6288?

MODELO SEMICLÁSSICO DE SEÇÃO DE

CHOQUE PARA NÊUTRONS RÁPIDOS

por

Abel Rosato

e

Augusto Brandão d'Oliveira

CTA - EAV - RP -- 004/77

NSTITUTO DE ESTUDOS AVANÇADO

CRP

RELATÓRIO DE PESQUISA
CTA - EAV 004/77
13 Abr 77

"MODELO SEMICLÁSSICO DE SEÇÃO DE CHOQUE PARA NÊUTRONS RÁPIDOS

por

Abel Rosato

e

Augusto Brandão d'Oliveira

CTA - EAV - RP - - 004/77

Divisão de Estudos Avançados
Instituto de Atividades Espaciais
Centro Técnico Aeroespacial
12.200-São José dos Campos-SP
Brasil

AGRADECIMENTOS

Queremos agradecer ao Dr. José Alberto Albano do Amarante pela sugestão deste trabalho e contínuo estímulo.

À Srta. Eliane D'Ippolito e à Sra. Maria Rita Hurpia da Rocha, pela ajuda no preparo dos programas e dos gráficos.

À Srta. Carolina Pozzati, que datilografou uma primeira versão deste trabalho e à Sra. Elisabete Campiutti, que datilografou a versão final. À elas nosso obrigado por um excelente trabalho de datilografia.

CONTEÚDO

I - INTRODUÇÃO

O estudo das seções de choque de espalhamento de nêutrons por núcleos atômicos tem grande importância prática. No projeto de reatores as seções de choque são um dado vital, e as incertezas nos valores dessas seções de choque acarretam ônus ao projeto, /R1/.

A medida experimental dessas seções de choque, e a melhoria da precisão experimental é um dos objetivos da pesquisa que está, atualmente, sendo realizada em vários centros nucleares, /1/. Por outro lado, a necessidade de se conhecer seções de choque para certos núcleos em energias nunca medidas, leva a necessidade de interpolação ou cálculo teórico. Para o dimensionamento de reatores, é também de grande interesse a parametrização dessas seções de choque em função do núcleo alvo e da energia do projétil.

Apresentamos um estudo dos principais aspectos do espalhamento de nêutrons, e descrevemos um modelo semiclássico, proposto por Angeli, Csikai e Nagy, /2,3,4/, aplicando esse modelo a diversos casos práticos.

Comparamos os resultados obtidos com dados experimentais, para núcleos deformados, e com resultados teóricos com base no modelo ótico, sem tratamento das deformações.

II - CONCEITUAÇÃO FÍSICA DO ESPALHAMENTO DE NÊUTRONS

A melhor maneira de se iniciar um estudo em física é, provavelmente, de se adquirir uma certa familiaridade com os resultados experimentais, suas ordens de grandeza e comportamentos característicos. Portanto, antes de abordarmos teoricamente o assunto do espalhamento de nêutrons, consideremos os resultados que são obtidos.

As Figuras 1,2 e 3 mostram o comportamento da seção de choque total de espalhamento de nêutrons de energias de 10^{-4}eV até 100 MeV incidentes num núcleo alvo de Bismuto.

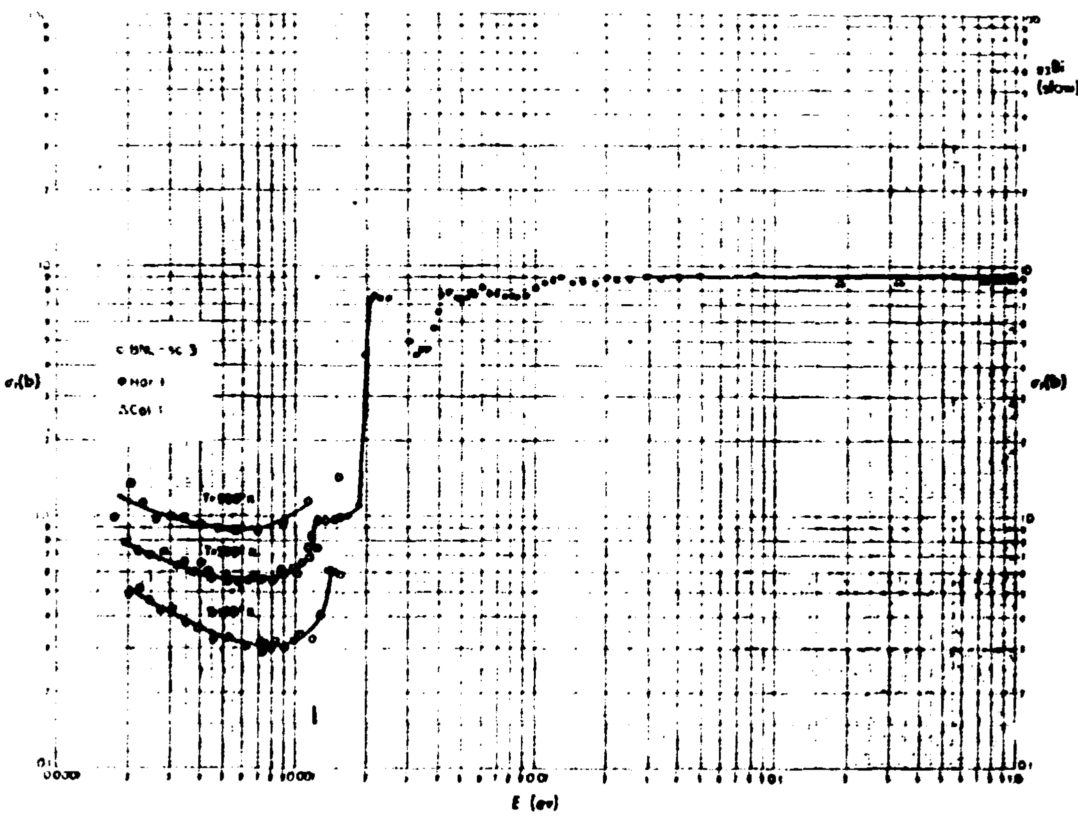


Fig. 1 - A seção de Choque total do Bismuto em função da energia do nêutron de 10^{-4}eV até 1 eV. /24/

Para uma recapitulação geral dos aspectos experimentais relativos à medida dessas seções de choque, veja o trabalho de resenha de Adair, /5/.

Pa.. as seções de choque de espalhamento de nêutrons, podemos distinguir três intervalos de energia:

(1) Para nêutrons incidentes com baixa energia, as seções de choque apresentam uma variação proporcional a 1/v.

(2) Para energias da ordem de alguns eV ou KeV, temos o aparecimento de ressonâncias. Enquanto as larguras das linhas forem menores que a separação dos níveis, as seções de espalhamento e de reação mostram ressonâncias individuais e dependem fortemente da energia incidente. Essa região extende-se até aproximadamente 1 MeV.

(3) Para energias mais acima de 0.1 MeV ou 1 MeV, as ressonâncias tornam-se tão densas e tão largas, que se superpõem. O resultado é que medimos uma média. Nessa região, que é a região de interesse para nós, é que é aplicável o modelo ótico ou modelos semiclássicos como o que será descrito no Cap. VIII.

Esse comportamento pode ser observado nas Figuras 1, 2 e 3. A região (1) corresponde as energias de 0.0001 eV até 0.001 eV. Em seguida vem a região (2), que termina aproximadamente em 0.1 MeV, e a partir dessa energia temos a região (3).

As Figuras 4 e 5 ilustram de maneira mais dramática a região 1/v (1), no espalhamento de nêutrons em ouro e a região de ressonância (2), no espalhamento de nêutrons em prata, respectivamente.

A Figura 6 nos mostra o comportamento da seção de choque total para o espalhamento de nêutrons em vários núcleos, numa faixa de energias correspondendo a região (3).

Importante, também, é a seção de choque diferencial de espalhamento elástico.

A Figura 7 ilustra resultados típicos, onde a seção de choque diferencial de espalhamento elástico é mostrada contra o ângulo de espalhamento no laboratório, para o espalhamento de nêutrons de 14 MeV em diversos núcleos alvo.

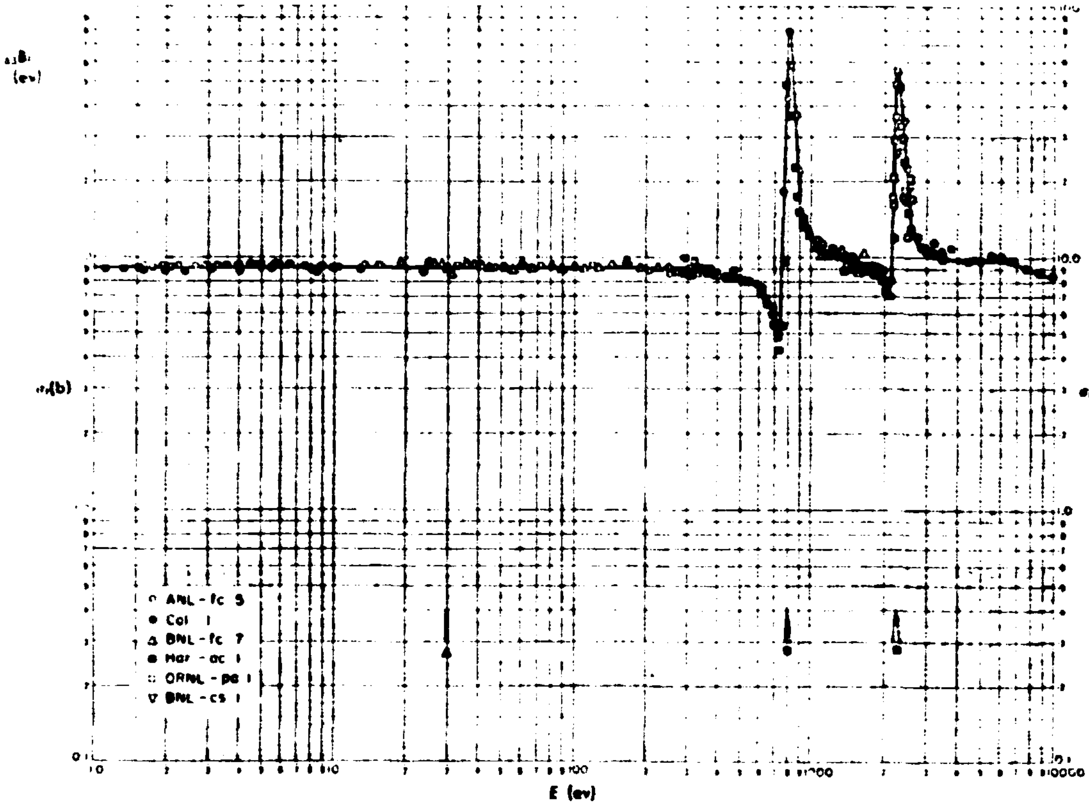


Fig. 2 - A seção de choque total do Bismuto
na região de baixas energias. /22/

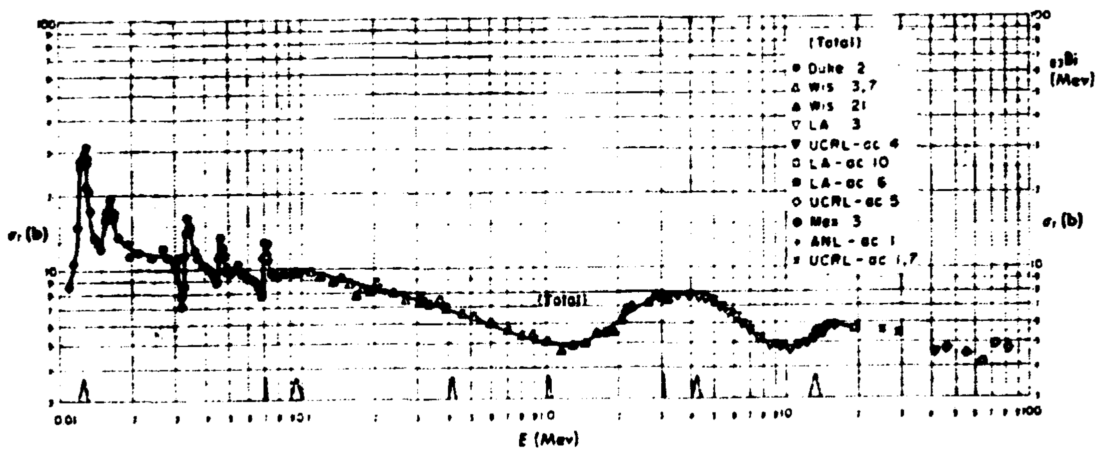


Fig. 3 - A seção de choque total do Bismuto
em função da energia do nêutron de
10^{-4} eV até 15 MeV. /22/

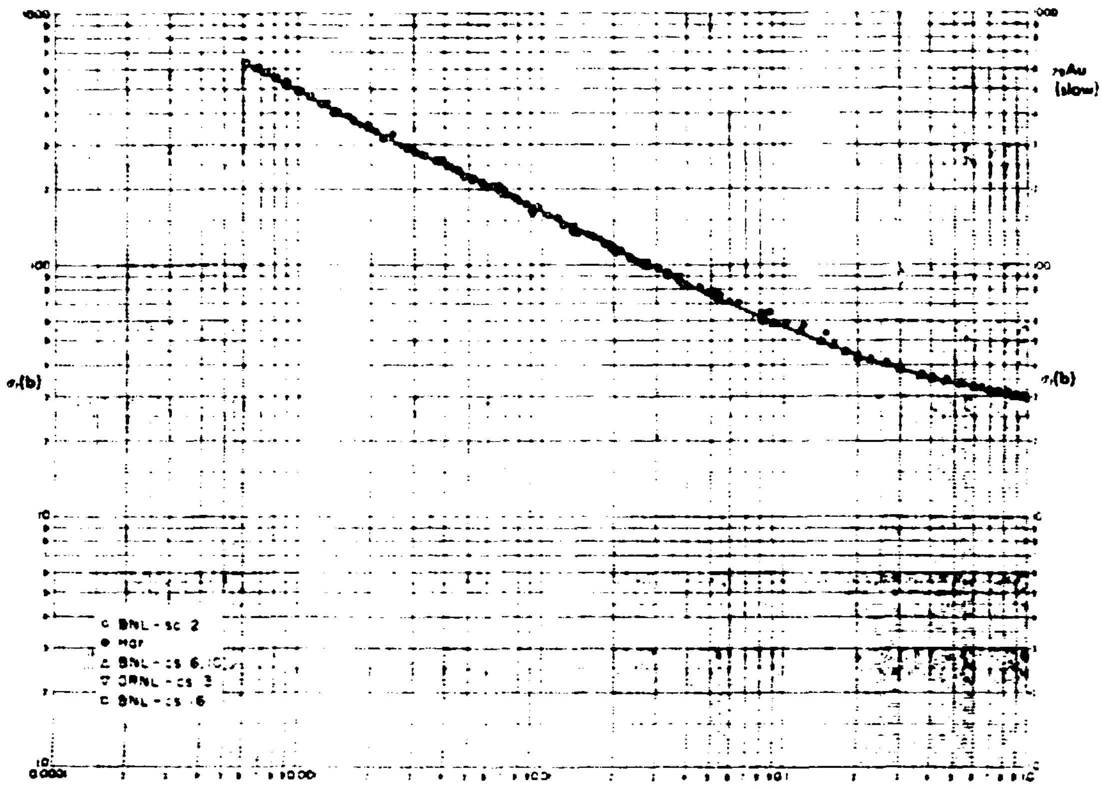


Fig. 4 - Seção de choque total do ouro para nêutrons lentos. /22/

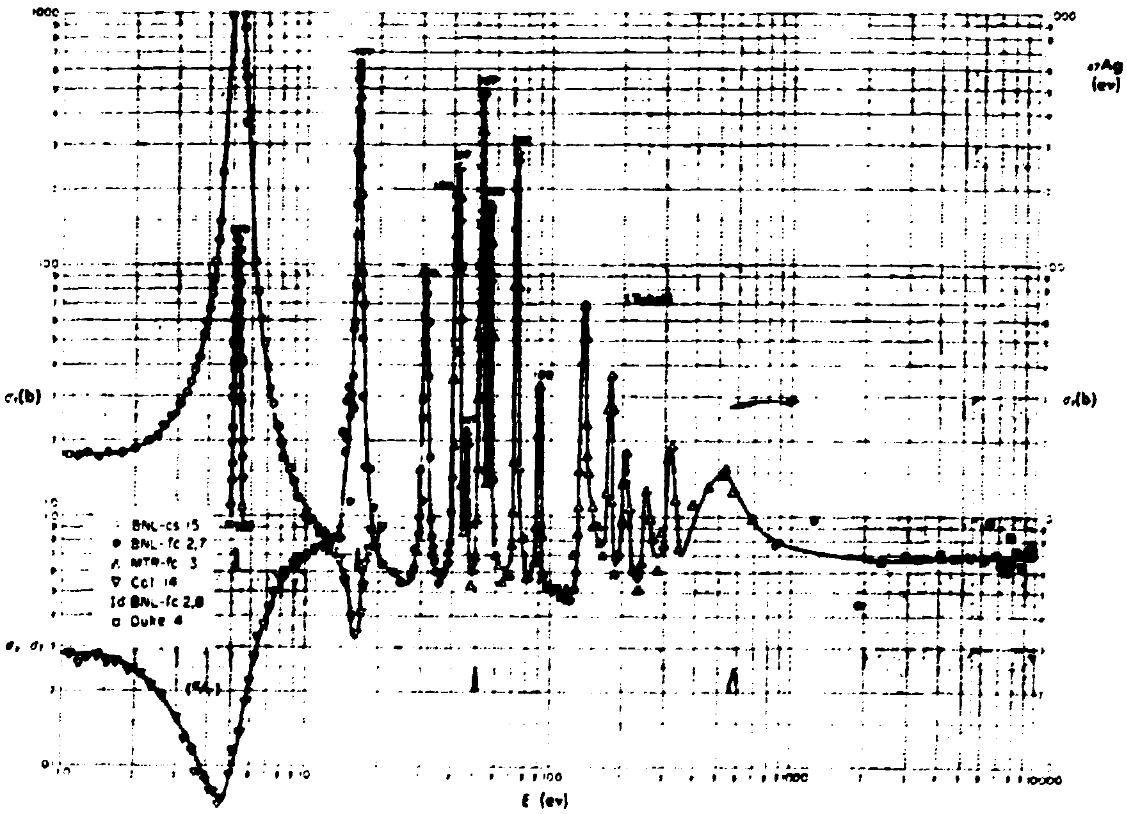


Fig. 5 - A seção de choque total para nêutrons em prata na região de baixas energias. /22/

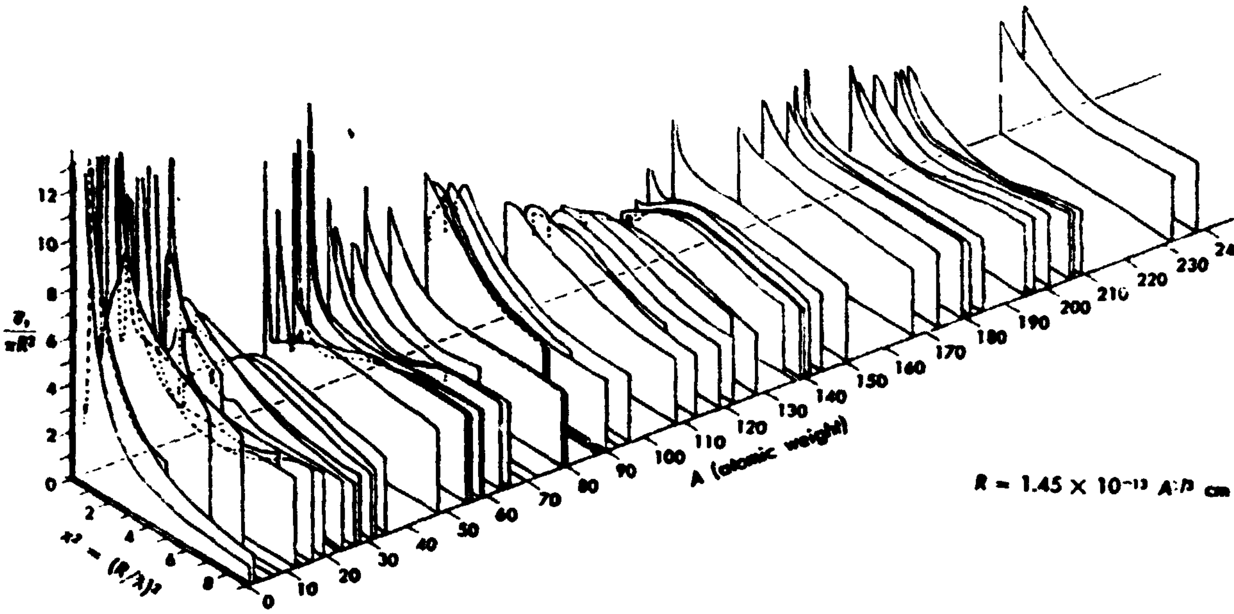


Fig. 6 - Seção de choque total para nêutrons em função da energia e do número de massa. A energia é dada como $x^2 = (R/\lambda)^2$, onde λ é o comprimento de onda de Broglie dos nêutrons. /23/

A interpretação desses resultados é o que iremos estudar e tentar descrever por meio de modelos.

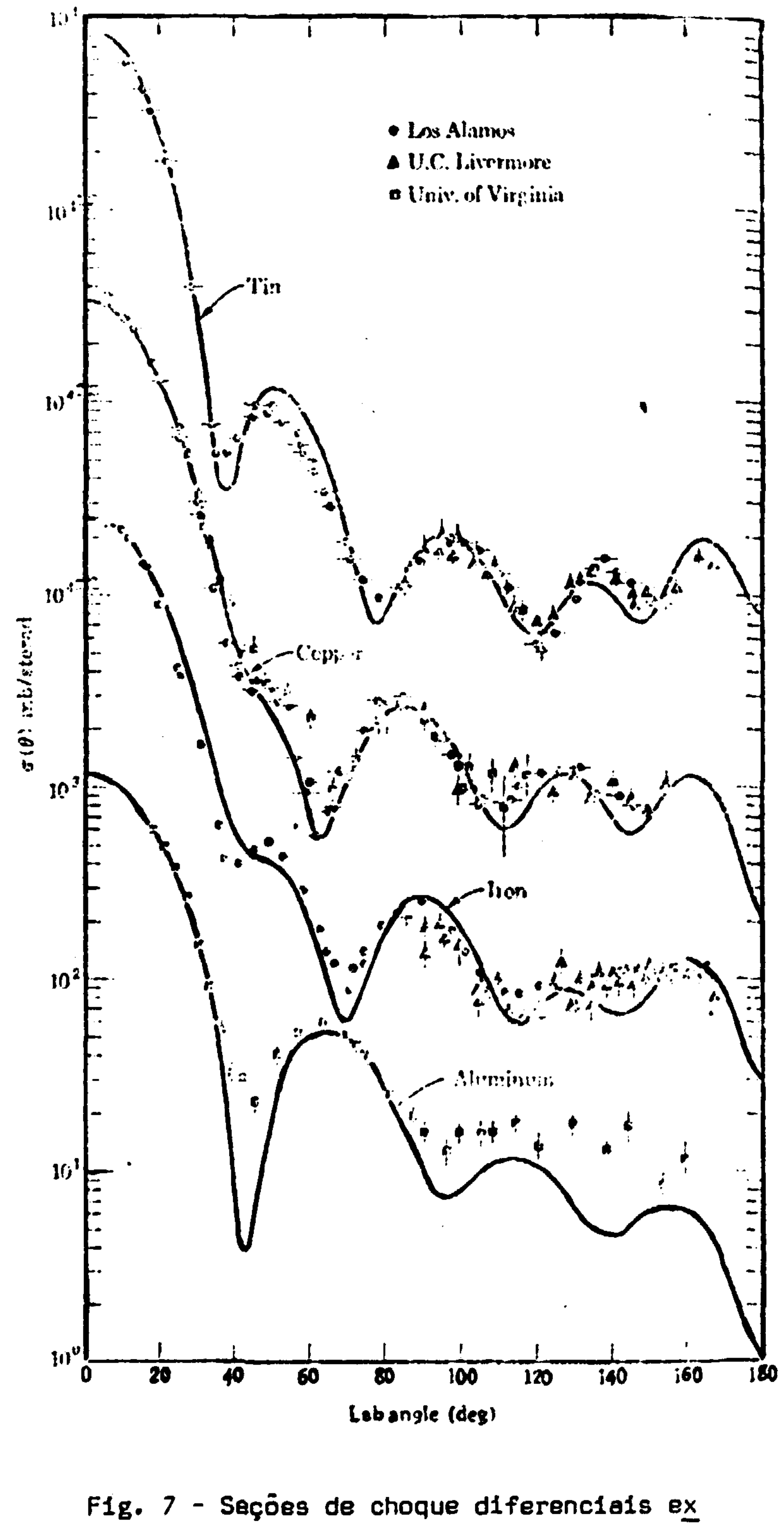


Fig. 7 - Seções de choque diferenciais experimentais e teóricas para nêutrons de 14 MeV espalhados por Su, Cu, Fe, Al (dados não corrigidos pelo espalhamento múltiplo /6/).

III - TRATAMENTO QUÂNTICO DO ESPALHAMENTO DE NÊUTRONS

Consideremos uma partícula, de energia E, incidindo num potencial esfericamente simétrico V(r). A equação de Schrödinger para o problema é:

$$(\nabla^2 + k_0^2 - U(r))\,\psi(\vec{r}) = 0 \tag{1}$$

onde

$$k_0^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E \tag{2}$$

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \tag{3}$$

Um conjunto completo de funções solução desta equação é da forma, desprezando spin,

$$\psi_{\ell m}(r) = \frac{R_\ell(r)}{\rho} Y_{\ell m}(\theta\phi) \tag{4}$$

onde $R_\ell(r)$ é a solução regular da equação

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\ell^2} - \frac{U}{E}\right)\right] R_\ell = 0 \tag{5}$$

$Y_{\ell m}$ são os harmônicos esféricos e a variável $\rho = k_0 r$, onde k_0 é dado pela equação (2) e E é a energia da partícula incidente.

A solução mais geral da equação de Schrödinger acima pode ser escrita como

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell m} a_{\ell m}\,\psi_{\ell m} = \sum_{\ell m} a_{\ell m} \frac{R_\ell}{\rho} Y_{\ell m} \tag{6}$$

Considerando o eixo z como sendo paralelo ao vetor de onda $\vec{k}$ da partícula incidente vem que

$$\psi(\vec{r}) = \sum_\ell b_\ell \frac{R_\ell}{\rho} P_\ell(\cos\theta) \tag{7}$$

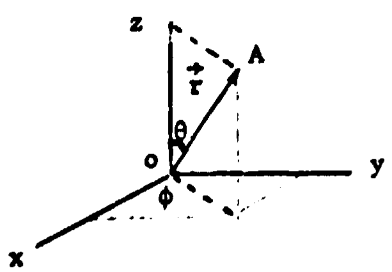


Fig. 8

onde $P_\ell(\cos\theta)$ são os polinômios de Legendre.

Pode-se mostrar que /B4/

$$b_\ell = i^\ell(2\ell+1)\, e^{i\delta\ell} \tag{8}$$

onde $i = \sqrt{-1}$ e δ_ℓ é a mudança de fase da onda parcial ℓ.

Com isto, a solução da equação de Schrödinger para uma partícula de energia E, e potencial esfericamente simétrico é dada por

$$\psi_{\ell m}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1)\, \frac{R\ell}{\rho}\, P_\ell(\cos\theta)\, e^{i\delta\ell} \tag{9}$$

onde R_ℓ satisfaz a equação radial (5).

Consideremos o caso particular em que $V(r) = 0$ nas regiões $r \to \infty$. Com isto a equação (5) fica

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 1\right) R_\ell \approx 0 \tag{10}$$

e as soluções são da forma $e^{\pm(i\rho+\phi\ell)}$ onde $\phi\ell$ é uma fase. Tal solução poderá ser escrita como uma combinação de onda esférica indo da origem para o infinito $e^{i(\rho+\phi\ell)}$, e outra vindo do infinito para a origem, isto é:

$$\frac{R\ell}{\rho} - \frac{1}{\rho}\left(e^{i(\rho+\phi\ell)} + e^{-i(\rho+\phi\ell)}\right) \tag{11}$$

Entretanto, sendo $V(r) \neq 0$ e considerando que o alcance de V seja finito, tal que $\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0$, podemos escrever as soluções da equação (5) para $r\to\infty$ também como a combinação linear de uma onda esférica vindo do infinito para a origem (onde está localizado o potencial) e uma onda esférica indo da origem para o infinito, com a ressalva de que esta onda que vai para o infinito já sofreu os efeitos do potencial localizado na origem e não pode ter a mesma amplitude da onda que vem do infinito e que não sentiu os efeitos do potencial. Para levar em conta o efeito do potencial na amplitude da onda indo para o infinito, define-se o número complexo $S\ell$, chamado elemento diagonal da matriz de espalhamento, e com isto a solução da eq. (5) para $r\to\infty$ fica

$$\frac{R\ell}{\rho} = \frac{1}{2i\rho}\left[S\ell\; e^{i(\rho-\pi\ell/2)} - e^{-i(\rho-\pi\ell/2)}\right] \tag{12}$$

onde a fase $\phi\ell = \pi\ell/2$.

Então podemos afirmar que a solução (6) para $r \to \infty$ é da forma

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \to \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1) \frac{1}{2i\rho}\left[S_{\ell} e^{i(\rho - \pi\ell/2)} - e^{-i(\rho - \pi\ell/2)}\right] P_{\ell}(\cos\theta) \quad (13)$$

Somando e subtraindo $e^{i(\rho - \pi\ell/2)}$, obtemos

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \to \infty} e^{ikz} + \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1) \frac{1}{2i\rho} (S_{\ell} - 1)\, e^{i(\rho - \pi\ell/2)}\, P_{\ell}(\cos\theta) \quad (14)$$

visto que a expansão de uma onda plana em termos dos harmônicos esféricos é sabido ser

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)\, P_{\ell}(\cos\theta)\, j_{\ell}(\rho) \quad (15)$$

onde o comportamento da função de Bessel esférica $j_{\ell}(\rho)$ para $r \to \infty$, consiste numa onda esférica vindo do infinito e uma onda esférica indo para o infinito.

Por outro lado, considerando o potencial $V(\vec{r})$ centrado na origem, e sendo $e^{ik_o z}$ a onda incidente nesta região, queremos saber qual a onda após passar pelo potencial. Assumimos que

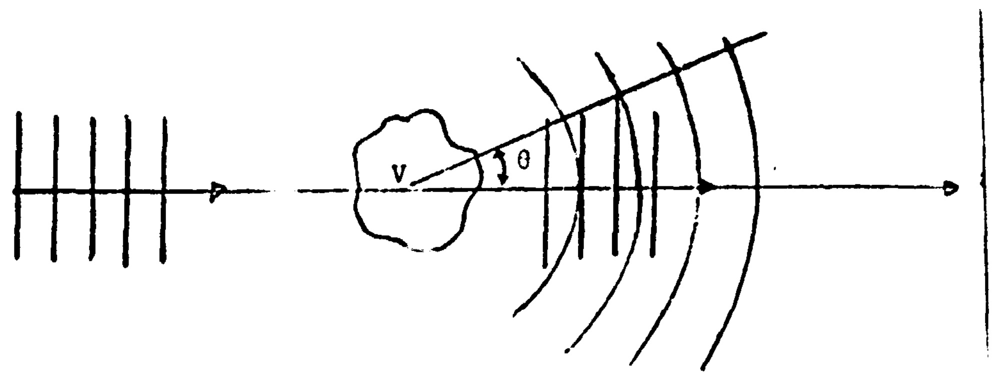


Fig. 9

esta onda ψ é a superposição da onda incidente $e^{ik_o z}$ com uma onda espalhada ψ_{esp}, isto é

$$\psi = e^{ik_o z} + \psi_{esp} \quad (16)$$

e que a onda espalhada, para $r \to \infty$, é uma onda esférica de amplitude $A(\theta\phi)$. Então a solução do problema é

$$\psi \xrightarrow{r \to \infty} e^{ik_o z} + \frac{A(\theta)}{r}\, e^{i\rho} \quad (17)$$

onde a dependência em ϕ inexiste se $V(r)$ for esfericamente simétrico.

$A(\theta)$ é chamada de amplitude de espalhamento, e $\psi_{esp} = \frac{A(\theta)}{r} e^{i\rho}$. Comparando (17) com (14) identificamos a amplitude de espalhamento como

$$A(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i}{2ik_0} (2\ell + 1)\ (S_\ell - 1)\ e^{-i\frac{\pi\ell}{2}}\ P_\ell(\cos\theta) \tag{18}$$

$$A(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2ik_0} (2\ell + 1)\ (S_\ell - 1)\ P_\ell(\cos\theta) \tag{19}$$

O conceito importante no caso de um feixe de partículas incidente numa região de potencial é o conceito de seção de choque. A seção de choque está ligada a probabilidade que um determinado evento aconteça. A seção de choque σ_i mede a probabilidade de ocorrência do evento i e é definida como $d\sigma_i$ = nº de eventos i considerados por seg. por centro espalhador no ângulo sólido $d\Omega$ dividido pelo número de partículas incidentes por cm^2 por seg.

Então

$$d\sigma_i = \frac{dN_i}{j_i} = \sigma_i(\theta,\phi)\ d\Omega \tag{20}$$

O fluxo de partículas $\vec{j}_i$ é determinado diretamente através da função de onda, isto é:

$$\vec{j}_i = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi_i^* \nabla\psi_i - \psi_i \nabla\psi_i^*) \tag{21}$$

e o número N_i de eventos do tipo i ocorridos por segundo é dado por

$$N_i = \int dN_i = \int_{\substack{\text{superfície}\\ \text{esférica}}} \vec{j}_i \cdot dS\ \hat{n} = \int_{\substack{\text{superfície}\\ \text{esférica}}} j_i\ r^2\ d\Omega \tag{22}$$

Com isto a seção de choque poderá ser obtida, e a probabilidade que o evento i ocorra quando um fluxo de partículas incide num alvo, poderá ser determinada.

A seção de choque $\sigma_i(\theta,\phi)$, assim como definida em (20), é chamada de seção de choque diferencial, e depende naturalmente dos ângulos θ e ϕ.

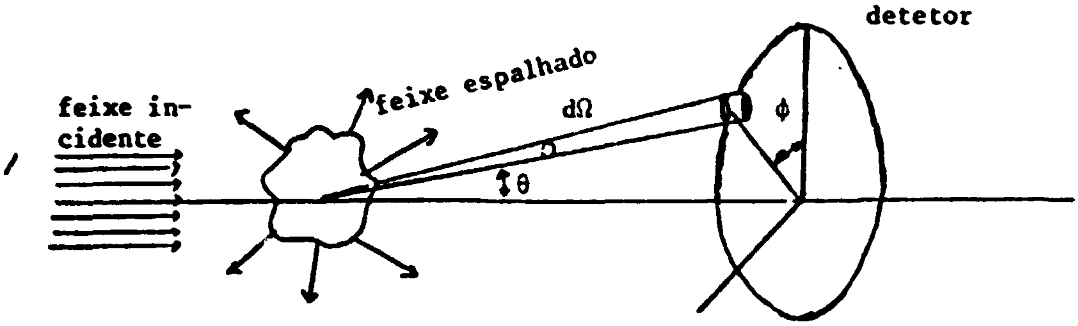


Fig. 10

Se o potencial for esfericamente simétrico, então a seção de choque depende de θ somente.

A seção de choque total é definida como

$$\sigma_i = \int_{\substack{\text{ângulo}\\\text{sólido}}} d\,\sigma_i = \frac{N_i}{j_i} \qquad (23)$$

IV - ESPALHAMENTO E REAÇÃO

Vimos como podemos tratar quânticamente o espalhamento de uma partícula por um potencial esfericamente simétrico.

Ao fazermos incidir um nêutron sobre um núcleo, outros fenomenos podem ocorrer que o mero espalhamento.

A Figura 11 mostra esquematicamente os tipos de reações que podem ocorrer ao fazermos incidir uma partícula a sobre um núcleo alvo A.

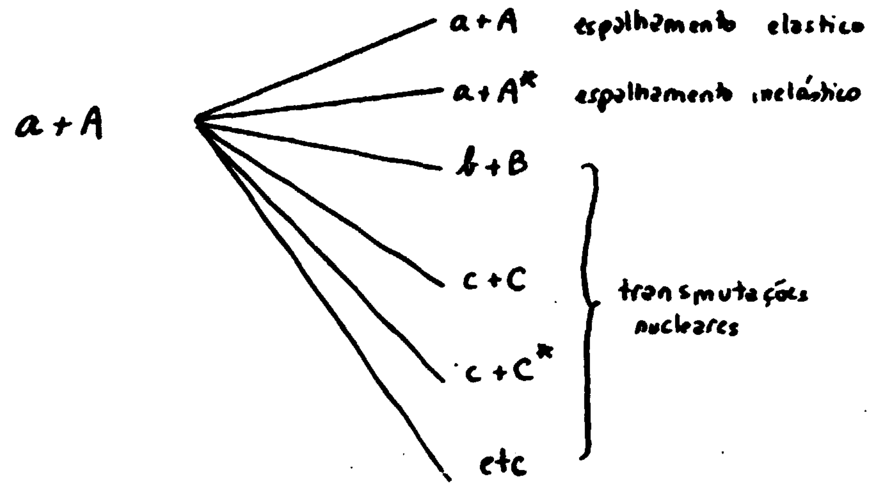


Fig. 11

Podemos dividir esses fenomenos como fenomenos de espalhamento elástico e de reação. Os fenomenos de reação encluem o espalhamento inelástico.

Para calcular a seção de choque de espalhamento elástico e de reação, devemos calcular N_{esp} e N_R, isto é, o número de espalhamento ou reações por segundo por centro espalhador.

O número de partículas espalhadas é, de acordo com (22)

$$N_{esp} = \int dN_{esp} = \int j_{esp}\; r^2\; d\Omega \qquad (24)$$

onde

$$\vec{j}_{esp} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*_{esp}\, \nabla\psi_{esp} - \psi_{esp}\, \nabla\psi^*_{esp}\right) \qquad (25)$$

e ψ_{esp} é dada pela identificação através de (16).

Procedendo desta forma, obtemos

$$dN_{esp} = v\ |A(\theta)|^2\ d\Omega \tag{26}$$

$$j_{inc.} = v$$

Com isto a seção de choque diferencial para espalhamento elástico é

$$d\sigma_{esp} = \sigma_{esp}(\theta)\ d\Omega = |A(\theta)|^2 d\Omega \tag{27}$$

e sendo $d\Omega = 2\pi\ \mathrm{sen}\theta\ d\ \theta$ vem

$$\sigma_{esp} = \int d\sigma_{esp} = \int |A|^2\ 2\pi\ \mathrm{sen}\theta\ d\theta \tag{28}$$

Como conhecemos a amplitude de espalhamento em termos da matriz de espalhamento S (eq. 1º) temos que

$$\sigma_{esp}(\theta) = |A(\theta)|^2 = \left|\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2ik_0}(2\ell+1)\ (S_\ell - 1)P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \tag{29}$$

Então a seção de choque diferencial vem

$$\sigma_{esp}(\theta) = \frac{1}{4k_0^2}\ \left|\sum_{\ell=0}^{\infty}\ (2\ell+1)(S_\ell - 1)\ P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \tag{30}$$

E a seção de choque integral de espalhamento elástico, é

$$\sigma_{esp} = \int \sigma(\theta)\ d\Omega = 2\pi \int \mathrm{sen}\ \theta\,\sigma(\theta)\ d\theta \tag{31}$$

$$\boxed{\sigma_{esp} = \frac{\pi}{k_0^2}\ \sum_{\ell=0}^{\infty}\ (2\ell+1)|S_\ell - 1|^2} \tag{32}$$

Se o espalhamento é não elástico, isto é, se parte da energia cinética da partícula incidente é usada para excitar o núcleo, ou se o número de partículas emergentes é menor do que o número incidente, então temos o evento denominado reação e a probabilidade deste evento é medida pela seção de choque de reação, σ_R. Para determiná-la basta conhecer o número N_R de partículas que sofrem reação. Este número está ligado à amplitude da onda esférica indo para o infinito. Isto é, por (13)

$$|\psi_{inc}|^2 \sim \text{nº de partículas incidentes} = \alpha^2$$

$$|\psi_{esp}|^2 \; - \; \text{nº de partículas que saem} = \alpha^2 |S_\ell|^2$$

O número de partículas absorvidas $- 1 - |S_\ell|^2$.

Neste caso então a seção de choque de reação total será:

$$\boxed{\sigma_R = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1)\,(1 - |S_\ell|^2)} \tag{33}$$

A seção de choque total será a soma de σ_{esp} e σ_R, isto é:

$$\sigma_T = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left[|1 - S_\ell|^2 + 1 - |S_\ell|^2 \right] \tag{34}$$

$$\sigma_T = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1)\;(2 - S_\ell^* - S_\ell) \tag{35}$$

O número de ondas parciais que entram na expansão (9) e que aparecem na somatória na seção de choque, não é infinito, mas vai até um valor máximo, denominado ℓ_{max}.

Como V tem alcance finito, consideremos que $V \neq 0$ dentro de uma esfera de raio r_0. Para $r > r_0$ $V = 0$ e portanto $S_\ell = 1$ e a equação radial , neste caso é

$$\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\right) R_\ell = 0 \tag{36}$$

e a única força atuante na partícula é aquela oriunda do potencial centrífugo

$$V_c = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \tag{37}$$

Para um dado ℓ a energia total da partícula, que é constante, consiste de uma energia cinética radial T_r (que é positiva) e uma energia potencial (repulsiva) V_c, isto é:

$$E = T_r + V_c \tag{38}$$

Dado que V_c cresce quando r descresce, existem valores r para os quais toda energia da partícula advém de V_c, isto é, $T_r = 0$. O conjunto destes valores de r definem a superfície de uma esfera, dentro do qual a partícula não pode penetrar, visto que isto implicaria numa energia cinética radial negativa. O raio desta esfera, r_c, naturalmente depende de ℓ.

Com isto podemos definir a distância do "cluse-approach", r_c, da partícula incidente com o alvo que obviamente é

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r_c^2} = E = \frac{\hbar^2}{2m} k_o^2 \qquad (39)$$

Então

$$k_o r_c = \sqrt{\ell(\ell+1)} \qquad (40)$$

Se para um dado ℓ e para uma dada energia incidente k_o, $r_c > r_o$, então não haverá espalhamento ou reação e neste caso $S_\ell = 1$ e $\sigma = 0$.

Se $r_c < r_o$ haverá interação e portanto a seção de choque será diferente de zero. Logo $\sigma \neq 0$ se

$$r_c < r_o \qquad \text{ou} \qquad k_o r_c < k_o r_o$$

e por (40) vem:

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} < k_o r_o \qquad (41)$$

O máximo valor de ℓ, ℓ_{max} é aquele para o qual

$$\sqrt{\ell_{max}\,(\ell_{max}+1)} = k_o r_o \qquad (42)$$

ou

$$\ell_{max} \gtrsim k_o r_o \qquad (43)$$

Assumimos a matriz de espalhamento S_ℓ da forma

$$S_\ell = e^{i\Delta\ell} \qquad (44)$$

onde $\Delta_\ell = \delta_\ell + i\,\beta_\ell$ e em particular nenhuma dependência com ℓ , isto é, $\Delta_\ell = \delta + i\beta$. Com isto

$$S_\ell = S = e^{i(\delta + i\beta)} = \rho\, e^{i\delta} \qquad (45)$$

onde $\rho = \exp(-\beta)$ e δ é a mudança de fase, devido ao potencial.

Nestas condições (30), (32), (33) e (35) se tornam

$$\sigma_{esp}(\theta) = \frac{1}{4k_0^2}(1+\rho^2-2\rho\cos\delta)\left|\sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \qquad (30')$$

$$\sigma_{esp} = \frac{\pi}{k_0^2}(1+\rho^2-2\rho\cos\delta)\sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}(2\ell+1) \qquad (32')$$

$$\sigma_R = \frac{\pi}{k_0^2}(1-\rho^2)\sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}(2\ell+1) \qquad (33')$$

$$\sigma_T = \sigma_{esp} + \sigma_R = \sigma_T = \frac{\pi}{k_o^2}(2-2\rho\cos\delta)\sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}(2\ell+1) \qquad (35')$$

Devemos notar que sendo $\ell_{max} = k_o r_o$ a soma indicada acima é dada por

$$\sum_{\ell=0}^{kr_0}(2\ell+1) = (1+k_o r_o)^2 \qquad (46)$$

Definindo a seção de choque do núcleo negro, σ_{BN} como o

$$\sigma_{BN} = 2\pi\left[r_0 + \frac{1}{k_0}\right]^2 \qquad (47)$$

obtemos

$$\sigma_{esp}(\theta) = \frac{1}{4k_o^2}(1+\rho^2-2\rho\cos\delta)\left|\sum_{\ell=0}^{\ell=kr_0}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \qquad (48)$$

$$\sigma_{esp} = \frac{1}{2}\sigma_{BN}(1+\rho^2-2\rho\cos\delta) \qquad (49)$$

$$\sigma_R = \frac{1}{2}\sigma_{BN}(1-\rho^2) \qquad (50)$$

$$\sigma_T = \sigma_{BN}(1-\rho\cos\delta) \qquad (51)$$

V - MODELO DO NÚCLEO COMPOSTO E SEÇÕES DE CHOQUE MÉDIA

Numa reação nuclear

$$a + A \rightarrow \text{algo} \tag{52}$$

uma possibilidade ainda não considerada é a da formação de um núcleo composto, isto é, com a colisão de a com o alvo A, há a criação de um estado intermediário excitado (a+A) (também chamado de núcleo composto c), o qual existe por um tempo consideravelmente maior que o tempo necessário para que a partícula atravesse a região do espaço acupado por A.

Se essa condição for satisfeita, antes do núcleo decair em pedaços b + B, ele está excitado como um todo, e não tem memória de como foi excitado.

Se um núcleo composto é formado ou não numa reação nuclear, depende muito da energia da partícula incidente. Podemos ter os casos seguintes:

(a) Núcleo Transparente - a partícula a passa pelo núcleo A sem reagir.

(b) Núcleo Preto - toda partícula que colide com A forma um núcleo composto.

(c) Reação Direta - a partícula a reage somente com uma parte de A.

A Fig. 12 abaixo, mostra uma esquematização das possíveis reações entre duas partículas, com formação de núcleo composto.

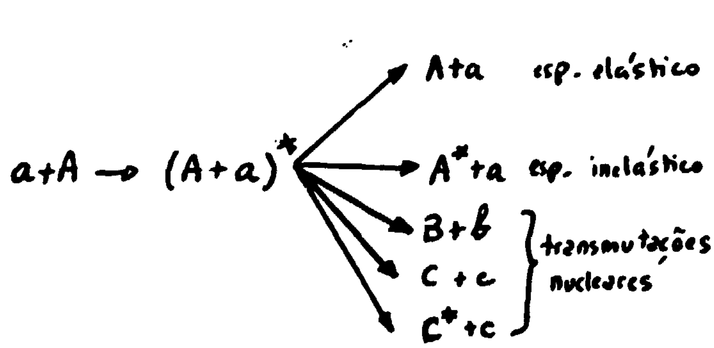


Fig. 12

Vamos separar a seção de choque total em seção de choque para espalhamento de potencial e seção de choque de reação. Sabemos que

$$\sigma_{esp} = \sum_{\ell=0} \sigma_{\ell,esp} \tag{53}$$

$$\sigma_{\ell,esp} = \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)|1-S_\ell|^2 \tag{54}$$

$$\sigma_R = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell,R} \tag{55}$$

$$\sigma_{\ell,R} = \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)(1-|S_\ell|)^2 \tag{56}$$

Faremos agora uma média sobre um intervalo de energia I, o qual deve ser pequeno, comparado com E, de tal forma que funções que variam lentamente com E como $\lambda\!\!\!^{-2}$ não se alterem quando fizermos a média sobre o intervalo E. Definimos:

$$\overline{S_\ell} = \frac{1}{I}\int_{E-\frac{I}{2}}^{E+\frac{I}{2}} S_\ell(E')\, dE' \tag{57}$$

e as seções de choque são:

$$\overline{\sigma_{\ell,Scat}} = \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ \overline{|1-S_\ell|^2} \tag{58}$$

$$\overline{\sigma_{\ell,R}} = \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ (1-\overline{|S_\ell|^2}) \tag{59}$$

a expressão para $\overline{\sigma_{\ell,Scat}}$ pode ser transformada

$$\begin{aligned}\overline{\sigma_{\ell,Scat}} &= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ \overline{(1-S_\ell-S_\ell^*+|S_\ell|^2)} \\ &= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ (1-\overline{S_\ell}-\overline{S_\ell^*}+\overline{S_\ell^2}\ )\end{aligned} \tag{60}$$

como

$$|1-\overline{S_\ell}|^2 = 1-\overline{S_\ell}-\overline{S_\ell^*}+|\overline{S_\ell}|^2 \tag{61}$$

$$\begin{aligned}\overline{\sigma_{\ell,Scat}} &= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ (|1-\overline{S_\ell}|^2-|\overline{S_\ell}|^2+\overline{|S_\ell|^2}) \\ &= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)|1-\overline{S_\ell}|^2+\pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell+1)\ (\overline{|S_\ell|^2}-|\overline{n_\ell}|^2) \\ &= (\overline{\sigma_{\ell,Scat}})_{pot}+(\overline{\sigma_{\ell,Scat}})_{res}\end{aligned} \tag{62}$$

A seção de choque de espalhamento com formação de núcleo composto é somada à seção de choque de reação para obtermos a seção de choque para a formação do núcleo composto $\sigma_{\ell,c}$.

$$\overline{\sigma_{\ell,c}} = \overline{\sigma_{\ell,R}} + \overline{(\sigma_{\ell,scat})}$$

$$= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell + 1(1 - |\overline{S_\ell}|^2)) \qquad (63)$$

A seção de choque total média é

$$\overline{\sigma_{\ell,tot}} = \overline{\sigma_{\ell,scat}} + \overline{\sigma_{\ell,R}}$$

$$= \pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell + 1)(2 - \overline{S_\ell^*} - \overline{S_\ell})$$

$$= 2\pi\lambda\!\!\!^{-2}(2\ell + 1)\left[1 - R_e(\overline{S_\ell})\right] \qquad (64)$$

A Figura 13 apresenta um diagrama ilustrativo dos vários tipos de seção de choque.

Nela está incluído o fato que as reações também podem passar sem a formação do núcleo composto.

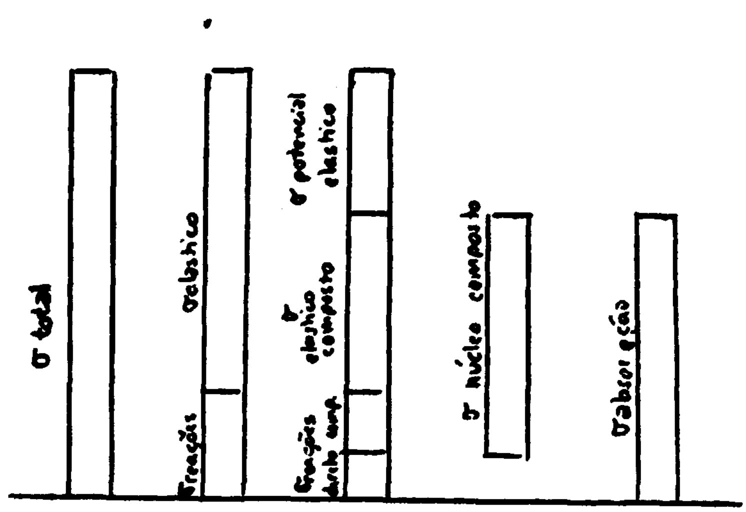


Fig. 13 - Diagrama ilustrativo dos vários tipos de seção de choque.

A Fig. 14 nos dá uma visão total dos processos que ocorrem na reação de duas partículas a e A.

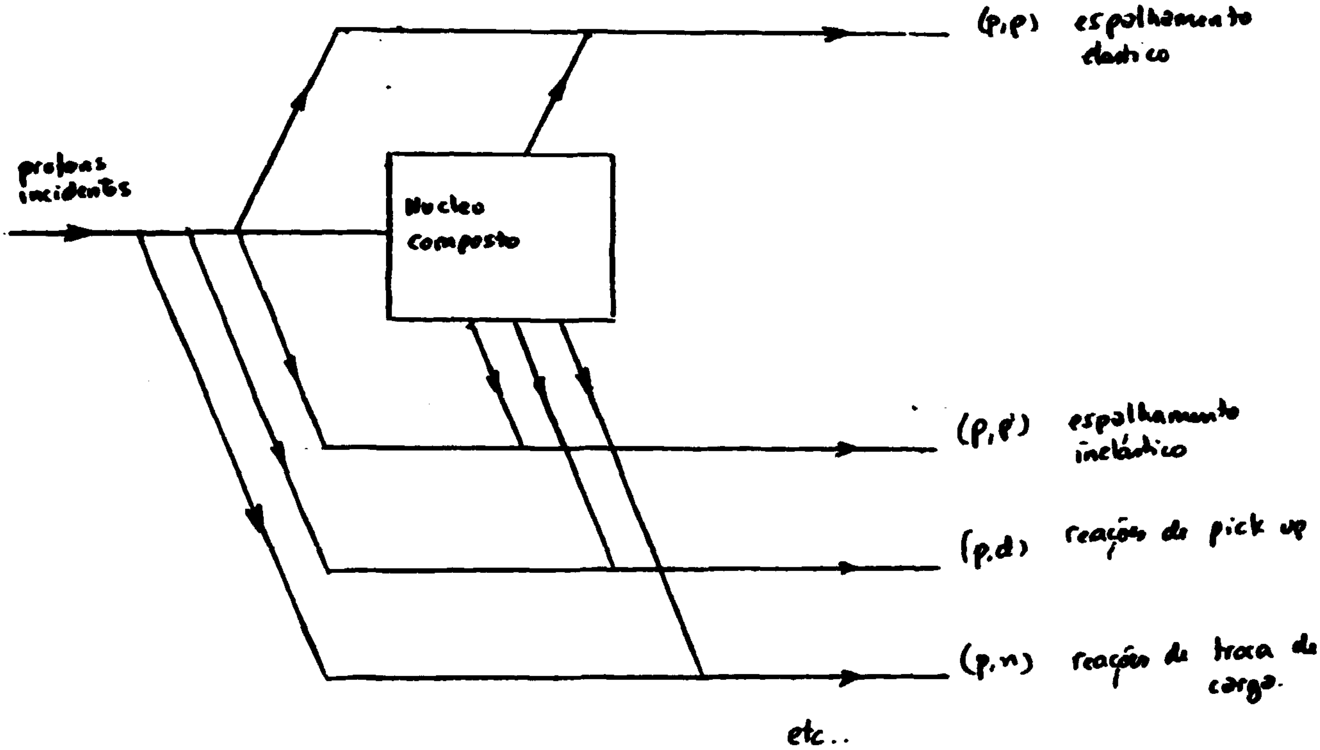


Fig. 14 - Processos diretos e compostos nas reações nucleares.

Esta Figura pode ser considerada como o efeito combinado dos processos esquematizados nas Figuras 11 e 12. Em outras palavras ela diz que todos os canais abertos de uma reação podem ser atingidos via formação de núcleo composto ou diretamente.

A Fig. 15 mostra o efeito que isto pode acarretar, por exemplo, numa seção de choque diferencial elástica. O efeito da formação do núcleo composto tem portanto de ser levado em conta no cálculo das seções de choque elástico.

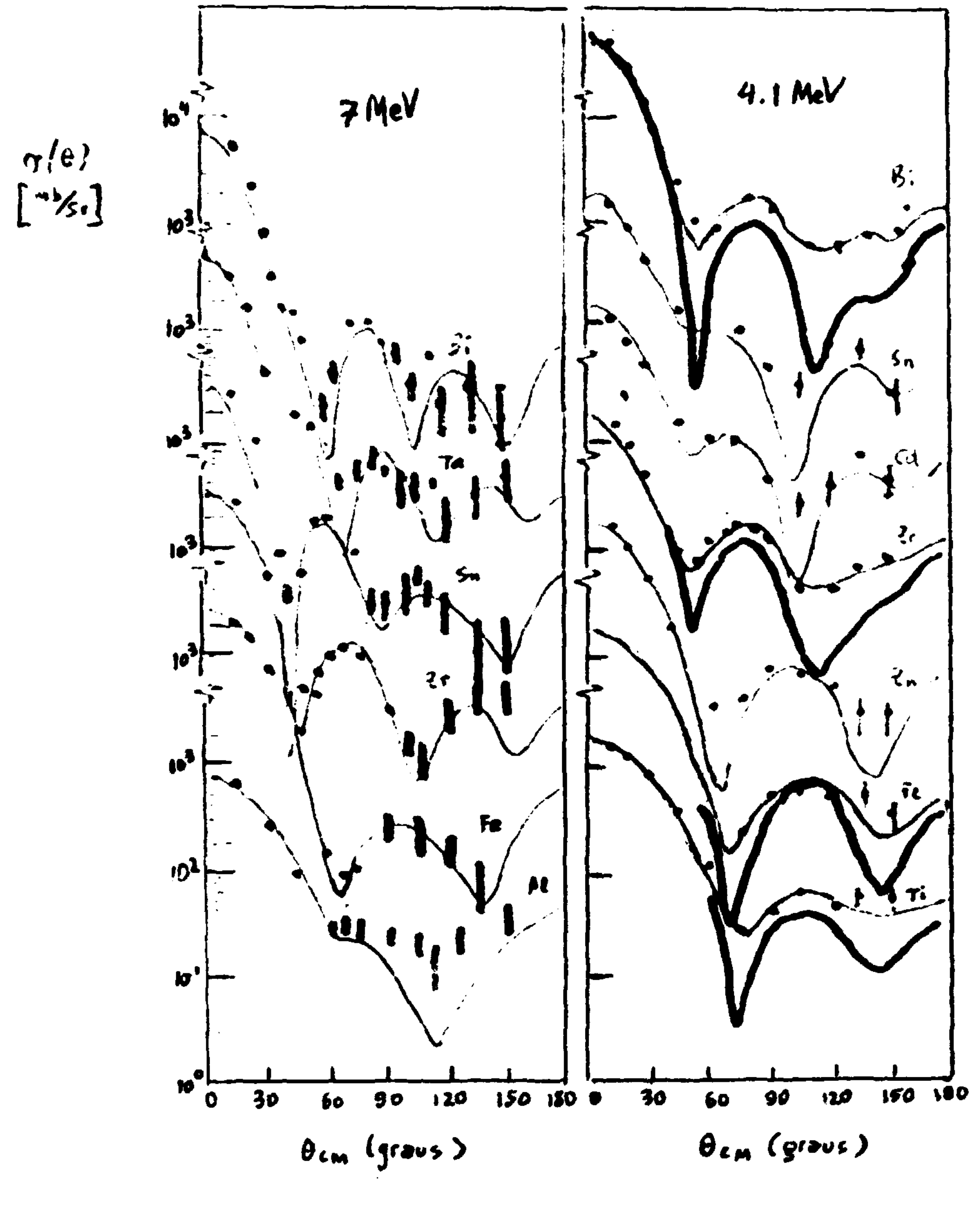


Fig. 15 - Comparação das predições do modelo ótico não local, independente de energia, com os resultados experimentais para as seções de choque diferenciais elásticas para nêutrons com energias 4.1 MeV e 7 MeV. Dados tomados da Ref. /7,21/. Algumas das curvas de espalhamento elástico de potencial (em verde, na figura) foram corrigidas com as contribuições elásticas compostas (na figura, em azul).

VI - MODELO ÓTICO E RESULTADOS OBTIDOS COM O MODELO ÓTICO

a - Modelo Ótico

Consideramos agora o cálculo das seções de choque usando um potencial complexo.

$$\begin{cases} V = - V_0(1 + i\xi) & r < R \\ V = 0 & r > R \end{cases} \qquad (65)$$

Para $\xi = 0$ o potencial é real e descreve o espalhamento potencial puro. Para $\xi \neq 0$ a possibilidade de absorção passa a existir, e com ela a formação do núcleo composto. Em geral ξ dependerá da energia.

b - Resultados obtidos com o Modelo Ótico

As Figuras 16 e 17 mostram as seções de choque totais para nêutron, em função da energia e do número de massa do núcleo alvo.

Esses cálculos foram feitos usando-se o seguinte potencial:

$$V = V_0 + iV_1$$

$$V_0 = \begin{cases} -U & r < R \\ 0 & r > 0 \end{cases}$$

$$V_1 = \xi V_0$$

Na Figura 16 usou-se o valor $\xi = 0{,}03$, ao passo que na Figura 17 a parte imaginária do potencial foi aumentada para $\xi = 0.05$ /8/.

É interessante compararmos esse resultado com os dados experimentais, mostrados na Figura 6.

Os detalhes desses cálculos são bastante complexos, e serão descritos em outro relatório. Para uma discussão desse tipo de cálculo, bem como refinamentos introduzidos no potencial acima, veja as Referências /R2, R3, R4, R5/.

Para finalizar essa breve discussão de resultados que podem ser obtidos com o modelo ótico, consideremos a Figura 18. Esta mostra os resultados de um outro cálculo /9/ que ilustram bem os problemas que devem ser levados em conta, no tratamento do espalhamento de nêutrons em núcleos alvos pesados.

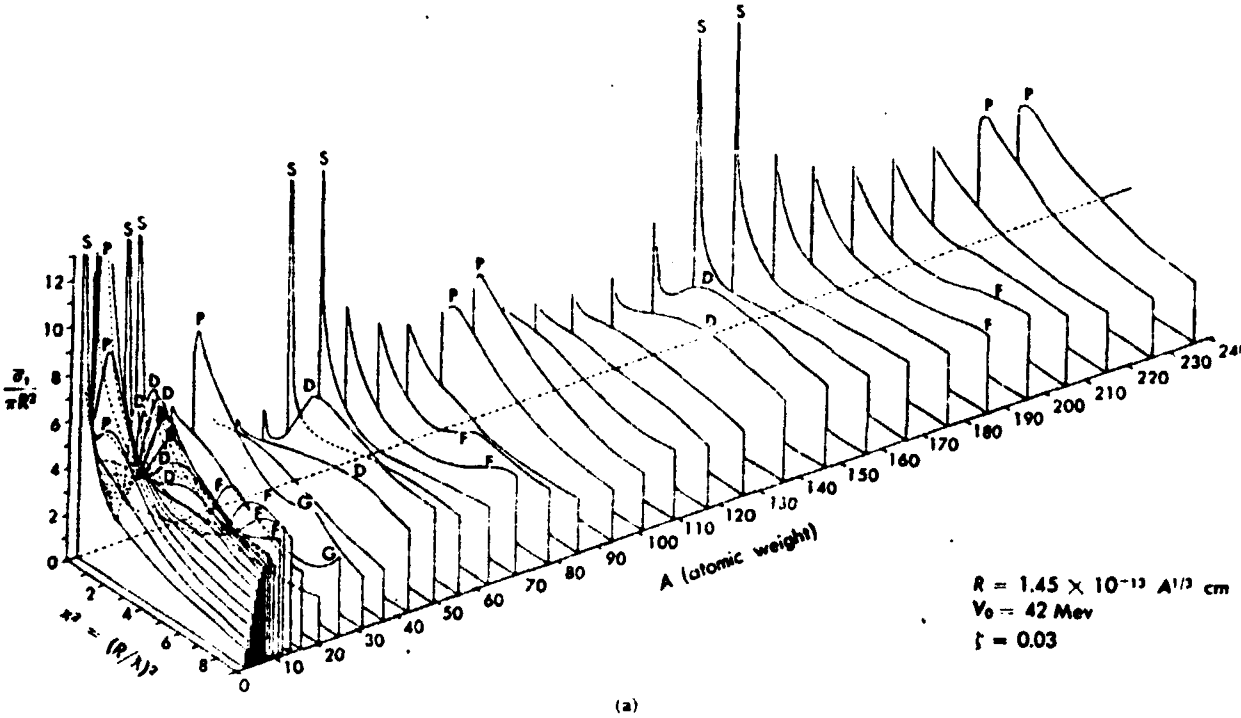


Fig. 16 - Seção de choque total para nêutrons em função da energia e do número de massa para um poço de potencial

$V = V_0 + V_1$; $V_1 = \xi V_0$ para $V_0 = 42$ MeV

$V_0 = \begin{cases} -U & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases}$ $R = 1.45 \times 10^{-13} A^{1/3}$ cm

$\xi = 0.03$

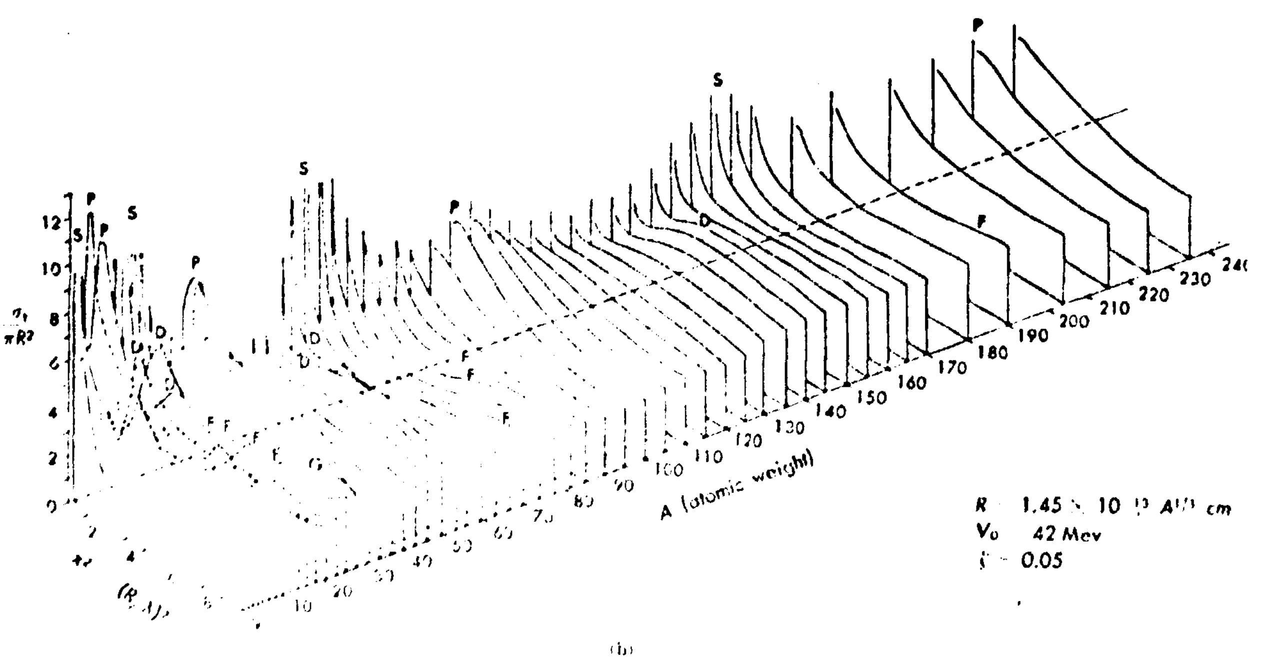


Fig. 17 - Seção de choque total para nêutrons em função da energia e do número de massa para um poço de potencial

$V = V_0 + V_1$; $V_1 = \xi V_0$ para $V_0 = 42$ MeV

$V_0 = \begin{cases} -U & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases}$ $R = 1,45 \times 10^{-13} A^{1/3}$ cm

$\xi = 0.05$

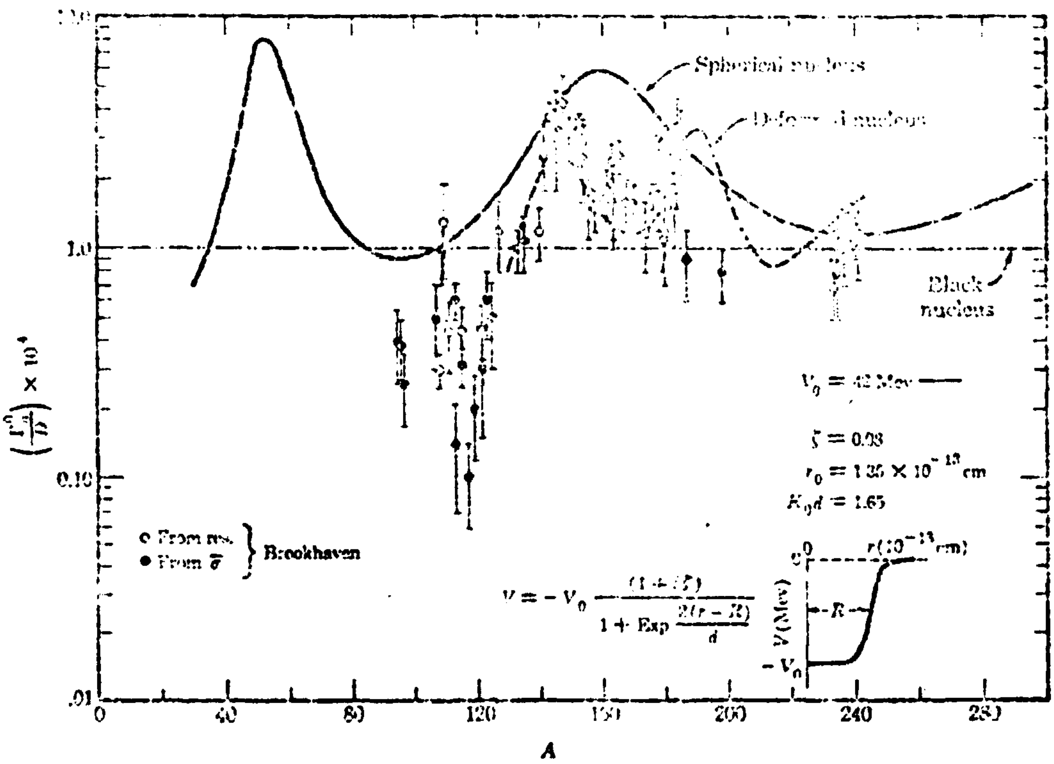


Fig. 18

Na Figura está plotado $\frac{\Gamma_n^0}{D} \times 10^4$ contra o número de massa para núcleos pesados /9/. A seção de choque para formação do núcleo composto é:

$$, = \frac{2\pi^2}{k^2}\left\langle\frac{\Gamma\alpha}{D}\right\rangle \qquad (66)$$

$$\frac{\Gamma\alpha}{D} = \frac{1}{\pi}\,\frac{\Gamma n^{(o)}\left(\frac{1}{2}\,\Gamma n^{(o)} + W\right)}{(E-\varepsilon n)^2 + \left(\frac{1}{2}\,\Gamma n^{(o)} + W\right)^2} \qquad (67)$$

Podemos concluir que os cálculos usando esse modelo ótico deformado dão resultados muito melhores para as seções de choque de formação de núcleo composto.

VII - DESCRIÇÃO SEMICLÁSSICA DA SEÇÃO DE CHOQUE PARA NÊUTRONS RÁPIDOS

Os cálculos das seções de choque de espalhamento de nêutrons podem ser feitos usando-se o modelo ótico. Esses cálculos podem ser feitos para núcleos esféricos /10/, existindo vários programas de computador para tal /11/, bem como para núcleos deformados /12/, para os quais vários métodos de abordagem e respectivos programas já foram desenvolvidos /13/.

Entretanto, além de serem bastante complexos sob o ponto de vista matemático, esses cálculos são feitos com computadores, usando-se programas bastante lentos. Para objetivos de engenharia torna-se mistér uma parametrização das seções de choque, que torne seu cálculo mais simples e rápido.

Numa série de artigos Angeli, Csikai e Nagy, /2,3,4/, fizeram uma previsão semiclássica da seção de choque para nêutrons com energia de 14 MeV, incidindo sob núcleos com diferentes números de massa A.

Eles obtiveram uma expressão empírica para a seção de choque total, è energia de 14 MeV, em função do número de massa A, que reproduzia os resultados experimentais, /10/, de uma maneira relativamente boa, especialmente para os núcleos pesados. Os dados experimentais mostram que a seção de choque total varia com o número de massa A da forma cossenoidal, isto é, dependendo de cos $A^{1/3}$, principalmente para os núcleos em que A>10. Vide Figura 19.

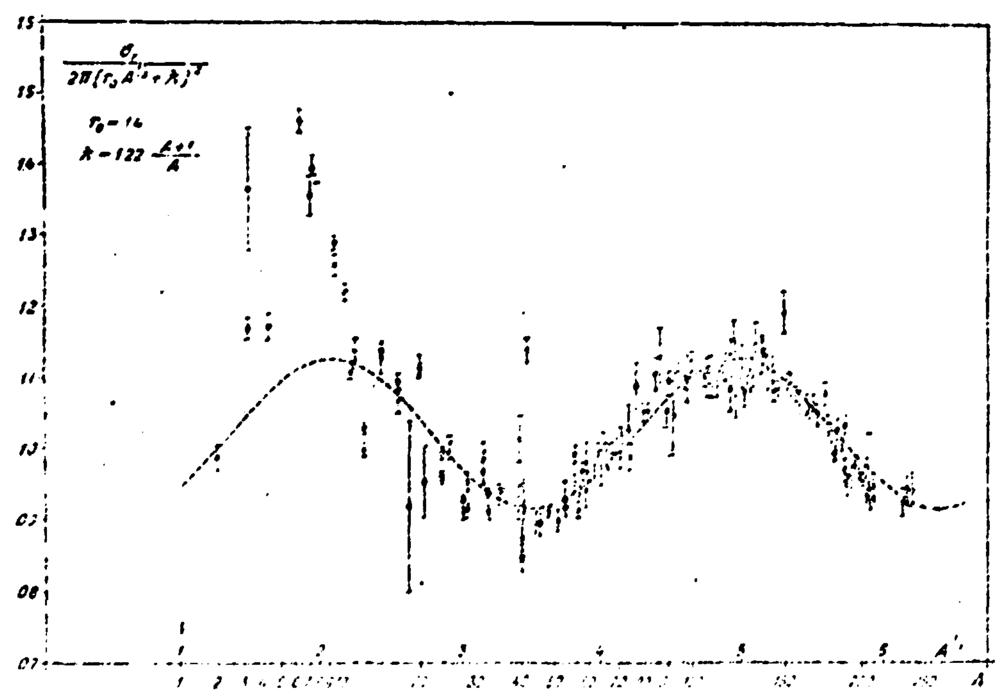


Fig. 19

A expressão empírica da seção de choque total, obtida pelos autores citados, e que fornece resultados compatíveis com os dados experimentais é da forma:

$$\sigma_T = \sigma_{BN} \left[1.02 - 0.104 \cos (2.18\ A^{1/3} - 1.25) \right] \qquad (68)$$

para a energia de 14 MeV. Na Figura 19 a expressão (68) é plotada em linha pontilhada.

Na verdade, em face dos resultados teóricos da teoria geral do espalhamento, expressos pelas equações (48-51), observamos que a seção de choque, em geral, depende de cos δ, onde δ é a parte real da mudança de fase da onda espalhada em relação a onda incidente, devido a presença do núcleo (ou do potencial). Seria interessante poder elaborar um modelo teórico e através dele mostrar que esta diferença de fase varia de núcleo para núcleo e que depende do núcleo considerado através da expressão $A^{1/3}$, onde A é o número de massa.

Os autores mencionados assim procederam e mostraram que é possível elaborar um modelo teórico para o núcleo, tal que seja permitido obter a mudança de fase Δ_ℓ da equação (44) e com isto obter não só δ_ℓ como β_ℓ, e portanto detrminar também ρ_ℓ. Com isto, uma justificativa teórica, através deste modelo, foi obtida para a expressão empírica (68) da seção de choque.

A interpretação física da expressão empírica (68) pode ser obtida através do efeito de Ramsauer, modelo este discutido por Peterson, /14/.

Consideremos o núcleo de número de massa A como um poço de potencial esférico de raio R. Seja k_o o número de onda do feixe de nêutrons incidente e k_i o número de onda do feixe dentro do poço de potencial, conforme Figura 20.

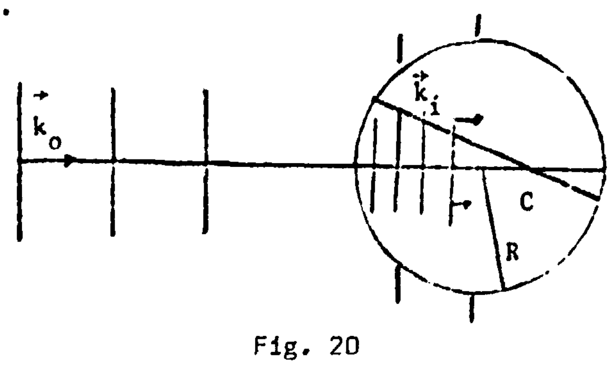


Fig. 20

A diferença de fase entre uma onda que atravessa o núcleo, seguindo a corda C da esfera, e outra onda que percorre a mesma distância mas sem a presença do núcleo seria

$$\delta' = k_i C - k_o C = k_o C \left(\frac{k_i}{k_o} - 1\right) \qquad (69)$$

Sendo a esfera igualmente "iluminada" pelo feixe incidente, podemos afirmar que a diferença média de fase entre as ondas que atravessam o núcleo e as que o contornam é dada por

$$\delta = \delta' = (k_i - k_o)\,\overline{C} = k_o \overline{C}\left(\frac{k_i}{k_o} - 1\right) \qquad (70)$$

onde $\overline{C}$ é o valor médio da corda através de uma esfera. Para determinar $\overline{C}$, considere um raio incidindo em O na direção marcada na Fig.21, à distância s do eixo. Seja $\overline{OC}$ a

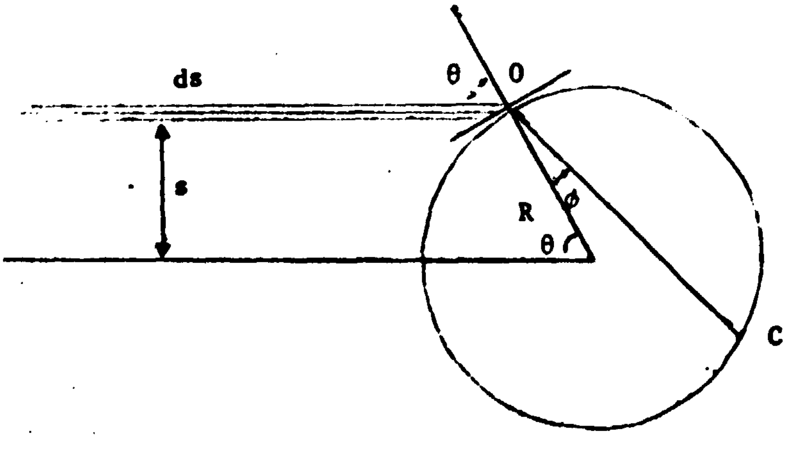


Fig. 21

corda correspondente e seja n o índice de refração do meio representado pelo núcleo. É fácil ver que $\overline{OC} = 2R\cos\phi$ e que $s = R\,\text{sen}\,\theta$. Mas sendo $n\,\text{sen}\,\phi = \text{sen}\,\theta$, obtemos que $s = Rn\,\text{sen}\,\phi$. Então

$$\overline{OC} = 2R\,(1 - \text{sen}^2\phi) = \frac{2}{n}\,(n^2 R^2 - s^2) \qquad (71)$$

Portanto, há uma relação entre a distância s e o comprimento da corda, para um dado núcleo, e podemos dizer que todo raio incidente dentro do anel $2\pi s ds$ corresponde a uma corda de comprimento $\overline{OC}$ dada pela equação (71). Nestas condições, o valor médio da corda $\overline{C}$, será

$$\overline{C} = \frac{1}{\text{área}} \int_{\substack{\text{todos valores}\\ \text{possíveis de}\\ s.}} \overline{OC}\; 2\pi s ds \tag{72}$$

Sendo a área varrida por s igual a πR^2, e utilizando a equação (71), obtemos

$$\overline{C} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R 2\pi \frac{2}{n} (n^2 R^2 - s^2)^{1/2} \; sds = \frac{4R}{3} n^2 \left[1 - (1 - \frac{1}{n^2})^{3/2}\right] \tag{73}$$

Com isto, a diferença de fase média entre o feixe que sente o núcleo e o feixe que não o sente é

$$\delta = \frac{4}{3} n^2 (n-1) \left[1 - (1 - \frac{1}{n^2})^{3/2}\right] R\, k_o \tag{74}$$

onde, lembramos que

$$\frac{k_i}{k_o} = n = \sqrt{\frac{E + V_o}{E}} = \sqrt{1 + \frac{V_o}{E}} \tag{75}$$

Escrevendo $R = r_o A^{1/3}$, obtemos

$$\delta = q A^{1/3} \tag{76}$$

onde

$$q = \frac{4 r_o}{3} n^2 (n-1) \left[1 - (1 - \frac{1}{n^2})^{3/2}\right] k_o \tag{77}$$

O modelo apresentado, sintetizado pela expressão (76), apesar da dependência desejada com o número de massa, $A^{1/3}$, ainda deixa a desejar quanto à defasagem que se verifica na expressão (68), sendo lá, de 1,25. A existência desta defasagem poderá ser explicada, introduzindo uma pequena modificação no modelo considerado, modificação esta que consiste em considerar o núcleo como um poço de potencial esférico, com uma película superficial, de espessura t onde o índice de refração médio é $\overline{n}$, diferente de n, sendo $\overline{n}$ o índice de refração na região R - t restante. No fundo, isto equivale a considerar um modelo de potencial não quadrado, mas na forma trapezoidal, conforme Figura 22.

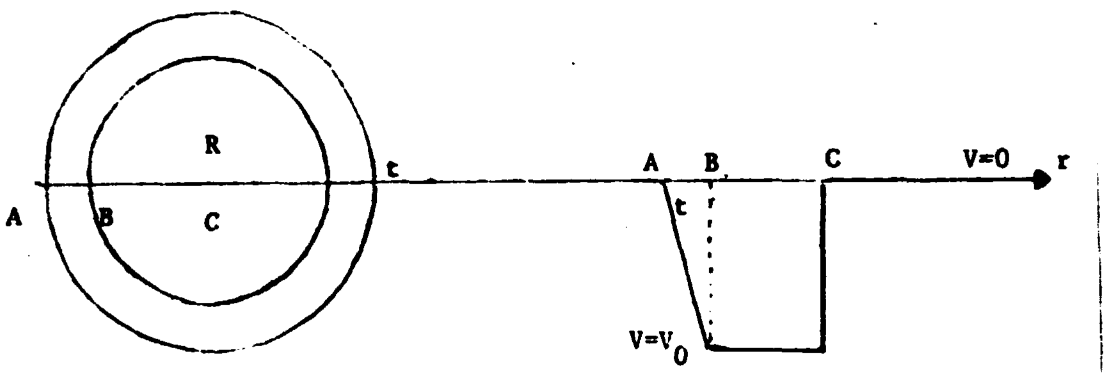


Fig. 22

Seja $\bar{n}$ o índice de refração médio na capa de espessura t e seja n o índice de refração no volume restante. Com isto, a expressão (70), para a diferença de fase entre as ondas que sentem o potencial e aquelas que o contornam, sofre algumas modificações. O comprimento médio da corda agora associado ao índice de refração n é $\bar{C} - 2t$, enquanto que a distância 2t é percorrida pela onda num índice de refração $\bar{n}$ e produz uma diferença de fase $(\bar{n} - 1)k_0\, 2t$. Portanto, a defasagem modificada será

$$\delta^* = k_0\ (n-1)(\bar{C} - 2t) + k_0(\bar{n} - 1)2t$$

$$\delta^* = \delta + k_0\, 2t\,(\bar{n} - n) = q\,A^{1/3} - r \tag{78}$$

onde q é o mesmo de (77) e o parâmetro r é definido por

$$r = 2t(n - \bar{n})\ k_0 \tag{79}$$

Em resumo, podemos dizer que através do formalismo da teoria do espalhamento da Mecânica Quântica, obtemos para a seção de choque elástica integral a expressão (49), isto é:

$$\sigma_{esp} = \frac{1}{2}\,\sigma_{BN}(1 + \rho^2 - 2\rho\cos\delta)$$

e usando , assim como obtido em (78), δ^*, vem

$$\sigma_{esp} = \frac{1}{2}\sigma_{BN}\left[1 + \rho^2 - 2\rho\cos(q A^{1/3} - r)\right] \tag{80}$$

Pela análise da Fig.19, e tendo em conta que

$$q(A_2 - A_1) = 2\pi \tag{81}$$

onde A_2 e A_1 são os valores de $A^{1/3}$ que dão σ_T máximo, e que pelo gráfico experimental $A_2 - A_1 \approx 2.88$, vem que $q = \frac{2\pi}{2.88} \approx 2.18$ quando a energia é 14 MeV.

Com este valor empírico do parâmetro q pode-se fazer uma avaliação do índice de refração n e portanto da profundidade do potencial V_0 da Figura 22 para a energia de 14 MeV. Para tal, vamos fixar $r_0 = 1.4$ fm. Em seguida, devemos calcular o número de onda k_0 em termos da energia incidente dos nêutrons.

Considere um nêutron de energia E, incidindo num núcleo de número de massa A em repouso. Queremos a energia E_0 do sistema no C.M. Pode-se mostrar que $E_0 = \frac{A}{1+A}E$ onde E é a energia no LAB. Então

$$\frac{\hbar^2}{2m}k_0^2 = \frac{A}{1+A}E \quad \text{ou} \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\left(\frac{A}{1+A}\right) = \frac{1}{\lambda^2} \tag{82}$$

Daí segue que:

$$\frac{1}{k_0} = \sqrt{\frac{1+A}{A}}\ \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = 1,22\left(\frac{1+A}{A}\right)^{1/2}\text{fm} \tag{83}$$

Substituindo esta valor em (77) obtemos o índice de refração $n \approx 2,015$ para a energia incidente de 14 MeV. De (75) obtemos a profundidade de V_0 do poço de potencial, que nos dá $V_0 = (n^2 - 1)E \approx 42,8$ MeV.

Da Figura 19 obtemos o valor da amplitude de oscilação $\rho \approx 0,1$. Do mesmo gráfico e considerando o valor de (79) para $A^{1/3} = 0$, obtemos o valor empírico de r. Este valor é da ordem de $r \approx 1,25$.

O valor do parâmetro r nos permite calcular o parâmetro t, a largura da capa esférica da Fig.22, se conhecermos o índice de refração $\bar{n}$ nesta região. Para tal, imaginamos que o potencial cai linearmente do valor $V = 0$ a $V = V_0$ quando $r = r_A$ até $r = r_B$ na Fig.22 ($r_B - r_A = t$). Portanto na região $r_A < r < r_B$ temos que $V = V(r) = \alpha + \beta r$ onde α e β são constantes. Mas para $r = r_A$, $V(r_A) = 0$. Logo $\alpha = -\beta r_A$. Para $r = r_B$, $V(r_B) = V_0$ então $\alpha = V_0 - \beta r_B$. Com isto, igualando as expressões de α, obtemos que $\beta = \frac{V_0}{t}$.

Então

$$V(r) = -\frac{V_0}{t} r_A + \frac{V_0}{t} r \tag{84}$$

e o primeiro termo da expressão acima pode ser tomado como sendo nulo, isto é, $r_A = 0$. Da expressão (75) vem que

$$n(r) = \sqrt{1 + \frac{V(r)}{E}} = \sqrt{1 + \frac{V_0}{tE} r} \tag{85}$$

Para calcular o índice de refração médio na região t basta considerar

$$\bar{n} = \frac{1}{t} \int_0^t n(r) dr = \frac{1}{t} \int_0^t \sqrt{1 + \frac{V_0}{Et} r}\, dr = \frac{2}{3} \left[\frac{Et}{V_0} \left(1 + \frac{V_0}{E}\right)^{3/2} - 1 \right]$$

$$= \frac{2}{3} \left(\frac{n^3-1}{n^2-1} \right) \tag{86}$$

onde usamos na última passagem a expressão (75).

Portanto $\bar{n}$ é determinado à partir de n e para o valor $n \approx 2{,}015$, obtemos $\bar{n}$ e daí o valor de t através de (79). Para a energia de 14 MeV este valor é $t \approx 1.7$ fm.

VIII- APLICAÇÃO DO MODELO SEMICLÁSSICO PARA OUTROS NÚCLEOS E OUTRAS ENERGIAS

Pelo que se viu nas páginas anteriores, a seção de choque elástica diferencial, a integral, a seção de choque total, e a seção de choque não elástica, podem ser determinadas por expressões relativamente simples, dependendo do número de massa A na forma $\cos(qA^{1/3})$, expressões estas que dão resultados relativamente bons para núcleos pesados e energia incidente da ordem de 14 MeV.

Atendo-se, inicialmente, ao caso da seção de choque elástica diferecial, e tendo em conta o modelo de Feterson /14/, é fácil ver que a equação(30') pode ser escrita na forma

$$\sigma_{Esp}(\theta) = \frac{1}{4k_0^2}\left[a + p^2 - 2p\cos(qA^{1/3} - r)\right]\left|\sum_{\ell=0}^{\ell_{Max}}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\right|^2 \qquad (87)$$

onde os parâmetros a, p, q e r dependem da energia e possuem os valores dados em (66) para E = 14 MeV.

Angeli e Csikai de posse de dados experimentais da seção de choque total para as diversas energias incidentes (E = 1,4,8.6,17.8,28.4 e 42 MeV) ajustaram os parâmetros da expressão (87) para que esta expressão teórica reproduzisse os dados experimentais. Com isto eles obtiveram, de uma forma empírica, a variação dos parâmetros a, p, q e r com a energia incidente. O resultado obtido por eles aparece na Figura 23a, b e c.

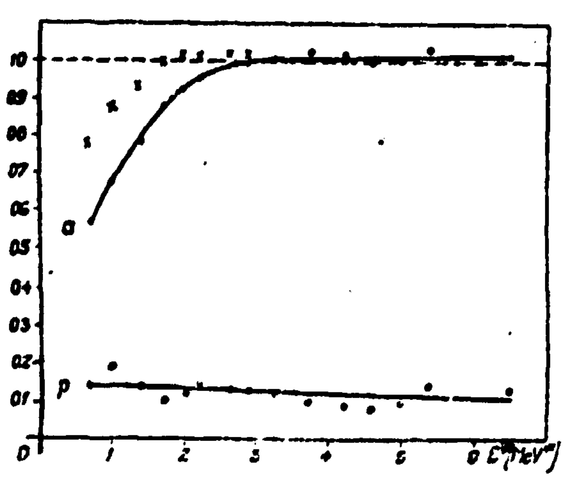


Figura 23a

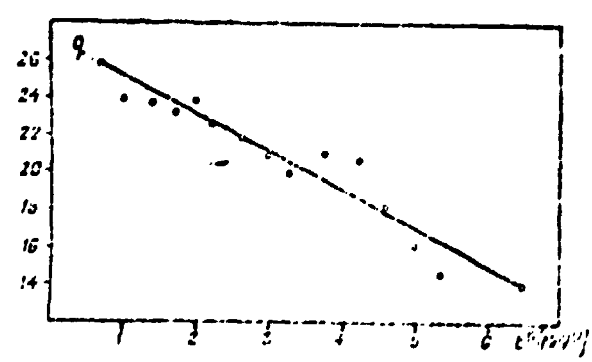


Figura 23b

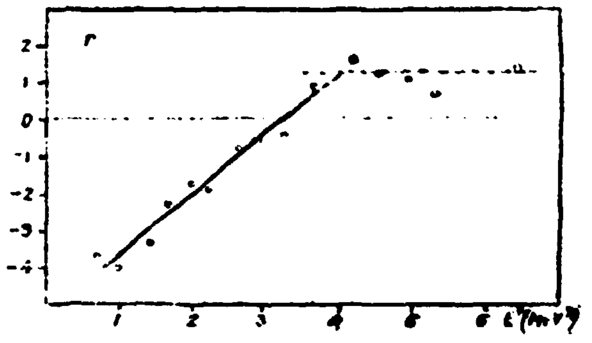


Figura 23c

Com isto, em princípio, se tem uma maneira de calcular as várias seções de choque para os vários núcleos a diversas energias, numa forma extremamente simples.

Um programa de computação foi elaborado para calcular a expressão (87) para alguns núcleos (A = 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,20,30,40,233, 235, 238,239) e para energias indo de E = 1 até E = 45 MeV e para o ângulo θ desde 0 até 180°.

Inicialmente, estabeleceu-se expressões algébricas para a variação dos parâmetros a, p, q e r em termos da energia $E^{1/2}$, $(x = E^{1/2})$, conforme se segue:

$$
\begin{aligned}
a(x) &= .24x + .44 && \text{para} \quad 0 < x < 2 \\
a(x) &= .08x + .76 && \text{para} \quad 2 < x < 3 \\
a(x) &= 1 && \text{para} \quad x > 3 \\
p(x) &= .1 && \text{para todo } x \\
q(x) &= -.2x + \frac{10.8}{4} && \text{para todo } x \\
r(x) &= \frac{4.75}{3}x - \frac{15.25}{3} && \text{para} \quad 0 < x < 4 \\
r(x) &= 1.25 && \text{para} \quad x > 4
\end{aligned}
\qquad (88)
$$

Em seguida, calculou-se o valor de ℓ_{Max} que aparece na equação (87). Este ℓ_{Max} é o mesmo que aparece em (42) ou (43) e depende, pois, da energia do nêutron incidente, na forma

$$
\ell_{Max} \approx k_o r_o = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \sqrt{\frac{A}{1+A}}\, r_o \qquad (89)
$$

O parâmetro característico do raio nuclear r_o foi considerado por Angeli e Csikai como dependentes do número de massa A na forma empírica

$$r_o = 1.21 + 4.0\ A^{-2/3} - 15\ A^{-4/3} \qquad (90)$$

Alguns valores típicos de r_o para certos núcleos pesados estão na Tabela I.

Tabela I

A	232	233	235	238	239
r_o(em fm)	1.305	1.305	1.304	1.303	1.303

Os valores de ℓ_{Max} para as várias energias com o valor obtido para r_o acima são apresentados na Tabela II para o caso de A=235.

Tabela II

E(MeV)	5	10	15	20	25	30	35	40	45
ℓ_{Max}	3.944	5.577	6.831	7.888	8.819	9.660	10.434	11.155	11.832

Como os valores de ℓ_{Max} não são números inteiros, usou-se o seguinte esquema para interpolar os valores dos polinômios de Legendre quando ℓ_{Max} contém uma parte fracionária. Considerando L como o maior inteiro contido em ℓ_{Max} e f a sua parte fracionária, então a soma na expressão (87) fica

$$\sum_{\ell=0}^{\ell_{Max}} (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta) = \sum_{\ell=0}^{L} (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta) + \left[(2L+1)+f\right] fP_{L+1}(\cos\theta) \qquad (91)$$

onde o polinômio de ordem L+1 entra no cômputo geral não com um peso (2L+1), mas com um coeficiente que depende da parte fracionária f e dado pela expressão acima.

Com isto os resultados para seção de choque elástica, para energia indo de 5 até 30 MeV e para A = 235 e A = 232 foi obtida numericamente para θ variando de 0 até 180° e em seguida plotada nas Figuras 24a até 24f e 25a até 25f, respectivamente. Os dados experimentais da se ção de choque elástica para A = 235 neste intervalo de energia, não são fáceis de serem conseguidos na literatura, e portanto não são plotados para efeito de comparação com os resultados teóricos.

Entretanto, Buccino, Hollandsworth e Bevington, /15/, apresentam resultados experimentais para a seção de choque elástica diferencial do Tório e do Urânio natural, para energia incidente de 5 MeV. Na Tabela III, os resultados experimentais e os resultados teóricos oriundos do modelo quase clássico, são apresentados para a seção de choque elástica diferencial destes materiais em *unidades mb/sr*.

Tabela III

Ângulo em°	20°	30°	40°	50°	60°	70°	80°	90°	100°	110°	120°	130°	140°
Th-232 (EXP.)	3390	1550	333	59	117	138	190	139	54	46	49	75	92
Th-232 (Teórico)	2735	845	56.5	45	129	63.5	0,77	26	45.9	14.7	2.1	31.5	34.9
U-238 (EXP.)	1950	972	254	69	130	149	162	97	50	56	62	80	90
U-238 (Teórico)	2798	851	54.5	50.7	136	64	0.41	30	49.6	14.7	2.98	26.3	38.7

A discrepância é acentuada para alguns valores do ângulo e isto acontece com o modelo para os núcleos pesados. Para núcleos intermediários o modelo apresenta resultados satisfatórios, conforme se pode observar nos resultados obtidos por Angeli e Csikai. Num aspecto, entretanto, o modelo apresenta bons resultados e isto no que diz respeito à previsão de picos na seção de choque, embora os valores dos picos em si não estejam compatíveis com os resultados experimentais.

A conclusão a que se chega é que este modelo semiclássico é útil para *fazer* previsões relativamente grosseiras da seção de choque diferencial para nêutrons incidindo em núcleos com número de massa A indo desde calores intermediários até altos valores. Definitivamente o modelo não serve para os núcleos leves, conforme se vê na Figura 19. Havendo necessidade de um conhecimento mais detalhado e cuidadoso da seção de choque elástica diferencial, então outro modelo deve ser procurado.

Para o cálculo da seção de choque elástica integral, de reação, e seção de choque total, através das equações (49), (50) e (51), utilizamos os mesmos valores dos parâmetros a, p, q e r, assim como dados por equação (88). Neste cálculo foi utilizado o valor de 1.4 fm para o parâmetro característico do raio nuclear r_0. O programa foi elaborado para energias indo de 1 até 45 MeV para os núcleos de número de massa A = 1,2,3,4,5,6,7, 8, 9,10,20,30,40,232,233,235,238 e 239. Na Tabela IV os resultados para A=235 são apresentados. As seções de choque que aparecem na tabela, todas em barns, são as seguintes:

- σ_{Esp} é a seção de choque elástica integral, dada por equação (49), onde devemos fazer as identificações de 1 com o parâmetro a, de ρ e de δ com a expressão (78), isto é, $\delta = qA^{1/3} - r$;
- σ_R é a seção de choque de reação dada por equação (50) com as mesmas identificações dos parâmetros como feitas acima.
- σ_T é a seção de choque total, isto é, $\sigma_{Esp} + \sigma_R$. O comportamento oscilatório de σ_T é idêntico ao comportamento de σ_{Esp}, visto que σ_R não oscila com $A^{1/3}$;
- σ_F é a seção de choque de reação obtida por Flerov e Talizin /16/, ou seja $\sigma_R = \pi(1.2\ A^{1/3} + 2.1)^2$, e que naturalmente apresenta os mesmos valores para qualquer energia.

ENERGIA (MeV)	σ_{Esp}	σ_R	σ_T	σ_F
1	2.68	3.66	6.35	2.83
2	3.08	3.40	6.48	2.83
3	3.77	3.37	7.15	2.83
4	4.17	3.41	7.58	2.83
5	4.09	3.32	7.42	2.83
10	2.60	3.16	5.77	2.83
11	2.56	3.11	5.68	2.83
12	2.62	3.08	5.70	2.83
13	2.76	3.05	5.82	2.83
14	2.95	3.02	5.98	2.83
15	3.15	2.99	6.15	2.83
20	3.48	2.90	6.38	2.83
21	3.49	2.88	6.38	2.83
22	3.50	2.87	6.37	2.83
23	3.49	2.86	6.35	2.83
24	3.48	2.84	6.33	2.83
25	3.45	2.83	6.29	2.83
30	3.25	2.79	6.04	2.83
35	2.95	2.75	5.70	2.83
40	2.64	2.72	5.37	2.83
45	2.39	2.70	5.09	2.83

Tabela IV - Seções de choque: elástica integral σ_{Esp}, não elástica σ_R, total σ_T e de Flerov,/16/, σ_F em barns para A = 235.

Os resultados experimentais encontrados na literatura foram os obtidos por Hudson, Walker e Berko, /17/, que estão na Tabela V, onde a seção de choque elástica integral foi medida para o Torio e Urânio natural, para energias incidentes de 15.2 MeV. Na Tabela V aparece também o resultado teórico de Bjorklund e Fernbach /18/ onde um potencial ótico foi utilizado para a obtenção das seções de choque.

Tabela V

Elemento	σ Esp Experimental	σ Esp Modelo Utilizado
Th	3.13 ± 0.25	3.15
U	3.21 ± 0.24	3.14

Pela tabela, se vê que o modelo semiclássico utilizado realmente apresenta bons resultados para a seção de choque elástica integral.

Quanto a seção de choque total σ_T, no nosso caso a soma da seção de choque elástica integral mais a seção de choque não elástica, o modelo apresenta resultados bastante bons quando comparados com os dados experimentais conforme Tabela VI abaixo. Também colocado na tabela está o valor da seção de choque não elástica para as dadas energias para o caso de A = 235 e A = 232.

Tabela VI

ELEMENTO	Energia (MeV)	σ_T (barns)		σ_R (barns)	
		Exp.	Modelo	Exp.	Modelo
A = 235	4.5	-	7.42	3.34±.40	3.32
A = 235	5	7.3	7.42	-	3.32
A = 232	5	7.3	7.35	-	3.30
A = 232	10	5.7	5.72	-	3.13
A = 232	15	5.7	6.13	-	2.97
A = 235	15.4	-	6.15	2.58±.04	2.99

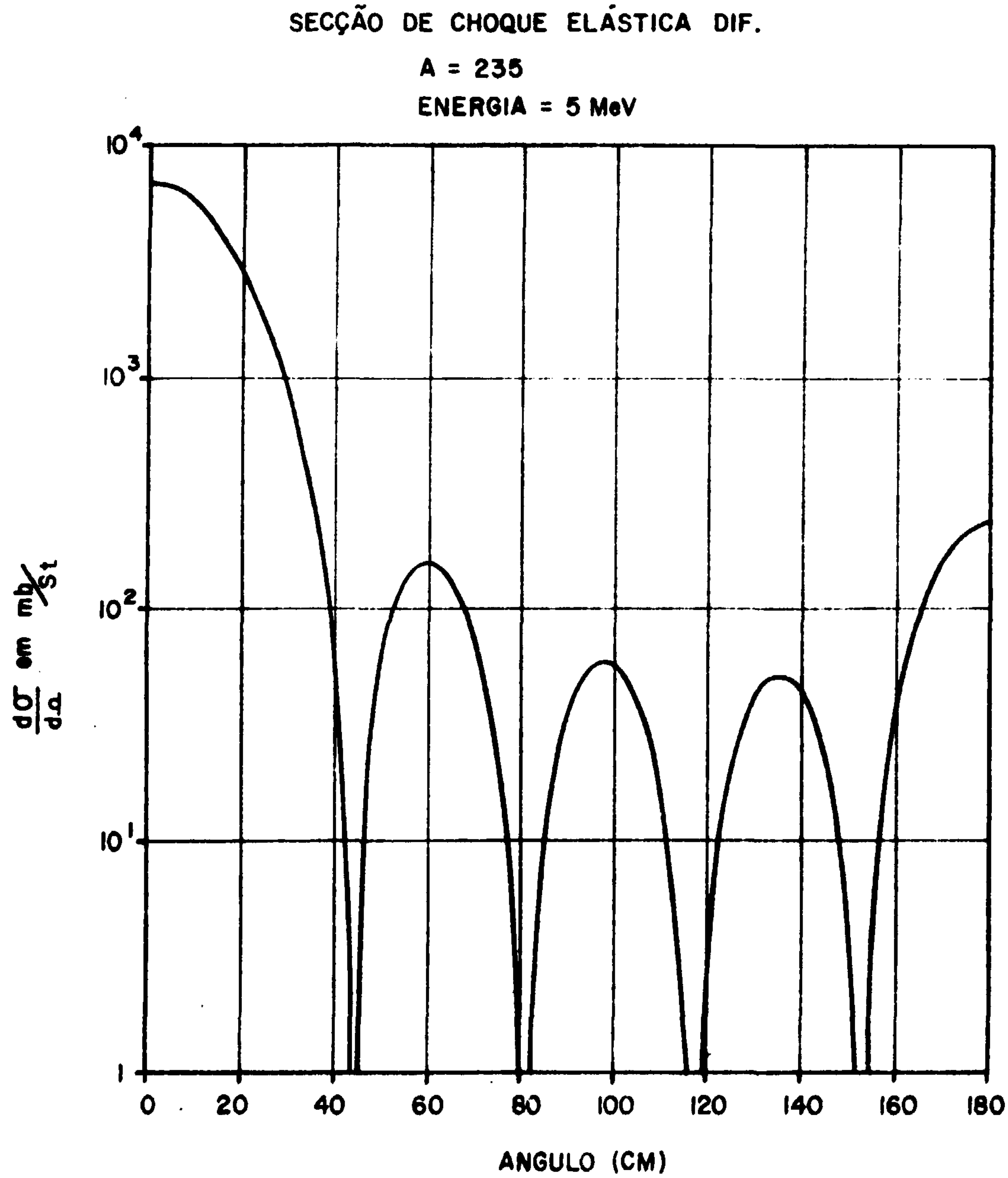

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 235
ENERGIA = 5 MeV
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 24a

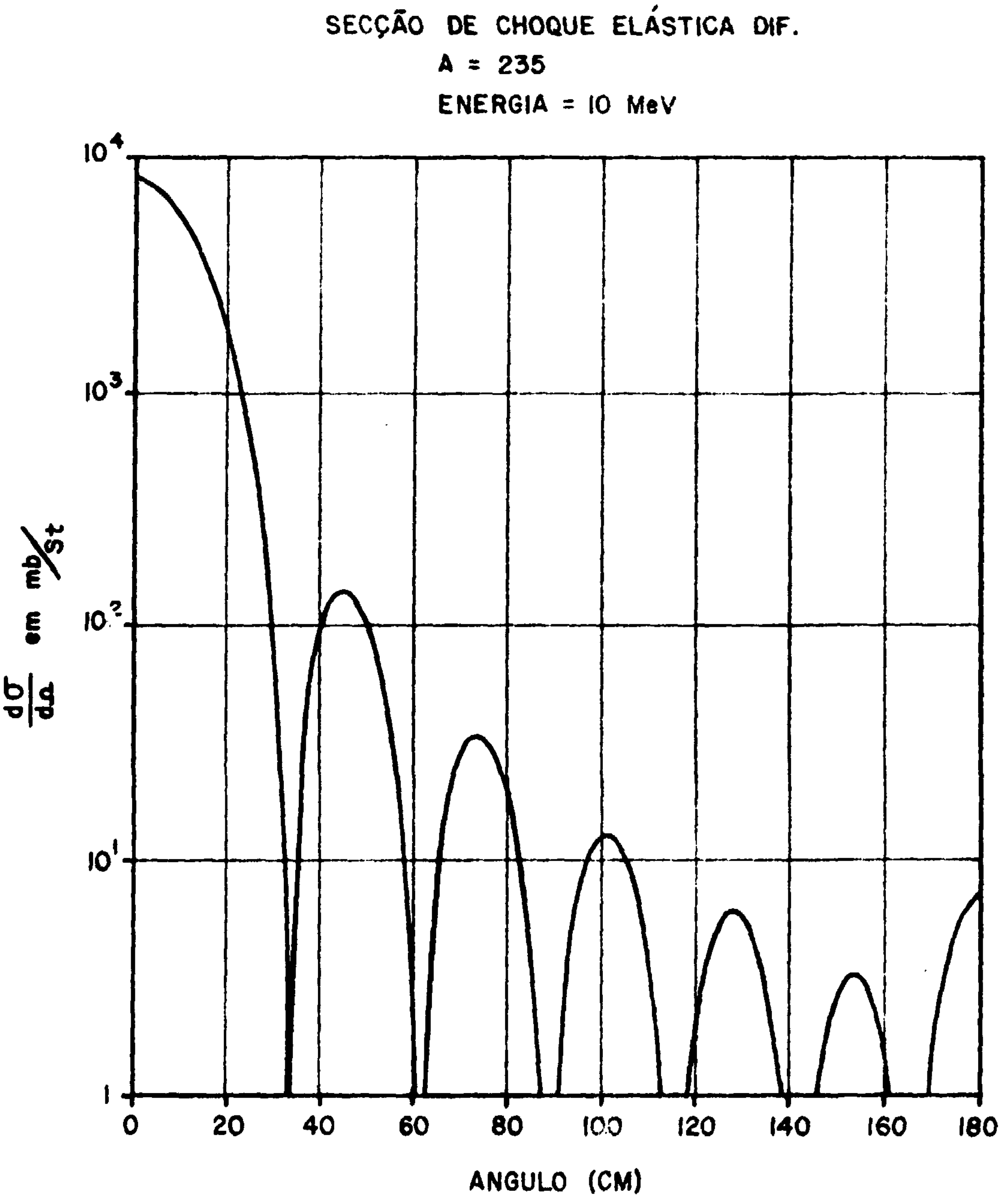

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 235
ENERGIA = 10 MeV
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 24b

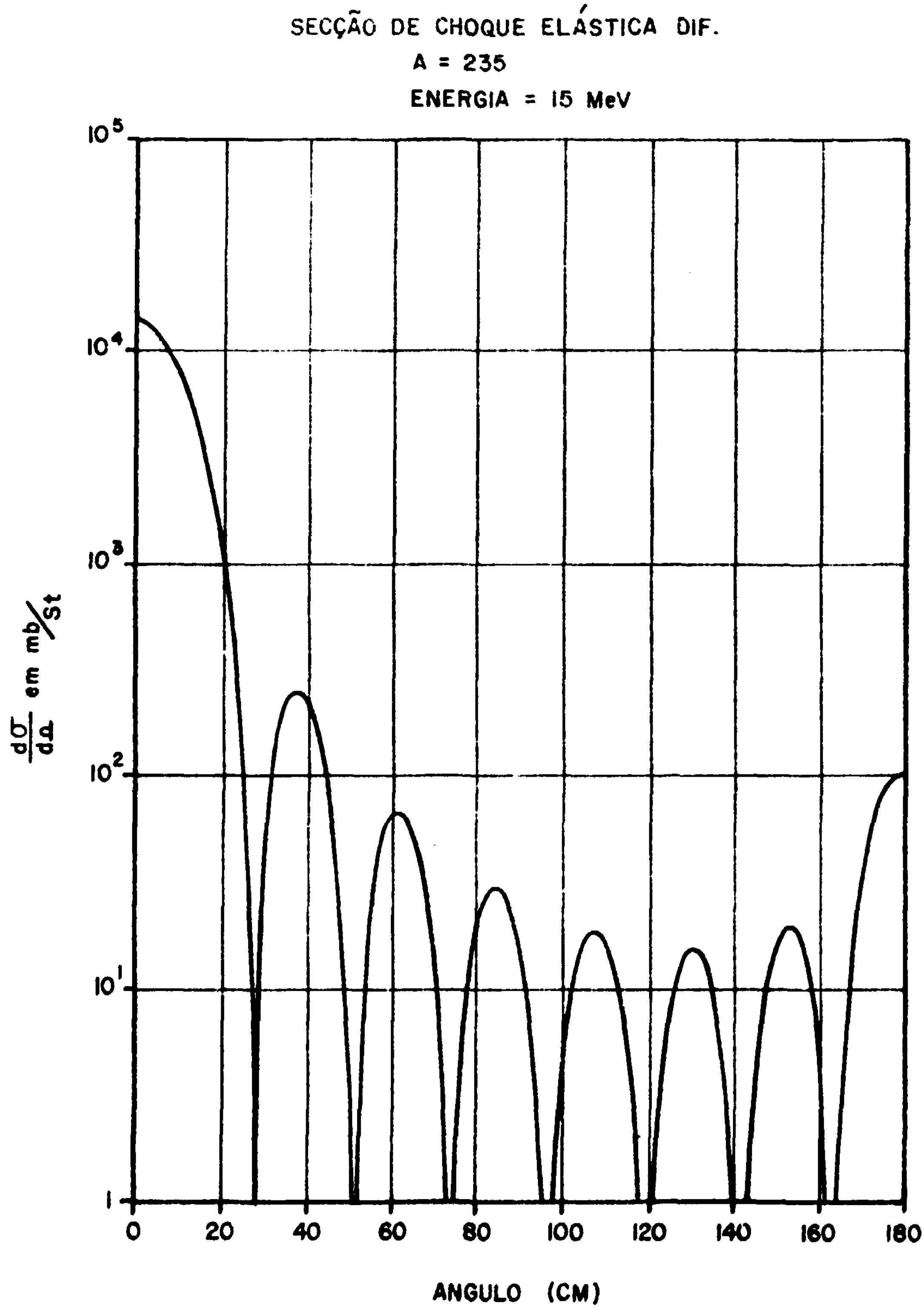
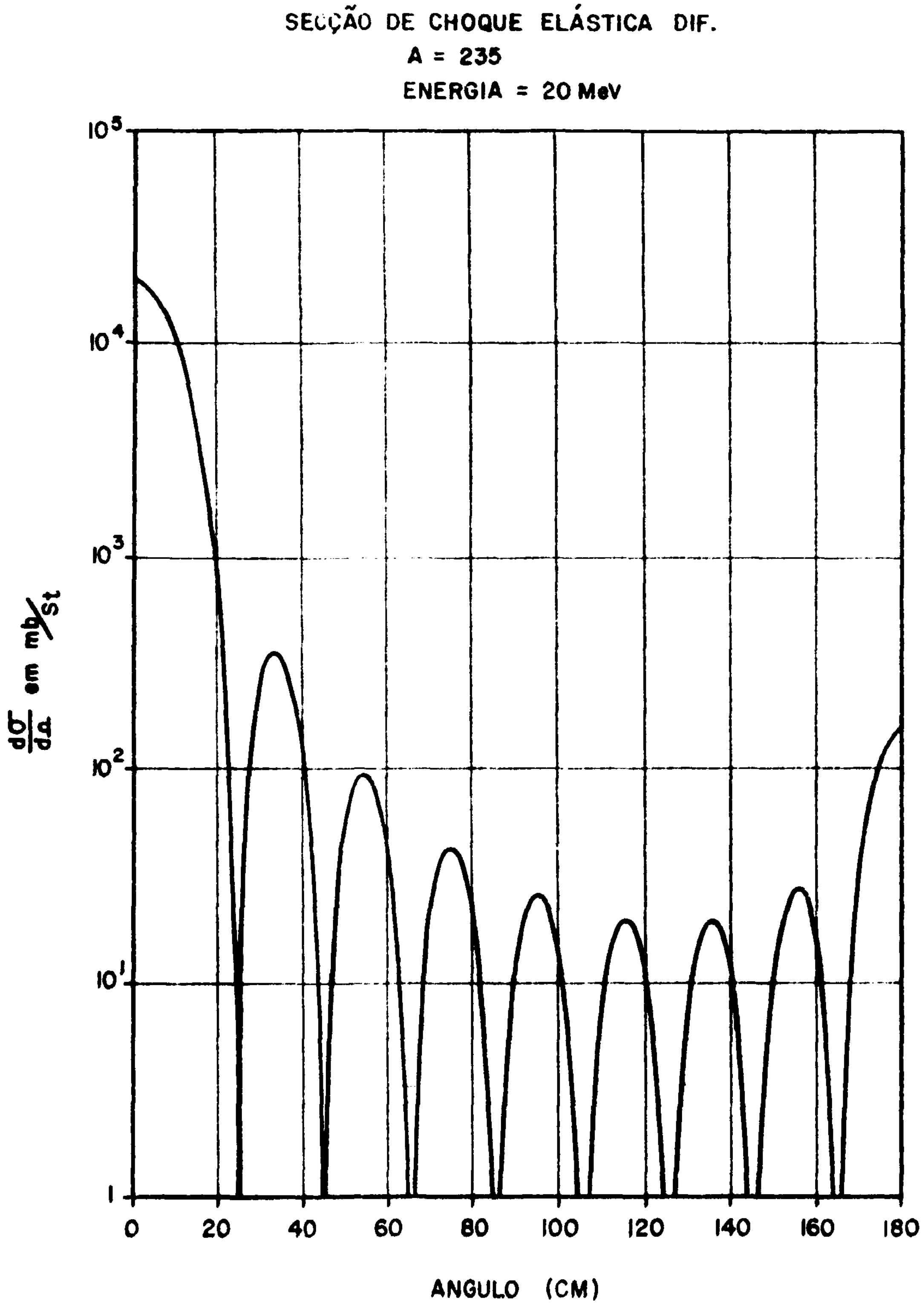

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 235
ENERGIA = 15 MeV
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 24c



SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 235
ENERGIA = 20 MeV
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 24d

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.

A = 235

ENERGIA = 25 MeV

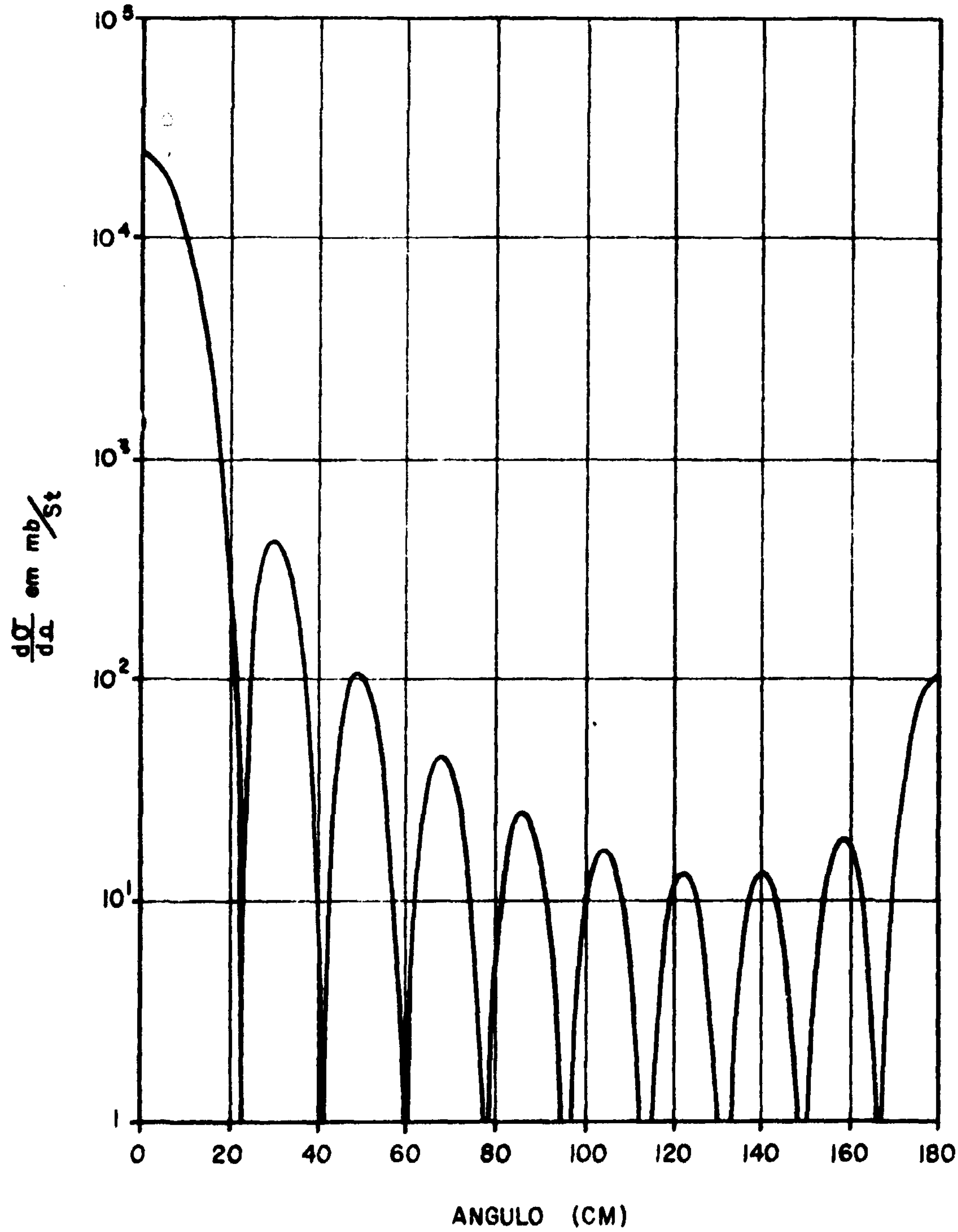
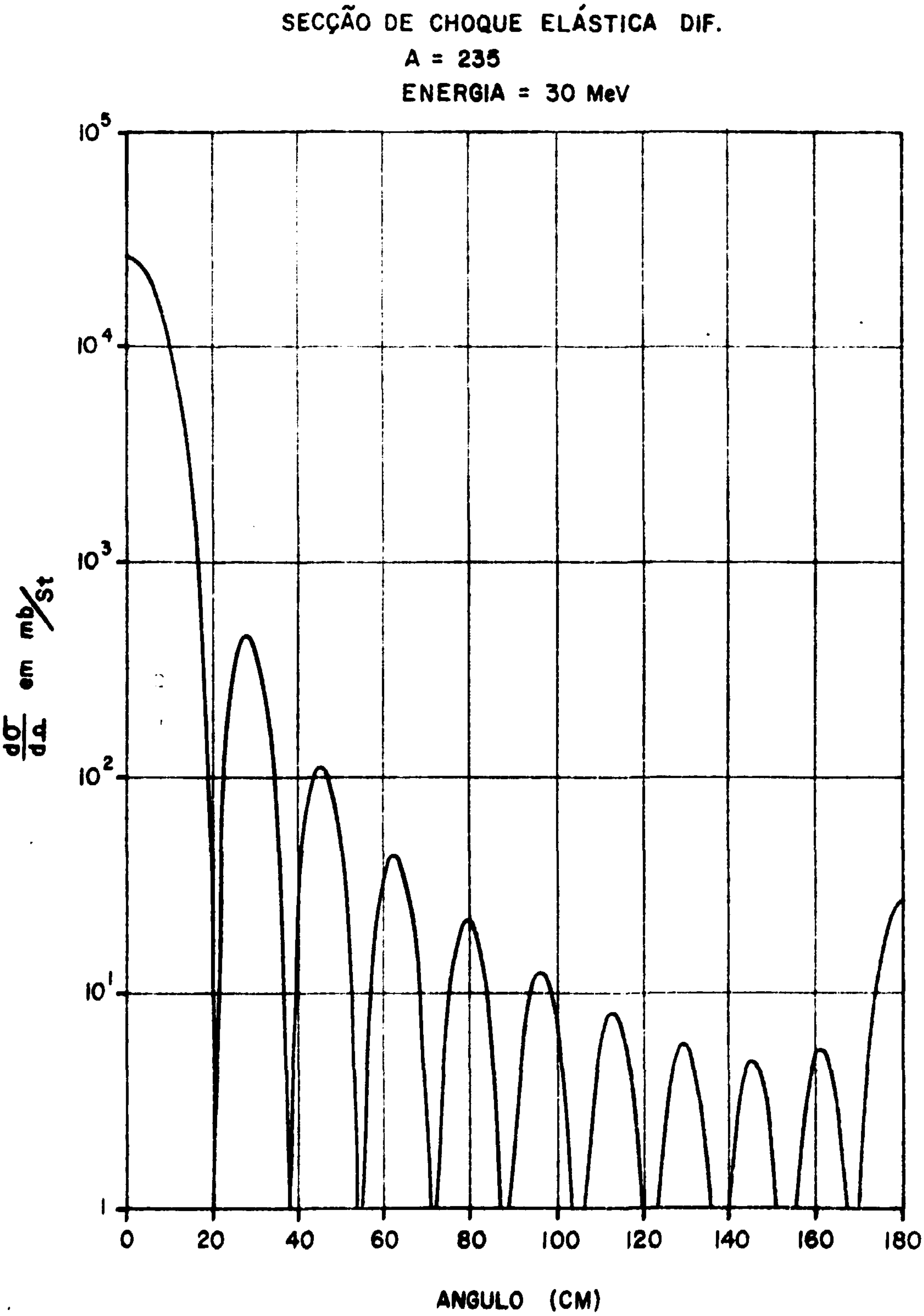
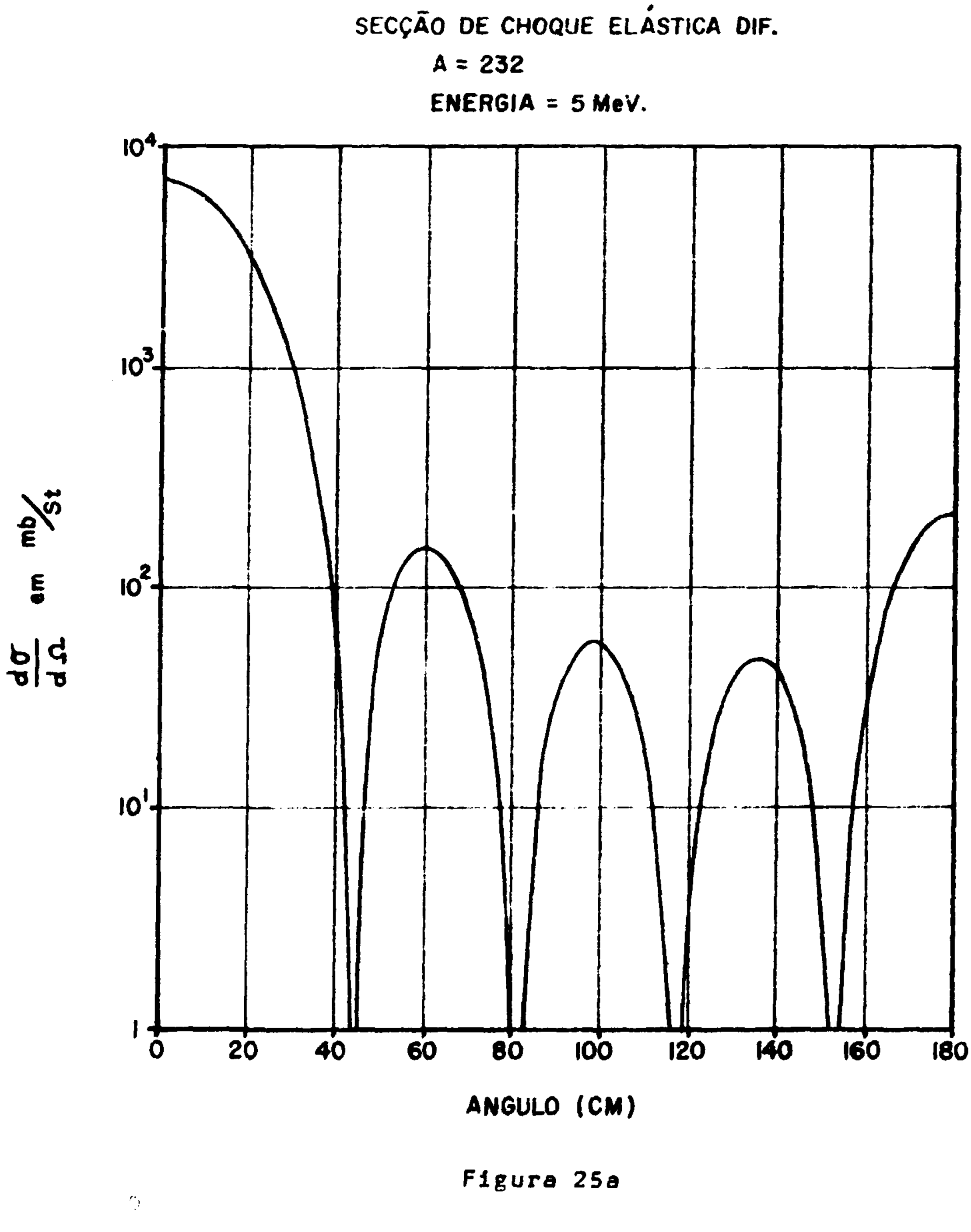


Figura 24e



SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 235
ENERGIA = 30 MeV
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 24f



SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 5 MeV.
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
10^4
10^3
10^2
10^1
1
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 25a

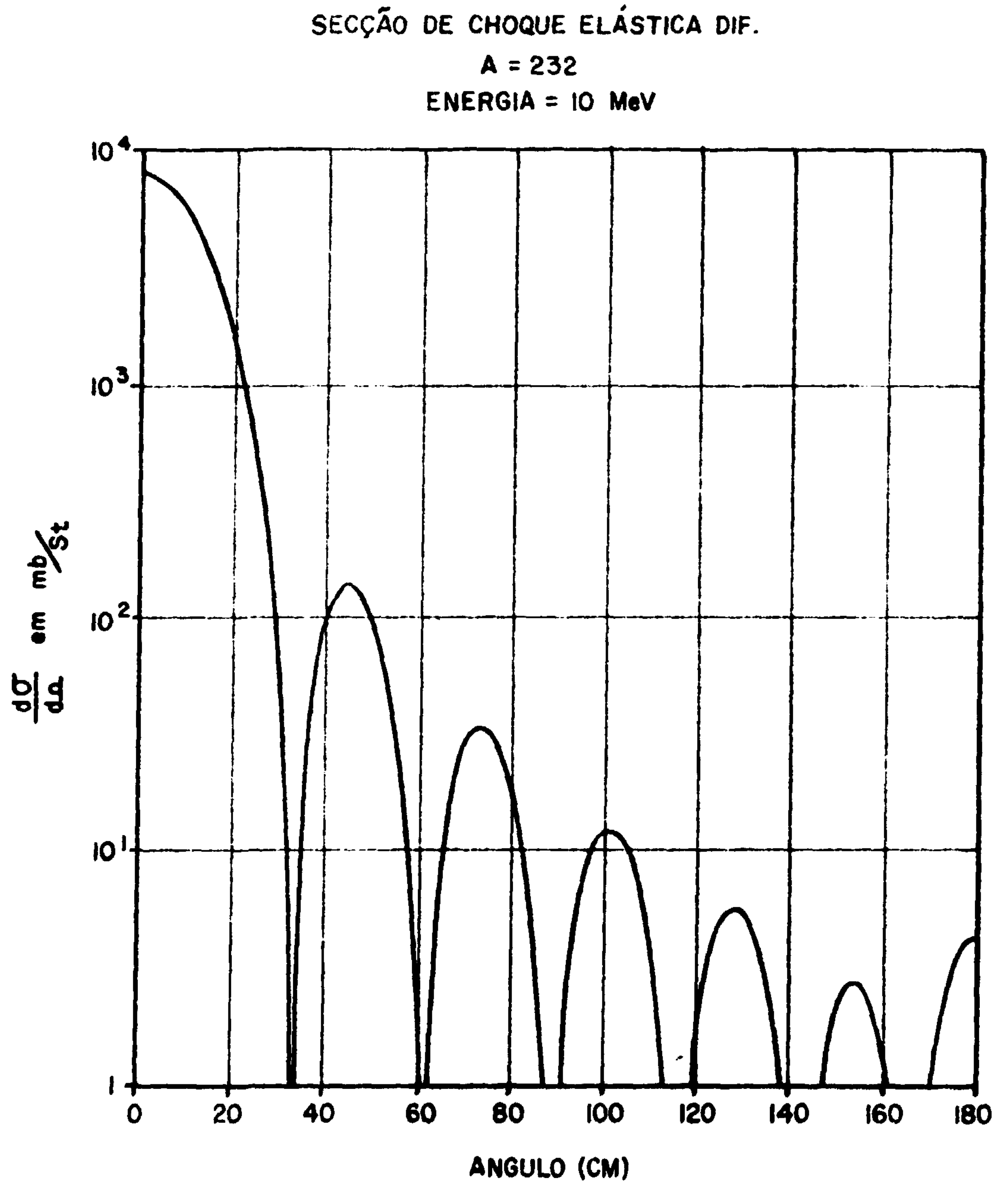

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 10 MeV
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 25b

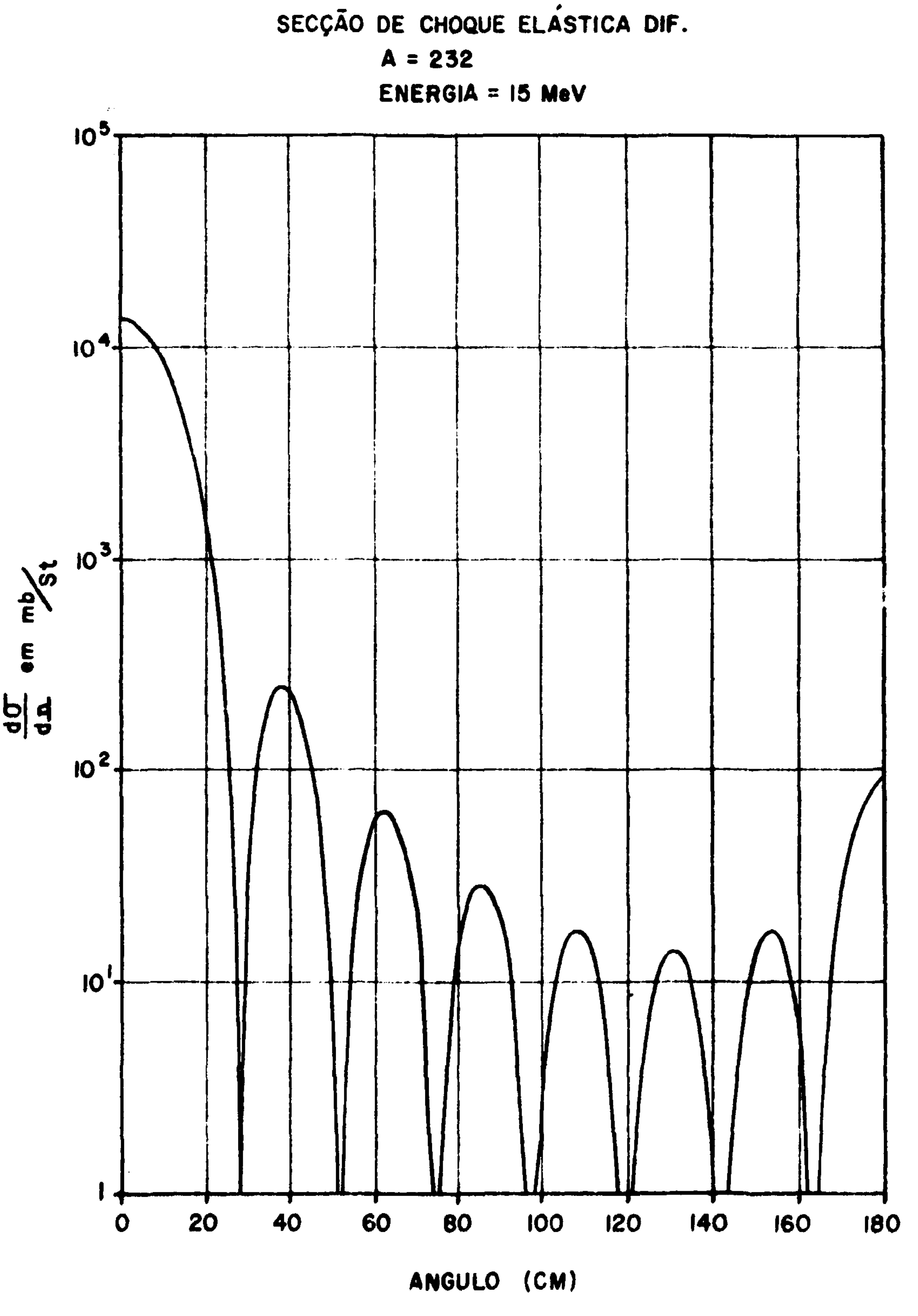

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 15 MeV
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 25c

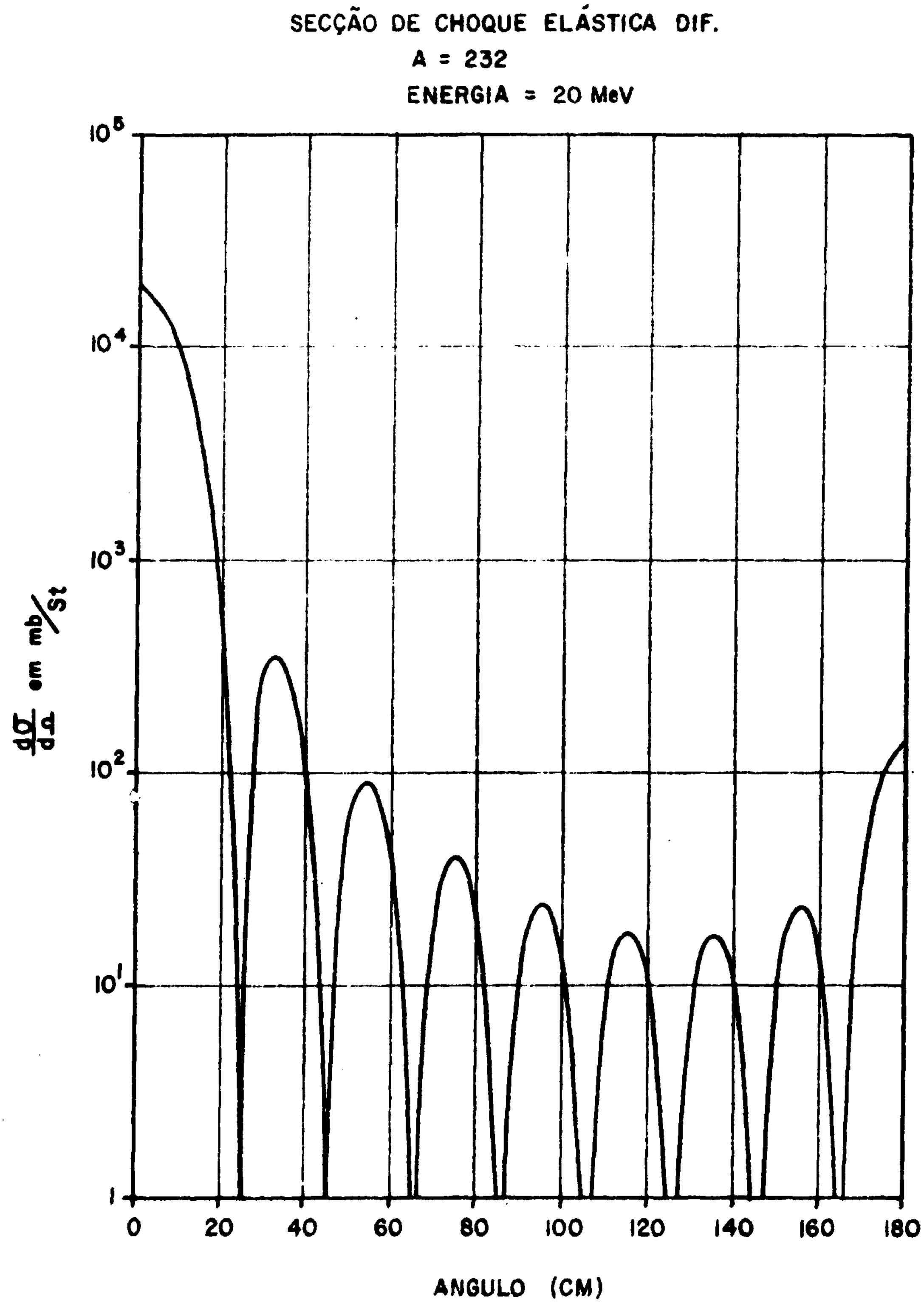

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 20 MeV
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 25d

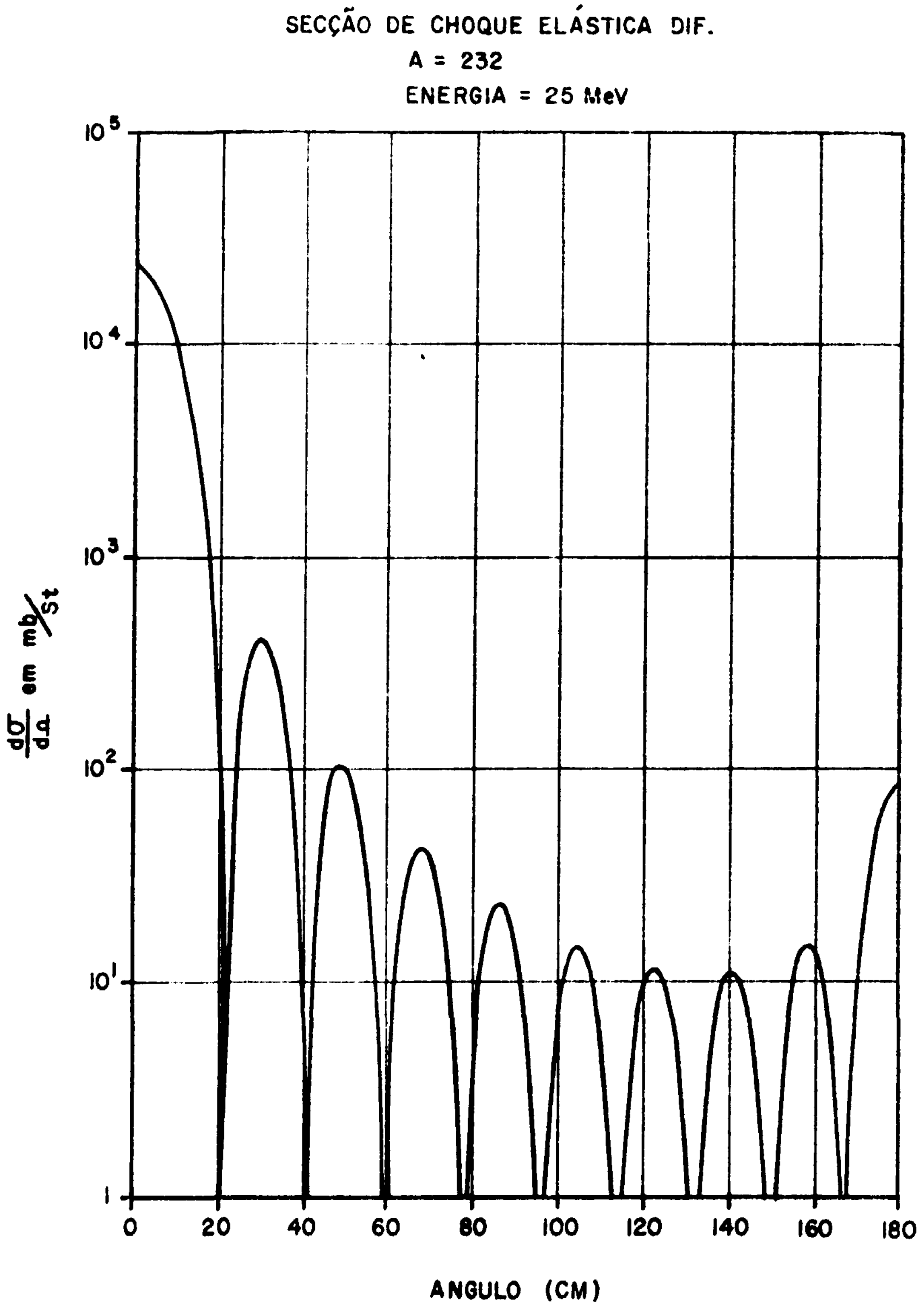

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 25 MeV
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
1
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ em mb/St
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
ANGULO (CM)

Figura 25e

SECÇÃO DE CHOQUE ELÁSTICA DIF.
A = 232
ENERGIA = 30 MeV

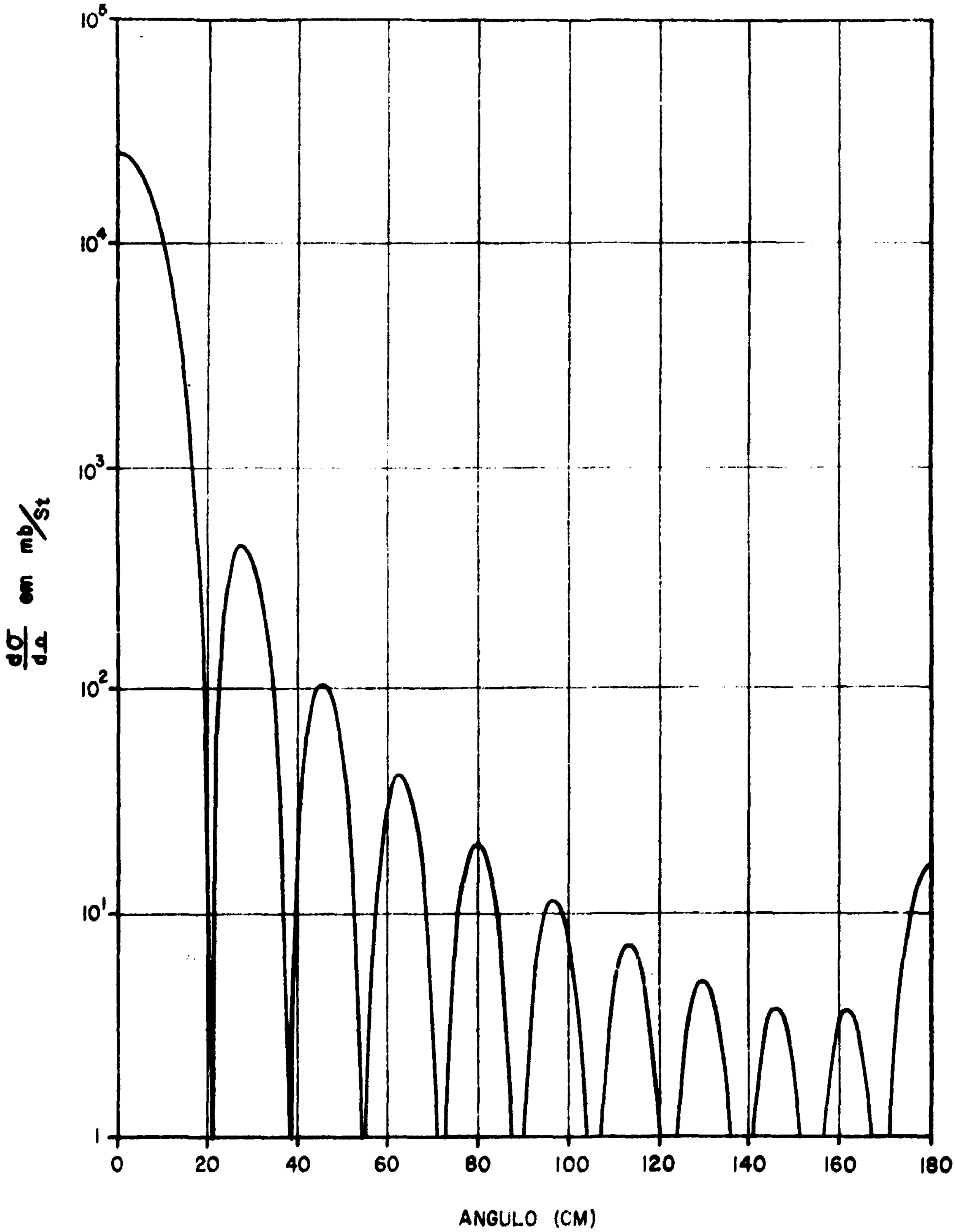


Figura 25f

IX - CONCLUSÃO

O modelo semiclássico é aproximadamente válido em um grande intervalo de energias de 1 a mais de 20 MeV, e para núcleos com $A > 10$. Os parâmetros a, q, p e r podem ser interpretados em termos do modelo ótico para energias superiores a 10 MeV, ao passo que para energias inferiores, eles podem ser encarados como coeficientes empíricos que parametrizam as seções de choque.

As seções de choque diferenciais são, entretanto, particularmente sensíveis a particularidades dos núcleos, como deformações e vibrações. O modelo semiclássico só reproduz as seções de choque diferenciais muito pobremente. Para ângulos superiores a 40º no CM, os resultados apresentam discrepâncias da ordem de 50%.

X - REFERÊNCIAS

Livros que abordam o problema do espalhamento de nêutrons

/B1/ - I. Kaplan, Nuclear Physics, Addison Wesley (1963)

/B2/ - H. V. Buttlar, Nuclear Physics an Introduction, Academic Press(1968)

/B3/ - T. Wu and T. Ohmura, Quantum Theory of Scattering Prentice-Hall (1862)

/B4/ - J. L. Powell and B. Craseman, Quantum Mechanics, Addison-Wesley (1961)

Trabalhos de resenha sobre o modelo ótico

/R1/ - T.D. Beynon, The Nuclear Physics of Fast Reactors, Rep. Prog. Phys. 37, 951 (1974)

/R2/ - H. Feshbach, Ann. Rev. Nucl. Sci. 8, 49 (1958)

/R3/ - P.E. Hodgson, Ann. Rev. Nucl. Sci. 17, 1 (1967)

/R4/ - P.E. Hodgson, Rep. Prog. Phys. 34, 765 (1971)

/R5/ - B. Sinha, Phys. Rep. 20C, 1, (1975)

Referências sobre o modelo ótico

/ 1 / - J.C. Ferrer, J.D. Carlso and I. Rapaport, Nucl. Phys. A275, 325 (1977)

/ 2 / - F. Perey and B. Buck, Nucl. Phys. 32, 353 (1962)

/ 3 / - I. Angeli and J. Csikai, Nucl. Phys. A179, 577 (1971)

/ 4 / - I. Angeli, J. Csikai and P. Nagy, Nucl. Sci. and Eng. 55, 418 (1974)

/ 5 / - R.K. Adair, Rev. Mod. Phys. 22, 249 (1950)

/ 6 / - S. Fernbach, Rev. Mod. Phys. 30, 414 (1958)

/ 7 / - R.J. Howerton, UCRL - 5573

/8/ - Ferhbach, Porter and Weis Kopf, Phys. Rev. 96, 448 (1954)

/9/ - K. K. Seth, Rev. Mod. Phys. 30, 442 (1958)

/10/ - H. Feshboch, C.E. Pater and V. Weisskopt, Phys. Rev. 96, 448 (1954)

/11/ - J. Raynal, Programa MAGALI, por exemplo

/12/ - R.D. Mackintosh, Nucl. Phys. A164, 398 (1971)

/13/ - J. Raynal, Programa ECIS, por exemplo

/14/ - J.M. Peterson, Phys. Rev. 125, 955 (1962)

/15/ - Buccino, Hollandsworth e Bevington, Z. Physik, 196, 103 (1962)

/16/ - Flerov Talizin, Atom. Energ. 1, 155 (1956)

/17/ - Hudson Walkár e Berko, Phys. Rev. 128, 1271 (1962)

/18/ - Bjorklund and Fernbach, Phys. Rev. 109, 1925 (1958)

/19/ - Neutron Cross Sections, Vol III, pág. 46, Feb. 1965

/20/ - I. Angeli at al, Acta Physica Scientiarum Hungaricae, 30, 115 (1971)

/21/ - F. Perey and B. Buck, Nucl. Phys. 32, 353 (1962)

/22/ - D.J. Hughes and R.B. Sch ,"Neutron Cross Sections", Report BNL 325 (1958)

/23/ - Okazaki, Darden and Walton, "Total Cross Sections of Rare for fast Neutrons", Phys.Rev. 93, 461 (1954)