes nêutrons, a energia depositada no alvo, e a distribuição dos produtos de "spallation", se faz necessário, pois são parâmetros fundamentais no projeto do alvo de um ADS. Sabendo, por exemplo, a distribuição angular e energética de nêutrons que atravessa a superfície que separa a fonte e o núcleo subcrítico, pode-se definir uma fonte superficial e introduzi-la na equação de transporte de nêutrons [15, 16] que descreve o núcleo subcrítico. Conhecida a fonte de nêutrons e de outras partículas, o transporte destas pode ser realizado através de simulação Monte Carlo, através, por exem-

plo, do código MCNP [17], ou no caso de partículas neutras, através da solução numérica da equação de transporte, como por exemplo o método de ordenadas discretas, ou S_N , como utilizado nos códigos TORT [18] ou DORT [19].

A reação "spallation"¹ [20] consiste de uma reação nuclear na qual uma partícula relativística, como, por exemplo, um hádron com uma dada energia ($E \sim 100 \text{ MeV} - 2 \text{ GeV}$), interage com os núcleons no núcleo atômico. Este processo pode ser dividido em duas fases. Primeiramente, o estágio denominado cascata intra-nuclear, onde a partícula incidente realiza espalhamentos múltiplos com os núcleons do núcleo, depositando parte de sua energia no núcleo, e partículas secundárias também são emitidas pelo núcleo ($T \sim 10^{-22} \text{ s}$). Posteriormente, no estágio denominado evaporação e/ou fissão, o qual envolve a dissipação de energia através da emissão de partículas secundárias (n, p, α) do núcleo excitado, ou competitivamente junto com o processo de fissão ($T \sim 10^{-16} \text{ s}$). Em resumo, a reação resulta na emissão de uma série de partículas secundárias, como por exemplo: nêutrons e prótons, as quais são emitidas durante a evolução temporal da reação. Existe uma série de modelos teóricos que descrevem estes fenômenos, tais como os conhecidos modelo de Bertini [21] e o de Cugnon [22].

Tais modelos nucleares são necessários devido à falta de dados experimentais avaliados na região de energia considerada, de forma que esses modelos são de importância fundamental para o estudo e projeto de fontes de Spallation e são os temas centrais deste trabalho.

Dentre os principais modelos existentes destaca-se o modelo de cascata intranuclear de Bertini [21] que foi proposto em 1963 e descreve o núcleo dividido em três regiões esféricas, concêntricas, com cada região possuindo uma dada densidade de núcleons constante e um dado potencial nuclear. A razão entre

¹Spallation é um processo no qual fragmentos de material ("spall") são ejetados do corpo devido impacto ou tensão. Em português a tradução literal seria espalação (s.f de origem francesa), que em princípio significa reduzir à lascas ou fragmentos. Neste trabalho se utilizara a palavra inglesa, tendo em vista que esta nomenclatura é frequentemente utilizada pela comunidade científica.

a densidade de nêutrons e prótons para cada região e como um todo é, por hipótese, considerada constante. O princípio de Pauli é tratado supondo que os núcleons criados são os núcleons produzidos no alvo, com uma energia maior que o nível de Fermi associado a uma dada zona. Como o meio é considerado contínuo o critério de colisão usado é o livre caminho médio. Este modelo considera também uma energia de corte (“Bertini cut off Energy”), no qual, abaixo desta, a cascata intra-nuclear cessa dando espaço ao processo de evaporação/fissão. Outros modelos de cascata (vide Isabel [23]) são baseados no modelo de Bertini, mas supõe uma quantidade maior de regiões e outros potenciais nucleares, sendo que a razão entre as densidades é também mantida constante.

Já o modelo de cascata intranuclear de Cugnon [22] supõe o núcleo como uma esfera com uma densidade constante e um dado raio nuclear. O núcleo não é considerado contínuo, mas sim um conjunto de núcleons em movimento, mantido coeso por um potencial e com isso possuem sempre uma possibilidade de escape. Quando um núcleon entra no núcleo, o critério de espalhamento usado é uma distância mínima de aproximação e dependendo da energia do núcleon, o espalhamento é considerado elástico ou inelástico. Neste modelo, a dinâmica de muitos corpos é utilizada. Um corte no tempo de reação é realizado de forma a cessar a cascata intranuclear e dar espaço aos processos de des-excitação, de forma que, ao final da cascata, obtém-se as energias de excitação do núcleo e distribuições desejadas.

Para o processo de des-excitação usam-se os modelos baseados no modelo de Weisskopf e Ewing [24, 25] para a evaporação e para fissão o clássico modelo de Born/Wheeler [26]. Outros modelos de fissão para altas energias são comumente usados, tais como o modelo de ORNL(Oak Ridge National Laboratory) e o modelo de RAL (Rutherford’s Appleton Laboratory) [17].

No Brasil, os grupos de física nuclear do Instituto de Física da Universidade

de São Paulo (IFUSP) e do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) desenvolveram modelos teóricos para simulação da reação de spallation, os quais foram incorporados a um programa denominado CRISP (Colaboração RIo-São Paulo), que é uma evolução dos códigos anteriormente desenvolvidos pelos grupos de Física Nuclear do Rio de Janeiro e de São Paulo o qual conta também com o MCEF (Monte Carlo Evaporation Fission)[27], que simula os processos de fissão e evaporação nuclear. Os acoplamentos desses dois códigos com a inclusão de alguns melhoramentos resultaram no código Monte Carlo, o CRISP [27, 28, 29]. O modelo de cascata no CRISP supõe uma densidade nucleônica homogênea em uma esfera (o núcleo como uma esfera), os núcleons estão confinados em um poço esférico. Dentro desta esfera os núcleons estão em posições escolhidas de forma aleatória, e a distribuição dos momentos são escolhidos de acordo com o modelo de gás de Fermi (vide Apêndice A) confinado no poço. com estas hipóteses inicia-se a cascata, usando um tratamento semi-clássico para todas as partículas as quais são seguidas durante a evolução temporal da reação. A colisão primária é realizada usando as secções de choque experimentais para a reação e a sequencia de eventos é finalizada no instante em que as colisões do sistema nuclear não dispuserem de energia para a produção ou escape de partículas.

Neste trabalho, o foco é a descrição detalhada destes modelos e principalmente as melhorias introduzidas no CRISP, com destaque na inclusão de um novo modelo, denominado multi-fragmentação, que será descrito ao longo deste trabalho.

Para a definição completa do termo fonte de nêutrons para ADS, ou para o projeto de alvos deste sistema é necessário, além do conhecimento da evolução temporal da reação de spallation, a descrição do transporte das partículas secundárias no meio que constitui o alvo, de maneira a se obter o número de nêutrons que deixam o alvo e suas distribuições de energia e angular, além da

energia depositada no alvo. Estes cálculos são realizados por simulação Monte Carlo [30] do transporte espacial dessas partículas secundárias. Dentre os vários códigos que realizam estes cálculos, destacam-se o LAHET, desenvolvido por Prael [31] de Los Alamos, e o FLUKA [32], desenvolvido no CERN.

Recentemente, foi desenvolvido o programa MCNPX [17] ("Monte Carlo N-Particle eXtended") [33], dedicado para cálculos de alvos de ADS, que além de permitir várias opções de modelos para a descrição do fenômeno de spallation, realiza o transporte de partículas em geral no meio material considerado por simulação Monte Carlo, para diversas faixas de energia. Este programa trata-se de uma junção, com melhoramentos, do clássico MCNP com o LAHET, sendo o programa mais aceito na comunidade internacional para estudos de ADS, contando com diversos modelos teóricos da reação de spallation, dentre esses o de Bertini, Cugnon e Isabel [23, 34].

Apesar destes códigos reproduzirem com boa precisão as reações nucleares de hádrons com núcleos pesados, as simulações de núcleos leves não fornecem resultados adequados principalmente por não ser levado em consideração o fenômeno de multi-fragmentação. Desta forma, neste trabalho o foco principal é o estudo deste fenômeno, e a introdução deste no código CRISP.

A multi-fragmentação do núcleo é uma reação nuclear na qual o núcleo excitado ($E \sim 3 - 4 \text{ MeV/A}$) se desintegra em vários fragmentos, obtendo com isso a formação de nuclídeos leves no sistema. Esta formação tem sua importância ressaltada em projeto de um ADS, uma vez que as partículas energéticas oriundas da fonte de Spallation poderão interagir com o material estrutural do sistema induzindo danos de Radiação no mesmo (e.g a interação de um próton vindo da fonte com um núcleo de Fe do material estrutural poderá formar um acúmulo de He que induzirá a formação de micro fissuras no material).

1.1 Considerações Preliminares

O foco deste trabalho é o estudo do termo fonte de um ADS, mais especificamente as reações nucleares induzidas em um alvo de "Spallation" (modelos e códigos).

O estudo contou com uma participação em um Projeto Coordenado de Pesquisa (CRP): "Analytical and Experimental Benchmark Analysis of ADS" com o objetivo de validar os códigos pré-existentes junto a Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA), bem como uma colaboração brasileira junto ao IFUSP com o uso e melhoramentos do código CRISP.

1.2 Objetivos

O objetivo desta tese é direcionado às reações nucleares presentes nos alvos dos sistemas subcríticos acionados por fonte. Devido a falta de dados nucleares avaliados experimentalmente, modelos nucleares são usados nas simulações desses sistemas. Os objetivos se resumem a um estudo detalhado dos principais modelos nucleares, seguido da implementação e validação dos códigos/modelos usados para a simulação de alvos de Spallation, bem como definições e projetos desses alvos. Para a validação destes códigos contamos a participação um trabalho comparativo realizado junto a Agência Nuclear de Energia Atômica, o qual tem como objetivo validar a metodologia de cálculo e diversos modelos através de uma análise comparativa com dados experimentais.

A produção de núclídeos leves no processo de spallation não é contemplada pelos modelos existentes e, para a análise desta produção, realizamos um estudo e implementação do modelo de multi-fragmentação do núcleo junto ao código CRISP.

1.3 Contribuições

As principais contribuições deste trabalho são as seguintes:

- Implementação da metodologia de cálculo de alvos de Spallation;
- Validação desta metodologia junto a um projeto coordenado de pesquisa;
- Desenvolvimento e implementação do módulo de multi-fragmentação e sua incorporação no código CRISP;
- Estudo e aprimoramento do cálculo de distribuição de massa dos fragmentos de fissão;
- Inclusão da produção de nêutrons prontos no modelo de fissão nuclear do código CRISP.

1.4 Organização do Trabalho

Inicialmente no Capítulo 2, apresentamos os conceitos e os principais modelos, com detalhes, usados para as reações de Spallation. A secção 2.1 tem por objetivo mostrar as peculiaridades dos modelos envolvidos em toda a fase da reação, iniciando pela fase de cascata nuclear descrito na subsecção 2.2 onde são descritos os principais modelos usados. Seguido pela subsecção 2.2.1 que descreve em algum detalhe a física envolvida na cascata intranuclear de Bertini e pela subsecção 2.2.2 que descreve a cascata segundo Cugnon. Na secção 2.3 comentamos brevemente os modelos de pré-equilíbrio. Seguindo, na secção 2.4 apresentamos os modelos de evaporação com ênfase no modelo de Weisskopf e comentamos sobre os modelos de fissão.

No Capítulo 3 apresentamos as especificações e resultados obtidos na participação no Projeto Coordenado de Pesquisa (CRP) da Agencia Internacional de Energia Atômica (AIEA), "Analytical and Experimental Benchmark Anal-

ysis of ADS”em particular no exercício ”Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in lead target exposed to 660 MeV proton”.

No Capítulo 4 apresentamos o código CRISP desenvolvido pelo IFUSP e pelo CBPF bem como resultados recentes obtidos com as modificações introduzidas neste trabalho. A secção 4.1 é dedicada ao módulo MCMC responsável pela simulação da cascata intranuclear no CRISP, na secção 4.2 apresentamos o modelo de evaporação do CRISP, o modulo MCEF e por fim, na secção 4.3, apresentamos o modelo responsável pela obtenção dos fragmentos de fissão recentemente incorporados no CRISP.

No Capítulo 5 apresentamos o modelo de Multi-fragmentação do Núcleo do núcleo implementado no CRISP. Inicialmente na secção 5.1 apresentamos a teoria envolvida em detalhes seguida do algoritmo e peculiaridades do código. Na secção 5.2 apresenta-se os resultados obtidos juntamente com os comentários finais (secção 5.2.6).

Por fim, no Capítulo 6 discutimos algumas conclusões gerais obtidas neste trabalho. Bem como nossa considerações finais e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Reações Nucleares de altas energias (“Spallation”)

A reação de spallation é uma reação nuclear na qual uma partícula relativística, como por exemplo, um próton (hádron) com uma energia na faixa de $\sim 100 \text{ MeV} - 2 \text{ GeV}$, interage com os núcleons no núcleo atômico ¹. Este processo pode ser dividido em duas fases, primeiramente, o estágio denominado cascata intra-nuclear, onde a partícula incidente realiza espalhamentos múltiplos com os núcleons no núcleo, depositando parte de sua energia, e partículas secundárias são emitidas. Posteriormente, no estágio denominado evaporação e/ou fissão, envolve a dissipação de energia, através da emissão de partículas secundárias (n, p, α , π , ou fragmentos de núcleos leves) do núcleo excitado, ou competitivamente através da fissão. A Figura 2.1 ilustra esquematicamente este processo no qual uma partícula, no caso um próton, interage com o núcleo dando início a cascata intranuclear, formando com isso um núcleo excitado que se estabiliza através de evaporação formando um produto de spallation frio ou fissiona.

Para a definição do termo fonte de nêutrons para ADS, ou para o projeto de alvos deste sistema é necessário, além do conhecimento da evolução temporal

¹Para a faixa de energia considerada, o comprimento de onda da partícula incidente (λ) é da ordem da distância entre os núcleons do núcleo e portanto a interação se dá núcleon a núcleon

Figura 2.1: Descrição esquemática da reação de spallation seguido de evaporação e/ou fissão.

da reação de spallation, a descrição do transporte das partículas secundárias no meio que constitui o alvo, de maneira a se obter o número de nêutrons que deixam o alvo e suas distribuições de energia e angular, além da energia depositada no alvo. Estes cálculos são realizados por simulação Monte Carlo do transporte espacial dessas partículas secundárias.

Existem, atualmente uma imensa quantidade de modelos teóricos voltados para descrever as reações nucleares de altas energias, bem como os processos posteriores de des-excitação. Dentre estes, destacam-se os modelos estocásticos de Bertini e de Cugnon.

Este capítulo apresenta os principais modelos utilizados na descrição dos fenômenos estudados afim de diferenciar suas peculiaridades.

2.1 Modelos

Anteriormente a 1963, os cálculos cascata intranuclear eram realizados por vários grupos, e.g o grupo de Metroplis et al. [35, 36]. Seus trabalhos foram baseados em um modelo nuclear, na qual a densidade do núcleon dentro do núcleo era suposta constante. Os resultados de seus trabalhos mostraram que os modelos explicavam muitos fenômenos, mas ainda havia divergências não negligenciáveis entre os experimentos e cálculos. Bertini, foi pioneiro, começou a investigar as discrepâncias usando um modelo nuclear aperfeiçoado. Em 1963,

propôs um novo modelo para o cálculo da cascata intranuclear [21].

Já os modelos para os estágios seguintes da reação, a evaporação, são derivados, geralmente, dos trabalhos de Weisskopf [24], Dostrovski [37, 38, 39], e Dresner [40].

Em suma, tais modelos para a cascata intranuclear geralmente seguem os núcleons de maneira clássica e considera o núcleo com um contínuo semelhante ao tratamento dado na difusão de partículas em um meio material. Os modelos de evaporação efetuam a des-excitação do núcleo excitado residual oriundo da fase de cascata fornecendo núcleos em estados energéticos menores. Porém a conexão entre estes dois modelos não é bem clara, sendo até um ponto delicado das simulações de reações próton-núcleo na região de alta energia. Tal conexão dá origem a modelos intermediários, os chamados modelos de pré equilíbrio.

A justificativa do emprego de justaposição de vários eventos de uma partícula única para a fase de cascata intra-nuclear é realizada mediante a hipótese de que o comprimento de onda do núcleon incidente é muito menor que o raio do núcleo, ou seja a interação se dá núcleon a núcleon.

Já o modelo de evaporação é justificado se a energia de excitação do núcleo oriundo da cascata não é muito superior à profundidade do poço de potencial do modelo (da ordem de 40 MeV), caso contrário a transição das fases de cascata intra-nuclear e evaporação não pode, a princípio, ser realizada diretamente. Por esta razão modelos intermediários são usados para a conexão destas, os modelos de pré-equilíbrio [41].

2.2 Cascata Intranuclear

O modelo mais consagrado de cascata intra-nuclear é o modelo de Bertini, onde próton incidente colide com um dos vários núcleons do núcleo alvo, e volta a colidir sucessivamente com o núcleo invariado e então a cascata é de-

envolvida. O cálculo de cascata cessa quando um limite energético é atingido em relação ao fundo da barreira potencial considerada. Porém, as colisões entre outros núcleons não são consideradas, esta limitação é reconsiderada em outros modelos tais como Iljinov et al. [42], Cugnon et al. [22, 43] e Yariv e Fraenkel [23, 34] onde as colisões de todos os núcleons do núcleo são realizadas e que por sua vez, acarreta um maior tempo de cálculo e problemas físicos de ocupação de níveis. No entanto, esses cálculos são muito demorados e, provavelmente, restrito a cálculos específicos, como aqueles necessários para estimar a produção de hélio em materiais estruturais.

O modelo inicial de Bertini é ainda o mais utilizado, mas melhoramentos foram recentemente realizados [44], em particular, a utilização das secções de choque núcleon-núcleon e pión-núcleon mais recentes que estão disponíveis atualmente. Esforços estão sendo realizados para usar os códigos mais recentes, como o código de ISABEL de Yariv et al. (baseado no modelo Bertini) incorporado como uma opção do código LAHET [31], o modelo de Cugnon do sistema de GEANT [45] do CERN também esta incorporado no LAHET, entre outros modelos.

2.2.1 Cascata Intranuclear de Bertini

O modelo de cascata intranuclear de Bertini foi proposto em 1963 por Bertini, e descreve o núcleo dividido em três regiões esféricas concêntricas (de forma a reproduzir melhor o potencial nuclear). A Figura 2.2 exemplifica esta construção, com cada região possuindo uma dada densidade nucleônica constante e um dado potencial nuclear característico, o meio é considerado como um contínuo.

A razão entre a densidade de nêutrons e prótons para cada região e como

Figura 2.2: Divisão de regiões do núcleo consideradas no modelo de Bertini.

um todo é, por hipótese, considerada constante, i.e.

$$\frac{\rho_{n_i}}{\rho_{p_i}} = \frac{\rho_n}{\rho_p} = \frac{N}{Z}, \quad (2.1)$$

onde os índices n_i e p_i se referem a densidade de nêutrons e prótons de uma e o região específica i . O princípio de Pauli é tratado supondo que somente os núcleons criados com uma energia maior que o nível de Fermi associado à região são armazenados para a simulação de Monte Carlo.

Como o meio é considerado contínuo o critério de colisão usado é o livre caminho médio, que para este caso é dado por:

$$\lambda_i = \frac{A}{n(Z\sigma_{ip} + (A-Z)\sigma_{in})}, \quad i = n, p, \quad (2.2)$$

onde o índice i se refere aos prótons e nêutrons, n é a densidade de núcleons do núcleo, σ_{pp} , σ_{nn} e σ_{np} são as seções de choque para espalhamento de próton-próton, nêutron-nêutron e próton-nêutron, respectivamente. Este modelo considera também uma energia de corte (cinética + potencial + massa) (“Bertini cut-off Energy”), na qual abaixo desta a cascata intra-nuclear cessa, dando espaço ao processo de evaporação.

A Figura 2.3 exemplifica um ramo da cascata de Bertini na qual é exemplificado o processo dinâmico (espalhamentos múltiplos e produção de ressonâncias e o posterior decaimento (produção de píons) no desenrolar da cascata) do

núcleon no interior do núcleo.

Figura 2.3: Esquema da cascata segundo Bertini.

O tratamento utilizado para a passagem de uma partícula de uma região 1 a outra região 2 de diferente densidade é considerado da seguinte forma (vide Figura 2.4): Considere o plano $P = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$, com $\mathbf{p}_1$ o momento da partícula antes de atravessar a superfície que delimita as regiões 1 e 2, e $\mathbf{p}_2$ o momento após atravessar.

Figura 2.4: Esquema do atravessar de uma superfície separadora das regiões de densidades diferentes.

Se $\mathbf{e}_r$ e $\mathbf{e}_t$ os vetores unitários normal e tangencial à superfície que separa as regiões, e $p_{i\parallel} = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{e}_t$ e $p_{i\perp} = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{e}_r$ as componentes tangencial e perpendicular à superfície que separa os dois meios, com $i = 1, 2$. Então podemos dizer que

$$p_{1\parallel} - p_{2\parallel} = 0, \quad (2.3)$$

e

$$p_{1\perp} - p_{2\perp} \neq 0, \quad (2.4)$$

Da invariância do quadrimomento $\mathbf{p}_\nu = \begin{pmatrix} E \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$ então $E_1^2 - \mathbf{p}_1^2 = E_2^2 - \mathbf{p}_2^2$, onde é assumido $c = 1$. Segue daí que as condições de contorno do atravessar são

$$p_{1\parallel} - p_{2\parallel} = 0, \quad (2.5)$$

$$E_1^2 - \mathbf{p}_1^2 = E_2^2 - \mathbf{p}_2^2. \quad (2.6)$$

Como a partícula pode ser transmitida ou refletida, o ângulo crítico de reflexão também pode ser obtido de

$$\sin(\theta_1) = \frac{p_{1\parallel}}{|\mathbf{p}_1|}, \quad (2.7)$$

$$\sin(\theta_2) = \frac{p_{2\parallel}}{|\mathbf{p}_2|}, \quad (2.8)$$

ou seja, o ângulo de espalhamento é obtido por

$$\sin(\theta_2) = \frac{|\mathbf{p}_1|}{|\mathbf{p}_2|} \sin(\theta_1). \quad (2.9)$$

Enfim, podemos escrever o ângulo de reflexão total do núcleon. para que a reflexão seja total ($\theta_2 = \frac{\pi}{2}$), então $p_{1\perp}^2 = E_1^2 - E_2^2$ e $\cos \theta_1^{max} = \frac{p_{1\perp}}{|\mathbf{p}_1|}$, ou

$$\cos \theta_1^{max} = \frac{\sqrt{E_1^2 - E_2^2}}{|\mathbf{p}_1|}, \quad (2.10)$$

Vejamos agora como é tratado a interação entre o projétil e um núcleon do núcleo. Considere para isso a interação entre dois alvos idênticos, caracterizadas por uma densidade ρ_i e um momento p_i , com $i = 1, 2$ indicando cada uma destas. A probabilidade invariante da interação entre os dois alvos é definida

por [46]

$$W_{12} = v_{12} \sigma_{12} \rho_1 \rho_2, \quad (2.11)$$

onde v_{12} a velocidade relativa entre as partículas e σ_{12} a secção de choque de interação entre o alvo 1 com momento $\mathbf{p}_1$ com o alvo 2 com momento $\mathbf{p}_2$. Supondo agora o segundo alvo como um contínuo, podemos escrever

$$W_{12} = \rho_1 \int v_{12}(\mathbf{p}_2) \sigma_{12}(\mathbf{p}_2) \frac{d\rho_2}{d\mathbf{p}_2} d\mathbf{p}_2, \quad (2.12)$$

onde o termo $\frac{d}{d\mathbf{p}_2}$ significa o gradiente em relação as coordenadas do vetor $\mathbf{p}_2$, as grandezas relativas ao alvo 1 são consideradas parâmetros. O número de partículas de 1 entrando em 2 na superfície S unitária por unidade de tempo t é $n_1 = \rho_1 v_1 S t$, segue daí que a secção de choque de interação é

$$\omega = \frac{W_{12}}{\rho_1 v_1} = \frac{1}{v_1} \int v_{12}(\mathbf{p}_2) \sigma_{12}(\mathbf{p}_2) \frac{d\rho_2}{d\mathbf{p}_2} d\mathbf{p}_2 = \frac{1}{\lambda}, \quad (2.13)$$

onde v_1 é a velocidade no referencial de laboratório do projétil incidente no núcleo e λ_1 é o livre caminho médio (vide Figura 2.5).

Figura 2.5: Esquema de colisão entre partículas.

Segue daí que a probabilidade do núcleon interagir no intervalo $[x, x + dx]$ é definida por

$$dP(x) = \omega \exp(-\omega x) dx. \quad (2.14)$$

Então a probabilidade de interação em um intervalo $[x, x + dx]$, isto é a probabilidade do projétil interagir dentro do núcleo após percorrer uma distância

x , é

$$P(x) = 1 - \exp(-\omega x). \quad (2.15)$$

A secção de choque ω depende da energia e geralmente não é possível de se obter uma forma fechada para σ_{12} , então a aproximação numérica

$$\omega = \frac{1}{v_1} \sum v_{12} \sigma_{12} \frac{d\rho_2}{d\vec{p}_2} \Delta \vec{p}_2, \quad (2.16)$$

é realizada para obter ω . O caminho desenvolvido pelo projétil é amostrado segundo 2.15 e a cascata é com isso realizada. Após a cascata intranuclear o núcleo excitado é obtido, e sua energia de excitação é dada por

$$E^* = \sum_{par=0}^{N_{par}} (\epsilon_{par} - \epsilon_F) + \sum_{bur=0}^{N_{bur}} (\epsilon_{bur} - \epsilon_F), \quad (2.17)$$

onde o primeiro termo do lado direito é a soma das energias cinéticas das partículas produzidas na cascata comparada com a energia de Fermi (E_f) do meio, e o segundo termo é a soma das energias dos buracos criados no meio comparados novamente com a energia de Fermi do meio.

2.2.2 Cascata Intranuclear de Cugnon

Cascata intranuclear de Cugnon supõe o núcleo como uma esfera com uma densidade constante e um dado raio nuclear. O núcleo não é considerado contínuo, mas sim um conjunto de núcleons em movimento. O raio nuclear é dado pela relação

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}}, \quad (2.18)$$

onde r_0 é uma constante e A o número de núcleons do núcleo.

Quando um núcleon incide na superfície do núcleo este pode ser transmitido ou refletido. Para um poço esférico de profundidade constante V_0 a probabili-

dade de transmissão é dada por

$$T = \frac{4p\sqrt{p^2 - 2mV_0 + V_0^2}}{\left(p + \sqrt{p^2 - 2mV_0 + V_0^2}\right)}, \quad (2.19)$$

onde p é o momento do núcleon incidente. Se o núcleon entra na matéria nuclear ele é considerado como parte do meio e é descrito da mesma forma que e os outros núcleons do núcleo. Como consequência desta descrição, o critério de interação (espalhamento elástico ou inelástico) entre os núcleons é agora uma distância mínima de aproximação entre núcleons, que é função da secção de choque total de interação (ilustrada na Figura 2.6 que exemplifica os espalhamentos, produção e decaimento realizados por um núcleon segundo o modelo de Cugnon), i.e,

$$d_{min} = \sqrt{\frac{\sigma_t}{\pi}}, \quad (2.20)$$

momento final das partícula após a interação é estimado de acordo com as leis de conservação e secções de choque experimentais.

Figura 2.6: Esquema da cascata segundo Cugnon.

Quanto ao espalhamento inelástico ocorre que píons são criados e partículas delta são excitadas de acordo com as seguintes reações

$$NN \longrightarrow N\Delta, \quad (2.21)$$

$$\Delta \longrightarrow N\pi, \quad (2.22)$$

tais canais de reação são escolhidos de maneira aleatória de acordo com a secção de choque das reações.

Desta forma a cascata é desenvolvida núcleo a núcleo até que um corte no tempo de reação (poucos $\frac{fm}{c}$) seja realizado de forma a cessar a cascata intranuclear e dar espaço aos processos de des-excitação ("Cugnon time cut-off"). O tempo de corte é geralmente considerado como sendo $\sim 25\frac{fm}{c}$ [44].

A energia de excitação do núcleo após a cascata pode ser obtida pela lei de conservação

$$E_0 = E^* + S + \sum_{l=0}^{N_{e,j}} E_{ej,l} + \sum_{l=0}^{N_\pi} E_{\pi,l}, \quad (2.23)$$

onde E_0 , E^* , $E_{ej,l}$ e $E_{\pi,l}$ são respectivamente a energia total inicial do sistema, energia de excitação no final da cascata, Energia das partículas ejetadas e energia dos píons ejetados. Sendo S a energia de separação, a energia mínima exigida para retirar todos os núcleos e píons a serem ejetados do núcleo no estado fundamental, logo podemos escrever $S = (A_{restante} - A_{alvo})(V_0 - E_f)$, onde V_0 é o potencial nuclear e E_f é a energia de Fermi, de forma que a energia remanescente no núcleo é dada por

$$E^* = T_0 - S - \sum_{l=0}^{N_{e,j}} T_l - \sum_{l=0}^{N_\pi} \epsilon_{\pi,l}. \quad (2.24)$$

onde T_l é a energia cinética da l -ésima partícula ejetada.

2.3 Fase de pré-equilíbrio

Os modelos de cascata intra-nuclear necessitam de justificação para as energias do núcleon (dentro do núcleo) em torno de 100-150 MeV. Modelos de

pré-equilíbrio [41, 47, 48] tem sido utilizados há algum tempo na física nuclear neste domínio da energia. Esses modelos seguem uma população de partículas excitadas em um gás de Fermi por meio de uma equação mestra (uma função paramétrica adotada). Os estados destas partículas são caracterizadas por sua fuga de partículas e larguras de amortecimento (parâmetros). As distribuições angulares são associados com as partículas de escape.

Em certo sentido, modelos de pré-equilíbrio permitem uma fácil adaptação fenomenológica da distribuição angular do que a cascata intranuclear, uma vez que os parâmetros do modelo são ajustados para melhor reproduzir esses dados. Existem muitas versões de modelos de pré-equilíbrio, mas infelizmente não há critérios claros para escolher entre eles, exceto a sua capacidade de reproduzir os dados experimentais.

2.4 Fase de Evaporação e Fissão

Os modelos de evaporação geralmente se baseiam no modelo de Weisskopf [24], alguns poucos usam o modelo de Hauser-Feshbach [49].

A aplicação do formalismo quântico para descrever a emissão de partículas por um núcleo pesado, é em princípio, inaplicável ou inviável pois se trata de uma reação entre muitos corpos.

Tendo isto em vista Bohr [50] propôs a separação do problema em duas fases distintas: a formação do núcleo composto e o processo de desintegração. Esta visão possibilita, para núcleos pesados, a aplicação de analogias termodinâmicas para tratar o problema de emissão de partículas pelo núcleo excitado, por exemplo, após a reação nuclear entre uma partícula e o núcleo, obtemos a formação de um núcleo composto cuja a energia armazenada por este núcleo pode ser comparada com a energia de um sólido ou líquido. Tal analogia foi proposta primeiramente por Frenkel [51], também devido a ele a analogia entre a ex-

pulsão de partículas pelo núcleo excitado com o processo de evaporação de um líquido.

Ao aplicarmos os métodos estatísticos à processos nucleares devemos resguardar algumas condições de efetibilidade do método. Assim, devemos tratar núcleos pesado (de forma a obtermos processos markovianos) e altamente excitados (estados quânticos quase contínuos ²).

Considere um núcleo A com energia de excitação E_A , supondo que seja maior que a energia de ligação de uma partícula elementar (próton, nêutron, etc.). A excitação pode ser produzida no núcleo, por exemplo, pela absorção de um gama (γ) ou colisão com um nêutron (n), formando o núcleo composto A .

Antes da colisão a partícula deve ter uma energia $E_A - E_0$, a energia de ligação da partícula limitada no núcleo no estado fundamental. A secção de choque para a colisão, a principio, é facilmente determinada. Para que este processo estatístico seja válido a partícula incidente deve ser suficientemente energética ($\sim 3 \text{ MeV}$ para nêutrons) , isto , o comprimento de onda da partícula incidente deve ser muito menor que as dimensões do raio atômico. O processo de colisão pode ser descrito classicamente, o que implica que a secção de choque deve ser da ordem de πr^2 , com r o raio do núcleo.

Considere agora que o núcleo excitado A emita um nêutron (n),

$$A \longrightarrow B + n, \quad (2.25)$$

onde B o núcleo excitado residual de energia de excitação E_B . Devemos ter um grande número de possibilidades para a reação para que tenhamos uma estatística coerente, isto é, devemos ter vários B 's possíveis e cuja probabilidade de reação deve depender essencialmente da energia de excitação do núcleo residual. A energia E_A deve ser muito maior que a energia E_0 que liga o nêutron

²A informação individual dos estados quânticos nos é interessante em se tratando de núcleos pesados, pois a separação dos níveis de energia são pequenas, o que possibilita obter informações do sistema como um todo (o coletivo).

ao núcleo A , para núcleos pesados ($A > 100$) é suficiente que

$$E_A - E_0 > 3MeV. \quad (2.26)$$

Devemos ter também um limite inferior para a energia E_A que deve ser pequena em comparação com a energia de ligação total do núcleo A , pois caso contrario o núcleo composto não pode ser formado.

Seja $W_n(E)dE$ a probabilidade por unidade de tempo que um núcleo excitado à uma energia E_A emitia um nêutron de energia cinética na faixa $[E, E + dE]$. O núcleo A após a reação se transmuta em um núcleo B com energia de excitação $E_B = E_A - E_0 - E$. Como a probabilidade ³ dependendo de alguma forma da energia de excitação do núcleo excitado inicial A (parâmetro). De posse destas considerações é possível expressar ⁴ $W_n(E)dE$ em função da secção de choque do processo reverso, isto é, a secção de choque $\sigma(E_A, E)$ da colisão de um nêutron de energia cinética E com um núcleo B de energia $E_A - E_0 - E$ produzindo um núcleo composto A , de energia E_A , segue dai que

$$W_n(E) dE = \sigma(E_A, E) \frac{gm_E \omega_B(E_B)}{\pi^2 h^3 \omega_A(E_A)} dE, \quad (2.27)$$

onde ω_A e ω_B são, respectivamente, o número de níveis de energia para os núcleos A e B , m_E a massa da partícula emitida e g o número de estados de spin das partículas consideradas ($g = 2$ para nêutrons e prótons, $g = 1$ para partículas alfas). É conveniente introduzirmos as variáveis termodinâmicas de

³Devemos entender $W(E) dE$, como uma probabilidade de emissão média.

⁴ Para derivar a expressão para $W(E)dE$, considere um núcleo e um nêutron limitados em um volume Ω , a probabilidade por unidade de tempo de um nêutron de energia na faixa $[E, E + dE]$ e velocidade $v = \sqrt{\frac{E}{2m}}$ ser capturado por um núcleo B de energia $E_A - E_0 - E$, formando um núcleo A com energia na faixa $[E_A, E_A + dE]$, dada por

$$\frac{gm\Omega}{2\pi^2 h^3} \sqrt{2mE} dE$$

segue dai que

$$W(E) dE = W_c \frac{\omega_B(E_B)}{\omega_A(E_A)} \frac{gm\Omega}{2\pi^2 h^3} \sqrt{2mE} dE$$

que não é nada mais nada menos que (2.27).

entropia nuclear

$$\begin{cases} S_A = \ln(\omega_A) \\ S_B = \ln(\omega_B) \end{cases}, \quad (2.28)$$

de forma que (2.28) se transforma em

$$W_n(E) dE = \sigma(E_A, E) \frac{gmE}{\pi^2 h^3} \exp(S_B(E_A - E_0 - E) - S_A(E_A)) dE, \quad (2.29)$$

que é a expressão geral para emissão de uma partícula de massa m de um sistema com excesso de energia E_A e densidade de níveis $\omega_A(E)$, obtendo após a colisão um sistema com densidade de nível $\omega_B(E)$ com excesso de energia E_B , a distribuição angular das partículas, é em princípio, isotrópica, por se tratar de um processo markoviano, sendo tal consideração bastante razoável.

Considere o caso particular $E_A \gg E_0$ e $E_A \gg E$, para tal caso $S_A(E_A) \simeq S_B(E_A)$, expandindo $S_B(E_A - E_0 - E)$ em torno de E_A , segue daí que

$$S_B(E_A - E_0 - E) \simeq S_A(E_A) - (E_0 + E) \left. \frac{dS_A}{dE} \right|_{E_A}. \quad (2.30)$$

Da definição de entropia nuclear

$$\frac{dS_A}{dE} = \frac{1}{T_A(E)}, \quad (2.31)$$

onde T_A a temperatura nuclear, temperatura na qual a energia mais provável do corpo é igual a E , no equilíbrio termodinâmico.

Logo de (2.29) obtemos

$$W_n(E) dE = \sigma(E_A, E) \frac{gmE}{\pi^2 h^3} \exp\left(\frac{-(E_0 + E)}{T_A(E_A)}\right) dE, \quad (2.32)$$

que é a expressão usual para o processo de evaporação, supondo (2.30) válido. O significado físico de σ no processo de evaporação nuclear pode ser visto fazendo $\sigma(E) = q\gamma(E)$, onde q é a secção de choque usual de um corpo va-

porizante e γ a razão entre o número de partículas capturadas pelo número de partículas incidentes de energia E ($\gamma(E) \leq 1$), e a secção de choque elástica de reflexão dada por $q[1 - \gamma(E)]$. Sempre que aplicarmos (2.29) para a emissão de partículas pelo núcleo devemos obter as expressões para S_A e S_B , coerentemente. Se E_0 , em particular, não é pequeno em comparação com E_A , não é possível obter (2.32) de (2.29). Se assumirmos, todavia, que $E \ll E_A - E_0$, podemos desenvolver S_B da seguinte forma

$$S_B(E_A - E_0 - E) = S_B(E_A - E) - \frac{E}{T_B(E_A - E_0)} - f(E), \quad (2.33)$$

onde $\frac{1}{T_B} = \frac{dS_B}{dE}$, é a temperatura na qual a energia mais provável do corpo B é igual a E no equilíbrio termodinâmico, e $f(E)$ uma função que contem todos os outros termos da expansão. E com isso de (2.29), obtemos:

$$W_n(E) dE = \sigma(E_A, E) \frac{gm_E}{\pi^2 h^3} e^{S_B(E_A - E_0) - S_A(E_A)} e^{-\frac{E}{T_B(E_A - E_0)}} e^{-f(E)} dE, \quad (2.34)$$

de (2.34) a largura da emissão obtida mediante a integração (cumulativa) em relação à energia e multiplicando por h , logo

$$\Gamma_n = h \int W_n(E) dE \quad (2.35)$$

$$= \bar{\sigma} \frac{gm}{\pi^2 h^2} T_B^2(E_A - E_0) \exp(S_B(E_A - E_0) - S_A(E_A)), \quad (2.36)$$

onde $\bar{\sigma}$ é o valor médio da secção de choque corrigida $\sigma(E_A, E) \exp(-f(E))$ calculado sobre uma distribuição de Maxwell, isto é,

$$\bar{\sigma} = \frac{\int \sigma(E_A, E) \exp(-f(E)) E \exp\left(-\frac{E}{T_B(E_A - E_0)}\right) dE}{\int E \exp\left(-\frac{E}{T_B(E_A - E_0)}\right) dE}. \quad (2.37)$$

Em analogia com (2.33) podemos fazer

$$S_B(E_A - E_0) - S_A(E_A) \simeq -\frac{E_0^*}{T_A(E_A)}, \quad (2.38)$$

onde E_0^* é igual a E_0 se, e somente se, $E_0 \ll E_A$ e $S_A(E) \simeq S_B(E)$.

A partir de 2.36 podemos obter a probabilidade de ocorrência dos vários canais possíveis de emissão.

Geralmente os modelos utilizados na descrição do processo de evaporação são baseados no trabalho desenvolvido por Dresner [40], o qual faz o uso de 2.29 para calcular as probabilidades de emissão. Os parâmetros mais importantes deste modelo são as densidades de níveis pois são importantes para explicar a influência dos efeitos de sela sobre os parâmetros de densidade de nível e seu relacionamento com temperatura nuclear. A densidade de nível se relaciona a Energia de excitação nuclear com a entropia como

$$S = 2k\sqrt{aE}, \quad (2.39)$$

onde k é a constante de Boltzmann e a o parametro de densidade de níveis.

Frequentemente os modelos recorrem às formulas de densidade de níveis obtidas por Ignatyuk et al. [52], os efeitos de sela também devem ser tratados com cuidado bem como sua influência sobre a barreira de fissão.

Já para a fissão a maioria dos modelos são baseados na formulação proposta por Bohr e Wheeler [26]. O modelo de Atchison [53] para a fissão também é bastante usado e trata de maneira diferente núclídeos pesados ($Z > 88$) e núclídeos intermediários ($70 < Z < 89$). Para núcleos pesados a barreira de fissão é fixa ($B_f = 6 \text{ MeV}$) e assume a razão $\frac{\Gamma_n}{\Gamma_f}$ dependente somente de carga dos núcleos fissionantes, tal aproximação é baseada em dados experimentais apresentados por Vandenbosch e Huizenga [54]. Para os núcleos mais leves o cálculo é realizados assumindo a Fissilidade dependente de parametrização da

barreira de fissão B_f e de razão $\frac{a_f}{a_n}$.

Capítulo 3

Implementação do Cálculo do Termo Fonte (Alvos Grossos)

Nesta seção apresentamos os resultados de cálculos realizados pela participação do Projeto Coordenado de Pesquisa (CRP) na Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA), "Analytical and Experimental Benchmark Analysis of ADS" em particular no exercício "Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in lead target exposed to 660 MeV proton" [55, 56]. Uma participação em um subprojeto do CRP também foi realizada com o intuito de estudar o acoplamento de reatores de pesquisa com fontes de menor energia e este é deixado como apêndice (Veja Apêndice C).

3.1 Fundamentos

Como dito anteriormente, uma boa descrição da fonte de Spallation é essencial para o projeto de um ADS, pois ela atua como a fonte externa de nêutrons do sistema subcrítico. Desta forma o estudo de operação e manutenção de um ADS inclui também a análise de produção e decaimento da atividade dos diversos radionuclídeos produzidos no alvo de Spallation.

Esta análise pode ser parcialmente realizada com as ferramentas computa-

cionais usuais, tais como MCNPX [17], FLUKA [32] entre outros. Mas nem sempre esta metodologia é simples e clara, isto é, devido a diversas considerações que podem ser consideradas nos cálculos. Nos cálculos de atividade, uma série de modelos nucleares descrevendo a reação entre a partícula incidente e o núcleo na região de energias intermediárias e altas ($\sim 50 - 2000$ MeV) estão disponíveis, mais especificamente, estão implementados no MCNPX (uma descrição detalhada da física e generalidades do MCNPX é feita no Apêndice B).

A escolha do melhor modelo ou código a ser usado nos cálculos de um ADS [57, 58, 59, 60], se esta ferramenta existe, e a indicação das suas principais deficiências é de grande importância para a definição do caminho mais adequado para projetos efetivos de um ADS. O modelo de referência atual deste Benchmark [61, 62, 63] é baseada nos projetos MUSE e SAD, no Instituto Conjunto de Pesquisa Nuclear de Dubna (Joint Institute of Nuclear Research in Dubna - Rússia). Neste experimento as atividades absoluta de vários radionuclídeos de longa vida gerada em um alvo de chumbo durante a irradiação com feixe de prótons de 660 MeV, foram determinadas.

Desta forma, este benchmark é orientado para comparar as previsões de simulações, com base em diversos códigos disponíveis e modelos físicos, com os dados experimentais.

Assim, os objetivos específicos de referência são:

- Cálculo da taxa de produção residual de vários radionuclídeos de longa meia vida durante a irradiação do alvo de chumbo e após 200 dias do término da irradiação, em 32 amostras de chumbo distribuído ao longo do alvo;
- Comparação desses resultados com as medidas experimentais para os isótopos : ^{46}Sc , ^{59}Fe , ^{60}Co , ^{65}Zn , ^{75}Se , ^{83}Rb , ^{85}Sr , ^{88}Y , ^{88}Zr , ^{95}Nb , ^{95}Zr , ^{102m}Rh ,

^{102}Rh , $^{110\text{m}}\text{Ag}$, $^{121\text{m}}\text{Te}$, ^{121}Te , ^{139}Ce , ^{172}Hf , ^{172}Lu , ^{173}Lu , ^{175}Hf , ^{183}Re , ^{185}Os , ^{194}Au , $^{194\text{m}2}\text{Ir}$, ^{195}Au , ^{203}Hg e ^{207}Bi .

O sistema proposto foi modelado usando MCNPX 2.5, e a geometria do alvo proposta pelos idealizadores do benchmark [55, 56] esta esquematizada na Figura 3.1.

Para o decaimento da produção residual dos diversos radio-nuclídeos foi utilizado o código ORIGEN-S do pacote SCALE5.1 [64], o Apêndice D apresenta detalhes do código e entradas de dados utilizadas.

Figura 3.1: Estrutura simplificada do alvo de chumbo (diâmetro - 80 mm, comprimento - 308 mm). Amostras de espessura de 1 mm.

3.1.1 Especificação

O experimento é dedicado para a medida da distribuição axial da atividade induzida em um alvo de chumbo, e foi realizado pelo laboratório Dzhelepov de Estudos Nucleares em JINR Dubna (Russia).

Para avaliar esta distribuição, o alvo é constituído de diversas peças cilíndricas de chumbo de 5 cm e 1 cm de espessura e 32 peças de 1 mm de espessura (as amostras de *Pb*), todas as peças possuem 80 mm de diâmetro (C.f. Fig 3.1). As amostras de *Pb* foram arranjadas ao longo do alvo de forma a melhor reproduzir a distribuição da atividade induzida por prótons do radionuclídeo ^{207}Bi . O comprimento total do alvo é 308 mm, onde os últimos 5 mm é composto de 22 amostras de 1 mm.

Os seguintes valores dos parâmetros foram aplicados no experimento:

1. Energia do próton: $E_p = 660 \pm 4$ MeV

Tempo	Distribuição de Corrente	Tempo	Distribuição de Corrente
[min]		[min]	
0-10	3,84E-03	270-280	2,40E-02
10-20	4,45E-03	280-290	2,43E-02
20-30	4,45E-03	290-300	2,33E-02
30-40	4,03E-03	300-310	2,30E-02
40-50	7,67E-03	310-320	2,30E-02
50-60	1,11E-02	320-330	2,27E-02
60-70	0,00E+00	330-340	2,40E-02
70-80	1,15E-02	340-350	2,43E-02
80-90	1,25E-02	350-360	2,40E-02
90-100	1,25E-02	360-370	2,37E-02
100-110	1,25E-02	370-380	2,37E-02
110-120	1,76E-02	380-390	2,34E-02
120-130	1,73E-02	390-400	2,30E-02
130-140	1,76E-02	400-410	2,27E-02
140-150	1,70E-02	410-420	2,24E-02
150-160	2,21E-02	420-430	2,19E-02
160-170	2,21E-02	430-440	2,17E-02
170-180	2,24E-02	440-450	2,14E-02
180-190	2,21E-02	450-460	2,14E-02
190-200	2,11E-02	460-470	2,11E-02
200-210	2,30E-02	470-480	1,99E-02
210-220	2,36E-02	480-490	1,92E-02
220-230	2,53E-02	490-500	1,95E-02
230-240	2,15E-02	500-510	1,99E-02
240-250	2,22E-02	510-520	1,95E-02
250-260	2,30E-02	520-530	1,95E-02
260-270	2,15E-02	total	1,00E+00

Tabela 3.1: Distribuição relativa da corrente (em unidades relativas) - Retirada da ref. [55]

2. Máx. fluxo de prótons: $I_{p,max} = 3.0 \times 10^{10}$ prótons/seg,
3. Tempo de irradiação: $t_i = 530$ min,
4. Número total de prótons: $(2,6 \pm 0,2) \times 10^{14}$ (A distribuição do tempo de feixe de prótons em intervalos de 10 minutos é fornecido na Tabela 3.1),
5. Fim da irradiação: 24 de novembro de 2001, 06:00 hrs GMT.

A intensidade do feixe de prótons aplicada foi monitorada com o uso de uma câmara de ionização calibradas com a reação $^{12}\text{C}(p, pn)^{11}\text{C}$ e com a folha de Al e reações $^{27}\text{Al}(p, 3n3p)^{22}\text{Na}$, $^{27}\text{Al}(p, n3p)^{24}\text{Na}$ e $^{27}\text{Al}(p, x)^7\text{Be}$. A distribuição do feixe sobre a superfície frontal alvo também foi medido (vide Fig. 3.2).

Figura 3.2: Perfil dos feixes de próton incidente na superfície do alvo (Retirada da ref. [55]).

Figura 3.3: Posicionamento das amostras e monitores por trás do alvo.

3.1.2 Resultados

As os resultados simulados para este Benchmark foram :

A atividade induzida:

1. Taxas de Produção de ^{46}Sc , ^{59}Fe , ^{60}Co , ^{65}Zn , ^{75}Se , ^{83}Rb , ^{85}Sr , ^{88}Y , ^{88}Zr , ^{95}Nb , ^{95}Zr , ^{102m}Rh , ^{102}Rh , ^{110m}Ag , ^{121m}Te , ^{121}Te , ^{139}Ce , ^{172}Hf , ^{172}Lu , ^{173}Lu , ^{175}Hf , ^{183}Re , ^{185}Os , ^{194}Au , $^{194m2}\text{Ir}$, ^{195}Au , ^{203}Hg e ^{207}Bi , nas amostras nas posições de $X = Y = 0.0$ cm e Z de acordo com as posições 0, 0.6, 1.2, 1.8, 2.4, 6.7, 11.6, 16.6, 21.0, 25.0, 28.1, 28.2, 28.3, 28.4, 28.5, 28.6, 28.7, 28.8, 28.9, 29.0, 29.1, 29.2, 29.3, 29.4, 29.5, 29.6, 29.7, 29.8, 29.9, 30.0, 30.1 e 30.2 cm com referencia ao topo do alvo (em 1o de julho de 2002 as 12:00 hrs GMT).
2. Taxas de Produção para todo o alvo (atividade integrada no alvo em 1o de julho de 2002 as 12:00 hrs GMT).

3. Fluxo de partículas(prótons, nêutrons, alfas e píons);
4. corrente (prótons, nêutrons, alfas e píons);
5. e espectro (prótons, nêutrons, alfas e píons).

Fluxo e espectro de prótons, nêutrons, alfas e píons, sobre cortes de 1 mm distribuídas sobre o alvo em passos de 1 cm.

Os resultados obtidos nas simulações são apresentados a seguir:

Figura 3.4: Distribuição da atividade específica dos radionuclídeos ao longo do alvo de Pb irradiados com prótons de 660 MeV.

Na Figura 3.4 apresentamos a comparação da taxa de produção isotópica em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo para os núclídeos ^{207}Bi , ^{203}Hg , ^{194}Au e ^{195}Au , para diversos modelos (Bertini/ABLA, ISABEL/ABLA, CEN2K e INCL4/Dresner). Devemos notar na figura que o fator forma é semelhante para todos os modelos, o que sugere um boa descrição física dos modelos, se diferenciando na amplitude que vem do fato das diversas considerações de canais de reação da cascata, tratamento e parâmetros considerados.

Nas Figuras 3.5-3.8 apresentamos, respectivamente, o fluxo de prótons, nêutrons, píons e alfas em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo para

Figura 3.5: Fluxo de prótons em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.

Figura 3.6: Fluxo de nêutrons em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.

Figura 3.7: Fluxo de pions em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.

Figura 3.8: Fluxo de alphas em função da posição da amostra em relação ao topo do alvo.

diversos modelos indicados. Note que a forma do fluxo para ambas partículas com relação aos diferentes modelos são bastante semelhantes, isto advém do fato que a forma da distribuição está ligada ao processo de transporte de partículas, e as amplitudes se diferenciam mais claramente ao se tratar de píons e alfas. Para o caso de píons as diferenças vêm do modelo de cascata uma vez que os píons são ejetados do núcleo nesta fase, vide figura 3.7, onde podemos observar que para os modelos de Bertini e ISABEL concordam entre si, e isso advém do fato que ambos são estruturalmente semelhantes se diferenciando somente no número de divisões do núcleo em regiões isotrópicas, já para os outros, devido a considerações estruturais e canais de reação considerados, a diferença é bem mais clara.

No caso de emissão de alfas as diferenças vêm da fase de evaporação, notamos que há uma maior concordância quando se trata dos pares usando o modelo de pré-equilíbrio Dresner e ABLA, e se diferenciando também na região mais reativa no caso do Bertini/ABLA e ISABEL/ABLA que é devido às energias de excitação obtidas após a cascata.

Já para o caso de prótons e nêutrons as diferenças, menos pronunciadas para o caso de nêutrons, são uma soma estrutural entre os modelos de evaporação

e cascata o que impossibilita diferenciar em separado de qual fase advém as diferenças.

Vale a pena ressaltar que as distribuições de partículas apresentam um pico que é originado de duas contribuições, a criação de partículas e atenuação. Tal pico não é visível no caso da produção de prótons pois atenuação é bem acentuada, e para o caso dos píons observa-se somente o perfil de atenuação, uma vez que estas partículas são criadas na fase de cascata intranuclear.

Figura 3.9: Atividade instantânea integrada do ^{185}Os para diversos participantes [65].

Figura 3.10: Atividade instantânea integrada do ^{85}Sr para diversos participantes [65].

Nas figuras 3.9 , 3.10 e 3.11 apresentamos, respectivamente, atividade integrada instantânea para a produção de ^{185}Os , ^{85}Sr e ^{46}Sc para diversos participantes.

Apresentamos nas Figuras 3.12 a 3.23 uma comparação prévia [65] da ativi-

Figura 3.11: Atividade integrada instantânea do ^{46}Sc para diversos participantes [65].

Figura 3.12: Atividade integrada do ^{207}Bi para diversos participantes [65].

Figura 3.13: Atividade integrada do ^{60}Co para diversos participantes [65].

dade integrada para os núclídeos: ^{207}Bi , ^{60}Co , ^{59}Fe , ^{175}Hf , ^{203}Hg , ^{173}Lu , ^{183}Os , ^{83}Rb , ^{183}Re , ^{88}Y , ^{65}Zn e ^{95}Zr para diversos participantes do Benchmark. Onde

Figura 3.14: Atividade integrada do ^{59}Fe para diversos participantes [65].

Figura 3.15: Atividade integrada do ^{175}Hf para diversos participantes [65].

Figura 3.16: Atividade integrada do ^{203}Hg para diversos participantes [65].

somos referenciados pelo número 2. Muitos resultados entre os participantes são concordante, mas geralmente divergem dos resultados experimentais.

Para o ^{207}Bi (Figura 3.12) devemos notar que todos os resultados dos cálculos

Figura 3.17: Atividade integrada do ^{173}Lu para diversos participantes [65].

Figura 3.18: Atividade integrada do ^{185}Os para diversos participantes [65].

Figura 3.19: Atividade integrada do ^{83}Rb para diversos participantes [65].

majoram o experimental - o que sugere um erro sistemático de modelo - e muitos divergem em ordens de grandeza os valores medidos, já para o ^{183}Re (Figura

Figura 3.20: Atividade integrada do ^{183}Re para diversos participantes [65].

Figura 3.21: Atividade integrada do ^{88}Y para diversos participantes [65].

Figura 3.22: Atividade integrada do ^{65}Zn para diversos participantes [65].

3.20) podemos notar divergências para todos os participantes, e no nosso caso baixa atividade e também para ^{88}Y e ^{83}Rb nossos resultados apresentam alta

Figura 3.23: Atividade integrada do ^{95}Zr para diversos participantes [65].

atividade, estas discrepâncias são devidas às considerações usadas no modelo, em particular o uso de seções de choque experimentais para partículas abaixo de 14 MeV. Os Demais resultados as variações concordam entre os participantes e sugerem um erro randômico oriundo dos modelos de cascata e des-excitação.

Figura 3.24: Distribuição da atividade do ^{95}Nb ao longo do Alvo para diversos participantes [65].

Figura 3.25: Distribuição da atividade de ^{183}Re ao longo do Alvo para diversos participantes [65].

3.1.3 Conclusão Parcial

Em relação a atividade instantânea integrada, os resultados se mostram consistentes para todos os participantes e para o mesmo modelo. A diferença entre os modelos são significantes.

Para a atividade integrada, a comparação dos resultados das simulações dos diversos participantes com os dados experimentais mostram um pior desempenho para os modelos CEM e Bertini/Dresner (com aceitabilidade da ordem de 12%), seguido dos modelos INCL4, ISABEL/Abla e Bertini/Abla (aceitabilidade da ordem de 20–25%) e por fim os modelos ISABEL/Dresner e Fluka com melhor desempenho (aceitabilidade da ordem de 45%) porem tal desempenho não é satisfatória.

A análise quantitativa dos 13 resultados, apresentada na tabela 3.2, calculados para diferentes núclídeos mostram um melhor desempenho para os núclídeos ^{185}Os e $^{194}\text{Au}/^{194}\text{Hg}$ (12 e 9 resultados dentro da margem de 20%, respectivamente), para ^{183}Re , ^{175}Hf e ^{207}Bi (entre 4 e 6 resultados dentro da margem de 20%) e para os núclídeos de ^{60}Co e ^{121}Te quase todos os cálculos são subestimados, enquanto para núclídeos mais pesados temos principalmente resultados superestimados.

E por fim, em relação as distribuições da atividade ao longo do alvo, os resultados comparados mostram um comportamento diferente para os radionuclídeos diferentes: para ^{95}Nb (C.f Figura 3.24) observamos uma subestimação para todos os modelos, especialmente para a CEM e Bertini/Dresner e para ^{183}Re (C.f Figura 3.25) vemos superestimação, também para a CEM e Bertini/Dresner.

Participant No	C/E									
and	Nuclide									
model/code	^{60}Co	^{65}Zn	^{83}Rb	^{88}Y	^{102}Rh	^{173}Lu	^{175}Hf	^{185}Os	^{203}Hg	^{207}Bi
1-CEM-0301	0.65	1.67	1.4	1.31	-	1.58	1.70	1.06	0.55	1.42
1-CEM 2k	0.40	1.43	0.45	0.47	0.40	0.72	0.84	1.1	0.49	1.66
3-CEM	0.41	1.45	0.44	0.50	0.40	0.76	0.82	1.11	0.77	1.77
2-CEM2k	9.81	1.42	1.35	0.96	0.25	0.01	0.02	0.04	0.64	1.78
1-BERT/DRES	0.41	1.20	0.39	0.38	0.42	1.30	1.24	1.05	1.30	1.40
3-BERT/DRES	0.46	1.41	0.39	0.38	0.42	1.36	1.29	1.07	1.44	1.47
1-BERT/ABLA	0.43	0.61	0.44	0.38	0.67	0.99	1.07	1.16	1.32	1.06
2-BERT/ABLA	7.94	0.84	2.05	1.17	0.41	0.01	0.02	0.06	1.2	1.09
1-INCL4/ABLA	0.51	0.54	0.53	0.44	0.84	0.38	0.49	0.82	1.61	1.17
3-INCL4/ABLA	0.55	0.62	0.49	0.48	0.94	0.42	0.47	0.83	1.70	1.22
1-INCL4/DRES	0.51	0.47	0.57	0.45	0.89	0.38	0.48	0.82	1.62	1.17
2-INCL4/DRES	11.31	0.99	2.53	1.55	0.53	0.01	0.01	0.04	1.65	1.18
1-ISABEL/ABLA	0.39	0.58	0.48	0.45	0.85	0.65	0.75	1.08	1.02	1.85
2-ISABEL/ABLA	11.47	0.96	2.48	1.42	0.49	0.01	0.06	1.22	1.22	1.98
1-ISABEL/DRES	0.42	1.16	0.33	0.35	0.41	0.93	0.97	1.04	1.30	1.40
3-ISABEL	1.00	1.25	0.96	0.84	1.38	0.94	0.91	1.02	0.83	1.15

Tabela 3.2: Tabela comparativa para a atividade total do alvo levando em conta a o decaimento e ativação [Valor calculado por dado experimental](da Ref. [66])

Capítulo 4

Cascata Intranuclear, evaporação e fissão no CRISP

O IFUSP e CBPF desenvolveram modelos teóricos para simulação da reações de spallation, os quais foram incorporados a um programa denominado CRISP (Colaboração RIO-São Paulo), que é uma evolução dos códigos anteriormente desenvolvidos pelos grupos de Física Nuclear do Rio de Janeiro e de São Paulo: o a MCMC (Monte Carlo Multicolisional Cascade) e o MCEF (Monte Carlo Evaporation Fission), que simulam, respectivamente, a cascata intra-nuclear e os processos de fissão e evaporação nuclear. Os acoplamentos desses dois códigos com a inclusão de alguns melhoramentos resultaram no código CRISP [28, 28, 29, 67].

O código CRISP vem sendo aperfeiçoado e melhorado constantemente nos últimos anos, bem como esforços de qualificação do código também têm sido realizados [68, 69, 70] que levaram a presente versão deste código que é aqui apresentada.

4.1 MCMC

O modelo de cascata no CRISP supõe uma densidade nucleônica homogênea em uma esfera de raio $r_0 A^{\frac{1}{3}}$. Os núcleons estão confinados em um poço esférico

de profundidade $V_0 = 43 \text{ MeV}$.

Dentro desta esfera os núcleons estão em posições (r_i, θ_i, ϕ_i) , os quais são escolhidos de forma aleatória na simulação Monte Carlo amostrados nos intervalos

$$x \mapsto [0, 1), \quad (4.1)$$

$$\theta_i \mapsto [-1, 1), \quad (4.2)$$

$$\phi_i \mapsto [0, 2\pi), \quad (4.3)$$

onde $r_i = Rx^{\frac{1}{3}}$. Analogamente a distribuição dos momentos são escolhidos, baseado no modelo de gás de Fermi (veja Apêndice A), e seu sentido é amostrado de maneira equi-provável.

Uma vez definido as posições e momentos de todos os núcleons, a energia é obtida segundo a lei e

$$E_i = \sqrt{\mathbf{p}_i^2 + \mu^2}, \quad (4.4)$$

onde μ é a massa efetiva dos núcleons ligados. Após estas definições da-se início à cascata, usando um tratamento semi-clássico para todas as partículas as quais são seguidas durante a evolução temporal da reação. A colisão primária é realizada usando as secções de choque experimentais para a reação.

Após o início da cascata, no instante t_0 , o tempo de ocorrência, t_c , para as colisões secundárias das partículas é dado por

$$t_c - t_0 = -\frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}}{\mathbf{v}_{ij}^2}, \quad (4.5)$$

onde $\mathbf{r}_{ij}$ e $\mathbf{v}_{ij}$ são os vetores posição relativa e velocidade relativa da partícula

i em relação a partícula j. O critério de colisão usado é

$$\pi b_{ij}^2 \leq \sigma(s), \quad (4.6)$$

onde b_{ij} é o parâmetro de impacto do par na colisão e σ a secção de choque total das partículas que participam da colisão e

$$\sqrt{s} = \sqrt{(E_i + E_j)^2 - (p_i + p_j)^2}, \quad (4.7)$$

e a energia relativa do par. Com isso o sistema é evoluído no tempo até ocorrer e interação entre o par, após a interação os núcleons que participaram da reação tem seus quadrimomentos modificados de acordo com as leis de conservação da energia e momento no sistema nuclear.

Quando as partículas alcançam a superfície do poço pode ocorrer reflexão ou refração. Estabelece-se então um critério para reflexão/refração.

Na reflexão a partícula com energia limitada é mantida no núcleo, aproveitando a simetria esférica do núcleo e respeitando as leis de conservação, a partícula é conduzida à posição diretamente oposta ao ponto de reflexão.

Na refração a partícula ao alcançar o poço possui energia suficiente para ultrapassar o poço e para partículas carregadas é considerada a possibilidade de tunelamento através da barreira Coulombiana. Caso a partícula escape do núcleo, a partícula deve assumir sua massa livre (de repouso) e por simplicidade se assume a a direção e a energia total da partícula no sistema de repouso do núcleo.

A sequência de eventos é finalizada no instante em que as colisões do sistema nuclear não dispuser de energia para a produção ou escape de partículas.

Em vários modelos nucleares a configuração inicial do núcleo é escolhida aleatoriamente sem a verificação de uma possível violação do princípio de Pauli. Já o CRISP constrói o núcleo no estado fundamental de uma maneira deter-

minística populando todos os níveis possíveis até o topo do nível de Fermi, desta forma o princípio de Pauli é automaticamente satisfeito. O passo de energia ΔE entre níveis são obtidos pela expressão

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x}, \quad (4.8)$$

onde Δx e Δp são, respectivamente, a incerteza associada à posição e momento do núcleon. Os níveis quânticos são caracterizados pelas componentes do momento $p_i = n_i \Delta p$, onde n_i é um número inteiro positivo e $i = x, y, z$. Então o momento total é caracterizado por

$$\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) (\Delta p)^2 = n^2 (\Delta p)^2, \quad (4.9)$$

onde n é um número inteiro. A condição de que n e n_i , para algum i , deve ser um inteiro restringe o número de possíveis estados, logo os possíveis níveis quânticos estão associados ao tripleto (n_x, n_y, n_z) o qual deve satisfazer [4.9].

Outra restrição usada é que o valor Δp esta associado com o potencial nuclear, V_0 , que se relaciona com a energia de Fermi E_f por $V_0 \approx E_f + S$, onde S é a energia de separação da partícula em questão. Por exemplo para o núcleo Pb obtém-se [71] $\Delta p \approx 28.57 \frac{MeV}{c}$ para prótons e $\Delta p \approx 26.45 \frac{MeV}{c}$ para nêutrons, e isso implica que $\Delta x \approx 5.5 fm$ que é compatível com a dimensão nuclear e isto é uma indicação de auto consistência do modelo.

O princípio de exclusão de Pauli é incorporada no modelo, garantindo que em qualquer etapa do cálculo da cascata intranuclear o número de núcleons em quaisquer níveis n_x, n_y, n_z não será superior ao limite permitido por esse princípio.

Essa abordagem elimina muitos resultados não físicos como a violação do princípio de Pauli de forma que o núcleo fica estável no decorrer do tempo (no decorrer da cascata) e com isso a cascata não necessita de cortes arbitrários no

tempo como no caso do modelo de Cugnon.

As Figuras 4.1 e 4.3 mostram a ocupação dos níveis de prótons e nêutrons em vários instantes da cascata, nelas vemos o comportamento de um núcleo aquecido e não temos em nenhum instante níveis super populados. As Figuras 4.2 e 4.4 mostram uma comparação dos níveis no decorrer do tempo e mostra o comportamento médio dos níveis, vemos nelas o comportamento de termalização devido a ejeção de núcleons, este comportamento é mais explicito se olharmos para a figura 4.5 que mostra o comportamento do chi-quadrado da distribuição em função do tempo. Este comportamento é importante e mostra a consistência do modelo, uma vez que possibilita a estabilidade no decorrer do tempo.

Figura 4.1: Ocupação média em função dos níveis de prótons para diversos instantes da cascata juntamente com um ajuste da função partição na temperatura.

Outra peculiaridade deste mecanismo é a eliminação da necessidade e a inclusão de modelos de pré-equilíbrio necessários para acoplamento do código de cascata e evaporação, pois a energia de excitação do núcleo residual se encontra nas possibilidades do modelo.

Figura 4.2: Ocupação média em função dos níveis de prótons para diversos instantes comparadas entre si.

Figura 4.3: Ocupação média em função dos níveis de nêutron para diversos instantes da cascata juntamente com um ajuste da função partição na temperatura.

4.2 Monte Carlo Evaporation Fission (MCEF)

O modelo de evaporação incorporado no CRISP realiza a simulação Monte Carlo de maneira usual, ou seja, durante o processo de evaporação a probabil-

Figura 4.4: Ocupação média em função dos níveis de nêutrons para diversos instantes comparadas entre si.

Figura 4.5: Chi-quadrado das distribuições de níveis em função do tempo.

idade relativa de emissão da partícula do tipo k em relação a partícula do tipo

j , de acordo com o modelo de Weisskopf [24] pode ser escrita como

$$\frac{\Gamma_k}{\Gamma_j} = \left(\frac{\gamma_k}{\gamma_j} \right) \left(\frac{E_k^*}{E_j^*} \right) \left(\frac{a_j}{a_k} \right) \exp \left\{ 2 \left[(a_k E_k^*)^{\frac{1}{2}} - (a_j E_j^*)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}, \quad (4.10)$$

onde a_j é o parâmetro de densidade de níveis, e todos se relacionam com o parâmetro de densidade do nêutron segundo

$$a_j = r_j a_n, \quad (4.11)$$

e r_j é uma contante adimensional. O parâmetro a_n é parametrizado segundo descrito na ref. [72].

Mais explicitamente, para emissão de prótons temos

$$\frac{\Gamma_p}{\Gamma_n} = \left(\frac{E_p^*}{E_n^*} \right) \exp \left\{ 2a_n^{\frac{1}{2}} \left[(r_p E_p^*)^{\frac{1}{2}} - (E_n^*)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}, \quad (4.12)$$

e para a emissão de alfas

$$\frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_n} = 2 \left(\frac{E_\alpha^*}{E_n^*} \right) \exp \left\{ 2a_n^{\frac{1}{2}} \left[(r_\alpha E_\alpha^*)^{\frac{1}{2}} - (E_n^*)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}. \quad (4.13)$$

O potencial Coulombiano é parametrizado segundo ref. [73] para o próton por

$$V_p = C \frac{[K_p (Z - 1) e^2]}{\left[r_0 (A - 1)^{\frac{1}{3}} + r_p \right]}, \quad (4.14)$$

e para partículas alfa por

$$V_\alpha = C \frac{[K_\alpha (Z - 1) e^2]}{\left[r_0 (A - 4)^{\frac{1}{3}} + r_\alpha \right]}, \quad (4.15)$$

onde $K_p = 0,70$ e $K_\alpha = 0,83$ são as penetrabilidades da barreira Coulombiana para o próton e alfas, $R_p = 1,14 fm$ é o raio do próton e $R_\alpha = 2,16 fm$ o raio

da partícula alfa e $r_0 = 1,2 fm$. E,

$$C = 1 - \frac{E^*}{B}, \quad (4.16)$$

é a correção da barreira Coulombiana devido a temperatura nuclear [73].

Para a probabilidade de fissão usa-se a forma funcional devido a Bohr e Wheeler [26] que juntamente com a forma de Weisskopf nos leva a

$$\frac{\Gamma_f}{\Gamma_n} = K_f \exp \left\{ 2 \left[(a_f E_f^*)^{\frac{1}{2}} - (a_n E_n^*)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}, \quad (4.17)$$

onde

$$K_f = K_0 a_n \frac{\left[2 (a_f E_f^*)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]}{4 A^{\frac{2}{3}} a_f E_n^*}, \quad (4.18)$$

e $E_f^* = E^* - B_f$ com $K_0 = 14,39 MeV$ e B_f a barreira de fissão [74].

As energias de separação das partículas são calculadas diretamente da fórmula de massa segundo a definição, temos para prótons e alfas por

$$B_p = m_p + m(A-1, Z-1) - m(A, Z), \quad (4.19)$$

$$B_\alpha = m_\alpha + m(A-4, Z-2) - m(A, Z), \quad (4.20)$$

onde m_p e m_α são respectivamente a massa do próton e da partícula alfa e $m(A, Z)$ é a fórmula de massa parametrizada segundo [75].

A cada passo da evaporação i o MCEF calcula a probabilidade de fissão definida por :

$$\Gamma_i = \frac{\left(\frac{\Gamma_f}{\Gamma_n} \right)_i}{1 + \left(\frac{\Gamma_f}{\Gamma_n} \right)_i + \left(\frac{\Gamma_p}{\Gamma_n} \right)_i + \left(\frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_n} \right)_i}. \quad (4.21)$$

Desta forma para cada partícula excitada oriunda da cascata intra-nuclear inicia-se o processo de evaporação e o processo de emissão é escolhido aleatori-

amente de acordo com a respectiva probabilidade e emissão parametrizadas no início desta secção. Consequentemente após a emissão ser escolhida as massas e número atômico são recalculados de acordo com

$$A_{i+1} = A_i - \Delta A_i, \quad (4.22)$$

e

$$Z_{i+1} = Z_i - \Delta Z_i, \quad (4.23)$$

onde ΔZ_i e ΔA_i são, respectivamente, a massa e o número atômico da i -ésima partícula evaporada e a cada passo de evaporação a energia de excitação é depreciada segundo a relação

$$E_{i+1}^* = E_i^* - B_i - T_i, \quad (4.24)$$

onde B_i é a energia de separação e T_i a energia cinética que no caso assintótico da partícula ejetada assume o valor $T = 2MeV$ para nêutrons, $T = V_p$ para prótons e $T = V_\alpha$ para alfas.

O processo de evaporação continua até que o sistema resultante não disponha de energia suficiente para emitir uma partícula ou fissione. E no fim do processo de evaporação a fissilidade é calculada segundo a expressão

$$W = \sum_i \left[\prod_{j=0}^{i-1} (1 - F_j) \right] F_i. \quad (4.25)$$

É importante notar que para que o código de Cascata/Evaporação seja fisicamente consistente ele deve ser capaz de reproduzir bem não só a distribuição dos produtos da reação mas também as curvas de fotofissão. Ou seja, deve descrever bem tanto as reações com prótons quanto com fótons.

Tendo isto em vista apresentamos as Figuras 4.6, 4.7 e 4.8, que mostram a consistência do modelo incorporado no CRISP.

Na figura 4.6 apresentamos as curvas de secção de choque de fotofissão calculada com o CRISP comparada com dados experimentais [76, 77, 78, 79] para ^{237}Np ^{208}Pb ^{235}U e ^{238}U em função da energia, nela observamos uma diferença de cerca de 10% nos picos para o Urânio e Neptúnio esta diferença advém da parametrização da barreira de fissão que é um ponto delicado em todos os modelos nucleares existentes.

Já nas Figuras 4.7 e 4.8 apresentamos a as parábolas de produção para Spallation com prótons de 1000 MeV incidindo no alvo de chumbo e prótons de 800 MeV incidindo no alvo de ouro, elas mostram que as secções de choque de produção apresentam um bom comportamento em relação aos dados experimentais para numero de massa grandes, e apresentam uma diminuição da amplitude a medida que o número atômico diminui, este comportamento esta sendo corrigido mediante o uso de algoritmos minimização pelo grupo responsável pelo código.

Figura 4.6: Secção de choque de fotofissão calculada com o CRISP comparada com dados experimentais [76, 77, 78, 79] para ^{237}Np ^{208}Pb ^{235}U e ^{238}U .

Figura 4.7: Parábolas de evaporação obtidas com o CRISP para a reação de Spallation com próton de 1000MeV no Chumbo comparadas com dados experimentais [80].

4.3 Fragmentos de Fissão

Para a obtenção da distribuição dos fragmentos de fissão, o CRISP conta com um modelo baseado na parametrização multimodal de fissão[82], ou seja sempre que o canal de fissão é escolhido, as massas e os números atômicos dos fragmentos mais pesados produzidos, A_H e Z_H , respectivamente, são classificados de acordo com uma distribuição probabilidade dada pela expressão

$$p(A, Z) = \left\{ \sum_{i=1}^3 \frac{p_i}{\sqrt{2\pi}\Gamma_i} \exp \left[-\frac{(A - D_i)^2}{\sigma_i^2} \right] \right\} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma_z} \exp \left[-\frac{(Z - Z_p)^2}{\sigma_p^2} \right], \quad (4.26)$$

onde p_i é a probabilidade da fissão ocorrer no i -ésimo modo, sujeita a condição $\sum_{i=1}^3 p_i = 1$ e os Γ_z , D_i e σ_p , são parâmetros a serem ajustados. E os fragmentos

Figura 4.8: *Parábolas de evaporação obtidas com o CRISP para a reação de Spallation com próton de 800MeV no Ouro comparadas com dados experimentais [81].*

leves são obtidos mediante o vínculo $A_L = A_f - A_H$ e $Z_L = Z_f - Z_H$ com Z_f e A_f o numero atômico e de massa do nuclídeo fissionante.

É importante ressaltar que o processo de fissão começa com a distribuição de núcleos obtidos ao final da cascata intranuclear, e o núcleo fissionante pode ser diferente do núcleo inicial porque os nêutrons, prótons e alfa-partículas podem ser evaporados antes de fissão acontecer.

Os parâmetros de 4.26 usados são obtidos a partir de ajustes baseados no estudo sistemático feito pela Bockstiegel et al. [83] para a fissão espontânea ou reações de baixa energia, onde o núcleo de fissão pode ser considerado idêntico ao núcleo inicial (ou alvo).

Apresentamos na Figura 4.9 apresenta os resultados do modelo para reação de fotofissão no ^{238}U (50MeV e 3500MeV) comparada com a sistemática e dados experimentais [82] e a Figura 4.10 para a reação de fotofissão no Am e

Np ($50MeV$) comparada com a sistemática e dados experimentais da referencia [84].

E as figuras 4.11, 4.12 e 4.13 apresentam, respectivamente, os produtos de fissão obtidos via CRISP comparados com dados experimentais para as reações $^{197}Au + p(800MeV)$ [85], $^{208}Pb + p(500MeV)$ [86] e $^{197}Pb + p(1000MeV)$ [80].

Figura 4.9: Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação de fotofissão no ^{238}U ($50MeV$ a $3500MeV$) obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.

Figura 4.10: Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação de fotofissão no Am e Np ($50MeV$) obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.

Estes resultados mostram boa concordância com os dados experimentais e permitem concluir que os parâmetros do modelo de fissão multimodal não são fortemente dependentes da energia de excitação do sistema fissionante. É importante notar, também, que as probabilidades relativas fissão simétrica e assimétrica são fortemente dependentes da massa do sistema fissionante, como a sistemática de fissão mostra claramente.

Figura 4.11: Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{197}\text{Au} + p(800\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.

Figura 4.12: Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{208}\text{Pb} + p(500\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.

4.3.1 Inclusão da Produção de Nêutrons Prontos

Quando na simulação direta de distribuição de produtos de fissão, esta distribuição apresenta um deslocamento da posição relativa do pico o que indica

Figura 4.13: Distribuição dos fragmentos de fissão mediante a reação $^{208}\text{Pb} + p(1000\text{MeV})$ obtidos com o modelo de fissão multimodal do CRISP.

um problema que pode estar relacionado com uma das seguintes acertativas: (i) os núclídeos oriundos do processo de evaporação não são suficientemente evaporados; (ii) os parâmetros adotados na simulação multimodal não são bons; (iii) a contribuição oriundas da produção de nêutrons prontos nesta faixa de energia não pode ser negligenciada.

Mas bibliotecas de dados nucleares para nêutrons, e.g ENDFB VII [87], indicam que o número médio de nêutrons prontos para elementos pesados nesta faixa de energia possui um valor em torno de uma dezena de nêutrons.

Para estimar a produção de neutrôns prontos, considerando a figura usual de fissão, onde o núcleo se deforma na forma de alêres imediatamente antes de fissionar, vide figura 4.14.

Esta figura dinâmica do processo de fissão nos permite inferir que há uma constante troca de nêutrons de um lado para o outro lado do alêre, tal figura permite supor que após a cisão do núcleo que os nêutrons que estão em transito na região estrangulada do alêre escapam do sistema.

Figura 4.14: esquema do processo de fissão.

Figura 4.15: Volume da região estrangulada.

Uma suposição simples é admitir que o número de neutros é proporcional à razão entre o volume da região estrangulada ($V_{disp} = \pi R_p^2 d$, onde d é a distancia de aproximação entre os fragmentos que pode ser obtida dos dados experimentais (usamos aqui o valor de d do canal SL somente do modelo de fissão multimodal), vide figura 4.15, pelo volume do núcleon ($V_n = \frac{4}{3}\pi r_N^3$), ou seja

$$\nu = \frac{3}{4}\alpha d \frac{R_p^2}{r_N^3}, \quad (4.27)$$

onde α é um parâmetro a ser determinado e R_p (utilizamos aqui a parametrização usual para o raio do núclídeo $r(A) = r_0 A^{\frac{1}{3}}$, com $r_0 = 1.2$) é o raio do menor produto de fissão.

Uma avaliação prévia desta suposição foi realizada mediante dados das referências [83, 88, 89, 90] e bibliotecas de dados avaliados [91] e esta apresentada na tabela 4.1 que mostra o bom comportamento médio do número de nêutrons obtidos pelo modelo, exceto nos casos de fissão espontânea.

As Figuras 4.12, 4.11 e 4.13 apresentadas na secção anterior utiliza esta estimativa de nêutrons prontos.

4.3.2 Distribuição de Cargas dos Produtos de Fissão

Para determinar a distribuição de carga do produto de fissão, uma consideração simples é utilizada.

Consideramos que a carga do fragmento é proporcional a razão Carga-Massa do núcleo fissionante. Ou seja, se A_0 , Z_0 e A são, respectivamente, o número de massa do núclídeo fissionante, carga do núclídeo fissionante e massa do fragmento, então a carga de cada fragmento é obtida determinando a quantidade

$$Z = A \frac{Z_0}{A_0}, \quad (4.28)$$

para cada fragmento e distribuindo o restante igualmente entre os dois frag-

nuclídeo	reação	calculado	Valores da referência				Referência/calculado				média
			ENDFB-VII	JEFF 3.1	JENDL 3.3	TENDL 2009					
U235	Fissão espontânea	2.8419	1.8700	-	-	-	0.6580	-	-	-	0.66
U235	Neutrons térmicos	2.4968	2.4209	2.4200	2.4205	-	0.9696	0.9692	0.9694	-	0.97
U235	Neutrons E = 6 MeV	2.7353	3.2110	3.2097	3.2316	-	1.1739	1.1734	1.1814	-	1.18
Pu236	Fissão espontânea	1.3531	2.1200	2.1200	-	-	1.5668	1.5668	-	-	1.57
Pu238	Fissão espontânea	1.3627	2.2100	2.2100	-	-	1.6218	1.6218	-	-	1.62
Pu240	Fissão espontânea	3.6990	2.1510	2.1510	-	-	0.5815	0.5815	-	-	0.58
Pu242	Fissão espontânea	4.3408	2.1410	2.1410	-	-	0.4932	0.4932	-	-	0.49
Pu239	Neutrons térmicos	3.5064	2.8773	2.8770	2.8721	-	0.8206	0.8205	0.8191	-	0.82
Pu241	Neutrons térmicos	2.7414	2.9453	2.9313	-	-	1.0744	1.0693	-	-	1.07
Th232	Gama E = 6.44 MeV	2.8134	-	-	-	2.7306	-	-	-	0.9706	0.97
Th232	Gama E = 13.15 MeV	4.2521	-	-	-	4.0806	-	-	-	0.9597	0.96
Cf252	Fissão espontânea	3.7590	1.9173	-	-	-	0.5100	-	-	-	0.51
U235	Neutrons E = 0.01 MeV	2.43	2.42	-	-	-	1	-	-	-	1
U235	Neutrons E = 0.05 MeV	2.43	2.41	-	-	-	0.99	-	-	-	0.99
U235	Neutrons E = 0.1 MeV	2.43	2.42	-	-	-	1	-	-	-	1
U235	Neutrons E = 0.5 MeV	2.41	2.45	-	-	-	1.01	-	-	-	1.01
U235	Neutrons E = 1.0 MeV	2.46	2.52	-	-	-	1.02	-	-	-	1.02
Np238	Neutrons E = 5.5 MeV	3.19	-	-	-	3.46	-	-	-	1.09	1.09
U236	Neutrons térmicos	2.5	2.38	-	-	-	0.95	-	-	-	0.95
U236	Neutrons E = 0.5 MeV	2.41	2.41	-	-	-	1	-	-	-	1
U236	Neutrons E = 1.0 MeV	2.44	2.46	-	-	-	1.01	-	-	-	1.01
U236	Neutrons E = 1.5 MeV	2.5	2.52	-	-	-	1.01	-	-	-	1.01
U236	Neutrons E = 2.0 MeV	2.55	2.58	-	-	-	1.01	-	-	-	1.01
U236	Neutrons E = 2.5 MeV	2.57	2.64	-	-	-	1.03	-	-	-	1.03
U236	Neutrons E = 3.0 MeV	2.6	2.71	-	-	-	1.05	-	-	-	1.05
U236	Neutrons E = 3.5 MeV	2.6	2.79	-	-	-	1.08	-	-	-	1.08
U236	Neutrons E = 4.0 MeV	2.65	2.86	-	-	-	1.08	-	-	-	1.08
U236	Neutrons E = 4.5 MeV	2.65	2.93	-	-	-	1.11	-	-	-	1.11
U236	Neutrons E = 5.0 MeV	2.69	3.01	-	-	-	1.12	-	-	-	1.12
U236	Neutrons E = 5.5 MeV	2.74	3.08	-	-	-	1.13	-	-	-	1.13
U236	Neutrons E = 6.0 MeV	2.74	3.15	-	-	-	1.15	-	-	-	1.15
											1.01

Tabela 4.1: Comparação do modelo de nêutrons prontos e dados avaliados para diversas reações e alvos.

mentos.

As Figuras 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19 apresentam as simulações comparadas com o experimentos para a reação $^{197}\text{Au}+p(800\text{ MeV})$ [81], onde também utilizamos a estimativa de nêutrons prontos. Estes resultados mostram boa concordância entre simulação e experimento tanto em posição relativa dos picos de produção quanto em relação a amplitude e, portanto, sugerem que a consideração da produção de nêutrons pronto não podem ser negligenciadas nas simulações.

Figura 4.16: Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 18$ a $Z = 26$, comparadas com dados experimentais [81].

Figura 4.17: Paraboloides de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 27$ a $Z = 35$, comparadas com dados experimentais [81].

Figura 4.18: Paraboloides de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 36$ a $Z = 45$, comparadas com dados experimentais [81].

Figura 4.19: Parabolas de de fissão para ^{197}Au bombardeado por prótons de 800 MeV para $Z = 46$ a $Z = 49$, comparadas com dados experimentais [81].

4.3.3 Conclusão Parcial

A boa descrição dos processos nucleares obtidas com o CRISP mostram a efetividade do código na descrição dos processos nucleares, que vem sendo constantemente aprimorado e validado. Mas a auto-consistência do modelo, evidenciada pela estrutura de níveis implementada e pelo número reduzido de parâmetros do código como um todo, aliada com a validação dos cálculos mediante confronto com o experimento nos permite dizer que o CRISP é um código com confiabilidade. Ou seja, podemos utilizar o CRISP em processos onde não possuímos dados experimentais e certamente obteremos resultados que refletem a física do processo.

Capítulo 5

Multi-fragmentação do Núcleo

Para casos em que a energia de excitação por núcleons do núcleo residual do processo de spallation é da ordem de alguns MeV por núcleon, pode ocorrer o processo o qual é chamado de multi-fragmentação do núcleo. Neste processo o núcleo se fragmenta em diversas partes.

Do ponto de vista estatístico pode ser dividido nas seguintes fases: primeiramente a formação de um estado intermediário excitado do sistema nuclear (sistema composto) e formação de rachaduras; seguido pela formação dos primeiros fragmentos no estágio de expansão; e por fim, evaporação dos fragmentos resultantes.

O modelo de multi-fragmentação estatística, considera o modelo de gota líquida quente para a descrição do processo e as possíveis combinações entre os núcleons para formar os fragmentos.

Devido ao grande número de possibilidades de combinações e complexidade do espaço de partições, devemos escolher um bom conjunto para amostrar.

A amostragem deve ser escolhida com alguma variável global, tendo as possíveis combinações dos núcleons para a formação de fragmentos, tendo isso em vista consideramos uma variável global, que no caso é a multiplicidade do sistema. Com esta amostragem, a partir da função partição do sistema, podemos calcular as probabilidades de ocorrência de cada configuração descrevendo

todo o processo.

Apresentamos aqui a teoria e parametrizações dos modelos adotados juntamente com o algoritmo implementado por nós junto ao código CRISP.

5.1 Multi-fragmentação Estatística do Núcleo

Considere um processo físico cuja resultante é um sistema excitado caracterizado por: número de núcleons A_0 , carga Z_0 , Energia de excitação E_0 (aqui, medida a partir da energia do estado fundamental) e ocupando o volume V_0 , sistema este que possa ser comprimido e aquecido por algum processo dinâmico.

O processo de fragmentação pode ser separado nas seguintes fases (vide Fig. 5.1) :

1. Formação de um estado intermediário excitado do sistema nuclear (sistema composto) e formação de rachaduras;
2. Formação dos primeiros fragmentos no estágio de expansão;
3. Evaporação dos fragmentos resultantes.

O número total de bárions do sistema podem ser expressos em termos da multiplicidade N_{AZ} dos fragmentos com massa A e carga Z .

$$\sum_{AZ} N_{AZ} A = A_0, \quad (5.1)$$

$$\sum_{AZ} N_{AZ} Z = Z_0, \quad (5.2)$$

onde N_{AZ} é a multiplicidade do nuclídeo (A, Z) .

Devido a grande número de possibilidades de combinações e complexidade do espaço de partições, devemos escolher um bom conjunto para amostrar. Mas a amostragem deve ser escolhida com alguma variável global, pensando nisso devemos olhar para as possíveis combinações. Tendo isso em vista considere a

variável global M , a multiplicidade do sistema, definida como

$$M = \sum_{N_A} N_{A,Z}, \quad (5.3)$$

onde a soma é realizada em toda a partição N_{AZ} .

Seja $P(A, M)$ o número de possíveis partições com uma multiplicidade M fixada. Para obter $P(A, M)$ basta notar que $P(A, M)$ é igual ao número de partições com menos um núcleon (ou seja, $P(A - 1, M - 1)$), mais o número de partições que não possuem nenhum fragmento unitário (para obter esta basta observar que é numericamente igual ao número de partições obtidas ao se retirar um núcleon de cada partição, isto é, $P(A - M, M)$).

Com isso obtemos a seguinte relação de recorrência

$$P(A, M) = P(A - M, M) + P(A - 1, M - 1), \quad (5.4)$$

aplicando iterativamente a equação (5.4) é possível mostrar que¹

$$P(A, M) = \sum_{k=0}^{k=\frac{A}{M}-1} P(A - kM - 1, M - 1). \quad (5.5)$$

O número total de possíveis partições é dado por

$$P(A) = \sum_{M=1}^A P(A, M), \quad (5.6)$$

de forma que a razão

$$b(A, M) = \frac{P(A, M)}{P(A)}, \quad (5.7)$$

pode ser interpretada como a probabilidade da partição com A bárions, combinar-se em M fragmentos.

Devido o grande número de possibilidades de combinações torna-se inviável

¹Detalhes da função partição inteira é dado no Apêndice E.

Figura 5.1: *Processo de Multi-fragmentação.*

a simulação Monte Carlo do sistema, a equação (5.7) pode ser usada para realizar uma amostragem sobre as partições possíveis, restringindo a simulação à amostragem de M .

O sistema inicialmente composto de um núcleo (Z_0, A_0) com uma energia de excitação E^* , que posteriormente se fragmenta em fragmentos e massa A , e carga Z , com multiplicidade N_{AZ} . Desta forma a energia total (E_{tot}) do sistema

pode ser expressa como

$$E_{tot} = E_g^{A_0 Z_0} + E^* = E_{coul} + \sum_{AZ} N_{AZ} E^{AZ}, \quad (5.8)$$

onde $E_{coul} = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{R}$ é a energia Coulombiana global do sistema, $E_g^{A_0 Z_0}$ a energia do estado fundamental e E^{AZ} , usando o formalismo modelo de gota líquida, é expresso como:

$$E^{AZ} = E_B^{AZ} + E_S^{AZ} + E_{Asym}^{AZ} + E_C^{AZ} + E_{Tr}^{AZ}, \quad (5.9)$$

onde os termos do lado direito de (5.9) são respectivamente: o termo de volume (B), o termo de superfície (S), o termo de assimetria ($Asym$), termo de Coulomb do fragmento (C) e termo de translação (Tr). Algumas destas quantidades dependem do volume V_{free} disponível para o movimento dos fragmentos, bem como da temperatura nuclear (T).

5.1.1 Termo de Volume

Usando o modelo de gota líquida a contribuição de volume do sistema de multi-fragmentação vem de ambas fases gasosa e líquida da partição. Para uma teoria auto-consistente ambas as fases devem ser expressas por uma única função, isto é, a densidade de energia de volume por núcleon $\epsilon_B(\rho, T)$. A dependência da densidade nuclear ρ deve ser o mesmo parâmetro tanto para a fase líquida ρ_L quanto para a fase gasosa ρ_G .

Quando $T \rightarrow T_c$ a diferença entre as duas fases desaparece (ou seja, $\rho_G \rightarrow \rho_L$), o que está de acordo com o critério de Gibbs, ou seja, a caracterização destas quantidades devem ser as mesmas na proximidade do ponto crítico.

Dada a condição de completo equilíbrio termodinâmico as densidades das fases líquida e gasosa (ρ_G e ρ_L) para $T < T_c$ são dadas pela forma da função $\epsilon_B(\rho, T)$ que é uma Maxwelliana (sino de saturação representado na figura

Figura 5.2: Diagrama de Fase do sistema nuclear, a região gasosa consiste de um sistema composto somente de núcleons livres e a região do líquido de um sistema composto de núclídeos pesados .

5.2).

Considere, agora, a expansão de Sommerfeld [92] para baixas temperaturas (fundamental + excitação), que é dada por

$$\epsilon_B(\rho, T) = \left(\epsilon_B(\rho, 0) + \frac{T^2}{\epsilon_0} \right), \quad (5.10)$$

onde $\epsilon_0 = \frac{4}{\pi^2} \epsilon_F \approx 16 \text{ MeV}$ que é a densidade nuclear do gás de Fermi. É conhecido que para temperaturas $T < 20 \text{ MeV}$ esta aproximação (o fator $\frac{T^2}{\epsilon_0^2}$) é razoavelmente boa. O valor empírico de ϵ_0 é aproximadamente um fator 2 menor que 16 MeV e possui uma dependência clara de A quando confrontada com o experimento. Tendo isso em vista podemos considerar ϵ_0 um parâmetro livre o qual pode ser interpretado como a fração da energia total que é transformada em excitação interna de volume dos fragmentos.

O termo $\epsilon_B(\rho, 0)$ é a parte dependente da densidade do termo de volume

que pode ser parametrizado de maneira usual por [93]

$$\epsilon_B(\rho, 0) = W_0 + \frac{K}{18} \frac{(\rho - \rho_0)^2}{\rho_0^2}, \quad (5.11)$$

onde $W_0 = -16 \text{ MeV}$ é a energia de ligação da matéria nuclear infinita e $K \approx 220 \text{ MeV}$ é a compressibilidade (incompressibilidade nuclear) da matéria nuclear em $\rho = \rho_0$.

A baixas densidades, onde a interação entre núcleons é negligenciável, então

$$\epsilon_B(\rho \rightarrow 0, T) = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{10m_N} \left(\frac{3}{2} \pi^2 \rho \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (5.12)$$

onde m_N é a massa do núcleon.

É Possível fazer uma interpolação entre os dois limites e obter a formula desejada. Mas por simplicidade, admita as seguintes simplificações

$$\epsilon_B(\rho_L, 0) = W_0, \quad (5.13)$$

$$\epsilon_B(\rho_G, 0) = 0 \quad (T = T_c), \quad (5.14)$$

o que significa que para a fase líquida a matéria nuclear da partição possui o mesmo comportamento da matéria nuclear infinita, e para a fase gasosa a matéria não está ligada. Isto nos leva ao seguinte resultado:

$$E_B^{AZ} = \begin{cases} \left(W_0 + \frac{T^2}{\varepsilon_0} \right) A, & \text{se } T < T_c \\ 0, & \text{se } T > T_c \end{cases} \quad (5.15)$$

Desta forma, usando as conhecidas relações termodinâmicas [94]

$$E = F + TS \quad (5.16)$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad (5.17)$$

podemos escrever

$$E_B^{AZ} = \left(W_0 + \frac{T^2}{\varepsilon_0} \right) A \quad (5.18)$$

$$S_B^{AZ} = -\frac{2T}{\varepsilon_0} A \quad (5.19)$$

$$F_B^{AZ} = \left(W_0 - \frac{T^2}{\varepsilon_0} \right) A \quad (5.20)$$

Devemos ter em mente que as relações acima não são validas para temperaturas muito baixas ou para fragmentos muito leves. A restrição para temperaturas muito baixas vem do fato que somente é valida se o temperatura excede o nível de espaçamento entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados do fragmento A , $T > \frac{\varepsilon_F}{A}$ (C.f. [95]).

5.1.2 Termo de Superfície

O termo de superfície do modelo é de grande importância pois devemos determinar os tamanhos ótimos dos fragmentos. Obviamente a tensão da superfície que delimita o fragmento diminui com o aumento da temperatura e tende a zero nas proximidades da temperatura crítica (T_c).

Considerando o fato de que (correlações de fluidos) a tensão (σ), a uma temperatura finita, é proporcional ao comprimento especifico e a densidade de energia livre. Das correlações sabemos (C.f. [46]) que a densidade de energia livre é proporcional a $(T_c - T)^{2-\alpha}$, onde α é o índice critico para o calor especifico. Mas a correlação do comprimento nos da a proporcionalidade $(T_c - T)^{-\nu}$, o que fornece a proporcionalidade da tensão da forma $\sigma \propto (T_c - T)^{2-\alpha-\nu}$, mas a relação ente as escalas se dá na forma $2 - \alpha = \nu d$ [46], onde d é um adimensional. De forma que o potencial termodinâmico deve escalonar com $(T_c - T)^{2\nu}$ onde o índice ν para um sistema clássico gás-liquido esta na faixa 0.62-0.63 com isso podemos dizer que a tensão varia segundo a $(T_c - T)^{\frac{5}{4}}$.

Uma interpolação usando o formalismo de Thomas-Fermi a baixas temper-

aturas foi efetuado em [96] cujo fórmula explícita é dada por

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(\frac{T_c^2 - T^2}{T_c^2 + T^2} \right)^{\frac{5}{4}}, \quad (5.21)$$

e será usada aqui.

A energia livre se relaciona com a tensão pela

$$F_s = \sigma(T) S, \quad (5.22)$$

onde S é a área da interface, i.e., $S = 4\pi R^2 = 4\pi \left(r_0 A^{\frac{1}{3}} \right)^2 = 4\pi r_0^2 A^{\frac{2}{3}}$, assim

$$F_s^{AZ} = 4\pi r_0^2 \sigma_0 \left(\frac{T_c^2 - T^2}{T_c^2 + T^2} \right)^{\frac{5}{4}} A^{\frac{2}{3}} \equiv \beta(T) A^{\frac{2}{3}}, \quad (5.23)$$

mas em $T = 0$ devemos ter

$$\beta(T = 0) = \beta_0 = 18.0 \text{ MeV}. \quad (5.24)$$

usando (5.16-5.17) obtemos finalmente que

$$S_S^{AZ} = -\frac{\partial \beta}{\partial T} A^{\frac{2}{3}}, \quad (5.25)$$

$$E_S^{AZ} = \left(\beta - T \frac{\partial \beta}{\partial T} \right) A^{\frac{2}{3}}. \quad (5.26)$$

Vale a pena notar que as relações acima são válidas somente sob a condição de equilíbrio térmico do sistema, ou seja, líquidos e gases devem possuir a mesma temperatura no sistema, o que não é muito real uma vez que é conhecido que as temperaturas de líquidos e gases são diferentes na realidade. Nas proximidades da temperatura crítica na situação de não equilíbrio a tensão deve ser reduzida de algum fator, para tanto podemos considerar T_c um parâmetro livre.

5.1.3 Termo de Coulomb

A energia de Coulomb do sistema (E_C) pode ser escrita como a soma da energia de Coulomb de uma esfera uniformemente carregada com carga Z_0 e raio R igual ao raio do sistema somado com uma contribuição adicional devida aos prótons de cada fragmento, i.e.

$$E_C = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{R} + \sum_{AZ} N_{AZ} E_C^{AZ}, \quad (5.27)$$

onde E_C^{AZ} é a energia de Coulomb adicional devido aos fragmentos com carga Z e massa A .

Uma aproximação obtida por Wigner-Seitz nos fornece uma formula simples (C.f. [97]) para essa contribuição a qual é

$$E_C^{AZ} = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{R_{AZ}} \left[1 - \frac{R_{AZ}}{R} \right], \quad (5.28)$$

onde Z é a carga do fragmento e $R_{AZ} = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ o raio do fragmento e R o raio do sistema o qual pertence o fragmento. O raio do sistema esta relacionado com a densidade de bárions dentro do Fragmento (ρ_{AZ}) e com a densidade media de bárions do sistema segundo a lei

$$\frac{R_{AZ}}{R} = \left(\frac{\frac{Z_0}{A_0} \rho}{\frac{Z}{A} \rho_{AZ}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (5.29)$$

Em (5.28) a contribuição desaparece quando os fragmentos preenchem todo o espaço ($\frac{R_{AZ}}{R}$) e se aproxima da energia de um fragmento quando estão distantes um do outro ($\rho \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$). Note que quando $\frac{R_{AZ}}{R} \rightarrow 1$ temos somente o primeiro termo de (5.27), o qual tende a zero da mesma forma que a contribuição dos fragmentos individualmente.

Nas proximidades de R_0 a contribuição dos diversos fragmentos cresce com R

enquanto a energia de Coulomb do sistema decresce com $\frac{1}{R}$ e com isso podemos determinar uma figura de barreira de fragmentação juntamente com a energia de superfície (originada por interações de curto alcance entre núcleons) e a energia total Coulombiana (interações de longo alcance) vide Figura 5.3.

Figura 5.3: Esquematica da energia em função do raio e barreira de Fragmentação.

A dependência do termo de Coulombiano com a temperatura é desprezada pois sua variação é pequena em comparação com os demais termos do modelo de gota.

Seja V_0 o volume do núcleo no estado fundamental e V o volume do sistema composto, então podemos relacionar-los de maneira usual por

$$V = (1 + \chi) V_0, \quad (5.30)$$

onde χV_0 é o volume disponível para o movimento dos fragmentos, que deve depender da multiplicidade (M) do sistema (partição), usaremos a formula paramétrica (C.f [97, 98]) na qual é estimada supondo que o volume livre é expresso pela superfície total da interface dos fragmentos vezes o comprimento de quebra, $2d$, da ordem do alcance das força nucleares.

$$\chi = \left(1 + \frac{d}{R_0} \left(M^{\frac{1}{3}} - 1\right)\right)^3 - 1, \quad (5.31)$$

onde $R_0 = 1.17A^{\frac{1}{3}}$. Para altas temperaturas $2d$ é da ordem de $1.4 fm$ para densidades de fragmentação da ordem de $\frac{1}{3}\rho_0$ ($0.05 fm^{-3}$), já para baixas temperaturas ($T \approx 10 MeV$) quando há a formação de fragmentos grandes este comprimento é estimado através de separação entre as superfícies esféricas dos fragmentos formados localizado a uma distancia onde a interação coulombiana e nuclear são compensadas. Para este caso temos $2d \approx 2.8 fm$.

É admitido na literatura a seguinte relação (C.f. [99])

$$\chi = \left(1 + \frac{D}{2r_0 A^{\frac{1}{3}}} \left(M^{\frac{1}{3}} - 1\right)\right)^3 - 1, \quad (5.32)$$

onde $D = 2.3r_0$ e é o usado neste modelo.

O raio do sistema esta relacionado com as densidades bariônica do fragmento ρ_{AZ} e a densidade média ρ do sistema (C.f. [97, 100]) por

$$\frac{R_{AZ}}{R} = \left(\frac{\frac{Z_0}{A_0}\rho}{\frac{Z}{A}\rho_{AZ}}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{1}{(1 + \chi)^{\frac{1}{3}}}, \quad (5.33)$$

oque nos leva a

$$E_C^{AZ} = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{R_{AZ}} \left[1 - \frac{1}{(1 + \chi)^{\frac{1}{3}}}\right], \quad (5.34)$$

ou

$$E_C^{AZ} = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{r_0 A^{\frac{1}{3}}} \left[1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \right] = \frac{3}{5} \frac{Z_0^2 e^2}{r_0 A^{\frac{1}{3}}} \left[1 - \frac{1}{(1 + \chi)^{\frac{1}{3}}} \right]. \quad (5.35)$$

5.1.4 Termo de Assimetria

O termo de Assimetria é considerado, aqui, independente da temperatura (C.f [101]) e é dado por

$$E_{Asym} = K_{asym} \frac{(A - 2Z)^2}{A \left(1 + \frac{9}{4} \frac{K_{asym}}{A^{\frac{1}{3}} Q_{asym}} \right)}, \quad (5.36)$$

onde K_{asym} é o volume de assimetria e Q_{asym} é a energia de assimetria de superfície, oque nos leva obviamente a

$$S_{Asym}^{AZ} = 0, \quad (5.37)$$

$$F_{Asym}^{AZ} = E_{Asym}^{AZ}. \quad (5.38)$$

5.1.5 Função Distribuição e Função Partição

Considerando o sistema de multi-fragmentação separado em subsistemas, cada um desses contendo apenas um fragmento tipo (A, Z) e sua respectiva multiplicidade N_{AZ} . Supondo ,também, que não há interações entre fragmentos, o que usando a hipótese de que somente um volume $V_f = \chi V_0$ esta disponível para o movimento dos fragmentos podemos fatorar a função partição como

$$Z_{AZ}^T Z_{AZ}^{int}, \quad (5.39)$$

onde Z_{AZ}^T é a função partição translacional (que inclui os termos de movimento dos fragmentos limitados pelo volume V_f) e Z_{AZ}^{int} é a função partição interna (que inclui os termos de excitação interna e interação Coulombiana). Como possuímos N_{AZ} fragmentos idênticos devemos descontar as contagens duplas

no espaço de configuração do sistema escrevendo a função partição total do sistema como

$$Z_{AZ} = \frac{(Z_{AZ}^T Z_{AZ}^{int})^{N_{AZ}}}{N_{AZ}!}, \quad (5.40)$$

onde $N_{AZ}!$ é o número de permutações dos N_{AZ} fragmentos.

O termo translacional é obtido de maneira usual por

$$Z_{AZ}^T = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{p_{AZ}^2}{2m_{AZ}T}\right) = g_{AZ} V_f \left(\frac{m_{AZ}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (5.41)$$

$$= \frac{g_{AZ} V_f}{\lambda_T^3} A^{\frac{3}{2}}, \quad (5.42)$$

onde $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m_N T}}$ é o comprimento de onda térmico do núcleon, g_{AZ} é o fator de degenerescência e m_{AZ} é a massa efetiva translacional do fragmento, que para estes cálculos é adotado a simplificação $m_{AZ} = Am_N$ onde m_N é a massa do núcleon livre. Esta aproximação pode não ser adequada para o caso particular onde existe muitos núcleons no sistema, uma vez que o movimento dos fragmentos atua para aumentar a massa efetiva (C.f. [102])

Usando as relações (5.16-5.17) podemos escrever a energia livre do sistema como

$$F_{AZ} = F_{AZ}^T + F_{AZ}^{int}, \quad (5.43)$$

onde

$$F_{AZ}^T = -T \left(\ln(Z_{AZ}^T) - \frac{\ln(N_{AZ}!)}{N_{AZ}} \right), \quad (5.44)$$

é a energia livre translacional e

$$F_{AZ}^{int} = -T \ln(Z_{AZ}^{int}), \quad (5.45)$$

a energia livre interna que pode ser parametrizada, usando o modelo de gota

liquida, como (seguindo a notação do texto)

$$F_{AZ}^{int} = F_{AZ}^B + F_{AZ}^S + F_{AZ}^{Asym} + F_{AZ}^C, \quad (5.46)$$

A contribuição translacional da entropia, usando é dada por

$$S_{AZ}^T = - \left(\frac{\partial F_{AZ}^T}{\partial T} \right)_V = \left(\ln(Z_{AZ}^T) - \frac{\ln(N_{AZ}!)}{N_{AZ}} \right) + T \frac{1}{Z_{AZ}^T} \frac{\partial Z_{AZ}^T}{\partial T}, \quad (5.47)$$

$$= \left(\ln(Z_{AZ}^T) - \frac{\ln(N_{AZ}!)}{N_{AZ}} \right) + \frac{3}{2}. \quad (5.48)$$

A equação (5.48) e (5.44) nos fornece

$$E^T = \frac{3}{2}T, \quad (5.49)$$

que é independente da massa do fragmento e volume do sistema que é conhecido como limite de Boltzmann. O que é um resultado importante uma vez que medidas experimentais (C.f. [103, 104]) mostram que o espectro de energia cinética dos fragmentos possuem valores bastante próximos uns aos outros.

5.1.6 Fragmentos Leves e Núcleons

O modelo de gota liquida é uma boa aproximação para núclídeos pesados mas núclídios leves e núcleons devem ser tratados de maneira diferenciada. Assim os núclídios 2H , 3H , e 3He são tratados como partículas elementares sem estados de excitação interna. Para estas partículas somente o movimento translacional e a interação de Coulomb contribuem para a energia livre do sistema.

As partículas α possuem somente alguns estados de excitados e esta contribuição é incluída somente na energia de volume, sendo assim a seguinte parametrização é incluída

Para $A \leq 3$ usamos (C.f. [98])

$$F_{int}^{AZ} = -B^{AZ} + F_{AZ}^C, \quad (5.50)$$

$$E_{int}^{AZ} = -B^{AZ} + F_{AZ}^C, \quad (5.51)$$

$$S^{AZ} = 0 \quad (5.52)$$

e para $A = 4$

$$F_{int}^{AZ} = -B^{AZ} - A \frac{T^2}{\varepsilon_0} + F_{AZ}^C, \quad (5.53)$$

$$E_{int}^{AZ} = -B^{AZ} + A \frac{T^2}{\varepsilon_0} + F_{AZ}^C, \quad (5.54)$$

$$S^{AZ} = -2A \frac{T}{\varepsilon_0}. \quad (5.55)$$

5.1.7 O algoritmo (Simplificado)

O processo de escolha da partição para um núcleo (A_0, Z_0) com energia de excitação E^* , pode ser dividido da seguinte maneira:

1. A Multiplicidade M é escolhida de acordo com a cumulativa

$$b(M) = \frac{P(A_0, M)}{P(A_0)};$$

2. A partição é aleatoriamente construída dividindo a linha de comprimento A_0 em M segmentos.
3. A temperatura (T) de partição é calculada, se $T \in [0, T_c]$ a partição é aceita e o processo continua, caso contrário a partição é descartada e se inicia outro processo.
4. A Probabilidade

$$W = \exp(S)$$

é calculada para a partição.

5. As grandezas Q são calculadas e o processo é repetido N vezes.

A figura 5.4 (abaixo) ilustra graficamente o processo.

Figura 5.4: *Algoritmo do processo.*

Os cabeçalhos e diagramas do código implementado esta descrito do Apêndice F.

5.2 Resultados

Apresentamos nesta secção os resultados obtidos com o modelo de multi-fragmentação implementado no CRISP. Lembramos aqui que a reação de multi-fragmentação possui limiar e adotamos o limiar de 2,5 MeV por núcleon.

5.2.1 Reação: $Fe + p(500MeV)$

Apresentamos nas figuras 5.5 a 5.9 as parábolas de produção obtidas com o CRISP (Cascata + evaporação + multi-fragmentação) para a reação $Fe + p(500MeV)$ dos núclídeos com $Z = 10$ a $Z = 27$ comparadas com dados experimentais da referencia [105].

Figura 5.5: Parábolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{10}Ne$ e $_{11}Na$

Figura 5.6: Parábolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para $_{12}Mg$, $_{13}Al$, $_{14}Si$ e $_{15}P$ comparadas com dados experimentais.

Figura 5.7: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{16}S , ^{17}Cl , ^{18}Ar e ^{19}K comparadas com dados experimentais.

Figura 5.8: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{20}Ca , ^{21}Sc , ^{22}Ti e ^{23}V comparadas com dados experimentais.

Figura 5.9: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{24}Cr , ^{25}Mn , ^{26}Fe e ^{27}Co comparadas com dados experimentais.

5.2.2 Reação: $Fe + p(750MeV)$

Apresentamos nas figuras 5.10 a 5.14 as parábolas de produção obtidas com o CRISP (Cascata + evaporação + multi-fragmentação) para a reação $Fe + p(750MeV)$ dos núclídeos com $Z = 8$ a $Z = 27$ comparadas com dados experimentais da referencia [105].

Figura 5.10: Parábolas de produção obtidas com *CRISP/MCEF/MCSMM* para ${}_8O$, ${}_9F$, ${}_{10}Ne$ e ${}_{11}Na$

Figura 5.11: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{12}Mg , ^{13}Al , ^{14}Si e ^{15}P comparadas com dados experimentais.

Figura 5.12: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{16}S , ^{17}Cl , ^{18}Ar e ^{19}K comparadas com dados experimentais.

Figura 5.13: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{20}Ca , ^{21}Sc , ^{22}Ti e ^{23}V comparadas com dados experimentais.

Figura 5.14: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{24}Cr , ^{25}Mn , ^{26}Fe e ^{27}Co comparadas com dados experimentais.

5.2.3 Reação: $Fe + p(1000MeV)$

Apresentamos nas figuras 5.15 a 5.20 as parábolas de produção obtidas com o CRISP (Cascata + evaporação + multi-fragmentação) para a reação $Fe + p(1000MeV)$ dos núclídeos com $Z = 3$ a $Z = 26$ comparadas com dados experimentais da referencia [105].

Figura 5.15: Parábolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ${}_3Li$, ${}_4Be$, ${}_5B$ e ${}_6C$

Figura 5.16: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ${}^7\text{N}$, ${}^8\text{O}$, ${}^9\text{F}$ e ${}^{10}\text{Ne}$ comparadas com dados experimentais.

Figura 5.17: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ${}^{11}\text{Na}$, ${}^{12}\text{Mg}$, ${}^{13}\text{Al}$ e ${}^{14}\text{Si}$ comparadas com dados experimentais.

Figura 5.18: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{15}P , ^{16}S , ^{17}Cl e ^{18}Ar comparadas com dados experimentais.

Figura 5.19: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{19}K , ^{20}Ca , ^{21}Sc e ^{22}Ti comparadas com dados experimentais.

Figura 5.20: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{23}V , ^{24}Cr , ^{25}Mn , ^{26}Fe comparadas com dados experimentais.

5.2.4 Reação: $Fe + p(1500MeV)$

Apresentamos nas figuras 5.21 a 5.25 as parábolas de produção obtidas com o CRISP (Cascata + evaporação + multi-fragmentação) para a reação $Fe + p(1500MeV)$ dos núclídeos com $Z = 8$ a $Z = 27$ comparadas com dados experimentais da referencia [105].

Figura 5.21: Parábolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ${}_8O$, ${}_9F$, ${}_{10}Ne$ e ${}_{11}Na$ comparadas com dados experimentais.

Figura 5.22: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{12}Mg , ^{13}Al , ^{14}Si e ^{15}P comparadas com dados experimentais.

Figura 5.23: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM para ^{16}S , ^{17}Cl , ^{18}Ar e ^{19}K comparadas com dados experimentais.

Figura 5.24: Parabolas de produção obtidas com *CRISP/MCEF/MCSMM* para ^{20}Ca , ^{21}Sc , ^{22}Ti e ^{23}V comparadas com dados experimentais.

Figura 5.25: Parabolas de produção obtidas com *CRISP/MCEF/MCSMM* para ^{24}Cr , ^{25}Mn , ^{26}Fe e ^{27}Co comparadas com dados experimentais.

5.2.5 Reação: $^{238}\text{U} + p(1000\text{MeV})$

Apresentamos nas figuras 5.26 a 5.30 as parábolas de produção de núclídeos leves obtidas com o CRISP (somente Cascata multi-fragmentação) para a reação $^{238}\text{U} + p(1000\text{MeV})$ dos núclídeos com $Z = 7$ a $Z = 26$ comparadas com dados experimentais da referencia [106, 107].

Figura 5.26: Parábolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para ${}^7\text{N}$, ${}^8\text{O}$, ${}^9\text{F}$ e ${}^{10}\text{Ne}$ comparadas com dados experimentais.

Figura 5.27: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para ^{11}Na , ^{12}Mg , ^{13}Al e ^{14}Si comparadas com dados experimentais.

Figura 5.28: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para ^{15}P , ^{16}S , ^{17}Cl e ^{18}Ar comparadas com dados experimentais.

Figura 5.29: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para ^{19}K , ^{20}Ca , ^{21}Sc e ^{22}Ti comparadas com dados experimentais.

Figura 5.30: Parabolas de produção obtidas com CRISP/MCSMM para ^{23}V , ^{24}Cr , ^{25}Mn e ^{26}Fe comparadas com dados experimentais.

5.2.6 Conclusão Parcial

Os resultados referente ao modelo de multi-fragmentação desenvolvido no código CRISP, o qual inclui multi-fragmentação e evaporação/fissão, apresentou consistência em relação aos dados experimentais para todos núclídeos simulados e energias incidentes, em especial para o ^{56}Fe os resultados se mostram, de maneira geral, bons tanto em forma quanto em amplitude em toda a gama produção estudada, observamos variações grandes na amplitude das secções de choque de produção para a região de evaporação, figuras 5.24, 5.25, 5.19, 5.20, 5.13, 5.14, 5.8 e 5.9 (região com $A = [35 - 45]$), estas variações podem ser minimizadas adotando valores de energia de limiar específicas para cada núclídeo, no nosso caso o valor de 2.5 MeV/A é adotado.

Já para ^{238}U os resultados apresentam boa concordância em relação a forma da distribuição mas em relação à amplitude começa levemente baixa para os núclídeos mais leves e se distancia a medida que a massa dos núclídeos aumenta, esta variação com o numero de massa é esperada (para $Z = 20 - 26$), figuras 5.29 e 5.30, uma vez que esta região é o inicio da região dos produtos de fissão. Devemos ter em mente também que para obtenção das secções de choque de multi-fragmentação usamos a secção de choque geométrica definida de maneira usual ($\sigma_{geo} = \pi r(A)^2$, com $r(A) = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ onde $r_0 = 1.2$) mas o valor de r_0 deve variar para núclídeos com massa grandes, variações essas devidas ao campo nuclear do sistema.

Apresentamos nas figuras 5.32 e 5.32 as secções de choque de produção em função do número de massa obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM comparativamente com resultados obtidos via simulação MCNPX/ISABEL/ABLA (MCNPX/BERTINI/DESNER) e dados experimentais para a reação $Fe + p(1000MeV)$ ($Fe + p(1000MeV)$). Nestas figuras podemos notar que na região com o numero de Massa na faixa de $[35 - 40]$ uma baixa produção, esta dis-

Figura 5.31: *Seção de choque de produção em função do número de massa obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM comparativamente com os resultados obtidos via simulação MCNPX/ISABEL/ABLA para a reação $Fe + p(750MeV)$ e com dados experimentais.*

Figura 5.32: *Seção de choque de produção em função do número de massa obtidas com CRISP/MCEF/MCSMM comparativamente com os resultados obtidos via simulação MCNPX/BERTINI/DRESNER para a reação $Fe + p(1000MeV)$ e com dados experimentais.*

crepância advém da conexão entre os dois modelos e pode ser melhorada mediante ajustes de um parâmetro, a energia de limiar. Para a região de multifragmentação, com o número de Massa na faixa de $[4 - 25]$, a produção é observada em toda a faixa de valores com o código CRISP, já com outros modelos sequer foi observada alguma produção. É importante notar que o objetivo principal não é a descrição exata da produção dos diversos núclídeos mas sim a obtenção de resultados razoáveis, já que uma parametrização específica pode ser realizada para a descrição de um determinado núclídeo, uma boa descrição média é desejável devida a falta de dados experimentais disponíveis na faixa de energia dessas reações.

Capítulo 6

Conclusões

Este trabalho apresentou os principais modelos de reações nucleares, em particular as de spallation, e os principais códigos usados para cálculos destas reações.

A primeira parte deste trabalho é dedicada à implementação e qualificação da metodologia de cálculo do termo fonte de nêutrons dentro de um esforço internacional (C.f Capítulo 3), um projeto coordenado de pesquisa junto à Agencia Internacional de Energia Atômica com o título "Analytical and Experimental Benchmark Analysis of ADS" em particular o exercício "Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in lead target exposed to 660 MeV proton", tendo por objetivo qualificar a aplicação das ferramentas de cálculo disponíveis, em particular o programa MCNPX, a fim de realizar simulações do alvo de "spallation" para melhorar o conhecimento sobre a acúmulo de produtos da reação no alvo de chumbo.

Foi dada atenção especial à estimativa dos parâmetros relacionados aos produtos de reação criados no alvo de "spallation" proposto como exercício.

Para a predição da produção dos nuclídeos residuais, os resultados obtidos mediante simulação com o MCNPX foram comparados com resultados de referência, simulações dos diversos participantes e experimento obtidos no âmbito

do exercício de benchmark, mostrando, de maneira geral, que as previsões obtidas com o MCNPX em nossa participação estão boas em relação aos principais núclídeos produzidos, possuindo algumas discrepâncias em relação à produção de alguns núclídeos específicos oriundos de parâmetros considerados em nossas simulações.

Os resultados comparados permitem concluir, em relação à atividade instantânea integrada em todo o alvo, que os resultados se mostram consistentes para todos os participantes quando usado o mesmo modelo nuclear e que as diferenças entre modelos são significantes.

Para a atividade integrada, a comparação dos resultados das simulações dos diversos participantes com o experimento mostram um pior desempenho para os modelos CEM e Bertini/Dresner, seguido dos modelos INCL4, ISABEL/Abla e Bertini/Abla e por fim os modelos ISABEL/Dresner e Fluka com melhor desempenho, porém tal desempenho não é satisfatório para propósito de projeto de um ADS.

Análise quantitativa dos 13 resultados calculados para diferentes núclídeos mostram um melhor desempenho em relação à produção dos núclídeos ^{185}Os , ^{183}Re , ^{175}Hf e ^{207}Bi enquanto para os núclídeos de ^{60}Co e ^{121}Te quase todos os resultados dos cálculos são subestimados. E em relação aos núclídeos mais pesados temos principalmente resultados superestimados.

E em relação às distribuições da atividade ao longo do alvo, os resultados comparados mostram um comportamento diferente para os radionúclídeos diferentes: para ^{95}Nb observamos uma subestimação em todos os modelos, especialmente para a CEM e Bertini/Dresner; para ^{183}Re vemos superestimação, em especial para os modelos CEM e Bertini/Dresner.

Em suma, os resultados mostram que ainda existe discrepâncias entre vários modelos, e que estas discrepâncias necessitam serem melhores investigadas de modo a convergir para melhores resultados.

A segunda parte deste trabalho é dedicada à reação de multi-fragmentação. Que é o ponto principal deste trabalho e reside na implementação do modelo de multi-fragmentação junto ao código CRISP, que foi realizado e foi qualificado por intermédio de comparação com dados experimentais disponíveis. Os resultados mostraram boa concordância com os dados experimentais e comparativamente com alguns casos simulados com outros códigos (C.f Capítulo 5).

Os núclídeos analisados foram o ^{56}Fe para as reações de spallation com prótons, com energias de 300 a 1500 MeV e o ^{238}U para as reação de spallation com prótons de 1000 MeV.

Para todos os casos analisados a posição relativa dos picos das distribuições de produção mostram-se compatíveis com os dados experimentais.

Onde para o ^{56}Fe a maioria dos núclídeos produzidos na simulação as secções de choque de produção apresentam valores compatíveis com o experimento, exceto nas regiões de transição multi-fragmentação/evaporação onde obtemos valores subestimados.

Para o ^{238}U a maioria dos núclídeos produzidos na simulação as secções de choque de produção apresentam valores compatíveis, se distanciando a medida que se aproxima das regiões de transição multi-fragmentação/fissão.

Em relação a forma, as parábolas do experimento são menos largas que as obtidas na simulação, isso é devido a parametrização utilizada no modelo de gota, em especial ao parâmetro de simetria utilizado.

Os resultados obtidos para o modelo de multi-fragmentação implementado junto ao CRISP proporciona uma visão otimista tanto para o código quanto para o futuro deste trabalho, uma vez que obtivemos valores compatíveis em ordem de grandeza e posições relativas dos picos das parábolas de produção comparativamente com o experimento, resultados estes que contemplam a ideia inicial do trabalho. Melhorias devem ser realizadas a fim de aprimorar mo mod-

elo, tais como parametrizações específicas dos parâmetros do modelo apresentado neste trabalho, em especial o parâmetro de simetria do modelo de gota a fim minimizar o erro sistêmico da espessura das parábolas de produção e da energia de limiar de forma a melhorar as amplitudes das parábolas de produção.

6.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Em relação a metodologia de projeto de alvo, a série de modelos, seus respectivos parâmetros e combinações implementados no programa MCNPX dá margem a pergunta : Qual a melhor configuração? - De forma que um estudo das combinações/parâmetros que melhor reproduzem o dados experimentais deve ser realizada no futuro.

Em relação ao modelo de multi-fragmentação implementado, um melhor conjunto de parâmetros do modelo deve ser escolhido de forma a minimizar as diferenças dos resultados simulado e experimentais, para isso uma série de ferramentas computacionais é hoje em dia disponível para este proposito, e é aqui sugerido.

Finalmente, a incorporação do CRISP em algum código Monte Carlo de transporte espacial de partículas, tal como o MCNPX [33] ou GEANT [45], deve ser um objetivo a ser perseguido.

Apêndice A

Modelo do gás de Fermi

A complexidade inerente à estrutura nuclear impede, de maneira geral, que o núcleo seja tratado com um sistema microscópico fazendo com que sejam invocados modelos estatísticos e termodinâmicos em seu tratamento. Tal sistemática concentra-se na análise das propriedades de uma parte do sistema, propriedades estas que, a priori, devem se refletir nas propriedades gerais do sistema e que permite, do ponto de vista estatístico, tratar o sistema físico de maneira geral.

No estado fundamental o núcleo se encontra no menor estado energético possível, ou seja, temperatura zero, neste estado o ponto de vista estatístico, permite inferir que as propriedades do sistema a partir das propriedades de uma simples partícula que por sua vez estão associadas com o estado de um gás que compõem o núcleo.

À temperaturas bastante baixas as partículas integrantes do sistema obedecem estatísticas de Fermi-Dirac e é possível mostrar que a energia de excitação E^* de um núcleo se relaciona com a temperatura nuclear T no modelo estatístico dinâmico para o núcleo. Para um gás constituído de n partículas a uma temperatura T esta relacionado com a energia à temperatura zero pela

expresso, obtida inicialmente por Sommerfeld [108]

$$E(T) = E(0) \left[1 + \frac{3\pi^2 n^2}{20} \left(\frac{kT}{E(0)} \right)^2 + \dots \right], \quad (\text{A.1})$$

com

$$E(0) = \frac{3}{5} n E_f, \quad (\text{A.2})$$

onde E_f denota uma energia limite a qual é conhecida, hoje em dia, como Energia de Fermi.

A energia de excitação E^* correspondendo a uma temperatura T , é portanto

$$E^* = E(T) - E(0) = \frac{\pi^2 n^2}{4n E_f} (kT)^2 = \alpha (kT)^2. \quad (\text{A.3})$$

Dentro dos vários modelos estatísticos usados em física nuclear destaca-se o modelo de gás de Fermi que ao contrario do conhecido modelo da gota líquida tem como foco as propriedades de uma partícula, e não a coletividade. Considere uma partícula quântica no espaço infinito, segue daí que a dinâmica deste sistema é descrita pela equação de onda

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.4})$$

e para estados estacionários da energia, temos por solução deste sistema:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (\text{A.5})$$

$$\varepsilon_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}. \quad (\text{A.6})$$

Para discretizar o continuo de estados devemos restringir a função de onda em cubo de lado a ; $x, y, z = 0, \dots, a$. O que requer que a função de onda se anule em cada extremo do cubo (condições periódicas de contorno), com isso é imediato

que

$$k_x = \frac{\pi}{a}n_x, k_y = \frac{\pi}{a}n_y, k_z = \frac{\pi}{a}n_z, n_i = 1, 2, \dots, \quad (\text{A.7})$$

assim os autovalores da energias são expressos por

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (\text{A.8})$$

Se considerarmos o argumento em coordenadas esféricas podemos escrever

$$dN = dn_x dn_y dn_z = n 2dn d\Omega, \quad (\text{A.9})$$

onde devemos ter em mente que os n_i esto limitados ao primeiro octante do espaço dos n_i , desta forma

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (\text{A.10})$$

o que nos leva densidade de estados

$$\rho = \frac{N}{a^3} = \frac{1}{a^3} \int dN = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^2} \left(\frac{m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{E_f} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon, \quad (\text{A.11})$$

onde a integração é realizada até uma energia limite, a energia de Fermi E_f .

Segue dai que

$$E_f = \frac{\hbar^2 \sqrt{6\pi^2 \rho}}{2m}. \quad (\text{A.12})$$

Se considerarmos o número de estados no formalismo de momento, ao invés da energia, indicando por V o volume da caixa, então o número de estados no volume com momento na faixa $(p, p + dp)$ dado por

$$dn = \frac{4\pi p^2 V}{\hbar^3}. \quad (\text{A.13})$$

Logo o número de estados contido no volume é

$$n = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{max}} 4\pi p^2 dp = \frac{gp_{max}^3}{6\pi^2\hbar^3}, \quad (\text{A.14})$$

onde p_{max} é o momento máximo possível, o momento de Fermi. Se considerarmos os estados degenerados de spin $s = \pm\frac{1}{2}$ devemos considerar o fator $g = 2$ na expresso acima de forma que

$$n = \frac{p_{max}^3}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (\text{A.15})$$

Quando um gás degenerado se encontra no estado fundamental, todos seus estados esto ocupados de forma que, para prótons e neutros, o momento é dado por

$$p_{max}^{(n)} = (3\pi)^{\frac{1}{3}} \hbar \left(\frac{A-Z}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (\text{A.16})$$

$$p_{max}^{(p)} = (3\pi)^{\frac{1}{3}} \hbar \left(\frac{Z}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (\text{A.17})$$

e a energia correspondente, supondo agora contidos em uma esfera de raio r ($V = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$),

$$E_f^{(n)} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_n r_0^2} \left(\frac{A-Z}{A} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (\text{A.18})$$

$$E_f^{(9)} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_n r_0^2} \left(\frac{Z}{A} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (\text{A.19})$$

jordens de grandeza e dependência de r_0 - terminar depois;

Se fizermos, para fins práticos, $\frac{Z}{A} 0.55$ e $\frac{A-Z}{A} \sim 0.45$ e $r_0 = 1.4 fm$, obtemos

$$E_f^{(n)} \sim 26 MeV \quad (\text{A.20})$$

$$E_f^{(9)} \sim 23 MeV \quad (\text{A.21})$$

Figura A.1: Níveis de Fermi em relação ao poço de Potencial.

e adotarmos a energia de ligação média por núcleon 8 Mev , temos uma indicação de que a barreira potencial de Fermi é bastante rasa, e tomando $r_0 = 1.1 \text{ fm}$, obtemos

$$E_f^{(n)} \sim 43 \text{ MeV} \quad (\text{A.22})$$

$$E_f^{(p)} \sim 37 \text{ MeV} \quad (\text{A.23})$$

o que um resultado bastante razoável com dados experimentais. Perceba que a energia do gás de nêutrons sempre excede a do gás de prótons, o que devido ao fato de que o potencial do gás de prótons deve ser menos simétrico que a do gás de nêutrons.

Com essas considerações podemos obter de (A.3) a energia de excitação

$$E^* = E_{(p)}^* + E_{(n)}^* = 0,25 (kT)^2, \quad (\text{A.24})$$

onde T é a temperatura nuclear.

Para derivar a densidade de níveis de energia, neste modelo simplificado,

considere a equação de Boltzmann escrita na forma

$$S = k [\ln (\rho (E^*) - \rho (0))] , \quad (\text{A.25})$$

sabendo que a entropia pode se escrita como

$$S = \int_0^T \frac{dE^*}{T}, \quad (\text{A.26})$$

e de (A.3)

$$dE^* = 2ak^2 T dT, \quad (\text{A.27})$$

segue daí que

$$S = 2ak^2 \int_0^T dT = 2ak^2 T = 2k (aE^*)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.28})$$

então, de (A.25), obtemos

$$\frac{\rho (E^*)}{\rho (0)} = \exp \left(\frac{S}{k} \right) = \exp \left(2 (aE^*)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (\text{A.29})$$

Este modelo foi proposto originalmente por Fermi e formulado efetivamente por Bethe. Outros modelos com refinamentos foram posteriormente propostos, como por exemplo o modelo de gás onde se considera a densidade de níveis nucleares para o isospin proposto por Kanestron e a formula semi-empírica proposta por Lang e Le Couteur.

Apêndice B

O MCNPX

No método de Monte Carlo devemos seguir a partícula desde seu nascimento (a fonte) até sua morte (absorção ou escape). A distribuição de probabilidades são amostradas aleatoriamente usando os dados nucleares de transporte para determinar o resultado da interação a cada etapa de vida da partícula.

Técnicas específicas devem ser implementadas para problemas críticos, onde o comprimento da cadeia de nêutrons pode alcançar o infinito.

No MCNP, cálculos de criticalidade são conhecidas como cálculos de KCODE.

Em todos os casos deve-se saber:

- (i). se a partícula interage ou não com o meio;
- (ii). se sim, com quais núclídeos do meio;
- (iii). quais tipos de reações pode ocorrer;
- (iv). quais partículas secundárias são emitidas.

- a partícula interage ou não com o meio

Considerando que a partícula se encontra no meio material, esta partícula pode interagir ou escapar do material. A probabilidade de colisão no intervalo entre l e dl é dada por

$$p(l) dl = \exp(-\Sigma_t l) \Sigma_t dl \quad (\text{B.1})$$

onde Σ_t é a secção de choque macroscópica total da partícula no meio.

Seja η um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1)$, então podemos escrever

$$\xi = \int_0^l p(l') dl' = 1 - \exp(-\Sigma_t l) \quad (\text{B.2})$$

ou seja

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi) = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(\xi) \quad (\text{B.3})$$

com isso a distribuição de probabilidades de l é obtida estimando o intervalo $\Delta\xi$ que corresponde ao intervalo Δl , i.e.,

$$\frac{\Delta\xi}{\Delta s} = \frac{d\xi}{ds} = \exp(-\Sigma_t s) \Sigma_t \quad (\text{B.4})$$

que satisfaz a mesma lei de probabilidades de (fmcnp1).

Se l é maior que a distância que limita o material, a partícula escapa do meio e é colocada no outro meio para qual ela escapou e o teste é novamente realizado, caso contrário a reação ocorre a distância l .

Se a interação ocorre, dependendo da interação, partículas secundárias podem ser emitidas e por sua vez seguidas.

(1) Qual a velocidade do núcleo alvo?

A colisão entra a partícula e o núcleo é afetada pelo movimento térmico dos núcleos componentes do material dependendo, essencialmente, da composição do material e energia da partícula incidente. Para nêutrons, por exemplo, dois tratamentos são levados em conta, para nêutrons lentos ($E < 4\text{eV}$) e grafite, água ... etc. os efeitos da rede cristalina e ligação química são adicionados via tratamento com as funções transferência $S(\alpha, \beta)$ (α é o momento transferido reduzido e β a energia transferida reduzida) essa função são tabeladas em conjuntos especiais de arquivos ENDFB. Para altas energias ou composições o tratamento de gás térmico é realizado (o meio é assumido como um gás livre),

Figura B.1: Esquema do transporte das partículas no MCNPX.

a secção de choque de espalhamento elástico a temperatura zero é assumida independente de temperatura do nêutron incidente e a secção de choque da reação independente da temperatura

$$\sigma(T) = \sigma(0) \left[1 + \frac{kT}{2AE_n} \right] \quad (\text{B.5})$$

onde A é o peso atômico e E_n a energia do nêutron (esta expressão é usada para $\sqrt{\frac{AE_n}{kT}} > 2$, uma fórmula mais geral é usada quando esta condição não é satisfeita).

A colisão é amostrada no referencial de repouso do alvo e a velocidade do referencial do alvo é escolhida de acordo com a lei de Maxwell $p(v) = v \exp\left(-\frac{v^2}{kT}\right)$. Vale a pena lembrar que as secções de choque de espalhamento pode ser processadas (e.g. por códigos como o NJOY) mas este tratamento foi implementado no MCNPX, recentemente após a versão 2.6.0. A temperatura é usada pelo MCNPX somente para modificar, caso necessário a secção de choque de espalhamento e portanto a total. Outras correções de efeito Doppler não são

levadas em conta através deste tratamento.

(2) Com qual núcleo a reação ocorre?

O material é composto de vários núclídeos, digamos N , a interação ocorre com o j -ésimo núclídeo se

$$\sum_{i=1}^{j-1} \Sigma_t^{(i)} < \xi \sum_{i=1}^N \Sigma_t^{(i)} \leq \sum_{i=1}^j \Sigma_t^{(i)} \quad (\text{B.6})$$

vide Figura B.2

Figura B.2: Probabilidades de reação.

(3) Quais são as partículas emitidas ? (é opcional)

como foi anteriormente dito se partículas secundárias são emitidas, cálculos de transporte podem ser realizados com essas. Porém devido a vasta gama de possibilidades, esta depende de dados nucleares ou modelos.

(4) O nêutron sobrevive ou é capturado?

Temos duas maneiras de tratar a captura: - A Captura analógica, a captura verdadeira: o nêutron é absorvido com a probabilidade de $\frac{\sigma_a}{\sigma_t}$ onde a absorção denota todas as reações tais como $(n, \gamma), (n, \alpha) \dots$ exceto as (n, n')

- A Captura implícita: o nêutron com o peso W_n que decresce para $W_n = (1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_t}) W_n$ por captura. Esta é uma maneira de tratar capturas de maneira a obter boas estatísticas (o nêutron sobrevive à captura mas sua contribuição para a estatística é menor).

(5) O espalhamento é elástico ou inelástico?

As reações inelásticas, tais como $(n, n'), (n, f), (n, p) \dots$, são assumidas independente da temperatura, enquanto que a secção de choque elástica (e portanto a total) é ajustada de acordo com o modelo de gás livre.

A probabilidade da reação ser elástica é

$$p_{el} = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}} = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_t - \sigma_a} \quad (\text{B.7})$$

e a probabilidade da inelastica é

$$p_{in} = \frac{\sigma_{in}}{\sigma_t - \sigma_a} \quad (\text{B.8})$$

Se a reação inelástica ganha a j -ésima reação é escolhida dentre as N possíveis de acordo com

$$\sum_{i=1}^{j-1} \sigma_{in}^{(i)} < \xi \sum_{i=1}^N \sigma_{in}^{(i)} \leq \sum_{i=1}^j \sigma_{in}^{(i)} \quad (\text{B.9})$$

(6) Quais as energias e direções das partículas emitidas?

em ambas as reações de espalhamento (elástico e inelástico) as direções das partícula emitidas são determinadas via sorteio de acordo com tabelas das distribuições angulares vindos das bibliotecas de secção de choque

- Se a distribuição é isotrópica para a reação escolhida, o cosseno do angulo é uniformemente escolhido no intervalo de $[-1, 1]$.

- Caso contrario o cosseno é escolhido via tabela de 32 grupos dependendo da biblioteca de dado nuclear. (a discretização em grupos angulares pode ser uma limitação do mcnpX sensível sobretudo a altas energias)

Já para a para a distribuição de energia das partículas emitidas, exceto para fissão, várias distribuições (e.g distribuição de Watt, equiprovável, evaporação, Maxwell, etc) são usadas para descrever as probabilidades e dependem do dado nuclear. c.f. [17, 33, 109]

Nas reações de fissão, os nêutrons são emitidos de acordo com $\nu(E_n)$, o

número médio de nêutrons por fissão, que é dado de acordo com os dados de secções de choque.

O número de nêutrons é escolhido de acordo com

$$N_p = \begin{cases} I + 1, & \text{se } \xi \leq \nu(E_n) - I \\ I, & \text{se } \xi > \nu(E_n) - I \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

onde I é o maior inteiro menor que $\nu(E_n)$. As energias das partículas emitidas são escolhidas de acordo com o espectro de fissão de Maxwell, Watt ou evaporação (a escolha depende do dado nuclear básico). Note que este tratamento não é totalmente correto, uma vez que o numero de nêutrons emitidos obedece uma distribuição de Poisson.

B.1 Da precisão

Os resultados da Simulação Monte Carlo Representam uma média de muitas histórias amostradas. O erro estatístico (incerteza) esta associado ao resultado e é muito importante mas não deve ser levado em conta sozinho. É importante ter em mente que a incerteza esta intimamente ligada com o número de histórias. Este comportamento deve se refletir no resultado do calculo, caso contrario o error estatístico pode não estar refletindo um intervalo de validade o que pode levar a resultados completamente errados. O MCNPX nos fornece um grande número de variáveis para testar nossa estatística, bem como muitas técnicas para melhora-la.

.Devemos diferenciar aqui os significados de precisão e exatidão. A precisão (incerteza) deve depender do número de eventos amostrados na região de interesse e do método estatístico usado. Já a exatidão (ERROS SISTEMÁTICOS) depende do código, ou seja, depende erros do código, bibliotecas de dados, tratamento utilizado, entre outros fatores, bem como do usuário, i.e, mas hipotes

usadas para o método em partícula , e etc.

Se para uma dada simulação queremos obter, por exemplo, o fluxo integrado ϕ de uma dada região, e para esta simulação temos N histórias simuladas contribuindo para nossa estatística então é conhecido que a incerteza $\Delta\phi$ deve ser proporcional a $\frac{1}{\sqrt{N}}$, logo para que dividamos nossa incerteza por um fator 2 o numero de histórias deve ser multiplicado por um fator 4.

.Para checar a validade do resultado o MCNPX nos fornece a evolução de um número, a figura de mérito FOM que é definida como $FOM = \frac{1}{\Delta\phi^2 T}$, onde T é o tempo de computação. Este número deve ser aproximadamente uma constante, uma vez que $T \propto N$ e $\Delta\phi \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$, para que o resultado seja confiável.

B.2 Simulação Monte Carlo analógica e não analógica

Na simulação analógica cada partícula é seguida evento por evento. É a maneira usual de realizar o transporte da partículas (C.f. B.1). Este método é coreto quando o número de histórias simuladas é extremamente grande. Na simulação não analógica Somente as partículas de interesse são seguidas e quando essa partícula passa para uma região de interesse ele é multiplicada em N partículas e cada uma dessas passa a ter um peso estatístico de $\frac{1}{N}$. Este método diminui o erro estatístico, mas introduz um erro sistemático nos resultados.

B.3 Técnicas de redução de variância.

Existem varias técnicas de redução de variância implementadas no MCNPX, dentre elas se destacam:

Truncamento : O MCNPX aplica um corte na energia ou no tempo. A partícula é morta ao atravessar esse limite inferior de energia ou exceder um limite estipulado de tempo de vida. Esta técnica diminui o tempo de calculo mas deve ser usada com cuidado

Magnitude	Unidade
Comprimento	cm
Energia	MeV
Tempo	$Shakes (10^{-8}s)$
Temperatura	$MeV (kT)$
Densidade Atômica	$\frac{atoms}{barn-cm}$
Densidade de Massa	$\frac{g}{cm^3}$
Secção de choque	$barn$

Tabela B.1: Principais unidades usadas no MCNPX

Métodos de controle de população : esses métodos utilizam as técnicas conhecidas como divisão (“splitting”) e roleta Russa para controlar o número de partículas em cada região. Cada célula no MCNPX possui uma dada importância I . Por exemplo se um nêutron com um peso W passa de uma célula de importância $I = 4$ para uma de importância $I = 16$, uma divisão em $\frac{16}{4} = 4$ novos nêutrons é realizada cada um com um peso estatístico de $\frac{W}{4}$. E se essa partícula passar de uma célula de peso 12 para uma célula de peso 4 ele terá uma probabilidade de viver de $\frac{4}{16} = \frac{1}{4}$, ou seja uma probabilidade de morrer de $\frac{3}{4} = 75\%$, então uma roleta russa é jogada com essa probabilidade e o peso da partícula que sobrevive é multiplicado por um fator 4. Este tipo de controle também pode ser aplicado para a energia.

B.4 Entrada de dados do MCNPX

Para a simulação do MCNPX dois arquivos são necessários: um é a entrada de dados do problema em questão (geometria materiais definição de fonte etc) e outra é o arquivo xsdir que é o arquivo contendo as especificações dos dados nucleares e o caminho para as bibliotecas de dados (arquivos ENDFB, LA150, etc) para cada dado.

B.4.1 Unidades

As principais unidades estão esquematizadas na Tabela B.1

Estrutura da Entrada

A especificação do problema a ser simulado está contida neste arquivo. Ele contém a descrição da geometria (células definidas com superfícies), materiais, fonte de partículas (esta pode ser dada em um arquivo separado (vide [17, 109])), tipo de cálculo realizado (cálculo de transporte ou de criticalidade).

Este arquivo possui um formato especial contendo delimitadores, entrada de dados (cartões) e comentários. Cada linha é limitada em 80 caracteres, mas uma entrada pode ter mais que uma linha para isto basta que esta termine com o caractere “&”, excetuando a última ou a próxima linha possua 5 espaços antes da continuação do cartão.

A estrutura da entrada é da seguinte forma:

```

1 Linha de Titulo
2 Cartão de especificação das Celulas
3 ...
4 <Linha Branca> : obrigatório
5 Cartão de especificação das Superfícies
6 ...
7 <Linha Branca> : obrigatório
8 Cartão de especificação de Dados
9 ...
10 <Linha Branca> : obrigatório
```

Comentários podem ser inseridos em linhas separadas, bastando estas começarem pelo carácter “c”, ou no final da linha de dados, após o carácter “\$”.

B.4.2 Superfícies

A geometria do problema é descrita nos cartões de células, células são volumes definidos por superfícies; esses volumes podem ou não ser preenchidos por materiais. Mas para definir as células devemos antes definir as superfícies. O MCNPX nos fornece alguns tipos básicos de superfícies (planos, cônicas, torus. etc) bem como superfícies definidas por ponto, permitindo com isso a

tipo de superfície	especificador	parametro	equação
Plano geral	p	A B C D	$Ax + By + Cz - D = 0$
Plano perpendicular a x	px	D	$x - D = 0$
Plano perpendicular a y	py	D	$y - D = 0$
Plano perpendicular a z	pz	D	$z - D = 0$
Cilindro ao longo de x	cx	R	$z^2 + y^2 = R^2$
Cilindro ao longo de y	cy	R	$x^2 + z^2 = R^2$
Cilindro ao longo de z	cz	R	$x^2 + y^2 = R^2$
Esfera geral	s	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ R$	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 = R^2$
Esfera na origem	so	R	$x^2 + y^2 + z^2 = R^2$
Cone sobre x	kx	$x_0 \ t^2 \pm 1$	$\sqrt{y^2 + z^2} = \pm t (x - x_0)$
Cone sobre y	ky	$y_0 \ t^2 \pm 1$	$\sqrt{x^2 + z^2} = \pm t (y - y_0)$
Cone sobre z	kz	$z_0 \ t^2 \pm 1$	$\sqrt{y^2 + x^2} = \pm t (z - z_0)$
Conicas	gq	A B C D E	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 +$
		F G H J K	$+Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz = -K$

Tabela B.2: Principais superfícies

modelagem de qualquer tipo de superfícies.

O cartão de superfície é constituído inicialmente por um número inteiro que caracteriza a superfície seguido de um identificador que especifica o tipo de superfície seguida dos parâmetros dessa superfície (a tabela B.2 mostra as principais superfícies implementadas no MCNPX).

B.4.3 Células

As células são volumes formados por operações booleanas de superfícies (intersecção, união ou exclusão). Um cartão de célula é definido primariamente por um numero inteiro que a diferencia; o número do material que ela é preenchida seguido da densidade ou zero para indicar célula vazia; e a lista de superfícies com suas respectivas operações (intersecção "espaço", união ":" e exclusão "#")

Considere a geometria exemplificada na Figura B.3 , a geometria pode ser escrita como:

```

1 c c c c c c c c c c c c c c c c
2 c celulas
3 c c c c c c c c c c c c c c c c
4 c
```

```

5 1 0 1 -2 -3 4
6 999 0 (-1 : 2 : 3 : -4)
7 c
8 c c c c c c c c c c c c c c c
9
10 c c c c c c c c c c c c c c c
11 c superficies
12 c c c c c c c c c c c c c c c
13 c
14 1 py -1
15 2 py 1
16 3 px 1
17 4 px -1
18 c
19 c c c c c c c c c c c c c c c
20
21 c c c c c c c c c c c c c c c
22 c mat., sur. e controle
23 c c c c c c c c c c c c c c c

```

note que intuitivamente o sinal “-” significa que a região está abaixo do plano definido pela superfície, i.e. “-2” define a região abaixo do plano perpendicular a y que corta y em $y = 1$, geometricamente isso significa a região na qual $y - d \leq 0$ uma vez que a equação da superfície é dada por $y - d = 0$.

Figura B.3: *Geometria exemplo 1.*

Desta forma a operação booleana de intersecção “1 -2 -3 4 ” define a célula

1 e a operação de união “(-1 : 2 : 3 : -4)” define os arredores à célula 1, que é a célula 999. O “0” anterior às operações indica uma célula vazia. Uma outra maneira de definir a célula 999 é escrever “#1” ao invés de “(-1 : 2 : 3 : -4)”, ou seja a exclusão da célula 1.

Figura B.4: *Geometria exemplo 2.*

Considere uma segunda geometria mais complicada como exemplificada na Figura B.4, para este caso a entrada de dados fica como

```

1 c c c c c c c c c c c c c c c c
2 c celulas
3 c c c c c c c c c c c c c c c c
4 c
5 1 0 -7 $ esfera interior
6 2 0 7 1 -2 -3 4 -5 6 $ cubo envolta da esfera
7 999 0 (-1:2:3:-4:5:-6) $ exterior
8 c
9 c c c c c c c c c c c c c c c c
10
11 c c c c c c c c c c c c c c c c
12 c superficies
13 c c c c c c c c c c c c c c c c
14 c
15 1 px -10

```

```

16 2 px 10
17 3 py 10
18 4 py -10
19 5 pz 10
20 6 pz -10
21 7 so 5
22 c
23 c c c c c c c c c c c c c c c
24
25 c c c c c c c c c c c c c c c
26 c mat., sur. e controle
27 c c c c c c c c c c c c c c c

```

Note que podemos escrever as células com o operador exclusão como

```

1 1 0 -7
2 2 0 7 1 -2 -3 4 -5 6
3 999 0 #1 #2

```

cada célula possui uma dada importância, tais importâncias são definidas pela entrada "imp:especificadordepartícula". Se uma partícula sai de uma célula de importância 1 e entra em uma de importância 2, o número de partículas entrando na célula é multiplicado por 2 e seu peso estatístico dividido por este fator. Uma célula de importância 0 significa que não há transporte nesta célula e a partícula “morre” nela.

Adicionando as importâncias no exemplo anterior temos:

```

1 1 0 -7 imp:n=1 $ esfera interior
2 2 0 7 1 -2 -3 4 -5 6 imp:n=1 $ cubo envolta da esfera
3 999 0 (-1:2:3:-4:5:-6) imp:n=0 $ exterior

```

isto significa que as células 1 e 2 possuem importância 1 e não temos interesse no transporte na célula 999, o identificador “n” indica a adição de importância para transporte de nêutrons, podendo ser trocado ou acompanhado por quaisquer outro identificador de partículas (e.g. “imp:h=1” para prótons).

B.4.4 Materiais

Para definir um dado material, usa-se o cartão “m” seguido do identificador e a lista das secções de choque e proporções. Voltando ao exemplo anterior

```

1 c c c c c c c c c c c c c c c
2 c celulas
3 c c c c c c c c c c c c c c c
4 c
5 1 1 -18.76 -7 $ esfera interior
6 2 2 -0.99 7 1 -2 -3 4 -5 6 $ cubo envolta da esfera
7 999 0 (-1:2:3:-4:5:-6) $ exterior
8 c
9 c c c c c c c c c c c c c c c
10
11 c c c c c c c c c c c c c c c
12 c superficies
13 c c c c c c c c c c c c c c c
14 c
15 1 px -10
16 2 px 10
17 3 py 10
18 4 py -10
19 5 pz 10
20 6 pz -10
21 7 so 5
22 c c c c c c c c c c c c c c c
23
24 c c c c c c c c c c c c c c c
25 c mat., sur. e controle
26 c c c c c c c c c c c c c c c
27 c
28 m1 92235.70c 1 $ U-235 ENDFB-VII
29 m2 1001.66c 2 8016.66c 1 $ H2O ENDFB-VI(6.6)
30 c
31 c c c c c c c c c c c c c c c

```

Agora preenchamos a célula 1 com o material 1 cuja densidade é $18,76 \frac{g}{cm^3}$ (o sinal “-” indica a unidade $\frac{g}{cm^3}$, caso contrário $barn^{-1}.cm^{-1}$). O material 1 é definido como sendo somente urânio-235. Note que a identificação é dada da

forma ZZAAA.id, onde ZZ é o número atômico, AAA o número de massa e id o identificador de biblioteca que pode ser de vários tipos (Cf. apêndice G de [17, 109] para maiores detalhes, 70c indica ENDFB-VII e .66c ENDFB-VI-6).

Já o material 2 é o que preencha a célula 2, com uma densidade de $0,99 \frac{g}{cm^3}$ e é composto por um átomo de oxigênio (8016.66c) e dois de hidrogênio (1001.66c).

Associado com o cartão “m” podemos usar o cartão “mt” para especificar um tratamento especial $S(\alpha, \beta)$, importante em muitos casos como o da água para nêutrons de energia menor que $5MeV$, tal tratamento leva em conta efeitos como efeitos vibracionais, fônons, ligação química e etc. Este tipo de tratamento não existe para quaisquer materiais (vide Apêndice G de [33]) mas existe para materiais importantes como água, grafite e polietileno.

Com tal tratamento na água no exemplo anterior teríamos:

```
1 m2 1001.66c 2 8016.66c 1 $ H2O ENDFB-VI(6.6)
2 mt2 lwtr
```

B.4.5 Fonte

O MCNPX nos fornece uma variedade recursos para as definições de fontes de partículas, para definir uma fonte usamos o cartão “sdef”, e.g. para definir uma fonte monoenergética (energia de 5 MeV) e isotrópica na origem, escrevemos :

```
1 sdef pos 0 0 0 erg=5
```

Fontes mais complicadas podem ser definidas, por exemplo uma fonte volumétrica cilíndrica de raio 27.5 cm, paralela ao eixo z e cuja extensão vai de -39.3 a 39.8 em z, emitindo nêutrons com espectro de fissão de Watt é escrita como:

```
1 sdef pos= 0 0 0      $ centro da fonte volumétrica
2     axs= 0 0 1      $ eixo da fonte (cilindro)
3     rad d1           $ distribuição radial – distr. 1
4     ext d2           $ distribuição axial – distr. 2
5     erg d3           $ distribuição de ener. – distr. 3
6     sil h 0 27.5     $ raio da fonte volumétrica
7     si2 h -39.3 39.8 $ extensão do cilindro (+/-)
```

8	sp3 -3	\$ distr. de ener.: espectro de Watt
---	--------	--------------------------------------

note que as distribuições são definidas pelos cartões “si” e “sp” (veja manual [17, 109] para outras distribuições) e são identificadas nas energia, extensão e raio do cilindro pelo identificador “d”. Para definir uma fonte de uma outra partícula basta usar a entrada “par” em “sdef”, por exemplo uma fonte de prótons monoenergéticos de 73 MeV e isotrópicos na origem teríamos: “sdef erg=73 par=h pos=0 0 0”.

B.4.6 Quantidades Físicas e Grupos

As quantidades a serem calculadas são guardadas durante a simulação Monte Carlo, essas quantidades são chamadas de “Tallies”. Vários são os possíveis “Tallies” tais como fluxo, corrente, energia depositada, etc. Todo “Tally” esta associado ao fluxo em uma célula podendo, também, estar associado com um multiplicador.

Um “Tally” é definido no bloco de dados pelo cartão “F” seguido de um número com no máximo 3 dígitos (podemos então ter no máximo 100 “Tallies” do mesmo tipo, digamos do tipo X então podemos ter FX, F2X, F3X, ..., F99X), cujo ultimo dígito corresponde ao tipo de “Tally”.

Por exemplo para definir o fluxo de fótons na célula 1 de alguma geometria escrevemos:

1 F4:p 1

já para calcular o fluxo na célula 1 e na célula 2 escrevemos

1 F14:p 1 2

e para calcular o fluxo na célula 1 e 2 e na união escrevemos

1 F24:p 1 2 (1 2)

ou simplesmente poderíamos escrever

1 F34:p 1 2 T

onde T indica a soma dos anteriores.

Podemos também definir grupos de energia e tempo para o cálculo dos “Tallies”, através dos cartões “E” e “T” estes cartões seguem a mesma regra de “F”

Por exemplo com:

```
1 E4 0.001 0.01 0.1 1
```

obtemos o cálculo em 4 grupos de energia (grupos : [0,0.001), [0.001,0.01), [0.01,0.1), [0.1,1)) associado ao “Tally” F4 e com

```
1 E14 0.001 4I 100
```

com 5 grupos igualmente espaçados além do primeiro associado ao “Tally” F14.

Para o fluxo integrado no tempo usamos

```
1 T24 0.001 0.01 0.1 1
```

que nos fornece 5 intervalos de tempos (em shakes) associado ao “Tally” F24 e também podemos escrever

```
1 T34 1 50I 2000
```

fornecendo 51 intervalos de tempo igualmente espaçados entre 1 e 2000 shakes associado ao “Tally” F34.

B.4.7 Multiplicadores

Multiplicadores no MCNPX é uma maneira de calcular quantidades da forma

$$C \int \phi(E) R(E) dE \quad (\text{B.11})$$

onde ϕ é o fluxo R uma função resposta (uma quantidade aditiva ou multiplicativa). É uma maneira prática de calcular taxas de reação, secções de choque média sobre o fluxo energia depositada e etc. Os multiplicadores são relacionados com os “Tallies” através do cartão “FM” que possui a forma :

Identificador das Reações	Descrição
-1	secção de choque total ($T = 0K$)
1	secção de choque total (dependente da temperatura)
-2	secção de choque de absorção
2	secção de choque elástica (dependente da temperatura)
-3	secção de choque elástica ($T = 0K$)
-6	secção de choque total de fissão
-7	número médio de neutrôns
16	secção de choque (n,2n)
102	secção de choque (n, γ)

Tabela B.3: *Reações mais importantes.*

```
1 FMx C m R
```

ou geralmente

```
1 FMx (C m1 R1)(C m2 R2)
```

onde x é o número do “Tally” , C é uma constante multiplicativa, mi o número do material e Ri o identificador da reação (uma lista principais identificadores é apresentado na tabela B.3)

Considere os seguintes exemplos, supondo que a célula 1 possui um volume V e é composta pelos materiais 3, 2 e 4:

```
1 c c c c c c c c c c c c c c c
2 c tally 1 :
3 c
4 F4:n 1
5 c
6 c tally 2 :
7 c
8 F14:n 1
9 FM14 (1 3 16)
10 c
11 c tally 3 :
12 c
13 F24:n 1
14 FM24 (1 2 102)
15 c
16 c tally 4 :
```

```

17 c
18 F34:n 1
19 FM24 (-1 2 102)
20 c
21 c tally 5 :
22 c
23 F44:n 1
24 FM44 (-1 4 -6:102) (-1 4 -6 -7)
25 c
26 c c c c c c c c c c c c c c c

```

O “Tally 1” nos fornece o fluxo na célula 1; o “Tally 2” nos fornece

$$\frac{1}{V} \int \phi(E) \sigma_{n,2n}(E) dE \quad (\text{B.12})$$

para o material 3; o “Tally 3” nos fornece

$$\frac{1}{V} \int \phi(E) \sigma_{n,\gamma}(E) dE \quad (\text{B.13})$$

para o material 2; o “Tally 4” nos fornece

$$\frac{1}{V} \int \phi(E) \Sigma_{n,\gamma}(E) dE \quad (\text{B.14})$$

para o material 2, note que aqui temos a seção de choque macroscópica isto é devido ao sinal - na frente de C que implica na multiplicação de densidade numérica; o “Tally 5” nos fornece

$$\frac{1}{V} \int \phi(E) (\Sigma_{n,\gamma} + \Sigma_f)(E) dE \quad (\text{B.15})$$

e

$$\frac{1}{V} \int \phi(E) \nu(E) \Sigma_f(E) dE \quad (\text{B.16})$$

para o material 4, respectivamente, note que o trecho “-6 -7” indica uma multiplicação e “-6:102” uma soma. Para células muito complexas o MCNPX pode

falhar no cálculo do volume, por isso recomenda-se especificar o volume diretamente via cartões SD ou o especificador “vol” nas células (vide [17, 109]).

B.4.8 Cálculo da reatividade

Na simulação Monte Carlo uma partícula é seguida desde seu nascimento até sua morte, a simulação termina com a morte da última partícula na última história. Mas em um sistema crítico, a cadeia de nêutrons é infinita e desta maneira o cálculo nunca terminaria. Então para este caso uma técnica especial é usada para determinar os “Tallies” e o k_{eff} para a criticalidade.

Esta técnica começa com N_s nêutrons de fonte e o calculo é desenvolvido em ciclos, i.e. em gerações de nêutrons. Em um ciclo, o nêutron é seguido desde seu nascimento até sua morte, mas desta vez a fissão é considerada com o fim de um ciclo assim como a captura. Dentro de um ciclo, em cada ponto de colisão, o número de nêutrons de fissão n guardado é amostrado aleatoriamente a fim de se obter a grandeza

$$\langle n \rangle = \nu \frac{\sigma_f W}{\sigma_t k_{eff}} \quad (\text{B.17})$$

onde W é o peso estatística do nêutron, $\frac{\sigma_f}{\sigma_t}$ a razão entre a secção de choque microscópica de fissão com a total e o k_{eff} é estimado do ciclo anterior ou dado na entrada de dados. Para o próximo ciclo $N = \sum n$ partículas são emitidas no local de colisão correspondente e o fator de multiplicação é obtido por

$$k_{eff} = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{N_i^{(f)}}{N_{i-1}^{(a)}} = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{N_i^{(f)}}{N_i^{(a)}} \quad (\text{B.18})$$

onde $N_i^{(f)}$ e $N_i^{(a)}$ são respectivamente o número de fissões e absorções na i -ésima geração. O MCNPX usa três métodos baseados na secção de choque para obter o valor do k_{eff} e o valor final é ponderado pela média dos três valores.

Para realizar os cálculos de criticalidade usa-se o cartão “kcode” que deve ser inserido no bloco de dados da entrada e sempre está associado com uma

fonte de nêutrons via “sdef” ou “ksrc”. A sintaxe é:

```
1 kcode Ns kes NI NT
```

onde Ns é o número de nêutrons de fonte por ciclo, kes é o valor esperado do fator de multiplicação, NI o número inicial de ciclos que são excluídos do cálculo (usado para estabilizar a fonte de fissão calculada) e NT o número total de ciclos.

B.5 Entrada de Dados Usadas nas Simulações

Neste apêndice apresentamos as entradas de dados usadas nas simulações apresentadas.

B.5.1 Entrada de Dados - H5b

```
1 c H5B LEU TVR-S
2 c
3 c
4 c H5B:
5 c Accelerator driven Subcritical research facility
6 c with low enriched TVR-S fuel in lead matrix
7 c
8 c Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares(IPEN)
9 c Centro de Engenharia Nuclear(CEN)
10 c Universidade de São Paulo(USP)
11 c
12 c input : version 1 rev. 3
13 c
14 c author: P. C. R. Rossi - (pcrossi@ipen.br)
15 c
16 c Geometry:
17 c
18 c
19 c Fuel Element
20 c
21 1 1 -1.20492E-3 13 -12 -1 2 u=2 $ AIR
22 2 4 -2.482 13 -12 -2 3 u=2 $ AL FUEL CHANNEL
```

```

23 3      3 -0.99985      13 -12 -3 4      u=2 $ MODERATOR
24 4      6 -2.729      13 -12 -4 5      u=2 $ AL CLADDING
25 5      5 -3.605      13 -12 -5 6      u=2 $ FUEL
26 6      6 -2.729      13 -12 -6 7      u=2 $ AL CLADDING
27 7      3 -0.99985      13 -12 -7 8      u=2 $ MODERATOR
28 8      6 -2.729      13 -12 -8 9      u=2 $ AL EXPELLER
29 9      3 -0.99985      13 -12 -9      u=2 $ MODERATOR
30 10     7 -11.35      1      u=2 $ LEAD
31 11     2 -2.29624    (12 -11) (15 -1) u=2 $ AL EXPELLER + H2O
32 12     9 -2.03659    11 (15 -1)      u=2 $ AL STAR + H2O (up)
33 13     9 -2.03659   -13 (15 -1)      u=2 $ AL STAR + H2O(down)
34 14     3 -0.99985   -15 12      u=2 $ H2O
35 15     3 -0.99985   -15 -13      u=2 $ H2O
36 c
37 c
38 c  Fuel Assembly
39 c
40 16      0 (-22 29 21 -20):(-29 -37 21) fill=4
41 17      7 -11.35 -18 19 -16 17 14 -10 lat=1 u=4
42      fill= -10:10 -10:10 -3:3
43 c  <---x  -10      -5      0      5      10
44      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $ -10
45      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
46      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
47      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
48      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
49      4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $ -5
50      4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
51      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
52      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
53      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
54      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 4 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $ 0  Z=-3
55      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
56      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
57      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
58      4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
59      4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $ 5
60      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
61      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
62      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $

```

```

63      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
64      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $ 10
65 c                                         Y
66 c                                         |
67 c                                         |
68 c                                         V
69 c  <—x  -10      -5      0      5      10
70      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $ -10
71      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
72      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
73      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
74      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
75      4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $ -5
76      4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
77      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
78      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
79      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
80      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 4 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $ 0  Z=-2
81      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
82      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
83      4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
84      4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 $
85      4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $ 5
86      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
87      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
88      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
89      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
90      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $ 10
91 c                                         Y
92 c                                         |
93 c                                         |
94 c                                         V
95 c  <—x  -10      -5      0      5      10
96      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $ -10
97      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
98      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
99      4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
100     4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 $
101     4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $ -5
102     4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 $

```

103		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
104		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
105		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
106		4	4	4	4	4	2	2	2	2	4	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$	0	Z=-1
107		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
108		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
109		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
110		4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	\$		
111		4	4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$	5	
112		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
113		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
114		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
115		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
116		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$	10	
117 c																							Y	
118 c																								
119 c																								
120 c																							V	
121 c	<—x	-10					-5									0							5	
122		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$	-10	
123		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
124		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
125		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
126		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
127		4	4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$	-5	
128		4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
129		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
130		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
131		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
132		4	4	4	4	4	2	2	2	2	4	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$	0	Z=0
133		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
134		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
135		4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
136		4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	\$		
137		4	4	4	4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4	4	4	\$	5	
138		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
139		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
140		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
141		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$		
142		4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	\$	10	

[illegible]

183	4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$	
184	4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$ 0	Z=2
185	4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$	
186	4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$	
187	4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$	
188	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 \$	
189	4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 4 \$ 5	
190	4 \$	
191	4 \$	
192	4 \$	
193	4 \$	
194	4 \$ 10	
195 c		Y
196 c		
197 c		
198 c		V
199 c	<—x -10 -5 0 5 10	
200	4 \$ -10	
201	4 \$	
202	4 \$	
203	4 \$	
204	4 \$	
205	4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$ -5	
206	4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
207	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
208	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
209	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
210	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$ 0	Z=3
211	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
212	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
213	4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
214	4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$	
215	4 4 4 4 4 4 4 4 2 2 2 2 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 \$ 5	
216	4 \$	
217	4 \$	
218	4 \$	
219	4 \$	
220	4 \$ 10	
221 c		Y
222 c		

```

223 c |
224 c V
225 c
226 c SS grid (up/down)
227 c
228 18 10 -7.92 -22 29 -24 20
229 19 10 -7.92 -22 25 -21
230 c
231 c Lead Disc Cobertura (up/down)
232 c
233 20 7 -11.35 -22 29 24 -26
234 21 7 -11.35 -22 -25 27
235 c
236 c Tank
237 c
238 22 10 -7.92 -22 -27 28
239 23 10 -7.92 -23 22 -26 28
240 c
241 c Guide Tube
242 c
243 24 3 -0.99985 -29 30 -26 37
244 25 4 -2.482 -30 31 -26 37
245 26 4 -2.482 -31 37 -32
246 27 1 -1.20492E-3 7 -31 -26 32
247 28 10 -7.92 34 -7 -26 32
248 29 10 -7.92 -34 32 -36
249 30 8 -6.02459E-13 (-34 -26 33):(35 -34 36 -33)
250 c
251 c Target
252 c
253 31 11 -11.35 -35 36 -33 $Pb
254 c 31 11 -18.95 -35 36 -33 $U
255 c 31 11 -11.72 -35 36 -33 $Th
256 c 31 11 -9.747 -35 36 -33 $Bi
257 c 31 11 -0.534 -35 36 -33 $Li
258 c 31 11 -1.848 -35 36 -33 $Be
259 c 31 11 -19.3 -35 36 -33 $W
260 c 31 11 -10.747 -35 36 -33 $PbBi
261 c
262 c Surrounding

```

263	c		
264	32	0	-90 (23:-28:26)
265	33	0	90
266	c		
267	c	cookie	cutter cell
268	c		
269	999	0	-999
270			
271	c		
272	c	Surfaces:	
273	c		
274	c		
275	1	cz	2.25
276	2	cz	2.15
277	3	cz	2.05
278	4	cz	1.86
279	5	cz	1.75
280	6	cz	1.55
281	7	cz	1.45
282	8	cz	1.175
283	9	cz	1.075
284	10	pz	5.9
285	11	pz	5.5
286	12	pz	5.0
287	13	pz	-5.0
288	14	pz	-5.4
289	15	cz	0.25
290	16	px	2.5
291	17	px	-2.5
292	18	py	2.5
293	19	py	-2.5
294	20	pz	39.8
295	21	pz	-39.3
296	22	cz	50.0
297	23	cz	52.5
298	24	pz	40.8
299	25	pz	-40.3
300	26	pz	51.85
301	27	pz	-51.85
302	28	pz	-54.35

```

303 29      cz  2.2501
304 30      cz  2.1501
305 31      cz  2.0501
306 32      pz  -5.3
307 33      pz  -2.7
308 c 33      pz  5.8 $ for 3Li
309 34      cz  1.35
310 35      cz  1.25
311 36      pz  -5.2
312 37      pz  -5.40001
313 90      so  200.0
314 c
315 c  cookie cutter surface
316 c
317 999      sq  1 1 0 0 0 0 -1.5811 0 0 0
318
319 c
320 c
321 c
322 imp:n 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
323      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
324      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
325      1 1 0 1
326 c imp:h 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
327 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
328 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
329 c      1 1 0 1
330 c imp:p 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
331 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
332 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
333 c      1 1 0 1
334 c imp:e 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
335 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
336 c      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
337 c      1 1 0 1
338 c
339 c
340 c
341 c MATERIALS:
342 c

```

```

343 c
344 c   AIR - 1.20492E-3 g/cm^3
345 c
346 m1   GAS=1
347       7014   7.81524E-01
348       7015   2.87090E-03
349       8016   2.10651E-01
350       8017   8.00776E-05
351       6000   1.60708E-04
352       18000  4.71299E-03
353 c
354 c   AL FUEL CHANNEL [expeller+H2O] - 2.29624 g/cm^3
355 c
356 m2       1001   2.36061E-01
357           1002   3.52814E-05
358           5010   8.02849E-07
359           5011   3.23157E-06
360           8016   1.18048E-01
361           12000  2.51235E-04
362           13027  6.44208E-01
363           14028  6.70321E-04
364           14029  3.40357E-05
365           14030  2.24361E-05
366           22000  2.07696E-05
367           25055  2.54053E-05
368           26054  2.83024E-05
369           26056  4.44286E-04
370           26057  1.02605E-05
371           26058  1.36549E-06
372           29063  2.46877E-05
373           29065  1.10037E-05
374           30000  9.87181E-05
375           48106  1.22223E-09
376           48108  8.70367E-10
377           48110  1.22125E-08
378           48111  1.25156E-08
379           48112  2.35940E-08
380           48113  1.19485E-08
381           48114  2.80917E-08
382           48116  7.32358E-09

```

```

383 c
384 c    MODERATOR (H2O) - 0.99985 g/cm^3
385 c
386 m3    1001 6.66567E-01
387        1002 1.00000E-04
388        8016 3.33200E-01
389        8017 1.33334E-04
390 c
391 c    Yu_Al (Fas Tube) - 2.482 g/cm^3
392 c
393 m4    COND=1
394        5010 8.70753E-05
395        5011 3.50489E-04
396        12000 7.78525E-04
397        13027 9.96168E-01
398        14028 5.32613E-04
399        14029 2.70435E-05
400        14030 1.78269E-05
401        22000 1.69370E-04
402        24050 9.03545E-06
403        24052 1.74240E-04
404        24053 1.97574E-05
405        24054 4.91804E-06
406        25055 4.92037E-04
407        26054 5.65828E-05
408        26056 8.88231E-04
409        26057 2.05132E-05
410        26058 2.72992E-06
411        28058 6.27100E-05
412        28060 2.41557E-05
413        28061 1.05012E-06
414        28062 3.34749E-06
415        28064 8.52995E-07
416        29063 5.88478E-05
417        29065 2.62292E-05
418        48106 3.00590E-07
419        48108 2.14021E-07
420        48110 3.00350E-06
421        48111 3.07804E-06
422        48112 5.80260E-06

```

423	48113	2.93857E-06
424	48114	6.90877E-06
425	48116	1.80114E-06
426	c	
427	c	FUEL - 3.605 g/cm ³
428	c	
429	m5	5010 8.64502E-07
430		5011 3.47972E-06
431		8016 2.03377E-01
432		8017 7.73127E-05
433		13027 6.90902E-01
434		14028 2.46767E-03
435		14029 1.25297E-04
436		14030 8.25949E-05
437		26054 6.88164E-05
438		26056 1.08027E-03
439		26057 2.49483E-05
440		26058 3.32014E-06
441		29063 4.08978E-05
442		29065 1.82286E-05
443		92234 1.60178E-04
444		92235 2.02451E-02
445		92238 8.13219E-02
446	c	
447	c	AL EXPELLER or Cladding - 2.729 g/cm ³
448	c	
449	m6	COND=1
450		5010 1.24308E-06
451		5011 5.00354E-06
452		12000 3.88994E-04
453		13027 9.97450E-01
454		14028 1.03788E-03
455		14029 5.26987E-05
456		14030 3.47386E-05
457		22000 3.21583E-05
458		25055 3.93358E-05
459		26054 4.38216E-05
460		26056 6.87904E-04
461		26057 1.58867E-05
462		26058 2.11423E-06


```

463      29063  3.82247E-05
464      29065  1.70373E-05
465      30000  1.52849E-04
466      48106  1.89241E-09
467      48108  1.34740E-09
468      48110  1.89090E-08
469      48111  1.93783E-08
470      48112  3.65312E-08
471      48113  1.85002E-08
472      48114  4.34953E-08
473      48116  1.13394E-08
474 c
475 c    LEAD - 11.35 g/cm^3
476 c
477 m7    COND=1
478      82206  2.41000E-01
479      82207  2.21000E-01
480      82208  5.37999E-01
481 c
482 c    VACUUM - 6.02459E-13 g/cm^3
483 c
484 m8    GAS=1
485      7014   7.81525E-01
486      7015   2.87089E-03
487      8016   2.10650E-01
488      8017   8.00777E-05
489      6000   1.60708E-04
490      18000  4.71299E-03
491 c
492 c    AL STAR + H2O - 2.03659 g/cm^3
493 c
494 m9    1001   3.48650E-01
495      1002   5.21090E-05
496      5010   5.92883E-07
497      5011   2.38643E-06
498      8016   1.74351E-01
499      12000  1.85530E-04
500      13027  4.75730E-01
501      14028  4.95014E-04
502      14029  2.51345E-05

```

503	14030	1.65685E-05
504	22000	1.53378E-05
505	25055	1.87612E-05
506	26054	2.09006E-05
507	26056	3.28094E-04
508	26057	7.57713E-06
509	26058	1.00838E-06
510	29063	1.82311E-05
511	29065	8.12591E-06
512	30000	7.29007E-05
513	48106	9.02584E-10
514	48108	6.42639E-10
515	48110	9.01861E-09
516	48111	9.24246E-09
517	48112	1.74235E-08
518	48113	8.82366E-09
519	48114	2.07450E-08
520	48116	5.40828E-09
521	c	
522	c	SS-304 - 7.92 g/cm ³
523	c	
524	m10	COND=1
525	24050	8.78068E-03
526	24052	1.69326E-01
527	24053	1.92002E-02
528	24054	4.77936E-03
529	25055	2.01739E-02
530	26054	4.02271E-02
531	26056	6.31481E-01
532	26057	1.45837E-02
533	26058	1.94081E-03
534	28058	6.09338E-02
535	28060	2.34715E-02
536	28061	1.02038E-03
537	28062	3.25270E-03
538	28064	8.28837E-04
539	c	
540	c	Target material
541	c	
542	c	

```

543 c Lead (82Pb) - 11.35 g/cm^3
544 c
545 m11      82206 7.94948E-03
546          82207 7.28977E-03
547          82208 1.72843E-02
548 c          82204 4.61796E-04
549 c
550 c -----
551 c Uranium (92U)- 18.95 g/cm^3
552 c
553 c m11      92234 2.58895E-06
554 c          92235 3.45386E-04
555 c          92238 4.75956E-02
556 c
557 c -----
558 c Thorium (90Th) - 11.72 g/cm^3
559 c
560 c m11      90232 3.04172E-02
561 c
562 c -----
563 c Bismuth (83Bi) - 9.747 g/cm^3
564 c
565 c m11      83209 2.80877E-02
566 c
567 c -----
568 c Lithium (3Li) - 0.534 g/cm^3
569 c
570 c m11      3006 3.51700E-03
571 c          3007 4.28203E-02
572 c
573 c -----
574 c Beryllium (4Be) - 1.848 g/cm^3
575 c
576 c m11      4009 1.23488E-01
577 c
578 c -----
579 c Tungsten (74W) - 19.3 g/cm^3
580 c
581 c m11      74180 7.58654E-05
582 c          74182 1.67536E-02

```

```

583 c          74183  9.04695E-03
584 c          74184  1.93710E-02
585 c          74186  1.79738E-02
586 c
587 c _____
588 c Pb-Bi alloy (55.5 % Pb + 44.5 % Bi)(b)
589 c          10.747  g/cm^3
590 c
591 c m11      82204  1.0799E-04
592 c          82206  1.8590E-03
593 c          82207  1.7047E-03
594 c          82208  4.0420E-03
595 c          83209  7.6487E-03
596 c
597 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
598 c
599 c          fixed source
600 c
601 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
602 c
603 c
604 c Models:
605 c _____
606 c
607 c PHYS:n 100
608 c PHYS:h 100
609 c PHYS:p 100
610 c PHYS:e 100
611 c mode n p h e
612 c
613 c physics models:
614 c
615 c _____
616 c LCA 2 1 1 23 1 1 0 1 0 $ Bertine
617 c LEA 1 4 1 0 1 0 0 1 $ Dresner
618 c _____
619 c LCA 8j 1 $ CEM2k
620 c _____
621 c LCA 2j 2 $ ISABEL/DRESNER(def)
622 c _____

```

```

623 c LEA 6j 2 $ BERTINI(def)/ABLA
624 c -----
625 c LCA 2j 2 $ ISABEL
626 c LEA 6j 2 $ ABLA
627 c -----
628 c LCA 8j 2 $ INCL4/DRESNER(def)
629 c -----
630 c LCA 8j 2 $ INCL4
631 c LEA 6j 2 $ ABLA
632 c                                     c
633 c
634 c   Source :
635 c   -----
636 c
637 c Proton Source :
638 c   -----
639 c sdef erg=73 par=h sur=33 dir=-1 rad=d1 sur=33 pos=0 0 -2.7 ccc=999
640 c
641 c for 3Li :
642 c sdef erg=73 par=h sur=33 dir=-1 rad=d1 sur=33 pos=0 0 5.8 ccc=999
643 c
644 c Deuteron Source :
645 c   -----
646 c sdef erg=67 par=D sur=33 dir=-1 rad=d1 sur=33 pos=0 0 -2.7 ccc=999
647 c
648 c for 3Li :
649 c sdef erg=67 par=D sur=33 dir=-1 rad=d1 sur=33 pos=0 0 5.8 ccc=999
650 c
651 c si1 1.25
652 c
653 c   Tallys :
654 c   -----
655 c
656 c   Tally core .
657 c
658 c f4:n (16<17[0,0,1]) (16<17[1,0,0]) (16<17[5,0,0]) (16<17[9,0,0])
659 c SD4 282.5 3r
660 c E4      1.00000E-09 5.00000E-09 1.00000E-08 1.50000E-08
661 c      2.00000E-08 2.50000E-08 3.00000E-08 4.20000E-08
662 c      5.00000E-08 5.80000E-08 6.70000E-08 8.00000E-08

```

```

663 c      1.00000E-07  1.40000E-07  1.80000E-07  2.20000E-07
664 c      2.50000E-07  2.80000E-07  3.00000E-07  3.20000E-07
665 c      3.50000E-07  4.00000E-07  5.00000E-07  6.25000E-07
666 c      7.80000E-07  8.75000E-07  9.95000E-07  1.12500E-06
667 c      1.30000E-06  2.10000E-06  3.30000E-06  4.00000E-06
668 c      9.97700E-06  1.59700E-05  2.77000E-05  4.80500E-05
669 c      7.55000E-05  1.48700E-04  3.67300E-04  9.06900E-04
670 c      2.24000E-03  5.53000E-03  2.47800E-02  1.11100E-01
671 c      1.83000E-01  3.02500E-01  5.00000E-01  8.21000E-01
672 c      1.35300E+00  2.23100E+00  3.67900E+00  6.06600E+00
673 c      1.05000E+01  1.50000E+01  2.00000E+01  5.00000E+01
674 c      7.50000E+01
675 c
676 c   c   Tally source.
677 c
678 c fl:n   33 35 36 T
679 c E1      1.00000E-09  5.00000E-09  1.00000E-08  1.50000E-08
680 c      2.00000E-08  2.50000E-08  3.00000E-08  4.20000E-08
681 c      5.00000E-08  5.80000E-08  6.70000E-08  8.00000E-08
682 c      1.00000E-07  1.40000E-07  1.80000E-07  2.20000E-07
683 c      2.50000E-07  2.80000E-07  3.00000E-07  3.20000E-07
684 c      3.50000E-07  4.00000E-07  5.00000E-07  6.25000E-07
685 c      7.80000E-07  8.75000E-07  9.95000E-07  1.12500E-06
686 c      1.30000E-06  2.10000E-06  3.30000E-06  4.00000E-06
687 c      9.97700E-06  1.59700E-05  2.77000E-05  4.80500E-05
688 c      7.55000E-05  1.48700E-04  3.67300E-04  9.06900E-04
689 c      2.24000E-03  5.53000E-03  2.47800E-02  1.11000E-01
690 c      1.83000E-01  3.02500E-01  5.00000E-01  8.21000E-01
691 c      1.35300E+00  2.23100E+00  3.67900E+00  6.06600E+00
692 c      1.05000E+01  1.50000E+01  2.00000E+01  3.00000E+01
693 c      4.00000E+01  5.00000E+01  6.00000E+01  6.50000E+01
694 c      7.50000E+01
695 c f2:n   33 35 36 T
696 c E2      1.00000E-09  5.00000E-09  1.00000E-08  1.50000E-08
697 c      2.00000E-08  2.50000E-08  3.00000E-08  4.20000E-08
698 c      5.00000E-08  5.80000E-08  6.70000E-08  8.00000E-08
699 c      1.00000E-07  1.40000E-07  1.80000E-07  2.20000E-07
700 c      2.50000E-07  2.80000E-07  3.00000E-07  3.20000E-07
701 c      3.50000E-07  4.00000E-07  5.00000E-07  6.25000E-07
702 c      7.80000E-07  8.75000E-07  9.95000E-07  1.12500E-06

```

```

703 c      1.30000E-06 2.10000E-06 3.30000E-06 4.00000E-06
704 c      9.97700E-06 1.59700E-05 2.77000E-05 4.80500E-05
705 c      7.55000E-05 1.48700E-04 3.67300E-04 9.06900E-04
706 c      2.24000E-03 5.53000E-03 2.47800E-02 1.11000E-01
707 c      1.83000E-01 3.02500E-01 5.00000E-01 8.21000E-01
708 c      1.35300E+00 2.23100E+00 3.67900E+00 6.06600E+00
709 c      1.05000E+01 1.50000E+01 2.00000E+01 3.00000E+01
710 c      4.00000E+01 5.00000E+01 6.00000E+01 6.50000E+01
711 c      7.50000E+01
712 c
713 c
714 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
715 c
716 c      Kcode calc
717 c
718 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
719 c
720 c      mode + kcode
721 c
722 c
723 c mode n
724 c totnu No
725 c PHYS:n 3j -1
726 c
727 c kcode 100 .90 150 150
728 c
729 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
730 c
731 c SOURCE CARDS
732 c
733 c sdef      pos= 0 0 0      $ center of volume source
734 c      axs= 0 0 1      $ axis of volume source (cylinder)
735 c      rad d1      $ radial bins to define by distributions 1
736 c      ext d2      $ axial bins to define by distributions 2
737 c      erg d3      $ energy distributions defined by distr. 3
738 c si1      h 0 27.5      $ radii of volume source
739 c si2      h -39.3 39.8 $ extension of cylinder (+/-) from the center
740 c sp3      -3      $ built in function: Watt fission spectrum
741 c
742 c prdmp 150 150 0 1

```

[illegible]


```

783 c
784 c
785 c
786 print
787 nps 10000000

```

B.5.2 Entrada de Dados - Alvo Pb 660 MeV Dubna

```

1 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
2 c c
3 c Pb target 8cm diam, 30.3cm length, c
4 c with 32 samples diam. c
5 c 660 MeV protons c
6 c c
7 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
8 c Celulas
9 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
10 1 2 -2.7 -10 1 -2 $ Al proton monitor
11 2 2 -2.7 -10 3 -4 $ Al matrix monitor
12 3 2 -2.7 -10 5 -6 $ Al matrix monitor
13 4 1 -11.34 -30 20 10 -7 $ Pb coat
14 5 14 -7.87 -30 20 7 -8 $ Fe coat
15 6 13 -8.92 -30 20 8 -9 $ Cu coat
16 c
17 $ front 5 rectangular samples holder description start
18 c
19 7 0 24 -21 13 -10
20 8 0 21 -20 -10 #15 #19 #23 #27 #31 $ Al monitors region
21 c
22 $ in front 5 samples holder
23 c
24 9 3 -1.2 13 22 -51 #12 #16 #20 #24 #28 $ 1-st sample plate nest
25 10 3 -1.2 -13 24 -22 #13 #17 #21 #25 #29
26 c
27 11 3 -1.2 -13 -21 51 #14 #18 #22 #26 #30
28 12 1 -11.34 22 -51 60 -70 80 -90
29 13 0 24 -22 62 -72 82 -92
30 14 7 -13.0 -21 51 60 -70 80 -90
31 15 2 -2.7 21 -20 60 -70 80 -90
32 16 13 -8.92 22 -51 60 -70 91 -131

```

33	17	0		24	-22	62	-72	93	-132	
34	18	9	-1.74	-21	51	60	-70	91	-131	
35	19	2	-2.7	21	-20	60	-70	91	-131	
36	20	6	-16.65	22	-51	71	-111	80	-90	
37	21	0		24	-22	73	-112	82	-92	
38	22	8	-7.47	-21	51	71	-111	80	-90	
39	23	2	-2.7	21	-20	71	-111	80	-90	
40	24	11	-8.57	22	-51	60	-70	121	-81	
41	25	0	24	-22	62	-72	122	-83		
42	26	4	-7.14	-21	51	60	-70	121	-81	
43	27	2	-2.7	21	-20	60	-70	121	-81	
44	28	12	-6.51	22	-51	101	-61	80	-90	
45	29	0		24	-22	102	-63	82	-92	
46	30	14	-7.87	-21	51	101	-61	80	-90	
47	31	2	-2.7	21	-20	101	-61	80	-90	
48	c									
49	32	3	-1.2	299	-300	-13	19	\$ part of s. holder		
50	33	0		299	-300	-19		\$ hole in front of sample Bi		
51	34	3	-1.2	18	-13	300	-301	\$ part with sample Bi		
52	35	3	-1.2	18	-13	301	-302	\$ part with sample Ni		
53	36	0		302	-24	18	-13	\$ part with monitor Al		
54	37	0		299	-24	13	-10	\$ space around holder		
55	38	5	-9.78	-18	300	-301		\$ sample Bi		
56	39	10	-8.908	-18	301	-302		\$ sample Ni		
57	40	2	-2.7	-18	302	-24		\$ monitor Al		
58	c									
59	41	0		30	-402	13	-10	\$ space around 5 samples		
60	42	3	-1.2	-13	400	-401	#45 #48 #51 #54 #57	\$ nest for samples plate		
61	43	3	-1.2	-13	401	-402	#46 #49 #52 #55 #58			
62	c									
63	44	3	-1.2	-13	30	-400	#47 #50 #53 #56 #59	\$ nest for samples plate		
64	45	1	-11.34	400	-401	60	-70	80	-90	\$ Pb sample nr 5 0,0
65	46	0		401	-402	62	-72	82	-92	\$ hole in front of sample 0,0
66	47	7	-13.0	30	-400	60	-70	80	-90	\$ W nr 19 0,0
67	48	13	-8.92	400	-401	60	-70	91	-131	\$ Cu nr 29 0,1
68	49	0		401	-402	62	-72	93	-132	\$ hole in front of sample 0,1
69	50	9	-1.74	30	-400	60	-70	91	-131	\$ Mg nr13 0,1
70	51	6	-16.65	400	-401	71	-111	80	-90	\$ Ta nr 24 1,0
71	52	0		401	-402	73	-112	82	-92	\$ hole in front of sample 1,0
72	53	8	-7.47	30	-400	71	-111	80	-90	\$ Mn nr 10 1,0

```

73  54  11 -8.57 400 -401  60 -70 121 -81      $ Nb nr 48 0,-1
74  55  0      401 -402  62 -72 122 -83      $ hole in front of sample 0,-1
75  56  4  -7.14 30 -400  60 -70 121 -81      $ Cr nr 54 0,-1
76  57 12 -6.51 400 -401 101 -61 80 -90      $ Zr nr 3 -1,0
77  58  0      401 -402 102 -63 82 -92      $ hole in front of sample -1,0
78  59 14 -7.87 30 -400 101 -61 80 -90      $ Fe nr 39 -1,0
79 c
80 c
81  60  3 -1.2  404 -405 -13  19 $ s. holder part
82  61  0      404 -405 -19      $ hole behind sample Bi
83  62  3 -1.2  18 -13 403 -404 $ part of s. holder with Bi
84  63  3 -1.2  18 -13 402 -403 $ part of s. holder with Ni
85  64  0      402 -405  13 -10
86  65  5 -9.78 -18 402 -403      $ sample Bi
87  66 10 -8.908 -18 403 -404      $ sample Ni
88 c
89 c Pb samples dia.80mmx1mm
90 c
91 165  1 -11.34 -10 20 -409
92 166  1 -11.34 -10 409 -410
93 167  1 -11.34 -10 410 -411
94 168  1 -11.34 -10 411 -412
95 169  1 -11.34 -10 412 -413
96 170  1 -11.34 -10 413 -414
97 171  1 -11.34 -10 414 -415
98 172  1 -11.34 -10 415 -416
99 173  1 -11.34 -10 416 -417
100 174  1 -11.34 -10 417 -418
101 175  1 -11.34 -10 418 -419
102 176  1 -11.34 -10 419 -420
103 177  1 -11.34 -10 420 -421
104 178  1 -11.34 -10 421 -422
105 179  1 -11.34 -10 422 -423
106 180  1 -11.34 -10 423 -424
107 181  1 -11.34 -10 424 -425
108 182  1 -11.34 -10 425 -426
109 183  1 -11.34 -10 426 -427
110 184  1 -11.34 -10 427 -428
111 185  1 -11.34 -10 428 -429
112 186  1 -11.34 -10 429 -430

```

113	187	1	-11.34	-10	430	-431
114	188	1	-11.34	-10	431	-432
115	189	1	-11.34	-10	432	-433
116	190	1	-11.34	-10	433	-434
117	191	1	-11.34	-10	434	-435
118	192	1	-11.34	-10	435	-436
119	193	1	-11.34	-10	436	-437
120	194	1	-11.34	-10	437	-438
121	195	1	-11.34	-10	438	-439
122	196	1	-11.34	-10	439	-440
123	197	1	-11.34	-10	440	-441
124	198	1	-11.34	-10	441	-442
125	199	1	-11.34	-10	442	-443
126	200	1	-11.34	-10	443	-444
127	201	1	-11.34	-10	444	-445
128	202	1	-11.34	-10	445	-446
129	203	1	-11.34	-10	446	-447
130	204	1	-11.34	-10	447	-448
131	205	1	-11.34	-10	448	-449
132	206	1	-11.34	-10	449	-450
133	207	1	-11.34	-10	450	-451
134	208	1	-11.34	-10	451	-452
135	209	1	-11.34	-10	452	-453
136	210	1	-11.34	-10	453	-454
137	211	1	-11.34	-10	454	-455
138	212	1	-11.34	-10	455	-456
139	213	1	-11.34	-10	456	-457
140	214	1	-11.34	-10	457	-458
141	215	1	-11.34	-10	458	-459
142	216	1	-11.34	-10	459	-460
143	217	1	-11.34	-10	460	-461
144	218	1	-11.34	-10	461	-462
145	219	1	-11.34	-10	462	-463
146	220	1	-11.34	-10	463	-464
147	221	1	-11.34	-10	464	-465
148	222	1	-11.34	-10	465	-466
149	223	1	-11.34	-10	466	-467
150	224	1	-11.34	-10	467	-468
151	225	1	-11.34	-10	468	-469
152	226	1	-11.34	-10	469	-470

```

153  227  1 -11.34 -10 470 -471
154  228  1 -11.34 -10 471 -472
155  229  1 -11.34 -10 472 -473
156  230  1 -11.34 -10 473 -474
157  231  1 -11.34 -10 474 -475
158  232  1 -11.34 -10 475 -476
159  233  1 -11.34 -10 476 -477
160  234  1 -11.34 -10 477 -478
161  235  1 -11.34 -10 478 -479
162  236  1 -11.34 -10 479 -480
163  237  1 -11.34 -10 480 -481
164  238  1 -11.34 -10 481 -482
165  239  1 -11.34 -10 482 -483
166  240  1 -11.34 -10 483 -484
167  241  1 -11.34 -10 484 -485
168  242  1 -11.34 -10 485 -486
169  243  1 -11.34 -10 486 -487
170  244  1 -11.34 -10 487 -488
171  245  1 -11.34 -10 488 -489
172  246  1 -11.34 -10 489 -490
173  247  1 -11.34 -10 490 -491
174  248  1 -11.34 -10 491 -492
175  249  1 -11.34 -10 492 -493
176  250  1 -11.34 -10 493 -494
177  251  1 -11.34 -10 494 -495
178  252  1 -11.34 -10 495 -496
179  253  1 -11.34 -10 496 -497
180  254  1 -11.34 -10 497 -498
181  255  1 -11.34 -10 498 -499
182  256  1 -11.34 -10 499 -500
183  257  1 -11.34 -10 500 -30
184  c
185  109  2 -2.7 405 -406 -10 $ Al dia 80mm plate
186  110 13 -8.92 406 -407 -10 $ Cu dia 80mm plate
187  111  1 -11.34 407 -408 -10 $ sample Pb diam. 80mmx5mm
188  112  0 -40 -299 #1 #2 #3 $ universe in front o front samples
189  113  0 -40 299 -20 10 $ next part of the universe
190  114  0 9 -40 20 -30 $ target part of the universe
191  115  0 30 -408 -40 10 $ back samples part of the universe
192  116  0 -40 408 $ back of the universe

```

```

193 117 0          40          $ external world
194 600 0          -600        $ cookie cutter cell
195 c
196 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
197
198 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
199 c Surfaces
200 c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
201 1      pz -75.02      $ first Al monitor
202 2      pz -75.0
203 3      pz -40.05      $ 1-st Al matrix
204 4      pz -40.0
205 5      pz -30.05      $ 2-nd Al matrix
206 6      pz -30.0
207 10     cz  4.0        $ Pb target radius
208 7      cz  4.1        $ plus Pb coat
209 8      cz  4.2        $ plus Fe coat
210 9      cz  4.3        $ plus Cu coat
211 13     cz  2.50       $ sample nest radius
212 18     cz  0.95       $ round sample radius
213 19     cz  0.715      $ hole radius
214 20     pz -25         $ plane - Pb target limit (front)
215 25     pz -25.4       $ pl. of 5 Al monitors (beam side)
216 21     pz -25.05      $ pl. 3-rd sample layer
217 22     pz -25.25      $ pl. 1-st sample layer
218 24     pz -25.35      $ pl. sample holder limit (beam side)
219 299    pz -25.7       $ pl. round sample holder limit (beam side)
220 300    pz -25.6       $ pl. of Bi sample (beam side)
221 301    pz -25.5       $ pl. of Ni sample (beam side)
222 302    pz -25.4       $ pl. of monitor Al (beam side)
223 30     pz  5.3        $ plane - Pb target limit (back)
224 40     so 200         $ sphere - outside world
225 51     pz -25.15      $ pl. of 2-nd sample layer in 5 s. holder
226 60     px -0.5        $ 60-130 planes limiting rectangular samples
227 61 4    px -0.5
228 62     px -0.4
229 63 9    px -0.4
230 70     px  0.5
231 71 3    px  0.5
232 72     px  0.4

```

233	73	7	px	0.4	
234	80		py	-0.5	
235	81	6	py	-0.5	
236	82		py	-0.4	
237	83		py	-0.82	
238	90		py	0.5	
239	91	5	py	0.5	
240	92		py	0.4	
241	93		py	0.82	
242	101	4	px	-1.5	
243	102	10	px	-0.4	
244	111	3	px	1.5	
245	112	8	px	0.4	
246	121	6	py	-1.5	
247	122		py	-1.62	
248	130		py	1.5	
249	131	5	py	1.5	
250	132		py	1.62	
251	400		pz	5.4	\$ pl. of 2-nd sample layer behind target in 5 s. holder.
252	401		pz	5.5	\$ pl. of sample nest bottom in 5 s. holder.
253	402		pz	5.6	\$ pl. limiting 5s. holder and pl. of 1-st round sample
254	403		pz	5.7	\$ pl. of 2-nd round sample behind target
255	404		pz	5.82	\$ pl. of round samples nest bottom
256	405		pz	5.92	\$ pl. limiting s. holder
257	406		pz	5.97	\$ pl. of Cu foil dia. 80mm
258	407		pz	6.02	\$ pl. of Pb sample diam. 80mmx5mm
259	408		pz	6.52	\$ end of target and samples
260	c				
261	409		pz	-24.9	
262	410		pz	-24.4	
263	411		pz	-24.3	
264	412		pz	-24.0	
265	413		pz	-23.9	
266	414		pz	-23.8	
267	415		pz	-23.7	
268	416		pz	-23.2	
269	417		pz	-23.1	
270	418		pz	-23.0	
271	419		pz	-22.9	
272	420		pz	-22.6	

273	421	pz	-22.5
274	422	pz	-22.0
275	423	pz	-21.9
276	424	pz	-21.0
277	425	pz	-20.9
278	426	pz	-20.0
279	427	pz	-19.9
280	428	pz	-19.0
281	429	pz	-18.9
282	430	pz	-18.3
283	431	pz	-18.2
284	432	pz	-18.0
285	433	pz	-17.9
286	434	pz	-17.0
287	435	pz	-16.9
288	436	pz	-16.0
289	437	pz	-15.9
290	438	pz	-15.0
291	439	pz	-14.9
292	440	pz	-14.0
293	441	pz	-13.9
294	442	pz	-13.4
295	443	pz	-13.3
296	444	pz	-13.0
297	445	pz	-12.9
298	446	pz	-12.0
299	447	pz	-11.9
300	448	pz	-11.0
301	449	pz	-10.9
302	450	pz	-10.0
303	451	pz	-9.9
304	452	pz	-9.0
305	453	pz	-8.9
306	454	pz	-8.4
307	455	pz	-8.3
308	456	pz	-8.0
309	457	pz	-7.9
310	458	pz	-7.0
311	459	pz	-6.9
312	460	pz	-6.0

313	461	pz	-5.9
314	462	pz	-5.0
315	463	pz	-4.9
316	464	pz	-4.0
317	465	pz	-3.9
318	466	pz	-3.0
319	467	pz	-2.9
320	468	pz	-2.0
321	469	pz	-1.9
322	470	pz	-1.0
323	471	pz	-0.9
324	472	pz	0.0
325	473	pz	0.1
326	474	pz	1.0
327	475	pz	1.1
328	476	pz	2.0
329	477	pz	2.1
330	478	pz	3.0
331	479	pz	3.1
332	480	pz	3.2
333	481	pz	3.3
334	482	pz	3.4
335	483	pz	3.5
336	484	pz	3.6
337	485	pz	3.7
338	486	pz	3.8
339	487	pz	3.9
340	488	pz	4.0
341	489	pz	4.1
342	490	pz	4.2
343	491	pz	4.3
344	492	pz	4.4
345	493	pz	4.5
346	494	pz	4.6
347	495	pz	4.7
348	496	pz	4.8
349	497	pz	4.9
350	498	pz	5.0
351	499	pz	5.1 \$ pl. 31 sample 30.1-30.2cm from target front
352	500	pz	5.2

```

353 c
354 600      sq   4.93827  4.93827  0 0 0 0  -1.0 0 0 0
355 c
356 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
357
358 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
359 c Transformacoes
360 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
361 c
362 *tr3      0.22 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  +1.2mm
363 *tr4     -0.22 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  -1.2mm
364 *tr5  0    0.22 0 0  90 90 90   0 90 90 90  0   $   y  +1.2mm
365 *tr6  0   -0.22 0 0  90 90 90   0 90 90 90  0   $   y  -1.2mm
366 *tr7      0.42 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  +4.2mm
367 *tr8      1.22 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  +12.2mm
368 *tr9     -0.42 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  -4.2mm
369 *tr10    -1.22 0 0   0 90 90 90   0 90 90 90 0 $   x  -12.2mm
370 c
371 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
372 c materiais
373 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
374 c
375 m1      82206   .241
376      82207   .221
377      82208   .524   $ Pb
378 c
379 m2      13027   1.0     $ Al
380 c
381 m3      1001   0.666
382      6012   0.333   $ to ma byc poliethylen
383 c
384 m4      24050   4.34e-2
385      24052   0.83789
386      24053   9.501e-2
387      24054   2.365e-2$ Cr
388 c
389 m5      83209   1.0     $ Bi
390 c
391 m6      73181   1.0     $ Ta
392 c

```

393	m7	74182	0.0908		
394		74183	0.0488		
395		74184	0.10455		
396		74186	0.09707		
397		29063	0.4557		
398		29065	0.2031	\$ W+Cu	
399	c				
400	m8	25055	1.0	\$ Mn	
401		12025	0.1009		
402		12026	0.1101	\$ Mg	
403	c				
404	m9	12000	1.0	\$ Mg	
405	c				
406	m10	28058	0.680769		
407		28060	0.262231		
408		28061	1.14e-2		
409		28062	3.63e-2		
410		28064	9.25e-3	\$ Ni	
411	c				
412	m11	41093	1.0	\$ Nb	
413		40091	0.1122		
414		40092	0.1715		
415		40094	0.1738		
416	c				
417	m12	40000	1.0		\$ Zr
418	c				
419	m13	29063	0.6917		
420		29065	0.3083	\$ Cu	
421	c				
422	m14	26054	5.845e-2		
423		26056	0.91754		
424		26057	2.119e-2		
425		26058	2.82e-3		
426	c				
427	c	ccc			
428	c	controle			
429	c	ccc			
430	c				
431	print	\$ 110	170	100	
432	c				

```

433 nps 200000000
434 c
435 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
436 c importancias
437 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
438 c
439 imp:h      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
440            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
441            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
442            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
443            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
444            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
445            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
446            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
447            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
448            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
449            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
450            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
451            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
452            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
453            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
454            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
455            1 1 1 1 1 1 1 0 1
456 c
457 imp:n,|    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
458            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
459            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
460            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
461            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
462            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
463            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
464            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
465            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
466            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
467            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
468            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
469            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
470            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
471            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
472            1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

```



```

513 c
514 sdef erg=660 dir=1 vec=0 0 1 x=d1 y=d2 z=0 ccc=600 tr=1 par=9
515 sp1 -41 1.05967 0
516 sp2 -41 1.05967 0
517 tr1 0.1 0.15 -90 1 0 0 0 1 0 0 0 1
518 c
519 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
520 c grupos
521 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
522 c
523 c
524 e0 0 0.100E-07 0.108E-07 0.117E-07 0.126E-07 0.136E-07
525 0.147E-07 0.158E-07 0.171E-07 0.185E-07 0.200E-07
526 0.215E-07 0.233E-07 0.251E-07 0.271E-07 0.293E-07
527 0.316E-07 0.342E-07 0.369E-07 0.398E-07 0.430E-07
528 0.464E-07 0.501E-07 0.541E-07 0.584E-07 0.631E-07
529 0.681E-07 0.736E-07 0.795E-07 0.858E-07 0.926E-07
530 0.100E-06 0.108E-06 0.117E-06 0.126E-06 0.136E-06
531 0.147E-06 0.159E-06 0.171E-06 0.185E-06 0.200E-06
532 0.216E-06 0.233E-06 0.251E-06 0.271E-06 0.293E-06
533 0.316E-06 0.342E-06 0.369E-06 0.398E-06 0.430E-06
534 0.464E-06 0.501E-06 0.541E-06 0.585E-06 0.631E-06
535 0.682E-06 0.736E-06 0.795E-06 0.858E-06 0.927E-06
536 0.100E-05 0.108E-05 0.117E-05 0.126E-05 0.136E-05
537 0.147E-05 0.159E-05 0.171E-05 0.185E-05 0.200E-05
538 0.216E-05 0.233E-05 0.251E-05 0.271E-05 0.293E-05
539 0.316E-05 0.342E-05 0.369E-05 0.398E-05 0.430E-05
540 0.464E-05 0.502E-05 0.542E-05 0.585E-05 0.631E-05
541 0.682E-05 0.736E-05 0.795E-05 0.858E-05 0.927E-05
542 0.100E-04 0.108E-04 0.117E-04 0.126E-04 0.136E-04
543 0.147E-04 0.159E-04 0.171E-04 0.185E-04 0.200E-04
544 0.216E-04 0.233E-04 0.251E-04 0.271E-04 0.293E-04
545 0.317E-04 0.342E-04 0.369E-04 0.398E-04 0.430E-04
546 0.465E-04 0.502E-04 0.542E-04 0.585E-04 0.632E-04
547 0.682E-04 0.736E-04 0.795E-04 0.859E-04 0.927E-04
548 0.100E-03 0.108E-03 0.117E-03 0.126E-03 0.136E-03
549 0.147E-03 0.159E-03 0.171E-03 0.185E-03 0.200E-03
550 0.216E-03 0.233E-03 0.251E-03 0.272E-03 0.293E-03
551 0.317E-03 0.342E-03 0.369E-03 0.399E-03 0.430E-03
552 0.465E-03 0.502E-03 0.542E-03 0.585E-03 0.632E-03

```

553		0.682E-03	0.737E-03	0.795E-03	0.859E-03	0.927E-03	
554		0.100E-02	0.108E-02	0.117E-02	0.126E-02	0.136E-02	
555		0.147E-02	0.159E-02	0.171E-02	0.185E-02	0.200E-02	
556		0.216E-02	0.233E-02	0.252E-02	0.272E-02	0.293E-02	
557		0.317E-02	0.342E-02	0.369E-02	0.399E-02	0.430E-02	
558		0.465E-02	0.502E-02	0.542E-02	0.585E-02	0.632E-02	
559		0.682E-02	0.737E-02	0.796E-02	0.859E-02	0.928E-02	
560		0.100E-01	0.108E-01	0.117E-01	0.126E-01	0.136E-01	
561		0.147E-01	0.159E-01	0.171E-01	0.185E-01	0.200E-01	
562		0.216E-01	0.233E-01	0.252E-01	0.272E-01	0.293E-01	
563		0.317E-01	0.342E-01	0.369E-01	0.399E-01	0.431E-01	
564		0.465E-01	0.502E-01	0.542E-01	0.585E-01	0.632E-01	
565		0.682E-01	0.737E-01	0.796E-01	0.859E-01	0.928E-01	
566		0.100E+00	0.108E+00	0.117E+00	0.126E+00	0.136E+00	
567		0.147E+00	0.159E+00	0.171E+00	0.185E+00	0.200E+00	
568		0.216E+00	0.233E+00	0.252E+00	0.272E+00	0.293E+00	
569		0.317E+00	0.342E+00	0.369E+00	0.399E+00	0.431E+00	
570		0.465E+00	0.502E+00	0.542E+00	0.585E+00	0.632E+00	
571		0.683E+00	0.737E+00	0.796E+00	0.859E+00	0.928E+00	
572		0.100E+01	0.108E+01	0.117E+01	0.126E+01	0.136E+01	
573		0.147E+01	0.159E+01	0.171E+01	0.185E+01	0.200E+01	
574		0.216E+01	0.233E+01	0.252E+01	0.272E+01	0.293E+01	
575		0.317E+01	0.342E+01	0.370E+01	0.399E+01	0.431E+01	
576		0.465E+01	0.502E+01	0.542E+01	0.586E+01	0.632E+01	
577		0.683E+01	0.737E+01	0.796E+01	0.860E+01	0.928E+01	
578		0.100E+02	0.108E+02	0.117E+02	0.126E+02	0.136E+02	
579		0.147E+02	0.159E+02	0.172E+02	0.185E+02	0.200E+02	
580		0.216E+02	0.233E+02	0.252E+02	0.272E+02	0.293E+02	
581		0.317E+02	0.342E+02	0.370E+02	0.399E+02	0.431E+02	
582		0.465E+02	0.502E+02	0.542E+02	0.586E+02	0.632E+02	
583		0.683E+02	0.737E+02	0.796E+02	0.860E+02	0.928E+02	
584		0.100E+03	0.108E+03	0.117E+03	0.126E+03	0.136E+03	
585		0.147E+03	0.159E+03	0.172E+03	0.185E+03	0.200E+03	
586		0.216E+03	0.233E+03	0.252E+03	0.272E+03	0.293E+03	
587		0.317E+03	0.342E+03	0.370E+03	0.399E+03	0.431E+03	
588		0.465E+03	0.502E+03	0.542E+03	0.586E+03	0.632E+03	0.683E+3
589	c						
590	c	cc					
591	c	Tallies					
592	c	cc					

```

593 c
594 c Neutron spectrum [particles/source proton]
595 c
596 f4:n    165 169 175 179 181 183 185 189 191 193
597         195 197 201 203 205 207 209 213 215 217
598         219 221 223 225 227 229 231 233 235 245 255
599 c
600 c Proton spectrum [particles/source proton]
601 c
602 f14:h    165 169 175 179 181 183 185 189 191 193
603         195 197 201 203 205 207 209 213 215 217
604         219 221 223 225 227 229 231 233 235 245 255
605 c
606 c Alpha particles spectrum [particles/source proton]
607 c
608 f24:a    165 169 175 179 181 183 185 189 191 193
609         195 197 201 203 205 207 209 213 215 217
610         219 221 223 225 227 229 231 233 235 245 255
611 c
612 c Negative pions spectrum [particles/source proton]
613 c
614 f34:/    165 169 175 179 181 183 185 189 191 193
615         195 197 201 203 205 207 209 213 215 217
616         219 221 223 225 227 229 231 233 235 245 255

```


Apêndice C

H5b

Outro Benchmark de interesse particular é referente ao reator em configuração subcrítica H5b.

Este adendo se refere a participação no subprojeto sob o título de "Collaborative Work on LEU Fuel Utilization in ADS Systems do Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems (ADS)".

O H5b é um conceito de unidade subcrítica de pesquisa acionada por fonte proposto por Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrado, República da Servia. H5b usa combustível russo de baixo enriquecimento do tipo TVR-S em uma matriz de chumbo. A fonte da nêutron é originada por interação de um feixe de prótons ou dêuterons, extraído de um acelerador TESLA, com um alvo posicionado dentro do núcleo subcrítico.

A modelagem do núcleo, fonte e alvo foi realizada usando o código MCNPX 2.5, detalhes geométricos estão esquematizados na Figura C.1. Foram utilizados as Bibliotecas ENDFB VI-6 para nêutrons juntamente com o modelo nuclear (para interação de fonte-alvo) Bertini/Dresner.

C.1 Introdução

A instalação do acelerador TESLA foi projetada em 1992 é a principal unidade do cyclotron VINCY, foi otimizada para extração de feixes de dêuterons.

Figura C.1: Cortes horizontal e vertical da modelagem de arranjo (LEU ADSRF (H5b)) do núcleo no nível do alvo.

Para efeito do H5b ADSFR somente faixes de prótons e dêuterons são estudados.

Para simular fonte de nêutrons de um ADS devemos conhecer os parâmetros do feixe de íons usado para produção de nêutrons sobre o alvo-fonte via reações $(*, xn)$. Os feixes de íons acelerados por ciclotrons na realidade não possuem distribuição de partículas bem comportadas, o feixe não é monoenergético e possui uma distribuição temporal tipo função passo, mas para o objetivo de simulações de fonte de nêutrons um modelo simplificado é proposto [110] o qual o feixe de íons possui uma simetria cilíndrica e um comportamento contínuo no tempo, a forma transversal do feixe é considerado esférica cujo o raio é considerado o mesmo do cilindro alvo. Este modelo extremamente simplificado supõe também as partículas uniformemente distribuída em função do raio. A energia das partículas está uniformemente distribuída sobre o intervalo $[E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]$ onde E_0 é a energia referente ao feixe de íons.

As características dos feixes estão apresentadas na tabela C.1, onde N_{norm} é o número de íons do feixe que cruza o alvo por unidade de tempo, este número depende da corrente do feixe I e do grau de ionização n de um íon do feixe. Se a carga $Q = \pm ne$, onde n é um inteiro e e a magnitude da carga do elétron,

Partícula do Feixe	$E_0(\text{MeV})$	$I_{max}(\mu A)$	$N_{norm}(s^{-1})$
próton	73	5	$3.12 \cdot 10^{13}$
deuteron	67	50	$3.12 \cdot 10^{14}$

Tabela C.1: Características dos feixes - Energia do Feixe, Intercidades Máxima e Numero de íons injetada para o acelerador TESLA.

Material	Alcance da partícula [cm]	
	próton 75 MeV	dêuteron 65 MeV
Chumbo	0.898	0.438
Urânio	0.564	0.278
Tório	0.898	0.441
Bismuto	1.042	0.509
Lítio	10.378	4.552
Berílio	3.052	1.348
Tungstênio	0.504	0.244
liga de Pb-Bi	0.999	0.491

Tabela C.2: As especificações dos alvos a serem calculados.

então $N_{norm} = \frac{I}{Q} = \frac{I}{ne} = 6.242 \cdot 10^{12} \frac{I}{n}$.

Para a interação com as partículas do feixe, um alvo cilíndrico de diferentes materiais no vácuo é assumido de acordo com a especificação.

As dimensões do alvo são determinados de acordo com : o espaço disponível dentro no núcleo subcrítico, alcance dos feixes de íons nos materiais propostos e propriedades básicas de resfriamento.

As especificações do alvo (material e dimensões) estão apresentadas nas tabela C.2 e composições na tabela C.3.

Material	Densidade	Diâmetro	Comprimento	Densidade atômica[1/barn/cm]	
Chumbo ($_{82}Pb$)	11,35	2,5	2,5	^{204}Pb : 4.61796 E-04	
				^{206}Pb : 7.94948 E-03	
				^{207}Pb : 7.28977 E-03	
				^{208}Pb : 1.72843 E-02	
				Pb_{nat} : 3.29854 E-02	
Urânio ($_{92}U$)	18,95	2,5	2,5	^{234}U : 2.58895 E-06	
				^{235}U : 3.45386 E-04	
				^{238}U : 4.75956 E-02	
				U_{nat} : 4.79436 E-02	
Tório ($_{90}Th$)	11,72	2,5	2,5	^{232}Th : 3.04172 E-02	
Bismuto ($_{83}Bi$)	9,747	2,5	2,5	^{209}Bi : 2.80877 E-02	
Lítio ($_{3}Li$)	0,534	2,5	11,0	6Li : 3.51700 E-03	
				7Li : 4.28203 E-02	
				Li_{nat} : 4.63373 E-02	
Berílio ($_{4}Be$)	1,848	2,5	2,5	9Be : 1.23488 E-01	
Tungstênio ($_{74}W$)	19,3	2,5	2,5	^{180}W : 7.58654 E-05	
				^{182}W : 1.67536 E-02	
				^{183}W : 9.04695 E-03	
				^{184}W : 1.93710 E-02	
				^{186}W : 1.79738 E-02	
				W_{nat} : 6.32211 E-02	
Liga de Pb-Bi	10,747	2,5	2,5	^{204}Pb : 1.94581E-04	
				^{206}Pb : 3.34958 E-03	
				^{207}Pb : 3.07160 E-03	
				^{208}Pb : 7.28290 E-03	
				Pb_{nat} : 1.38987 E-02	
				^{209}Bi : 1.71880 E-02	

Tabela C.3: Composições dos alvos.

Material do Alvo	Valor	Incert.
Pb	2,7337E-01	2,8157E-03
U	4,8410E-01	9,1010E-03
Th	4,1294E-01	1,7200E-02
Bi	2,5734E-01	2,7278E-03
Li	3,2303E-01	4,0378E-03
Be	1,9552E-01	2,4440E-03
W	2,3791E-01	2,2363E-03
Pb-Bi	2,6995E-01	2,7805E-03

Tabela C.4: *Multiplicidade de nêutrons para diferentes alvos obtidas com o feixe de prótons.*

Material do Alvo	Valor	Incert.
Pb	1,3559E-01	2,1424E-03
U	2,0706E-01	4,3896E-03
Th	1,6485E-01	3,1980E-03
Bi	1,3047E-01	2,0353E-03
Li	4,5409E-01	5,9032E-03
Be	2,7206E-01	4,0809E-03
W	1,3972E-01	2,3752E-03
Pb-Bi	1,3501E-01	1,8632E-03

Tabela C.5: *Multiplicidade de nêutrons para diferentes alvos obtidas com o feixe de dêutrons.*

Resultados para a fonte

Para simular uma fonte de nêutrons de um ADS precisamos conhecer os parâmetros do feixe de íons usado para a produção de nêutrons sobre o alvo, o qual sera a fonte externa de nêutrons do sistema, por reação do tipo $(*,xn)$. Os resultados preliminares para multiplicidade de nêutrons para diferentes alvos compostos de diferentes materiais e feixes são mostrados nas tabelas C.4 e C.5.

O espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos, normalizada por partícula de fonte também foram calculadas e os resultados estão apresentados nas figuras C.2,C.3,C.4.

Figura C.2: Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos obtidos por este trabalho (IPEN) e pelo VINCA Institute, utilizando o feixe de dêuterons.

Figura C.3: Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos obtidos por este trabalho (IPEN) e pelo VINCA Institute, utilizando o feixe de prótons.

Figura C.4: Espectro de nêutrons escapando das superfícies dos alvos de Urânio e Chumbo obtidos por este trabalho (IPEN) e pelo VINCA Institute.

	Multiplicidade de Nêutrons [%]			
	Prótons - 73 MeV		Dêuteron - 67 MeV	
Lab.	Vinca	IPEN	Vinca	IPEN
Pb	14.99	17.22	4.80	6.96
U	27.73	30.89	8.06	10.51
Th	23.66	26.72	6.61	8.80
Bi	15.97	16.33	4.61	6.79
Li	13.43	16.56	7.97	7.80
Be	12.21	14.17	8.99	5.17
W	17.36	16.97	5.62	7.59
Pb-Bi	16.01	17.26	4.81	7.13

Tabela C.7: Multiplicação (k_{source}) em função do feixe e do alvo obtidos pelo VINCA Institute.

Parâmetro	valor	erro
k_{eff}	0.98693	0.00002
$l_p[\mu s]$	85.07	0.08

Tabela C.8: Multiplicação (k_{eff}) e tempo de geração (Λ)

C.1.1 Resultados para o núcleo

Os parâmetros, multiplicação efetiva (k_{eff}) e tempo de geração do nêutron¹ (Λ) estão mostrados nas Tabelas C.7 e C.6.

	Valor	incerteza
k_{eff}	9,8693E-01	2,0000E-05
$\Lambda[seg]$	8,5073E-05	7,5099E-07

Tabela C.6: Multiplicação (k_{eff}) e tempo de geração (Λ)

¹Para calcular a tempo de geração realizamos o seguinte experimento numérico calculamos o tempo de vida do nêutrons simulando uma fonte pulsada e obtendo a resposta do sistema, ou seja, a função resposta deve ser da forma $R = \int S(t) \exp(\alpha t) dt$ onde é assumido que $\alpha = \frac{(\rho - \beta)}{\lambda}$, $\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}}$ e $\beta = \frac{k_{eff} - k_{prompt}}{k_{eff}}$, onde k_{prompt} é a geração considerando somente os nêutrons prontos.

As figuras C.5-C.5 representam o espectro em quatro posições distintas do arranjo, as quais são:

1. Abaixo do alvo;
2. ao lado do alvo na direção radial;
3. na posição entre o refletor e o núcleo na altura do alvo;
4. na posição entre o refletor e o tanque na altura do alvo.

Figura C.5: Espectro de nêutrons na célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.

Figura C.6: Espectro de nêutrons ao lado celula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.

Figura C.7: Espectro de nêutrons na celula entre o refletor e o núcleo na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.

Figura C.8: *Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o tanque na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de dêuteron.*

Figura C.9: Espectro de nêutrons na célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.

Figura C.10: Espectro de nêutrons ao lado célula abaixo do alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.

Figura C.11: Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o núcleo na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.

Figura C.12: Espectro de nêutrons na célula entre o refletor e o tanque na altura do alvo para o alvo de Urânio utilizando o feixe de prótons.

C.1.2 Conclusão

Os cálculos realizados neste estudo comparativo, a fim de otimizar os parâmetros do alvo de nêutrons, assim como os parâmetros cinéticos e de distribuição de energia de fluxos de nêutrons no interior do núcleo subcrítico do sistema, apresentam um importante passo no projeto de H5B ADSRR no Instituto de Ciências Nucleares Vinca. Os maiores valores para o fluxo de nêutrons emitidos foram obtidos para o alvo de urânio metálico. Os picos do espectro de nêutrons do alvo para ambos feixes estão na faixa de energia de 0,2 MeV a 4 MeV para todos os materiais, exceto para o berílio e lítio que estão na faixa de 1 MeV a 10 MeV. De acordo com estes resultados, os responsáveis pela instalação decidirão usar a fonte de nêutrons feita de urânio e de continuar a estudar uma construção alvo real (por exemplo, a dimensão exata, a forma de projeto de revestimento e da necessidade de refrigeração), tendo em conta a geração de produtos de fissão e geração de calor devido ao impacto do feixe de nêutrons e a interação do acoplamento do núcleo do H5B ADSRR.

Os espectros de nêutrons nas células representativas selecionadas do ADSRR H5B com o alvo de urânio foram calculados por ambos os grupos de pesquisa e concordam razoavelmente. Os valores calculados para o fator de multiplicação k_{eff} foram 0,9745 e 0,98693, obtidos por VINCA e IPEN, respectivamente, diferem de forma um pouco maior do que o valor aceitável de 0,010, isso é devido ao fato que de acordo com as especificações do exercício foi pedido para calcular o fator de multiplicação efetivo e este fator foi o calculado pelo IPEN, já o valor calculado pelo instituto VINCA varia com a fonte indicando por sua vez que o valor calculado é o fator conhecido como k_{source} . A vida útil dos nêutrons prontos calculada assumiram valores iguais a 77 ms e 85 ms estão dentro de 10% da diferença aceitável. Ambos os resultados do grupo de pesquisa mostram que os espectros de nêutrons multi grupo nas células selecionadas da

instalação ADSRR H5B têm quase a mesma forma. Esses resultados confirmam que a exigência de projeto de reatores rápidos: espectro de nêutrons rápidos dominante.

A ideia de obter resultados mais confiáveis através da introdução de dois grupos de pesquisa independente, usando versões diferentes dos códigos de MCNP e MCNPX e bibliotecas de dados nucleares, levar a algumas discrepâncias, particularmente nos cálculos das emissões de nêutrons do alvo. Esta situação exige um estudo mais profundo das causas das diferenças existentes, com especial atenção para a modelagem de sistemas, códigos e seleção de dados de secção de choque.

Apêndice D

Decaimento dos Produtos de Spallation

Para determinar a dependência temporal das concentrações de núclídeos é preciso o desenvolvimento de soluções para a seguinte equação (Eq. D.1):

$$\frac{dN_i}{dt} = \text{Taxa de Formação} - \text{Taxa de Destruição} - \text{Taxa de Decaimento.} \quad (\text{D.1})$$

Considerando a desintegração radioativa e a absorção (captura e fissão) como os processos que aparecem no lado direito da Eq. (D.2). A taxa de tempo de mudança da concentração de um determinado núclídeo, N_i , em termos desses fenômenos pode ser escrita como

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_i \gamma_{ji} \sigma_{f,j} N_j \phi + \sigma_{c,i-1} N_{i-1} \phi + \lambda'_i N'_i - \sigma_{f,i} N_i \phi - \sigma_{c,i} N_i \phi - \lambda_i N_i, \quad (\text{D.2})$$

onde ($i = 1, \dots, I$), e

- $\sum_i \gamma_{ji} \sigma_{f,j} N_j \phi$ é o yield de N_i devido à fissão de todos os núclídeos N_j ;
- $\sigma_{c,i-1} N_{i-1} \phi$ é a taxa de transmutação em N_i devido à captura radiativo de nêutrons pelo núclídeo N_{i-1} ;
- $\lambda'_i N'_i$ é a taxa de formação de N_i devido ao decaimento radioativo dos núclídeos N'_i ;

- $\sigma_{f,i}N_i\phi$ é a taxa de destruição de N_i , devido à fissão;
- $\sigma_{c,i}N_i\phi$ é a taxa de destruição de N_i devido a todas as formas de absorção, que não fissão, $(x, \gamma, x, \alpha, x, p, x, 2n, x, 3n)$; e
- $\lambda_i N_i$ é a taxa de decaimento radioativo do N_i .

A Eq. (D.2) é escrita para um meio homogêneo contendo um espaço de energia média de fluxo de nêutrons, ϕ , com o fluxo ponderado pelas médias das seções de choque, σ_f e σ_c , representando a probabilidade de reação. O fluxo é uma função espacial, da energia, tempo e dependente da concentração de nuclídios. O tratamento matemático, utilizado, assume que o fluxo ponderado no espaço e energia pode ser considerado constante ao longo de um intervalo de tempo suficientemente pequeno, Δt . Da mesma forma, assume-se que um único grupo de nêutrons com fluxo ponderado pelas médias das seções de choque pode ser utilizado durante o mesmo intervalo de tempo. Para um determinado intervalo de tempo, estas condições são necessárias para se tratar a Eq. (D.2) como uma de primeira ordem, equação diferencial linear.

As mudanças dependentes do tempo, no fluxo e nas seções de choque ponderadas, são simuladas proporcionando a capacidade de atualizar os valores do fluxo ponderado no espaço e energia e, também, as seções de choque ponderadas em cada intervalo temporal, $\Delta t_k, \Delta t_{k+1}, \dots, \Delta t_n$.

D.0.3 Solução com o Método de Matriz Exponencial

Para todos os nuclídios N_i , a Eq. (D.2) representa um conjunto de equações lineares, homogêneas, diferenciais de primeira ordem com coeficientes constantes. A mesma pode ser escrita em notação matricial como

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = \mathbf{A}\vec{N} \quad (\text{D.3})$$

onde $\vec{N}$ é um vetor de concentrações de núclídeos e $\mathbf{A}$ é matriz de transição contendo os coeficientes de taxa de decaimento radioativo e absorção de nêutrons. A Eq. (D.3) tem a solução conhecida

$$\vec{N} = \exp(\mathbf{A}t)\vec{N}(o) \quad (\text{D.4})$$

onde $\vec{N}(o)$ é o vetor das concentrações iniciais dos núclídios. Análogo a uma expansão de série para a função exponencial, a função exponencial da matriz, $\exp(\mathbf{A}t)$, aparecendo na Eq. (D.4), é definido como

$$\exp(\mathbf{A}t) \equiv \mathbf{I} + \mathbf{A}t + \frac{(\mathbf{A}t)^2}{2} + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{A}t)^m}{m!}, \quad (\text{D.5})$$

com $\mathbf{I}$ sendo a unidade matriz. As Eq. (D.4) e (D.5) constituem o método da matriz exponencial, que produz uma solução completa para o problema. No entanto, em certos casos relacionados com a limitação de precisão do computador, ocorrem dificuldades na geração de valores precisos da função da matriz exponencial. Nessas circunstâncias, procedimentos alternativos usando as equações generalizadas de Bateman ou o método iterativo de Gauss-Seidel para resolução de sistemas de equações lineares é aplicado.

Uma solução simples da Eq. (D.4) através da expansão na Eq. (D.5) exige a armazenagem completa da matriz transição. Para evitar exigências de armazenamento excessivas da memória, foi desenvolvida uma relação. Substituindo a função de matriz exponencial na Eq. (D.4), temos

$$\vec{N} = \left[\mathbf{I} + \mathbf{A}t + \frac{(\mathbf{A}t)^2}{2!} + \frac{(\mathbf{A}t)^3}{3!} + \dots \right] \vec{N}(o). \quad (\text{D.6})$$

A relação de recursão pode ser observado considerando-se a solução da Eq. (D.6) para um determinado núclídeo, N_i . O resultado é uma série de termos que surgem a partir das sucessivas pós-multiplicação da matriz de transição

pelo vetor de incrementos das concentração de núclídeos produzidos a partir do cálculo dos períodos anteriores. Dentro da precisão da aproximação da expansão de série, os valores físicos das concentrações dos núclídeos são obtidos somando uma série convergida dos termos do vetor. Os elementos da matriz de transição, a_{ij} , são as constantes de taxa de produção de primeira ordem para a formação de núclídeos i de núclídeos j . A solução nos termos destas constantes de taxa de produção é escrita como:

$$N_i = N_i(o) + t \sum_j a_{ij} N_j(o) + \frac{t}{2} \sum_k \left[a_{ik} t \sum_j a_{kj} N_j(o) \right] + \frac{t}{3} \sum_m \left\{ a_{im} * \frac{t}{2} \sum_k \left[a_{mk} t \sum_j a_{kj} N_j(o) \right] \right\} + \dots, \quad (D.7)$$

onde o intervalo de índices, j, k, m , é de 1 a M para um tamanho $M \times M$ da matriz $\mathbf{A}$.

A relação de recursão é desenvolvido a partir de Eq. (D.7), definindo os termos C_i^n como

$$C_i^0 \equiv N_i(o), C_i^{n+1} = \frac{t}{n+1} \sum_j a_{ij} C_j^n, \quad (D.8)$$

que produz a solução para N_i como

$$N_i = \sum_{n=0}^{\infty} C_i^n. \quad (D.9)$$

O uso da Eq. (D.9) na obtenção da solução para o sistema de núclídeos dado na Eq. (D.4) exige o armazenamento de apenas dois vetores, $\vec{C}^n$ e $\vec{C}^{n+1}$, além do valor atual da solução.

Núclídeos com alta constante de decaimento são removidos da matriz de transição e tratados separadamente. Por exemplo, na cadeia de decaimento $A \rightarrow B \rightarrow C$, se a constante de decaimento para B é alta, uma nova

constante é inserido na matriz $A \rightarrow C$.

A determinação de que as transições devem ser reduzidos a partir da matriz envolve o cálculo da matriz norma. A norma da matriz $\mathbf{A}$ é definida como sendo a menor linha de montante máximo absoluto e a coluna de montante máximo absoluto. Ou seja, a norma $[\mathbf{A}]$ é dada por

$$[\mathbf{A}] = \min \left\{ \max_i \sum_j |a_{ij}|, \max_j \sum_i |a_{ij}| \right\}. \quad (\text{D.10})$$

Apresentamos nas figuras D.1 a D.26 as cadeias consideradas em nossas simulações para os principais núclídeos.

Figura D.1: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{110}Ag .

Figura D.2: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{194}Au .

Figura D.3: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{195}Au .

Figura D.4: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{207}Bi .

Figura D.5: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{139}Ce .

Figura D.6: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{60}Co .

Figura D.7: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{59}Fe .

Figura D.8: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{172}Hf .

Figura D.9: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{175}Hf .

Figura D.10: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{203}Hg .

Figura D.11: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{194}Ir .

Figura D.13: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{173}Lu .

Figura D.14: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{95}Nb .

Figura D.15: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{185}Os .

Figura D.16: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{83}Rb .

Figura D.17: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{183}Re .

Figura D.18: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{102}Rh .

Figura D.19: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{46}Sc .

Figura D.20: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{75}Se .

Figura D.21: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{85}Sr .

Figura D.22: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{121}Te .

Figura D.23: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{88}Y .

Figura D.24: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{65}Zn .

Figura D.25: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{88}Zr .

Figura D.26: Cadeia de decaimento para o nuclídeo ^{95}Zr .

A listagem abaixo, apresenta como exemplo de entrada de dados para o origem-s, utilizada em nossas simulações para a primeira amostra de chumbo no passo puro decaimento e com o modelo de BERTINI/ABLA.

```

1 =origens
2 0$$ a5 28 e
3 1$$ 1 1t
4 pwr nuclear data – sample case 1
5 3$$ a4 0 a11 0 0 a16 0 a33 18 e
6 4** 0.632 4.8312 1.3793 e 2t
7 35$$ 0 4t
8 56$$ 10 a13 1087 4 3 0 0 1 e
9 57** a3 1–20 e 5t
10 pwr – 3.3% enriched u
11 mt of heavy metal charged to reactor
12 60** 20 40 60 80 100 120 140 160 180 200
13 66$$ 1 a5 1 a9 1 e
14 73$$ 100210 100220 120270 130290 130310 140290
15 140300 140330 150310 160330 160340
16 160360 160380 170360 170380 170390
17 170420 180370 180380 180390 180400
18 180410 180420 180430 180450 190380
19 190410 190420 190430 190450 200400
20 200410 200430 200440 200450 200460
21 200470 210440 210450 210460 210470
22 210480 210490 210500 220450 220460
23 220470 220480 220490 220500 220510
24 220520 220530 220540 230480 230490
25 230500 230510 230520 230530 230540
26 230550 230560 240490 240510 240520
27 240530 240540 240550 240560 240570
28 240580 240590 250530 250540 250550
29 250560 250570 250580 250590 250600
30 250610 250620 260540 260550 260560
31 260570 260580 260590 260600 260610
32 260620 260630 260640 270570 270580
33 270590 270600 270610 270620 270630
34 270640 270650 270660 270680 270690
35 280580 280590 280600 280610 280620
36 280630 280640 280650 280660 280670

```

37	280680	280690	290590	290610	290620
38	290630	290640	290650	290660	290670
39	290680	290690	290700	290710	290730
40	300620	300630	300640	300650	300660
41	300670	300680	300690	300700	300710
42	300720	300730	300740	310650	310660
43	310670	310680	310690	310700	310710
44	310720	310730	310740	310750	310760
45	310770	310780	320670	320680	320690
46	320700	320710	320720	320730	320740
47	320750	320760	320770	320780	320790
48	320800	320810	320820	330690	330700
49	330710	330720	330730	330740	330750
50	330760	330770	330780	330790	330800
51	330810	330820	340710	340720	340730
52	340740	340750	340760	340770	340780
53	340790	340800	340810	340820	340830
54	340840	340860	350730	350740	350750
55	350760	350770	350780	350790	350800
56	350810	350820	350830	350840	350850
57	350860	350870	350880	360770	360780
58	360790	360800	360810	360820	360830
59	360840	360850	360860	360870	360880
60	360890	360900	370790	370800	370810
61	370820	370830	370840	370850	370860
62	370870	370880	370890	370900	370910
63	370920	370940	380820	380830	380840
64	380850	380860	380870	380880	380890
65	380900	380910	380920	380930	380940
66	380950	380960	390830	390840	390850
67	390860	390870	390880	390890	390900
68	390910	390920	390930	390940	390950
69	390960	390970	400840	400850	400860
70	400870	400880	400890	400900	400910
71	400920	400930	400940	400950	400960
72	400970	400980	40990	401000	410870
73	410880	410890	410900	410910	410920
74	410930	410940	410950	410960	410970
75	410980	41990	411000	411010	411020
76	420880	420900	420910	420920	420930

77	420940	420950	420960	420970	420980
78	42990	421000	421010	421020	421030
79	421040	421050	430920	430930	430940
80	430950	430960	430970	430980	43990
81	431000	431010	431020	431030	431040
82	431050	431060	431070	440940	440950
83	440960	440970	440980	44990	441000
84	441010	441020	441030	441040	441050
85	441060	441070	441080	441090	450970
86	450980	45990	451000	451010	451020
87	451030	451040	451050	451060	451070
88	451080	451090	451100	451120	46990
89	461000	461010	461020	461030	461040
90	461050	461060	461070	461080	461090
91	461100	461110	461120	461130	461140
92	461150	471010	471020	471030	471040
93	471050	471060	471070	471080	471090
94	471100	471110	471120	471130	471140
95	471150	471160	481040	481050	481060
96	481070	481080	481090	481100	481110
97	481120	481130	481140	481150	481160
98	481170	481180	481190	481200	491050
99	491070	491080	491090	491100	491110
100	491120	491130	491140	491150	491160
101	491170	491180	491190	491200	491210
102	491220	501100	501110	501120	501130
103	501140	501150	501160	501170	501180
104	501190	501200	501210	501220	501230
105	501240	511120	511130	511140	511150
106	511160	511170	511180	511190	511200
107	511210	511220	511230	511240	511250
108	511270	521140	521150	521160	521170
109	521180	521190	521200	521210	521220
110	521230	521240	521250	521260	521270
111	521280	531150	531160	531170	531180
112	531190	531200	531210	531220	531230
113	531240	531250	531260	531270	531280
114	531290	531300	541190	541200	541210
115	541220	541230	541240	541250	541260
116	541270	541280	541290	541300	541310

117	551210	551220	551230	551240	551250
118	551260	551270	551280	551290	551300
119	551310	551320	551330	551350	561240
120	561250	561260	561270	561280	561290
121	561300	561310	561320	561330	561340
122	561350	561360	561380	561390	571240
123	571270	571280	571290	571300	571310
124	571320	571330	571340	571350	571360
125	571370	571380	571390	581280	581290
126	581300	581310	581320	581330	581340
127	581350	581360	581370	581380	581390
128	591330	591340	591350	591360	591370
129	591390	591400	591420	591430	601330
130	601350	601360	601370	601380	601390
131	601400	601410	601420	601430	611360
132	611370	611380	611400	611410	611420
133	611430	611440	611450	611480	621380
134	621430	621440	621460	621470	621480
135	631420	631440	631470	641430	641450
136	641460	641470	641480	641490	641510
137	651450	651490	651520	651550	661500
138	661510	661530	661540	661550	661570
139	661580	671540	671550	671560	671570
140	671580	671590	671620	681530	681540
141	681550	681560	681570	681580	681590
142	681600	681610	681620	681630	691550
143	691560	691570	691580	691590	691600
144	691610	691620	691630	691640	691650
145	691660	691670	701570	701580	701590
146	701600	701610	701620	701630	701640
147	701650	701660	701670	701680	701690
148	701700	701740	711580	711590	711600
149	711610	711620	711630	711640	711650
150	711660	711670	711680	711690	711700
151	711710	711720	711730	711750	721610
152	721620	721630	721640	721650	721660
153	721670	721680	721690	721700	721710
154	721720	721730	721740	721750	721760
155	721770	721800	731630	731640	731650
156	731660	731670	731680	731690	731700

157	731710	731720	731730	731740	731750
158	731760	731770	731780	731790	731800
159	731810	741650	741660	741670	741680
160	741690	741700	741710	741720	741730
161	741740	741750	741760	741770	741780
162	741790	741800	741810	741820	741830
163	741840	741850	741880	751660	751670
164	751680	751690	751700	751710	751720
165	751730	751740	751750	751760	751770
166	751780	751790	751800	751810	751820
167	751830	751840	751850	751860	751870
168	751880	751920	761690	761700	761710
169	761720	761730	761740	761750	761760
170	761770	761780	761790	761800	761810
171	761820	761830	761840	761850	761860
172	761870	761880	761890	761900	761910
173	761930	771710	771720	771730	771740
174	771750	771760	771770	771780	771790
175	771800	771810	771820	771830	771840
176	771850	771860	771870	771880	771890
177	771900	771910	771920	771930	771940
178	771950	771970	771990	781740	781750
179	781760	781770	781780	781790	781800
180	781810	781820	781830	781840	781850
181	781860	781870	781880	781890	781900
182	781910	781920	781930	781940	781950
183	781960	781970	781980	781990	782010
184	791760	791770	791780	791790	791800
185	791810	791820	791830	791840	791850
186	791860	791870	791880	791890	791900
187	791910	791920	791930	791940	791950
188	791960	791970	791980	791990	792000
189	792010	792020	792030	792040	792050
190	792060	801790	801800	801810	801820
191	801830	801840	801850	801860	801870
192	801880	801890	801900	801910	801920
193	801930	801940	801950	801960	801970
194	801980	801990	802000	802010	802020
195	802030	802040	802050	802060	811820
196	811830	811840	811850	811860	811870

197	811880	811890	811900	811910	811920
198	811930	811940	811950	811960	811970
199	811980	811990	812000	812010	812020
200	812030	812040	812050	812060	812070
201	812080	821850	821860	821870	821880
202	821890	821900	821910	821920	821930
203	821940	821950	821960	821970	821980
204	821990	822000	822010	822020	822030
205	822040	822050	822060	822070	822080
206	831900	831910	831920	831930	831940
207	831950	831960	831970	831980	831990
208	832000	832010	832020	832030	832040
209	832050	832060	832070	832080	841950
210	841960	841970	841980	841990	842000
211	842010	842020	842030	842040	842050
212	842060	250581	270621	290681	300711
213	320771	340731	340831	350741	350841
214	360851	370811	370821	370901	380851
215	390851	390871	390961	410921	410951
216	410981	41991	420911	430941	430951
217	430961	431021	450971	450981	45991
218	451001	451011	451021	451061	451081
219	451101	471041	471061	471081	471101
220	471111	471131	481131	481151	481171
221	481191	491081	491101	491141	491151
222	491161	491171	491181	491191	491201
223	491211	501211	501231	511161	511181
224	511201	521191	521211	561291	601391
225	611481	651491	671541	691641	711661
226	711661	711681	731781	751821	751841
227	761811	761831	771901	791891	792001
228	801931	801951	801971	811871	811901
229	811911	811941	811961	811981	821971
230	821991	822021	831991	832011	841991
231	842011				
232	74**	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	
233		2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	
234		2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017
235		2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
236		2.15875e-017	4.3175e-017	4.3175e-017	6.47625e-017

237	6.47625e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
238	8.635e-017	1.07938e-016	1.07938e-016	2.15875e-017	4.3175e-017
239	2.15875e-017	8.635e-017	6.47625e-017	4.3175e-017	1.07938e-016
240	4.3175e-017	6.47625e-017	6.47625e-017	1.07938e-016	1.07938e-016
241	8.635e-017	6.47625e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
242	1.07938e-016	8.635e-017	1.94288e-016	2.15875e-016	1.51113e-016
243	6.47625e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	1.07938e-016
244	6.47625e-017	1.51113e-016	1.07938e-016	1.51113e-016	1.07938e-016
245	6.47625e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	1.727e-016
246	1.51113e-016	1.07938e-016	3.02225e-016	8.635e-017	1.29525e-016
247	2.15875e-017	2.15875e-017	8.635e-017	1.07938e-016	1.727e-016
248	1.94288e-016	3.02225e-016	1.727e-016	1.29525e-016	1.07938e-016
249	1.07938e-016	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	8.635e-017
250	1.29525e-016	3.88575e-016	3.02225e-016	3.23813e-016	1.94288e-016
251	4.3175e-017	8.635e-017	6.47625e-017	2.15875e-017	6.47625e-017
252	2.15875e-016	4.74925e-016	3.02225e-016	2.37463e-016	3.454e-016
253	2.15875e-016	1.07938e-016	6.47625e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
254	4.3175e-017	4.3175e-017	1.94288e-016	3.88575e-016	3.23813e-016
255	5.61275e-016	5.39688e-016	4.3175e-016	2.5905e-016	2.80638e-016
256	8.635e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	1.29525e-016
257	2.15875e-016	3.88575e-016	5.39688e-016	5.39688e-016	6.26038e-016
258	5.181e-016	4.74925e-016	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
259	4.3175e-017	6.47625e-017	8.635e-017	4.96513e-016	4.10163e-016
260	7.33975e-016	8.635e-016	6.26038e-016	6.26038e-016	3.88575e-016
261	3.23813e-016	4.3175e-017	6.47625e-017	2.15875e-017	6.47625e-017
262	3.02225e-016	5.181e-016	9.28263e-016	8.635e-016	7.7715e-016
263	8.41913e-016	5.61275e-016	5.181e-016	2.5905e-016	1.94288e-016
264	8.635e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	6.47625e-017	2.15875e-016
265	6.26038e-016	8.20325e-016	1.0362e-015	9.71438e-016	9.49851e-016
266	6.908e-016	5.61275e-016	4.96513e-016	1.727e-016	6.47625e-017
267	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	1.07938e-016
268	2.37463e-016	6.69213e-016	7.12388e-016	1.05779e-015	1.14414e-015
269	1.12255e-015	1.2089e-015	6.26038e-016	4.10163e-016	2.80638e-016
270	1.727e-016	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.37463e-016
271	5.61275e-016	7.12388e-016	1.23049e-015	1.05779e-015	1.2089e-015
272	1.46795e-015	1.25208e-015	5.181e-016	3.66988e-016	2.37463e-016
273	2.37463e-016	2.15875e-017	2.15875e-017	1.07938e-016	1.727e-016
274	4.10163e-016	6.69213e-016	1.05779e-015	1.10096e-015	1.66224e-015
275	1.36001e-015	1.01461e-015	8.41913e-016	4.3175e-016	2.15875e-016
276	1.51113e-016	4.3175e-017	4.3175e-017	6.47625e-017	3.23813e-016

277	6.47625e-016	1.0362e-015	1.42478e-015	1.51113e-015	1.68383e-015
278	1.48954e-015	9.93026e-016	6.26038e-016	3.66988e-016	2.37463e-016
279	1.29525e-016	4.3175e-017	8.635e-017	1.727e-016	5.61275e-016
280	1.07938e-015	1.42478e-015	1.79176e-015	1.70541e-015	1.96446e-015
281	1.44636e-015	1.23049e-015	5.181e-016	3.454e-016	1.07938e-016
282	2.15875e-017	2.15875e-017	1.94288e-016	6.47625e-016	9.71438e-016
283	1.36001e-015	1.727e-015	2.22351e-015	1.48954e-015	1.727e-015
284	1.44636e-015	7.7715e-016	4.53338e-016	1.94288e-016	1.94288e-016
285	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	1.07938e-016	3.454e-016
286	9.49851e-016	1.2089e-015	1.74859e-015	2.20193e-015	2.26669e-015
287	2.13716e-015	1.57589e-015	9.71438e-016	5.181e-016	4.53338e-016
288	1.727e-016	8.635e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	6.47625e-017
289	3.23813e-016	6.0445e-016	6.908e-016	1.59748e-015	2.18034e-015
290	1.79176e-015	1.94288e-015	1.40319e-015	1.12255e-015	5.82863e-016
291	3.454e-016	3.23813e-016	8.635e-017	4.3175e-017	6.47625e-017
292	4.3175e-017	1.07938e-016	6.0445e-016	8.635e-016	1.83494e-015
293	1.79176e-015	2.30986e-015	2.22351e-015	1.85653e-015	1.48954e-015
294	7.7715e-016	3.454e-016	2.15875e-016	1.727e-016	6.47625e-017
295	2.15875e-017	4.3175e-017	1.29525e-016	4.53338e-016	6.69213e-016
296	1.18731e-015	1.59748e-015	1.92129e-015	2.26669e-015	2.09399e-015
297	1.77018e-015	9.71438e-016	6.908e-016	4.3175e-016	1.727e-016
298	2.15875e-017	4.3175e-017	4.3175e-017	8.635e-017	2.15875e-016
299	6.69213e-016	1.10096e-015	1.3816e-015	1.59748e-015	1.87811e-015
300	1.57589e-015	1.61906e-015	1.01461e-015	8.85088e-016	4.10163e-016
301	2.15875e-016	4.3175e-017	1.29525e-016	2.15875e-017	2.15875e-017
302	1.07938e-016	4.96513e-016	8.41913e-016	1.0362e-015	1.40319e-015
303	1.42478e-015	1.48954e-015	1.42478e-015	1.23049e-015	6.26038e-016
304	6.47625e-016	4.96513e-016	1.727e-016	8.635e-017	4.3175e-017
305	6.47625e-017	2.80638e-016	7.12388e-016	9.93026e-016	1.57589e-015
306	1.59748e-015	1.59748e-015	1.29525e-015	1.25208e-015	7.12388e-016
307	4.74925e-016	1.94288e-016	1.51113e-016	1.07938e-016	2.15875e-017
308	2.15875e-017	2.37463e-016	3.66988e-016	5.82863e-016	1.14414e-015
309	1.57589e-015	1.10096e-015	1.29525e-015	8.85088e-016	8.85088e-016
310	6.0445e-016	4.10163e-016	1.727e-016	8.635e-017	2.15875e-017
311	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	1.94288e-016	3.66988e-016
312	5.39688e-016	8.41913e-016	1.05779e-015	1.01461e-015	1.18731e-015
313	1.16573e-015	7.98738e-016	7.12388e-016	4.53338e-016	1.94288e-016
314	6.47625e-017	8.635e-017	4.3175e-017	8.635e-017	1.07938e-016
315	6.26038e-016	6.0445e-016	9.28263e-016	7.98738e-016	7.98738e-016
316	9.71438e-016	6.908e-016	4.10163e-016	3.02225e-016	3.02225e-016

317	1.51113e-016	2.15875e-017	8.635e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
318	6.47625e-017	1.29525e-016	1.94288e-016	3.88575e-016	4.3175e-016
319	6.908e-016	8.20325e-016	8.20325e-016	6.0445e-016	4.96513e-016
320	3.66988e-016	3.454e-016	2.15875e-016	8.635e-017	8.635e-017
321	6.47625e-017	6.47625e-017	1.29525e-016	3.02225e-016	4.3175e-016
322	6.0445e-016	6.26038e-016	4.74925e-016	4.74925e-016	4.3175e-016
323	3.66988e-016	1.727e-016	2.15875e-016	4.3175e-017	4.3175e-017
324	2.15875e-017	6.47625e-017	6.47625e-017	1.94288e-016	3.02225e-016
325	3.66988e-016	5.61275e-016	5.181e-016	5.82863e-016	3.66988e-016
326	3.88575e-016	2.37463e-016	1.727e-016	1.29525e-016	6.47625e-017
327	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	1.07938e-016	2.15875e-016
328	2.5905e-016	2.80638e-016	3.66988e-016	3.66988e-016	1.51113e-016
329	2.5905e-016	1.727e-016	8.635e-017	2.15875e-017	4.3175e-017
330	1.29525e-016	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
331	2.37463e-016	2.5905e-016	2.80638e-016	3.88575e-016	2.5905e-016
332	1.51113e-016	1.07938e-016	6.47625e-017	6.47625e-017	2.15875e-017
333	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	6.47625e-017	4.3175e-017
334	8.635e-017	1.727e-016	2.80638e-016	2.80638e-016	3.23813e-016
335	1.94288e-016	8.635e-017	1.29525e-016	1.51113e-016	2.15875e-017
336	2.15875e-017	4.3175e-017	6.47625e-017	6.47625e-017	4.3175e-017
337	8.635e-017	1.29525e-016	2.15875e-016	2.15875e-016	6.47625e-017
338	6.47625e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	6.47625e-017
339	4.3175e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	6.47625e-017	6.47625e-017
340	8.635e-017	8.635e-017	6.47625e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
341	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
342	2.15875e-017	6.47625e-017	1.51113e-016	2.15875e-017	2.37463e-016
343	6.47625e-017	8.635e-017	4.3175e-017	1.07938e-016	4.3175e-017
344	4.3175e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
345	2.15875e-017	8.635e-017	4.3175e-017	1.07938e-016	1.29525e-016
346	1.29525e-016	4.3175e-017	6.47625e-017	6.47625e-017	4.3175e-017
347	2.15875e-017	1.29525e-016	1.07938e-016	2.15875e-017	4.3175e-017
348	2.15875e-017	4.3175e-017	8.635e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
349	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	8.635e-017	8.635e-017
350	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
351	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
352	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
353	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
354	2.15875e-017	4.3175e-017	8.635e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
355	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
356	2.15875e-017	4.3175e-017	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017

357	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	2.15875e-017
358	2.15875e-017	1.29525e-016	6.47625e-017	2.15875e-017	1.07938e-016
359	4.3175e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017
360	6.47625e-017	2.37463e-016	8.635e-017	2.5905e-016	2.15875e-016
361	1.94288e-016	1.07938e-016	1.727e-016	6.47625e-017	6.47625e-017
362	1.727e-016	1.51113e-016	2.15875e-016	2.15875e-016	3.02225e-016
363	4.3175e-016	2.37463e-016	3.23813e-016	1.94288e-016	1.727e-016
364	6.47625e-017	4.3175e-017	4.3175e-017	1.51113e-016	2.5905e-016
365	4.53338e-016	5.82863e-016	9.93026e-016	7.7715e-016	8.85088e-016
366	5.61275e-016	4.96513e-016	1.94288e-016	2.15875e-016	1.29525e-016
367	1.51113e-016	2.15875e-017	6.47625e-017	2.15875e-017	1.94288e-016
368	3.88575e-016	6.47625e-016	9.93026e-016	1.53271e-015	1.727e-015
369	1.42478e-015	1.48954e-015	1.05779e-015	6.26038e-016	4.10163e-016
370	2.37463e-016	1.51113e-016	8.635e-017	2.15875e-017	8.635e-017
371	1.727e-016	5.82863e-016	1.3816e-015	1.94288e-015	2.82796e-015
372	2.80638e-015	2.82796e-015	2.39621e-015	1.74859e-015	1.48954e-015
373	8.41913e-016	7.12388e-016	4.3175e-016	1.29525e-016	6.47625e-017
374	2.15875e-017	2.15875e-017	8.635e-017	3.66988e-016	4.96513e-016
375	1.64065e-015	2.28828e-015	3.47559e-015	4.10163e-015	4.23115e-015
376	4.81402e-015	3.47559e-015	3.30289e-015	1.98605e-015	1.16573e-015
377	8.85088e-016	4.96513e-016	3.02225e-016	1.51113e-016	4.3175e-017
378	2.15875e-017	6.47625e-017	3.02225e-016	1.01461e-015	2.15875e-015
379	3.25971e-015	5.05148e-015	6.41149e-015	7.03753e-015	7.4261e-015
380	6.5626e-015	5.67752e-015	4.44703e-015	3.30289e-015	1.92129e-015
381	1.2089e-015	7.12388e-016	3.88575e-016	4.10163e-016	8.635e-017
382	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	6.47625e-017
383	1.94288e-016	8.635e-016	1.83494e-015	3.49718e-015	5.59117e-015
384	7.72833e-015	9.49851e-015	1.01893e-014	1.01677e-014	8.22484e-015
385	6.80007e-015	6.32514e-015	4.12321e-015	2.35304e-015	2.05081e-015
386	1.07938e-015	7.33975e-016	3.454e-016	1.07938e-016	1.07938e-016
387	1.07938e-016	2.15875e-017	8.635e-017	1.94288e-016	7.98738e-016
388	1.64065e-015	3.77781e-015	6.17403e-015	9.32581e-015	1.27366e-014
389	1.31252e-014	1.56078e-014	1.44205e-014	1.3557e-014	1.15709e-014
390	1.00814e-014	7.51245e-015	5.15942e-015	3.32448e-015	1.87811e-015
391	9.71438e-016	6.0445e-016	2.15875e-016	1.29525e-016	8.635e-017
392	2.15875e-017	4.3175e-017	1.29525e-016	5.82863e-016	1.40319e-015
393	3.23813e-015	5.50482e-015	8.98041e-015	1.19379e-014	1.48306e-014
394	1.59316e-014	1.76154e-014	1.54782e-014	1.50465e-014	1.36001e-014
395	1.07722e-014	8.41913e-015	6.77848e-015	4.1448e-015	2.80638e-015
396	1.44636e-015	8.635e-016	3.454e-016	3.23813e-016	6.47625e-017

397	2.15875e-017	8.635e-017	2.15875e-017	4.3175e-017	3.02225e-016
398	8.635e-016	2.35304e-015	4.68449e-015	7.81468e-015	1.15493e-014
399	1.6903e-014	2.00764e-014	2.48256e-014	2.5171e-014	2.63368e-014
400	2.42428e-014	2.13069e-014	1.89107e-014	1.2823e-014	8.635e-015
401	5.95815e-015	2.97908e-015	1.85653e-015	1.70541e-015	1.0362e-015
402	4.96513e-016	4.3175e-016	1.94288e-016	1.51113e-016	2.15875e-017
403	4.3175e-017	1.07938e-016	5.39688e-016	1.36001e-015	3.08701e-015
404	5.09465e-015	8.89406e-015	1.17004e-014	1.52408e-014	1.92561e-014
405	1.92561e-014	2.2192e-014	2.09831e-014	2.15012e-014	1.86084e-014
406	1.78313e-014	1.40535e-014	1.24344e-014	8.13849e-015	6.3899e-015
407	4.87878e-015	3.84258e-015	2.33145e-015	1.29525e-015	1.40319e-015
408	1.2089e-015	5.181e-016	4.74925e-016	1.29525e-016	2.15875e-017
409	2.15875e-017	2.15875e-017	2.15875e-016	6.26038e-016	1.85653e-015
410	3.23813e-015	6.30355e-015	1.04268e-014	1.36433e-014	1.66224e-014
411	1.97526e-014	2.17602e-014	2.25158e-014	2.26885e-014	2.43939e-014
412	2.39837e-014	2.39621e-014	2.2559e-014	1.92561e-014	1.65792e-014
413	1.35138e-014	1.25423e-014	1.0729e-014	8.1169e-015	7.14547e-015
414	5.91498e-015	4.74925e-015	2.82796e-015	1.59748e-015	4.3175e-017
415	1.51113e-016	7.98738e-016	1.53271e-015	3.51876e-015	5.37529e-015
416	7.27499e-015	1.01893e-014	1.26935e-014	1.55862e-014	2.00332e-014
417	2.67038e-014	3.57489e-014	3.82962e-014	3.74759e-014	3.16041e-014
418	3.27267e-014	2.99419e-014	2.76104e-014	2.60777e-014	2.39837e-014
419	2.37894e-014	2.38542e-014	3.46695e-014	2.56676e-014	3.54251e-014
420	6.47625e-017	2.15875e-017	6.47625e-017	3.23813e-016	1.42478e-015
421	2.02923e-015	3.88575e-015	5.5264e-015	7.90103e-015	1.04484e-014
422	1.50897e-014	1.90618e-014	2.2818e-014	2.45018e-014	2.80854e-014
423	2.92727e-014	3.24892e-014	3.60296e-014	3.8728e-014	4.12321e-014
424	4.41681e-014	6.70508e-014	4.89691e-013	4.62728e-013	9.57622e-013
425	6.47625e-017	4.10163e-016	7.98738e-016	2.02923e-015	2.4178e-015
426	4.3175e-015	5.41847e-015	6.30355e-015	7.74992e-015	9.45533e-015
427	1.13982e-014	1.30173e-014	1.71621e-014	1.93208e-014	2.26669e-014
428	2.22567e-014	1.6903e-014	8.24643e-015	6.908e-016	2.15875e-017
429	1.07938e-016	3.88575e-016	2.37463e-016	1.51113e-016	2.37463e-016
430	3.66988e-016	2.80638e-016	2.37463e-016	8.635e-017	6.47625e-017
431	2.15875e-017	2.15875e-010	7.85e-011	1.79896e-011	1.67903e-010
432	9.38586e-011	7.85e-011	2.7475e-010	8.635e-011	6.47625e-011
433	1.68946e-010	3.32116e-011	1.46795e-010	1.34922e-010	3.42659e-011
434	2.4286e-010	7.70981e-012	1.07938e-010	2.89527e-010	2.51505e-011
435	3.23813e-010	5.39688e-011	1.43917e-010	2.5905e-010	2.78548e-010
436	8.46567e-012	9.18618e-011	2.15875e-010	1.43917e-010	2.98904e-010

```

437      1.30833e-011  1.68946e-010  2.54319e-010  2.90315e-010  2.7475e-010
438      1.85036e-010  7.61914e-011  1.54987e-010  4.59309e-011  7.19585e-011
439      2.45048e-010  3.28953e-010  1.88891e-010  1.54197e-010  1.85036e-010
440      2.15875e-010  3.59792e-010  9.59444e-011  1.13619e-011  1.54197e-011
441      1.31402e-010  2.53971e-011  1.07938e-010  1.727e-010  2.15875e-010
442      2.15875e-010  1.727e-010  2.15875e-010  1.26986e-010  5.39688e-011
443      1.7778e-010  2.32481e-010  2.53971e-011  1.43917e-010  1.07938e-010
444      2.15875e-010  2.15875e-010  7.19585e-011  9.59444e-011  7.19585e-011
445      6.54166e-011  1.32168e-010  2.77554e-010  1.90879e-010  1.26986e-011
446      3.78587e-011  8.43649e-011  6.44405e-011  2.19343e-010  1.99269e-011
447      1.48839e-010  6.81712e-011  1.46166e-011  2.56623e-010  2.72414e-010
448      3.16936e-010  2.19004e-011  1.32311e-010  1.4553e-010  1.74982e-010
449      1.05072e-011  6.01657e-012  4.73151e-011  1.50361e-011  2.46715e-010
450      1.52382e-010
451 75$$  1087r1  t
452 56$$  f0 t
453 end

```


Apêndice E

Função Partição P

A Função partição P não restritiva denotada por $P(A)$ ([111] pg. 825 e [112]) nos fornece o número de maneiras que podemos escrever um inteiro A como a soma de inteiros positivos cuja a ordem de somação não é significativa. Por exemplo podemos escrever o inteiro 4 como

$$\begin{aligned}4 &= 4 \\&= 3 + 1 \\&= 2 + 2 \\&= 2 + 1 + 1 \\&= 1 + 1 + 1 + 1\end{aligned}$$

logo $P(4) = 5$. Mais detalhes desta função pode ser encontrado em Abramowitz and Stegun [111], [113] e Math Word [114]

Nosso interesse não esta na função partição P não restritiva mas sim na restritiva que é denotada por $P(A, M)$ que nos fornece o número de maneiras que podemos escrever um inteiro A como a soma de M números inteiros positivos.

Por exemplo

$$\begin{aligned}
12 &= 1 + 1 + 1 + 1 + 8 \\
&= 1 + 1 + 1 + 2 + 7 \\
&= 1 + 1 + 1 + 3 + 6 \\
&= 1 + 1 + 1 + 4 + 5 \\
&= 1 + 1 + 2 + 2 + 6 \\
&= 1 + 1 + 2 + 3 + 5 \\
&= 1 + 1 + 2 + 4 + 4 \\
&= 1 + 1 + 3 + 3 + 4 \\
&= 1 + 2 + 2 + 2 + 5 \\
&= 1 + 2 + 2 + 3 + 4 \\
&= 1 + 2 + 3 + 3 + 3 \\
&= 2 + 2 + 2 + 2 + 4 \\
&= 2 + 2 + 2 + 3 + 3
\end{aligned}$$

i.e. $P(12, 5) = 13$.

Como foi dito anteriormente, podemos obter $P(A, M)$ notando que $P(A, M)$ é igual ao número de partições com menos um inteiro $P(A - 1, M - 1)$, mais o número de partições que não possuem nenhum elemento unitário (para obter esta basta observar que é numericamente igual ao número de partições obtidas ao se retirar um inteiro de cada partição, isto é, $P(A - M, M)$).

O que fornece a seguinte relação de recorrência :

$$P(A, M) = P(A - M, M) + P(A - 1, M - 1) \quad (\text{E.1})$$

com $P(A, K) = 0$ para $K > A$, $P(A, A) = 1$ e $P(A, 0) = 0$.

Figura E.1: Descrição da figura mostrada.

Aplicando iterativamente a equação (E.1) é possíveis mostrar ¹ que

$$P(A, M) = \sum_{k=0}^{k=\frac{A}{M}-1} P(A - kM - 1, M - 1) \quad (\text{E.2})$$

O número total de possíveis partições (a função partição P não restritiva) é dado por

$$P(A) = \sum_{M=1}^A P(A, M) \quad (\text{E.3})$$

A equação de recorrência pode ser resolvida analiticamente para valores de

¹Aplicando iterativamente a equação (E.1) segue que

$$P(A, M) = \left[\begin{array}{c} P(A - M - 1, M - 1) \\ P(A - 2M, M) \end{array} \right] + [P(A - 1, M - 1)]$$

$$P(A, M) = P(A - 3M, M) + \left[\begin{array}{c} P(A - 1, M - 1) \\ P(A - M - 1, M - 1) \\ P(A - 2M - 1, M - 1) \end{array} \right]$$

logo

$$P(A, M) = P(A - kM, M) + \left[\begin{array}{c} P(A - 1, M - 1) + \\ P(A - M - 1, M - 1) + \\ P(A - 2M - 1, M - 1) + \\ \dots \\ + P(A - (k - 1)M - 1, M - 1) \end{array} \right]$$

quando $A - kM = 0$, o termo esquerdo da relação acima, obviamente, se anula logo

$$P(A, M) = \sum_{k=0}^{k=\frac{A}{M}} P(A - (k - 1)M - 1, M - 1)$$

ou alternativamente

$$P(A, M) = \sum_{k=0}^{k=\frac{A}{M}-1} P(A - kM - 1, M - 1)$$

$M \leq 4$ (C.f [114], [113])

$$P(A, 1) = 1 \quad (\text{E.4})$$

$$P(A, 2) = \frac{1}{4} \left(2A - 1 + (-1)^A \right) \quad (\text{E.5})$$

$$P(A, 3) = \frac{1}{72} \left(6A^2 - 7 - 9(-1)^A + 16 \cos \left(\frac{2}{3} \pi A \right) \right) \quad (\text{E.6})$$

$$P(A, 4) = \frac{1}{864} \left\{ \begin{array}{l} 3(A+1) \left[2A(A+2) - 13 + 9(-1)^A \right] + \\ -96 \cos \left(\frac{2}{3} \pi A \right) + 108(-1)^{\frac{A}{2} \bmod ((A+1), 2)} + \\ + 32\sqrt{3} \sin \left(\frac{2}{3} \pi A \right) \end{array} \right\} \quad (\text{E.7})$$

A qual pode ser escrita em termos da função truncamento $\text{int}(x) \equiv \{x\}$ (C.f.[115]) como

$$P(A, 2) = \left\{ \frac{A}{2} \right\} \quad (\text{E.8})$$

$$P(A, 3) = \left\{ \frac{A^2}{12} \right\}$$

ou em termos da função

$$t_M(A) = A + \frac{1}{4}M(M-3) \quad (\text{E.9})$$

forneendo

$$P(A, 2) = \left\{ \frac{t_2(A)}{2} \right\} \quad (\text{E.10})$$

$$P(A, 3) = \left\{ \frac{t_3^2(A)}{12} \right\} \quad (\text{E.11})$$

$$P(A, 3) = \left\{ \begin{array}{l} \left\{ \frac{1}{144}t_4^3(A) - \frac{1}{48}t_4(A) \right\}, \text{ para } A \text{ par} \\ \left\{ \frac{1}{144}t_4^3(A) - \frac{1}{12}t_4(A) \right\}, \text{ para } A \text{ impar} \end{array} \right\} \quad (\text{E.12})$$

E.1 Aspectos computacionais da função P restritiva

Ao se efetuar o calculo numérico pela relação de recorrência (E.2) vemos que um loop recursivo é efetuado. Para ver melhor o significado da equação de recorrência (E.1) defina a função

$$g(A, M) \equiv \ln(P(A, M))$$

assim a recorrência toma a forma

$$\begin{aligned} g(A, M) &= g(A - M, M) g(A - 1, M - 1) \\ \frac{g(A, M)}{g(A - 1, M - 1)} &= g(A - M, M) \end{aligned}$$

e conseqüentemente

$$\begin{aligned} \frac{g(A, M)}{g(A - 1, M - 1)} &= g(A - M, M) \\ \frac{g(A - 1, M - 1)}{g(A - 2, M - 2)} &= g(A - M, M - 1) \\ &\dots \\ \frac{g(A - N, M - N)}{g(A - (N + 1), M - (N + 1))} &= g(A - M, M - N) \end{aligned}$$

então

$$g(A, M) = g(A - M, M) g(A - M, M - 1) \dots g(A - (N + 1), M - (N + 1))$$

$$g(A, M) = g(A - M, M) g(A - M, M - 1) \dots g(A - M, 1)$$

$$g(A, M) = \prod_{i=0}^{M-1} g(A - M, M - i)$$

que nos fornece

$$P(A, M) = \sum_{i=0}^{M-1} P(A - M, M - i)$$

o que mostra mais facilmente que a cada passo da recursão é efetuado em um intervalo de comprimento M e a somação é realizada para todos os valores da multiplicidade $(M - i)$ e portanto esses passos são realizados inúmeras vezes no calculo da equação de recorrência. Se alternativamente guardamos cada passo da somação e o resultado dos itens anteriores forem usados a velocidade de calculo (computacional) aumenta consideravelmente.

E.2 Algoritmo para geração das diversas funções partições restritivas.

Este algoritmo é devido a Hindenburg (C.f [113]). O algoritmo consiste em achar as diversas partições inteiras de n inteiros divididas em m partes, em ordem ascendente.

Algoritmo :

- Escreva o primeiro elemento como $(1, 1, \dots, 1, n + 1 - m) \equiv (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_3, \lambda_m)$.
- Para obter a proxima partição procure o maior j tal que $\lambda_m - \lambda_j \geq 2$.
- Repace a $(m - j)$ -tupla como $(\lambda_j, \lambda_{j+1}, \dots, \lambda_3, \lambda_m) \rightarrow (\lambda_{j+1}, \lambda_{j+1}, \dots, \lambda_{j+1}, \lambda'_m)$, onde λ'_m é escolhido de forma que n não se altere.

Apêndice F

Cabeçalhos do código fonte do MCSMM e diagramas

F.1 Makefile

```
1 #####
2 #
3 #           Makefile from MSSMM
4 #
5 #           This document is part of:
6 #           Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
7 #
8 #   Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
9 #           Airtón Deppman (adeppman@gmail.com)
10 #
11 #####
12
13 rm = del
14 CC=  cl
15 DEFS=
16 PROGNAME= MCSMM
17 INCLUDES=  -I.
18 LIBS=
19 MCSMMSRC=./
20
21 DEFINES= $(INCLUDES) $(DEFS)
22 CFLAGS= /EHsc $(DEFINES)
23
```

```

24 SRCS = \
25     TRandomi.cpp \
26     PamClass.cpp \
27     TFragment.cpp \
28     TCanonical.cpp \
29     TPartition.cpp \
30     TPartitionHelper.cpp \
31     TStorage.cpp \
32     TSMM.cpp \
33     MCSMM.cpp
34
35 OBJS = \
36     PamClass.obj \
37     TRandomi.obj \
38     TFragment.obj \
39     TCanonical.obj \
40     TPartition.obj \
41     TPartitionHelper.obj \
42     TStorage.obj \
43     TSMM.obj \
44     MCSMM.obj
45
46 .c.o:
47     $(rm) $@
48     $(CC) $(CFLAGS) -c $*.cpp
49
50 all: $(PROGNAME)
51
52 $(PROGNAME) : $(OBJS)
53     $(CC) $(CFLAGS) -o $(PROGNAME) $(OBJS) $(LIBS)
54
55 clean:
56     $(rm) $(OBJS) $(PROGNAME) core *~

```

F.2 definedvalues.h

```

1 //-----//
2 //
3 //          This document is part of:

```

```

4 //      Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5 //
6 //      Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7 //      Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8 //
9 //-----//
10 #ifndef _DEFINED_VALUES_HH
11 #define _DEFINED_VALUES_HH
12
13 #define PI      3.14159265358979323846
14
15 /// Define Constantes usadas em todo codigo.
16 ///
17
18 const double /// Raio Nuclear
19      r_0      = 1.2      , // [fm]
20      /// Constande Planck x Velocidade da Luz
21      hc       = 197.3    , // []
22      /// Massa do netron
23      mnc2     = 939.5656 , // [MeV]
24      /// Massa do proton.
25      mpc2     = 938.2723 ; // [MeV]
26 #endif

```

F.3 PamClass.h

```

1 //-----//
2 //
3 //      This document is part of:
4 //      Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5 //
6 //      Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7 //      Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8 //
9 //-----//
10 #ifndef _PAMCLASS_HH
11 #define _PAMCLASS_HH
12
13 #include <iostream>

```

```

14 #include <vector>
15 #include <cmath>
16 #include <map>
17
18 #include <string>
19 #include <sstream>
20 #include <fstream>
21
22 #include "definedvalues.h"
23
24
25 using namespace std;
26
27 /// A Classe PamClass Calcula as funções de estatísticas (PAM
28 /// Formula) usada no modelo de multifragmentação. A distribuição
29 ///  $P(A,M)$  gerada no construtor para um dado valor de A e seus
30 /// valores normalizados (probabilidades) armazenados em um vetor
31 /// para uso posterior através da função getProb(M), onde M é a
32 /// multiplicidade ( $M \leq A$ ).
33 ///
34 //-----
35
36 class PamClass
37 {
38 public:
39
40 /// Construtor
41 ///
42 /// @param A_ : Numero de Baryons da partição.
43 /// @param path : Caminho para gravar/ler o arquivo PAM.
44 ///
45 //-----
46
47     PamClass( int A_ , string path);
48
49 /// Construtor
50 ///
51 /// @param A_ : Numero de Baryons da partição.
52 ///
53 //-----

```



```

54
55   PamClass( int A_ );
56
57   /// Construtor Padro.
58   //-----
59
60   PamClass() {}
61
62   /// Construtor de Cpia.
63   //-----
64
65   PamClass(const PamClass & copy ) {}
66
67   /// Destrutor.
68   //-----
69
70   ~PamClass();
71
72   /// Retorna o numero parcial de combinaes ( $P(A0,M)$ ) associado a
73   /// multiplicidade M.
74   ///
75   /// @param A0 : Numero de Baryons da partio.
76   /// @param M : Multiplicidade da partio.
77   ///
78   /// @return Retorna o numero parcial de combinaes.
79   ///
80   //-----
81
82   double PAM( const int A0 , const int M);
83
84   /// Retorna o numero parcial de combinaes ( $P(A0,M)$ ) associado a
85   /// multiplicidade M.
86   ///
87   /// Metodo 1 : Usa solues analiticas para  $M \leq 4$  e usa a eq. de
88   /// recorrncia (#) ver manual.
89   /// @param A0 : Numero de Baryons da partio.
90   /// @param M : Multiplicidade da partio.
91   ///
92   /// @return Retorna o numero parcial de combinaes.
93   ///

```

```

94 //-----
95
96  double PAMMod1( const int A0 , const int M);
97
98  /// Retorna o numero parcial de combinações (P(A0,M)) associado a
99  /// multiplicidade M.
100  /// Metodo 2 : Usa soluções analíticas para  $M \leq 4$  e usa a eq. de
101  /// recorrência usual.
102  ///
103  /// @param A0 : Numero de Baryons da partição.
104  /// @param M : Multiplicidade da partição.
105  ///
106  /// @return Retorna o numero parcial de combinações.
107  ///
108  //-----
109
110  double PAMMod2( const int A0 , const int M);
111
112  /// Retorna o numero parcial de combinações (P(A0,M)) associado
113  /// a multiplicidade M.
114  /// Metodo 3 : Mapeia a recorrência e usa a eq. de recorrência usual.
115  ///
116  /// @param A0 : Numero de Baryons da partição.
117  /// @param M : Multiplicidade da partição.
118  ///
119  /// @return Retorna o numero parcial de combinações.
120  ///
121  //-----
122
123  double PAMMod3( int A0 , int M);
124
125  /// Retorna o numero parcial de combinações (P(A0,M)) associado a
126  /// multiplicidade M.
127  /// Metodo 4 : Mapeia a recorrência e usa a eq. de recorrência (#)
128  /// ver manual.
129  /// Este é o método adotado (Default).
130  /// @param A0 : Numero de Baryons da partição.
131  /// @param M : Multiplicidade da partição.
132  ///
133  /// @return Retorna o numero parcial de combinações.

```

```

134 ///  

135 //-----  

136  

137 double PAMMod4( int A0 , int M);  

138  

139 ///Retorna o numero total de combinações (P(A0)).  

140 ///  

141 //-----  

142  

143 double PAM( const int A0 );  

144  

145 ///Retorna a probabilidade associada A multiplicidade M.  

146 ///@param M valor de  

147 ///@return valor  

148 ///  

149 //-----  

150  

151 double getProb(const int M);  

152  

153 ///Constroi o vetor Partição .  

154 ///@param A : Número de elementos.  

155 ///  

156 //-----  

157  

158 void makeProb(int A_);  

159  

160 ///Constroi o vetor Partição grava no arquivo.  

161 ///  

162 ///@param A : Número de elementos.  

163 ///@param namearq : Nome do arquivo.  

164 ///  

165 //-----  

166  

167 void makeProbArq(string & namearq, int A_);  

168  

169 ///Gera a função Partição.  

170 ///  

171 ///@param A : Número de elementos.  

172 ///  

173 //-----

```

```

174
175     void Generate( int A_);
176
177 private:
178
179     /// Vetor usado para armazenar as probabilidades associadas.
180     /// - Prob = [P(A,1)/P(A),P(A,2)/P(A),...,P(A,A)/P(A)]
181     ///
182     //-----
183
184     vector<double> Prob;
185
186     /// Mapa usado para tabelar a função.
187     //-----
188
189     map<int, double> Table;
190
191 };
192 #endif

```

F.4 TCanonical.h

```

1  //-----//
2  //
3  //          This document is part of:
4  //          Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5  //
6  //          Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7  //          Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8  //
9  //-----//
10 #ifndef _TCANONICAL_HH
11 #define _TCANONICAL_HH
12
13 #include "TFragment.h"
14 #include "definedvalues.h"
15
16 #include <iostream>
17 #include <vector>

```

```

18 #include <algorithm>
19 #include <cmath>
20
21 using namespace std;
22
23 /// Definição do vetor de ponteiros de TFragment usado para construir
24 /// a partição, ou seja, cada ponteiro TFragment* armazena o endereço
25 /// de um fragmento na memória.
26 ///
27 // -----
28
29 typedef vector<TFragment*> vPartition;
30
31 /// A classe TCanonical contém a definição do modelo e grandezas
32 /// físicas para a simulação do processo de Multifragmentação
33 ///
34 // -----
35
36 class TCanonical {
37
38 public:
39
40 /// Construtor Padrão da Classe.
41 ///
42 // -----
43
44     TCanonical():Omega_0(16.00) ,    // [MeV]
45         Beta_0(18.00) ,    // [MeV]
46         C_c(0.737) ,    // [C/fm]
47         K_asym(30.00) ,    // [MeV]
48         Q_asym(35.00) ,    // [MeV]
49         T_c(16.00) ,    // [MeV]
50         eps_0(16.00) ,    // [MeV]
51         D_(2.3)    {}; // [fm]
52
53 /// Destrutor Padrão da Classe.
54 ///
55 // -----
56
57     ~TCanonical() {};

```

```

58
59 /// Definição de betha (C.f. eq. T-3.3).
60 ///
61 /// @param T : Temperatura da Partição.
62 /// @return : betha(T).
63 ///
64 //-----
65
66 double betha(double T);
67
68 /// Definição da primeira derivada de betha em relação a temperatura.
69 ///
70 /// @param T : Temperatura da Partição.
71 /// @return : Primeira derivada de betha(T).
72 ///
73 //-----
74
75 double dbethadT(double T);
76
77 /// Definição da segunda derivada de betha em relação a temperatura.
78 ///
79 /// @param T : Temperatura da Partição.
80 /// @return : Primeira derivada de betha(T).
81 ///
82 //-----
83
84 double d2bethadT2(double T);
85
86 /// Definição do volume do sistema não fragmentado.
87 ///
88 /// @param A : Número de Baryons da Partição.
89 /// @return : Volume do sistema não fragmentado.
90 ///
91 //-----
92
93 double V_0(int A);
94
95 /// Definição da fração incrementada ao volume pelo processo de
96 /// fragmentação.
97 ///

```

```

98 ///  @param  A0   : Número de Baryons da Partição.
99 ///  @param  Mf   : Multiplicidade da Partição.
100 ///  @return   : Fração incrementada ao volume pelo processo
101 ///                de fragmentação.
102 ///
103 //-----
104
105  double x_f(int A0, int Mf);
106
107 /// Definição do volume do sistema fragmentado.
108 ///
109 ///  @param  A0   : Número de Baryons da Partição.
110 ///  @param  Mf   : Multiplicidade da Partição.
111 ///  @return   : Volume do sistema fragmentado.
112 ///
113 //-----
114
115  double V(int A0, int Mf);
116
117 /// Definição do volume acessível para o movimento dos fragmentos.
118 ///
119 ///  @param  A0   : Número de Baryons da Partição.
120 ///  @param  Mf   : Multiplicidade da Partição.
121 ///  @return   : Volume acessível para o movimento dos frag.
122 ///
123 //-----
124
125  double V_free(int A0, int Mf);
126
127 /// Definição da razão entre o volume do sistema fragmentado pelo
128 /// volume do não fragmentado.
129 ///
130 ///  @param  A0   : Número de Baryons da Partição.
131 ///  @param  Mf   : Multiplicidade da Partição.
132 ///  @return   : Razão entre volume (V/V0).
133 ///
134 //-----
135
136  double V_frac(const int A0, const int Mf);
137

```

```

138 /// Definição da Energia de ligação ( $T=0$ ).
139 ///
140 /// @param A : Número de Massa.
141 /// @param Z : Número Atômico.
142 /// @return : Energia de ligação  $B(A,Z)$ .
143 //-----
144
145 double B(int A, int Z);
146
147 /// Definição do Termo de Energia Térmica ( cinética ) da Partição.
148 ///
149 /// @param T : Temperatura da Partição.
150 /// @return : Energia Térmica da Partição  $E_k(T)$ .
151 //-----
152
153 double E_k(double T);
154
155 /// Definição do Termo de Energia de Excitação do Fragmento.
156 ///
157 /// @param A : Número de Massa.
158 /// @param Z : Número Atômico.
159 /// @param T : Temperatura da Partição.
160 /// @return : Energia de Excitação do Fragmento  $E_{ex}(A,Z,T)$ .
161 //-----
162
163 double E_ex(int A,int Z, double T);
164
165 /// Definição do Termo de Energia de Coulomb do Fragmento.
166 ///
167 /// @param A : Número de Massa.
168 /// @param Z : Número Atômico.
169 /// @param Vfrac : Razão entre Volume do Sistema nao Fragmentado
170 /// pelo Fragmentado ( $V_0/V$ ).
171 /// @return : Energia de Coulomb do Fragmento  $E_c(A,Z, Vfrac)$ .
172 //-----
173
174 double E_C(int A,int Z, double Vfrac);
175
176 /// Definição do Termo de Energia do Fragmento .
177 ///

```



```

178 /// @param A : Número de Massa.
179 /// @param Z : Número Atômico.
180 /// @param T : Temperatura da Partição.
181 /// @param V : Volume do Sistema Fragmentado.
182 /// @return : Energia do Fragmento  $E(A,Z,T)$ .
183 //-----
184
185 double Efrag(int A,int Z, double T, double Vfrac);
186
187 /// Definição da diferença entre a Energia inicial (sistema não
188 /// fragmentado) e final (sistema fragmentado)
189 /// usado para obter a temperatura da Partição.
190 ///
191 /// @param T : Temperatura da Partição.
192 /// @param Mf : Multiplicidade do Sistema.
193 /// @param A0 : Número de Massa do Sistema.
194 /// @param Z0 : Número Atômico do Sistema.
195 /// @param E_exc : Energia de Excitação do Sistema.
196 /// @param vec : Vetor Partição do Sistema.
197 /// @return : Diferença da Energia do Sistema  $\Delta E(T,Mf,A0,$ 
198 ///  $Z0,E\_exc,vPart)$ .
199 //-----
200
201 double deltaE(double T, int Mf, int A0, int Z0, double E_exc ,
202               vPartition & vec);
203
204 /// Definição da Energia do Sistema .
205 ///
206 /// @param T : Temperatura da Partição.
207 /// @param Mf : Multiplicidade do Sistema.
208 /// @param A0 : Número de Massa do Sistema.
209 /// @param Z0 : Número Atômico do Sistema.
210 /// @param E_exc : Energia de Excitação do Sistema.
211 /// @param vec : Vetor Partição do Sistema.
212 /// @return : Energia do Sistema  $E(T,Mf,A0,Z0,E\_exc,vPart)$ .
213 //-----
214
215 double Epart(double T, int Mf, int A0, int Z0, double E_exc ,vPartition & vec)
216 ;

```

```

217 /// Definição do fator de degenerescência.
218 ///
219 /// @param A : Número de Massa.
220 /// @param Z : Número Atômico.
221 /// @return : Fator de Degenerescência  $g(A,Z)$ .
222 //-----
223
224 double g(const int A,const int Z);
225
226 /// Definição do Comprimento de Onda Termico do Fragmento.
227 ///
228 /// @param A : Número de Massa.
229 /// @param Z : Número Atômico.
230 /// @return : Comprimento de Onda Termico  $\lambda_{T}(A,Z)$ .
231 //-----
232
233 double lambdaT(const int A, const double T);
234
235 /// Definição do Termo de Energia Livre de Coulomb do Fragmento.
236 ///
237 /// @param A : Número de Massa.
238 /// @param Z : Número Atômico.
239 /// @param Vfrac : Rasão entre Volume do Sistema nao Fragmentado
240 /// pelo Fragmentado ( $V_0/V$ ).
241 /// @return : Energia Livre de Coulomb do Fragmento  $F_c(A,Z,$ 
242 ///  $V_{frac})$ .
243 //-----
244
245
246 double F_c(int A, int Z, double Vfrac);
247
248 /// Definição do Termo de Energia Livre de Excitação do Fragmento.
249 ///
250 /// @param A : Número de Massa.
251 /// @param Z : Número Atômico.
252 /// @param T : Temperatura da Partição.
253 /// @return : Energia Livre de Excitação do Fragmento  $F_{ex}(A,$ 
254 ///  $Z,T)$ .
255 //-----
256

```

```

257  double F_ex(int A,int Z, double T);
258
259  /// Definição do Termo de Energia Livre Térmica ( cinética ) da
260  /// Partição .
261  ///
262  ///  @param  A      : Número de Massa .
263  ///  @param  Z      : Número Atômico .
264  ///  @param  T      : Temperatura da Partição .
265  ///  @param  Vfree  : Volume disponível no Sistema para movimento do
266  ///                      Fragmentado .
267  ///  @param  Naz    : Multiplicidade do Fragmento .
268  ///  @return      : Energia Livre Térmica da Partição Ftrans(T) .
269  //-----
270
271  double F_trans(int A, int Z, double T, double Vfree , int Naz);
272
273  /// Definição do Termo de Energia Livre do Fragmento .
274  ///
275  ///  @param  A      : Número de Massa .
276  ///  @param  Z      : Número Atômico .
277  ///  @param  T      : Temperatura da Partição .
278  ///  @param  M      : Multiplicidade do Fragmento .
279  ///  @param  Vfrac  : Razão entre Volume do Sistema nao Fragmentado
280  ///                      pelo Fragmentado (V0/V) .
281  ///  @param  Vfree  : Volume disponível no Sistema para movimento do
282  ///                      Fragmentado .
283  ///  @return      : Energia do Fragmento F(A,Z,T,M, Vfrac , Vfree) .
284  //-----
285
286  double Fpart (int A, int Z, double T, int M, double Vfrac ,
287               double Vfree);
288
289  /// Definição da Energia Livre do Sistema .
290  ///
291  ///  @param  T      : Temperatura da Partição .
292  ///  @param  Mf     : Multiplicidade do Sistema .
293  ///  @param  A0     : Número de Massa do Sistema .
294  ///  @param  Z0     : Número Atômico do Sistema .
295  ///  @param  vec    : Vetor Partição do Sistema .
296  ///  @return      : Energia Livre do Sistema F(T,Mf,A0,Z0,vPart) .

```

```

297 //-----
298
299 double F (int A0, int Z0, double T, int Mf, vPartition & vec);
300
301 /// Definição da Função Partição em termos da Energia Livre Energia .
302 ///
303 /// @param T : Temperatura da Partição.
304 /// @param Mf : Multiplicidade do Sistema.
305 /// @param A0 : Número de Massa do Sistema.
306 /// @param Z0 : Número Atômico do Sistema.
307 /// @param vec : Vetor Partição do Sistema.
308 /// @return : Função Partição Z(A0,Z0,T,Mf,vPart).
309 //-----
310
311 double Z (int A0, int Z0, double T, int Mf, vPartition & vec);
312
313 /// Definição do Termo de Entropia de Excitação do Fragmento.
314 ///
315 /// @param A : Número de Massa.
316 /// @param Z : Número Atômico.
317 /// @param T : Temperatura da Partição.
318 /// @return : Contribuição de Excitação da Entropia do
319 /// Fragmento Sex(A,Z,T).
320 //-----
321
322 double S_ex(int A,int Z, double T);
323
324 /// Definição do Termo de Entropia de Térmica ( cinética ) da
325 /// Partição.
326 ///
327 /// @param A : Número de Massa.
328 /// @param Z : Número Atômico.
329 /// @param T : Temperatura da Partição.
330 /// @param Vfree : Volume disponível no Sistema para movimento do
331 /// Fragmentado .
332 /// @param Naz : Multiplicidade do Fragmento.
333 /// @return : Contribuição Térmica da Entropia da Partição
334 /// Strans.
335 //-----
336

```

```

337  double S_trans(int A, int Z, double T, double Vfree, int Naz);
338
339  /// Definição da Entropia do Sistema .
340  ///
341  ///  @param  T    : Temperatura da Partição.
342  ///  @param  Mf   : Multiplicidade do Sistema.
343  ///  @param  A0   : Número de Massa do Sistema.
344  ///  @param  Z0   : Número Atômico do Sistema.
345  ///  @param  vec  : Vetor Partição do Sistema.
346  ///  @return      : Entropia do Sistema  $S(T, Mf, A0, Z0, vPart)$ .
347  // -----
348
349  double S (int A0, int Z0, double T, int Mf, vPartition & vec);
350
351  /// Definição do Termo de Capacidade termica de Excitação do Fragmento.
352  ///
353  ///  @param  A    : Número de Massa.
354  ///  @param  Z    : Número Atômico.
355  ///  @param  T    : Temperatura da Partição.
356  ///  @return      : Contribuição de Excitação Calor Especifico do
357  ///                  Fragmento  $C_{vex}(A, Z, T)$ .
358  // -----
359
360  double Cv_ex(int A, int Z, double T);
361
362  /// Definição do Termo de Capacidade termica Térmico ( cinética )
363  /// da Partição.
364  ///
365  ///  @param  A    : Número de Massa.
366  ///  @param  Z    : Número Atômico.
367  ///  @param  T    : Temperatura da Partição.
368  ///  @param  Vfree : Volume disponivel no Sistema para movimento do
369  ///                  Fragmentado .
370  ///  @param  Naz  : Multiplicidade do Fragmento.
371  ///  @return      : Contribuição Térmica do Calor Especifico
372  ///                   $C_{vtrans}$ .
373  // -----
374
375  double Cv_trans();
376

```

```

377 /// Definição da Capacidade termica do Sistema .
378 ///
379 /// @param T : Temperatura da Partição .
380 /// @param Mf : Multiplicidade do Sistema .
381 /// @param A0 : Número de Massa do Sistema .
382 /// @param Z0 : Número Atômico do Sistema .
383 /// @param vec : Vetor Partição do Sistema .
384 /// @return : Calor Especifico do Sistema Cv(T,Mf,A0,Z0,
385 ///          vPart).
386 //-----
387
388 double Cv(int A0, int Z0, double T, int Mf, vPartition & vec);
389
390 /// Definição do Termo da Pressão (Térmica) ( cinética ) da Partição .
391 ///
392 /// @param T : Temperatura da Partição .
393 /// @param Vfree : Volume disponivel no Sistema para movimento do
394 ///          Fragmentado .
395 /// @return : Contribuição Térmica da Pressão Ptrans.
396 //-----
397
398 double P_trans(double Vfree , double T);
399
400 /// Definição da Pressão do Sistema .
401 ///
402 /// @param T : Temperatura da Partição .
403 /// @param Mf : Multiplicidade do Sistema .
404 /// @param A0 : Número de Massa do Sistema .
405 /// @param Z0 : Número Atômico do Sistema .
406 /// @param vec : Vetor Partição do Sistema .
407 /// @return : Pressão do Sistema P(T,Mf,A0,Z0,vPart).
408 //-----
409
410 double P (int A0, int Z0, double T, int Mf, vPartition & vec);
411
412 /// Definição da Função fatorial de um número inteiro .
413 ///
414 /// @param N : Numero.
415 /// @return : N!.
416 //-----

```

```

417
418     double fatorial(int N);
419
420     /// Calcula a Temperatura de uma dada partição em um intervalo
421     /// definido [0,Tc] usando o método de varredura.
422     ///
423     /// @param Multiplicity : Multiplicidade do Sistema.
424     /// @param A : Número de Massa do Sistema.
425     /// @param Z : Número Atômico do Sistema.
426     /// @param ExcitationEnergy : Energia de Excitação do Sistema.
427     /// @param Partition : Vetor Partição do Sistema.
428     /// @return : Temperatura da Partição (T>0) se T<0
429     /// temperatura não encontrada no intervalo.
430     // -----
431
432     double GetTemperature( int Multiplicity , int A, int Z, double
433         ExcitationEnergy ,vPartition & Partition );
434
435     /// Muda o valor do parametro Omega_0.
436     ///
437     /// @param Omega_0_ : novo valor de Omega_0.
438     ///
439     // -----
440
441     inline void SetOmega_0( const int Omega_0_){ Omega_0 = Omega_0_;}
442
443     /// Muda o valor do parametro Betha_0.
444     ///
445     /// @param Betha_0_ : novo valor de Betha_0.
446     ///
447     // -----
448
449     inline void SetBetha_0( const int Betha_0_ ){Betha_0 = Betha_0_;}
450
451     /// Muda o valor do parametro C_c.
452     ///
453     /// @param C_c_ : novo valor de C_c.
454     ///
455     // -----
456

```

```

457 inline void SetC_c( const int C_c_ ){ C_c = C_c_; }
458
459 /// Muda o valor do parametro K_asym.
460 ///
461 /// @param K_asym_ : novo valor de K_asym.
462 ///
463 //-----
464
465 inline void SetK_asym( const int K_asym_ ){ K_asym = K_asym_; }
466
467 /// Muda o valor do parametro Q_asym.
468 ///
469 /// @param Q_asym_ : novo valor de Q_asym.
470 ///
471 //-----
472
473 inline void SetQ_asym( const int Q_asym_ ){ Q_asym = Q_asym_; }
474
475 /// Muda o valor do parametro eps_0.
476 ///
477 /// @param eps_0_ : novo valor de eps_0.
478 ///
479 //-----
480
481 inline void Seteps_0( const int eps_0_ ){ eps_0 = eps_0_; }
482
483 /// Muda o valor do parametro D_.
484 ///
485 /// @param D_ : novo valor de D_.
486 ///
487 //-----
488
489 inline void SetD_( const int D_ ){ D_ = D_; }
490
491 /// Muda o valor do parametro T_c.
492 ///
493 /// @param T_c_ : novo valor de T_c.
494 ///
495 //-----
496

```



```

497 inline void SetT_c( const int T_c_ ){ T_c = T_c_; }
498
499 private:
500
501 double      Omega_0 , // [MeV]
502      Betha_0 , // [MeV]
503      C_c      , // [C/fm]
504      K_asym    , // [MeV]
505      Q_asym    , // [MeV]
506      eps_0     , // [MeV]
507      D_        , // [fm]
508      T_c       ; // [MeV]
509
510 };
511
512 #endif

```

F.5 TFragment.h

```

1  //-----//
2  //
3  //      This document is part of:
4  //      Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5  //
6  //      Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7  //      Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8  //
9  //-----//
10 #ifndef _TFRAGMENT_HH
11 #define _TFRAGMENT_HH
12
13 #include <vector>
14
15 ///
16 /// A Classe TFragment define as grandezas e mÃ©todos associados ao
17 /// Fragmento.
18 ///
19
20 class TFragment

```

```

21 {
22 public:
23
24 ///
25 ///   Construtor
26 ///
27 ///   @param A_   : Nmero de Baryons.
28 ///   @param Z_   : Carga.
29 ///   @param E_Ex : Energia de Excitao.
30 ///
31
32 TFragment(const int A_, const int Z_, const double E_Ex):
33     A(A_),
34     Z(Z_),
35     ExcitationEnergy(E_Ex),
36     Probability(0)
37 {}
38
39 ///   Construtor Padro
40
41 TFragment():
42     A(0),
43     Z(0),
44     ExcitationEnergy(0),
45     Probability(0)
46 {}
47
48 ///   Construtor de Cpia
49
50 TFragment(const TFragment & frag)
51 {
52
53     A      = frag.A;
54     Z      = frag.Z;
55     ExcitationEnergy = frag.ExcitationEnergy;
56     Probability      = frag.Probability;
57
58 }
59
60 public:

```

```

61
62 ///   Destrutor Padro
63
64   ~TFragment()
65   {}
66
67 public:
68
69 ///
70 ///   Retorna a Energia de Excitao do Fragmento.
71 ///
72   inline double GetExcitationEnergy();
73
74 ///
75 ///   Retorna o nmero de Baryons do Fragmento.
76 ///
77
78   inline int GetA(){ return A; }
79
80 ///
81 ///   Retorna a carga do Fragmento.
82 ///
83
84   inline int GetZ(){ return Z; }
85
86 ///
87 ///   Retorna a multiplicidade do Fragmento.
88 ///
89
90   inline int GetM(){ return M; }
91
92 ///
93 ///   Retorna a probabilidade associada ao Fragmento.
94 ///
95
96   inline double GetProb(){ return Probability; }
97
98 ///
99 ///   Altera o nmero de Baryons do Fragmento.
100 ///

```

```

101 ///   @param  A_      : número de baryons
102 ///
103
104   inline void SetA( const int A_ ){ A = A_; }
105
106 ///
107 ///   Altera a Carga do Fragmento.
108 ///
109 ///   @param  Z_      : Carga
110 ///
111
112   inline void SetZ( const int Z_ ){ Z = Z_; }
113
114 ///
115 ///   Altera a Multiplicidade do Fragmento.
116 ///
117 ///   @param  M_      : Multiplicidade
118 ///
119
120   inline void SetM( const int M_ ){ M = M_; }
121
122 ///
123 ///   Altera a Probabilidade associada ao Fragmento.
124 ///
125 ///   @param  Probability_ : Probabilidade
126 ///
127
128   inline void SetProb( const double Probability_ )
129   {
130       Probability = Probability_;
131   }
132
133 ///
134 ///   Altera a Energia de Excitação associada ao Fragmento.
135 ///
136 ///   @param  E_      : Energia de Excitação
137 ///
138
139   inline void SetExcitationEnergy( const double E_ )
140   {

```

```

141     ExcitationEnergy = E_;
142 }
143
144 ///
145 ///  Definição do operador Atribuição.
146 ///
147
148     const TFragment & operator=(const TFragment &var);
149
150 ///
151 ///  Definição do operador Igualdade.
152 ///
153
154     bool operator==(const TFragment &var) const;
155
156 ///
157 ///  Definição do operador Diferença.
158 ///
159
160     bool operator!=(const TFragment &var) const;
161
162 private:
163
164     /// Energia de Excitação.
165     double ExcitationEnergy,
166     /// Probabilidade Associada.
167     Probability;
168     /// Número de Baryons do Fragmento.
169     int A,
170     /// Carga do Fragmento.
171     Z,
172     /// Multiplicidade do Fragmento.
173     M;
174
175     // momentum
176     // position
177 };
178
179
180 #endif

```

F.6 TPartitionHelper.h

```

1  //-----//
2  //
3  //      This document is part of:
4  //      Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5  //
6  //      Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7  //      Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8  //
9  //-----//
10 #ifndef _TPARTITIONHELPER_HH
11 #define _TPARTITIONHELPER_HH
12
13 #include <iostream>
14 #include <vector>
15
16 using namespace std;
17
18 /// Classe contruida para gerar interativamente os vetores inteiros
19 /// das partições.
20 ///
21 ///-----
22
23 class TPartitionHelper{
24
25 public :
26
27 /// Constroi o vetor partição inteiro.
28 ///
29 /// @param A : Numero de elementos da partição.
30 /// @param M : Multiplicidade da partição.
31 /// @param v : Vetor partição.
32 ///-----
33
34 static void Makefirstpartition(int A, int M, vector<int> & v);
35
36 /// verifica se a próxima partição existe.
37 ///
38 /// @param v : Vetor partição.

```

```

39 /// @return : true se existe , false se não existe a próxima partição .
40 // -----
41
42 static bool NextPartitionIs(vector<int> & vec);
43
44 /// Constroi apartir do vetor partição v a proxima partição altera v).
45 ///
46 /// @param v : Vetor partição .
47 /// @return : true se existe , false se não existe a próxima partição .
48 // -----
49
50 static bool nextpartition(vector<int> & vec) ;
51
52 };
53 #endif

```

F.7 TPartition.h

```

1 //-----//
2 //
3 //          This document is part of:
4 //          Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5 //
6 //    Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7 //          Airon Deppman (adeppman@gmail.com)
8 //
9 //-----//
10 #ifndef __TPARTITION_HH
11 #define __TPARTITION_HH
12
13 #include "PamClass.h"
14 #include "TFragment.h"
15 #include "TRandomi.h"
16 #include "TCanonical.h"
17 #include "TPartitionHelper.h"
18
19 #include <iostream>
20 #include <vector>
21 #include <algorithm>

```

```

22 #include <cmath>
23 #include <limits>
24
25 using namespace std;
26
27 ///
28 /// Definição do vetor de ponteiros de TFragment usado para construir
29 /// a partição, ou seja, cada ponteiro TFragment* armazena o endereço
30 /// de um fragmento na memória.
31 ///
32 //-----
33
34 typedef vector<TFragment*> vPartition;
35
36 /// A Classe TPartition é responsável por gerar cada partição do
37 /// processo de multifragmentação, armazenar os fragmentos, ou seja,
38 /// faz o processo de fragmentação em si.
39 ///
40 //-----
41
42 class TPartition
43 {
44
45 public:
46
47 /// Construtor Padrão da Classe.
48 ///
49 /// @param A_ : Número de Baryons do Núcleo
50 /// @param Z_ : Carga do Núcleo
51 /// @param E_Ex : Energia de Excitação do Núcleo.
52 ///
53 //-----
54
55
56 TPartition(int A_, int Z_, double E_Ex_);
57
58 /// Construtor Padrão da Classe Sobrecarregado. Seta a Energia de
59 /// Excitação do Núcleo como 0.
60 ///
61 /// @param A_ : Número de Baryons do Núcleo

```



```

62 ///   @param  Z_      : Carga do Ncleo
63 ///
64 //-----
65
66
67   TPartition(int A_, int Z_);
68
69 /// Construtor de Cpia
70 ///
71 ///   @param  part     : Objeto TPartition
72 ///
73 //-----
74
75   TPartition(const TPartition & part){}
76
77 /// Destrutor Pado da Classe.
78 ///
79 //-----
80
81   ~TPartition();
82
83 /// Limpa os elementos da partio.
84 ///
85 //-----
86
87   void Reset();
88
89 /// Gera a partio, sorteando os elementos e calcula as grandezas
90 /// fsicas do sistema.
91 ///
92 ///   @return   : "true" de a Partio  valida ou "false" se no 
93 ///
94 //-----
95
96   bool Generate();
97
98 /// Gera a partio, sorteando os elementos e calcula as grandezas
99 /// fsicas do sistema.
100 ///
101 ///   @param    : Vetor inteiro (partio P).

```

```

102 ///   @return : "true" de a PartiÃ§Ã£o Ã© valida ou "false" se nÃ£o Ã©
103 ///
104 //-----
105
106   bool Generate(vector<int>& vec);
107
108
109 /// Executa o processo de construÃ§Ã£o da partiÃ§Ã£o.
110 ///
111 //-----
112
113   void MakeProcess();
114
115 /// Continua o processo - EvaporaÃ§Ã£o/fissÃ£o dos fragmentos.
116 ///
117 //-----
118
119   void TPartition::ContinueProcess();
120
121
122 /// Monta a PartiÃ§Ã£o de acordo com o vetor inteiro (partiÃ§Ã£o P).
123 ///
124 ///   @param : Vetor inteiro (partiÃ§Ã£o P).
125 ///   @return : "true" de a PartiÃ§Ã£o Ã© valida ou "false" se nÃ£o Ã©
126 ///
127 //-----
128
129   void mountPartition(vector<int>& vec );
130
131
132 /// Sorteia a partiÃ§Ã£o igualmente distribuida.
133 //-----
134
135   void choosePartition();
136
137 /// Sorteia a multiplicidade de fragmentaÃ§Ã£o do sistema e armazena
138 /// sua probabilidade em "Weight".
139 ///
140 ///   @return : Multiplicidade do sistema
141 ///

```

```

142 // -----
143
144 int chooseMultiplicity();
145
146 /// Remove todos os elementos iguais ao Primeiro elemento do vetor.
147 ///
148 /// @param vPartition : Vetor contendo ponteiros para os
149 /// fragmentos
150 /// @return : Número de elemento iguais ao Primeiro
151 /// elemento
152 ///
153 // -----
154
155 int removefirst(vPartition &vec);
156
157 /// Colapsa o vetor Partition retirando os elementos repetidos e
158 /// adicionando o seu número de Multiplicidade daquele fragmento.
159 ///
160 /// @param vPartition : Vetor contendo ponteiros para os
161 /// fragmentos
162 ///
163 // -----
164
165 void collapse(vPartition & vec);
166
167 /// Expande o vetor Partition colocando os elementos repetidos e
168 /// redefinindo a Multiplicidade dos fragmentos.
169 ///
170 /// @param vPartition : Vetor contendo ponteiros para os
171 /// fragmentos
172 // -----
173
174 void expand(vPartition & vec);
175
176 /// Retorna o menor de dois inteiros.
177 ///
178 /// @param A_ : Primeiro Inteiro
179 /// @param B_ : Segundo Inteiro
180 /// @return : Retorna o menor dos dois elementos
181 ///

```

```

182 //-----
183
184  int MIN(int A_, int B_);
185
186 /// Retorna o maior de dois inteiros.
187 ///
188 /// @param A_ : Primeiro Inteiro
189 /// @param B_ : Segundo Inteiro
190 /// @return    : Retorna o maior dos dois elementos
191 ///
192 //-----
193
194  int MAX(int A_, int B_);
195
196
197 /// Função que calcula o valor máximo da carga Z.
198 ///
199 /// @param A_ : Número de Bárions do fragmento
200 /// @return    : O valor máximo para a carga
201 ///
202 //-----
203
204  int MaxZ(int A_);
205
206 /// Função que calcula o valor mínimo da carga Z.
207 ///
208 /// @param A_ : Número de Bárions do fragmento
209 /// @return    : O valor mínimo para a carga
210 ///
211 //-----
212
213  int MinZ(int A_);
214
215 /// Rotina que procura a partícula mais provável (busca uma a uma).
216 ///
217 /// @param Mult : Multiplicidade da Partícula
218 /// @return    : Peso máximo
219 ///
220 //-----
221

```

```

222  double findMustProbable( int Mult );
223
224  ///Retorna o vetor PartiÃ§ÃŁo.
225  //////
226  ///@return      : PartiÃ§ÃŁo
227  //////
228  /////-----
229
230  vPartition& GetPartition();
231
232  ///Retorna a Multiplicidade da PartiÃ§ÃŁo.
233  //////
234  ///@return      : Multiplicidade
235  //////
236  /////-----
237
238  double GetMultiplicity();
239
240  ///Retorna o peso da PartiÃ§ÃŁo.
241  //////
242  ///@return      : Peso da PartiÃ§ÃŁo
243  //////
244  /////-----
245
246  double long GetWeight();
247
248  ///Retorna a Temperatura da PartiÃ§ÃŁo.
249  //////
250  ///@return      : Temperatura
251  //////
252  /////-----
253
254  double GetTemperature();
255
256  ///Retorna a Entropia da PartiÃ§ÃŁo.
257  //////
258  ///@return      : Entropia
259  //////
260  /////-----
261

```

```

262  double GetEntropy();
263
264  /// Retorna o Calor especifico a volume constante da Partícula.
265  ///
266  /// @return      : Calor especifico
267  ///
268  //-----
269
270  double GetCv();
271
272  private:
273
274  /// Energia de Excitação Inicial do Sistema.
275  double ExcitationEnergy;
276  /// Baryon Number.
277  int A,
278  /// Charge Number.
279  Z;
280  /// Temperatura do Sistema.
281  double Temperature;
282  /// Energia Livre de Helmholtz Partícula.
283  double HelmholtzEnergy;
284  /// Entropy .
285  double Entropy;
286  /// Cv.
287  double Cv;
288  /// Peso (Probabilidade Não Normalizada da Partícula).
289  long double Weight;
290  /// Multiplicidade da Partícula.
291  int Multiplicity;
292  double VarRegularization;
293
294  /// Gerador da Função Partícula.
295  PamClass probMultiplicity;
296  /// Vetor Partícula – Armazena os Fragmentos( tipo TFragment ).
297  vPartition Partition;
298  /// Classe que contém o gerador de números aleatórios.
299  TRandomi germ;
300  /// Rotinas de modelo
301  TCanonical model;

```

```

302
303
304 /// Estrutura usada para deletar fragmentos do vetor vPartition.
305 /// -----
306
307     struct DeleteTFragment
308     {
309         void operator()(const TFragment *ptr) const
310         {
311             delete ptr;
312         }
313     };
314 };
315
316 #endif

```

F.8 TRandomi.h

```

1 ///-----
2 ///
3 ///          This document is part of:
4 ///          Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5 ///
6 ///          Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7 ///          Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8 ///
9 ///-----
10 #ifndef _TRANDOMLHH
11 #define _TRANDOMLHH
12
13 #if defined(linux) || defined(__linux) || defined(__linux__)
14
15 #include <tr1/random>
16
17 #elif defined(_WIN32) || defined(__WIN32__) || defined(WIN32)
18
19 #include <random>
20
21 #endif

```

```

22
23 #include <iostream>
24 #include <ctime>
25
26 ///
27 /// A Classe TRandom foi construida com o objetivo de armazenar
28 /// funcoes que geram nmeros aleatrios para o uso no mÃ©todo de
29 /// Monte Carlo para a fragmentaÃ§Ã£o e por padronizaÃ§Ã£o – facilitando
30 /// a alteracoes dos geradores caso nescessarios.
31 ///
32 //-----
33
34 class TRandomi{
35
36 public:
37
38 ///
39 /// Construtor
40 ///
41 //-----
42
43   TRandomi() : eng(1953341547){
44   // seed = unsigned long(time(NULL))
45   }
46
47 ///
48 /// Destrutor
49 ///
50 //-----
51
52   ~TRandomi() {}
53
54 ///
55 /// Retorna um numero inteiro aleatorio na faixa [xi,xf]
56 ///
57 /// @param xi : inicio do intervalo.
58 /// @param xf : fim do intervalo.
59 /// @return numero inteiro aleatorio.
60 ///
61 //-----

```



```

62
63  int intRand(const int xi, const int xf) ;
64
65  ///
66  /// Retorna um numero aleatorio real no intervalo [0,1]
67  ///
68  /// @return numero aleatorio entre 0 e 1.
69  ///
70  //-----
71
72  double doubleRand() ;
73
74  private:
75
76  std::tr1::mt19937 eng;
77  };
78
79 #endif

```

F.9 TSMH.h

```

1  //-----//
2  //
3  //      This document is part of:
4  //      Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5  //
6  //      Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7  //      Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8  //
9  //-----//
10 #ifndef _TSMH_H
11 #define _TSMH_H
12
13 #include <iostream>
14 #include <string>
15 #include <fstream>
16 #include <sstream>
17 #include <vector>
18

```

```

19 #include "TPartition.h"
20 #include "TStorage.h"
21 #include "TRandomi.h"
22
23 #define RelaxationParameter 1.0e-5
24
25 using namespace std;
26
27 /// Classe que executa o calculo de Monte Carlo para o processo de
28 /// multifragmrntação.
29 ///
30 ///-----
31
32 class TSMM{
33
34 public:
35
36 /// Construtor
37 ///
38 /// @param A_ : Numero de Baryons do Nucleo.
39 /// @param Z_ : Numero de Baryons do Nucleo.
40 /// @param E_ : Energia de Excitação do Nucleo.
41 /// @param Method_ : Methodo usado para o calculo (analogic|findmax
42 /// | stepsavemax).
43 ///
44 ///-----
45
46 TSMM(int A_,int Z_,double E_, string Method_);
47
48 /// Construtor
49 ///
50 /// @param A_ : Numero de Baryons do Nucleo.
51 /// @param Z_ : Numero de Baryons do Nucleo.
52 /// @param E_ : Energia de Excitação do Nucleo.
53 ///
54 ///-----
55
56 TSMM(int A_,int Z_,double E_);
57
58 /// Construtor Padrão

```

```

59 ///
60 //-----
61
62   TSMH();
63
64 /// Destrutor
65 ///
66 //-----
67
68   ~TSMH();
69
70 /// Seleciona o metodo de calculo.
71 ///
72 /// @param meth : Methodo usado para o calculo (analogic|findmax|
73 ///                stepsavemax).
74 ///
75 //-----
76
77   void setMethod(string meth);
78
79 /// Executa o calculo.
80 ///
81 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
82 /// @param relaxation : Parametro de relaxação do calculo (usado em
83 ///                findmax|stepsavemax).
84 /// @param arq       : nome do arquivo de entrada de dados.
85 ///
86 //-----
87
88   void execute(int hist, string arq){
89
90       execute(hist, RelaxationParameter, arq);
91
92   }
93
94   void execute(int hist, double relaxation, string arq){
95
96       ifstream fin(arq.c_str(), ios::in);
97
98       if (fin.is_open()){

```

```

99
100     int    A_,
101           Z_;
102     double E_;
103
104     while (fin >> Z_ >> A_ >> E_){
105         execute(hist ,relaxation);
106     }
107 }
108 else{
109     cerr << "Error : Arquivo: " << arq
110         << " não encontrado ou inexixtente. \n";
111     exit(1);
112 }
113 bank.MakeStatistics();
114 fin.close();
115 }
116
117 /// Executa o calculo.
118 ///
119 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
120 /// @param relaxation : Parametro de relaxação do calculo (usado em
121 ///                      findmax|stepsavemax).
122 ///
123 //-----
124
125 void execute(int hist , double relaxation);
126
127 /// Executa o calculo.
128 ///
129 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
130 ///
131 //-----
132
133 void execute(int hist );
134
135 /// Metodo findmaxMethod.
136 ///
137 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
138 ///

```

```

139 //-----
140
141 void findmaxMethod(int hist);
142
143 /// Metodo findmaxMethod.
144 ///
145 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
146 /// @param relaxation : Parametro de relaxação do calculo (usado em
147 ///                      findmax|stepsavemax).
148 ///
149 //-----
150
151 void findmaxMethod(int hist, double relaxation);
152
153 /// Metodo analogicMethod.
154 ///
155 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
156 ///
157 //-----
158
159 void analogicMethod(int hist);
160
161 /// Metodo stepsavemaxMethod.
162 ///
163 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
164 ///
165 //-----
166
167 void stepsavemaxMethod (int hist);
168
169 /// Metodo stepsavemaxMethod.
170 ///
171 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
172 /// @param relaxation : Parametro de relaxação do calculo (usado
173 ///                      em findmax|stepsavemax).
174 ///
175 //-----
176
177 void stepsavemaxMethod (int hist, double relaxation);
178

```

```

179 /// Executa o calculo Monte Carlo em cascata em um intervalo de
180 /// energia.
181 ///
182 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
183 /// @param Ei        : Limite inferior de energia.
184 /// @param Ef        : Limite superior de energia.
185 /// @param step      : numero de intervalos para calculo.
186 ///
187 //-----
188
189 void scanningProcess(int hist, double Ei, double Ef, int step);
190
191 /// Executa o calculo Monte Carlo em cascata em um intervalo de
192 /// energia.
193 ///
194 /// @param hist      : Numero de historias executadas.
195 /// @param relaxation : Parametro de relaxação do calculo (usado em
196 ///                               findmax|stepsavemax).
197 /// @param Ei        : Limite inferior de energia.
198 /// @param Ef        : Limite superior de energia.
199 /// @param step      : numero de intervalos para calculo.
200 ///
201 //-----
202
203 void scanningProcess(int hist, double Ei, double Ef, int step,
204                     double relax);
205
206 /// Altera os valores de A, Z e E.
207 ///
208 /// @param A_        : Numero de Baryons do Nucleo.
209 /// @param Z_        : Numero de Baryons do Nucleo.
210 /// @param E_        : Energia de Excitação do Nucleo.
211 ///
212 //-----
213
214 void setAZE(int A_, int Z_, double E_);
215
216 /// Grava saida em arquivo.
217 ///
218 ///

```

```

219 //-----
220
221 void writefile();
222
223 /// Converte inteiro em string.
224 ///
225 /// @param I : numero inteiro.
226 ///
227 //-----
228
229 string convert(int I);
230
231 /// Converte float em string.
232 ///
233 /// @param I : numero float.
234 ///
235 //-----
236
237 string convert(double I);
238
239 private:
240
241 /// metodo de calculo.
242 string Method;
243 /// Guardador de dados.
244 TStorage bank;
245 /// numero de Barions.
246 int A,
247 /// Carga.
248 Z;
249 /// Energia de excitação.
250 double E;
251
252
253 };
254 #endif

```

F.10 TStorage.h

```

1  //-----//
2  //
3  //          This document is part of:
4  //          Statistical Multifragmentation Module of CRISP code
5  //
6  //          Authors : Pedro C. R. Rossi (pedro.russorossi@gmail.com)
7  //          Airton Deppman (adeppman@gmail.com)
8  //
9  //-----//
10 #ifndef _TSTORAGE_HH
11 #define _TSTORAGE_HH
12
13 #include <iostream>
14 #include <map>
15 #include <cmath>
16
17 #include <string>
18 #include <fstream>
19
20 #include "TPartition.h"
21
22 typedef vector<TFragment*> vPartition;
23
24 using namespace std;
25
26 /// TStorage é uma classe, não muito especializada, criada para
27 /// guardar valores
28 /// para o uso da simulação Monte Carlo.
29 ///
30 //-----
31
32 class TStorage {
33
34 public:
35
36 /// Construtor Padrão.
37 ///
38 ///
39 //-----

```



```

40
41   TStorage() : Mount(0) ,
42               Temperature(0) ,
43               Cv(0) ,
44               Entropy(0) ,
45               Multiplicity(0){}
46
47   /// Destrutor Padrão.
48   ///
49   ///
50   // -----
51
52   ~TStorage();
53
54   /// Limpa Containers e zera variaveis.
55   ///
56   ///
57   // -----
58
59   void reset();
60
61   /// Guarda contagens dos fragmentos e seu respectivo peso e seu valor
62   /// quadrático.
63   ///
64   /// @param A_   : Numero de Barions.
65   /// @param Z_   : Carga.
66   /// @param M    : Multiplicidade.
67   /// @param Weight : Peso Associado.
68   ///
69   // -----
70
71   void AddYield(int A_, int Z_, double M, double Weight);
72
73   /// Guarda todos os elementos de uma partição.
74   ///
75   /// @param Part   : Vetor Partição.
76   /// @param Weight : Peso Associado.
77   ///
78   // -----
79

```

```

80  void AddPartition(vPartition & Part, double Weight);
81
82  /// Incrementa peso total de Weight.
83  ///
84  /// @param Weight : Peso Associado.
85  ///
86  //-----
87
88  void AddWeight(double Weight);
89
90  /// Incrementa a Temperatura e seu valor quadratico.
91  ///
92  /// @param Temperature_ : Temperatura .
93  /// @param Weight      : Peso Associado.
94  ///
95  //-----
96
97  void AddTemperature(double Temperature_, double Weight_);
98
99  /// Incrementa a Entropia e seu valor quadratico.
100 ///
101 /// @param Entropy      : Entropia.
102 /// @param Weight      : Peso Associado.
103 ///
104 //-----
105
106 void AddEntropy(double Entropy_, double Weight_);
107
108 /// Incrementa a Capacidade termica e seu valor quadratico.
109 ///
110 /// @param Cv_          : Capacidade termica.
111 /// @param Weight      : Peso Associado.
112 ///
113 //-----
114
115 void AddCv(double Cv_, double Weight_);
116
117 /// Incrementa a Multiplicidade e seu valor quadratico.
118 ///
119 /// @param Multiplicity : Multiplicidade.

```

```

120 /// @param Weight : Peso Associado.
121 ///
122 //-----
123
124 void AddMultiplicity(double Multiplicity_ , double Weight_);
125
126 /// Controi as estatisticas (faz a media).
127 ///
128 ///
129 //-----
130
131 void MakeStatistics();
132
133 /// Sobrecarga de operador << para cout.
134 ///
135 ///
136 //-----
137
138 friend ostream& operator<<(ostream& out , TStorage& stor){
139
140     out.setf(ios::scientific , ios::floatfield);
141
142     out << "\n      Physics Properties [Breakup System] \n\n";
143
144     out <<"    <Temperature> : " << stor.Temperature <<" "
145         << stor.GetsigTemperature()<< "\n";
146     out <<"    <Entropy>      : " << stor.Entropy    <<" "
147         << stor.GetsigEntropy()<< "\n";
148     out <<"    <Multiplicity> : " << stor.Multiplicity<<" "
149         << stor.GetsigMultiplicity()<< "\n";
150     out <<"    <Cv>           : " << stor.Cv          <<" "
151         << stor.GetsigCv()<< "\n";
152
153     out << "\n\n";
154
155     out << "      Prodction [Nuclide(Nucleon)]      \n\n";
156     out << "      ZAID      Yield      RERR      \n\n";
157
158     out.adjustfield;
159

```

```

160     map<int , double>::iterator imap;
161
162     for (imap = stor.Yield.begin(); imap != stor.Yield.end()
163           ; imap++){
164         out << "      "<< imap->first
165             << "      "<< imap->second
166             << "      "<< sqrt(- imap->second
167                 * imap->second + stor.Yield2[imap->first])
168             << "\n";
169     }
170
171     return out;
172 }
173
174 /// Sobrecarga de operador << para saida de disco.
175 ///
176 ///
177 // -----
178
179 friend ofstream& operator<<(ofstream& out , TStorage& stor){
180
181     out.setf(ios::scientific , ios::floatfield);
182
183     out << "\n      Physics Properties [Breakup System] \n\n";
184
185     out <<"    <Temperature>  : " << stor.Temperature <<" "
186         << stor.GetsigTemperature()<< "\n";
187     out <<"    <Entropy>      : " << stor.Entropy <<" "
188         << stor.GetsigEntropy()<< "\n";
189     out <<"    <Multiplicity> : " << stor.Multiplicity<<" "
190         << stor.GetsigMultiplicity()<< "\n";
191     out <<"    <Cv>          : " << stor.Cv <<" "
192         << stor.GetsigCv()<< "\n";
193
194     out << "\n\n";
195
196     out << "      Prodction [Nuclide(Nucleon)]      \n\n";
197     out << "      ZAID      Yield      RERR      \n\n";
198
199     out.adjustfield;

```

```

200
201     map<int , double>::iterator imap;
202
203     for (imap = stor.Yield.begin(); imap != stor.Yield.end();
204           imap++ ){
205         out << "      "<< imap->first
206         << "      "<< imap->second
207         << "      "<< sqrt(- imap->second *
208           imap->second + stor.Yield2[imap->first])
209         << "\n";
210     }
211
212     return out;
213 }
214
215 /// Retorna a Temperatura.
216 ///
217 /// @return : Temperatura
218 ///
219 // -----
220
221 double GetTemperature();
222
223 /// Retorna a variancia da Temperatura.
224 ///
225 /// @return : Variancia da Temperatura
226 ///
227 // -----
228
229 double GetsigTemperature();
230
231 /// Retorna a Entropia.
232 ///
233 /// @return : Entropia
234 ///
235 // -----
236
237 double GetEntropy();
238
239 /// Retorna a variancia da Entropia.

```

```

240 ///  

241 ///  

242 ///  

243 //-----  

244  

245     double GetsigEntropy();  

246  

247 ///  

248 ///  

249 ///  

250 ///  

251 //-----  

252  

253     double GetMultiplicity();  

254  

255 ///  

256 ///  

257 ///  

258 ///  

259 //-----  

260  

261     double GetsigMultiplicity();  

262  

263 ///  

264 ///  

265 ///  

266 ///  

267 //-----  

268  

269     double GetCv();  

270  

271 ///  

272 ///  

273 ///  

274 ///  

275 //-----  

276  

277     double GetsigCv();  

278  

279 private:

```

```

280
281  /// Mapa para armazenar Yield (ZZAAA)
282  map<int, double> Yield;
283  /// Mapa para armazenar valor quadratico do Yield (ZZAAA)
284  map<int, double> Yield2;
285  /// Mapa para armazenar valor da energ. de excit. do Yield (ZZAAA)
286  map<int, double> YieldE;
287
288  /// cumulativa do Peso (sum(Qi)).
289  double Mount,
290  /// Temperatura <T>.
291      Temperature,
292  /// Entropia <S>.
293      Entropy,
294  /// Multiplicidade <M>.
295      Multiplicity,
296  /// Numero de Barions do nucleo <A>.
297      A,
298  /// Carga do nucleo <Z>.
299      Z,
300  /// Capacidade Termica <Cv>.
301      Cv,
302  /// Pressão <P>.
303      P,
304  /// <T^2>
305      sigTemperature,
306  /// <S^2>
307      sigEntropy,
308  /// <M^2>
309      sigMultiplicity,
310  /// <A^2>
311      sigA,
312  /// <Z^2>
313      sigZ,
314  /// <Cv^2>
315      sigCv,
316  /// <P^2>
317      sigP;
318 };
319 #endif

```

F.11 Gráficos de relacionamento das classes

Figura F.1: *relacionamento e chamadas de `definedvalues.h`.*

Figura F.2: *relacionamento e chamadas de MCSMM.cpp*.

Figura F.3: *relacionamento e chamadas de TCanonical.cpp .*

Figura F.4: relacionamento e chamadas de *TFragment.h* .

Figura F.5: relacionamento e chamadas de *TRandom.h* .

Figura F.6: relacionamento e chamadas de TSMC.cpp .

Figura F.7: *relacionamento e chamadas de TSMM.cpp*.

Figura F.8: relacionamento e chamadas de TStorage.cpp .

Referências Bibliográficas

- [1] J.R. Maiorino, A. Santos, and S.A. Pereira. The utilization of accelerators in subcritical systems for energy generation and nuclear waste transmutation: the world status and a proposal of a national r&d program. *Brazilian journal of physics*, 33:267–272, 2003. 1, 3
- [2] A. Gandini and M. Salvatores. The physics of subcritical multiplying systems. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 39(6):673–686, 2002. 1
- [3] IAEA. Technical Meeting to Review of National Programmes on Fast Reactors and Accelerator Driven Systems (ADS), report nr. TWGFR/114, IAEA-TM-25614 . 2003. 1
- [4] IAEA. Review of National Accelerator Driven System Programmers for Partitioning and Transmutation, IAEA TECDOC 1365. 2003. 1, 3
- [5] S. Taczanowski. Transmutations of nuclear waste in accelerator-driven subcritical systems. *Applied Energy*, 75(1-2):97–117, 2003. 1
- [6] Wacław Gudowski. Accelerator-driven transmutation projects. the importance of nuclear physics research for waste transmutation. *Nuclear Physics A*, 654(1-2):C436 – C457, 1999. Proceedings of the International Nuclear Physics Conference. 1, 3
- [7] NEA. Comparative study on ADS and FR in Advanced Nuclear Fuel Cycles. *NEA/OECD Report*, (1), 2003. 2
- [8] Boletim SBF. Boletim SBF [009/2005], 2005, Sociedade Brasileira de Física in: <http://www.sbf1.sbfisica.org.br/boletim/>. 2005. 3
- [9] J. R MAIORINO. Accelerator driven system(ads): an innovative reactor to be used as dedicated waste burner and a multipurpose neutron source-the status of the art. *Proceedings of the INAC 2005 -International Nuclear Atlantic Conference*, 1:1–10, 2005. 3
- [10] C. Rubbia, J.A. Rubio, S. Buono, F. Carminati, N. Fiétier, J. Galvez, C. Geles, Y. Kadi, R. Klapisch, P. Mandrillon, et al. *Conceptual design of a fast neutron operated high power energy amplifier*. European Organization for Nuclear Research, 1995. 3
- [11] C. Rubbia and J.A. Rubio. A tentative programme towards a full scale energy amplifier. 1996. 3
- [12] C. Rubbia et al. Report No. CERN/AT/95-44(ET), 1995. Technical report, CERN, 1995. 3
- [13] C. Rubbia et al. A Realistic Plutonium Elimination Scheme with Fast Energy Amplifiers and Thorium Plutonium Fuel CERN/AT95-53 (ET); C. Rubbia et al., Fast Neutron Incineration in the Energy Amplifier as Alternative to Geological Storage: the Case of Spain CERN. Technical report, LHC/97-01 (EET). 3
- [14] C. Rubbia, S. Buono, Y. Kadi, and J.A. Rubio. Fast neutron incineration in the energy amplifier as alternative to geologic storage: The case of Spain. 1997. 3

- [15] K.M. Case, P.F. Zweifel, and GC Pomraning. Linear transport theory. *Physics Today*, 21:72, 1968. 3
- [16] K.M. Case, F. Hoffmann, G. Placzek, B. Carlson, and M. Goldstein. *Introduction to the theory of neutron diffusion*. Los Alamos Scientific Laboratory, 1953. 3
- [17] DB Pelowitz. Mcnpx user's manual, version 2.5. 0. *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM*, 2005. 4, 5, 7, 30, 121, 125, 131, 132, 136
- [18] WA Rhodes and DB Simpson. The TORT three-dimensional discrete ordinates neutron/photon transport code (TORT Version 3). *ORNL/TM-13221, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN*, 1997. 4
- [19] WA Rhoades and RL Childs. Updated version of the DOT 4 one-and two-dimensional neutron/photon transport code. Technical report, ORNL-5851, Oak Ridge National Lab., TN (USA), 1982. 4
- [20] JR Maiorino et al. A Review of Models and Codes for Neutron Source (Spallation) Calculation for ADS Application. In *International Atlantic Conference-INAC 2005-SP*, 2005. 4
- [21] H.W. Bertini et al. Low-energy intranuclear cascade calculation. *Physical Review*, 131(4):1801–1821, 1963. 4, 13
- [22] J. Cugnon. Proton-nucleus interaction at high energy. *Nuclear Physics A*, 462(4):751 – 780, 1987. 4, 5, 14
- [23] Y. Yariv and Z. Fraenkel. Intranuclear cascade calculation of high-energy heavy-ion interactions. *Phys. Rev. C*, 20(6):2227–2243, Dec 1979. 5, 7, 14
- [24] V. Weisskopf. Statistics and nuclear reactions. *Phys. Rev.*, 52(4):295–303, Aug 1937. 5, 13, 22, 54
- [25] VF Weisskopf and DH Ewing. On the yield of nuclear reactions with heavy elements. *Physical Review*, 57(6):472–485, 1940. 5
- [26] Niels Bohr and John Archibald Wheeler. The mechanism of nuclear fission. *Phys. Rev.*, 56(5):426–450, Sep 1939. 5, 27, 55
- [27] A. Deppman, OAP Tavares, SB Duarte, EC de Oliveira, JDT Arruda-Neto, SR de Pina, VP Likhachev, O. Rodriguez, J. Mesa, and M. Gonçalves. The MCEF code for nuclear evaporation and fission calculations* 1. *Computer physics communications*, 145(3):385–394, 2002. 6
- [28] A. Deppman, OAP Tavares, SB Duarte, JDT Arruda-Neto, M. Gonçalves, VP Likhachev, J. Mesa, EC De Oliveira, SR De Pina, and O. Rodríguez. A Monte Carlo method for nuclear evaporation and fission at intermediate energies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 211(1):15–21, 2003. 6, 47
- [29] M. Gonçalves, S. de Pina, DA Lima, W. Milomen, EL Medeiros, and SB Duarte. Many-body cascade calculation for photonuclear reactions. *Physics Letters B*, 406(1-2):1–6, 1997. 6, 47
- [30] J. Spanier and EM Gelbard. Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems. , 1969. 7
- [31] R.E. Prael and H. Lichtenstein. User guide to LCS: the LAHET code system. *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-UR-89-3014*, 1989. 7, 14
- [32] A. FERRARI, PR SALA, A. FASSO, et al. FLUKA manual: Program verison 2002. Technical report, Milan: INFN, 2002, 2002. 7, 30

- [33] DB Pelowitz. Mcnpx user's manual, version 2.6. 0. *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM*, 2005. 7, 110, 121, 131
- [34] Y. Yariv and Z. Fraenkel. Intranuclear cascade calculation of high energy heavy ion collisions: Effect of interactions between cascade particles. *Phys. Rev. C*, 24(2):488–494, Aug 1981. 7, 14
- [35] N. Metropolis. *Phys. Rev.*, 110:185, 1958. 12
- [36] N. Metropolis. *Phys. Rev.*, 110:204, 1958. 12
- [37] I. Dostrovsky, Z. Fraenkel, and G. Friedlander. Monte carlo calculations of nuclear evaporation processes. iii. applications to low-energy reactions. *Phys. Rev.*, 116(3):683–702, Nov 1959. 13
- [38] Israel Dostrovsky, Zeev Fraenkel, and Lester Winsberg. Monte carlo calculations of nuclear evaporation processes. iv. spectra of neutrons and charged particles from nuclear reactions. *Phys. Rev.*, 118(3):781–791, May 1960. 13
- [39] I. Dostrovsky, Z. Fraenkel, and P. Rabinowitz. Monte carlo calculations of nuclear evaporation processes. v. emission of particles heavier than $he4$. *Phys. Rev.*, 118(3):791–793, May 1960. 13
- [40] LW Dresner. Evap a fortran program for calculating the evaporation of various particles tkom excited compound nuclei. *Oak Ridge National Laboratory report, ORNL-TM-196*, 1962. 13, 27
- [41] M Blann. Recent progress and current status of preequilibrium reaction theories and computer code alice. In *Workshop in Computation and Analysis of Nuclear Data Relevant to Nuclear Energy and Safety*. World Scientific, 1993. 13, 22
- [42] A. S. Iljinov, M. V. Mebel, N. Bianchi, E. De Sanctis, C. Guaraldo, V. Lucherini, V. Muccifora, E. Polli, A. R. Reolon, and P. Rossi. Phenomenological statistical analysis of level densities, decay widths and lifetimes of excited nuclei. *Nuclear Physics A*, 543(3):517 – 557, 1992. 14
- [43] J. Cugnon, C. Volant, and S. Vuillier. Improved intranuclear cascade model for nucleon-nucleus interactions. *Nuclear Physics A*, 620(4):475 – 509, 1997. 14
- [44] V. Baylac-Domengetroy and H.H.G.D. Forschungszentren. *Investigations related to the generation of reaction products in the target of Accelerator Driven Systems for nuclear waste incineration*. Forschungszentrum Karlsruhe, 2003. 14, 21
- [45] F. Carminati et al. GEANT Users Guide. *CERN program Library*, 1991. 14, 110
- [46] EM Lifshitz LD Landau. *Course of theoretical physics 5: Statistical physics 1*. Butterworth-Heinemann, 1991. 18, 78
- [47] M. Blann. Preequilibrium decay. *Annual Review of Nuclear Science*, 25(1):123–166, 1975. 22
- [48] Herman Feshbach, Arthur Kerman, and Steven Koonin. The statistical theory of multi-step compound and direct reactions. *Annals of Physics*, 125(2):429 – 476, 1980. 22
- [49] A.J. Cole. *Statistical models for nuclear decay: from evaporation to vaporization*. Taylor & Francis, 2000. 22
- [50] N. Bohr. Nature 137, 344; N. Bohr,(1937). *Science*, 86:161, 1936. 22
- [51] I. Frenkel. Sov.Phys. 9, 533 (1936) . *Sov.Phys.*, 9:533, 1936. 22

- [52] AV Ignatyuk and et al. *Sov. J. Nucl. Phys.*, 21:256–256, 1975. 27
- [53] F. Atchison. Spallation and fission in heavy metal nuclei under medium energy proton bombardment. *Proc. Meeting on Targets for Neutron Beam Spallation Source*, 1980. 27
- [54] R. Vandenbosch and JR Huizenga. P/688 in *Proc. 2nd UN Conf. on the peaceful uses of atomic energy*, 1958. 27
- [55] W. Pohorecki and et al. Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in lead target exposed to 660 mev protons. 2006. IAEA specification. xi, xxi, 29, 31, 32, 33
- [56] IAEA. Report of the Technical Meeting and 3rd RCM , Vienna, Austria, 26-30 January 2009, Working (LIMITED DISTRIBUTION). 2009. 29, 31
- [57] J. Janczyszyn, S. Taczanowski, G. Domanska, and W. Pohorecki. Recent works of the agh team connected with the analyses of ads. *Working Material, Research Coordination Meeting of the Coordinated Research Project on Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems*, 2006. IAEA-RC-1003.1 TWG-FR/127, pp. 140-154, Reproduced by IAEA, 2006. 30
- [58] Alexander Stanculescu and et al. Iaea coordinated research project (crp) on analytical and experimental benchmark analyses of accelerator driven systems. *Proceedings of the 8th International Topical Meeting on Nuclear Applications and Utilization of Accelerators (AccApp07)*, 2007. Pocatello, Idaho, July 29-August 2, 2007, ISBN: 0-89448-054-5, CD-ROM. 30
- [59] W. Pohorecki, J. Janczyszyn, G. Domanska, J-C. David, D. DorÃ©, S. Leray, and D. Ridikas. Thick lead target exposed to 660 mev protons: benchmark model on radioactive nuclides production and heat generation. *Proceedings of the ND2007 - International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, page 1225, 2007. Nice, April 22 - 27, ISBN 978-2-7598-0091-9, EDP Sciences, 2008, vol. 2, pp. 1225-1228. 30
- [60] W. Pohorecki, J. Janczyszyn, and G. Domanska. Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in a spallation target. *Proceedings of the International Conference on the Physics of Reactors : Nuclear Power: A Sustainable Resource*, page 240, 2008. 14-19 September 2008, Interlaken, Switzerland, CD, ISBN 978-3-9521409-5-6, Paul Scherrer Institut 2008, paper 240. 30
- [61] W. Pohorecki, J. Janczyszyn, S. Taczanowski, I.V. Mirokhin, A.G. Molokanov, T. Horwacik, and A. Polanski. in: *Proceedings of the Euradwaste-2004 Conference*, 2003. Luxembourg, 29 31 March. 30
- [62] W. Pohorecki, T. Horwacik, J. Janczyszyn, S. Taczanowski, V. P. Bamblevski, S. A. Gustov, I. V. Mirokhin, A. G. Molokanov, and A. Polanski. Spatial distributions of residuals production inside a spallation target. *Radiation Protection Dosimetry*, pages 630–633, 2005. Radiation Protection Dosimetry 115. 30
- [63] W. Pohorecki, J. Janczyszyn, S. Taczanowski, I.V. Mirokhin, A.G. Molokanov, G. Domanska, and T. Horwacik. Evaluation of an ads lead target activation. comparison of computations and measurements. *Working Material, Research Coordination Meeting of the Coordinated Research Project on Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems*, 2006. Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A, 562 (2006), pp 750-754. 30
- [64] CV Parks et al. SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation. *CCC-545, ORNL Radiation Shielding Information Center*, 1990. 31

- [65] Jerzy Janczyszyn. Private communication: benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in lead target exposed to 660 mev protons. 2009. xii, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43
- [66] Janczyszyn and et al. Benchmark on computer simulation of radioactive nuclides production rate and heat generation rate in a spallation target in iaea technical meeting of the crp on "analytical and experimental benchmark analyses of accelerator driven systems. *Tech. rep.*, IAEA, Mumbai, India, 2010. xxi, 45
- [67] TE Rodrigues, JDT Arruda-Neto, A. Deppman, VP Likhachev, J. Mesa, C. Garcia, K. Shterger, G. Silva, SB Duarte, and OAP Tavares. Photonuclear reactions at intermediate energies investigated via the Monte Carlo multicolisional intranuclear cascade model. *Physical Review C*, 69(6):64611, 2004. 47
- [68] S. Anéfalos Pereira, A. DEPPMAN, G. Silva, J. R. MAIORINO, A. SANTOS, S. B. DUARTE, and O. A.P.TAVARES. Spallation product distribution and neutron multiplicity for accelerator driven using the crisp code. *Nuclear Science and Engineering*, 159:102–103, 2008. 47
- [69] S. Anéfalos, A. DEPPMAN, G. SILVA, J. R. MAIORINO, A. SANTOS, and F. GARCIA. Development of the crisp package for spallation studies and accelerator driven systems. *Nuclear Science and Engineering*, 151:82, 2005. 47
- [70] S. Anéfalos, A. Deppman, G. Silva, JR Maiorino, A. Santos, SB Duarte, OAP Tavares, and F. Garcia. The utilization of crisp code in hybrid reactor studies. *Brazilian Journal of Physics*, 35:912–914, 2005. 47
- [71] A. Deppman, SB Duarte, G. Silva, OAP Tavares, S. Anéfalos, JDT Arruda-Neto, and TE Rodrigues. The CRISP package for intermediate-and high-energy photonuclear reactions. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 30:1991, 2004. 50
- [72] A.S. Iljinov, E.A. Cherepanov, S.E. Chigrinov, and Yad. Fiz. *Sov. J. Nucl. Phys.*, 32:322–166, 1980. 54
- [73] O. A. P. Tavares and M. L. Terranova. Analysis of bi and u photofission cross section in the quasi-deuteron region of photonuclear absorption. *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei*, 343(4):407–416, 1992. Cited By (since 1996): 14. 54, 55
- [74] J.R. Nix. Calculation of fission barriers for heavy and superheavy nuclei. *Annual Review of Nuclear Science*, 22(1):65–120, 1972. 55
- [75] E. Segre. *Nuclei and particles: an introduction to nuclear and subnuclear physics*. WA Benjamin, New York, 1964. 55
- [76] N. Bianchi, A. Deppman, E. De Sanctis, A. Fantoni, P.L. Sandri, V. Lucherini, V. Muccifora, E. Polli, AR Reolon, M. Rossi, et al. Measurement of the total cross section for ^{238}U photofission in the nucleon resonance region. *Physics Letters B*, 299(3-4):219–222, 1993. xiii, 57
- [77] C. Cetina, P. Heimberg, BL Berman, WJ Briscoe, G. Feldman, LY Murphy, H. Crannell, A. Longhi, DI Sober, JC Sanabria, et al. Photofission of heavy nuclei from 0.2 to 3.8 GeV. *Physical Review C*, 65(4):44622, 2002. xiii, 57
- [78] T. Frommhold, F. Steiper, W. Henkel, J. Kneissl, et al. Total photofission cross section for ^{238}U as a substitute for the photon absorption cross section in the energy range of the first baryon resonances* 1. *Physics Letters B*, 295(1-2):28–31, 1992. xiii, 57

- [79] JC Sanabria, BL Berman, C. Cetina, PL Cole, G. Feldman, NR Kolb, RE Pywell, JM Vogt, VG Nedorezov, AS Sudov, et al. Photofission of actinide nuclei in the quasideuteron and lower part of the Δ energy region. *Physical Review C*, 61(3):34604, 2000. xiii, 57
- [80] T. Enqvist, W. Wlazole, P. Armbruster, J. Benlliure, M. Bernas, A. Boudard, S. Czajkowski, R. Legrain, S. Leray, B. Mustapha, M. Pravikoff, F. Rejmund, K. H. Schmidt, C. Stephan, J. Taieb, L. Tassan-Got, and C. Volant. Isotopic yields and kinetic energies of primary residues in 1 a gev 208pb+p reactions. *Nuclear Physics A*, 686(1-4):481 – 524, 2001. xiii, 58, 60
- [81] F. Rejmund, B. Mustapha, P. Armbruster, J. Benlliure, M. Bernas, A. Boudard, JP Dufour, T. Enqvist, R. Legrain, S. Leray, et al. Measurement of isotopic cross sections of spallation residues in 800 A MeV 197Au+ p collisions* 1. *Nuclear Physics A*, 683(1-4):540–565, 2001. xiii, xiv, 59, 66, 67, 68
- [82] NA Demekhina and GS Karapetyan. Multimode approximation for ^{238}U photofission at intermediate energies. *Physics of Atomic Nuclei*, 71(1):27–35, 2008. 58, 59
- [83] C. Bockstiegel, S. Steinhauser, K.H. Schmidt, H.G. Clerc, A. Grewe, A. Heinz, M. de Jong, AR Junghans, J. Muller, and B. Voss. Nuclear-fission studies with relativistic secondary beams: Analysis of fission channels. *Nuclear Physics A*, 802(1-4):12–25, 2008. 59, 64
- [84] GS Karapetyan, AR Balabekyan, NA Demekhina, and J. Adam. Multimode approach to ^{241}Am and ^{237}Np fission induced by 660-MeV protons. *Physics of Atomic Nuclei*, 72(6):911–916, 2009. 60
- [85] J. Benlliure, P. Armbruster, M. Bernas, A. Boudard, JP Dufour, T. Enqvist, R. Legrain, S. Leray, B. Mustapha, F. Rejmund, et al. Isotopic production cross sections of fission residues in 197Au-on-proton collisions at 800 A MeV. *Nuclear Physics A*, 683(1-4):513–539, 2001. 60
- [86] B. Fernandez-DomÁnguez, P. Armbruster, L. Audouin, J. Benlliure, M. Bernas, A. Boudard, E. Casarejos, S. Czajkowski, J.E. Ducret, T. Enqvist, B. Jurado, R. Legrain, S. Leray, B. Mustapha, J. Pereira, M. Pravikoff, F. Rejmund, M.V. Ricciardi, K.-H. Schmidt, C. Stephan, J. Taieb, L. Tassan-Got, C. Volant, and W. Wlazole. Nuclide cross-sections of fission fragments in the reaction $^{208}\text{Pb} + p$ at 500[thin space]a mev. *Nuclear Physics A*, 747(2-4):227 – 267, 2005. 60
- [87] MB Chadwick, P. Oblozinsky, M. Herman, NM Greene, RD McKnight, DL Smith, PG Young, RE MacFarlane, GM Hale, SC Frankle, et al. ENDF/B-VII. 0: Next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. *Nuclear Data Sheets*, 107(12):2931–3060, 2006. 62
- [88] C. Straede, C. Budtz-Jørgensen, and H.H. Knitter. ^{235}U (n, f) Fragment mass-, kinetic energy-and angular distributions for incident neutron energies between thermal and 6 MeV. *Nuclear Physics A*, 462(1):85–108, 1987. 64
- [89] P. Siegler, F.J. Hambsch, S. Oberstedt, and JP Theobald. Fission modes in the compound nucleus ^{238}Np . *Nuclear Physics A*, 594(1):45–56, 1995. 64
- [90] T. Fan, J. Hu, and S. Bao. Study of multichannel theory for the neutron induced fissions of actinide nuclei. *Nuclear Physics A*, 591(2):161–181, 1995. 64
- [91] iaea. <http://www-nds.iaea.org/>. 2010. 64
- [92] P. Marmier and E. Sheldon. PHYSICS OF NUCLEI AND PARTICLES. VOLUME I. 1969. 76

- [93] KC Chung. Introdução à física nuclear. 2001. 77
- [94] RK Pathria. *Statistical mechanics; (International series of monographs in natural philosophy, v. 45) tural philosophy, v. 45) tural philosophy, v. 45)*. Pergamon, 1972. 77
- [95] A. Bohr and B.R. Mottelson. *Nuclear structure*. World Scientific Publishing, 1998. 78
- [96] D. G. Ravenhall, C. J. Pethick, and J. M. Lattimer. Nuclear interface energy at finite temperatures. *Nuclear Physics A*, 407(3):571 – 591, 1983. 79
- [97] J. P. Bondorf, R. Donangelo, I. N. Mishustin, C. J. Pethick, H. Schulz, and K. Sneppen. Statistical multifragmentation of nuclei : (i). formulation of the model. *Nuclear Physics A*, 443(2):321 – 347, 1985. 80, 82
- [98] J. Bondorf, R. Donangelo, I.N. Mishustin, and H. Schulz. Statistical multifragmentation of nuclei: (ii). application of the model to finite nuclei disassembly. *Nuclear Physics A*, 444(3):460 – 476, 1985. 82, 86
- [99] C. E. Aguiar, R. Donangelo, and S. R. Souza. Nuclear multifragmentation within the framework of different statistical ensembles. *Phys. Rev. C*, 73(2):024613, Feb 2006. 82
- [100] J. HÄ $\frac{1}{4}$ fner. Heavy fragments produced in proton-nucleus and nucleus-nucleus collisions at relativistic energies. *Physics Reports*, 125(4):129 – 185, 1985. 82
- [101] M. Brack, C. Guet, and H.-B. Håkansson. Selfconsistent semiclassical description of average nuclear properties-a link between microscopic and macroscopic models. *phys. rep.*, 123:275–364, July 1985. 83
- [102] J. M. Lattimer, C. J. Pethick, D. G. Ravenhall, and D. Q. Lamb. Physical properties of hot, dense matter: The general case. *Nuclear Physics A*, 432(3):646 – 742, 1985. 84
- [103] H. Schulz, B. Kampfer, H. W. Barz, G. Ropke, and J. Bondorf. On the time-development of the liquid-vapor phase transition in an expanding nuclear system. *Physics Letters B*, 147(1-3):17 – 22, 1984. 85
- [104] A. S. Hirsch, A. Bujak, J. E. Finn, L. J. Gutay, R. W. Minich, N. T. Porile, R. P. Scharenberg, B. C. Stringfellow, and F. Turkot. Experimental results from high energy proton-nucleus interactions, critical phenomena, and the thermal liquid drop model of fragment production. *Phys. Rev. C*, 29(2):508–525, Feb 1984. 85
- [105] C. Villagrasa-Canton, A. Boudard, J.E. Ducret, B. Fernandez, S. Leray, C. Volant, P. Armbruster, T. Enqvist, F. Hammache, K. Helariutta, et al. Spallation residues in the reaction $^{56}\text{Fe} + p$ at 0.3 A, 0.5 A, 0.75 A, 1.0 A, and 1.5 A GeV. *Physical Review C*, 75(4):44603, 2007. 88, 91, 94, 98
- [106] M. V. Ricciardi, P. Armbruster, J. Benlliure, M. Bernas, A. Boudard, S. Czajkowski, T. Enqvist, A. Kelic, S. Leray, R. Legrain, B. Mustapha, J. Pereira, F. Rejmund, K.-H. Schmidt, C. Stephan, L. Tassan-Got, C. Volant, and O. Yordanov. Light nuclides produced in the proton-induced spallation of ^{238}u at 1 gev. *Phys. Rev. C*, 73(1):014607, Jan 2006. 101
- [107] P. Armbruster, J. Benlliure, M. Bernas, A. Boudard, E. Casarejos, S. Czajkowski, T. Enqvist, S. Leray, P. Napolitani, J. Pereira, F. Rejmund, M.-V. Ricciardi, K.-H. Schmidt, C. Stephan, J. Taieb, L. Tassan-Got, and C. Volant. Measurement of a complete set of nuclides, cross sections, and kinetic energies in spallation of ^{238}u 1a gev with protons. *Phys. Rev. Lett.*, 93(21):212701, Nov 2004. 101
- [108] A. Sommerfeld. Zur Elektronentheorie der Metalle. *Naturwissenschaften*, 16(21):374–381, 1928. 112

- [109] F.B. Brown, RF Barrett, TE Booth, J. Bull, L. Cox, R. Forster, J. Goorley, R. Mosteller, S. Post, R. Prael, et al. MCNP version 5. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 87(273):02–3935, 2002. 121, 125, 131, 132, 136
- [110] M. Pesic, I. Avramovic, and N. Neskovic. H5b - Accelerator driven subcritical research facility with low enriched TVR-S fuel in lead matrix User guide to LCS: the LAHET code system. *Material prepared for the IAEA Sub-Coordinated Research Project on Low Enriched Uranium (LEU) Fuel Utilization in Accelerator Driven Sub-Critical Assembly (ADS) Systems*, 2006. 174
- [111] M. Abramowitz and I.A. Stegun. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. National Bureau of Standards Applied Mathematics Series 55. Tenth Printing. 1972. 227
- [112] R. Honsberger. *More Mathematical Morsels*. Math. Assoc. Amer., 1991. 227
- [113] G.E. Andrews. *The theory of partitions*. Cambridge Univ. Press, 1998. 227, 230, 232
- [114] Eric W. Weisstein. "partition function p."from mathworld—a wolfram web resource. <http://mathworld.wolfram.com/PartitionFunctionP.html>. 227, 230
- [115] R. Honsberger. *Mathematical Gems III*. Math. Assoc. Amer., 1985. 230