

Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Coordenação de Física Experimental de Altas Energias



Antonio Romero da Costa Pinheiro

Reações de “Spallation” em  
Protonterapia  
e em  
Reatores acionados por feixes de  
prótons - Sistemas (ADS)

Rio de Janeiro - RJ

Agosto, 2016

**Antonio Romero da Costa Pinheiro**

**Reações de “Spallation” em Protonterapia  
e em  
Reatores acionados por feixes de prótons - Sistemas  
(ADS)**

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Dr. Sérgio José Barbosa Duarte

Co-orientador:

Dr. Marcello Gomes Gonçalves

Agosto, 2016

“Tu, Senhor e Deus *meu*, és digno de receber a glória, a honra e o poder, porque criastes todas as coisas, e por tua vontade elas existem e foram criadas.”

*Apocalipse 4.11*

Dedico este trabalho a minha esposa Siliana, aos meus pais, Fátima e Francisco, aos meus irmãos, Raquel e Rogério.

# Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus pela vida e a saúde. Agradeço ao meu orientador Sérgio José Barbosa Duarte na condução deste trabalho. Pela orientação incomparável e a preocupação de obtermos sempre o melhor. A colaboração e co-orientação do pesquisador Marcello Gonçalves pois foram fundamentais para concretização do trabalho. A colaboração da professora Bianca Santos e demais co-autores de publicações alcançadas durante o projeto de doutoramento.

Aos professores que contribuíram para a realização do trabalho e minha formação na instituição. Em especial os professores da Coordenação de Física Experimental de Altas Energias e tecnologistas da Coordenação de Atividades Técnicas.

À Universidade Federal do Acre pela garantia na minha qualificação acadêmica e profissional.

Ao suporte tecnológico do Núcleo de Tecnologia da Informação da Universidade Federal do Acre, em especial ao técnico Geowany Galdino na prontidão dos serviços de atendimento para as simulações computacionais.

Aos meus amigos e colegas da pós-graduação em física e aos grandes companheiros de sala.

Agradeço dignamente ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas pela oportunidade e disponibilidade de recursos fundamentais para a conclusão do trabalho. Aos funcionários da secretaria da coordenação do LAFEX e da CFC.

Ao órgão de fomento, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), que esteve presente ao longo dos últimos dez anos.

Todos esses agradecimentos acima só foram possíveis graças a compreensão da minha família durante essa longa jornada, desde a graduação até o doutorado.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>xvi</b>
<b>Abstract</b>	<b>xviii</b>
<b>Glossário</b>	<b>xx</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Reações Nucleares de Spallation</b>	<b>12</b>
2.1 Resumo Histórico e Definições . . . . .	13
2.2 O Mecanismo de Reação de Spallation . . . . .	15
2.2.1 Modelo de Dinâmica Quântica Molecular . . . . .	16
2.2.2 Modelo de Transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck . . . . .	18
<b>3 O Modelo de Cascata Intranuclear</b>	<b>20</b>
3.1 Modelagem do Núcleo Alvo . . . . .	20
3.1.1 Distribuição da Posições e dos Momentos . . . . .	21
3.1.2 Massa Efetiva e Potencial Nuclear Confinante . . . . .	23
3.2 Dinâmica da Castata Intranuclear . . . . .	29
3.2.1 Mecanismo de Bloqueio de Pauli . . . . .	33
3.2.2 Encerramento da INC e o Cálculo da Energia de Excitação . . . . .	34
<b>4 Modelo da Evaporação Nuclear</b>	<b>37</b>
4.1 Evaporação Convencional/Fissão Nuclear . . . . .	37
4.1.1 Método de MC para Evaporação Convencional . . . . .	44
4.2 Evaporação Nuclear com Múltiplas Emissões Simultâneas . . . . .	46

4.2.1	Método de MC para Nova Cadeia de Decaimento . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Aplicações em Protonterapia e em Reatores ADS</b>	<b>51</b>
5.1	Reações de Spallation no Contexto da Protonterapia . . . . .	51
5.1.1	Processos Físicos da Radiação Ionizante . . . . .	55
5.1.2	Mecanismo de Interação do Próton com a Matéria . . . . .	58
5.2	Reações de Spallation no contexto de Reatores Nucleares . . . . .	64
5.2.1	Reatores - Sistemas ADS . . . . .	69
<b>6</b>	<b>Resultados</b>	<b>72</b>
6.1	Resultados para Aplicações em Protonterapia . . . . .	72
6.1.1	Relaxação Térmica . . . . .	73
6.1.2	Multiplicidade de Prótons e Nêutrons . . . . .	78
6.1.3	Espectro de Energia . . . . .	82
6.1.4	Distribuições Angulares . . . . .	86
6.2	Resultados para Aplicações em Reatores ADS . . . . .	90
6.2.1	Relaxação Térmica . . . . .	90
6.2.2	Multiplicidade de Prótons e Nêutrons . . . . .	94
6.2.3	Espectro de Energia . . . . .	96
6.2.4	Distribuição Angular . . . . .	98
6.2.5	Efeito da Evaporação de Múltiplas Partículas . . . . .	100
<b>7</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>107</b>
<b>A</b>	<b>Massa Efetiva numa Teoria de Campo Médio</b>	<b>110</b>
<b>B</b>	<b>Seções de Choque para Processos Elementares</b>	<b>114</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>119</b>

# Lista de Figuras

1.1	Esquema representativo de uma cascata intranuclear induzida por uma colisão de próton de 1 GeV com um núcleo alvo. Nesta fase, pode haver a produção e absorção de ressonâncias bariônicas e píons, além das emissão de nêutrons e prótons, caracterizando um processo de pré-equilíbrio do sistema. . . . .	2
1.2	Esquema representativo da fase de evaporação competindo com o processo de fissão. Nesta fase, o núcleo se encontra em equilíbrio térmico. . . . .	2
1.3	Esquema representativo para a dinâmica da cascata intranuclear na abordagem do código MCMC. Os processos físicos ilustrados da interação elementar, do bloqueio de Pauli, das emissões e reflexões de partículas, serão discutidos em detalhe ao longo do tese. . . . .	4
1.4	A seção de choque diferencial como uma função da energia incidente para a reação de $^{12}\text{C}(\gamma, K^+)$ . Os resultados do MCMC são dimensionados para reproduzir o valor experimental em $E_\gamma = 0,975$ GeV. . . . .	5
1.5	Fissilidade relativa para $^{232}\text{Th}$ e $^{238}\text{U}$ com respeito ao $^{237}\text{Np}$ . As linhas cheias são os resultados dos cálculos com o MCMC, as linhas pontilhadas são as incertezas devido o cálculo de MC. Os dados experimentais são representados pelos pontos e suas respectivas barras de erro. . . . .	6
1.6	Multiplicidade média de nêutrons da reação $\gamma+^{208}\text{Pb}$ calculada no MCMC. Os dados experimentais estão representados. . . . .	7
1.7	Esquema representativo dos dezoito canais de decaimento em uma nova abordagem da evaporação, levando em conta o processo simultâneo de emissão múltipla de partículas. Cada direção radial representa os canais em uma etapa de decaimento do núcleo residual quente. . . . .	8

1.8	Densidade de prótons logo depois da reação nuclear (prótons com energia incidente de 150 MeV) como uma função da profundidade na água. Para colisões inelásticas da reação $p\text{-}^{16}\text{O}$ , os prótons produzidos são representados por $\square$ . Para colisões inelástica da reação $n\text{-}^{16}\text{O}$ , são representados por $\triangle$ . As colisões elásticas da reação $p\text{-H}$ , os prótons produzidos são representados por $\times$ e para colisões elásticas da reação $n\text{-H}$ , por $\circ$ . A curva pontilhada é a dose absorvida em unidade arbitrária na escala linear. As letras, a-e, representam pontos médios de cinco regiões na curva do pico de Bragg: a - (14,50–14,56 cm) região a esquerda do pico correspondendo a metade da dose absorvida; b - (15,38–15,44 cm) região da localização do pico; c - (15,63–15,69 cm) região a direita do pico correspondendo a metade da dose absorvida; d - (15,94–16,00 cm) região do ponto final do pico; e - (16,19–16,25 cm) região afastada do ponto final do pico de Bragg. . . . .	10
3.1	Representação simbólica da ideia de massa efetiva. Ao lado esquerdo, um conjunto de nucleons constitui um campo médio (região hachurada) que mantém o núcleo ligado. Ao lado direito, os nucleons $m_0$ e o campo médio nuclear $\phi_0$ foram substituídos por partículas com massas efetivas $m^*$ . . . . .	24
3.2	Profundidade do potencial nuclear, onde $B$ é a energia de ligação do nucleon, $V_C$ é a altura da barreira de potencial de Coulomb e $\varepsilon_F$ é a energia de Fermi. . . . .	27
3.3	Profundidade do poço de potencial nuclear onde a massa efetiva representa os efeitos da energia de ligação no núcleo alvo. . . . .	28
3.4	Representação esquemática de uma colisão binária entre as partículas $i$ e $j$ , após um intervalo de tempo $\Delta t$ . . . . .	30
3.5	Esquema das principais característica do código desenvolvido pelo grupo de física nuclear do CBPF ao longo dos últimos 25 anos. . . . .	36
4.1	Representação dos elementos que definem da altura da barreira de fissão no estado fundamental do núcleo, conforme a equação 4.19. . . . .	41
4.2	Efeito de camada na barreira de fissão no estado fundamental do núcleo extraído de dados experimentais utilizados no cálculo. . . . .	42

4.3	Representação esquemática de uma possível cadeia de evaporação a partir de um núcleo residual ( $Z, A, E^*$ ). A sequência de cadeia é mostrada até a terceira ordem de ocorrer a fissão. Porém podem existir ramos em que a fissão não ocorrerá como sendo o último estágio. . . . .	44
4.4	Esquema representativo dos dezoito canais de decaimento em uma nova abordagem da evaporação, levando em conta o processo simultâneo de emissão múltipla de partículas. Cada direção radial representa os canais em uma etapa de decaimento do núcleo residual quente. . . . .	47
4.5	Fluxograma do algoritmo computacional para simular reações de spallation com o método de cascata intranuclear. As variáveis $N_c$ e $N_r$ significam número de contagem e número de repetições completas, respectivamente. Mostramos os dois estágios da reação de spallation, a cascata intranuclear (INC) e a evaporação nuclear (NEV). . . . .	50
5.1	Número de centros de protonterapia de tratamento de cânceres ao redor do k6mundo até os dias atuais. . . . .	54
5.2	Esquema ilustrativo do mecanismo de interações do próton $p$ com a matéria. (a) perda de energia pela interação coulombiana com o elétron $e$ , (b) espalhamento elástico devido a repulsão coulombiana com o núcleo e (c) absorção do próton e criação de partículas secundárias (próton secundário - $p'$ , nêutron - $n$ , fótons - $\gamma$ ). . . . .	58
5.3	Ilustração do pico de Bragg para um feixe de prótons (linha sólida) comparado com um típico feixe de raios-X (linha tracejada). . . . .	61
5.4	Dose absorvida como função da profundidade na água de um pico de Bragg disperso derivado dos picos de Bragg primários. Em muitos casos clínicos, a largura do alvo é maior que a do pico de Bragg primário. Usa-se, clinicamente, colimadores de múltiplas folhas para obter a superposição dos picos. . . . .	61
5.5	Distribuição de dose-profundidade para um feixe de próton de 160 MeV modulado na água na escala linear (painel superior) e na escala logarítmica (painel inferior). Além das contribuições de dose do próton do feixe, é mostrada a dose das partículas secundárias (próton, dêuteron, trítio, alfa e $^3\text{He}$ ). . . . .	63

5.6	Esquema representativo de um reator de potência do tipo PWR. . . . .	66
5.7	Ilustração representativa do Reator Nuclear de Angra 2. . . . .	66
5.8	Fluxograma representando o ciclo do combustível nuclear. Na Mineração ocorre a produção de um concentrado de urânio ( $U_3O_8$ ) convertido em hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ). . . . .	67
5.9	Sistema de transmutação guiado por aceleradores, também chamados de sistemas híbrido acelerador-reator, combina uma fonte de nêutrons de spallation e um reator de sub-crítico que pode servir para transmutar resíduos nucleares de longa duração ou produzir energia. . . . .	69
5.10	Configuração esquemática do Accelerator-Driven System - ADS. . . . .	70
6.1	Profundidade do potencial nuclear no estado fundamental dos núcleos leves. . . . .	73
6.2	Evolução temporal de energia média de excitação de partículas para diferentes valores de $m_0^*$ na fase de cascata intranuclear. Na parte (a), são apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para a reação p+C em diferentes valores de energias incidentes. A parte (b) é para reação p+Ca, também para prótons incidentes de cinco valores de energia. E por fim, a parte (c), para reações do tipo p+Ti. . . . .	74
6.3	Massa efetiva como uma função do tempo para as reações p+C, p+Ca e p+Ti em cinco valores de energia incidente como mostra a legenda. Os resultados para cada valor da massa efetiva inicial estão organizados horizontalmente. A massa efetiva $m_0^* = m_0$ não foi representado devido sua variação ser praticamente nula. . . . .	75
6.4	Energia de excitação do núcleo residual para reação de feixe de próton e núcleos alvo em energias de 50 MeV a 250 MeV. Na Parte (a) para a reação p+C, na parte (b) para p+Ca e na parte (c) para reação p+Ti. . . . .	76
6.5	Emissão de mésons $\pi$ para reações de spallation induzidas por feixes de próton de 250 MeV. . . . .	77
6.6	Rendimento médio de nêutrons e prótons como função da energia do feixe, durante a fase rápida, para diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio. . . . .	78

6.7	Rendimento médio de nêutrons e prótons como função do feixe, durante a fase rápida, a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio. . . . .	79
6.8	Distribuição de núcleos residuais e suas correspondentes energias de excitações, como por exemplo, para as reações p+C e p+Ca com feixes de 250 MeV, usando massa efetiva inicial $m_0^* = 0,9m_0$ . . . . .	81
6.9	Rendimento médio total de nêutrons e prótons como função do feixe, durante a fase rápida, a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio. . . . .	81
6.10	Espectro de energia de prótons emitidos em um ângulo frontal, $\theta = 0 \pm \pi/12$ rad, reações induzidas por feixe de próton de 50 MeV a 250 MeV a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon, como mostra a legenda. Os painéis da parte (a) são resultados para reação p+C, enquanto que da parte (b) são espectros da reação p+Ca e da parte (c) para a reação p+Ti. Como estamos interessados apenas em aspectos qualitativos da distribuição, todos os resultados foram normalizados para efeito de comparação. . . . .	82
6.11	Seção de choque diferencial para nêutrons emitidos a partir de um ângulo frontal, $\theta = 0 \pm \pi/12$ rad. A descrição das curvas é a mesma da figura anterior, Figura 6.10. . . . .	83
6.12	Espectro de prótons emitidos transversalmente, $\theta = \pi/2 \pm \pi/12$ rad. A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.10. . . . .	84
6.13	Espectro de nêutrons emitidos transversalmente, $\theta = \pi/2 \pm \pi/12$ rad. A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.10. . . . .	85
6.14	Distribuição angular de prótons emitidos com energia cinética ( $0 < E_p < 100$ MeV) em reações induzidas por feixes de prótons de 50 a 250 MeV para diferentes valores iniciais de massa efetiva do nucleon, como mostra a legenda. Os nossos resultados para reação p+C são plotados na parte (a). No caso da reação p+Ca, na parte (b). A parte (c) representa os resultados para a reação p+Ti. . . . .	86
6.15	Distribuição angular de nêutrons emitidos com energia cinética ( $0 < E_n < 100$ MeV). A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.14. . . . .	88

6.16	Distribuição angular de prótons emitidos com alta energia cinética ( $100 \text{ MeV} < E_p < 200 \text{ MeV}$ ) em reações induzidas por feixes de prótons de 50 a 250 MeV em diferentes valores iniciais da massa efetiva, como mostra a legenda. Os nossos resultados para a reação p+Ca são plotados na parte (a). No caso da reação p+C, na parte (b). A parte (c) representa os resultados para a reação p+Ti. . . . .	89
6.17	Distribuição angular para nêutrons emitidos com energia cinética ( $100 \text{ MeV} < E_p < 200 \text{ MeV}$ ). A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.14. . . . .	89
6.18	Evolução temporal de energia de excitação média de partículas para diferentes valores de $m_0^*$ na fase de cascata intranuclear. Na parte (a), são apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para feixe de energia perto e abaixo da limiar de ressonâncias bariônicas $E_{B-th}$ em reações p+ <sup>208</sup> Pb com feixes energias de 0,8 GeV, 1,0 GeV e 1,2 GeV (como especifica a legenda). Parte (b) é a energia incidente acima do limiar bariônico para prótons incidentes de 1,6 GeV, 1,8 GeV e 2,0 GeV (com o mesmo código de linha da parte (a)). . . . .	91
6.19	Evolução temporal da variação da massa efetiva durante a fase de cascata para diferentes valores de $m_0^*$ . São apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para feixe de energia perto e abaixo da limiar de ressonâncias bariônicas da reação p+ <sup>208</sup> Pb, conforme a legenda. Os resultados foram multiplicados por um fator $10^{-2}$ para melhor visualização. Nós usamos $\Delta m^* = m^* - m_0^*$ . . . . .	92
6.20	Energia de excitação do núcleo residual em função da energia incidente para a reação p+Pb. . . . .	92
6.21	Evolução do rendimento de píons durante a fase de cascata. Mostramos apenas os resultados de dois feixes incidentes: parte (a) e (b) da figura. . .	93
6.22	Previsão para multiplicidade de nêutrons durante as fases da cascata e a fase de evaporação nuclear. Realizamos os cálculos para os cinco valores iniciais de massa efetiva. Os resultados são para reações p(1 GeV)+ <sup>208</sup> Pb em diferentes energias incidentes. Os resultados de TIERCE são representados por símbolo quadrado vazio. Os dados experimentais são símbolos estrelas cheias. . . . .	95

6.23	Os espectros de nêutrons na fase de cascata da reação para diferentes valores de $m_0^*$ valores em três ângulos de detecção, como mostra a legenda. . . . .	97
6.24	Os espectros de próton na fase de cascata da reação $p(1 \text{ GeV})+^{208}\text{Pb}$ para diferentes valores de $m_0^*$ valores em três ângulos de detecção, como mostra a legenda. . . . .	97
6.25	Distribuição angular de nêutrons para a fase de cascata. Os resultados são da reação $p+\text{Pb}$ com 1 GeV de energia incidente. . . . .	98
6.26	Distribuição angular de prótons para a fase de cascata. Os resultados são da reações $p+\text{Pb}$ com 1 GeV de energia incidente. . . . .	99
6.27	A distribuição dos núcleos residuais para a reação $p+\text{Pb}$ (1 GeV) utilizando massas efetivas $m_0^* = 0,6m_0$ e $m_0^* = 0,9m_0$ . . . . .	100
6.28	A multiplicidade de nêutrons ( $\langle N_n \rangle$ ) em relação a energia de excitação para $^{208}\text{Pb}$ e $^{200}\text{Hg}$ . A figura também apresenta o cálculo para diferentes dados para o excesso de massa. O resultado do cálculo utilizando apenas emissão sequencial simples (linhas finas) é comparado com o de um cálculo incluindo emissão simultânea de várias partícula (linhas grossas). Diferentes cores são usadas para mostrar os resultados para diferentes dados nucleares de acordo com a legenda. Nossos resultados são comparados com o cálculo convencional da evaporação de emissão simples de partículas (sem a fissão) do grupo de Liège (curva com pontos preto). . . . .	101
6.29	Comparação da multiplicidade de prótons e partículas alfa em função da energia de excitação para as três fórmulas de massa do excesso de massa para $^{208}\text{Pb}$ e $^{200}\text{Hg}$ . No painel é apresentado o cálculo com emissão múltiplo (linhas espessas) e de emissão simples (linhas finas). . . . .	102
6.30	Comparação entre as razões de largura de decaimento dos principais canais para o $^{208}\text{Pb}$ no estado excitado. Este resultado foi obtido incluindo a emissão simultânea de multipartículas na esquerda e na direita a emissão sequencial simples. Onde, a energia de separação de um nêutron é ( $S_n$ ), de dois nêutrons é ( $S_{nn}$ ) e a de três nêutrons é ( $S_{nnn}$ ). . . . .	103
6.31	Frequência de núcleos participantes da cadeia de decaimento. A parte esquerda é a emissão de multipartículas ( $N^{(m)}(Z, A)$ ) e a direita os resultados para emissão simples ( $N^{(s)}(Z, A)$ ). . . . .	105

6.32	Frequência de núcleos em que participa na cadeia de fissão nuclear. A parte esquerda é a emissão de multipartículas ( $N^{(m)}(Z, A)$ ) e a direita os resultados considerando apenas emissão simples ( $N^{(s)}(Z, A)$ ). . . . .	105
A.1	Massa efetiva como função da densidade para matéria nuclear. . . . .	113

# Lista de Tabelas

2.1	Alguns tipos de reações nucleares para a produção de nêutrons. O símbolo $e^-$ representa o elétron e $f$ representa a fissão. . . . .	12
3.1	Processos de colisões considerados na descrição do MCMC. A letra $B$ representa um bárion, $N$ especifica um nucleon, $\Delta$ representa um dos estados da ressonância delta, $N^*$ significa os estados da ressonância nucleônica de 1440 MeV, $Y$ representa um dos hípeons e por fim, $K$ especifica o méson estranho $k^+$ . . . . .	31
3.2	Semilargura e vida média da ressonância $\Delta(1232)$ e $N^*(1440)$ empregadas no presente modelo. . . . .	32
5.1	Processos físicos para radiação eletromagnética ionizante (raios X, raios gama e fótons de aniquilação) e consequências após a interação. . . . .	55
5.2	Processos físicos para radiação de partículas carregas e consequências após suas interações. . . . .	56
5.3	Processos físicos para radiação causadas por nêutrons e consequências após a interação. . . . .	57
5.4	Tipos de interações do próton, alvo, produtos, influência no feixe, e as manifestações dosimétricas. . . . .	59
5.5	Quantidade de reatores nucleares atualmente no mundo de acordo com a Associação Mundial Nuclear. Muitos países estão propondo a instalação de reatores nucleares, no sítio da associação é possível acessar estas informações. . . . .	65
6.1	Profundidade do poço esférico de potencial nuclear ( $V_0$ ) em relação a diferentes valores iniciais da massa efetiva $m_0^*$ . O potencial nuclear dos núcleos envolvidos no estudo da protonterapia. . . . .	73

6.2	Multiplicidade média de nêutrons ( $M_n$ ) e prótons ( $M_p$ ) emitidos na fase de evaporação das reações p+C, p+Ca e p+Ti. A multiplicidade é baseada somente na evaporação simples sequencial. Apresentamos o núcleo residual mais provável e sua energia de excitação mais provável, para diferentes valores de energias incidentes e diferentes valores de massa efetiva do nucleon.	80
6.3	Profundidade do poço esférico de potencial nuclear ( $V_0$ ) determinada para diferentes valores iniciais da massa efetiva $m_0^*$ do núcleo de chumbo, envolvido no estudo dos reatores nucleares.	90
6.4	Multiplicidades de nêutrons durante as fases de cascata e evaporação, de acordo com as previsões teóricas TIERCE (coluna 2) e INCL4 (coluna 3), nossos resultados para diferentes massas efetivas, $m_0^* = 0.6m_0, 0.7m_0, 0.8m_0, 0.9m_0$ , e $m_0$ (colunas de 4 a 8), comparados com os dados experimentais correspondentes (última coluna).	94
6.5	Multiplicidade média de nêutrons emitidos na fase de evaporação da reação experimental p+Pb. Comparação do nossos resultados: multiplicidade de nêutron com a emissão simples sequencial, $\langle N_n^{(s)} \rangle$ , e com a emissão simultânea de multipartículas, $\langle N_n^{(m)} \rangle$ . Estes resultados são obtidos incluindo o canal do processo de fissão.	104
6.6	Multiplicidade média de nêutrons emitidos na fase de evaporação $N_n^{evap}$ da reação experimental p+Pb e p+Hg, comparadas com nossos resultados. A multiplicidade de nêutrons com evaporação simples sequencial é indicada por $N_n^{(s)}$ , e para o caso de emissão simultânea de multipartículas por $N_n^{(m)}$ .	104
B.1	Todos processos de colisões considerados na descrição do código MCMC. A letra $B$ representa um bárion, $N$ especifica um nucleon, $\Delta$ representa um dos estados da ressonância delta, $N^*$ significa os estados da ressonância nucleônica de 1440 MeV, $Y$ representa um dos híperons e por fim, $K$ especifica o méson $k^+$ .	114

# Resumo

Colisões próton-núcleo são estudadas em faixas de energia de interesse para aplicações terapêuticas e reatores ADS (Accelerator Driven System). O processo de reação é simulado à luz de uma nova abordagem para as reações de “spallation”, onde a fase rápida da reação, a cascata intranuclear, é reformulada. Exploramos o efeito da massa efetiva durante a evolução temporal de todas as partículas envolvidas na reação. Ao final da fase de cascata é formado um núcleo residual quente, que se desexcita pela evaporação de partículas em competição com o processo de fissão, caracterizando a fase lenta da reação, evaporação nuclear.

Neste trabalho, consideramos os canais prováveis cinematicamente de interação nucleon-nucleon na faixa de energia de interesse durante a fase cascata, onde os resultados obtidos para cada história evolutiva constituem uma amostragem da dinâmica do sistema, dentro de um método de Monte Carlo. Na fase rápida, ocorre a emissão de partículas energéticas a partir de um processo de pré-equilíbrio do núcleo composto. Na fase lenta, o núcleo residual se encontra em equilíbrio térmico, as partículas evaporadas, em maior quantidade, são menos energéticas quando comparadas àquelas emitidas na fase de cascata. Assim, partículas são emitidas em ambas fases. Ressaltamos que o processo de evaporação compete com a fissão nuclear, produzindo ao final de toda reação de spallation o núcleo residual de evaporação ou fragmentos de fissão.

Visando aplicações em protonterapia, uma simulação computacional com base no Código de Monte Carlo MultiColisional (MCMC) é realizada para levarmos em conta a interação entre o feixe de prótons (50 – 250 MeV) e núcleos atômicos, que constituem o tecido orgânico. A deposição de energia leva à destruição de regiões tumorais. Entretanto, o efeito de produção de partículas secundárias dentro do plano de tratamento é pouco explorado. Neste sentido, tanto a modelagem do processo de reação nuclear de spallation como a propagação das partículas produzidas no tecido sadio, que circunda a região tu-

moral, deve ser discutidas e analisadas por serem elementos de extrema importância para subsidiar o plano de tratamento clínico. Fizemos simulações com os núcleos de massa leve, carbono (C), nitrogênio (N), oxigênio (O) e núcleos de massa intermediária, fósforo (P) e cálcio (Ca). Os elementos, a pouco citados, são os mais frequentes na composição do material orgânico. Além disso, consideramos a produção de partículas secundárias da reação  $p+Ti$  (próton+titânio) com o intuito de descrever um planejamento em que a região inclui alguma prótese clínica.

Outra aplicação importante consiste utilizar as reações de spallation como fontes de nêutrons para reatores nucleares ADS. A proposta trazida por estes reatores é o reprocessamento do lixo radioativo dos reatores convencionais. São reatores subcríticos acionados por aceleradores de partículas de alta energia ( $\sim 1$  GeV). Para reproduzir um cenário mais realista, a fase de evaporação foi reformulada, com a inclusão de múltiplos canais no processo de emissão de partículas, uma vez que a maior parte dos nêutrons gerados nestas reações provem desta fase. Para esta aplicação usamos o código MCMC para simular a reação  $p+Pb$  (próton+chumbo) com feixe de energia no intervalo de 0.8 a 2.0 GeV. O efeito de novos canais evaporativos no rendimento de partículas e no processos de fissão em competições é analisado para os núcleos Pb e Hg (mercúrio), no estado excitado.

Como resultados principais, apresentaremos os rendimentos de partículas, espectro e distribuição angular das partículas emitidas em baixas e altas energias. Estes observáveis são obtidos em função dos valores iniciais da massa efetiva do nucleon. Além disso, apresentaremos resultados de multiplicidade de partículas na evaporação múltipla em regime de altas energias, usando três fórmulas de massa nuclear.

Ao final do estudo observamos que os resultados estão de acordo com os dados experimentais. Os resultados obtidos na abordagem de uma evaporação com múltiplos canais de emissão mostram que o efeito de considerar outros canais de decaimento é importante na determinação da multiplicidade de nêutrons. A intensidade dos espectros e distribuição angulares revelam que os efeitos nucleares devem ser incluídos no plano físico de tratamento.

**Palavras-chave:** Spallation, Cascata intranuclear, Evaporação nuclear, Código de Monte Carlo, Protonterapia, Reatores ADS.

# Abstract

We studied the proton-nucleus collisions at the energy range of interest for therapeutic applications in protontherapy and also for application in ADS reactors (Accelerator Driven System). The reaction process is simulated in the view of the new approach for the spallation reactions, where the rapid phase of the reaction, the intranuclear cascade stage is revised to explore the effective mass effect during the evolution of all participating bound particles, in the reaction. At the end of the cascade it is formed a hot residual nucleus, which is desexcite by evaporation of particles in competition with the fission process, characterizing the slow phase of the reaction, the nuclear evaporation.

In the present work we consider the probable channels, for interaction in the energy range of interest during the cascade stage, where the results obtained, for each evolutionary history, constitutes a sample of the system to be used in a dynamic Monte Carlo method. In the rapid phase occurs the energetic particle emission during pre-equilibrium phase of the compound nucleus. In slow phase, the residual nucleus is in thermal equilibrium, the evaporated particles are lower energy when compared to those emitted in the cascade phase and also being larger quantities. Thus, particles are emitted in both phases. We remark that the evaporation phase competes with the nuclear fission, at this final stage, producing fission fragments or evaporation residual nucleus.

Aiming applications in Protontherapy, a computational simulation based on the Multi-Colisional Monte Carlo code (MCMC) is used to take into account the interaction between the proton beam (50 – 250 MeV) and atomic nuclei that constitutes the organic tissue. The energy deposition leads to the destruction of tumor tissue. However, the effect of secondary particles production on the treatment plan has been little explored. Because of this, both the modeling of nuclear reaction process as well as the transport of secondary particles in the healthy tissue should be discussed. Sense its extremely important to preseve healthy tissue surrounding the tumor region, to suportre the clinical plan. We

carried out simulations with light nuclei, such as carbon (C), nitrogen (N) and oxygen (O) and intermediate mass nuclei, phosphorus (P) and calcium (Ca), which are elements of organic material. In addition, we consider the generation of secondary particles in reaction  $p+Ti$  (proton+titanium) to support clinical plan in region including titanium prosthesis.

Another important application of spallation reactions consist in the use them as sources of neutrons for ADS nuclear reactors. The proposal of these reactors is the reprocessing of radioactive waste originated in conventional reactors. These machines are subcritical reactors and are driven by high-energy particle accelerators. To have a more realistic description of the evaporation phase the particle process include simultaneous multiple particle emission channel was reformulated, since most of the emitted neutrons comes from this phase. For application we also use the MCMC code to simulate the reaction  $p+Pb$  (proton+lead) with beam energy in range from 0.8 to 2.0 GeV. The effect of new evaporative channels on particles yield and fission processes is analyzed for Pb and Hg (mercury) in excited state.

As the main results it is presented the yields of particles, the spectrum and the angular distribution of emitted particles at low and high energies. These observables are obtained at different initial values of the nucleon effective mass. Moreover, we present results of particle multiplicities in multiple evaporation in high energy scheme using three nuclear mass formulas.

At the end of the study we observe that the results are in agreement with the experimental data. The results of the approach of an evaporative emission with multiple channels show the effect consider other decay channels is important in determining the multiplicity of neutrons. The intensity of the angular distribution and spectra indicate that the nuclear effects should be included in the physical treatment plan.

**Keywords:** Nuclear reaction, Intranuclear cascade, Nuclear evaporation, Monte Carlo code, Protontherapy, Reactors ADS.

# Glossário

<b>MCMC</b>	<i>Monte Carlo MultiCollisional</i>
<b>NEV</b>	<i>Nuclear Evaporation</i>
<b>EVAP</b>	<i>Evaporação</i>
<b>CASC</b>	<i>Cascata</i>
<b>INC</b>	<i>IntraNuclear Cascade</i>
<b>ADS</b>	<i>Accelerator Driven Systems</i>
<b>CBPF</b>	<i>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas</i>
<b>MC</b>	<i>Monte Carlo</i>
<b>BUU</b>	<i>Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck</i>
<b>IFUSP</b>	<i>Instituto de Física da Universidade de São Paulo</i>
<b>QMD</b>	<i>Quantum Molecular Dynamics</i>
<b>INCL</b>	<i>Liège Intranuclear Cascade</i>
<b>LBNL</b>	<i>Lawrence Berkeley National Laboratory</i>
<b>PTCOG</b>	<i>Particle Therapy Cooperative Group</i>
<b>LET</b>	<i>Linear Energy Transfer</i>
<b>RBE</b>	<i>Relative Biological Effectiveness</i>
<b>PWR</b>	<i>Pressurized Water Reactor</i>
<b>BWR</b>	<i>Boling Water Reactor</i>
<b>TRU</b>	<i>Transuranic</i>
<b>DM</b>	<i>Droplet Model</i>
<b>FRDM</b>	<i>Finite-Range Droplet Model</i>
<b>WSM</b>	<i>Weisächer-Skyrme Model</i>
<b>WKB</b>	<i>Wentzel-Kramers-Brillouin</i>

**MCNP**    *Monte Carlo N-Particle*  
**FLUKA**    *FLUktuierende KAskade*  
**GEANT**    *GEometry ANd Tracking*  
**FMT**        *Mean Field Theory*  
**SOBP**      *Spread-Out Bragg Peak*

# Capítulo 1

## Introdução

Em 1947, Sabers propôs pela primeira vez o mecanismo de reações de “spallation”<sup>1</sup> [1]. Desde então, estudos com o objetivo de esclarecê-la com maior precisão, e cálculos para produção de partículas no processo de bombardeio de núcleos com feixes de partículas-sonda estão sendo aprimorados. Nos anos 50, Rudstam [2] foi um dos pioneiros a estudar as reações de “spallation”, após seu estudo, inúmeros trabalhos importantes foram realizados, tanto na área experimental como na fenomenológica [3, 4]. As reações de spallation induzidas por prótons e nêutrons de altas energias encontram várias aplicações na Física Nuclear e ciências afins, como por exemplo, física médica, produção de radioisótopos, núcleos exóticos, aplicações industriais, astrofísica nuclear e nucleossíntese, entre outras. Neste trabalho, as reações nucleares de spallation são usadas como fontes de nêutrons para um reator nuclear, que utiliza rejeitos radioativos de reatores convencionais como combustíveis, permitindo a transmutação de actínidos de longa meia-vida em elementos estáveis. Além disso, analisamos a emissão de partículas secundárias em regime de energia terapêutico resultante de reações nucleares de spallation induzidas por próton. Estas reações podem ocorrer para feixes de prótons, antiprótons, píons, fótons ou nêutrons, com energia cinética de várias dezenas de MeV até vários GeV, em colisão com um núcleo alvo. O resultado da interação é a emissão de um grande número de hádrons (principalmente nêutrons) e vários outros fragmentos nucleares.

As reações nucleares de spallation são descritas por um modelo de dois estágios bem definidos. O primeiro é a cascata intranuclear, e o segundo, a fase de evaporação em competição com fissão nuclear. A Figura 1.1 ilustra a cascata intranuclear, e a Figura 1.2

---

<sup>1</sup>Spallation é um decaimento nuclear com uma grande produção de partículas resultantes do bombardeamento de partículas de alta energia. Este conceito será discutido amplamente no Capítulo 2.

representa esquematicamente a evaporação de um núcleo residual da fase de cascata.

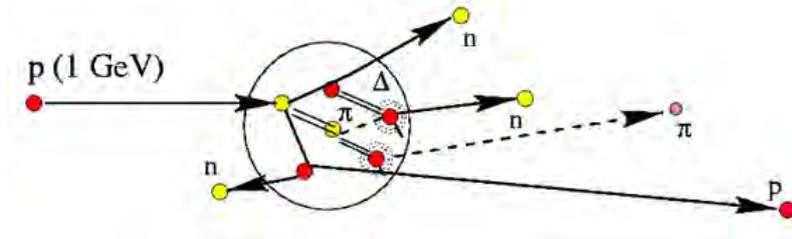


Figura 1.1: Esquema representativo de uma cascata intranuclear induzida por uma colisão de próton de 1 GeV com um núcleo alvo. Nesta fase, pode haver a produção e absorção de ressonâncias bariônicas e píons, além das emissão de nêutrons e prótons, caracterizando um processo de pré-equilíbrio do sistema.

O estágio rápido da reação de spallation, como esquematizado na Figura 1.1, leva aproximadamente  $10^{-22}$  s. A interação é diretamente com os nucleons (próton e nêutrons) e não com o núcleo alvo como um todo. Esta hipótese é justificada quando a energia da partícula incidente é tal que seu comprimento de onda de Broglie  $\lambda_B$ , é muito menor do que a distância média  $d_{ij}$ , entre os nucleons  $i$  e  $j$  do núcleo, ou seja, a condição suficiente para esta justificativa é

$$\lambda_B \ll r_0 \ll d_{ij}, \quad (1.1)$$

onde  $r_0$  é o alcance da interação. O feixe distribui sua energia cinética aos nucleons do núcleo alvo através de uma cascata de colisões elásticas e inelásticas entre nucleon-nucleon, com eventual emissão de nucleons, de mésons energéticos e a produção de ressonâncias bariônicas. Ao final da cascata o núcleo se encontra em um estado de alta energia de excitação.

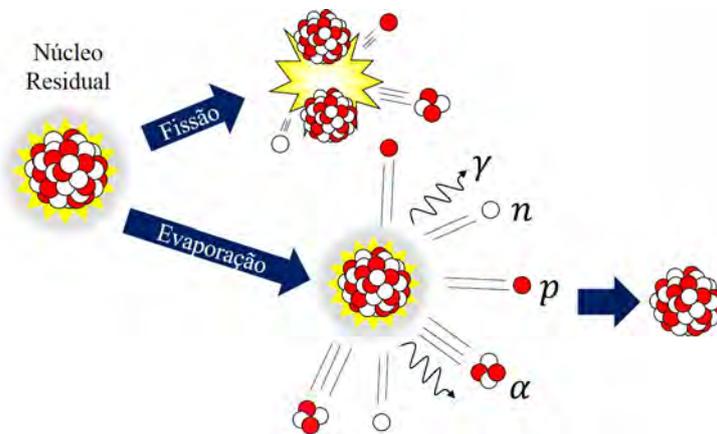


Figura 1.2: Esquema representativo da fase de evaporação competindo com o processo de fissão. Nesta fase, o núcleo se encontra em equilíbrio térmico.

Em baixas energias incidentes do feixe de prótons ( $\sim 100$  MeV), a condição da equação 1.1 é tomada como uma aproximação, e os processos e colisões entre os nucleons são estritamente elásticos, em que ocorre apenas a transferência de energia do feixe para os nucleons do núcleo, sem a produção de mésons e ressonâncias. À medida que se aumenta a energia incidente, o limiar para produção de partículas pode ser alcançado. Inicialmente, píons são emitidos com algumas centenas de MeV; em energias acima de 2 GeV, hádrons pesados são produzidos, denominando a cascata intranuclear como cascata de hádrons [5].

Em se tratando de reação de spallation, a cascata intranuclear não é nitidamente separada do estágio final de equilíbrio térmico do núcleo residual, que é a fase de evaporação nuclear. No estágio em que o núcleo residual se forma, existe uma etapa de pré-equilíbrio devido a emissão de partículas. As energias de partículas de pré-equilíbrio são maiores do que as energias de partículas evaporadas durante o estágio de equilíbrio. Com o fim da cascata intranuclear, mais especificamente o fim da fase de pré-equilíbrio, a etapa de desexcitação do núcleo residual é iniciada, a fase de evaporação leva aproximadamente  $10^{-16}$  s, isto é, por tal motivo é chamada de fase lenta da reação de spallation. As partículas emitidas na fase da cascata intranuclear, carregam grande parte da energia do sistema. A energia restante é distribuída entre os nucleons do núcleo residual. A desexcitação do núcleo residual se dar por um mecanismo estatístico de evaporação de nucleons ( $n, p$ ) e aglomerados de nucleons ( $d$  - dêuteron,  $t$  - trítio,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ) dentro de um espectro térmico. Como este processo de evaporação compete com a fissão, os fragmentos da fissão também podem sofrer o processo de evaporação de nucleons. Após o término da desexcitação, o núcleo resultante é geralmente radioativo em beta e gama, decaindo até se tornar estável, como está representado na Figura 1.2.

Existe um amplo campo de pesquisa, inclusive com aplicações diversas, em relação às reações de spallation, notadamente no desenvolvimento de códigos computacionais para simulações dessas reações e a determinação de seus produtos finais [6, 7, 8]. Na literatura, há uma variedade de códigos baseada no método de Monte Carlo, em particular, o modelo de cascata intranuclear de Bertini [9] e o modelo de cascata intranuclear de Liège [10]. Vale salientar que estas pesquisas são passíveis de aplicações diretas em sistema de reatores nucleares acoplados a aceleradores de prótons. As reações de spallation, induzidas por feixes de partículas energéticas, são usadas como fonte de nêutrons para o processo de fissão em cadeia no reator. Hoje, tais sistemas estão em pleno desenvolvimento em

todo o mundo, são conhecidos como Sistemas acionados por Aceleradores ou Accelerator Driven Systems (ADS). Estes são idealizados tanto para geração de energias com para o processamento de rejeitos nucleares [11].

Simulamos a colisão próton-núcleo para diferentes energias incidentes no regime de operação de reatores ADS. Utilizamos o conceito de massa efetiva do nucleon objetivando um tratamento mais realista em interações nucleon-nucleon, uma vez que as partículas em interação são vistas como “revestidas” por algum campo médio nuclear, que normalmente não são explicitamente considerado nos processos intranucleares durante a fase de cascata. Esta fase é descrita pelo cálculo MultiCollisional Monte Carlo (MCMC) dependente do tempo [12, 13, 14, 15]. Mostramos que as características dos núcleos residuais da cascata e sua energia de excitação são sensíveis ao valor atribuído à massa efetiva do nucleon. A diferença fundamental do código MCMC em relação aos demais códigos consiste na ordenação temporal da cascata. Todas as colisões binárias, reflexões e emissões de pré-equilíbrio das partículas são levadas em conta sem qualquer distinção entre as partículas. Nessa análise de colisões múltiplas, o instante final da colisão é determinado em função da condição inicial (interação inicial e estado fundamental do núcleo). O diagrama da Figura 1.3 esquematiza a evolução de um processo de cascata intranuclear a luz do modelo MCMC [16].

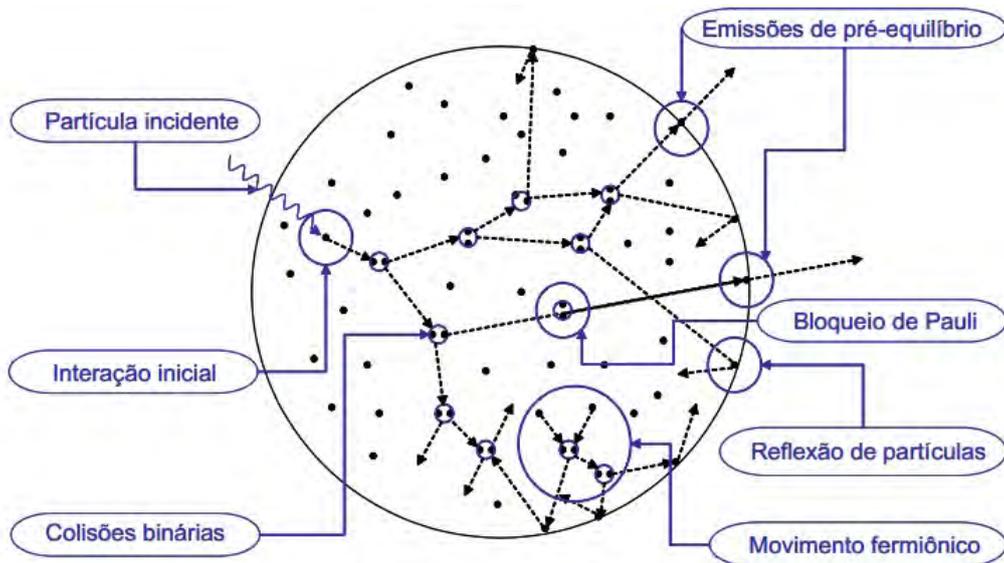


Figura 1.3: Esquema representativo para a dinâmica da cascata intranuclear na abordagem do código MCMC. Os processos físicos ilustrados da interação elementar, do bloqueio de Pauli, das emissões e reflexões de partículas, serão discutidos em detalhe ao longo do tese.

As simulações via Monte Carlo, para evolução dinâmica da reação intranuclear, acompanham ao longo do tempo todos os processos colisionais internucleônicos e a produção de partículas. O código vem sendo desenvolvido há mais de vinte anos em projetos de pesquisas e em temas de teses sob orientação do grupo de Física Nuclear do CBPF [12, 13, 14, 17]. Um dos objetivos principais do estudo desta fase é a produção de partículas (píons, káons, ressonâncias bariônicas) e nucleons emitidos. A multiplicidade e espectro de píons produzidos, em energias próximas ao limiar e acima dele, podem ser determinados e comparados aos dados existentes na literatura. Uma excelente concordância com os resultados experimentais tanto na faixa de energia de interesse do projeto como em altas energias, onde ocorre a produção de mésons estranhos, é obtida na referência [15], como mostra a Figura 1.4, os dados experimentais foram medidos por Maeda e colaboradores, no Laboratório Elétron-Síncrotron do Instituto para Estudos Nucleares, da Universidade de Toquio [18]. Além disso, os resultados dos cálculos para a multiplicidade e espectros de nêutrons e prótons energéticos emitidos neste estágio podem ser gerados, sendo estes elementos de fundamental interesse da presente tese. Com resultados promissores da simulação da fase

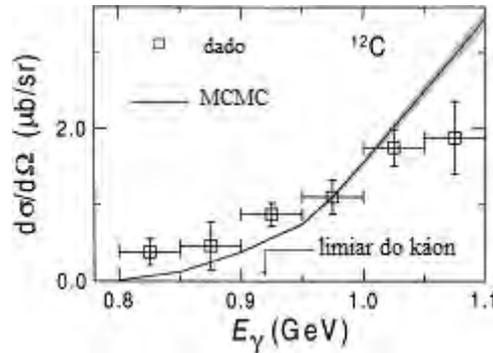


Figura 1.4: A seção de choque diferencial como uma função da energia incidente para a reação de  $^{12}\text{C}(\gamma, K^+)$ . Os resultados do MCMC são dimensionados para reproduzir o valor experimental em  $E_\gamma = 0,975$  GeV.

rápida, mais recentemente o grupo de trabalho desenvolveu o cálculo computacional da fase evaporativa, que partindo dos resultados obtidos para as características do núcleo residual quente, permitiu obter os resultados finais de spallation e os fragmentos de fissão. Esta última proposta fortaleceu a colaboração de pesquisadores do CBPF com pesquisadores do IFUSP, dentro dos últimos dez anos. Em alguns trabalhos desenvolvidos nesta colaboração [19, 20, 21], os resultados para os valores da fissilidade dos actídeos e suas seções de choque de fissão foram determinados utilizando dois cálculos acoplados, como mostra a Figura 1.5. Os resultados foram comparados com os correspondentes dados

experimentais mais recentes, e novamente reproduzidos com êxito.

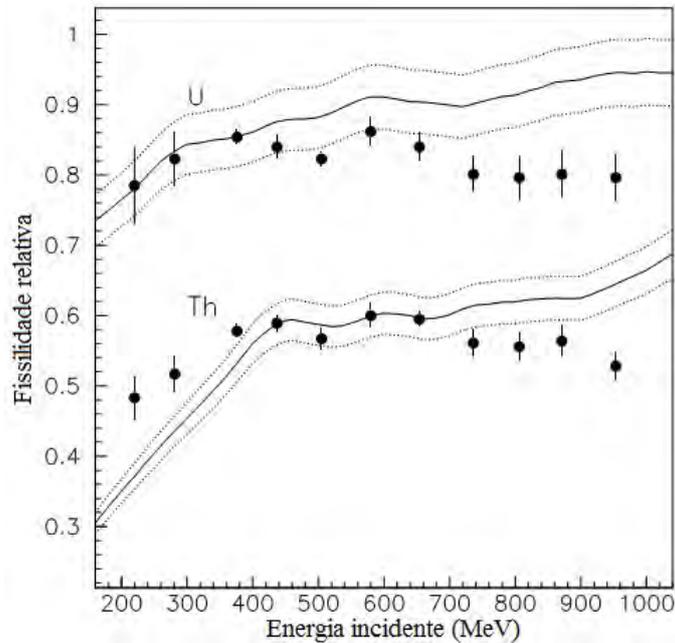


Figura 1.5: Fissilidade relativa para  $^{232}\text{Th}$  e  $^{238}\text{U}$  com respeito ao  $^{237}\text{Np}$ . As linhas cheias são os resultados dos cálculos com o MCMC, as linhas pontilhadas são as incertezas devido o cálculo de MC. Os dados experimentais são representados pelos pontos e suas respectivas barras de erro.

Cálculos usando o MCMC para reação de spallation com  $^{208}\text{Pb}$  induzida por feixes de fótons em baixas energias apresentaram resultados satisfatórios, como por exemplo a multiplicidade média de nêutrons [16]. Os resultados concordaram com dados experimentais [22], como mostra a Figura 1.6. Estes são alguns dos resultados que consolidamos e validamos o código, permitindo a utilização do mesmo com grande confiabilidade em outros contextos.

Entretanto, alguns aperfeiçoamentos deveriam ser ainda implementados tanto na fase rápida como na fase evaporativa que é, em grande parte, o objeto deste trabalho. Destacamos algumas otimizações nas duas fases da reação de spallation, tendo em vista as aplicações a serem realizadas:

- Na **fase de cascata intranuclear** ressaltamos a utilização dos valores da massa efetiva para nucleons e ressonâncias bariônicas quando estão ligados ao sistema nuclear, a mudança nos valores de massa efetiva dos bárions traz implicações cinemáticas quanto aos processos colisionais entre partículas ligadas, até mesmo como a mudança dos limiares de produção de mésons e ressonâncias. Ao mesmo tempo,

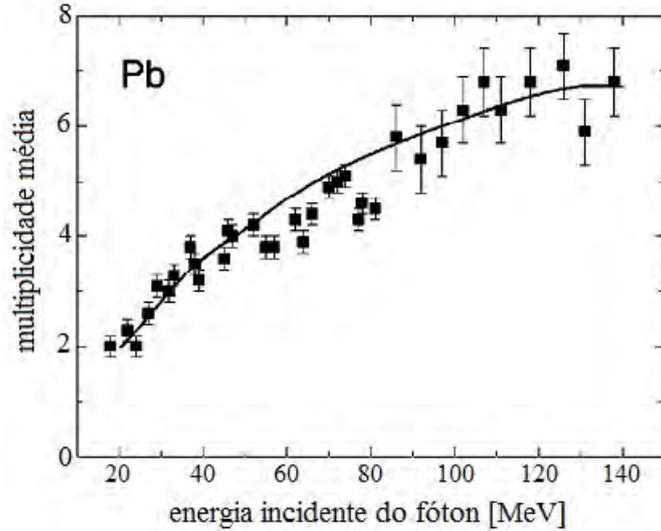


Figura 1.6: Multiplicidade média de nêutrons da reação  $\gamma+^{208}\text{Pb}$  calculada no MCMC. Os dados experimentais estão representados.

os valores estabelecidos para a massa efetiva das partículas ligadas podem afetar o bloqueio de Pauli nas colisões entre nucleons [23]. Dentre os aprimoramentos mais importantes desta fase destacamos ainda a determinação da profundidade do poço nuclear que confina os nucleons no volume do núcleo, em função da variação da massa efetiva dos nucleons. Tal procedimento implica diretamente no cálculo da multiplicidade, espectro e distribuição angular de partículas emitidas.

- Para a **fase de evaporação** trabalhamos no aperfeiçoamento dos efeitos de resfriamento a partir da inclusão de novos canais de emissão de partículas. Até então, os cálculos para a largura dos canais de decaimento de nêutrons, prótons e alfa tem levado em conta os efeitos de temperatura, tratando de forma muito simplificada a evaporação nuclear de partículas pelo sistema nuclear quente (Modelo de gás de Fermi). Nesta fase, contemplamos a emissão múltipla simultânea de partículas que são energeticamente provável em altas energias. Os novos canais implementados estão ilustrados na Figura 1.7, onde, em cada direção radial é indicado um canal de emissão diferente. Agora, notamos que a desexcitação inclui dezenove canais, um para a fissão e dezoito para emissão de partículas, ou seja, a emissão simples de partículas,  $n$ ,  $p$  e  $\alpha$ , a emissão dupla  $nn$ ,  $np$ ,  $n\alpha$ ,  $pp$ ,  $p\alpha$  e  $\alpha\alpha$ , e a emissão tripla de partículas  $nnn$ ,  $nnp$ ,  $nn\alpha$ ,  $npp$ ,  $np\alpha$ ,  $n\alpha\alpha$ ,  $ppp$ ,  $pp\alpha$  e  $p\alpha\alpha$ . E o desafio adicional é estender o modelo de evaporação simples sequencial para núcleos leves ( $Z \geq 4$ ) em regime de baixas energias.

Um aspecto fundamental do comportamento do nucleon no sistema nuclear é a modificação das suas propriedades cinemáticas devido às interações nucleon-nucleon. O conceito de massa efetiva bariônica é introduzido para determinar a propagação do nucleon ligado ao sistema nuclear através de um campo médio efetivo. Este conceito surge quando uma aproximação de campo médio é usada para descrever a interação do nucleon no sistema nuclear como um todo. Citamos a abordagem Hartree-Fock para uma descrição não-relativista da interação, e também a relativística de campo médio, quando uma teoria de campo mais fundamental é incorporada. Esta análise fundamental é apresentada pela primeira vez na literatura, uma vez que cálculo de cascata intranuclear convencional construído em códigos computacionais utilizam uma cinemática livre para as partículas ligadas [24, 25].

Até o momento, o cálculo para a evaporação nuclear com múltiplos canais de emissão de partículas foi realizado separadamente da fase de cascata intranuclear. Inicialmente testamos esta nova abordagem do processo de desexcitação de núcleos pesados com energia de excitação em uma faixa de energia de 10 MeV a 400 MeV. Porém, a evaporação simples sequencial está acoplada ao código MCMC para núcleos leves e pesados em qualquer nível de energia de interesse entre 50 MeV a 3,0 GeV para feixe de próton incidente.

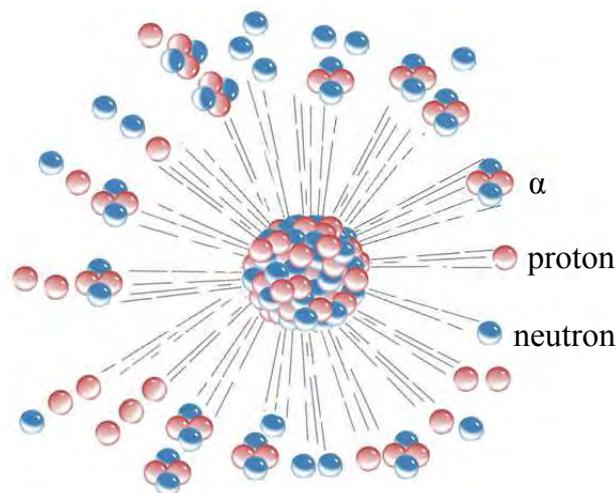


Figura 1.7: Esquema representativo dos dezoito canais de decaimento em uma nova abordagem da evaporação, levando em conta o processo simultâneo de emissão múltipla de partículas. Cada direção radial representa os canais em uma etapa de decaimento do núcleo residual quente.

Um novo cálculo de reações de spallation foi considerado, para um regime de baixas energias, onde podemos verificar multiplicidade de partículas secundárias oriundas da interação próton-núcleo em protonterapia. Feixes de prótons apresentam propriedades de

interações específicas nesta faixa de energia (50 - 250 MeV) que mais adequados para o tratamento de tumores em regiões próximas a órgãos vitais [26]. A entrega de dose localizada é a propriedade do feixe de prótons relevante clinicamente, e com grande vantagem na comparação com o uso de fótons e feixes de elétrons. As partículas pesadas aceleradas permitem melhor conformação da dose absorvida pela distribuição de energia transmitida e pela modulação do perfil de dose sobre uma região bem definida [27].

Uma vez que o perfil correto de dose deve ser calculado para estabelecer os parâmetros de configuração do acelerador de prótons no tratamento, vários algoritmos são propostos para lidar com o problema de realizar planejamento tridimensional do tratamento e sua otimização [28, 29, 30, 31, 32, 33]. Todos estes modelos utilizam as descrições numéricas ou analíticas da curva de Bragg para estimar a dose absorvida em pacientes considerando apenas os efeitos eletromagnéticos da interação de prótons com o átomo alvo. No entanto, para energias do feixe acima de 20 MeV, Lee e colaboradores construíram uma expressão semi-empírica para o número de prótons removidos do feixe devido a interações com núcleos atômicos [33]. Eles concluíram que cerca de 20% das interações do feixe são com os núcleos atômicos. Matsuzaki e colaboradores obtiveram a densidade de prótons por colisões de prótons e nêutrons com a água [34]. A Figura 1.8 mostra a densidade de próton e a curva de dose absorvida calculados por Matsuzaki e colaboradores.

A partir do estudo das reações de spallation, onde aplicamos um modelo de cascata intranuclear baseado no método de Monte Carlo, podemos descrever a interação entre o feixe de prótons e núcleos atômicos componente do material orgânico [15]. Espera-se que uma investigação teórica em reações prótons no núcleo deva fornecer subsídios da dispersão do feixe enquanto interage no tecido biológico. Através do cálculo da multiplicidade de partículas espalhadas, bem como das suas seções de choque diferenciais, podemos assim avaliar a radiação secundária gerada no processo e determinar a contribuição da dose absorvida na região adjacente ao tecido tumoral, incluindo os órgão densos [35]. Este trabalho tem como objetivo ajudar na elucidação desta questão.

Especificamente estudamos e analisamos os resultados das reações de spallation induzidas por feixe de próton com núcleo de átomos mais abundantes no tecido orgânico. Nos concentramos nas reações de prótons com carbono ( $^{12}\text{C}$ ), nitrogênio ( $^{14}\text{N}$ ), oxigênio ( $^{16}\text{O}$ ) e com fósforo ( $^{31}\text{P}$ ). Para incluir material em tecidos específicos, tais como o material ósseo, consideramos o cálcio ( $^{40}\text{Ca}$ ) em nosso estudo. Além desses, componentes protéticos

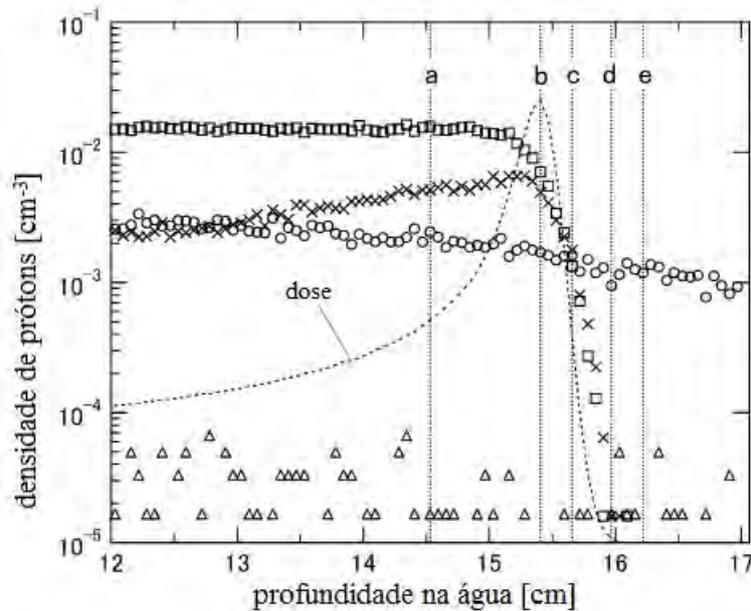


Figura 1.8: Densidade de prótons logo depois da reação nuclear (prótons com energia incidente de 150 MeV) como uma função da profundidade na água. Para colisões inelásticas da reação  $p-^{16}\text{O}$ , os prótons produzidos são representados por  $\square$ . Para colisões inelásticas da reação  $n-^{16}\text{O}$ , são representados por  $\triangle$ . As colisões elásticas da reação  $p\text{-H}$ , os prótons produzidos são representados por  $\times$  e para colisões elásticas da reação  $n\text{-H}$ , por  $\circ$ . A curva pontilhada é a dose absorvida em unidade arbitrária na escala linear. As letras, a-e, representam pontos médios de cinco regiões na curva do pico de Bragg: a - (14,50–14,56 cm) região a esquerda do pico correspondendo a metade da dose absorvida; b - (15,38–15,44 cm) região da localização do pico; c - (15,63–15,69 cm) região a direita do pico correspondendo a metade da dose absorvida; d - (15,94–16,00 cm) região do ponto final do pico; e - (16,19–16,25 cm) região afastada do ponto final do pico de Bragg.

podem também representar uma heterogeneidade para o planejamento do tratamento, logo decidimos ainda analisar reações do feixe com titânio ( $^{48}\text{Ti}$ ), um material típico empregado para corrigir estruturas ósseas.

Além das reações de spallation induzidas por prótons em núcleos leves à energias baixas, a reação  $p+^{208}\text{Pb}$  com energias incidentes entre 0,8 a 2,0 GeV foi objeto de estudos, a partir do rendimento de partículas, espectros de energia e distribuições angulares. No regime de energia e núcleos pesados, calculamos a multiplicidade da evaporação com emissão múltipla de partículas dos núcleos chumbo ( $^{208}\text{Pb}$ ) e mercúrio ( $^{200}\text{Hg}$ ), considerando-os em um estado excitado de energia. A intenção é reproduzir as reações nucleares que ocorrem entre o feixe de um acelerador e o chumbo líquido do núcleo do reator, em um ADS.

Previsões dos processos nucleares em ambas aplicações mencionadas são importante no desenvolvimento de novas tecnologias e no entendimento da matéria nuclear. Vários

modelos computacionais estão em desenvolvimento, mesmo depois de muitos anos de pesquisas, para descrever o mecanismo de spallation. Podemos citar o modelo baseado na equação de transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU) [36] e o Modelo de Dinâmica Quântica Molecular (QMD) [37]. A fase de cascata intranuclear normalmente é elaborada a partir de uma abordagem microscópica, enquanto que para o estágio de evaporação nuclear é usado o modelo estatístico construído em 1937, por Weisskopf [38].

Neste trabalho estudamos as reações de spallation da interação próton-núcleo em energias intermediária, tendo em vista aplicações em protonterapia, e em energias altas como fonte de nêutrons para reatores baseados em ADS. Tal estudo foi realizado a partir do modelo de cascata intranuclear computacional, usando o método de Monte Carlo e o modelo de competição entre evaporação nuclear e processo de fissão. Ambas são simuladas utilizando o MCMC [17].

A tese está organizada da seguinte forma. No Capítulo 2, veremos os aspectos teóricos fundamentais para a abordagem de reações de spallation. Apresentaremos sucintamente dois modelos para o estudo de reações nucleares, o BUU e QMD. No Capítulo 3, detalharemos a fase de cascata intranuclear no MCMC, modelo proposto para o estudo de reações de spallation. A fase de evaporação nuclear bem como a proposta para a evaporação com emissão simultânea de múltiplas partículas no modelo de Monte Carlo são abordadas no Capítulo 4. No Capítulo 5, comentaremos sobre as áreas de aplicações tecnológicas que serviram de motivação para o estudo de reações de spallation, a protonterapia e reatores baseados em sistemas de ADS. O capítulo 6 mostra os principais resultados alcançados ao longo do período do doutoramento, onde são comparados com dados experimentais disponíveis e resultados de outros modelos teóricos. E finalmente, no Capítulo 7, explanaremos as conclusões e perspectivas nesse campo de estudos em outros regimes de energias e aplicações.

# Capítulo 2

## Reações Nucleares de Spallation

A primeira demonstração da ocorrência de reações nucleares com produção de partículas secundárias surge com Rutherford, a partir do bombardeamento com partículas energéticas sobre núcleo atômico, em 1919 [39]. É claro que ao longo dos anos, o desenvolvimento da física nuclear proporcionou vários tipos de mecanismo de produção de partículas em reações nucleares. A Tabela 2.1 mostra algumas reações com a produção de nêutrons.

Tabela 2.1: Alguns tipos de reações nucleares para a produção de nêutrons. O símbolo  $e^-$  representa o elétron e  $f$  representa a fissão.

Processo nuclear	Aplicação técnica	Rendimento de nêutrons
$d$ em $t$	Alvo sólido ( $d, t$ )	$4 \times 10^{-5}(n/d)$
$d$ em Li	Quebra do dêuteron	$3 \times 10^{-2}(n/d)$
$e^-$ sobre $^{238}\text{U}$	Bremsstrahlung do $e^-$	$5 \times 10^{-2}(n/e)$
$^{238}\text{U}(n, f)$	Fissão térmica	3 ( $n/f$ )
p+Hg (1 GeV)	Spallation	30 ( $n/p$ )

Cada processo nuclear, citado na Tabela 2.1, pode ser usado para produção de nêutrons, dependendo da finalidade. É claro que a utilização de uma das reações não depende apenas do rendimento de partículas, mas também de outros fatores, tais como o espectro de energia, a distribuição angular, a disponibilidade de aceleradores adequados e restrições no caso de reatores de fissão. Porém, a partir da Tabela 2.1, percebemos que a produção de partículas secundárias no mecanismo de spallation é muito superior, comparada com a dos outros mecanismos.

Neste capítulo, descreveremos os aspectos da teoria das reações de spallation. Inicialmente, na Seção 2.1, abordaremos um contexto histórico do desenvolvimento dos estudos

teóricos realizados nos últimos 80 anos, deste tipo de reação nuclear e as definições relacionadas a este campo de estudo. Na Seção 2.2, apresentaremos os principais modelos microscópicos desenvolvidos para analisar os processos físicos-nucleares envolvidos no mecanismo de reação de spallation. O primeiro deles foi o método de cascata intranuclear, a ser discutido no Capítulo 3, conforme nossa perspectiva. Um cálculo que inclui os efeitos de campo médio é o modelo de Boltzmann-Uehling-Uhlenbech, descrito pela solução numérica da equação de transporte de Boltzmann. O modelo de BUU está discutido na Subseção 2.2.2. Na Subseção 2.2.1, serão mostrados os conceitos básicos gerais do modelo de Dinâmica Quântica Molecular, onde estuda a dinâmica dos bárions participantes da colisão nuclear.

## 2.1 Resumo Histórico e Definições

Quando partículas energéticas (prótons, nêutrons ou píons) interagem com um núcleo do átomo, um tipo de reação nuclear pode ocorrer, as reações de spallation. A partícula incidente é capturada, deposita energia no ambiente nuclear, deixando para trás um núcleo residual no estado excitado. Então, nucleons e vários fragmentos são emitidos, além da possibilidade do núcleo dividir-se em duas partes. Estas partes finais são chamados de fragmentos de fissão.

As reações de spallation são baseadas em observações experimentais de diferentes estados finais da colisão. Normalmente, observa-se um núcleo de massa nuclear menor (em relação a massa do alvo inicial), um número pequeno de fragmentos leves e nucleons individuais. Tal mecanismo, no qual partículas energéticas causam a produção de inúmeras partículas secundárias do núcleo alvo, deixa um resíduo frio de spallation. Caso detecte-se simultaneamente um grande número de fragmentos de massa intermediária ( $4 < A < 20$ ), este processo indica uma *Fragmentação Nuclear* e não uma reação de spallation. Experimentalmente são observados dois aspectos distintos no espectro das partículas emitidas: uma parte anisotrópica com partículas energéticas, outra parte isotrópica de partículas menos energéticas.

O processo de spallation na física nuclear é definido, de acordo com o dicionário de física da Collis [40], como a redução significativa no número de nucleons de um núcleo após a reação. Spallation é, em outras palavras, um decaimento nuclear com uma grande

produção de partículas resultantes do bombardeamento por radiação ou partícula de alta energia. O principal caso é em interações de radiação cósmica. No entanto, usando alvos de metais pesados em um acelerador pode produzir pulsos de nêutrons (no caso de mercúrio, entre 20 e 30 nêutrons por impacto).

Historicamente, a primeira sugestão de bombardear o núcleo com nêutrons foi dada por N. Bohr em 1936 [41]. Porém, a primeira especulação teórica de incidir partículas, sucessivamente, em vários nucleons do núcleo alvo, de tal forma que haveria uma perda da energia da partícula incidente, foi proposto por Serber em 1947 [1]. Ele notou que, em colisões partícula-núcleo, o comprimento de onda da partícula incidente é aproximadamente igual à distância intranuclear. Dez anos antes dos cálculos de Serber e um ano depois da publicação de Bohr sobre processo nuclear originado por colisões entre partículas e um núcleo [41], Weisskopf sugeriu que o processo de spallation poderia ser estudado com base em um método estatístico, em particular usando conceitos termodinâmicos para os processos nucleares [38]. Além disso, a reação de spallation pode ser tratada como dois estágios bem definidos: o primeiro é a formação do núcleo composto, onde a energia incidente é distribuída entre todos os constituintes do núcleo alvo, e o segundo é a desintegração daquele núcleo residual por um processo de desexcitação, chamando de mecanismo de evaporação, que pode ser tratado aproximadamente como um estágio independente do primeiro. Os primeiros modelos estatísticos, para descrever as interações intranucleares como uma cascata nuclear, foram propostos por Goldberger, em 1948 [42]. Na década de 1950, Metropolis formulou as primeiras simulações computacionais via método de Monte Carlo para cascata intranuclear [43]. Metropolis e colaboradores realizaram cálculos de cascatas nucleares em vários núcleos incididos por nucleons com energia abaixo de 380 MeV. Dostrovsky e co-autores estudaram a partir de simulação Monte Carlo o mecanismo de evaporação nuclear [44]. Outra abordagem para a desexcitação do núcleo residual relacionando a temperatura nuclear e energia de excitação foi dada por Le Couter [45].

As abordagens de Serber e Weisskopf são usadas até os dias de hoje em muitas formulações de Método de Monte Carlo para reações de spallation. A descrição do primeiro estágio, a chamada fase rápida da spallation é um processo de não-equilíbrio. A partícula incidente viaja dentro do núcleo, depositando uma quantidade de energia e momento angular, enquanto partículas são emitidas, como por exemplo nucleons, píons e raios gamas, conforme a representação esquemática da Figura 1.1, caracterizando o mecanismo de pré-

equilíbrio. As partículas incidentes causam uma cascata intranuclear em um intervalo de tempo de aproximadamente  $10^{-22}$ s. O resultado ao final da primeira fase da spallation é um núcleo residual excitado em equilíbrio termodinâmico, com energia de excitação de alguns MeV/nucleon. A segunda fase, o estágio lento da spallation, consiste na desexcitação do núcleo residual, pelo mecanismo da evaporação nuclear de partículas com a emissão isotrópica de nucleons (principalmente nêutrons) e alguns íons leves. O núcleo residual leva aproximadamente entre  $10^{-18}$  a  $10^{-16}$ s para se desexcitar.

Há muito tempo as reações de spallation de próton de alta energia com o núcleo são objeto de interesse por várias razões. Principalmente, a necessidade de conhecer completamente o mecanismo desse tipo de reação nuclear. Tanto em estudos teóricos como do ponto de vista experimental. Os dados experimentais de reações, especificamente medidas de seção de choque de processos elementares (NN, N $\pi$ , etc.), são de fundamental importância para validar os modelos teóricos. Outra razão é a gama de possibilidades de aplicações, isto é, em protonterapia, raios cósmicos, tecnologia para aceleradores e a utilização do processo como fontes de nêutrons. Além disso, as reações são usadas como geração de energia quando o alvo é rejeito nuclear de reatores convencionais com a transmutação de lixo radioativo de alta meia-vida em curta meia-vida.

Os modelos astrofísicos também são arquitetados incluindo os processos de spallation, visto que o transporte de raios cósmicos na atmosfera terrestre é um bom exemplo de reação de spallation. Mashnik e colaboradores mostraram a abundância de raios cósmicos e alguns elementos do sistema solar, que foram produzidos por uma reação de spallation induzida por núcleos de hidrogênio com elementos pesados, liberados em explosões estelares [46].

## 2.2 O Mecanismo de Reação de Spallation

Como vimos anteriormente, Serber foi o primeiro a fazer uma descrição teórica do mecanismo de spallation. Vários modelos microscópios são construídos com o intuito de estudar o primeiro estágio da reação próton-núcleo. Todos eles partem das sugestões de Serber, ou seja, descrevem a reação como uma cascata de colisões nucleon-nucleon, porém explorando hipóteses diferentes. A principal diferença entre os modelos é a alteração do potencial de interação da colisões nucleon-nucleon. Há modelos que se distinguem quanto

às características de dinâmica de campo médio e potencial nuclear estático constante, que são levados em conta ou não, como na maioria dos modelos de cascata intranuclear (INC). Um modelo baseado na equação de transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU) permite mudar dinamicamente o campo e flutuações, usando o método de partícula de teste. O modelo que considera a dinâmica das partículas com suas correlações e flutuações reais é o Modelo de Dinâmica Quântica Molecular (QMD). Nas subseções seguintes, abordaremos os principais conceitos gerais dos modelos QMD e BUU, que são bastante difundidos no estudo das características e propriedades da matéria nuclear.

Dentre os modelos amplamente utilizados para análise de reações nucleares partícula-núcleo, o modelo de Cascata Intranuclear toma destaque, onde podemos ter melhor controle dos processos elementares em diferentes níveis de energia das partículas envolvidas. No próximo capítulo, dedicaremos exclusivamente a descrição detalhada deste método largamente usado para o estudo de reações de spallation no contexto do modelo INC. Por enquanto nos atentamos aos modelos de QMD e BUU na sequência.

### 2.2.1 Modelo de Dinâmica Quântica Molecular

A QMD é uma aproximação [37] para a dinâmica microscópica nas colisões projétil-alvo de  $n$ -corpos. Esta teoria descreve a evolução de uma colisão núcleo-núcleo tentando considerar correlações entre partículas e essencialmente a formação de fragmentos durante o processo colisional, o processo de clusterização de nucleons. Neste modelo, os nucleons do sistema propagam-se sob interações mútuas num espaço de fase com uma distribuição gaussiana, para cada nucleon  $i$ , do tipo:

$$\psi_i(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_{i0})^2}{4L}} e^{i\vec{p}\vec{r}} \quad (2.1)$$

onde  $L \approx 1,08 \text{ fm}^2$  é a largura da gaussiana, e  $\vec{r}_{i0}$  são as coordenadas do centro dos pacotes gaussianos. A normalização é em relação a um nucleon.

O sistema inicial é construído com os centros das gaussianas escolhidos aleatoriamente no espaço de coordenadas e de momento. Primeiramente, as posições ( $\vec{r}_i$ ) dos nucleons são determinadas numa esfera de raio  $R \approx 1,18A^{1/3}$ . Valores mais próximos de  $r_{min} \approx 1,5 \text{ fm}$  são descartados. Em seguida, a densidade local ( $\rho(\vec{r}_i)$ ) na representação de Szilard-Wigner [47], no centro dos nucleons, é determinada por todos os outros nucleons. O momento de

Fermi é calculado a partir da densidade local, isto é,

$$p_F^l = \hbar \left( \frac{3}{2} \pi^2 \rho(\vec{r}_i) \right)^{1/3}. \quad (2.2)$$

Finalmente, o momento ( $\vec{p}_i$ ) de todos os  $i$ -ésimos nucleons também são escolhidos aleatoriamente, entre 0 e  $p_F^l$ .

Dinamicamente, apenas a posição ( $r_i$ ) e o momento ( $p_i$ ) são modificados, a largura da função de onda é mantida fixa. Os valores médios ( $r_{i0}, p_{i0}$ ) são calculados no instante das interações entre as partículas, de acordo com as equações de movimento:

$$\frac{dr_{i0}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{i0}} \quad \text{e} \quad (2.3)$$

$$\frac{dp_{i0}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial r_{i0}}, \quad (2.4)$$

onde o hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_i \frac{p_{i0}^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \quad (2.5)$$

O potencial de interação nucleon-nucleon é normalmente composto por uma interação de curto alcance,

$$V^{loc} \approx \delta(r_1 - r_2) + \delta(r_1 - r_3) + \delta(r_2 - r_3), \quad (2.6)$$

uma interação de longo alcance de Yukawa,

$$V^Y \approx \frac{e^{|r_1 - r_2|/\nu}}{|r_1 - r_2|/\nu}, \quad \nu \approx 0.8\text{fm}, \quad (2.7)$$

e a interação de Coulomb

$$V^C \approx \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|r_1 - r_2|}, \quad Ze \quad \text{é a carga das partículas em interação.} \quad (2.8)$$

Uma vez determinado o instante de colisão entre os pacotes de onda, calcula-se a produção de partículas segundo a seção de choque experimental do espalhamento nucleon-nucleon. Em muitos modelos de QMD, a seção de choque e a ramificação, associada a cada canal de produção são obtidas a partir da parametrização de Cugnon [48].

O modelo de Dinâmica Quântica Molecular tem suas restrições dentro de uma faixa de

energia definida. Existem tentativas de estender o modelo a níveis mais altos de energia com a inclusão de um tratamento relativístico. As primeiras abordagens de uma teoria relativística foi proposta por Sorge e colaboradores [49], e não será discutida no presente trabalho.

## 2.2.2 Modelo de Transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck

Outra teoria ao modelo microscópico de cascata, proposto por Serber, baseado no método de Monte Carlo para a simulação de reações nucleares, foi fundamentada na equação de transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck. A equação de Boltzmann é composta por um potencial médio efetivo,  $U(\vec{r}, \vec{p}_1, t)$ , e com colisões respeitando o princípio de exclusão de Pauli. A equação a ser resolvida numericamente, levando em conta uma função de distribuição de uma partícula teste no espaço de fase,  $f(\vec{r}, \vec{p}_1, t)$ , descrita pela primeira vez na proposta de Bertsch [36], é:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + \left( \frac{\vec{p}_1}{m_1} + \frac{\partial U(\vec{r}, \vec{p}_1, t)}{\partial \vec{p}_1} \right) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U(\vec{r}, \vec{p}_1, t)}{\partial \vec{p}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} \right] f(\vec{r}, \vec{p}_1, t) = \frac{4}{(2\pi)^3} \int d^3 p_2 d^3 p_3 d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \delta^3(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \cdot [f_3 f_4 \bar{f}_1 \bar{f}_2 - f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4]. \quad (2.9)$$

Igualando a zero o lado esquerdo da equação 2.9, ela se torna a Equação de Vlasov [50]. A integral de colisão, no lado direito, depende da seção de choque nucleon-nucleon  $\sigma(\Omega)$ . A diferença da integral da equação de BUU e da integral de colisão clássica de Uehling e Uhlenbeck [51] é o fator de bloqueio de Pauli, último termo da equação 2.9, com a probabilidade das partículas 1 e 2,  $\bar{f}_3 \bar{f}_4$  para os estados finais 3 e 4, e no processo inverso,  $\bar{f}_1 \bar{f}_2$ .

Inicialmente, o núcleo alvo está em repouso ( $\sum \vec{p}_i = 0$ ), mas o momento de cada partícula é determinado dentro de uma esfera de Fermi com raio dado por:

$$p_F(r) = \left( \frac{3\pi^2}{2} \rho(r) \right)^{1/3} \quad (2.10)$$

onde  $\rho(r)$  é a distribuição nuclear de Wood-Saxon, na qual se determina as coordenadas iniciais de todas as partículas do alvo, isto é:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (2.11)$$

onde  $a \approx 0,5$  fm,  $R \approx 1,18 A^{1/3}$  fm é o raio do núcleo alvo e  $\rho_0 \approx 0,17$  n/fm<sup>3</sup> é a densidade de saturação.

A dinâmica das partículas testes nas colisões é governada pelas equações de movimento de Hamilton:

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial U(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)}{\partial \vec{r}_i} \quad \text{e} \quad (2.12)$$

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\vec{p}_i}{\sqrt{m^2 + p^2}} + \frac{\partial U(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)}{\partial \vec{p}_i}, \quad (2.13)$$

onde  $U(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)$  é um potencial de campo médio, dado por:

$$U(\vec{r}) = \frac{3}{4}t_0\rho(\vec{r}) + \frac{7}{8}t_3\rho(\vec{r})^{4/3} + V_0 \int d^3r' \frac{\exp(-\mu|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\mu|\vec{r}-\vec{r}'|} \rho(\vec{r}') + V_{Coul}, \quad (2.14)$$

em que  $t_0 = -1124$  MeV · fm<sup>3</sup>,  $t_3 = 2037$  MeV · fm<sup>4</sup>,  $V_0 = -378$  MeV e  $\mu = 2,175$  fm<sup>-1</sup>, todos estes valores conforme a referência [52].

No contexto do modelo de BUU, partículas são produzidas de acordo com a seção de choque experimental total de espalhamento nucleon-nucleon e a ramificação associada a cada canal de produção novas partículas.

Uma proposta para incorporação de efeitos relativísticos no método BUU, através do cálculo da interação do campo bariônico com os campos mesônicos escalar e vetorial foi abordada por Ko e Li em 1996 [53]. Contudo, a solução da equação de transporte com tratamento relativístico ainda é pouco viável computacionalmente. Além de disso, questiona se os poucos efeitos quânticos contemplados no modelo e sua aplicabilidade em núcleos pesados.

# Capítulo 3

## O Modelo de Cascata Intranuclear

Nos capítulos anteriores, apresentamos os principais aspectos das reações de spallation, bem como alguns modelos mais importante na sua descrição. Foi discutido de maneira sucinta os modelos microscópicos baseados na equação de transporte de Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck e o modelo de Dinâmica Quântica Molecular.

O método de cascata intranuclear criado por Bertini, em 1963, descreve o mecanismo de reação sem dependência temporal e leva em conta apenas interações binárias isoladas no meio nuclear [9]. Mais tarde, esta concepção foi utilizada por Yariv no código ISABEL, que tem a limitação de suprimir colisões entre partículas com momento inferior ao momento de Fermi [54]. Uma descrição da cascata intranuclear levando em conta a dependência temporal do processo, foi dada pelo código INCL do grupo de Liège [48].

Ao longo deste capítulo, descreveremos a teoria e o modelo de cascata intranuclear no contexto do Código MultiCollisional Monte Carlo (MCMC), modelo usado neste trabalho para estudar as reações nucleares de spallation. O MCMC, em princípio, foi desenvolvido para interpretar de forma consistente a maioria dos processos importantes durante as colisões relativísticas para íons pesados. O principal objetivo deste capítulo é a descrição do aspecto nuclear, a evolução temporal do sistema nuclear composto pelo feixe e núcleo alvo.

### 3.1 Modelagem do Núcleo Alvo

O estudo de reações nucleares é sustentado no método de cascata intranuclear, que consiste em descrever o processo de colisão entre partículas e núcleos alvo, como uma

sequência de colisões binárias independentes entre os nucleons do alvo. Aqueles que não participam das colisões binárias seguem em trajetórias retilíneas clássicas. Nesta seção, descreveremos as distribuições de posição e de momento dos nucleons do núcleo alvo, obtendo assim a configuração inicial do sistema. O parâmetro de impacto de cada colisão será discutido. O efeito do potencial nuclear e a barreira coulombiana será discutida e definiremos a massa efetiva dos nucleons ligados.

### 3.1.1 Distribuição da Posições e dos Momentos

A princípio, na simulação computacional de fenômenos nucleares precisamos especificar as condições iniciais das partículas e dos núcleos envolvidos no processo de colisão. Sendo assim, é necessário conhecer o instante inicial, as posições dos nucleons no meio nuclear, as energias e momentos dos respectivos nucleons e o parâmetro de impacto da colisão.

Para definir as posições e os momentos das partículas foram utilizadas distribuições uniformes no volume nuclear  $d\Omega = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$  com  $r_{max} = R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$  e  $r_0 \approx 1,2$  fm, em que  $A$  é o número de massa nuclear do alvo e  $R$  o seu raio. Para simular a configuração inicial do núcleo alvo, as suas coordenadas espaciais são geradas através de um cálculo de Monte Carlo, seguindo uma distribuição de densidade de Wood-Saxon,

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{c}\right)}, \quad (3.1)$$

onde  $\rho_0 \approx 0,17$  n/fm<sup>3</sup> é a densidade de equilíbrio da matéria nuclear com o parâmetro  $c = 0,5$  fm, como já havíamos citado anteriormente. Esta densidade é usada para determinar a distribuição radial, numa descrição de simetria esférica. As coordenadas polares  $(\theta, \phi)$  são sorteadas uniformemente,  $\phi$  estará entre 0 e  $2\pi$ , e o  $\cos\theta$  entre -1 e +1.

As distribuições de momento são dadas a partir de uma esfera de Fermi uniforme com momento de Fermi  $k_F$ , baseadas no modelo de Gás de Fermi de partículas não interagentes, que exige descrever os núcleos com base na definição de um potencial confinante nuclear, ou seja:

$$\hat{H}|p\rangle = \epsilon|p\rangle, \quad (3.2)$$

onde  $H$  é o operador Hamiltoniano, e  $\epsilon$  os autovalores de energias dos autoestados correspondentes. Relativisticamente o operador  $H$  para a evolução intercolisional pode ser

escrito como

$$H = \sqrt{\vec{p}_i^2 + m_0^2}, \quad (3.3)$$

onde  $p_i$  é o momento do nucleon e  $m_0 = 938MeV$ , sua massa livre<sup>1</sup>. Os nucleons estão confinados em um volume  $\Omega = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$ , neste caso, as energias de Fermi não relativísticas podem ser escritas na forma:

$$\epsilon_F^p = \frac{1}{2m_0} \left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{Z}{\Omega}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.4)$$

e

$$\epsilon_F^n = \frac{1}{2m_0} \left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{A-Z}{\Omega}\right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.5)$$

Estas energias são descritas em relação ao fundo do poço esfericamente simétrico. O poço de potencial introduzido tem duplo papel. O primeiro é evitar uma expansão espúria do núcleo devido o movimento de Fermi. O segundo é manter partículas de baixa energia ligadas ao núcleo. Podemos definir o momento de Fermi  $k_F$ , relativisticamente, a luz do código MCMC, como:

$$k_F^p = \sqrt{\epsilon_F^p (\epsilon_F^p + 2m_0)}, \quad (3.6)$$

e

$$k_F^n = \sqrt{\epsilon_F^n (\epsilon_F^n + 2m_0)}. \quad (3.7)$$

Embora na configuração inicial, o sistema de nucleons ligados seja não relativístico no referencial de repouso do núcleo alvo, após as primeiras interações alguns desses nucleons alcançam energias relativísticas. Isto justifica a utilização de uma cinemática relativística para o tratamento da evolução do sistema. A partir dos momentos definidos nas equações 3.6 e 3.7, podemos usar a função de distribuição de um gás de Fermi completamente degenerado no espaço do momento. Os estados fisicamente acessíveis são distribuídos uniformemente entre  $k_{min}^n = 0$  e  $k_{max} = k_F^n$  para os nêutrons, enquanto que para os prótons,  $k_{min}^p = k_F^n - k_F^p$  e  $k_{max} = k_F^n$ . Portanto, as posições e os momentos iniciais dos nucleons são escolhidos aleatoriamente usando a seguinte técnica de inversão da função distribuição acumulativa, isto é,

$$r = R \sqrt[3]{x_1} \quad (3.8)$$

---

<sup>1</sup>No MCMC, o sistema de unidade definido é o natural, em que  $c = \hbar = 1$ . No código não há diferença entre a massa do próton e do nêutron.

$$\varphi = 2\pi x_2, \quad (3.9)$$

$$\cos \theta = (1 - 2x_3), \quad (3.10)$$

$$p = k_F^n \sqrt[3]{x_4} \text{ para n\u00eautrons e} \quad (3.11)$$

$$p = \sqrt[3]{((k_F^n)^3 + (k_{min}^p)^3) x_4 + (k_{min}^p)^3} \text{ para pr\u00f3tons.} \quad (3.12)$$

As vari\u00e1veis  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  e  $x_4$ , que aparecem nas equa\u00e7\u00f5es acima, assumem um valor entre 0 e 1, a cada sorteio. Uma vez conhecido o momento de cada nucleon, sua energia \u00e9 determinada por:

$$E_i = \sqrt{\vec{p}_i^2 + m_0^2} \quad (3.13)$$

Em nosso estudo, na colis\u00e3o pr\u00f3ton-n\u00facleo, o par\u00e2metro de impacto  $b$  tamb\u00e9m \u00e9 sorteado aleatoriamente, n\u00e3o \u00e9 considerado fixo. A fun\u00e7\u00e3o de distribui\u00e7\u00e3o \u00e9 agora dada por:

$$p(b) = \frac{2b}{b_{max}^2}, \quad (3.14)$$

onde  $b_{max} = R = r_0 A^{1/3}$  \u00e9 o par\u00e2metro de impacto m\u00e1ximo. Invertendo, obtemos a express\u00e3o para determinar  $b$ :

$$b = b_{max} \sqrt{x_5}. \quad (3.15)$$

Portanto, estando especificados os momento, energias e posi\u00e7\u00f5es iniciais de todos nucleons no sistema de refer\u00eancia do n\u00facleo, utilizando a transforma\u00e7\u00e3o de Lorentz adequada, estas grandezas s\u00e3o determinadas no sistema de refer\u00eancia onde pretende-se desenvolver o c\u00e1lculo de cascata, ou seja, no sistema de centro de massa ou no de laborat\u00f3rio. Com isto, a configura\u00e7\u00e3o inicial do n\u00facleo alvo est\u00e1 completamente especificada.

### 3.1.2 Massa Efetiva e Potencial Nuclear Confinante

A cinem\u00e1tica de processos colisionais envolvendo b\u00e1rions ligados \u00e9 tratada usando uma massa efetiva  $m^*$ , associada a estas part\u00edculas, diferente da massa livre. A inclus\u00e3o dos efeitos de liga\u00e7\u00e3o nuclear foi elaborada por Medeiros e colaboradores [14], onde a liga\u00e7\u00e3o nuclear fez-se presente na massa efetiva atribu\u00edda a cada nucleon. A raz\u00e3o principal \u00e9 que uma parte da energia cin\u00e9tica da part\u00edcula incidente \u00e9 transformada em energia de

excitação e recuo nuclear.

O conceito de campo médio nuclear não carrega a natureza covariante quando a dinâmica do campo não está explícita, porém a conservação da energia e momento total deve ser garantida. Desta forma, é usada uma aproximação local para o campo médio, isto é, uma correlação entre cada nucleon e o campo mesônico  $\phi_0$ , localmente resulta em uma partícula de massa efetiva, como está ilustrado na Figura 3.1. Assim, considerando que o

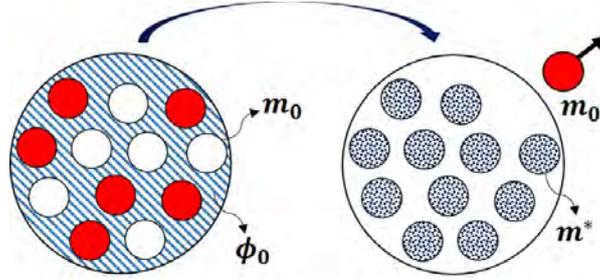


Figura 3.1: Representação simbólica da ideia de massa efetiva. Ao lado esquerdo, um conjunto de nucleons constitui um campo médio (região hachurada) que mantém o núcleo ligado. Ao lado direito, os nucleons  $m_0$  e o campo médio nuclear  $\phi_0$  foram substituídos por partículas com massas efetivas  $m^*$ .

quadrimento dos bárions sujeitos a ação do campo tenha a forma  $p = \left( \vec{p}_i, \sqrt{\vec{p}_i^2 + m^{*2}} \right)$ , com a energia e momento total, para o núcleo com  $A$  nucleons, dados por:

$$E = \sum_{i=1}^A \sqrt{\vec{p}_i^2 + m_i^{*2}} \quad \text{e} \quad (3.16)$$

$$\vec{p} = \sum_{i=1}^A \vec{p}_i.$$

No estado fundamental do núcleo, a energia total de todas partículas não relativísticas é dada por:

$$E = \sum_{i=1}^A \left( m_i^* + \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i^*} \right)$$

$$= m_0 A + \sum_{i=1}^A (m_i^* - m_0) + \frac{1}{2m_0} \sum_{i=1}^A \vec{p}_i^2, \quad (3.17)$$

onde o segundo termo está relacionado à energia de ligação total do núcleo.

A conservação de momento e energia total é satisfeita quando variamos a massa efetiva das partículas. A massa efetiva de nucleons ligados varia na medida em que partículas deixam o núcleo. Assim, durante a fase de cascata quando a  $i$ -ésima partícula escapa do núcleo, sua massa efetiva deve ser substituída pelo valor de massa livre,  $m_i^* \rightarrow m_0$ ,

ou seja, a partícula sofre um processo de “refração nuclear”. Nas refrações de partículas (para aquelas carregadas) a barreira coulombiana foi considerada. E neste caso, para a determinação da probabilidade de tunelamento, consideramos um cálculo semi-clássico utilizando o fator de Gamow [55], a ser discutido mais adiante. As massas efetivas dos bárions ligados são recalculadas por um fator multiplicativo  $\alpha$ ,  $m_j^* \rightarrow \alpha m_j^*$ , sempre que ocorrer um escape de uma partícula.

A partir da condição de conservação da energia e momento total do sistema, ou seja, de acordo com a seguinte condição,

$$\underbrace{\sum_{j=1}^A \sqrt{\vec{p}_j^2 + m_j^{*2}}}_{\text{antes da refração}} = \underbrace{\sqrt{(\vec{p}_i^2) + (m_i^{*2})} + \sum_{j=1}^{A-1} \sqrt{(\vec{p}_j^2) + (m_j^{*2})}}_{\text{depois da refração}}, \quad (3.18)$$

podemos determinar o  $\alpha$  que corrige a massa efetiva do bárion ligado no sistema de repouso do núcleo antes da refração, considerando a energia total do sistema antes e depois da partícula  $i$  sofrer o processo de refração, isto é,

$$E = \sqrt{(\alpha \vec{p}_i)^2 + m_0^2} + \alpha E'. \quad (3.19)$$

O fator  $\alpha$  compensa o quadri-momento dos bárions que compõem o núcleo residual, enquanto que o tri-vetor momento da partícula emitida é alterado pelo mesmo fator. Com este procedimento, as massas efetivas das partículas ligadas evoluem por um fator  $\alpha$  multiplicativo sempre que uma partícula deixa o meio nuclear. Depois de algumas operações algébricas, o fator multiplicativo é definido como

$$\alpha = \frac{E' E - \left[ (E' E)^2 - (E'^2 - p_i^2)(E'^2 - m_0^2) \right]^{1/2}}{(E'^2 - p_i^2)}, \quad (3.20)$$

onde  $E$  é a energia total de todos os bárions antes da saída do  $i$ -ésimo nucleon e  $E'$  é a energia total das partículas remanescentes. Portanto, a massa efetiva dos bárions no interior do núcleo é atualizada a cada processo de refração durante a fase de cascata intranuclear pelo fator  $\alpha$ , a partir da equação 3.20.

Acabamos de ver a cinemática de uma interação da partícula com a superfície, a refração nuclear. Quando uma partícula ligada incide na superfície nuclear, e em vez de ser refratada, ela é refletida, ou seja, as partículas não têm energias suficiente para

ultrapassar o potencial confinante. Neste caso, elas são mantidas no ambiente nuclear denominando o processo como “reflexão nuclear”. Nas reflexões com a superfície, a massa efetiva e a energia da partícula refletida são mantidas constantes, bem como a conservação de energia e momento total do sistema. Isto resulta que na equação 3.19, o primeiro termo do segundo membro é nulo e conseqüentemente  $\alpha = 1$ .

Até o momento, vimos que a massa efetiva sofre correção de modo que exista conservação da energia e momento total, de acordo com a determinação do fator  $\alpha$ . O objetivo agora é determinar o valor da massa efetiva,  $m_0^*$ , na configuração inicial do processo de cascata. Este valor pode ser estimado a partir de teorias de campo médio para a matéria nuclear em equilíbrio. Estes valores variam para diferentes teorias microscópicas [56, 57, 58, 59, 60, 61]. A teoria de campo médio de Walecka é um exemplo na qual considera graus de liberdade mesônicos por troca de mésons escalares e vetoriais [62]. Neste método, defini-se a massa efetiva dos nucleons no meio como:

$$m^* = m_0 - g_s \phi_0 \quad (3.21)$$

onde  $g_s$  é a constante de acoplamento escalar e  $\phi_0$  é um campo médio mesônico escalar, como ilustra a representação na Figura 3.1. No Apêndice A, apresentamos uma rápida descrição dos passos para determinar a massa efetiva numa teoria de campo médio, equação 3.21. Em nossos cálculos, os valores de massa efetiva, próxima a densidade de equilíbrio da matéria nuclear, foram tomados como valores típicos para a variação da massa efetiva dos nucleons na configuração inicial. Para investigar o efeito da intensidade do campo médio nuclear através da massa efetiva, adotamos cinco valores diferentes para massa efetiva inicial dos nucleons,  $m_0^* = 0,6m_0, 0,7m_0, 0,8m_0, 0,9m_0$  e  $1,0m_0$ , onde  $m_0$  é massa do nucleon livre. Consideramos o valor  $m_0^*$  como sendo um parâmetro livre, e analisamos o efeito de sua variação na multiplicidade de partículas e em outros observáveis quando alteramos seu valor inicial.

A introdução da energia de ligação nuclear impõe considerar a reflexão e a refração de nucleons quando eles incidem na superfície do núcleo, e a redistribuição da energia e momento do recuo nuclear entre os constituintes do núcleo residual. No processo de escape através da superfície o nucleon sofre a mudança no momento devido ao potencial nuclear imposto na definição de um sistema ligado. Devido à inclusão do valor inicial de massa efetiva na relação de dispersão do nucleon, a possibilidade de ter partículas

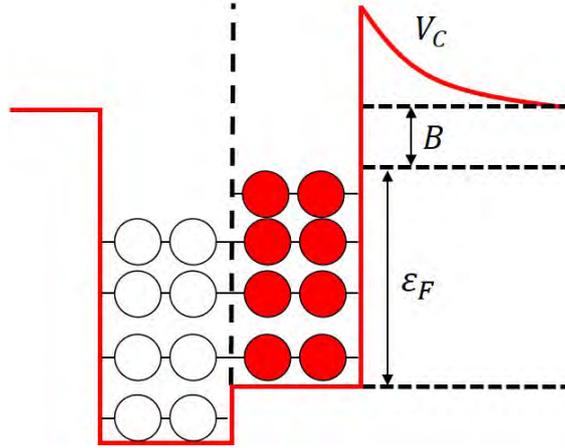


Figura 3.2: Profundidade do potencial nuclear, onde  $B$  é a energia de ligação do nucleon,  $V_C$  é a altura da barreira de potencial de Coulomb e  $\epsilon_F$  é a energia de Fermi.

escapando do sistema nuclear aumenta, devido o movimento de Fermi dos nucleons. Para evitar esta situação anômola e levar a uma situação física factível, nós ajustamos o modelo de potencial nuclear, determinando a profundidade apropriada do poço de potencial confinante. Teoricamente, a profundidade do potencial nuclear, a Figura 3.2 ilustra uma representação esquemática da profundidade do poço de potencial, pode ser estimada como

$$V_0 = \epsilon_F + B, \quad (3.22)$$

onde  $\epsilon_F$  é a energia de Fermi que depende da configuração de níveis<sup>2</sup>,  $B$  é a energia de ligação do nucleon no estado fundamental do núcleo, determinada pelos dados tabelados na literatura [63, 64, 65] e  $V_C$  é a altura da barreira de potencial de Coulomb. Entretanto, preferimos determinar a profundidade do poço, estabelecendo a condição de que o núcleo alvo permaneça estável face ao movimento de Fermi não permitindo o escape de partículas. Isto é feito com a variação direta do valor do potencial  $V_0$ , verificando através do cálculo dinâmico a condição que nenhum nucleon escape, numa escala de tempo superior a do processo de colisão projétil-alvo. O gráfico da Figura 3.3 mostra a relação do potencial calculado com os valores iniciais de massa efetiva do nucleon. Note que as profundidades do potencial foram ajustadas para adequar a distribuição de Fermi, aos valores de massa efetiva e para cada núcleo alvo utilizado. Note que a energia de Fermi é definida em termos da massa efetiva atribuída ao nucleon.

A altura da barreira coulombiana  $V_C$  é calculada na superfície nuclear,  $R = r_0 A^{1/3}$ ,

<sup>2</sup>No nosso cálculo, não consideramos os níveis de energia como é previsto no modelo de camada.

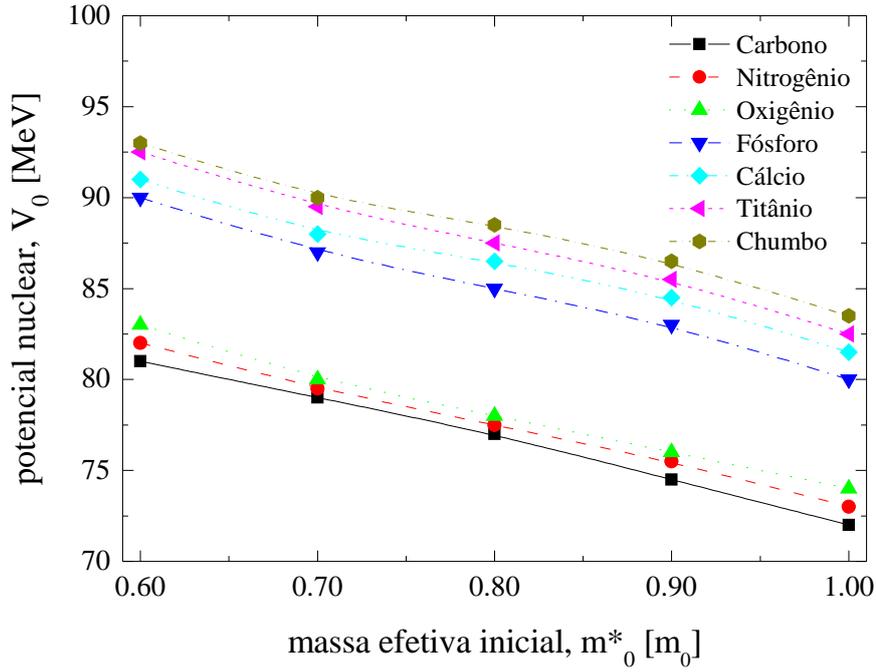


Figura 3.3: Profundidade do poço de potencial nuclear onde a massa efetiva representa os efeitos da energia de ligação no núcleo alvo.

dada pela seguinte expressão:

$$V_C = \frac{e^2 Z_1 Z_2}{R}, \quad (3.23)$$

onde  $e^2 = 1,44$  MeV/fm,  $Z_1$  e  $Z_2$  são as cargas da partículas incidentes e carga remanescente do núcleo, respectivamente. A probabilidade de transmissão é calculada numa aproximação WKB, isto é:

$$T_C = \begin{cases} 1, & \text{para } T_{cin}^0 > V_C \\ e^{-2/\hbar \int_R^r \sqrt{2m \left( \frac{e^2 Z_1 Z_2}{r} - E \right)} dr}, & \text{para } T_{cin}^0 < V_C, \end{cases} \quad (3.24)$$

onde  $T_{cin}^0$  é a energia cinética assintótica ( $r \rightarrow \infty$ ) da partícula emitida e  $r = \frac{e^2 Z_1 Z_2}{E}$ , o raio de retorno clássico. Integrando a equação 3.24, obtemos:

$$T_C = \exp \left[ \frac{-2e^2 Z_1 Z_2}{\hbar \nu} (2W - \text{sen } 2W) \right], \quad (3.25)$$

em que  $\nu = \sqrt{\frac{2E}{m}}$  e  $\cos W = \frac{R}{r}$ . A equação acima é conhecida como Fórmula de Gamow para a probabilidade tunelamento, na aproximação semi-clássica.

Portanto, partículas carregadas têm a possibilidade de ser emitidas na fase de pré-equilíbrio, considerando a probabilidade de tunelamento da barreira coulombiana. De maneira mais geral, as emissões de pré-equilíbrio devem ocorrer caso a partícula considerada tenha energia cinética superior ao potencial nuclear, ou seja:

$$T_{cin} > V_0 \quad \text{para partículas neutras} \quad (3.26)$$

$$T_{cin} > V_0 + V_C \quad \text{para partículas carregas} \quad (3.27)$$

Na próxima seção, abordaremos a dinâmica evolutiva do processo de cascata intranuclear no modelo MCMC, utilizado neste trabalho. Tal processo leva em conta a evolução temporal de múltiplos espalhamentos binários até que o sistema tenha atingido seu equilíbrio térmico. Abordaremos o critério de colisão, o princípio de exclusão de Pauli e os processos energéticos de não equilíbrio e pré-equilíbrio bem como a formação do núcleo residual composto e sua energia de excitação final.

## 3.2 Dinâmica da Cascata Intranuclear

A evolução temporal da cascata e a cinemática de processos colisionais, envolvendo bárions ligados, são tratadas usando uma massa efetiva  $m^*$  associada a estas partículas. Adotamos apenas colisões binárias entre as partículas. Com isso, o andamento temporal de cada história simulativa de colisão entre nucleons foi feito por passos, onde o sistema evolui a intervalos de tempo  $\Delta t$ , determinado em cada instante  $t$  como sendo aquele associado à colisão do par  $ij$  que possui a menor distância de aproximação. Este intervalo de tempo é definido como

$$\Delta t_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}}{2\vec{v}_{ij}^2} \quad (3.28)$$

onde  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  é a distância relativa e  $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$  é a velocidade relativa entre as partículas  $i$  e  $j$  no instante inicial  $t$ . A Figura 3.4 ilustra de maneira representativa a colisão do par  $ij$ .

O critério de colisão entre duas partículas é estabelecido com a seguinte condição; a distância entre as partículas  $i$  e  $j$  seja inferior ou igual ao alcance efetivo da interação, entre os dois nucleons, isto é,

$$d_{ij} \leq \sqrt{\frac{\sigma_{ij}(s)}{\pi}}, \quad (3.29)$$

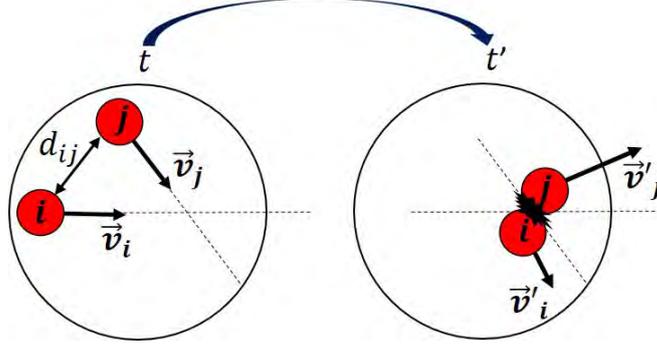


Figura 3.4: Representação esquemática de uma colisão binária entre as partículas  $i$  e  $j$ , após um intervalo de tempo  $\Delta t$ .

onde  $\sigma_{ij}(s)$  é a seção de choque total do processo nucleon-nucleon para uma energia total no centro de massa (extraídas de dados apresentados nas literaturas [14, 66, 67]), é parametrizada em termos da massa invariante,

$$\sqrt{s} = \sqrt{(E_i + E_j)^2 - (\vec{p}_i + \vec{p}_j)^2},$$

e  $d_{ij}$  é a distância mínima entre o par  $ij$  no sistema de repouso de um dos nucleons envolvido na colisão. A distância de máxima aproximação entre o par de partículas, Figura 3.4, é dada por:

$$d_{ij} = (\vec{r}_{ij})^2 + \frac{2m_i m_j}{f(s)g(s)} \left[ f(s) \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i}{m_i} - 2\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_j \right] \left[ f(s) \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_j}{m_j} - 2\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i \right], \quad (3.30)$$

onde,

$$f(s) = \sqrt{g(s) + s - m_i^2 - m_j^2}$$

e

$$g(s) = [s - (m_i + m_j)^2] [s - (m_i - m_j)^2].$$

O princípio de conservação de energia e momento é usado para determinar os momentos e energias finais das partículas envolvidas na colisão binária, está é tratada como um processo instantâneo. O ângulo de espalhamento é sorteado de acordo com uma distribuição angular experimental de interações bárions-bárions. Assim, no instante  $t' = t + \Delta t_{ij}^{min}$ , determina-se o novo par  $ij$  de máxima aproximação para processar a próxima colisão. Os estados finais das partículas envolvidas na colisão são testados quanto ao mecanismo de bloqueio de Pauli (discutiremos na seção 3.2.1). Caso a interação seja possível, os res-

pectivos quadri-momentos são atualizados conservando-se a energia e momento. Caso contrário, a interação não é processada e tomamos o próximo instante  $\Delta t$  de correspondente a máxima aproximação.

Além das colisões elásticas as colisões inelásticas também são consideradas a partir da produção de píons, káons, ressonâncias bariônicas e híperons ao longo da evolução temporal do sistema. Os processos colisionais que levamos em conta no modelo estão ilustrados na Tabela 3.1. Para simulação via Monte Carlo foram considerados dezesseis tipos distintos de partículas: os nucleons ( $n$ ,  $p$ ), as ressonâncias delta ( $\Delta^-$ ,  $\Delta^0$ ,  $\Delta^+$ ,  $\Delta^{++}$ ), as ressonâncias  $N^*(1440)$  ( $N^{*0}$ ,  $N^{*+}$ ), os mésons  $\pi$  ( $\pi^-$ ,  $\pi^0$ ,  $\pi^+$ ), o híperons ( $\Lambda$ ,  $\Sigma^-$ ,  $\Sigma^0$ ,  $\Sigma^+$ ) e méson estranho  $k$  ( $k^+$ ).

Tabela 3.1: Processos de colisões considerados na descrição do MCMC. A letra  $B$  representa um bárion,  $N$  especifica um nucleon,  $\Delta$  representa um dos estados da ressonância delta,  $N^*$  significa os estados da ressonância nucleônica de 1440 MeV,  $Y$  representa um dos híperons e por fim,  $K$  especifica o méson estranho  $k^+$ .

<b>Interação</b>	<b>Descrição</b>
$B_1 B_2 \rightarrow B_1 B_2$	Colisão elástica bárion-bárion
$NN \rightarrow N\Delta$	Formação da ressonância delta
$N\Delta \rightarrow NN$	Recombinação da ressonância delta
$NN \rightarrow NN^*$	Formação da ressonância $N^*$
$NN^* \rightarrow NN$	Recombinação da ressonância $N^*$
$\Delta \rightarrow N\pi$	Produção de píons a partir do decaimento da ressonância delta
$N^* \rightarrow N\pi$	Produção de píons a partir do decaimento da ressonância $N^*$
$N\pi \rightarrow \Delta$	Absorção de píons
$N\pi \rightarrow N^*$	
$B_1 B_2 \rightarrow BYK$	Produção de híperons e káons em colisão bárion-bárion

A seção de choque da colisão elástica, primeiro processo considerado na Tabela 3.1, foi obtida a partir do espalhamento elástico experimental próton-próton da referência [68]. As seções de choque para as formações das ressonâncias  $\Delta$  e  $N^*$  foram definidas a partir de um ajuste dos dados experimentais para a seção de choque inelástica próton-próton [69]. No processo de recombinação das ressonâncias, as seções de choque foram obtidas a partir da relação de balanço detalhado (balanço baseado nas taxas de decaimento e seções de choque na condição de equilíbrio térmico), onde a cinemática das partículas participantes da colisão foi levada em conta, de forma que ressonâncias com baixa energia cinética em relação ao meio nuclear têm maior chance de serem recombinadas [70]. Os processos fundamentais e suas seções de choque são apresentados detalhadamente no Apêndice B.

A produção de píons foi considerada unicamente pelo decaimento das ressonâncias  $\Delta$

e  $N^*$ , sendo a meia-vida destas ressonâncias obtidas a partir da semi-largura da curva de distribuição de suas massas. Na Tabela 3.2, estão disponíveis os valores da semi-largura das ressonâncias, considerados neste cálculo. Nos efeitos de absorção de píons [71], consideramos as seções de choque de Wolf [72], obtidas por uma normalização da distribuição de Breit-Wigner, em termos da seção de choque máxima para a absorção de píons, com formação da ressonância  $\Delta(1232)$  ou da ressonância  $N^*(1440)$ . Dessa forma, a produção de píons foi o resultado da competição entre os processos de produção e absorção de píons durante a reação próton-núcleo. Mais detalhes são expostos no Apêndice B.

Tabela 3.2: Semilargura e vida média da ressonância  $\Delta(1232)$  e  $N^*(1440)$  empregadas no presente modelo.

Ressonância	$\Gamma$ semi-largura (MeV)	$\tau$ (fm/c)
$\Delta$	115.0	1.71
$N^*$	200.0	0.98

Para os processos de produção de káons, acompanhados aos de híperons devido à conservação de estranheza, as seções de choque foram obtidas a partir da parametrização proposta por Schürmann e Zwermann [73]. Eles estabeleceram uma seção de choque para a formação de káons dada por:

$$\sigma_{NN \rightarrow BYK} = 0,8 [p_{max}(GeV)]^4 mb \quad (3.31)$$

onde  $p_{max}^2 = \frac{1}{4s} [s - (m_N + m_\Lambda + m_k)^2] [s - (m_N + m_\Lambda - m_k)^2]$  é o máximo momento possível para káon e  $m_N$ ,  $m_\Lambda$  e  $m_k$  são as massas do nucleon, do lambda e do káon, respectivamente.

Além dos processos colisionais, também foram considerados os processos de perda de partículas do núcleo por refração e reflexão das partículas na superfície nuclear, como enfatizamos na seção anterior. Atribuímos um tempo de encerramento para a fase de cascata considerando que nenhuma partícula possa ser ejetada por refração, todas as colisões são elásticas e conseqüentemente não ocorre o decaimento e nem a produção de partículas no sistema. Em seguida, prepara-se uma nova situação inicial de nucleons, que evolui a intervalos de tempo  $\Delta t_{ij}$  e processando as colisões intranucleares, até o término do processo de interação próton-núcleo, e ao final, avaliar os observáveis obtidos estatisticamente no modelo.

### 3.2.1 Mecanismo de Bloqueio de Pauli

Observa-se que em nossa abordagem, diferentemente dos cálculos de cascata convencionais, consideramos a evolução de todos os nucleons no sistema, levando em conta todas as possíveis colisões bárion-bárion e méson-bárion. Uma vez que estamos lidando com a evolução completa, em vez de um sistema de muitas partículas, este procedimento permite tratar ao mesmo tempo a fase rápida e a fase de pré-equilíbrio como uma única abordagem teórica.

As simulações de reações nucleares tratam de sistemas fermiônicos em interação, conseqüentemente, o Princípio de Exclusão de Pauli torna-se um ingrediente importante na determinação do nível de excitação do núcleo alvo após ser bombardeado pelo feixe de prótons. Assim, para que as colisões entre nucleons sejam processadas, deve-se examinar a disponibilidade do espaço de fase na vizinhança do estado final das partículas envolvidas na colisão.

Uma maneira de satisfazer aproximadamente a requisição deste princípio consiste em considerar que abaixo de um valor característico da energia por nucleon (nos cálculos admitiu-se a própria energia de Fermi para este valor) os estados estão ocupados, portanto, a colisão é permitida somente quando a energia das partículas envolvidas na colisão no estado final for superior a energia de Fermi, ou seja,

$$\epsilon_k \geq \epsilon_F = \frac{k_F^2}{2m_0^*}. \quad (3.32)$$

Esta foi a condição de bloqueio de Pauli adotada no presente trabalho.

Outra possibilidade de procurar “imitar” a atuação do princípio considera que a vizinhança de cada nucleon no espaço de fase consiste numa célula nele centrada de volume  $h^3$ . Caso a ocupação da célula fosse superior a  $(2S+1)(2I+1)$  para partículas da mesma espécie, a colisão seria proibida, onde  $S$  e  $I$  são os graus de liberdade de spin e isospin, respectivamente, das partículas [74].

Na segunda condição, a energia das partículas no estado final de uma dada colisão seria comparada com a energia de Fermi. Como do ponto de vista computacional esta segunda possibilidade seria muito mais onerosa em termos de tempo de cálculo, a opção recaiu sobre a prescrição anterior, embora menos elaborada.

### 3.2.2 Encerramento da INC e o Cálculo da Energia de Excitação

A fase rápida da reação de spallation deve corresponder a um período de tempo no qual ao menos uma partícula tenha energia cinética suficiente para ser emitida do núcleo. Portanto, o sistema atinge o equilíbrio quando nenhuma partícula tem energia cinética suficiente nem pode tunelar a barreira de potencial. Outro ponto a ser considerado é que para energias acima do limiar de píons, é necessário introduzir critérios adicionais de parada, uma vez que pode haver a produção de ressonâncias e mésons no volume nuclear. A este regime de energia todas as ressonâncias produzidas tenham decaído e todos os mésons devem estar fora do volume nuclear para que a cascata seja encerrada.

A utilização de uma massa efetiva do nucleon na fase de cascata pode trazer implicações no tempo de relaxação do sistema, na fase de pré-equilíbrio. Assim, o tempo de encerramento é um aspecto importante para o cálculo da fase rápida da reação. Um vez que, por questões práticas de cálculo, este tempo não pode ser determinado ao longo da reação (uma solução “cara” computacionalmente seria determinar o instante que a taxa de reação caísse até um valor pré-determinado). Devemos determinar o tempo que melhor conforme uma estatística razoável para os principais observáveis do cálculo. Consideramos como principal observável o rendimento de prótons e nêutrons na fase rápida e investigamos como estes observáveis evoluem em função do tempo de encerramento da fase de cascata.

Ressaltamos que a investigação do tempo apropriado para encerrar a fase de cascata é analisado para cada potencial nuclear confinante correspondente a sua respectiva massa efetiva inicial para a reação. Realizamos esse estudo para os valores de potencial disponíveis na Figura 3.3. Observa-se claramente que os valores para os rendimentos de prótons e nêutrons mudam significativamente em função do potencial confinante, visto que quanto mais profundo é o poço de potencial menor é a probabilidade da partícula escapar. Esta abordagem permite determinar a forma mais adequada de se tratar estas reações nucleares para os núcleos alvo e as energias incidentes no campo de aplicação em questão.

Por meio de transferência de energia de partículas energéticas para o núcleo alvo por colisões nucleon-nucleon, o sistema atinge um equilíbrio térmico com uma energia de excitação final ou a temperatura do núcleo residual. Esta energia de excitação do núcleo residual é uma quantidade determinante na evaporação nuclear, como iremos discutir no próximo capítulo. A energia de excitação do sistema é definida como a diferença de

energia cinética do núcleo alvo. Após o encerramento da fase de cascata, o núcleo residual é formado por  $(A - N)$ -nucleons. Lembrando que podemos ter a produção de  $M$ -mésons. Porém, na configuração inicial o núcleo alvo é um gás de Fermi, como também no estado final. Desta forma, a energia de excitação é dada por:

$$\begin{aligned}
 E^* &= \sum_{j=1}^{A'} (T'_j - T_j) \\
 &= \sum_{j=1}^{A'} [(E'_j - E_j) - (m^* - m_0^*)], \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

onde  $T$  e  $E$  referem-se a energia cinética e energia total dos nucleons ligados, respectivamente. Um fato a ser comentado aqui é que a energia de excitação é a temperatura do gás de Fermi.

Portanto, neste capítulo vimos as principais características da abordagem multicollisional do código MCMC desenvolvido ao longo dos anos, que estão esquematizadas na Figura 3.5. Este trabalho contribuiu com as melhorias no estado fundamental do núcleo alvo, baseado na distribuição de momenta dentro de uma modelo de Gás de Fermi, em que o sistema apresenta energia de ligação a partir da definição de massa efetiva do nucleon, estando estes nucleons confinados em um potencial nuclear cuja profundidade depende de  $A$  e de  $m_0^*$ . A massa efetiva é determinada a partir da conservação de energia e momento total quando ocorre a emissão de partículas, definindo assim uma etapa de pré-equilíbrio. O princípio de exclusão de Pauli, nesta tese, foi reformulado também para interação primária e para o processo de absorção de píons. Outro ponto comentado diz a respeito ao cálculo da energia de excitação, considerando toda a cinemática de partículas com massa efetiva.

No próximo capítulo apresentaremos os procedimentos para descrever a desexcitação do núcleo residual formado na primeira fase da reação de spallation. A fase de evaporação para núcleos leves não compete com o processo de fissão quando estudamos a reação de spallation em baixas energias (núcleos leves), visando aplicações futuras em protonterapia.

Uma nova proposta será apresentada para o cálculo de evaporação de múltiplas emissões de partículas. Inicialmente o código de evaporação com múltiplos canais foi introduzido neste trabalho para o estudo de desexcitação de núcleos residuais (pesados), como no combustível de reatores acionados por aceleradores - ADS. Onde a faixa de energia é

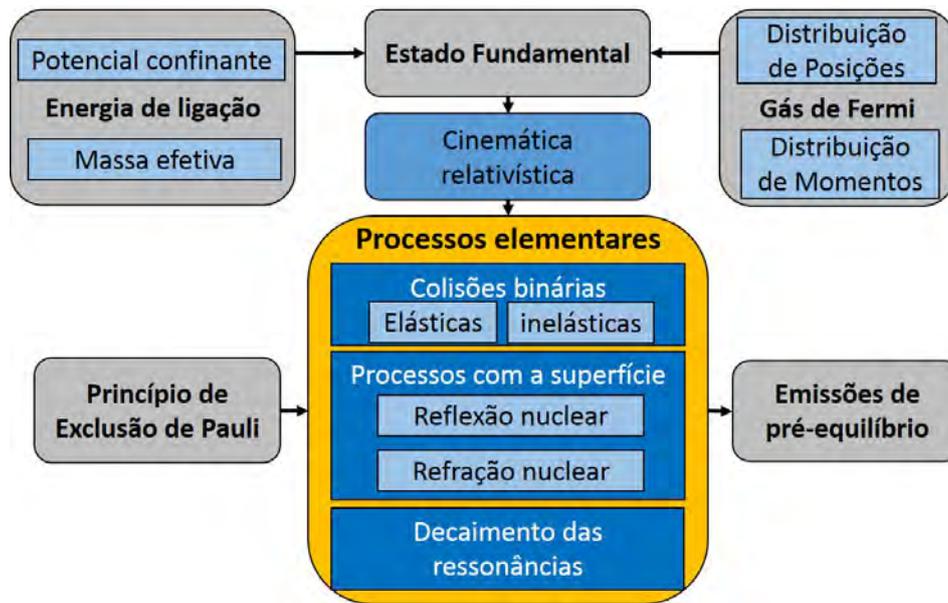


Figura 3.5: Esquema das principais características do código desenvolvido pelo grupo de física nuclear do CBPF ao longo dos últimos 25 anos.

nitidamente mais alta do que em aplicações em protonterapia [75].

# Capítulo 4

## Modelo da Evaporação Nuclear

Neste capítulo, descreveremos o processo de decaimento do núcleo residual formado no fim da fase de cascata intranuclear, como mencionamos na última seção do capítulo anterior. Ao final da fase de cascata a energia de excitação do núcleo residual é determinada e a fase de evaporação começa, o segundo estágio da reação nuclear de spallation. O sistema nuclear é relaxado e uma temperatura é definida para o sistema. O processo de desexcitação do núcleo quente é baseado no modelo estatístico de Weisskopf [38], em que é usado o método de competição entre emissões de partículas e fissão nuclear. Em muitos modelos existentes para o estudo de spallation, a fase de evaporação é descrita considerando este método estatístico. O modelo de evaporação de múltiplas emissões será discutido no final do capítulo. Inicialmente, o código de evaporação de múltiplas emissões foi desenvolvido para o estudo de desexcitação de núcleos residuais do combustível de reatores, como por exemplo, chumbo e mercúrio. O objetivo futuro é usar o método de evaporação de múltiplas emissões em núcleos leves e em baixas energias incidentes de forma a reproduzir resultados experimentais de reações nucleares.

### 4.1 Evaporação Convencional/Fissão Nuclear

Na fase de evaporação, os nucleons que não escaparam diretamente do núcleo na fase de cascata intranuclear, termalizam-se formando um núcleo residual de cascata que ainda se encontra em um estado excitado. O mecanismo de desexcitação do núcleo residual de cascata é a competição entre os processos de evaporação e fissão nuclear, no qual algumas partículas escapam do núcleo e/ou a fissão nuclear ocorre. O processo inteiro é

governado pelas probabilidades relativas dos processos individuais, que são determinadas utilizando-se propriedades físicas do núcleo quente descrito como um gás de Fermi.

A teoria da evaporação convencional baseia-se nas prescrições do modelo estatístico de Weisskopf [38]. As probabilidades de emissão simples sequencial de partículas e fissão podem ser determinadas como

$$P_k = \frac{\Gamma_k}{\left(\sum_i \Gamma_i\right)}, \quad (4.1)$$

com  $\Gamma_k$  sendo a largura do  $k$ -ésimo canal no cálculo das emissões simples de partículas, em que  $k$  representa o processo de emissão de prótons, nêutrons, partículas alfa e o processo de fissão. A larguras de emissão de partículas segue a expressão original de Weisskopf, dada por,

$$\Gamma_k = \frac{r^2 m_k}{2\pi^3 \hbar^2} (E^* - \bar{E}_k) a_k \exp \left[ 2\sqrt{a_k (E^* - \bar{E}_k)} - 2\sqrt{a_k E^*} \right], \quad (4.2)$$

onde  $r$  é o raio do núcleo residual,  $m_k$  é massa da partícula evaporada. O parâmetro  $a_k$  é a densidade de nível do gás de Fermi, relacionado por

$$a_k = r_k a_n,$$

para todos os processos de emissão de partículas. A constante  $r_k$  é adimensional, no qual tomamos a relação,  $a_k = a_n = a_p = a_\alpha = a$ , como estabelecido na descrição de Le Couteur [45]. A densidade de nível é parametrizada, de acordo com a abordagem de Tavares [76], como

$$a = \tilde{a} \left\{ 1 + [1 - \exp(-0,05E^*)] \frac{\Delta M}{E^*} \right\}, \quad (4.3)$$

em que  $\Delta M$  (em MeV) é a correção de camada para massa nuclear, sendo usada a fórmula de massa semi-empírica de Myers e Swiatecki [64] para núcleos pesados, e para núcleos leves a fórmula de massa de Weizsäcker-Skyrme [63]. O valor assintótico,  $\tilde{a}$ , é determinado por uma regra sistemática fenomenológica construída da análise de outras reações nucleares [76], dado por:

$$\tilde{a} = 0,114A + 0,098A^{\frac{2}{3}} MeV^{-1}. \quad (4.4)$$

A energia de excitação do núcleo residual após a emissão de uma partícula  $k$  é dada

por

$$E_k^* = E^* - \bar{E}_k \quad (4.5)$$

onde,  $\bar{E}_k$  é a energia total média removida do sistema nuclear excitado pela emissão da  $k$ -ésima partícula. A equação 4.5 é obtida a partir da distribuição térmica do núcleo quente com energia de excitação  $E^*$  [76, 77]. Para evaporação de nêutrons,  $\bar{E}_k$  é dada por

$$\bar{E}_n = S_n + 2\sqrt{\frac{E^* - S_n}{a}}, \quad (4.6)$$

para a de prótons,

$$\bar{E}_p = (V_p + S_p) + 2\sqrt{\frac{E^* - (V_p + S_p)}{a}} \quad (4.7)$$

e para evaporação de partículas alfa temos,

$$\bar{E}_\alpha = (V_\alpha + S_\alpha) + 2\sqrt{\frac{E^* - (V_\alpha + S_\alpha)}{a}}. \quad (4.8)$$

Estas energias são calculadas considerando os valores de energia de separação de nêutrons, prótons e partículas alfa, dadas por  $S_n$ ,  $S_p$  e  $S_\alpha$ , respectivamente, e das alturas da barreiras de potencial de Coulomb para emissão de partículas carregadas,  $V_p$  (próton) e  $V_\alpha$  (alfa). As energias de separação foram parametrizadas conforme as referências [78, 79], dadas por Montagna e colaboradores. A energia de separação do nêutron, em MeV, é dada por

$$S_n = -0,16(A - Z) + 0,25Z + 5,6, \quad (4.9)$$

enquanto que as energias de separação do próton e da partícula alfa são calculadas, respectivamente, pelas expressões

$$S_p = m_p + m(A - 1, Z - 1) - m(A, Z) \quad (4.10)$$

e

$$S_\alpha = m_\alpha + m(A - 4, Z - 2) - m(A, Z). \quad (4.11)$$

As barreiras de Coulomb efetivas conforme a descrição na subseção 3.1.1, apresentadas por Túlio na referência [80], são utilizadas para calcular a energia média removida,  $\bar{E}_k$ ,

para as emissões de prótons e alfa, dadas por

$$V_p = C \frac{K_p(Z-1)e^2}{r_0(A-1)^{1/3} + R_p} \quad (4.12)$$

e

$$V_\alpha = C \frac{2K_\alpha(Z-2)e^2}{r_0(A-4)^{1/3} + R_\alpha}. \quad (4.13)$$

As constantes  $K_p = 0,70$  e  $K_\alpha = 0,83$  são as correções de penetrabilidade da barreira coulombiana para prótons e partículas alfa, respectivamente, da referência [80]. Os raios destas partículas são dados como  $R_p = 1,14$  fm e  $R_\alpha = 2,16$  fm, e  $r_0 = 1,2$  fm [20, 21], e  $e$  é a carga elétrica. Nas equações 4.12 e 4.13,  $C$  é a correção da barreira coulombiana devido a temperatura nuclear, dada por

$$C = 1 - \frac{E^*}{B}, \quad (4.14)$$

onde  $B$  é a energia de ligação total do núcleo depois da emissão, tal parametrização foi proposta por Tavares em 1992 [81].

Portanto, uma vez definidas todas as grandezas envolvidas, a partir da equação 4.2, as razões entre larguras de decaimento de emissão de partículas e a emissão de nêutrons, dada pela teoria estatística de Weisskopf, são determinadas por

$$\frac{\Gamma_p}{\Gamma_n} = \frac{E_p^*}{E_n^*} \exp \left[ 2\sqrt{a} \left( \sqrt{E_p^*} - \sqrt{E_n^*} \right) \right], \quad (4.15)$$

para a emissão de prótons. E para a emissão de partículas alfa,

$$\frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_n} = \frac{2E_\alpha^*}{E_n^*} \exp \left[ 2\sqrt{a} \left( \sqrt{E_\alpha^*} - \sqrt{E_n^*} \right) \right]. \quad (4.16)$$

Para cada etapa da cadeia de evaporação, o processo de fissão compete com as emissões de partículas individuais.

A largura do processo de fissão é calculada a partir do tratamento de gota líquida do modelo de Borh e Wheeler [82, 83], fazendo o uso da equação. (4.2) obtemos para a razão de probabilidade da fissão,

$$\frac{\Gamma_f}{\Gamma_n} = \frac{K_0 a \left[ 2\sqrt{a_f E_f^*} - 1 \right]}{4A^{2/3} a_f E_n^*} \exp \left( 2\sqrt{a_f E_f^*} - 2\sqrt{a E_n^*} \right), \quad (4.17)$$

onde a correção efetiva do fator da barreira de fissão devido ao tunelamento de fragmento é estimada como  $K_0 = 14,39 \text{ MeV}$  [76]. A energia disponível para formação dos fragmentos de fissão do núcleo residual,  $E_f^*$ , é dada por

$$E_f^* = E^* - B_f, \quad (4.18)$$

onde  $B_f$  é a barreira de fissão que é dada por

$$B_f = CB_{f0},$$

com a barreira de fissão do estado fundamental, como pode ser esquematizada pela ilustração da Figura 4.1, expressa por

$$B_{f0} = \Delta m - \Delta M. \quad (4.19)$$

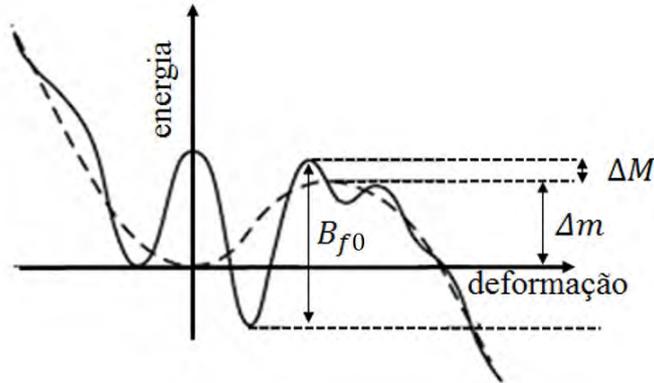


Figura 4.1: Representação dos elementos que definem da altura da barreira de fissão no estado fundamental do núcleo, conforme a equação 4.19.

O efeito de correção de camada é levado em consideração, quando se determina a altura da barreira de fissão. A Figura 4.2 mostra a altura da barreira em função do número atômico e número de massa, ou seja,  $B_{f0}(Z, A)$ . A massa nuclear no ponto de sela  $\Delta m$  foi obtida também da fórmula de massa semi-empírica de Myers e Swiatecki [64]. O fator C é a correção térmica efetiva, equação 4.14, usado também para definir a barreira coulombiana. Para o parâmetro de densidade de nível nuclear para fissão, temos  $a_f = r_f a_n = r_f a$ , proposto por Tavares na referência [84], em que  $r_f$  é dado por

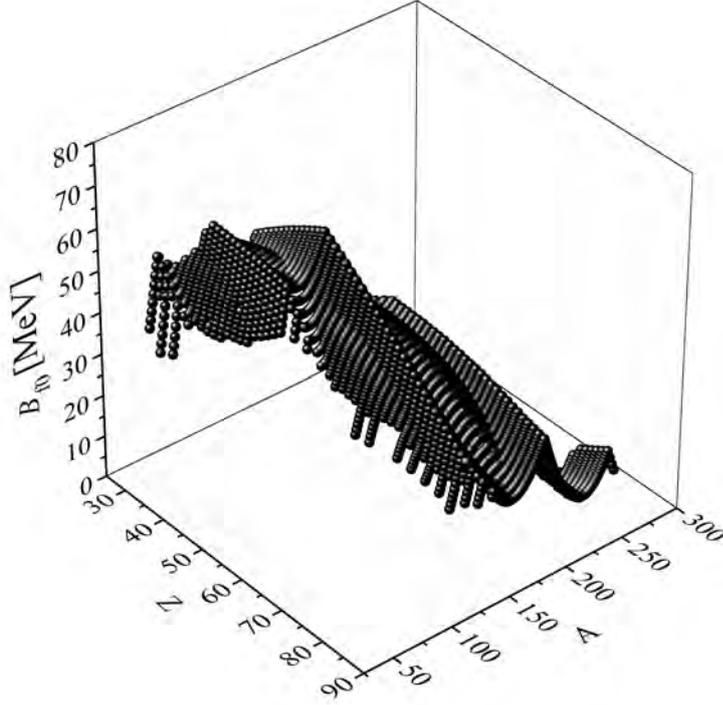


Figura 4.2: Efeito de camada na barreira de fissão no estado fundamental do núcleo extraído de dados experimentais utilizados no cálculo.

$$r_f = 1 + \frac{p}{(E^*)^q}, \quad (4.20)$$

onde a função  $p$  e  $q$  são expressos, respectivamente, por,

$$p = \begin{cases} \exp [0, 257(217 - A)], & 210 < A \leq 232 \\ \exp [0, 150(222 - A)], & 140 < A \leq 210 \\ \exp [0, 0388(176 + A)], & 30 < A \leq 140 \end{cases}$$

e

$$q = \begin{cases} 0, 0352(235 - A), & (140 < A \leq 235) \\ 0, 0129(119 + A), & (30 < A \leq 140). \end{cases} \quad (4.21)$$

Estas expressões são resultado de parametrização considerando energias de excitação superiores a 40 MeV. Neste trabalho, extrapolamos as mesmas para valores mais baixos.

A cada etapa da cadeia de evaporação determinamos as razões das larguras de decaimento (“branching ratios”) dos canais considerados. Portanto as probabilidades de emissão simples sequencial de partículas e processo de fissão são

$$F = \frac{\Gamma_f}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f}, \quad (4.22)$$

$$N = \frac{\Gamma_n}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f}, \quad (4.23)$$

$$P = \frac{\Gamma_p}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f}, \quad (4.24)$$

e

$$H = \frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f}. \quad (4.25)$$

Onde  $F$  é a probabilidade do núcleo residual fissionar,  $N$  é a probabilidade do núcleo emitir um nêutrons,  $P$  é a probabilidade de emitir um próton e  $H$  a probabilidade de emitir uma partícula alfa. Uma vez que um destes canais foi escolhido, o número atômico e o número de massa são recalculados, exceto o canal de fissão, por:

$$Z_{i+1} = Z_i - \Delta Z_i \quad (4.26)$$

e

$$A_{i+1} = A_i - \Delta A_i \quad (4.27)$$

onde  $\Delta Z_i$  e  $\Delta A_i$  são, respectivamente, o número atômico e número de massa da partícula ejetada na  $i$ -ésima etapa da evaporação. A energia de excitação conseqüentemente é modificada devido à evaporação das partículas em cada etapa, ou seja:

$$E_{i+1}^* = E_i^* - \bar{E}_{ki}, \quad (4.28)$$

onde  $\bar{E}_{ki}$  é a energia média total removida pela partícula  $k$  evaporada na  $i$ -ésima etapa. Este processo continua até a energia de excitação do núcleo não ser suficiente para a emissão de partículas por evaporação. A cadeia de decaimento é encerrada sempre que ocorre a fissão, caso contrário a cadeia prossegue até que a energia de excitação esteja esgotada. Quando isto acontece o núcleo composto é o produto residual de spallation.

Devido a limitação da aplicabilidade dos modelos que determinam as larguras de decaimento e fissão: restringimos o decaimento  $\alpha$  a núcleos residuais com  $Z > 8$ . O canal de fissão apenas estará aberto para núcleos residuais com  $Z > 30$ , tendo em vista a definição da barreira de fissão  $B_{f0}$  do modelo de gota líquida. Um cálculo de Monte

Carlo é utilizado para simular a fase de evaporação, e a cada passo, o canal de emissão é sorteado para determinar o novo ramo da cadeia de decaimento. Normalmente para núcleos pesados, o processo de fissão nuclear termina a cadeia garantindo o efeito coletivo do modelo de gota líquida. No caso de núclídeos com  $Z < 30$ , a cadeia evaporativa encerra quando a energia de excitação do núcleo residual filho for inferior a energia de separação do nêutron, ou seja,  $E_k^* < S_n$ .

#### 4.1.1 Método de MC para Evaporação Convencional

No início da fase evaporação, um sistema nuclear quente com número atômico  $Z$ , número de massa  $A$  e energia de excitação  $E^*$  desenvolve uma cadeia de evaporação de prótons, nêutrons e partículas alfa. Esta cadeia é regida pelas probabilidades relativas dos respectivos canais de emissão. Todos os ramos de evaporação encerram pelo processo de fissão ou pela exaustão de energia, como esquematiza a ilustração da Figura 4.3.

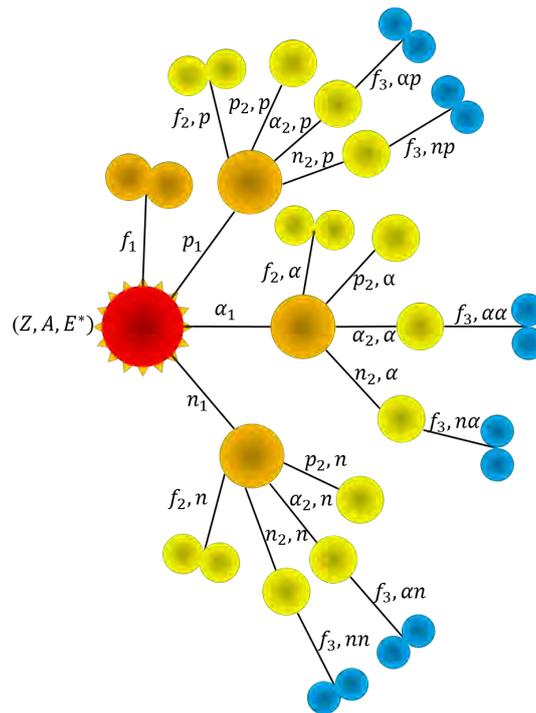


Figura 4.3: Representação esquemática de uma possível cadeia de evaporação a partir de um núcleo residual  $(Z, A, E^*)$ . A sequência de cadeia é mostrada até a terceira ordem de ocorrer a fissão. Porém podem existir ramos em que a fissão não ocorrerá como sendo o último estágio.

As variáveis da cadeia evaporativa, conforme a Figura 4.3, representam os valores de probabilidade para as diferentes possibilidades de desexcitação. Os números subscritos indicam as diferentes ordens da chance de fissão ou evaporação de partículas. Para melhor

compreensão, vamos comentar sobre alguns ramos, por exemplo,  $f_1$  é a probabilidade de fissão na primeira chance,  $n_1$  é a emissão de nêutron de primeira ordem e  $p_1$  é para a emissão de próton,  $f_{3,pn}$  é a probabilidade de fissão na terceira chance após as emissões sucessivas de um próton e um nêutron,  $\alpha_{2,n}$  é o probabilidade da segunda chance de evaporar partículas alfa após a primeira emissão de nêutron, e assim por diante.

Utilizando o método de Monte Carlo apresentado no presente trabalho foi possível calcular a evaporação de partículas e a fissão nuclear de acordo com as seguintes etapas, em qualquer fase da competição entre os processos:

1. A partir do número de massa, número atômico e a energia de excitação do núcleo residual, calcula-se a barreira de fissão; a energia de separação de próton, partícula alfa e nêutron; e as barreiras coulombianas para prótons e partículas alfa.
2. É verificado se a energia de excitação é superior às barreiras de fissão ou de emissão de qualquer partícula considerada. Em caso afirmativo, as probabilidades de emissão das partículas e do núcleo sofrer fissão são calculadas. Se nenhum dos processos é permitido com a energia de excitação em questão, a etapa (5) abaixo descrita é executada.
3. Um número aleatório  $x$  é gerado no intervalo  $[0 - 1]$ , e a partícula que será emitida é escolhida comparando este número com as probabilidades calculadas na etapa (2). Inicialmente,  $x$  é comparado com a probabilidade de emissão de nêutrons, se  $x \leq N$ , um nêutron escapa do núcleo; Em seguida,  $x$  é comparado com a probabilidade de emissão de próton, se  $N < x \leq N + P$ , um próton é emitido; Logo após,  $x$  é comparado com a probabilidade de emissão de partícula alfa, se  $P < x \leq N + P + H$ , uma partícula alfa é emitida; E finalmente,  $x$  é comparado com a probabilidade de fissão, se  $H < x \leq N + P + H + F$ , a fissão ocorre. Ocorrendo a fissão, a etapa (5) é executada. Como  $x$  é um número aleatório, nesta etapa, o canal escolhido depende apenas das probabilidades individuais de emissão de partículas ou fissão ( $N$ ,  $P$ ,  $H$  e  $F$ ).
4. A massa nuclear e os números atômicos são recalculados considerando a emissão da partícula escolhida na etapa (3), e a energia de excitação do novo núcleo residual é calculada usando a equação 4.5. O algoritmo, então, retorna para a etapa (1).

5. O ramo da cadeia de evaporação é interrompido e inicia-se um novo.

Como esse processo é essencialmente estatístico, os mesmos parâmetros de entrada podem gerar resultados diferentes durante a execução do algoritmo em uma segunda vez. Para levar em conta esta característica do processo, é necessário a execução do mesmo algoritmo várias vezes. Os resultados finais são entendidos como valores médios do parâmetro físico investigado, como por exemplo a multiplicidade de partículas evaporadas ao longo do processo de spallation.

## 4.2 Evaporação Nuclear com Múltiplas Emissões Simultâneas

No caso da abordagem convencional, como vimos ao final da seção anterior, em cada passo da cadeia de decaimento a escolha do canal de decaimento é determinada pelo sorteio entre as possibilidades de canais, com apenas uma única partícula no estado final. Para valores de alta energia de excitação média, a cadeia de evaporação com emissões simultânea de múltiplas partículas torna-se energeticamente possível.

A emissão simultânea de múltiplas partículas é um assunto pouco explorado na literatura, tanto no ponto de vista experimental como teórico. Do lado experimental temos a dificuldade para as medições em coincidência dos fragmentos. Do lado teórico, a complexidade de lidar com a configuração de estado final de poucos corpos e a interação entre eles. Na verdade, um pequeno número de trabalhos pode ser encontrado tratando o problema [85, 86, 87, 88].

No presente trabalho, para discutir a relevância da emissão múltipla de partículas nos resultados da evaporação, usamos uma hipótese estatística simplificada. Consideramos que as probabilidades de emissão de múltiplas partículas simultaneamente são determinadas pela regra do produto de probabilidades de emissão simples. O caminho da cadeia pode ser completamente modificado com a desexcitação parcial do núcleo remanescente em cada estágio de decaimento intermediário. Este é um ponto importante no cálculo, e conduz a diferentes resultados finais para o rendimento de partículas e as características dos produtos da reação de spallation.

Os novos canais implementados estão ilustrados na Figura 4.4, onde, em cada direção radial é indicado um canal diferente de emissão. A probabilidade para o canal de

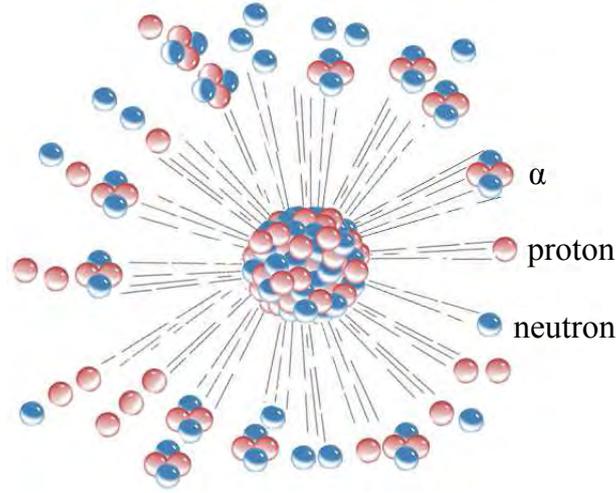


Figura 4.4: Esquema representativo dos dezoito canais de decaimento em uma nova abordagem da evaporação, levando em conta o processo simultâneo de emissão múltipla de partículas. Cada direção radial representa os canais em uma etapa de decaimento do núcleo residual quente.

emissão de múltiplas partículas (a menos da normalização) é determinada como eventos independentes, considerando-se as probabilidades de emissão simples de partículas,  $P_k$  é determinada a partir das equações (4.22–4.25), isto é

$$P_{ij} \propto P_i P_j, \quad \text{para emissão de 2 partículas} \quad (4.29)$$

$$P_{ijl} \propto P_i P_j P_l, \quad \text{para emissão de 3 partículas} \quad (4.30)$$

onde os índices subscritos  $i, j$  e  $l$  referem-se aos nêutrons, prótons e partículas alfa.

Notamos que nesta abordagem, a cadeia evaporativa tem dezenove canais  $\lambda$ , um para o processo de fissão e dezoito para emissão de partículas, isto é: (i) emissão simples de  $n$ ,  $p$  e  $\alpha$ ; (ii) emissão dupla  $nn$ ,  $np$ ,  $n\alpha$ ,  $pp$ ,  $p\alpha$  e  $\alpha\alpha$ ; e (iii) emissão tripla de partículas,  $nnn$ ,  $nnp$ ,  $nn\alpha$ ,  $np\alpha$ ,  $npp$ ,  $n\alpha\alpha$ ,  $ppp$ ,  $pp\alpha$  e  $p\alpha\alpha$ . O canal de emissão de três partículas alfa pode ser desprezado devido sua alta barreira coulombiana. Com a normalização adequada, as probabilidades de canais são dadas por,

$$\mathcal{P}^{(\lambda)} = \frac{P^{(\lambda)}}{\sum_{\mu=1}^{19} P^{(\mu)}} \quad (4.31)$$

onde  $\mathcal{P}^{(\lambda)}$ 's são as razões de probabilidades de canais, que são usadas para sortear o canal de decaimento em cada passo do processo de evaporação, na simulação de Monte

Carlo. Os resultados do presente cálculo reduz automaticamente ao convencional quando  $\mathcal{P}^{(\lambda)} = 0$  para canais com dupla e tripla emissão de partículas.

### 4.2.1 Método de MC para Nova Cadeia de Decaimento

Novamente utilizamos o cálculo Monte Carlo para simular a cadeia de decaimento por amostragem da evaporação nuclear, com o conjunto de dezenove canais mostrados na Figura 4.4. Após a primeira etapa evaporativa de partículas, a energia de excitação do núcleo residual é recalculada para o próximo passo, tal como no método convencional. Quando ocorre a fissão, a cadeia evaporativa é terminada, caso contrário, uma nova etapa de decaimento dá continuidade à cadeia. No entanto, se a energia de excitação se esgota a cadeia também é encerrada.

A determinação da energia de excitação, para os rendimentos no processo de evaporação ao longo da cadeia, é um ponto importante e diferente no cálculo convencional. A energia de separação do grupo de partículas emitidas deve considerar o número de partículas envolvidas no estado final e a energia de ligação do núcleo, antes e após a emissão. Ou seja, a perda de energia do sistema carregada pelas  $N$  partículas é diferente do cálculo convencional. Em cada etapa, a energia de separação das partículas emitidas é dada por,

$$S_N = m(Z - Z_N, A - A_N) - m(Z, A) + \sum_{l=1}^N m_l, \quad (4.32)$$

onde  $N$  representa o número de partículas emitidas no canal,  $A_N = \sum_{l=1}^N A_l$  e  $Z_N = \sum_{l=1}^N Z_l$ .

Para estimar a perda de energia coulombiana no sistema, foi considerado a interação de partículas emitidas com o núcleo filho residual, no ponto em que as partículas saem do núcleo. Assim, quando tivermos  $N_{ch}$  partículas carregadas entre as  $N$  emitidas, a perda de energia coulombiana é dada por,

$$V = C \sum_{l=1}^{N_{ch}} \left[ K_l \frac{Z_l Z_d e^2}{r_o A_d^{1/3} + R_l} \right], \quad (4.33)$$

onde  $K_l$ ,  $Z_l$  e  $R_l$  são, respectivamente, os fatores de penetrabilidade da barreira de Coulomb, o número atômico e o raio das partículas emitidas, já definidos anteriormente. Note que,  $Z_d = (Z - Z_N)$  e  $A_d = (A - A_N)$  são o número atômico e o número de massa do núcleo filho.

Finalmente, a energia média total removida devido a emissão de  $N$  partículas é calculada como

$$\bar{E}_N = S_N + V + 2\sqrt{\frac{E^* - (S_N + V)}{a}}, \quad (4.34)$$

onde o último termo representa a energia cinética média das  $N$  partículas emitidas. Note que, a equação 4.34 é idêntica às equações 4.6, 4.7 e 4.8, a menos da energia de separação e da barreira coulombiana.

Para continuar com as próximas etapas, fazemos  $A' = A - A_N$  e  $Z' = Z - Z_N$ , com a energia de excitação nuclear reduzida de acordo equação 4.34.

Todos os registros da etapa que caracterizam a cadeia de decaimento são armazenados em uma história de Monte Carlo. Ao final, calculamos os observáveis de interesse, tal como rendimento de partículas, frequência de núcleos envolvidos na cadeia de decaimento, as distribuições angulares, espectros, energia de excitação e assim por diante. Todos esses observáveis relacionamos com a massa efetiva inicial e a energia incidente.

Portanto, apresentamos na Figura 4.5, de maneira esquemática, os principais processos que estão incluídos na simulação das reações nucleares de spallation com o nosso modelo de cascata intranuclear, baseado num método de MC.

No próxima capítulo abordaremos o contexto na qual aplicaremos as reações de spallation. Tais aplicações são definidas a partir do nível de energia e o núcleo alvo de interesse. Notamos que, quando analisamos reações de spallation do tipo p+Pb com feixes de 0.8 a 2.0 GeV, o campo de aplicação tecnológico a ser investigado é fontes de nêutrons para reatores com sistemas ADS. No entanto, se estudamos reações p+C ou p+Ca, em baixas energias (dezenas a centenas de MeV), podemos visar estas reações de spallation para aplicações médicas, como o tratamento de tumores via feixe de prótons.

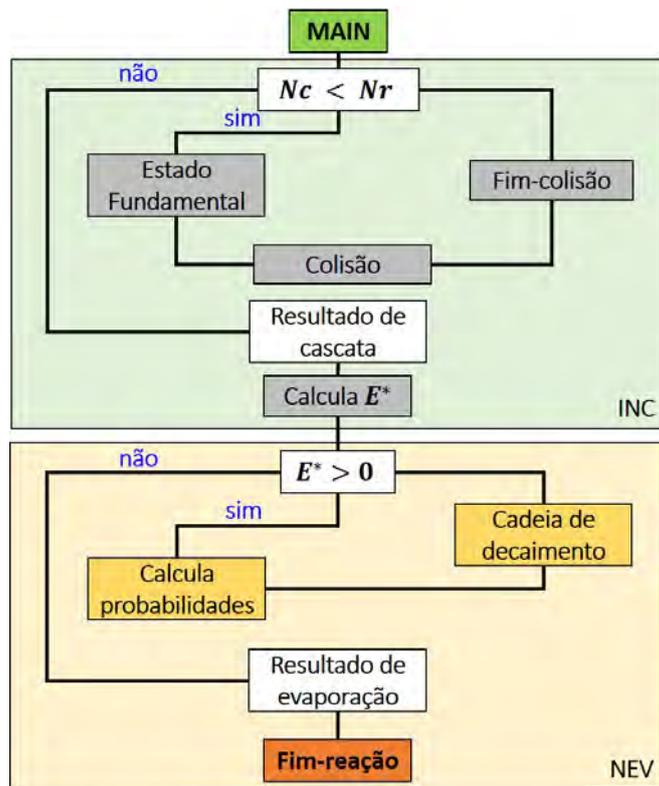


Figura 4.5: Fluxograma do algoritmo computacional para simular reações de spallation com o método de cascata intranuclear. As variáveis  $N_c$  e  $N_r$  significam número de contagem e número de repetições completas, respectivamente. Mostramos os dois estágios da reação de spallation, a cascata intranuclear (INC) e a evaporação nuclear (NEV).

# Capítulo 5

## Aplicações em Protonterapia e em Reatores ADS

As aplicações de reações de spallation em tecnologia e ciência básica são inúmeras. Elas abrangem a área de raios cósmicos, produção de feixes de isótopos raros, fontes de nêutrons de spallation e sistemas guiados por acelerador (ADS), bem como investigações de matéria nuclear aquecida. Uma aplicação mais peculiar de reações de spallation é aquelas reações induzidas por feixes de prótons com uso terapêutico, a protonterapia.

Neste capítulo, abordaremos aspectos gerais da protonterapia e reatores ADS. Na Seção 5.1, enfatizaremos uma abordagem histórica da protonterapia. Apresentaremos de forma resumida os processos físicos associadas as radiações ionizantes, na Seção 5.1.1. Na Seção 5.1.2, destacaremos os efeitos da interação do próton com a matéria a nível nuclear. Na última seção abordaremos as principais características e aspectos físicos dos reatores nucleares convencionais. Consideraremos os principais motivos que intensificaram as pesquisas em novos reatores, os baseados no sistema ADS.

### 5.1 Reações de Spallation no Contexto da Protonterapia

Historicamente, os primeiros estudos sobre o uso de radiação iniciaram em 1895 com Wilhelm K. Röntgen (1845-1923) [89]. Röntgen mostrou que os novos raios eram produzidos pelo impacto de raios catódicos com materiais específicos com uma plana anódica em um tubo de vácuo. Como a natureza dos raios era desconhecida, deu-lhes o nome de

raios-X.

Logo após a publicação da descoberta de Röntgen, ocorreram diversas aplicações das radiações quer em diagnóstico quer em terapia, como por exemplo, o tratamento de um cancro de estômago que Emil Grubbe (1875-1960) fez em Chicago/EUA, em 1896. Esse acontecimento marca a descoberta do raio-X como uso direto em produção de imagens da época, isto é, o início das técnicas de radiodiagnóstico e radioterapia por raio-X, conhecidas hoje na medicina. Em 1901, Röntgen foi laureado com o primeiro Prêmio Nobel da Física.

Mais tarde, em torno de um ano após a descoberta de Röntgen, Antoine H. Becquerel (1852-1908) começou investigar qual era a relação do novo raio observado por Röntgen e o fenômeno de fluorescência. Com a posse de sais de urânio, que fosforesce quando exposto a luz, colocou-o na presença de uma placa fotográfica coberta por um papel opaco. Becquerel observou que a placa tinha sido submetido a uma espécie de “pulverização”. Este fenômeno se repetiu para todos os sais de urânio, e mais tarde conclui que era uma propriedade do átomo de urânio [90]. Este é o marco da descoberta da radioatividade espontânea<sup>1</sup>.

Os estudos sobre a radioatividade foram realizados por Madame Marie Curie (1867-1934) e por Pierre Curie (1859-1906). Eles conseguiram o isolamento do elemento Polônio e do Rádio, desenvolvendo métodos para a separação do rádio a partir de resíduos radioativos. Com a separação destes elementos, foi possível estudar e caracterizar suas propriedades, principalmente seu alto poder radioativo. Mais tarde, seriam usados como ferramentas terapêuticas durante a Segunda Guerra Mundial. A família Curie e Becquerel dividiram o Premio Nobel de Física de 1903, caracterizando o início histórico da Física Nuclear.

Os estudos avançaram sobre a natureza radioativa dos elementos químicos. Algumas décadas após a descoberta da radioatividade natural, Irene Curie (1897–1956) e Jean Frédéric Joliot (1900–1958), paralelamente a Enrico Fermi (1901–1954) e colaboradores, descobriram a *Radioatividade Artificial*<sup>2</sup>. Em 1912, construiu-se o primeiro aparelho para tratamento de câncer pélvico, o “canhão de radium”, rapidamente abandonado por necessitar de grande quantidade de material radioativo para seu funcionamento. Em 1922, foi

---

<sup>1</sup> *Radioatividade* - Um fenômeno resultante de uma instabilidade do núcleo atômico em certos átomos através do qual o núcleo experimenta uma transição nuclear espontânea com a emissão de radiação, normalmente, partícula alfa  $\alpha$ , partícula beta  $\beta$  ou raio gama  $\gamma$

<sup>2</sup> *Radioatividade Artificial* - Radiação induzida emitida de um núcleo instável após ser bombardeado por partículas

construído no Hospital Radiumhemmt em Estocolmo, o que provavelmente pode ser considerado até então, como o mais poderoso aparelho de radioterapia, pois utilizava 2 gramas de Rádio, trabalhando com distância de 6.0 cm entre a fonte e a pele. Até 1929, apenas seis unidades similares estavam disponíveis no mundo. Uma em Estocolmo, Baltimore, Bruxelas, Nova York e duas em Paris.

Por volta de 1930, criaram os núcleos instáveis, ou seja, isótopos instáveis dos elementos químicos através dos aceleradores circulares de partículas, os Cíclotrons, idealizado por Ernest Lawrence (1901-1958). Além dos cíclotrons, os reatores nucleares tiveram um papel fundamental na produção de isótopos radioativos. Um dos principais radioisótopos criado nos cíclotrons foi o Cobalto 60, em 1941. A ideia de utilizar  $^{60}\text{Co}$  como fonte radioativa em aplicações médicas foi de Joseph Stanley Mitchell (1909-1987).

Em virtude das tecnologias da segunda guerra, foi possível a construção do primeiro acelerador linear de partículas para uso médico, com energia incidente de 8 MeV. Este foi instalado no Hammersmith Hospital, em 1952 na cidade de Londres, iniciando suas atividades em agosto de 1953. Em seguida, os EUA produziram o primeiro acelerador isocêntrico, a partir de uma cooperação entre o Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) e a Universidade de Stanford. O acelerador iniciou suas atividades em 1956, gerando 5 MeV de energia incidente.

Após a Segunda Guerra Mundial, autoridades e cientistas voltaram-se para a segurança com o uso inadequado da radiação, uma vez que já estava comprovado que ela poderia causar também danos letais às células sadias do organismo. Diante deste contexto, foram iniciadas novas pesquisas sobre a utilização de partículas carregadas. Robert Wilson foi o primeiro a sugerir o uso de feixes de prótons para radioterapia como uma alternativa, em 1946 [91].

A colaboração entre o Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) e o Hospital Geral de Massachusetts conduziu ao estudo pioneiro no desenvolvimento da protonterapia nos EUA, desde os estudos na área de física das radiações como em tecnologia essencial. Em 1954, o primeiro humano foi tratado com feixes de próton.

Hoje em dia, a protonterapia é amplamente difundida em todo o mundo. Existem vários centros clínicos que já estão em operação, utilizando prótons como feixe terapêutico [92]. Nos EUA existem 20 centros de tratamentos de cânceres que usam especificamente feixes de prótons. No mundo, são mais de 60 centros em operação. O Grupo de Coopera-

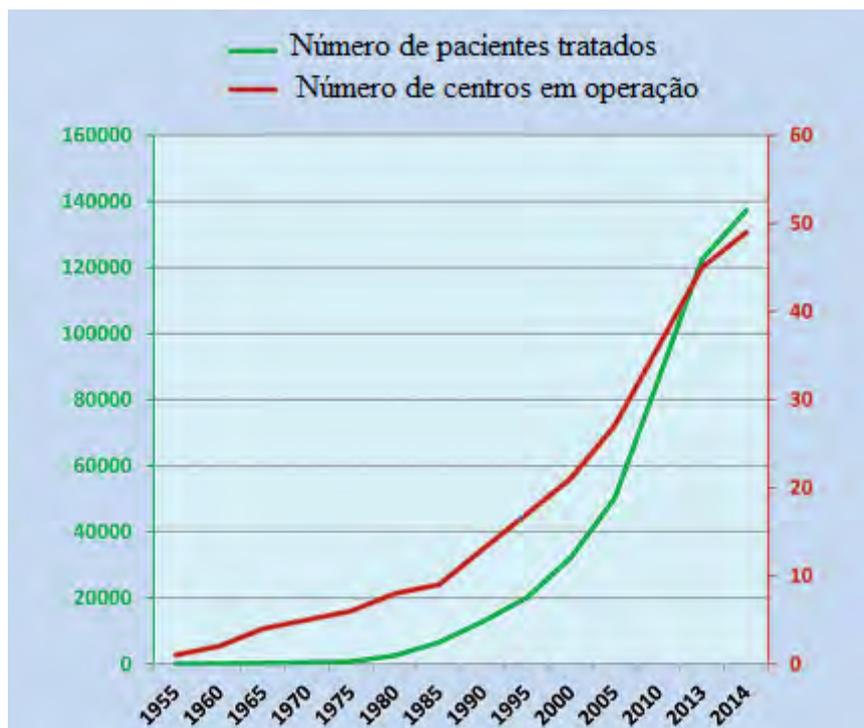


Figura 5.1: Número de centros de protonterapia de tratamento de cânceres ao redor do mundo até os dias atuais.

tiva de Terapia por Partículas (PTCOG, em inglês [Particle Therapy Cooperative Group](#)) relata que até 2014, mais de 115 mil pacientes foram tratados com protonterapia em todo o mundo, como mostra a Figura 5.1. A comunidade técnica da área tem intensificado esforços para conduzir ensaios clínicos que comparam os resultados após a terapia com feixes de prótons com aqueles oriundos de outras terapias avançada com uso de radiação.

A protonterapia é uma forma eficaz de tratamento utilizando radiação. Funciona da mesma razão fundamental que qualquer tipo de radiação ionizante, causa alterações cromossômicas que conduz à morte das células tumorais. A protonterapia é uma excelente forma de tratamento não-invasiva em pacientes com câncer profundos e bem localizado, assim os pacientes, após tratamento, podem apresentar um quadro clínico muito eficaz comparado aquele da radioterapia convencional. As metas de controle da doenças e a minimização dos efeitos colaterais são objetivos do tratamento com radiação: o uso de feixes de prótons pode atender estas metas.

Os feixes de prótons oferecem um potencial significativo para aumentar os resultados da radioterapia de feixes externos. Em regiões bem localizadas, onde o tratamento via raios-X é inviável, os feixes de prótons podem ser usados para escalonar a dose tumoral, sem aumentar as taxas de radiação em regiões sadias. Nestas situações, onde a morbidade

é alta (como por exemplo o caso de tumores pediátricos), a protonterapia pode ser usada para diminuir ou eliminar efeitos posteriores relacionados ao tratamento [93].

Na subseção seguinte examinaremos os aspectos gerais da física básica da protonterapia. Revisaremos, brevemente, os tipos predominantes de interações do próton com a matéria. Mas antes, faremos um breve resumo dos processos físicos das radiações ionizantes, visto que esta área já está consolidada teórica e experimentalmente.

### 5.1.1 Processos Físicos da Radiação Ionizante

Radiação ionizante é o fenômeno de espalhamento e absorção de partículas carregadas com um meio atômico ou nuclear que podem remover elétrons de átomos e de moléculas. O conjunto das radiações ionizantes usualmente estudadas compreendem [94]:

- **radiação eletromagnética (REM)** com energia de fóton acima de 12 eV, que recebe várias denominações de acordo com a origem; *raios X* – originados de desexcitações atômicas (raios X característicos) e da desaceleração de partículas carregadas (Bremsstrahlung); *raios gama* – originados de desexcitações nucleares; e *fótons de aniquilação* – originados da aniquilação de pares partícula-antipartícula. Os processos físicos da radiação ionizante eletromagnética ocorrem em uma faixa de energia de alguns KeV a algumas dezenas de MeV. Os principais processos físicos estão exemplificados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Processos físicos para radiação eletromagnética ionizante (raios X, raios gama e fótons de aniquilação) e consequências após a interação.

Tipo de interação	Alterações no meio	Influência no feixe	Radiação produzida
Espalhamento coerente (espalhamento da radiação pelo átomo)		Direção de propagação	REM espalhada de mesma energia
Efeito fotoelétrico (ejeção de $e^-$ ligado)	Ionização e excitação do átomo, recuo nuclear	Fóton é absorvido	$e^-$ rápido, raios-X, $e^-$ de Auger
Efeito Compton (espalhamento do fóton pelo $e^-$ )	Ionização do átomo	Fóton perde energia e muda de direção	$e^-$ rápido, fóton com menor energia, espalhado
Produção de par (energia do fóton é consumida na criação do par $e^- e^+$ )	Recuo do Núcleo, aniquilação do $e^+$	Fóton é absorvido	$e^-$ e $e^+$ rápidos, raio-X de aniquilação
Reação fótonuclear (ejeção de nucleon ligado)	Núcleo diferente excitado	Fóton é absorvido	Partículas subnucleares, em nucleons

- **partículas energéticas carregadas** que possuem energia cinética bem maior que

a energia térmica, e superior a energias de ligação de elétrons atômicos. Suas origens podem ser a *emissão por núcleos atômicos* (partículas alfa e beta e os produtos de fissão nuclear, por exemplo), a *emissão por átomos* (elétrons Auger), *feixes produzidos em aceleradores* de partículas (elétrons, pósitrons, prótons, dêuterons, íons em geral, de qualquer número atômico ou número de massa), a *radiação cósmica* primária ou produtos de sua interação com a atmosfera (múons, píons etc.), *produtos de reações nucleares*. As principais interações com partículas carregadas estão apresentadas na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Processos físicos para radiação de partículas carregadas e consequências após suas interações.

Partícula carregada	interações possíveis	Alterações no meio	Radiação produzida
$e^-$ , $e^+$ e íons pesados	Colisão inelástica com o átomo (colisão suave) Colisão com $e^-$ fortemente ligado (colisão dura) Choque elástico com o núcleo	Excitação e eventual ionização de átomos em camada de valência Ionização (camada interna) e excitação do átomo Recuo do núcleo	Partícula primária com pequena mudança de direção, eventualmente um $e^-$ rápido (secundário) Partícula primária, $e^-$ rápido (secundário), raio-X característicos, $e^-$ de Auger Partícula primária com mesma energia e outra trajetória
$e^-$ e $e^+$	Choque elástico com o núcleo	Recuo do núcleo	Partícula primária e radiação de freamento (Bremsstrahlung)
$e^+$	Aniquilação com um $e^-$ do meio	Ionização e excitação do átomo	Dois fótons de aniquilação, cada um com $h\nu \leq 0.511$ MeV
Hádrons e léptons	Reação Nuclear	Núcleo modificado (excitado)	Partículas subnucleares, raios gama de desexcitação nuclear

Os nêutrons são partículas neutras que ao longo do material viajam em linha reta, se desviam do seu caminho apenas quando eles realmente colidem com um núcleo, podendo ser espalhado em uma nova direção ou absorvido. As interações do nêutron com a matéria é estritamente interação nuclear, em que o espalhamento elástico ou inelástico são provocados pelos nucleons do núcleo. De acordo com a energia do incidente, podem provocar outras reações nucleares [95]. Na Tabela 5.3, citamos as possíveis ocorrências de interações do nêutron.

Na seção seguinte concentramos apenas na descrição sucinta da radiação por prótons, visto que as reações de spallation, objeto de estudo desta tese, é induzida por feixes de prótons. Nós faremos uma breve discussão das quantidades básicas utilizadas na descrição

Tabela 5.3: Processos físicos para radiação causadas por nêutrons e consequências após a interação.

Tipo de interação	Alterações no meio	Influência no feixe	Radiação produzida
Espalhamento inelástico	Núcleo recua e fica excitado	Direção de propagação e energia do nêutron	Radiação gama (desexcitação do núcleo), núcleo de recuo
Reação nuclear	Núcleo se torna outra espécie nuclear	Nêutron é absorvido	Emissões radioativas do núcleo final, radiação gama do núcleo final, produtos da reação nuclear
Espalhamento elástico	Recuo do núcleo	Direção de propagação e energia do nêutron	Núcleo de recuo, nêutron com menor energia, espalhado

do campo de radiação de prótons, antes de retornar a uma discussão quantitativa de freamento, espalhamento e das reações nucleares.

Suponha que um feixe de prótons desacelera e eventualmente para em um tanque de água. Normalmente, estamos preocupados com o número de prótons em relação a profundidade, a sua taxa individual de perda de energia, ou a taxa total a que depositarem energia na água. A razão entre o número  $N$  de prótons e o elemento infinitesimal de área,  $da = dz dy$ , do material exposto é chamada de fluência  $\Phi$ . Esta quantidade é definida como:

$$\Phi = \frac{dN}{dz dy} \quad (5.1)$$

em que consideramos  $x$  a direção do feixe.

Ao atravessar o tanque de água, o próton transfere sua energia  $dE$  por meio dos processos de colisões e freamento, ao longo da direção  $dx$ , a taxa de perda de energia ou o poder de freamento linear pode ser expresso por:

$$S \equiv -\frac{dE}{dx}. \quad (5.2)$$

A principal grandeza de interesse para fins de radioterapia é a dose absorvida, que é dada pela energia média depositada pela radiação ionizante na matéria com massa  $dm$ , num ponto de interesse, isto é:

$$D = \frac{d\bar{E}}{dm}. \quad (5.3)$$

### 5.1.2 Mecanismo de Interação do Próton com a Matéria

Partículas carregadas têm grande possibilidade de interagir com os átomos e moléculas do meio material, pois há cargas distribuídas no meio e a força coulombiana é de longo alcance. Os prótons interagem com a matéria em três maneiras distintas:

- diminui a velocidade através de inúmeras colisões com elétrons do átomo;
- defletidos quando colidem inúmeras vezes com o núcleo;
- colidem frontalmente com núcleo produzindo partículas secundárias.

Estes três processos de interação são mais conhecidos como “stopping” (freamento), “scattering” (espalhamento) e reações nucleares. Outra interação é via Bremsstrahlung, em que o próton perde energia cinética ao interagir com o núcleo e emite um fóton. Porém no regime de energia da protonterapia (50 – 250 MeV), fótons de Bremsstrahlung são processos físicos desprezíveis. A Figura 5.2 ilustra vários mecanismos pelos quais o próton interage com um átomo ou núcleo.

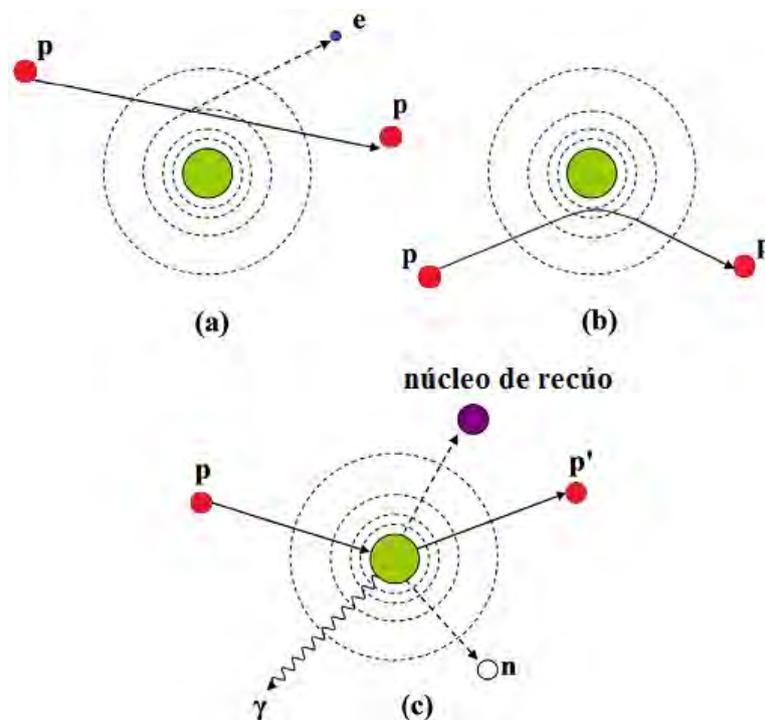


Figura 5.2: Esquema ilustrativo do mecanismo de interações do próton  $p$  com a matéria. (a) perda de energia pela interação coulombiana com o elétron  $e$ , (b) espalhamento elástico devido a repulsão coulombiana com o núcleo e (c) absorção do próton e criação de partículas secundárias (próton secundário -  $p'$ , nêutron -  $n$ , fótons -  $\gamma$ ).

Para uma aproximação de primeira ordem, prótons continuamente perdem energia cinética através das interações de Coulomb com elétrons atômicos. A maioria dos prótons viaja em linha reta, porque a sua massa de repouso é 1832 vezes maior do que a massa do elétron. Em comparação, um próton passando perto do núcleo atômico experimenta uma interação coulombiana repulsiva que, devido à grande massa do núcleo, o próton é desviado da sua trajetória inicial e o núcleo pode sofrer um recuo. Reações nucleares inelásticas entre prótons e núcleos atômicos são menos frequentes, porém um próton individual tem um efeito muito mais específico. Em uma reação nuclear induzida por um feixe de próton, o núcleo poderá emitir próton, dêuteron, trítio ou íons com um ou mais nêutrons.

A Tabela 5.4 resume os tipos de interação de prótons, alvos de interação, principais produtos de reações e influência sobre o feixe de prótons. Nós analisamos estes mecanismos de interação, com exceção de Bremsstrahlung de próton.

Tabela 5.4: Tipos de interações do próton, alvo, produtos, influência no feixe, e as manifestações dosimétricas.

<b>Tipo de interação</b>	<b>Alvo</b>	<b>Produtos</b>	<b>Influência no feixe</b>
Espalhamento inelástico de Coulomb	Elétrons	Prótons primários, elétrons de ionização	Perda de energia
Espalhamento elástico de Coulomb	Núcleo	Prótons primários, recuo nuclear	Mudança de trajetória
Reações nucleares inelástica	Núcleo	Prótons secundários, íons leves, nêutrons e raios gamas	Absorção do próton do feixe
Bremsstrahlung	Núcleo	Prótons primários, fóton de Bremsstrahlung	Perda de energia, mudança de trajetória

A taxa de perda de energia de íons, ou poder de freamento linear, que é expressa mais frequentemente como a taxa de perda de energia em um meio que não depende da densidade de massa, é definida como o quociente de  $dE$  e  $dx$ , onde  $E$  é a energia média perdida e  $x$  é a distância percorrida pela partícula, como vimos no início da seção. Então, o poder de freamento para o feixe é dado por:

$$\frac{S}{\rho} = -\frac{dE}{\rho dx}, \quad (5.4)$$

onde  $\rho$  é a densidade de massa do material.

A taxa de energia perdida pode ser descrita por várias formulações matemáticas. A teoria física inicialmente foi desenvolvida por Bohr [96], que é baseada no cálculo do momento de um elétron livre estacionário e no parâmetro de impacto. O modelo mais preciso, atribuído por Bethe e Bloch [97], leva em conta os efeitos quânticos. Tal modelo

matemático é conhecido como Fórmula de Beth-Bloch [98]. A equação de Beth-Bloch é escrita da seguinte forma:

$$-\frac{dE}{dx} = 4\pi\rho N_A r_e^2 m_e c^2 \frac{Z}{A} \frac{e^2}{\beta^2} \left[ \ln \frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I} - \beta^2 - \frac{\zeta}{2} - \frac{C}{Z} \right], \quad (5.5)$$

onde  $N_A$  é o número de Avogadro,  $r_e$  é o raio do elétron com massa  $m_e$ ,  $e$  é carga elétrica do feixe,  $Z$  é o número atômico do material,  $A$  é a massa atômica do material,  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$  em que  $\beta = v/c$  com  $c$  sendo a velocidade da luz e  $v$  a velocidade do projétil,  $I$  é o potencial médio de excitação do material,  $\zeta$  representa as correções de densidades decorrente da blindagem dos elétrons distantes por elétrons próximos, que resulta numa redução das perdas de energia a níveis altos de energia, e  $C$  é o fator correção de camada, que só é importante para as energias baixas, onde a velocidade das partículas é próximo da velocidade dos elétrons atômicos. Os dois termos de correção na Equação Bethe-Bloch envolvem a teoria relativística e mecânica quântica. Estes efeitos quânticos relativísticos precisam ser considerados, quando energias muito altas do próton são usadas nos cálculos.

O aspecto físico mais bem compreendido dos feixes de prótons é a curva de dose em função da profundidade, ou de forma mais usual, curva dose-profundidade. Este cálculo considera somente o poder de freamento e os efeitos coulombianos sofridos pelo feixe. Próximo à superfície do material irradiado, a velocidade do próton (num feixe de 250 MeV) é cerca de 60% da velocidade da luz. Entre a superfície e a profundidade de 360 mm, a velocidade diminui para cerca de 30% da velocidade da luz, enquanto a variação do poder de freamento é mínima. Na região de “entrada”, a entrega de dose varia pouco com a profundidade e pode ser considerada constante. Após o comportamento constante em relação a profundidade, a taxa de perda de energia aumenta rapidamente até um máximo, para prótons de energia de 0,15 MeV. O poder de freamento diminui imediatamente antes do próton praticamente cessar seu movimento. A região de rápido aumento de dose é conhecido como pico de Bragg. Podemos resumir na representação da Figura 5.3. Em 1997, um modelo analítico para o cálculo da curva de Bragg foi proposto por Bortfeld [99], que descreve muitos processos físicos presentes, considerando dados clínicos.

A taxa em que os prótons transferem energia para a matéria por ionização é inversamente proporcional à energia do próton. Portanto, ao passo que os prótons se aproximam do seu alcance final, sua energia cinética diminui e a ionização aumenta, formando um pico

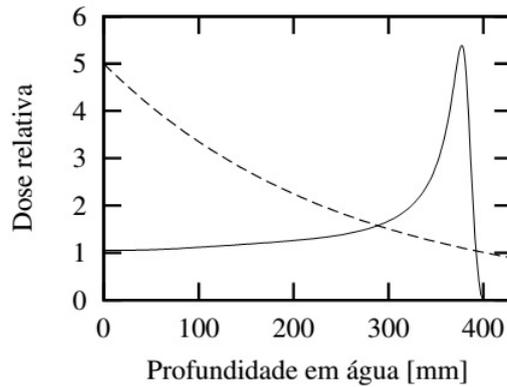


Figura 5.3: Ilustração do pico de Bragg para um feixe de prótons (linha sólida) comparado com um típico feixe de raios-X (linha tracejada).

muito estreito. Esta é a grande diferença entre prótons e raios-X, que torna os prótons uma alternativa de radioterapia muito mais eficaz para tumores profundos. Este pico, estreito, que tem alta densidade de ionização, concentraria o feixe na região do alcance em pouquíssimos milímetros. Através de técnicas de superposições, a região de deposição de dose pode ser alargada, obtendo um pico que é conhecido como pico de Bragg disperso, SOBP (do inglês, “Spread-Out Bragg Peak”), que é modelado para o tamanho do tumor a ser irradiado, atingindo uma largura de alguns centímetros, como mostra a Figura 5.4. Bortfeld e Schlegel [99] também propuseram um método analítico para a combinação múltipla dos picos de Bragg primários obtendo o SOBP.

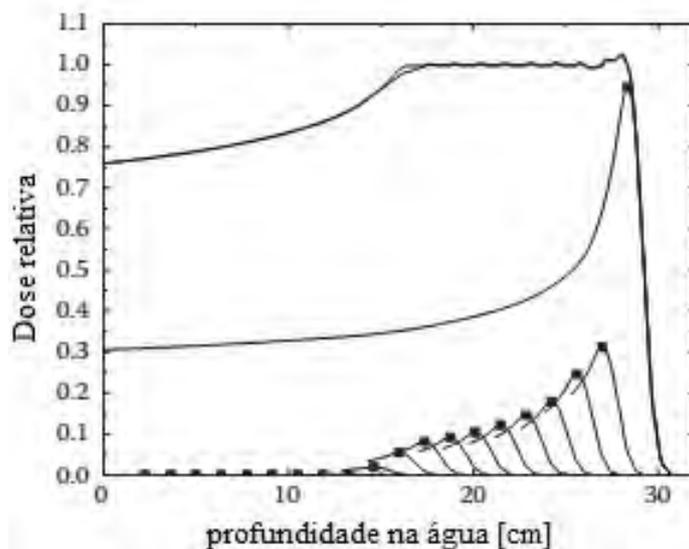


Figura 5.4: Dose absorvida como função da profundidade na água de um pico de Bragg disperso derivado dos picos de Bragg primários. Em muitos casos clínicos, a largura do alvo é maior que a do pico de Bragg primário. Usa-se, clinicamente, colimadores de múltiplas folhas para obter a superposição dos picos.

Embora a forma da curva de dose por profundidade seja dominada pelo “stopping power” dos prótons, ela é também modificada por partículas produzidas (partículas secundárias) pela interação com a matéria orgânica e nos dispositivos de formação do platô do feixe.

O freamento e o espalhamento são gerados a partir da interação eletromagnética entre o próton e os elétrons que compõem o átomo, ou até mesmo diretamente com o núcleo. O estudo de interações eletromagnéticas já está bem consolidado a partir comprovações experimentais de teorias. Por outro lado, as reações nucleares baseiam-se fortemente em modelos nucleares. Neste contexto, os efeitos a nível atômico estão consolidados por inúmeros modelos, resta considerar os efeitos a nível de interação com os nucleons do núcleo atômico, visto que, para feixes com dezenas de MeV, estes efeitos tornam-se presentes e precisam ser levados em conta nos cálculos. Matsuzaki e colaboradores [34] concluíram que a principal contribuição para a dose absorvida é a dos prótons primários (aproximadamente de 80 a 90%), ao passo que prótons secundários decorrentes de reações induzida por prótons primários contribuem para a dose de 5 a 20%. Paganetti realizou estudos teóricos para obter o rendimentos de partículas a partir de diferentes canais de interações nucleares como uma função da profundidade dos prótons em várias faixas de energia incidente [100]. Ele concluiu que prótons secundários entregam aproximadamente até 10% da dose total para o pico de Bragg de um feixe modulado e afeta o achatamento do SOBP, como mostra a Figura 5.5.

Geralmente é permitido que métodos analíticos comuns, de cálculo de dose em protonterapia, envolvam aproximações que podem refletir na qualidade do resultado. Além da contribuição das interações eletromagnéticas (ionização e excitação), parte da dose total, depositada pelo feixe de prótons, é gerada por partículas secundárias ( $\alpha$ ,  $d$ ,  $t$ ,  $n$  e  ${}^3\text{He}$ ) que são liberadas por processos inelásticos de interações nucleares [100]. A ocorrência de cada tipo de interação e a correspondente perda de energia pela partícula carregada dependem basicamente do parâmetro de impacto da interação.

Interações nucleares são de grande importância para a protonterapia por três razões. Primeiro, contribuem para a dose total absorvida. Em segundo lugar, elas podem ter valor alto na transferência linear de energia (LET), causando um aumento na eficiência biológica relativa (RBE). Terceiro, as reações nucleares produzem nêutrons secundários causando uma deposição de dose fora do volume alvo, que criam potenciais riscos de

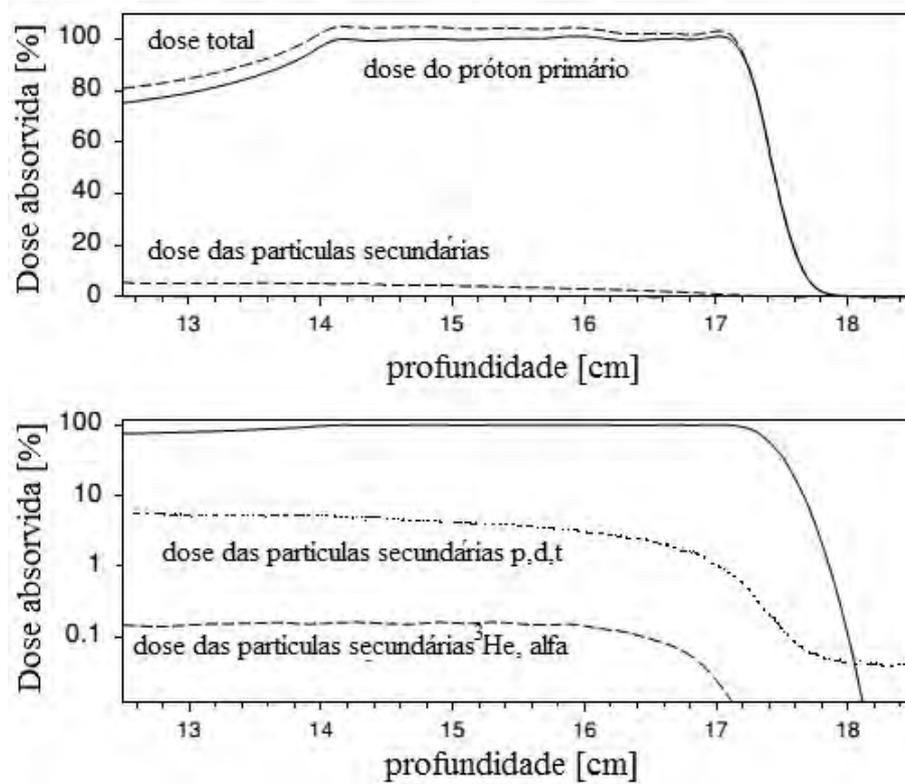


Figura 5.5: Distribuição de dose-profundidade para um feixe de próton de 160 MeV modulado na água na escala linear (painel superior) e na escala logarítmica (painel inferior). Além das contribuições de dose do próton do feixe, é mostrada a dose das partículas secundárias (próton, dêuteron, trítio, alfa e  $^3\text{He}$ ).

segurança como um todo.

Se considerarmos a composição padrão dos organismos vivos, nela certamente aparecem com maior abundância aqueles elementos que constituem o chamado CHONP (Carbono, Hidrogênio, Oxigênio, Nitrogênio e Fósforo) além de outros como o Cálcio. No tratamento mais realista, existem a preocupação com certos materiais implantados ao corpo humano. Neste caso, além de analisar reações nucleares com núcleos alvo abundantes no corpo humano, estudamos reações de prótons com núcleos de titânio (material usado em próteses médicas). É importante salientar que do ponto de vista de tratamento e para irradiar tumores em profundidade, as energias necessárias para o feixe de prótons estão no intervalo entre 50 e 250 MeV.

Portanto, nesta seção vimos alguns conceitos físicos relacionados a área de protonterapia. Neste trabalho, consideramos apenas interações com o núcleo atômico, como abordado no Capítulo 3. A produção de partículas secundárias origina-se das emissões da fase de pré-equilíbrio e da fase de evaporação do núcleo residual. O código MCMC foi reestruturado para a dinâmica nuclear na simulação das etapas do processo: fase de pré-

equilíbrio e fase de resfriamento do núcleo residual formado no regime de baixas energias. Além disso, o efeito da massa efetiva, atribuído aos nucleons ligados durante o processo, também é considerado na determinação da multiplicidade e espectro das partículas emitidas nas reações de spallation. Os resultados para este tipo de aplicação médica são baseados fortemente num contexto de pesquisas físicas, de tal forma que servirão para mediar cálculos de dose no tratamento clínico.

## 5.2 Reações de Spallation no contexto de Reatores Nucleares

Os reatores nucleares são instalações que utilizam a fissão nuclear em cadeia de forma controlada, para a produção de energia ou de fluxo de nêutrons. Os reatores nucleares podem ser divididos em dois grandes grupos: os reatores de potência, utilizados para a geração de energia núcleo-elétrica em usinas nucleares, como mecanismos de propulsão naval ou os reatores de pesquisa, usados para experimentos e ensino.

O grupo de reatores de potência contribui com 11,5% da produção mundial da energia elétrica, dados de julho de 2016 conforme a Associação Mundial Nuclear. Estes reatores utilizam a energia nuclear para a produção de calor, que é transformado em energia elétrica. A Tabela 5.5 apresenta os reatores de potências utilizados para geração núcleo-elétrica em estado de operação, em construção e ainda os que estão em planejamento ao redor do mundo.

Os reatores de potência utilizados no Brasil são do tipo PWR (Pressurized Water Reactor) e utilizam a água leve sob pressão como meio de retirada do calor produzido. A água leve é a água na proporção natural dos isótopos de oxigênio e hidrogênio, sendo assim denominada para diferenciar da água pesada que é a molécula água formada pelo hidrogênio pesado (dêuteron). A Figura 5.6 mostra um esquema de um reator de potência do tipo PWR. No Brasil, o reator do tipo PWR é o Angra 2, como apresenta a Figura 5.7.

Os reatores à água pressurizada e reatores à água fervente (Boiling Water Reactor - BWR), que juntos constituem a grande maioria dos reatores comerciais em funcionamento, têm para todos os propósitos práticos, o mesmo ciclo de combustível, mudando somente o nível de enriquecimento do combustível e suas dimensões. O ciclo do combus-

Tabela 5.5: Quantidade de reatores nucleares atualmente no mundo de acordo com a [Associação Mundial Nuclear](#). Muitos países estão propondo a instalação de reatores nucleares, no sítio da associação é possível acessar estas informações.

País	Geração elétrica 2015		Em operação		Em construção		Em planejamento		Propostas	
	2015		ago/16		ago/16		ago/16		ago/16	
	TWh	%	Nº	Mwe	Nº	MWe	Nº	MWe	Nº	MWe
Argentina	6,5	4,8	3	1627	1	27	2	1950	2	1300
Armênia	2,6	34,5	1	376	0	0	1	1060		
Bélgica	24,8	37,5	7	5943	0	0	0	0	0	0
Brasil	13,9	2,8	2	1901	1	1405	0	0	4	4000
Bulgária	14,7	31,3	2	1926	0	0	1	950	0	0
Canadá	95,6	16,6	19	13553	0	0	2	1500	3	3800
China	161,2	3	34	30597	20	22596	42	47930	136	156000
Rep. Checa	25,3	32,5	6	3904	0	0	2	2400	1	1200
Finlândia	22,3	33,7	4	2741	1	1700	1	1200	1	1500
França	419,0	76,3	58	63130	1	1750	0	0	1	1750
Alemanha	86,8	14,1	8	10728	0	0	0	0	0	0
Hungria	15,0	52,7	4	1889	0	0	2	2400	0	0
Índia	34,6	3,5	21	5302	6	4300	22	20700	38	44000
Irã	3,2	1,3	1	915	0	0	2	2000	7	6300
Japão	4,3	0,5	43	40480	3	3036	9	12947	3	4145
Coreia do Sul	157,2	31,7	25	23017	3	4200	8	11600	0	0
México	11,2	6,8	2	1600	0	0	0	0	2	2000
países Baixos	3,9	3,7	1	485	0	0	0	0	1	1000
Paquistão	4,3	4,4	3	725	3	1841	1	1161	0	0
Romênia	10,7	17,3	2	1310	0	0	2	1440	1	655
Rússia	182,8	18,6	35	26053	8	7104	25	27755	23	22800
Eslováquia	14,1	55,9	4	1816	2	942	0	0	1	1200
Eslovenia	5,4	38,0	1	696	0	0	0	0	1	1000
África do Sul	11	4,7	2	1830	0	0	0	0	8	9600
Espanha	54,8	20,3	7	7121	0	0	0	0	0	0
Suécia	54,5	34,3	9	8849	0	0	0	0	0	0
Suíça	22,2	33,5	5	3333	0	0	0	0	3	4000
Ucrânia	82,4	56,5	15	13107	0	0	2	1900	11	12000
Reino Unido	63,9	18,9	15	8883	0	0	4	6100	9	11800
EUA	798,0	19,5	100	100013	4	5000	18	8312	24	26000

tível nuclear, ilustrado na Figura 5.8, compreende todos os processos e manuseios pelos quais o combustível nuclear percorre, desde a mineração até o armazenamento do rejeito radioativo. Os rejeitos radioativos são constituídos por material não aproveitado, produzido em cada uma das fases do ciclo do combustível. Em todas essas fases existe a produção de certa quantidade de material contaminado, como roupas, luvas, ferramentas, filtros e componentes dos equipamentos substituídos. Esses tipos de material fazem parte dos rejeitos de baixa e média atividade radioativa. Nos reatores de potência tipo PWR, a maior quantidade de rejeito é constituída de resíduos de baixa e média atividade. Os rejeitos de alta atividade radioativa são os que provêm do reprocessamento do combustível queimado, ou seja, resíduos contendo os produtos de fissão, sendo esses altamente

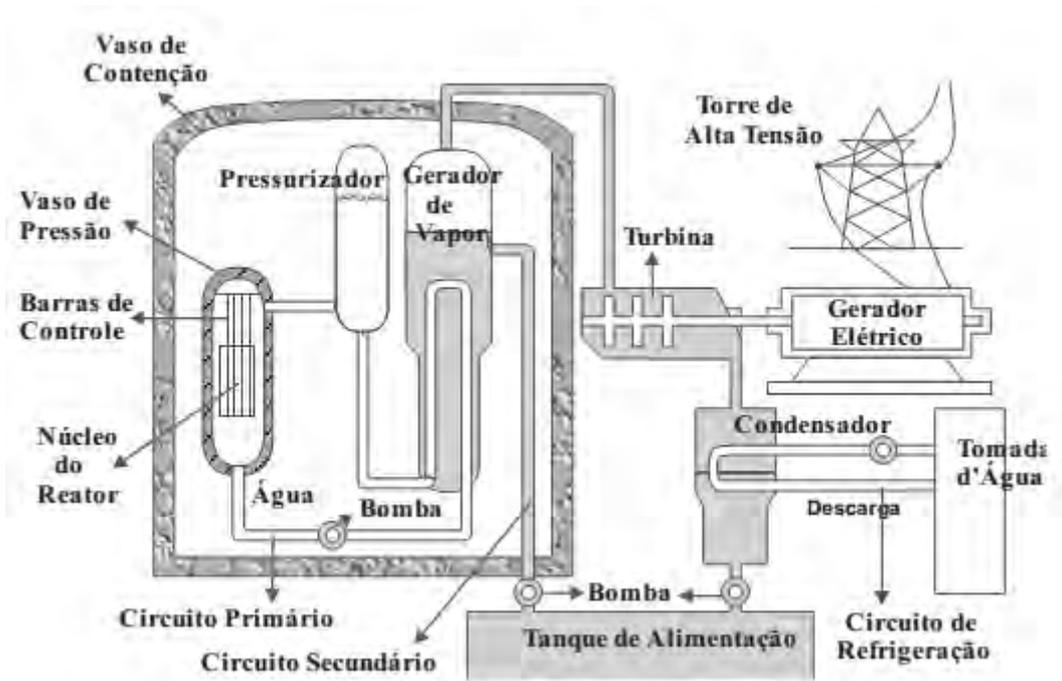


Figura 5.6: Esquema representativo de um reator de potência do tipo PWR.

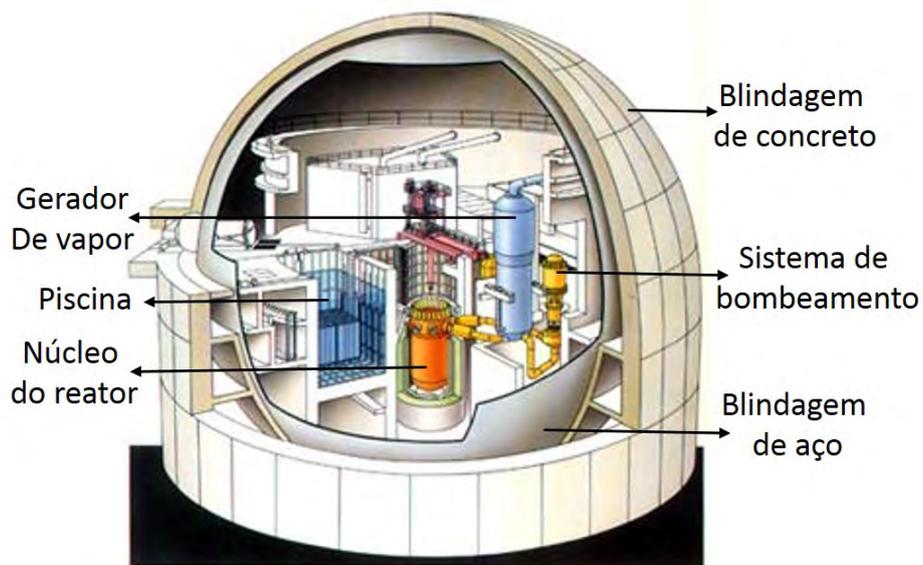


Figura 5.7: Ilustração representativa do Reator Nuclear de Angra 2.

radioativos.

Os reatores comerciais convencionais são objetos de questionamento quanto a produção de energia nuclear no mundo, principalmente no que diz respeito a produção excessiva de rejeitos radioativos e a segurança durante o processo de funcionamento. Os atuais reatores térmicos nucleares possuem ciclo aberto, ou seja, não reciclam o combustível, e têm produzido principalmente os actínídeos transurânicos (TRU), como por exemplo o Neptúnio (Np), Amerício (Am) e Plutônio (Pu). Os elementos transuranianos são resíduos

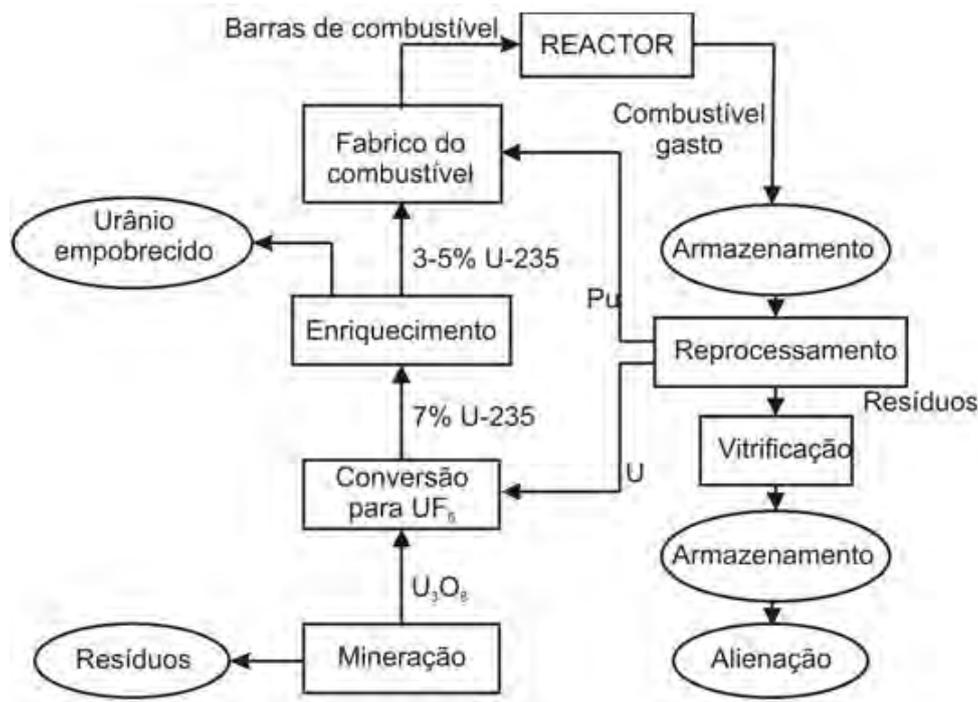


Figura 5.8: Fluxograma representando o ciclo do combustível nuclear. Na Mineração ocorre a produção de um concentrado de urânio ( $U_3O_8$ ) convertido em hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ).

de alto nível, com meia-vida longa. Este ponto tem gerado preocupações com relação à necessidade de estocagem final com uma capacidade temporal segura de milhares de anos. Estas preocupações, aliadas à questão da segurança dos atuais reatores, têm sido o ponto fraco para o desenvolvimento da energia nuclear e também motivo de críticas por parte da comunidade científica e dos organismos de preservação ambiental.

O desenvolvimento de novos reatores é objetivo de pesquisa científica desde a década de 90, principalmente os Reatores Híbridos proposto por C. Rubbia [11]. Muito embora, a mais de 60 anos, ideias similares foram propostas porém tiveram dificuldades de implementação devido a falta de recursos tecnológicos naquela época. A busca por reatores mais seguros, redução de rejeitos radioativos e por maior competitividade econômica na geração de energia elétrica, tem levado a conceitos inovadores. Várias concepções de reatores nucleares visam maximizar a segurança e minimizar os rejeitos gerados. Portanto, o desenvolvimento de meios mais seguros e menos poluidores para produção de energia via fissão nuclear é de grande interesse.

A questão da estocagem de rejeitos com grande meia-vida (Actinídeos Transurânicos,  $^{99}Tc$ ,  $^{129}I$  e  $^{135}Cs$ ) resultantes da irradiação nos atuais reatores é, talvez, a maior preocupação relativa à utilização dos reatores nucleares. Embora exista tecnologia disponível para de-

pósitos definitivos, a grande preocupação é que estes deverão ter capacidade de estocagem segura por milhares de anos. Desta forma, existem estudos quanto ao procedimentos da “queima” de actinídeos transurânicos, com o objetivo de eliminar a necessidade de repositórios definitivos. Uma das técnicas precursoras é a transmutação de um radionuclídeo em outro. Esta é conseguida pelo bombardeamento com nêutrons num reator nuclear ou dispositivo acionado por acelerador. Neste último, um feixe de prótons de alta energia atinge um alvo de metal pesado que produz uma chuva de nêutrons por reações de spallation. Os nêutrons podem provocar fissão num combustível subcrítico, mas ao contrário de um reator convencional, a fissão cessa quando o acelerador é desligado. O combustível pode ser urânio, plutônio ou o tório, possivelmente misturados com resíduos de longa vida provenientes de reatores convencionais.

Nos últimos anos, nêutrons rápidos derivados da reação de spallation induzida por feixes de prótons acelerados e alvos como o chumbo, são utilizados para transmutar núclídeos de grande meia-vida em produtos de fissão e produtos de fissão de longa vida em núclídeos estáveis ou de meia-vida curta. Estas ideias são fundamentadas pelo fato de que a processo de fissão por captura de nêutrons para actinídeos, como o Np e Am, é muito favorável para energias na faixa de keV-MeV. Embora diminuindo significativamente a toxicidade radiológica dos rejeitos, a necessidade de depósitos de resíduos certamente não é eliminada, mas pode ser em menor proporção e mais simples. Neste caso, o perigo representado pelos materiais de resíduos depositados é reduzido.

Por outro lado, alternativamente à utilização de sistemas híbridos (combustível + aceleradores) para apenas queimar actinídeos (transmutação), verificou-se que um sistema físsil subcrítico com uma fonte externa de nêutrons de spallation, teria um ganho líquido de energia (energia total gerada no sistema menos a energia necessária para operar o acelerador). Existem também a possibilidade do sistema ser regenerador com a vantagem adicional que ao eliminar a fonte externa (desligando o acelerador), a reação em cadeia cessaria (segurança intrínseca). Desta forma, não haveria a possibilidade de acidente dos níveis de potência extremos. Estas ideias sugeriram que sistemas híbridos (aceleradores de prótons + reatores subcríticos) poderiam ser utilizados para gerar energia. Sendo uma solução aos pontos negativos acima discutidos (utilização das reservas, segurança, queima de actinídeos transurânicos).

## 5.2.1 Reatores - Sistemas ADS

Como mencionado anteriormente, um reator híbrido é a associação de um acelerador de partículas a um meio multiplicador de nêutrons que utiliza o ciclo de combustível Tório-Urânio. Este pode oferecer as soluções para resolver estes dois problemas típicos de geração a partir da energia nuclear. O sistema em que um reator acoplado a um acelerador é chamado de “Accelerator-Driven System” (ADS) [101]. Este é considerado o reator de mais alto nível para queima de resíduos produzidos pelos presentes reatores nucleares comerciais. O ADS consiste no conjunto formado por um acelerador de feixe de prótons. Os prótons interagem com o alvo por reações nucleares num processo de spallation. Este processo produz nêutrons secundários que são usado em um reator subcrítico. Uma representação resumida é mostrada na Figura 5.9. Por conseguinte, o alvo é a interface física e funcional entre o acelerador e o reator subcrítico, como idealizado por Rubbia na Figura 5.10. O planejamento do núcleo alvo é uma questão fundamental para investigar a concepção dos ADS. O seu desempenho é caracterizado pelo número de nêutrons emitidos por próton incidente, pela energia média depositada no alvo para produção de nêutrons, espectro de nêutrons e a distribuição do produto de spallation.

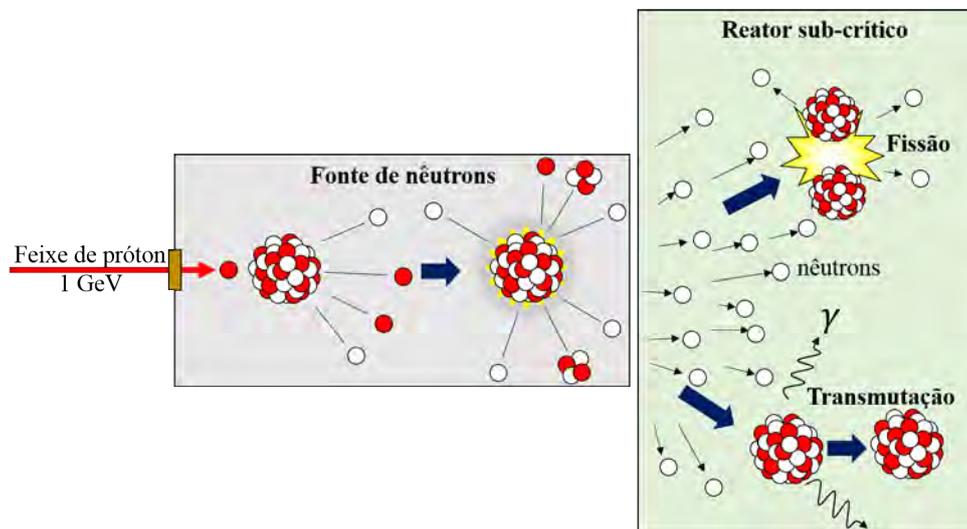


Figura 5.9: Sistema de transmutação guiado por aceleradores, também chamados de sistemas híbrido acelerador-reator, combina uma fonte de nêutrons de spallation e um reator de sub-crítico que pode servir para transmutar resíduos nucleares de longa duração ou produzir energia.

Essencialmente, o conceito do ADS, desenvolvido por Rubbia [11], consiste em bombardear uma mistura de chumbo líquido, utilizando um acelerador de prótons de 1 GeV e corrente da ordem de aproximadamente 10 mA, como ilustra a Figura 5.10.

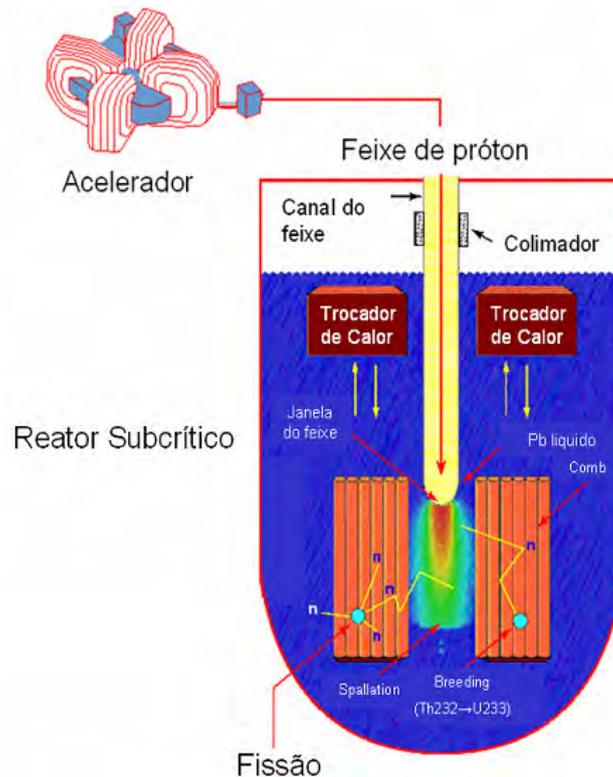
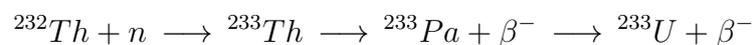


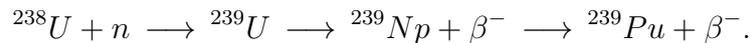
Figura 5.10: Configuração esquemática do Accelerator-Driven System - ADS.

O processo inteiro (a reação de spallation e as fissões no combustível) depende do contínuo bombardeamento do alvo por prótons. Isto faz com que os nêutrons gerados no processo de spallation interajam com o combustível através da reação de fissão para produção de novos nêutrons, iniciando uma reação em cadeia, embora subcrítica, com a energia liberada proporcional à intensidade do feixe de prótons do acelerador [102]. Para essa proposta o Tório-232 pode ser usado como combustível, que através da absorção de um nêutron dá origem ao Urânio-233, onde ocorrerão as fissões



O núcleo do reator situa-se em uma piscina de chumbo líquido que circula por convecção natural para refrigerar o núcleo. A mistura de combustível pode conter Plutônio-239 (núcleo físsil) ou também um alto nível de resíduos radioativos de reatores convencionais, rico em Urânio-238 (núcleo fértil), trazendo a possibilidade de serem transformados em isótopos com um nível mais baixo de radioatividade. O Urânio-238 quando usado como

combustível dá origem ao Plutônio-239 através da reação:



Um aspecto essencial a ser analisado nestes reatores é a produção de nêutrons. A dinâmica da reação tem sido objeto de inúmeros trabalhos utilizando códigos computacionais elaborados para descrever todos os processos microscópicos que ocorrem no interior do núcleo ao longo da reação. Vale salientar que, no processo de spallation em reatores ADS, a fonte de nêutrons origina-se das emissões da fase de pré-equilíbrio e da fase de evaporação do núcleo residual. Em muitos códigos foram incorporados detalhes mais refinados da dinâmica nuclear na simulação das etapas do processo: fase de pré-equilíbrio e fase de resfriamento do núcleo composto. Entretanto, restam algumas características quanto a evolução dinâmica do sistema de nucleons em interação que não foram explorados, e que ainda precisam ser analisados, por exemplo, o efeito da massa efetiva atribuída aos nucleons ligados durante o processo, para a determinação da multiplicidade e espectro das partículas emitidas nas reações de spallation.

Neste sentido, no presente trabalho foi estudado o efeito do ambiente nuclear sobre as partículas pela introdução de uma massa efetiva para os nucleons do núcleo. Foram discutidas também a produção de nêutrons no processo de spallation como fonte para os reatores ADS, qual seja, um feixe de próton com energia de aproximadamente 1 GeV incidente em meio de  ${}^{208}\text{Pb}$ .

# Capítulo 6

## Resultados

Neste capítulo, apresentaremos os principais resultados obtidos no cálculo das reações de spallation, em baixas e altas energias com fins tecnológicos diversos. Determinamos a profundidade do poço de potencial nuclear para os núcleos envolvidos nas aplicações desenvolvidas. A energia de excitação do núcleo residual é obtida variando a massa efetiva inicial do nucleon, bem como sua evolução temporal. Além da evolução temporal da energia de excitação, apresentaremos o comportamento da massa efetiva ao longo do tempo como função da energia.

Mostraremos as multiplicidades ou o rendimento de partículas, espectro e distribuição angular de reações de spallation em regime de energia de reatores ADS e protonterapia. Além dos resultados da reação como um todo, apresentaremos resultados apenas da evaporação de emissão de múltiplas partículas de núcleos residuais excitados em regime de altas energias. Alguns resultados do trabalho já estão disponíveis nos jornais e revistas científicas de tal forma a consolidar o modelo para reações nucleares de spallation, seja em baixas energias (em elaboração para publicação) ou em altas energias [103, 75].

### 6.1 Resultados para Aplicações em Protonterapia

Um dos pontos mais importantes no desempenho do código é o potencial confinante nuclear. Este potencial deve ser determinado de forma que garanta o mínimo de estabilidade para o núcleo alvo, quando da ausência do feixe. A profundidade do poço de potencial nuclear para núcleos leves foi analisada e está apresentada na Tabela 6.1. Nesta, são apresentados os valores mínimos para que os potenciais garantam que o núcleo alvo não

Tabela 6.1: Profundidade do poço esférico de potencial nuclear ( $V_0$ ) em relação a diferentes valores iniciais da massa efetiva  $m_0^*$ . O potencial nuclear dos núcleos envolvidos no estudo da protonterapia.

$m_0^* [m_0]$	$V_0$ [MeV]					
	$^{12}\text{C}$	$^{14}\text{N}$	$^{16}\text{O}$	$^{31}\text{P}$	$^{40}\text{Ca}$	$^{48}\text{Ti}$
0.6	81.0	82.0	83.0	90.0	92.0	92.5
0.7	79.0	79.5	80.0	87.0	89.0	89.5
0.8	77.0	77.5	78.0	85.0	87.0	87.5
0.9	74.5	75.5	76.0	83.0	85.0	85.5
1.0	72.0	73.0	74.0	80.0	82.0	82.5

emita qualquer partícula após a incidência de um feixe de prótons de energia  $E_{\text{feixe}} \approx 0$ . Vemos que o comportamento do potencial decresce com o aumento do valor inicial da massa efetiva do nucleon, bem como decresce com a massa nuclear, como mostra a Figura 6.1.

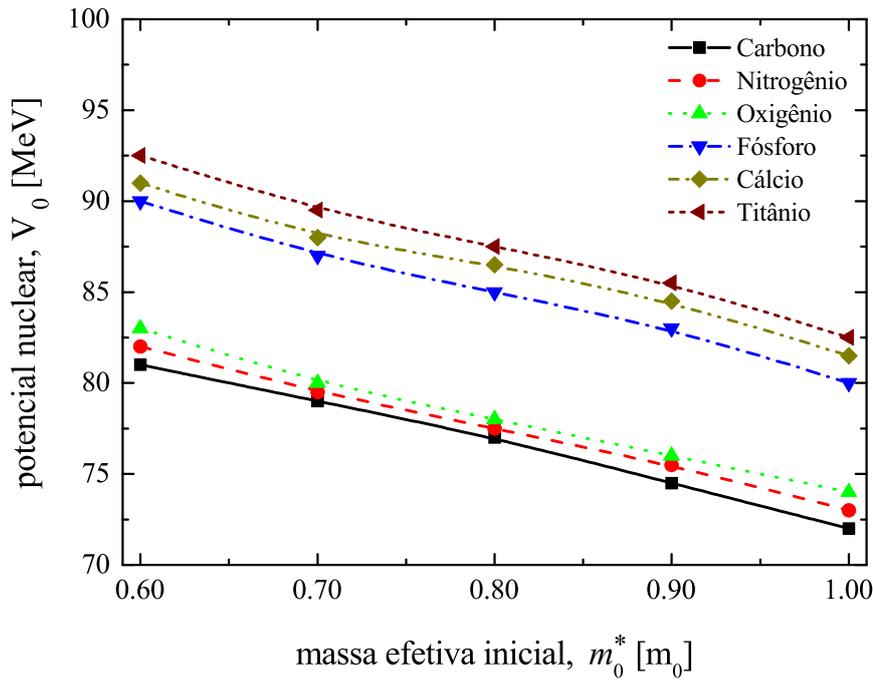


Figura 6.1: Profundidade do potencial nuclear no estado fundamental dos núcleos leves.

### 6.1.1 Relaxação Térmica

Quando trabalhamos em baixas energias, isto é, com feixes de prótons entre 50 MeV a 250 MeV, a evolução da energia de excitação por partículas ligadas, em diferentes valores

de massa efetiva inicial, passa a ter um comportamento diferente daquele observado no regime de altas energias, que veremos mais adiante na Figura 6.18, Seção 6.2. Na Figura 6.2, mostramos a evolução da energia de excitação, equação 3.33, para reações com três núcleos alvo, carbono, cálcio e titânio.

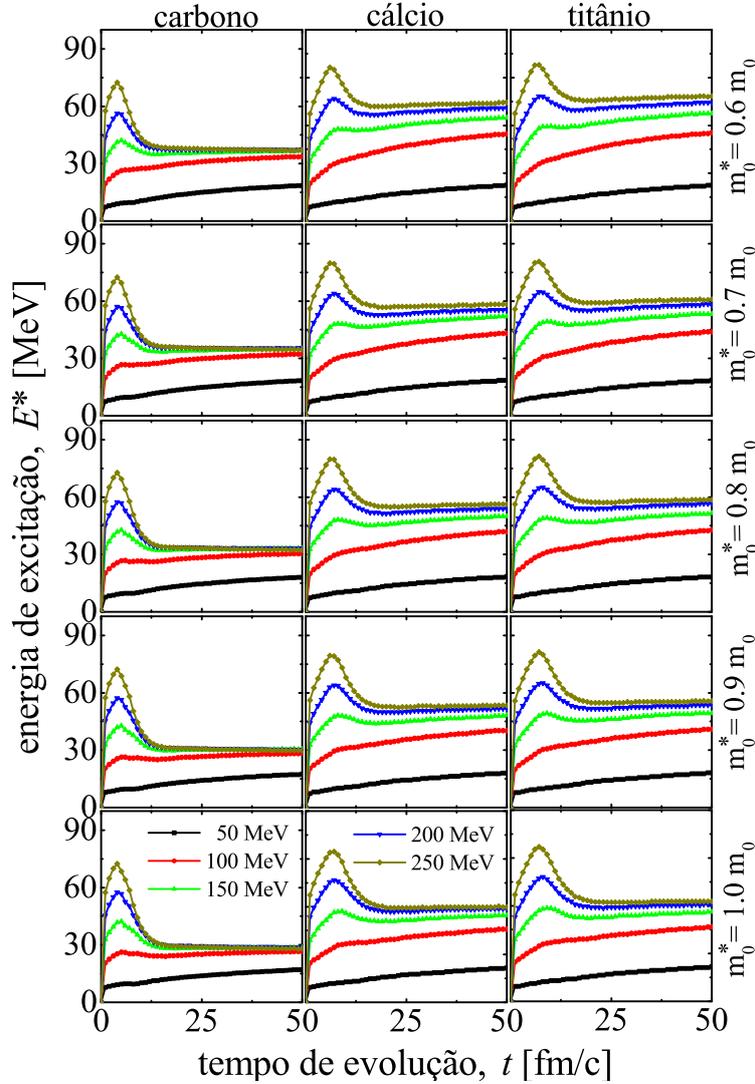


Figura 6.2: Evolução temporal de energia média de excitação de partículas para diferentes valores de  $m_0^*$  na fase de cascata intranuclear. Na parte (a), são apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para a reação p+C em diferente valores de energias incidentes. A parte (b) é para reação p+Ca, também para prótons incidentes de cinco valores de energia. E por fim, a parte (c), para reações do tipo p+Ti.

Na Figura 6.3, ilustramos a evolução no tempo dos valores de massa bariônica efetivas para diferentes reações de interesse. Exibimos resultados para p-carbono, p-cálcio e p-titânio.

O instante inicial da reação é crucial para a evolução dinâmica do sistema. De fato, observa-se que a maioria das partículas é emitida no início da reação e, mais importante,

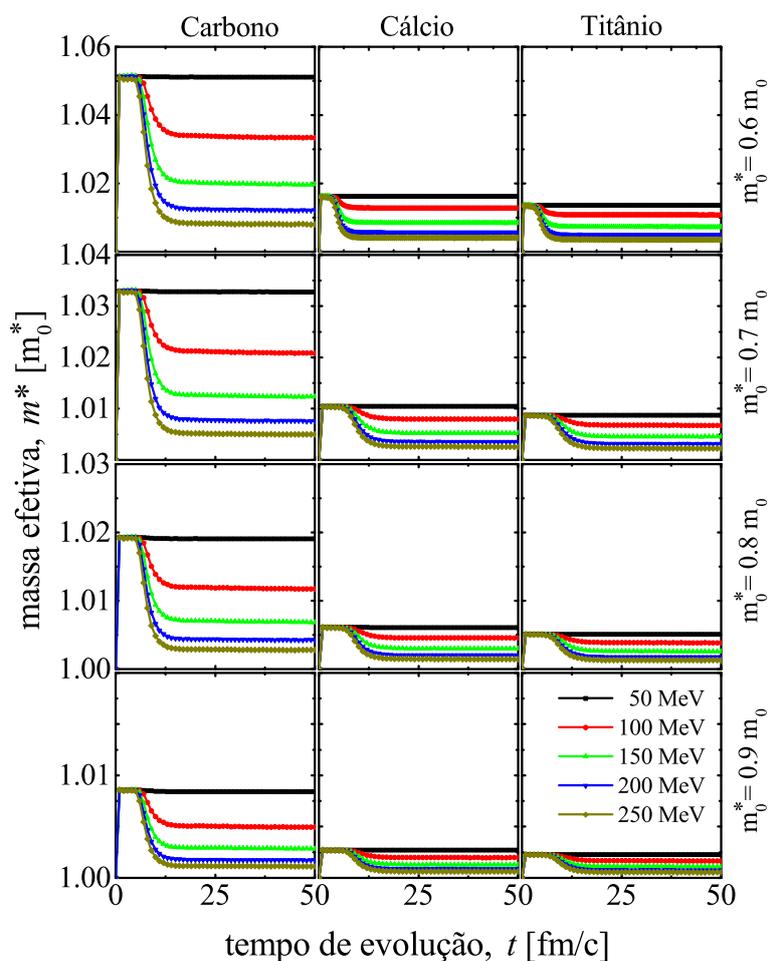


Figura 6.3: Massa efetiva como uma função do tempo para as reações p+C, p+Ca e p+Ti em cinco valores de energia incidente como mostra a legenda. Os resultados para cada valor da massa efetiva inicial estão organizados horizontalmente. A massa efetiva  $m_0^* = m_0$  não foi representado devido sua variação ser praticamente nula.

os núcleos alvo mais pesados apresentam pequena sensibilidade para a massa efetiva, afirmando que poucas partículas são emitidas a partir destes núcleos na cascata intranuclear.

De acordo com a figura, delimitamos o tempo da fase de cascata em 50 fm/c, quando seguramente o sistema entra em equilíbrio térmico, levando a um valor constante para a massa efetiva do sistema. Como vimos anteriormente, no Capítulo 3, quando não há emissão de partículas na fase de pré-equilíbrio, não temos mais mudança no valor da massa efetiva dos nucleons.

Vimos que a energia de excitação do núcleo residual na fase de cascata é uma quantidade fundamental para determinar o rendimento de partículas emitidas no processo de

desexcitação, fase de evaporação. Em reações no regime de baixas energias, analisamos a energia de excitação  $E^*$ , veja a Figura 6.4, como uma função da energia incidente para a reação de p+C, p+Ca e p+Ti em cinco valores da massa efetiva inicial do nucleon. Um padrão regular é observado para energia de excitação com a massa efetiva para todos os núcleos alvo escolhidos.

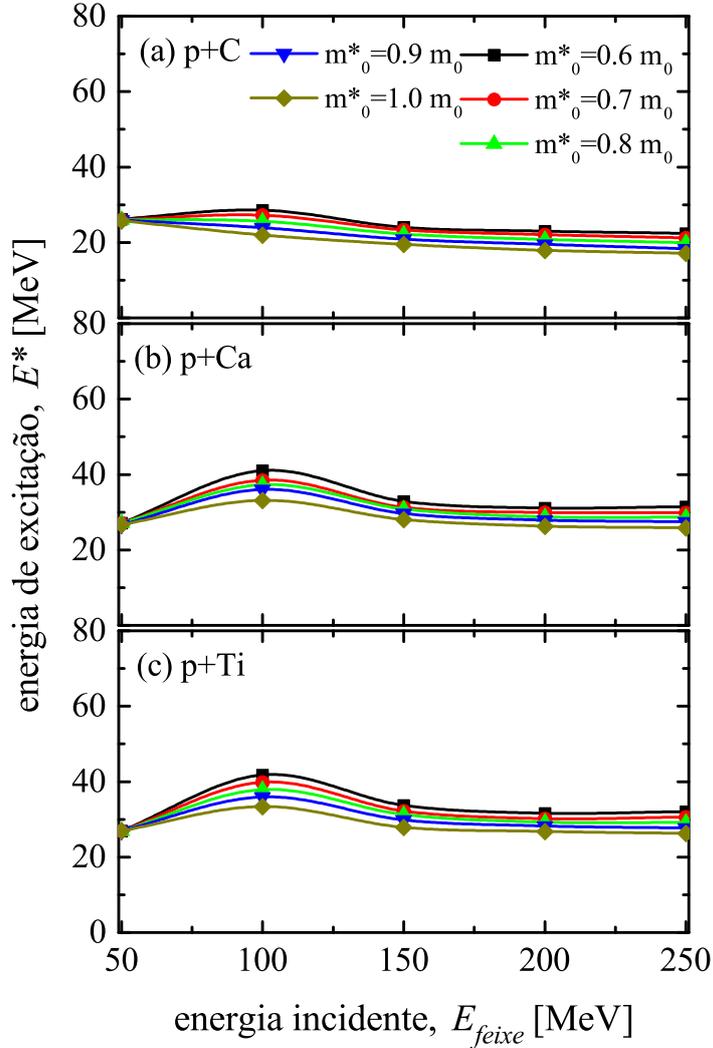


Figura 6.4: Energia de excitação do núcleo residual para reação de feixe de próton e núcleos alvo em energias de 50 MeV a 250 MeV. Na Parte (a) para a reação p+C, na parte (b) para p+Ca e na parte (c) para reação p+Ti.

Para valores mais elevados da energia do feixe de prótons ( $E_{feixe} \geq 100$  MeV) um padrão ligeiramente decrescente é observado como consequência da emissão de píons durante a fase rápida. Visto que nesta região de energia incidente, o limiar da produção de pión pode é alcançado, ou seja,  $E_{\pi} = 140$  MeV. A Figura 6.5 mostra a existência da emissão de mésons  $\pi$ . Embora esta produção não seja significativa em termo de dose.

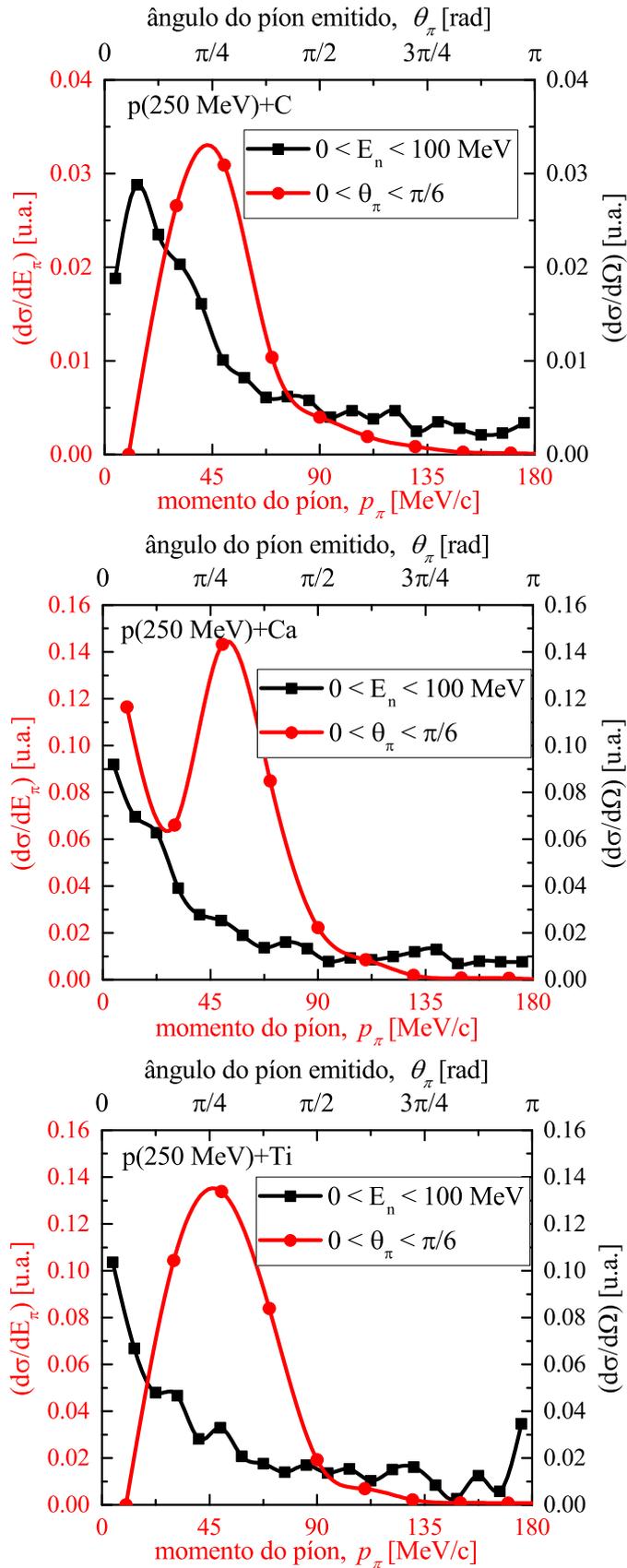


Figura 6.5: Emissão de mésons  $\pi$  para reações de spallation induzidas por feixes de próton de 250 MeV.

## 6.1.2 Multiplicidade de Prótons e Nêutrons

Na Figura 6.6, mostramos a multiplicidade de nucleons emitidos como uma função da energia incidente para núcleos alvo; carbono, cálcio e titânio, durante a fase cascata intranuclear. Podemos observar que o rendimento médio de prótons e nêutrons emitidos aumenta com a energia incidente, sendo pouco sensível à massa efetiva inicial e também às massas dos núcleos. O rendimento de prótons é mais acentuado devido a presença do feixe de próton.

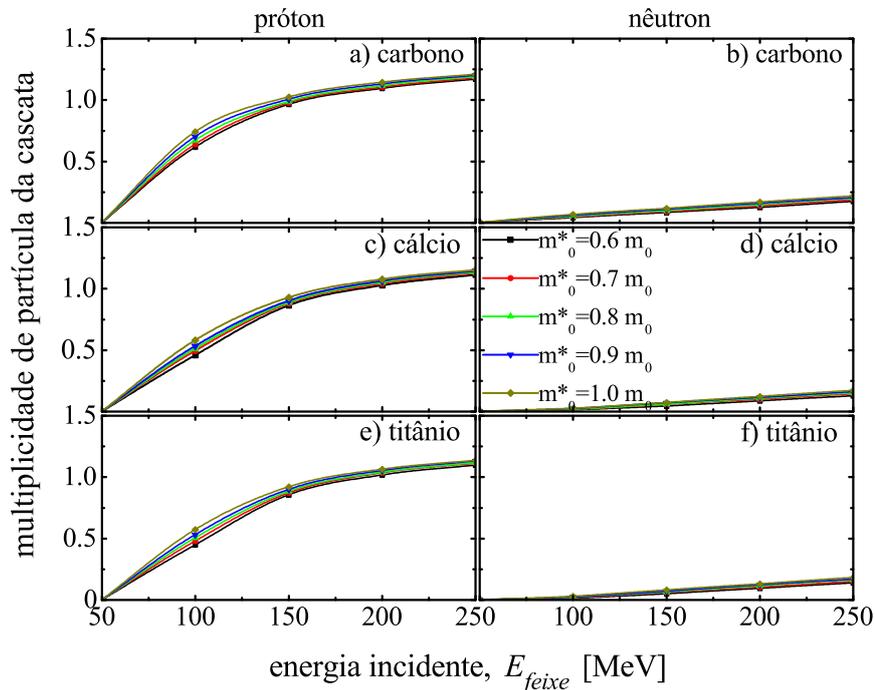


Figura 6.6: Rendimento médio de nêutrons e prótons como função da energia do feixe, durante a fase rápida, para diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio.

O rendimento de nêutrons ou de prótons não é sensível a mudança de massa efetiva inicial e a massa do núcleo alvo.

O comportamento da multiplicidade de partículas na fase de evaporação está disponível na Figura 6.7. Uma consequência de liberar mais nêutrons a partir do processo de evaporação é devido o sistema deixar mais energia cinética para bárions ligados. Uma vez que esta energia é distribuída para todos os bárions do sistema, aumenta a probabilidade de sua emissão, permitindo mais nêutrons serem ejetados.

Os resultados de multiplicidade de partículas evaporadas no processo de desexcita-

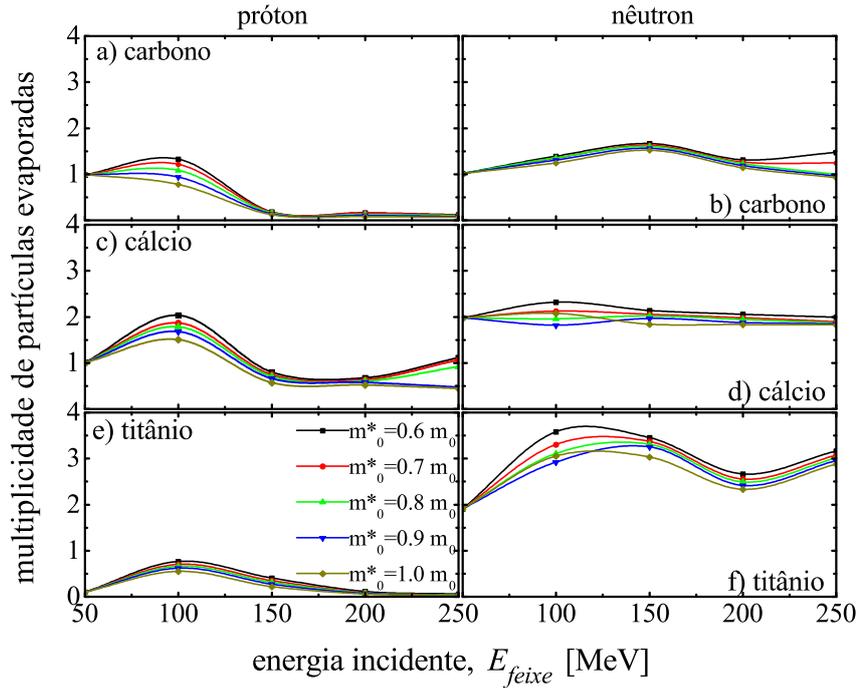


Figura 6.7: Rendimento médio de nêutrons e prótons como função do feixe, durante a fase rápida, a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio.

ção do núcleo residual podem ser vistos detalhadamente na Tabela 6.2. A tabela mostra os valores médios para o número atômico e de massa dos núcleos residuais, com as respectivas energias de excitação média, mostrando a multiplicidade de prótons e nêutrons. Observamos que, como os feixes incidentes estão no regime de baixa energia, a evaporação convencional pode ser usada com segurança.

Na Figura 6.8, mostramos a frequência de núcleos residuais e suas correspondentes energias de excitações que aparecem ao final da fase de cascata para as reações p+C e p+Ca (feixes de 250 MeV). As multiplicidades na fase de evaporação são determinadas para cada núcleo residual com suas respectivas energias de excitações, considerando a distribuição estatística. Note que, se compararmos os resultados da tabela 6.2 e os da Figura 6.6, concluímos que o rendimento de partículas na fase de evaporação tem a mesma ordem de grandeza que o na fase de cascata, devido exclusivamente serem núcleos leves. Além disso, como são núcleos com  $N \approx Z$ , a quantidade de nêutrons e prótons evaporados é similar.

Portanto, para o rendimento médio total de partículas, isto é, a soma das partículas emitidas no processo de pré-equilíbrio com as partículas evaporadas, está representado na

Tabela 6.2: Multiplicidade média de nêutrons ( $M_n$ ) e prótons ( $M_p$ ) emitidos na fase de evaporação das reações p+C, p+Ca e p+Ti. A multiplicidade é baseada somente na evaporação simples sequencial. Apresentamos o núcleo residual mais provável e sua energia de excitação mais provável, para diferentes valores de energias incidentes e diferentes valores de massa efetiva do nucleon.

$E_{feixe}$ [MeV]	Carbono				Cálcio				Titânio			
	$(\tilde{Z}, \tilde{A})$	$\tilde{E}^*$	$M_p$	$M_n$	$(\tilde{Z}, \tilde{A})$	$\tilde{E}^*$	$M_p$	$M_n$	$(\tilde{Z}, \tilde{A})$	$\tilde{E}^*$	$M_p$	$M_n$
	$m_0^* = 0.6m_0$											
50	(7.0, 13.0)	26.1	0.98	1.01	(21.0, 41.0)	27.0	1.00	1.97	(23.0, 49.0)	26.9	0.09	1.90
100	(6.4, 12.4)	28.5	1.32	1.38	(20.7, 40.7)	40.9	2.02	2.31	(22.7, 48.7)	41.7	0.76	3.57
150	(6.0, 11.9)	23.9	0.18	1.66	(20.3, 40.4)	32.8	0.80	2.13	(22.3, 48.4)	33.6	0.40	3.45
200	(5.9, 11.7)	22.9	0.16	1.31	(19.9, 39.8)	31.1	0.67	2.05	(21.9, 47.8)	31.6	0.10	2.66
250	(5.7, 11.5)	22.3	0.11	1.47	(19.8, 39.7)	31.4	1.10	1.98	(21.8, 47.7)	31.9	0.05	3.16
	$m_0^* = 0.7m_0$											
50	(7.0, 13.0)	26.0	0.98	1.01	(21.0, 41.0)	27.0	1.00	1.97	(23.0, 49.0)	26.9	0.09	1.90
100	(6.4, 12.3)	27.2	1.21	1.34	(20.6, 40.6)	38.4	1.86	2.12	(22.6, 48.6)	39.7	0.70	3.30
150	(6.0, 11.9)	23.2	0.17	1.62	(20.5, 40.1)	31.2	0.74	2.05	(22.5, 48.8)	32.2	0.35	3.36
200	(5.8, 11.6)	21.9	0.15	1.26	(19.9, 39.8)	29.8	0.63	1.97	(21.9, 47.8)	30.1	0.08	2.54
250	(5.7, 11.5)	21.1	0.10	1.24	(19.8, 39.6)	29.7	1.06	1.89	(21.8, 47.7)	30.5	0.04	3.06
	$m_0^* = 0.8m_0$											
50	(7.0, 13.0)	26.0	0.98	1.01	(21.0, 41.0)	27.0	1.00	1.97	(23.0, 49.0)	26.9	0.09	1.90
100	(6.4, 12.3)	25.5	1.08	1.35	(20.6, 40.6)	37.2	1.78	1.95	(22.6, 48.6)	37.8	0.65	3.10
150	(6.1, 10.1)	22.1	0.15	1.60	(20.6, 41.0)	30.8	0.70	2.01	(22.6, 49.0)	31.2	0.31	3.30
200	(5.8, 11.6)	20.7	0.12	1.22	(19.9, 39.8)	28.6	0.60	1.93	(21.9, 47.8)	29.1	0.07	2.48
250	(5.5, 11.5)	19.8	0.09	0.99	(19.8, 39.6)	28.5	0.91	1.86	(21.8, 47.6)	29.1	0.04	3.00
	$m_0^* = 0.9m_0$											
50	(7.0, 13.0)	25.8	0.98	1.01	(21.0, 41.0)	26.6	1.00	1.97	(23.0, 49.0)	26.9	0.09	1.90
100	(6.3, 12.3)	23.8	0.93	1.30	(20.6, 40.5)	36.0	1.67	1.81	(22.6, 48.5)	35.8	0.61	2.91
150	(5.9, 11.8)	20.7	0.14	1.56	(21.8, 41.0)	29.6	0.65	1.96	(22.9, 49.0)	29.7	0.27	3.25
200	(5.8, 11.6)	19.4	0.10	1.18	(19.9, 39.8)	27.8	0.57	1.87	(21.9, 47.8)	28.2	0.06	2.41
250	(5.7, 11.5)	18.3	0.07	0.95	(19.8, 39.6)	27.3	0.47	1.84	(21.8, 47.6)	27.6	0.03	2.95
	$m_0^* = 1.0m_0$											
50	(7.0, 13.0)	25.7	0.98	1.01	(21.0, 41.0)	26.6	1.00	1.97	(23.0, 49.0)	26.9	0.09	1.90
100	(6.3, 12.2)	21.9	0.77	1.24	(20.5, 40.5)	33.1	1.50	2.07	(22.5, 48.5)	33.3	0.54	3.04
150	(5.9, 11.8)	19.4	0.11	1.51	(20.4, 40.6)	28.0	0.56	1.84	(22.2, 48.4)	27.8	0.21	3.02
200	(5.8, 11.6)	17.8	0.07	1.13	(19.9, 39.7)	26.2	0.52	1.82	(21.9, 47.7)	26.7	0.05	2.32
250	(5.7, 11.4)	17.1	0.06	0.92	(19.8, 39.6)	25.7	0.44	1.82	(21.8, 47.6)	26.2	0.02	2.87

Figura 6.9. Este resultado é a multiplicidade total para reação de spallation induzida por feixes de prótons com núcleos alvo. Concluimos que, quanto maior a massa do núcleo alvo, maior é a multiplicidade de partículas na reação de spallation. Um ponto importante no rendimento dos núcleos é se compararmos a emissão do carbono na fase de cascata com o dos outros alvos. Vemos que durante a cascata o núcleo leve emite mais partículas do que os núcleos mais pesados como o cálcio e titânio. Neste caso, a energia de ligação nuclear para núcleos leves é menor do que nos casos de núcleos mais pesados. Muito embora tenhamos mais interações com alvos mais denso porém a energia de ligação desse núcleo minimiza a emissão de partículas.

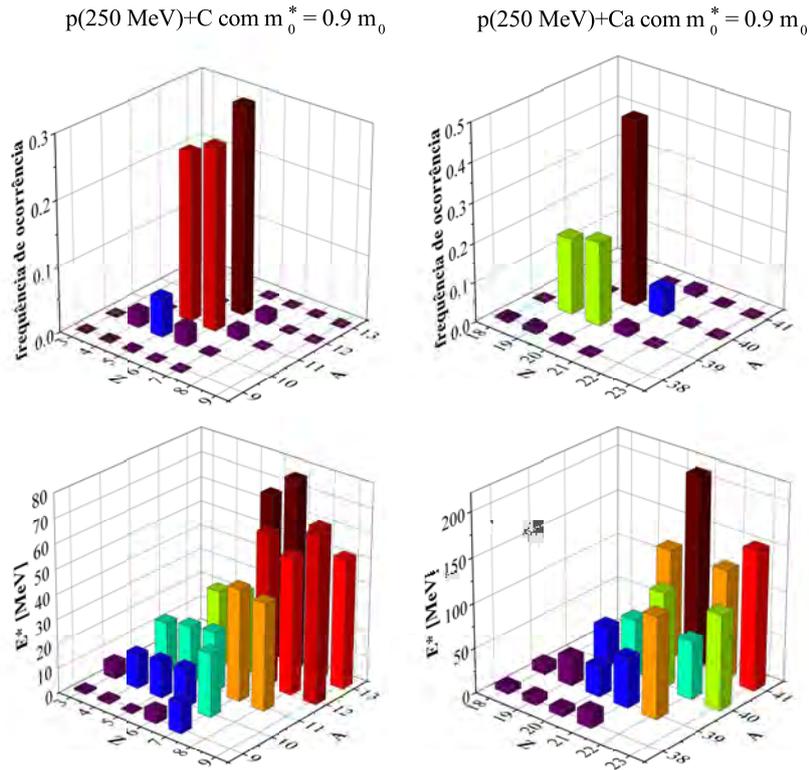


Figura 6.8: Distribuição de núcleos residuais e suas correspondentes energias de excitações, como por exemplo, para as reações p+C e p+Ca com feixes de 250 MeV, usando massa efetiva inicial  $m_0^* = 0,9m_0$ .

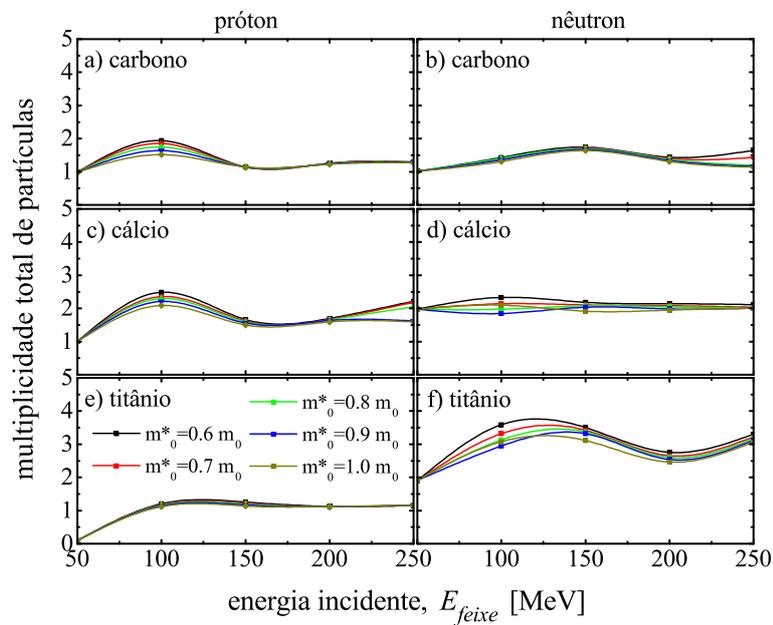


Figura 6.9: Rendimento médio total de nêutrons e prótons como função do feixe, durante a fase rápida, a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon conforme a legenda da figura. Os núcleos alvo são carbono, cálcio e titânio.

### 6.1.3 Espectro de Energia

A distribuição de energia de prótons emitidos na direção frontal está mostrada na Figura 6.10. A localização do pico da distribuição é praticamente a mesma para diferentes núcleos alvo, quando analisamos a mesma intensidade do feixe. Além disso, inspecionando resultados para próton-carbono (primeiro grupo horizontal), próton-cálcio (grupo do meio) e próton-titânio (último grupo) conclui-se que o comportamento do espectro é pouco sensível a variação da massa efetiva, quando os alvos têm massas nucleares próximas. Embora o espectro seja dependente da energia do feixe incidente, o feixe com maior intensidade é o de 100 MeV, no caso do carbono e independentemente da massa efetiva inicial. Porém, quando analisamos o cálcio e titânio, o maior pico resulta do feixe de 150 MeV em massas efetivas menores. Em massa efetivas maiores, o feixe de 100 MeV de energia tem maior contribuição.

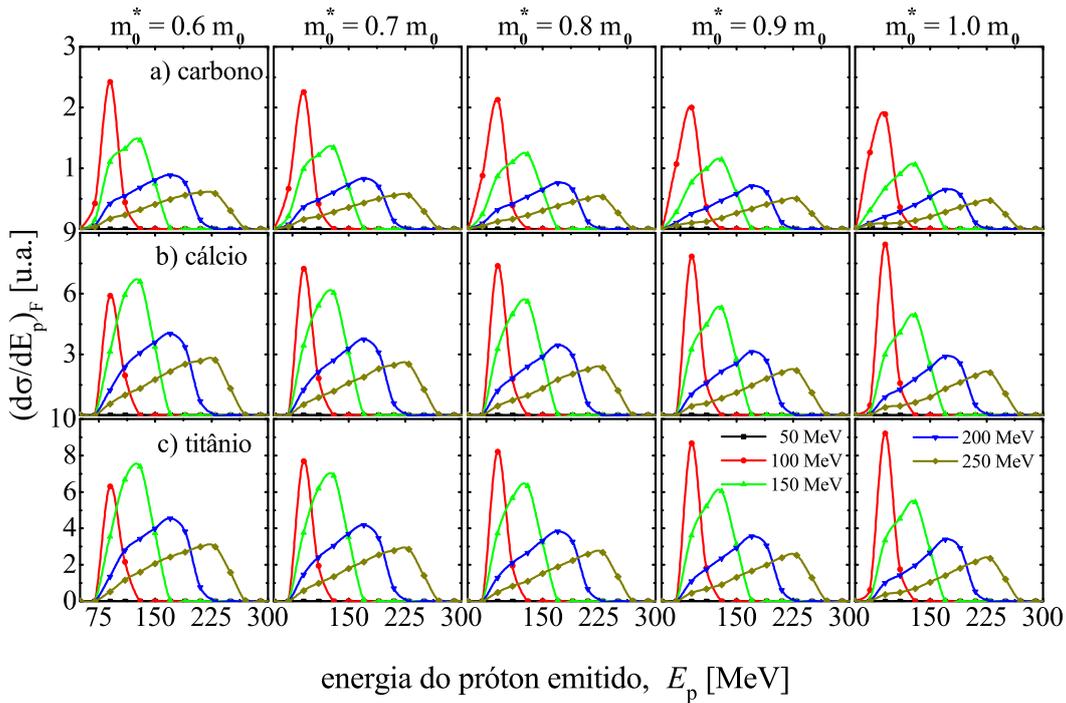


Figura 6.10: Espectro de energia de prótons emitidos em um ângulo frontal,  $\theta = 0 \pm \pi/12$  rad, reações induzidas por feixe de próton de 50 MeV a 250 MeV a diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon, como mostra a legenda. Os painéis da parte (a) são resultados para reação p+C, enquanto que da parte (b) são espectros da reação p+Ca e da parte (c) para a reação p+Ti. Como estamos interessados apenas em aspectos qualitativos da distribuição, todos os resultados foram normalizados para efeito de comparação.

O efeito da mudança da massa efetiva é mais sensível em função do número de massa  $A$  do alvo. Para  $E_{\text{feixe}} = 250$  MeV, dois picos correspondentes para emissão de prótons com energia levemente acima da energia de Fermi e com energia em torno da energia

do feixe são observados para  $m^* \rightarrow m_0$ . Quando  $m^* = 0,6m_0$  é analisado, este tipo de comportamento é menos acentuado em torno da energia do feixe.

Então, quando efeitos nucleares são intensificados em razão de valores pequenos para  $m^*$ , o processo de emissão de partículas resulta numa distribuição de energia ampla e mais uniforme, aumentando a contribuição de valores de energia intermediárias por um fator três em relação à distribuição de massa do nucleon livre.

Esta contribuição de energia intermediária leva a uma uniformização da penetração de prótons no tecido, sendo claramente um aspecto desafiador para o cálculo da dose final com feixes de prótons.

A semelhança entre todas as curvas para a emissão de partículas de forma independente sobre a massa núcleo alvo é uma consequência da pouca diferença entre as profundidades do poço para confinar nucleons ligados quando alteramos o valor da massa efetiva.

A distribuição de nêutron segue um comportamento bastante diferente ao que observado para prótons emitidos. A Figura 6.11 mostra a distribuição de nêutron emitidos na direção do feixe. A diferença nos aspectos globais das curvas é uma consequência da barreira de Coulomb que é relevante para o processo de emissão de partículas carregadas, Figura 6.10.

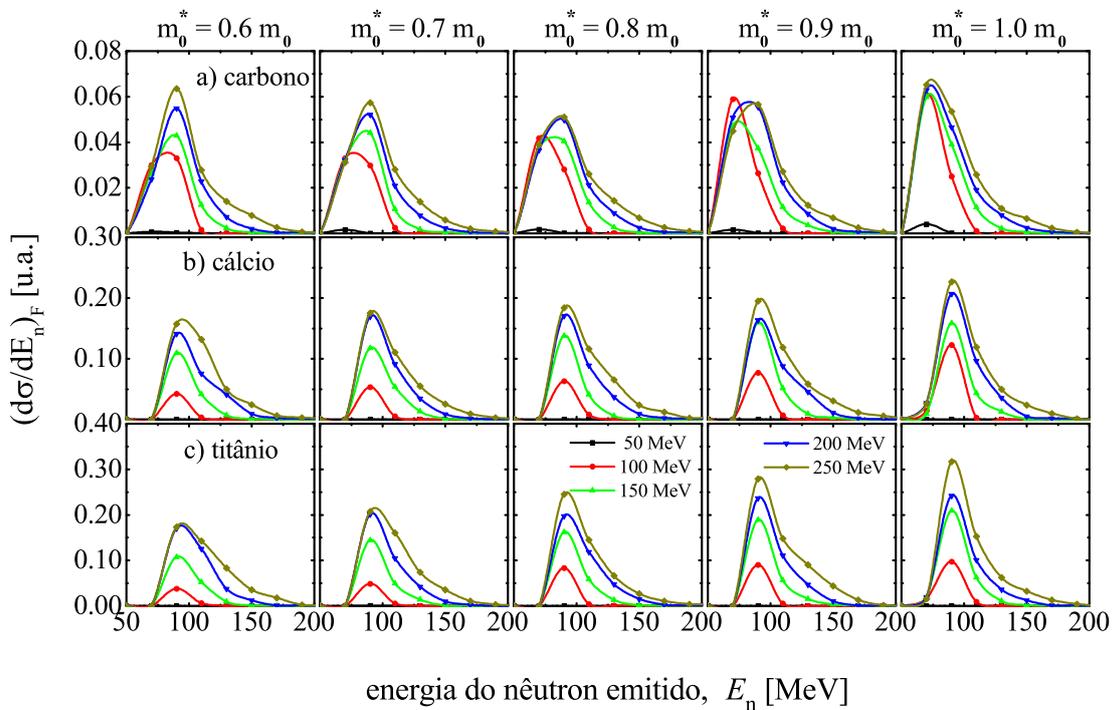


Figura 6.11: Seção de choque diferencial para nêutrons emitidos a partir de um ângulo frontal,  $\theta = 0 \pm \pi/12$  rad. A descrição das curvas é a mesma da figura anterior, Figura 6.10.

Para partículas emitidas transversalmente à direção do feixe, o espectro de partículas emitidas é distinto àquele na direção do feixe. Na Figura 6.12, mostramos a distribuição de próton emitidos para uma janela de ângulos de  $5\pi/12 < \theta < 7\pi/12$  rad. Em geral, podemos afirmar que o comportamento da distribuição é qualitativamente semelhante e independente da massa do núcleo alvo e da energia incidente. Quantitativamente, observamos que os efeitos nucleares tendem a aumentar a emissão de partículas com valores elevados de energia incidente e massa do núcleo. Além disso, aumentando a massa efetiva inicial do nucleon resulta também no aumento dos efeitos nucleares.

Na verdade, podemos observar que os efeitos nucleares nos espectros de prótons são menos afetados à mudança de massa efetiva, principalmente para os núcleos alvo mais leves. De fato, valores maiores para a massa efetiva inicial diminui a emissão de partículas em ângulos transversais mais rapidamente para núcleos pesados, como consequência de uma profundidade do poço para partículas que interagem com a superfície nuclear, favorecendo uma estabilização térmica mais rápida do sistema.

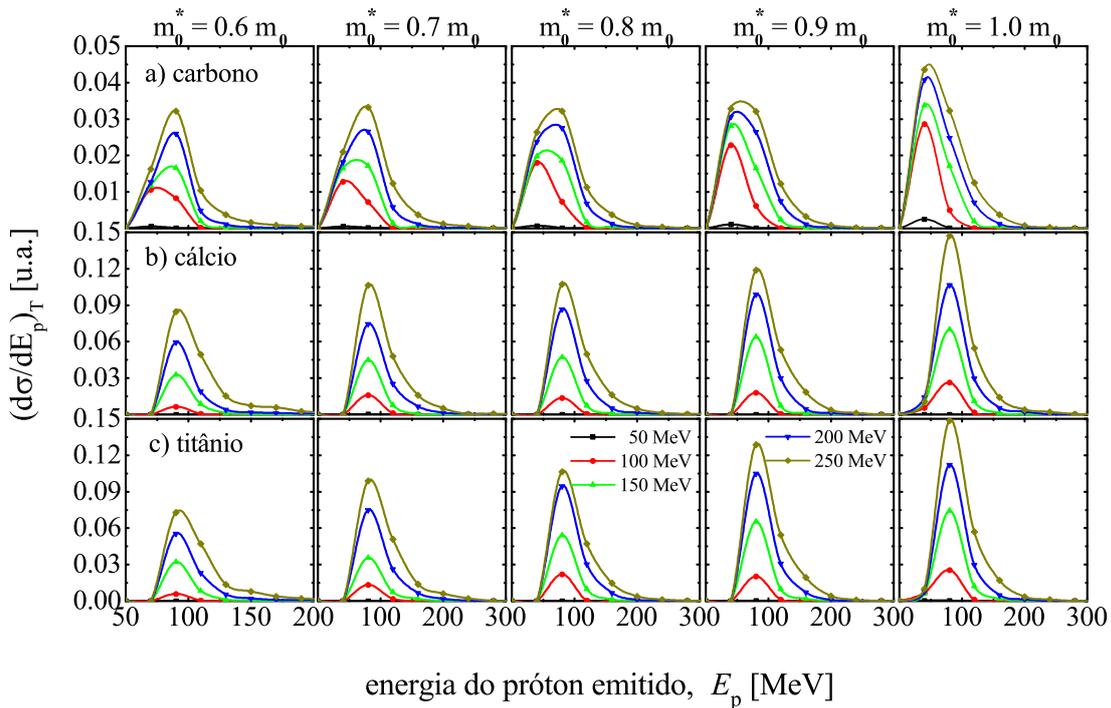


Figura 6.12: Espectro de prótons emitidos transversalmente,  $\theta = \pi/2 \pm \pi/12$  rad. A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.10.

Um comportamento muito semelhante é observado para a distribuição de nêutrons em ângulos transversais, como mostra na a Figura 6.13. Novamente, o efeito da massa efetiva é pouco relevante em termos de efeitos nucleares. A intensidade aumenta com o aumento da energia efetiva e o aumento da energia incidente, bem como o aumento da massa do

núcleo.

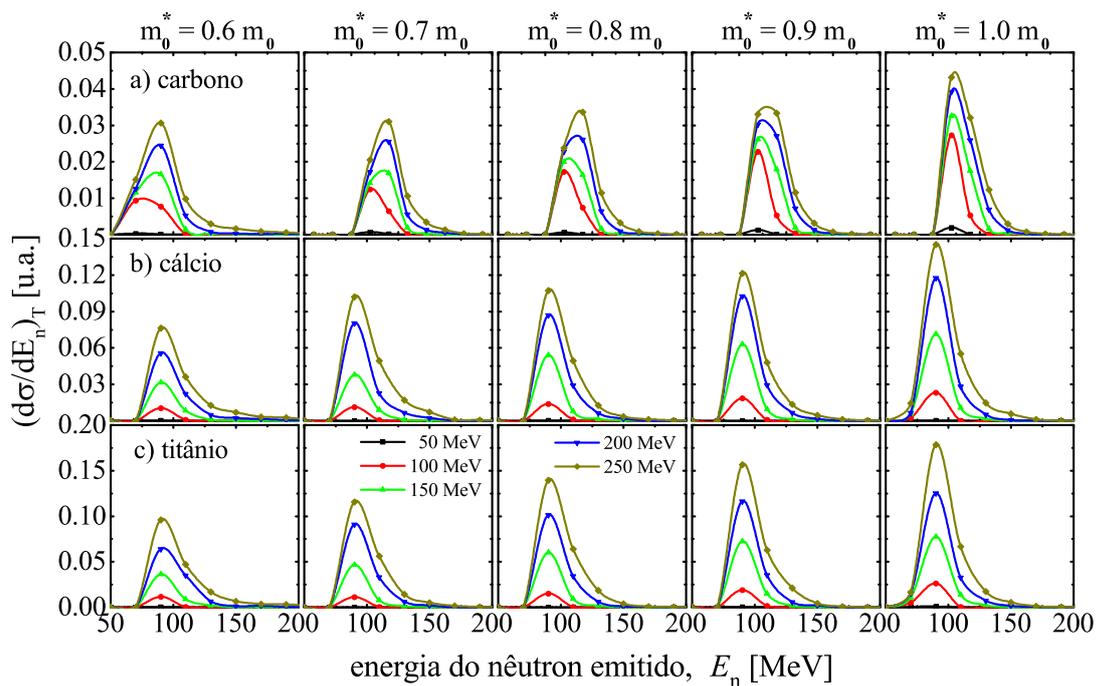


Figura 6.13: Espectro de nêutrons emitidos transversalmente,  $\theta = \pi/2 \pm \pi/12$  rad. A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.10.

## 6.1.4 Distribuições Angulares

Juntamente com espectros de partículas, as distribuições angulares são observáveis fundamentais na explicação da importância de efeitos nucleares, quando feixes de prótons interagem com núcleos de material durante o tratamento em protonterapia. A distribuição angular das partículas emitidas é um elemento chave, a fim de estudar os efeitos secundários de radiação no tratamento de prótons. A dose absorvida posteriormente será calculada em termos da multiplicidade de partículas emitidas, do espectro e da distribuição angular. Como vimos anteriormente, se houver uma contribuição significativa para a dose absorvida total devido às partículas secundárias, certamente haverá uma alteração no desempenho do tratamento final.

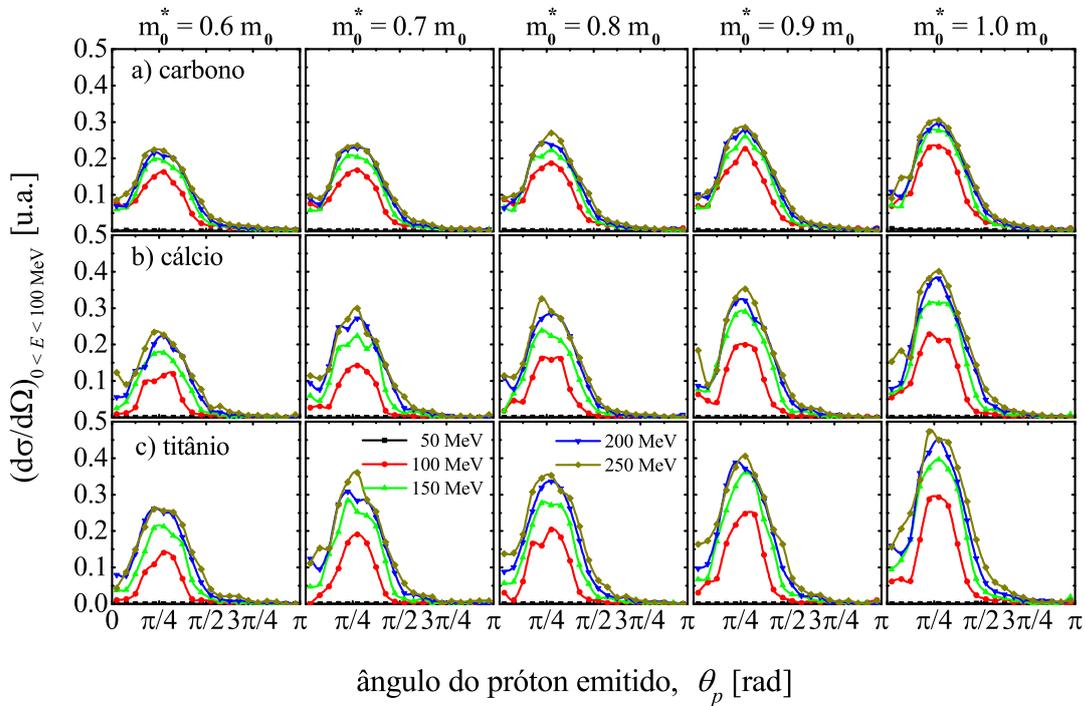


Figura 6.14: Distribuição angular de prótons emitidos com energia cinética ( $0 < E_p < 100$  MeV) em reações induzidas por feixes de prótons de 50 a 250 MeV para diferentes valores iniciais de massa efetiva do nucleon, como mostra a legenda. Os nossos resultados para reação p+C são plotados na parte (a). No caso da reação p+Ca, na parte (b). A parte (c) representa os resultados para a reação p+Ti.

Inicialmente, investigamos a distribuição angular dos prótons com energia  $0 < E_p < 100$  MeV na Figure 6.14. A seção de choque diferencial angular dos prótons emitidos é exibida também para as energias incidentes 50, 100, 150, 200 e 250 MeV, para reações p+C, p+Ca e p+Ti, e com  $m^* = 0,6m_0$ ,  $0,7m_0$ ,  $0,8m_0$ ,  $0,9m_0$  e  $m^* = m_0$ . As curvas seguem a mesma descrição das figuras anteriores. Mais uma vez, nota-se que, para a

mesma energia de prótons incidentes, a massa efetiva não afeta a distribuição angular de prótons com respeito a efeitos nucleares. No entanto, ao aumentar a energia do feixe e tendendo para a massa livre do nucleon, observamos maior a intensidade dos prótons emitidos, tendo maior contribuição para emissão dos prótons frontais.

Como resultado secundário, notamos que para núcleo alvo pesado, tal como o titânio exibido na última linha de painéis, efeitos nucleares surgem mesmo para prótons emitidos transversalmente, afirmando que a diferença de energia entre resultados de estados ligados e livres funciona como um mecanismo de estabilização térmica para o meio nuclear. Este efeito nuclear fornecerá mais tarde uma alteração na distribuição de partículas no material, modificando a dose absorvida.

A distribuição angular nucleon-nucleon experimental é utilizada para determinar o estado final cinemático de núcleos envolvidos na colisão. Lembramos que para colisões elásticas entre as partículas de massa semelhante o ângulo de espalhamento no referencial laboratório é a metade do ângulo de espalhamento no referencial centro de massa. O pico pronunciado na direção frontal no referencial laboratório vem de colisões principais de nucleons espalhados no referencial centro de massa nucleon-nucleon.

Em relação aos nêutrons emitidos com baixa energia cinética ( $0 < E_n < 100$  MeV), o comportamento da distribuição angular é qualitativamente diferente, como se pode ver na Figura 6.15.

Para baixa energia do feixe incidente, o pico na frontal independente da massa núcleo alvo, deixando claro que nêutrons emitidos vêm principalmente da interação primária do feixe incidente com o núcleo-alvo. Além disso, ainda para feixes de baixa energia, percebemos que para ângulos menores a intensidade é acentuada, pois os nêutrons estão com energia cinética baixa, desta forma apenas os feixes de baixa intensidade contribuem.

Outro aspecto interessante relacionado com a emissão nêutron é que, devido ao excesso de nêutrons do núcleo alvo de titânio, a produção de nêutrons é esperada ser acentuada nestas reações, e este aumento da emissão nêutrons é observado nas distribuições angulares.

As distribuições angulares para prótons emitidos numa janela de mais alta energia cinética ( $100 < E_p < 200$  MeV) são mostrados na Figura 6.16. Aqui, como antes, efeitos de massa efetiva não interferem tanto e a grande maioria dos prótons emitidos está no intervalo  $0 < \theta_p < \pi/6$  rad, assegurando que estes prótons são produzidos principalmente

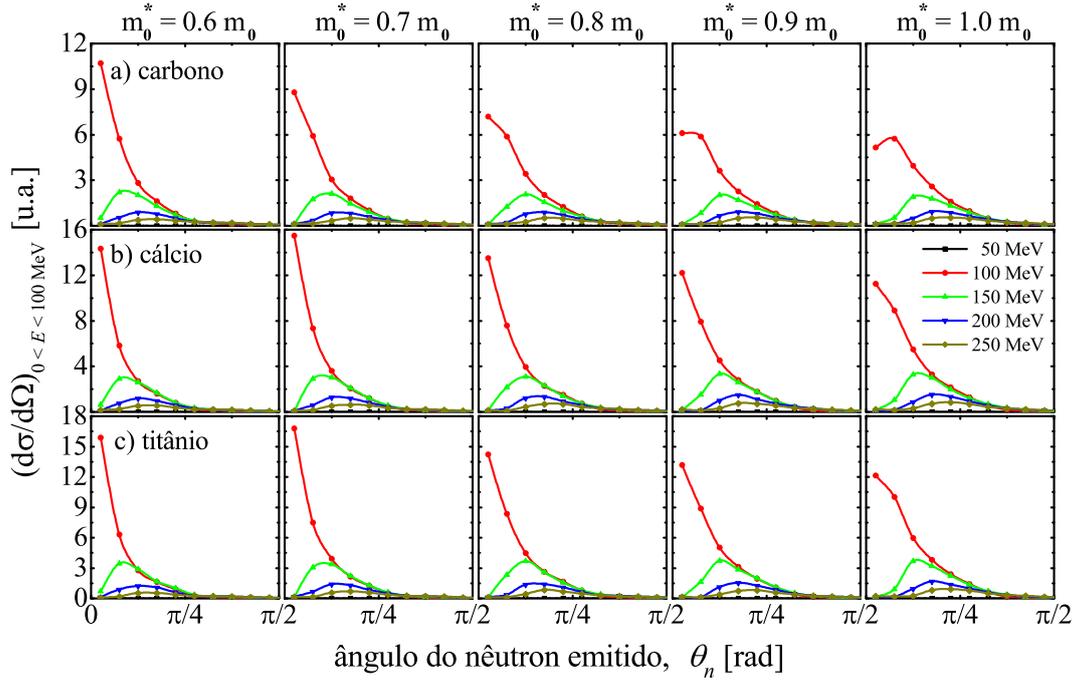


Figura 6.15: Distribuição angular de nêutrons emitidos com energia cinética ( $0 < E_n < 100$  MeV). A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.14.

na colisão primária.

Outra observação importante é que, para a energia baixa do feixe incidente (ou seja,  $E_{feixe} = 50$  MeV), partículas emitidas com energia acima de 100 MeV são muito raras, de modo que os nossos resultados foram apresentados com uma estatística aceitável.

O panorama muda bastante quando observamos a distribuição angular de nêutrons altamente energéticos, como mostra a Figura 6.17. A emissão de nêutrons é favorecida principalmente para massas efetivas menores. Em seguida, alguns nêutrons do sistema adquirem energia suficiente para escapar a partir da meio nuclear.

Quando a interação primária ocorre, mais uma vez a diferença de massa entre um nêutron ligado e um livre está diretamente definida pelo valor inicial de massa efetiva, sendo substancialmente grande para pequenos valores  $m_0^*$ . Quanto maior o efeito da massa efetiva (menor valor de  $m_0^*$ ) mais massa do feixe é transformada em energia cinética, aumentando a temperatura do núcleo excitado para baixos valores de  $m^*$ . Como consequência deste estado mais energético, mais nêutrons são emitidos para pequenos valores da massa efetiva inicial.

Mais uma vez, estes nêutrons emitidos podem deformar a distribuição da dose planejada e calculada para o paciente, sendo significativos para a dose administrada ao tecido saudável e de órgãos com risco próximo de tecido tumoral.

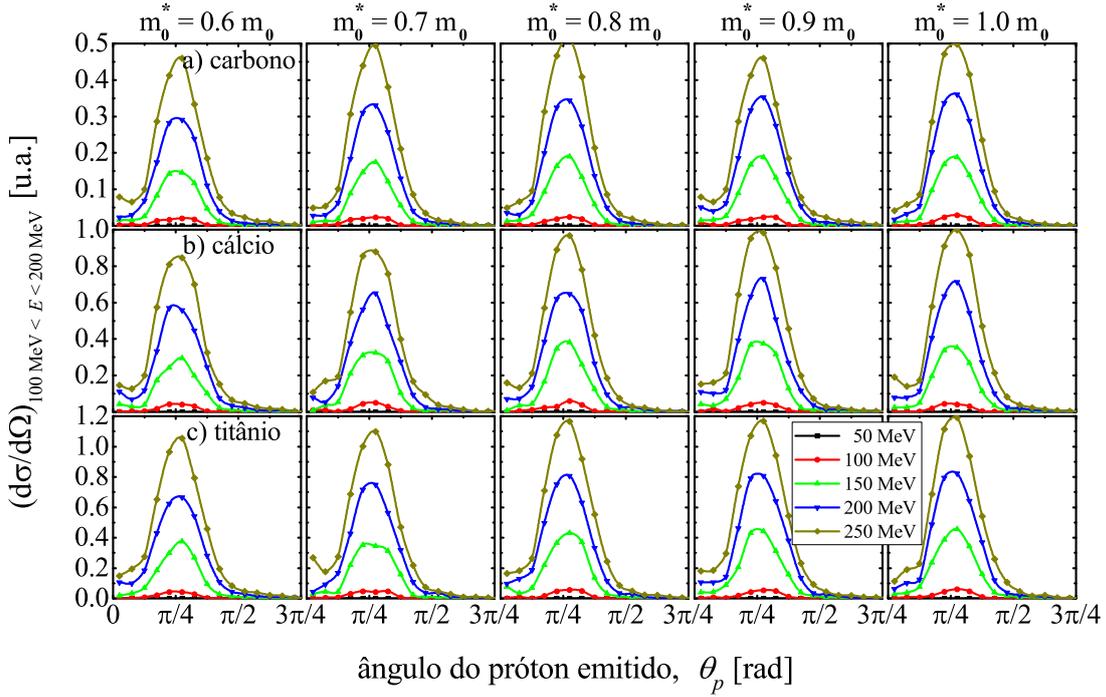


Figura 6.16: Distribuição angular de prótons emitidos com alta energia cinética ( $100 \text{ MeV} < E_p < 200 \text{ MeV}$ ) em reações induzidas por feixes de prótons de 50 a 250 MeV em diferentes valores iniciais da massa efetiva, como mostra a legenda. Os nossos resultados para a reação  $p+\text{Ca}$  são plotados na parte (a). No caso da reação  $p+\text{C}$ , na parte (b). A parte (c) representa os resultados para a reação  $p+\text{Ti}$ .

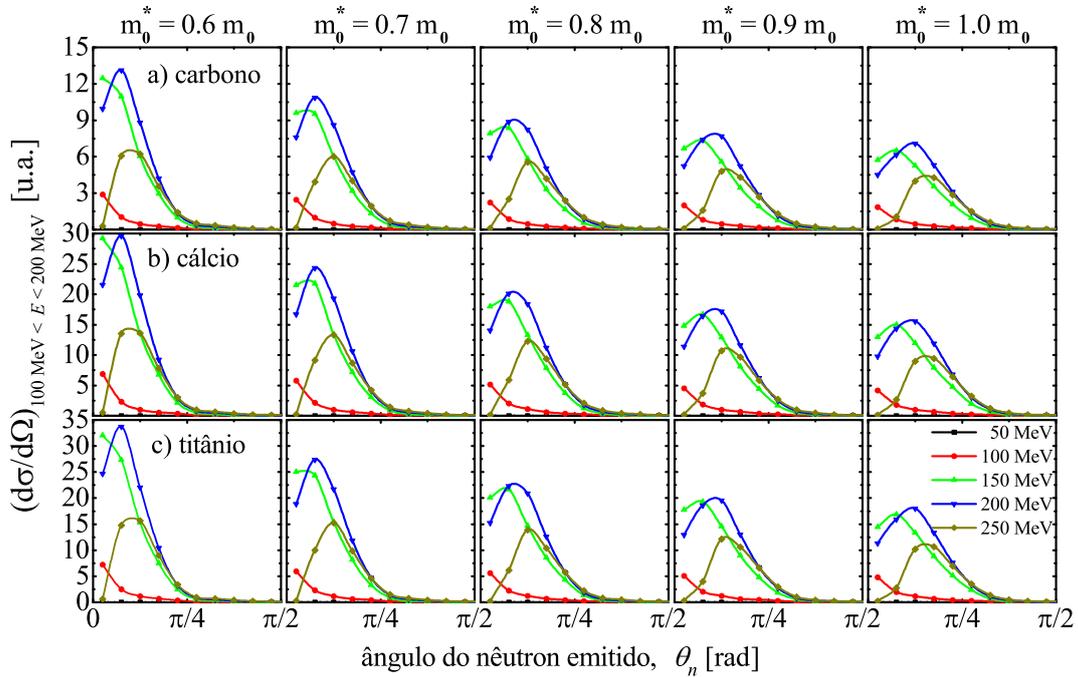


Figura 6.17: Distribuição angular para nêutrons emitidos com energia cinética ( $100 \text{ MeV} < E_p < 200 \text{ MeV}$ ). A descrição das curvas é a mesma da Figura 6.14.

## 6.2 Resultados para Aplicações em Reatores ADS

Na Subsecção 3.1.2, chamamos a atenção a um estudo preliminar do poço de potencial nuclear adequado para a realização de nossas simulações. As profundidades do poço de potencial nuclear calculadas estão apresentados na Tabela 6.3, para os núcleos alvo com interesse em aplicações em reatores ADS. O potencial decresce com o aumento do valor inicial da massa efetiva do nucleon. Para núcleos mais pesado o poço é mais profundo, como era de se esperar com o aumento da energia de Fermi.

Tabela 6.3: Profundidade do poço esférico de potencial nuclear ( $V_0$ ) determinada para diferentes valores iniciais da massa efetiva  $m_0^*$  do núcleo de chumbo, envolvido no estudo dos reatores nucleares.

$m_0^*/m_0$	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$V_0$ (MeV)	93.0	90.0	88.5	86.5	83.5

### 6.2.1 Relaxação Térmica

Na Seção 4.1, vimos que a energia de excitação do núcleo residual na fase de cascata é uma quantidade fundamental para determinar a multiplicidade de partículas emitidas na fase de evaporação do processo. A Figura 6.18 mostra a evolução temporal da energia de excitação por partículas ligadas durante a fase de cascata para diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon e diferentes valores de energia do feixe de próton da reação  $p+^{208}\text{Pb}$ .

Note que estendemos a fase rápida de cascata até 500 fm/c, para assegurar a situação de equilíbrio térmico do sistema nuclear residual. Na Figura 6.18 mostramos apenas a etapa inicial da fase de pré-equilíbrio. Ilustramos no gráfico a evolução até  $t = 50$  fm/c, para detalharmos o transiente do sistema nuclear excitado. Percebemos que o tempo de relaxação é mais ou menos independente do valor inicial da massa efetiva do nucleon e da energia incidente. No entanto, o valor final de energia de excitação por partícula aumenta em algumas centenas de KeV em relação ao aumento da energia do feixe, e diminui para uma quantidade menor quando diminuimos a massa efetiva do nucleon. O comportamento crescente das curvas é estritamente relacionado à transferência de energia do feixe ao núcleo e o decréscimo pela energia cinética carregada das partículas emitidas. O valor constante do energia de excitação significa que o sistema está termalizado. Separamos

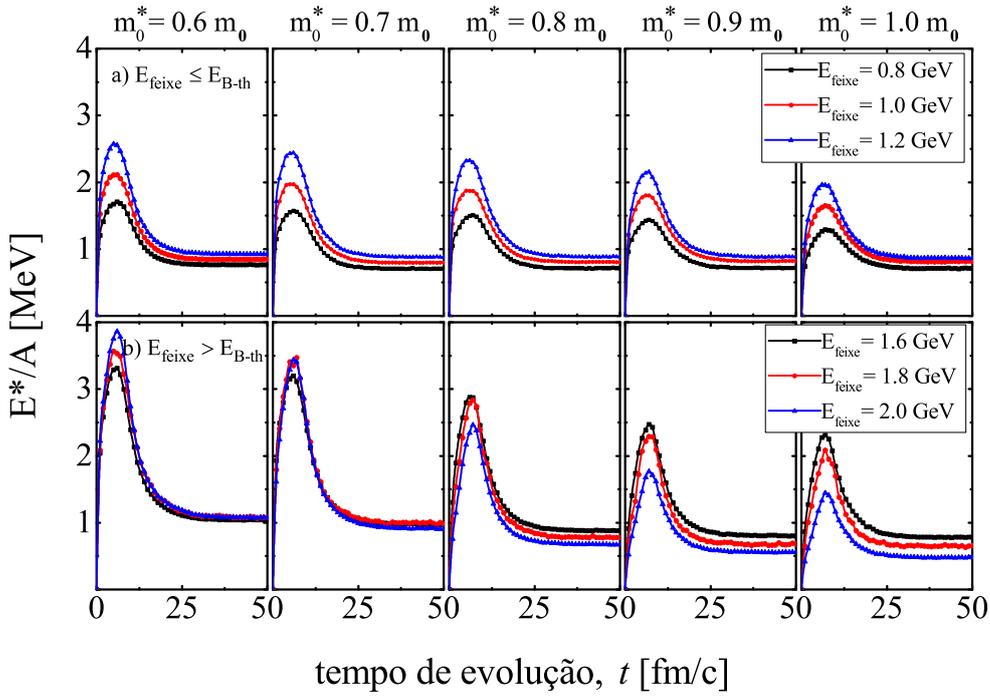


Figura 6.18: Evolução temporal de energia de excitação média de partículas para diferentes valores de  $m_0^*$  na fase de cascata intranuclear. Na parte (a), são apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para feixe de energia perto e abaixo da limiar de ressonâncias bariônicas  $E_{B-th}$  em reações  $p+^{208}\text{Pb}$  com feixes energias de 0,8 GeV, 1,0 GeV e 1,2 GeV (como especifica a legenda). Parte (b) é a energia incidente acima do limiar bariônico para prótons incidentes de 1,6 GeV, 1,8 GeV e 2,0 GeV (com o mesmo código de linha da parte (a)).

os resultados de energia de excitação em dois regimes de energia incidente, na parte (a), energias do feixe perto ou abaixo do limiar das ressonâncias bariônicas,  $N^*$  e  $\Delta$ , ( $E_{B-th}$ ). Na parte (b), a energia do feixe acima do limiar, isto é, para energia incidente acima de 1.2 GeV. Na parte (b), observa-se uma diminuição sistemática da energia de excitação com a energia do feixe, uma vez que parte da energia disponível foi usada para produzir ressonâncias com provável emissão de mésons subsequentes.

Na Figura 6.19, mostramos o comportamento de variação da massa efetiva ao longo da evolução temporal do sistema. O pico inicial é correspondente à variação súbita da massa efetiva quando a primeira partícula é emitida do sistema. Enquanto ocorre o escape de partículas, a massa efetiva sofre variações até o sistema atingir o equilíbrio termodinâmico. Nós também separamos os resultados para dois regime de energias do feixe próximo ou abaixo do  $E_{B-th}$  e acima.

Visando a aplicação futura para reatores ADS no regime de altas energias, plotamos a energia de excitação,  $E^*$  como mostra a Figura 6.20, do núcleo residual como uma função da energia de incidente, para diferente valores iniciais da massa efetiva inicial do nucleon

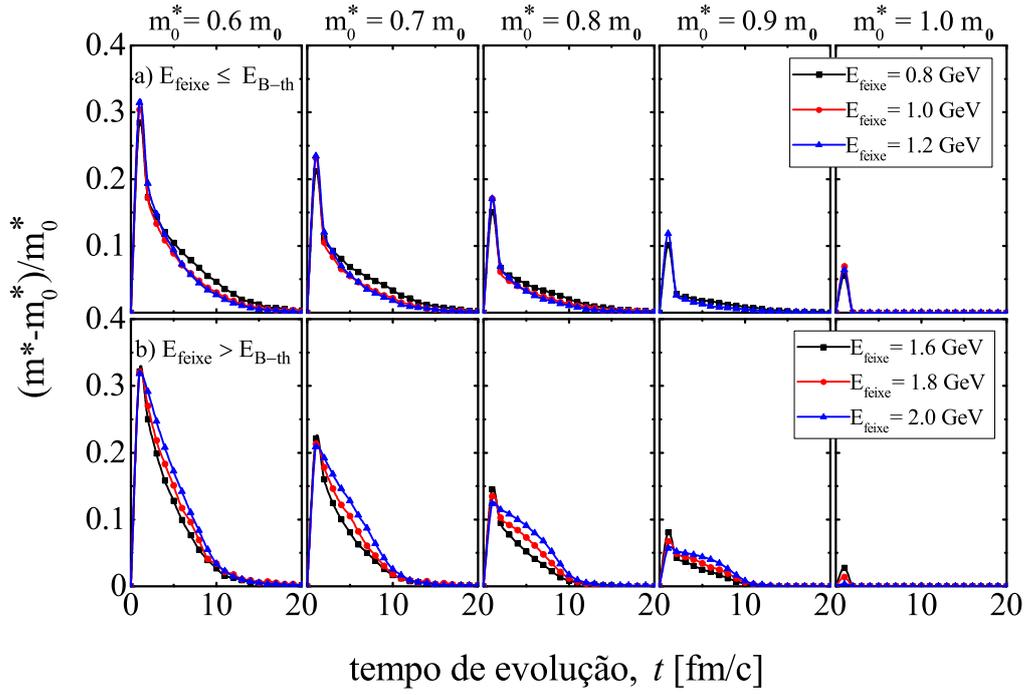


Figura 6.19: Evolução temporal da variação da massa efetiva durante a fase de cascata para diferentes valores de  $m_0^*$ . São apresentados os resultados da mudança na energia de excitação para feixe de energia perto e abaixo da limiar de ressonâncias bariônicas da reação  $p+^{208}\text{Pb}$ , conforme a legenda. Os resultados foram multiplicados por um fator  $10^{-2}$  para melhor visualização. Nós usamos  $\Delta m^* = m^* - m_0^*$ .

para a reação de  $p+\text{Pb}$ .

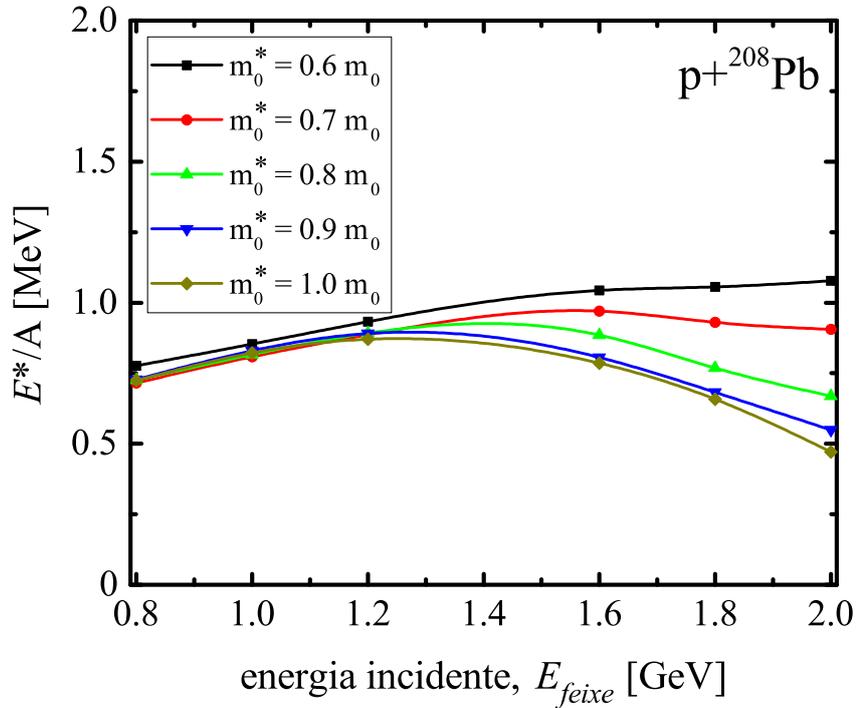


Figura 6.20: Energia de excitação do núcleo residual em função da energia incidente para a reação  $p+\text{Pb}$ .

A energia de excitação aumenta em função da energia incidente para um limiar de 1,6 GeV e depois decresce. Para valores mais elevados da energia do feixe de prótons, o padrão decrescente é observado como consequência da produção de ressonância e emissão píons durante a fase rápida. A produção de píons ao longo da cascata intranuclear para 0.8 a 2.0 GeV de energia incidente está mostrado na Figura 6.21. Observa-se que, quando o núcleo é incidido pelo feixe de 2,0 GeV, a produção de píons é maior, e conseqüentemente ocorre uma diminuição da energia restante ao sistema.

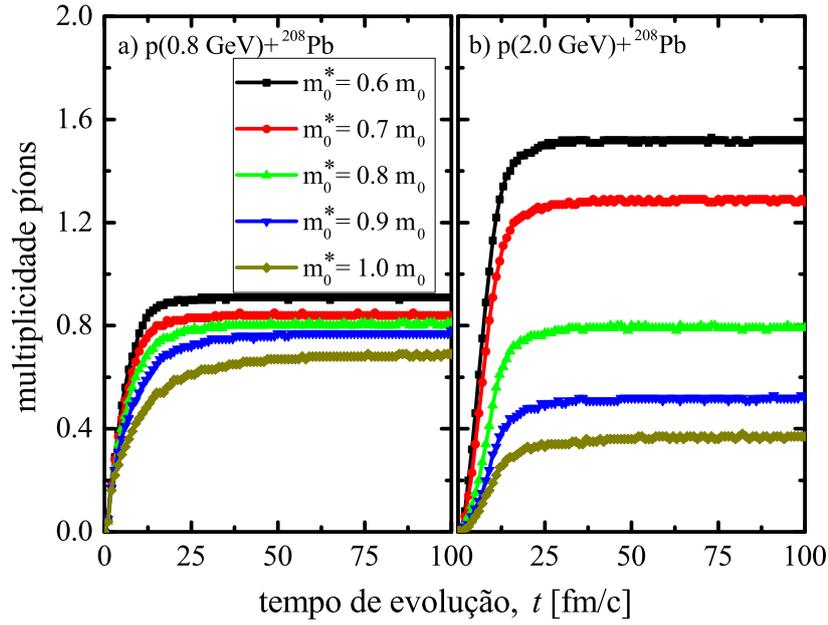


Figura 6.21: Evolução do rendimento de píons durante a fase de cascata. Mostramos apenas os resultados de dois feixes incidentes: parte (a) e (b) da figura.

A energia de excitação é também uma grandeza importante para o cálculo de parâmetros de detecção, tais como rendimento partículas (multiplicidade de partículas), distribuição angular e espectros de partículas emitidas.

## 6.2.2 Multiplicidade de Prótons e Nêutrons

Um resultado de grande interesse para aplicações que envolve fontes de nêutrons no reator de ADS corresponde à produção de nêutrons em reações de spallation induzidas por prótons energéticos. Tal produção é dada a partir da multiplicidade de nêutrons na reação. Os resultados obtidos neste trabalho estão mostrados na Tabela 6.4. Comparamos nossos resultados com dados experimentais medidos no acelerador SATURNE em Saclay pelo grupo de Leray, em 2002 [104]. Os resultados também foram comparados com resultados teóricos do modelo de TIERCE [105] e do modelo INCL4 [106]. Duas faixas de energia cinética das partículas emitidas estão demarcadas por: i)  $0 \leq T < 20$  MeV para partículas produzidas na fase de evaporação; e ii)  $T \geq 20$  MeV para partículas emitidas na cascata intranuclear.

Tabela 6.4: Multiplicidades de nêutrons durante as fases de cascata e evaporação, de acordo com as previsões teóricas TIERCE (coluna 2) e INCL4 (coluna 3), nossos resultados para diferentes massas efetivas,  $m_0^* = 0.6m_0, 0.7m_0, 0.8m_0, 0.9m_0$ , e  $m_0$  (colunas de 4 a 8), comparados com os dados experimentais correspondentes (última coluna).

Energia $T$ (MeV)	TIERCE	INCL4	MCMC					Dados Exp.
			$0.6m_0$	$0.7m_0$	$0.8m_0$	$0.9m_0$	$m_0$	
energia do próton incidente — 800 MeV								
0 – 2	4.9	3.3	9.5	9.7	9.6	9.1	8.4	$6.5 \pm 0.7$
2 – 20	6.9	6.8						
$\geq 20$	2.2	2.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.7	
energia do próton incidente — 1000 MeV								
0 – 20			9.5	9.7	9.6	9.1	8.4	
$\geq 20$			1.7	1.8	1.8	1.9	2.0	
energia do próton incidente — 1200 MeV								
0 – 2	5.8	3.4	8.9	9.3	8.8	8.4	8.1	$8.3 \pm 0.8$
2 – 20	8.9	8.1						
$\geq 20$	2.8	3.1	2.0	2.1	2.1	2.1	2.2	
energia do próton incidente — 1600 MeV								
0 – 2	6.0		8.9	9.1	9.0	8.6	8.3	$10.1 \pm 1.0$
2 – 20	9.9							
$\geq 20$	3.1		2.5	2.	2.4	2.1	2.1	
energia do próton incidente — 1800 MeV								
2 – 20			8.8	9.0	9.0	9.0	8.3	
$\geq 20$			2.7	2.7	2.2	1.8	1.8	
energia do próton incidente — 2000 MeV								
0 – 20			9.0	9.5	9.0	8.6	8.2	
$\geq 20$			2.8	2.6	1.9	1.4	1.2	

Chamamos a atenção para o número maior de nêutrons emitidos na fase de evaporação em comparação com a fase em cascata. O comportamento praticamente constante da

energia de excitação com a massa efetiva (mostrado na Figura 6.20) é acompanhado pela multiplicidade de nêutrons mostrada na Figura 6.22 (vemos este comportamento pela Tabela 6.4).

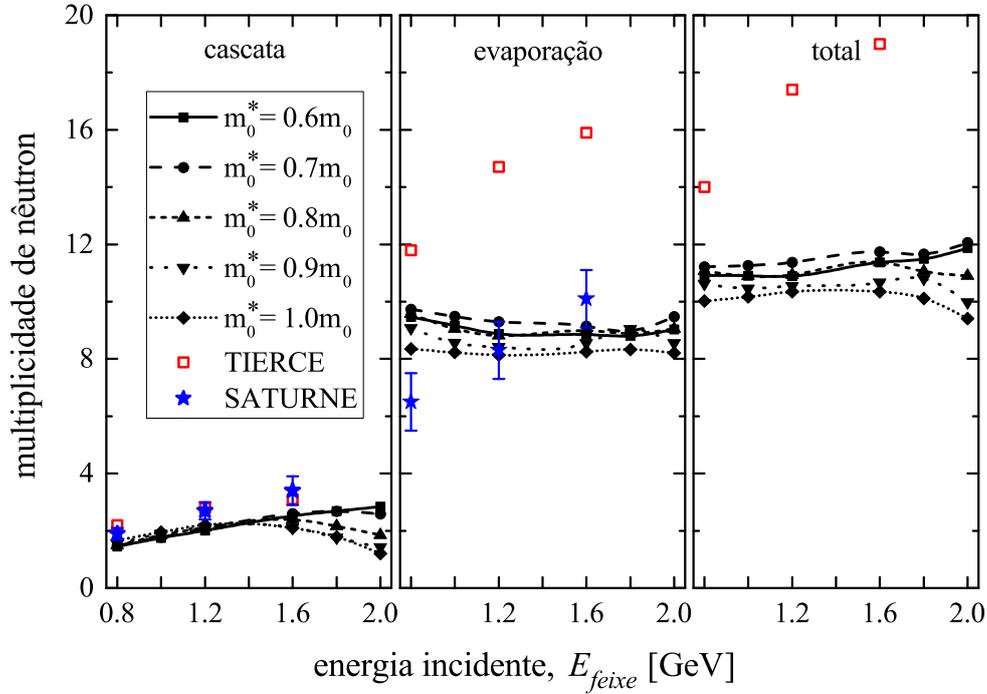


Figura 6.22: Previsão para multiplicidade de nêutrons durante as fases da cascata e a fase de evaporação nuclear. Realizamos os cálculos para os cinco valores iniciais de massa efetiva. Os resultados são para reações  $p(1 \text{ GeV}) + {}^{208}\text{Pb}$  em diferentes energias incidentes. Os resultados de TIERCE são representados por símbolo quadrado vazio. Os dados experimentais são símbolos estrelas cheias.

Na literatura é possível encontrar várias estimativas para a multiplicidade de nêutrons na reação de spallation. No entanto, Além da falta de dados experimentais de reações próton-Pb apresentados nas referências [107, 108], mesmo assim com a utilização de folhas grossas de chumbo como alvo, sendo estas bombardeadas por prótons com 0,8 GeV, 1,2 GeV e 1.6 GeV. Desta forma, os resultados do MCMC não são diretamente comparáveis com o experimento, já que os dados para a multiplicidade de nêutrons são obtidos com alvo de grande espessura. Neste caso, nêutrons podem ser produzidos ou absorvidos por processos de re-espalhamento no alvo. Ressaltamos que em nossas simulações estamos considerando a produção de nêutrons para núcleos isolados. Mesmo pouco comparáveis, nossos resultados para as multiplicidades de nêutrons concordam mais fielmente com os dados experimentais [104] do que resultados obtidos em outros modelos para reações de

spallation, como mostra a Figura 6.22. O motivo da diferença entre nossos resultados e os resultados obtidos em outros modelos é exclusivamente porque na fase de evaporação de tais modelos, a energia de excitação aumenta à medida que a energia incidente aumenta.

Na Figura 6.22, apresentamos os nossos resultados e os dados experimentais em comparação com os outros resultados teóricos (mostrados na tabela 6.4). A multiplicidade de nêutrons está dividida nas fases correspondentes, isto é, fase de cascata e a fase de evaporação convencional com quatro canais de emissão. A partir desse gráfico percebemos um decréscimo no rendimento de nêutrons na fase de cascata devido a produção de ressonâncias bariônicas e emissão de mésons. Este efeito não é observado na evaporação nuclear pois a multiplicidade de partículas é fortemente em função da energia de excitação do núcleo residual.

### 6.2.3 Espectro de Energia

A característica da fonte de nêutrons em um sistema ADS, isto é, a distribuição de energia de nêutrons da reação de spallation é um aspecto importante para o desempenho do reator. Na Figura 6.23 (também em unidades arbitrárias) mostramos três espectros de nêutrons emitidos. Os resultados foram obtidos para nêutrons detectados na direção frontal ( $0 < \theta < \pi/6$ ) na parte (a), na parte (b) está mostrando os resultados para a direção transversal ( $5\pi/12 < \theta < 7\pi/12$ ), já na parte (c) mostramos o espectro no intervalo  $0 < \theta < 2\pi$  dos nêutrons emitidos.

A partir do espectro da Figura 6.23, observa-se que os nêutrons são energéticos com pico máximo na energia cinética de 90 MeV. Outro aspecto é que aumentando a massa efetiva, a seção de choque diferencial aumenta sem alterar o perfil da curva. Portanto quanto maior a massa efetiva menor é a energia de ligação do núcleo e conseqüentemente, a emissão de nêutrons é acentuada. O pico é resultado da emissão dos nêutrons da interação primária.

Ressaltamos que o espectro apresentado é um resultado calculado somente da fase de cascata intranuclear. O que podemos concluir que são nêutrons bastante energéticos, isto é, com energia cinética entre 100 a 400 MeV. A distribuição de energia de prótons durante esta fase da reação de spallation é muito similar, como podemos observar dos gráficos da Figura 6.24. Porém a seqüência das curvas não segue a mesma do espectro de nêutrons.

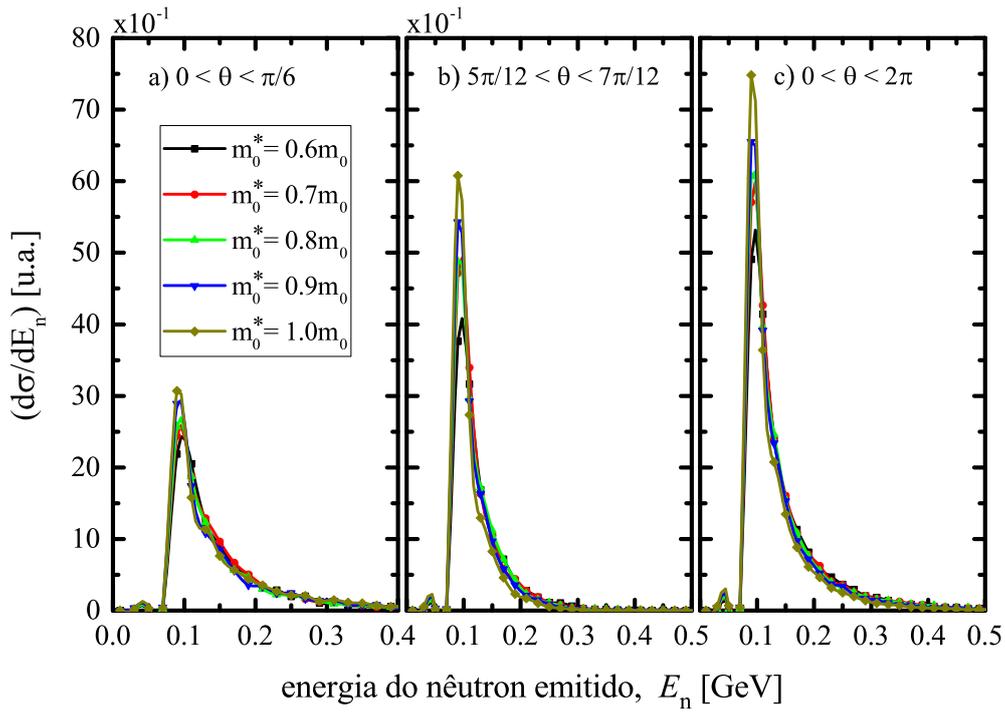


Figura 6.23: Os espectros de n\u00e9utrons na fase de cascata da rea\u00e7\u00e3o para diferentes valores de  $m_0^*$  valores em tr\u00eas \u00e2ngulos de detec\u00e7\u00e3o, como mostra a legenda.

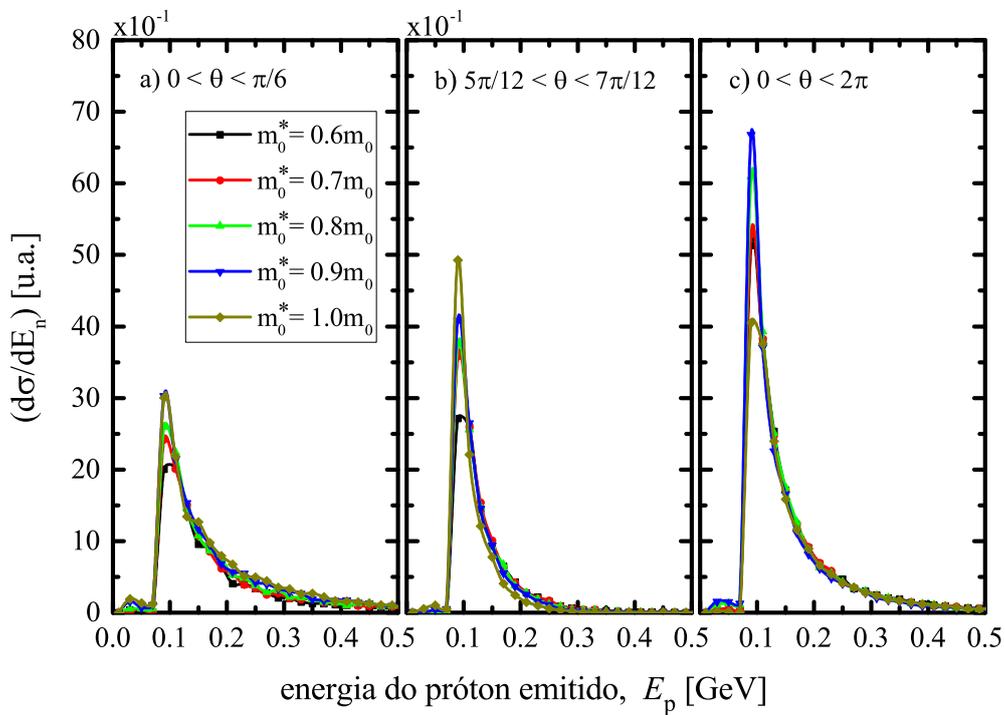


Figura 6.24: Os espectros de pr\u00f3ton na fase de cascata da rea\u00e7\u00e3o  $p(1 \text{ GeV})+^{208}\text{Pb}$  para diferentes valores de  $m_0^*$  valores em tr\u00eas \u00e2ngulos de detec\u00e7\u00e3o, como mostra a legenda.

## 6.2.4 Distribuição Angular

Na fase de evaporação, nêutrons e partículas carregadas são emitidos isotropicamente, considerando o momento angular nulo, a partir do núcleo residual, em contraste com a fase cascata quando um pico frontal é observado na distribuição angular, como mostrado na Figura 6.25. A distribuição angular de nêutrons (em unidades arbitrárias, uma vez que estamos interessados principalmente no aspecto qualitativo da distribuição) é exibida para diferentes faixas de energia nêutrons, isto é,  $0 < E_n < 100$  MeV,  $100 \text{ MeV} < E_n < 200$  MeV, e  $350 \text{ MeV} < E_n < 450$  MeV, considerando os valores diferentes da massa efetiva. A distribuição angular dos nêutrons emitidos pode ser relacionada ao número de nêutrons espalhados até sua emissão do núcleo. Os resultados são de seção de choque diferencial são obtidos para três janelas de energia cinética.

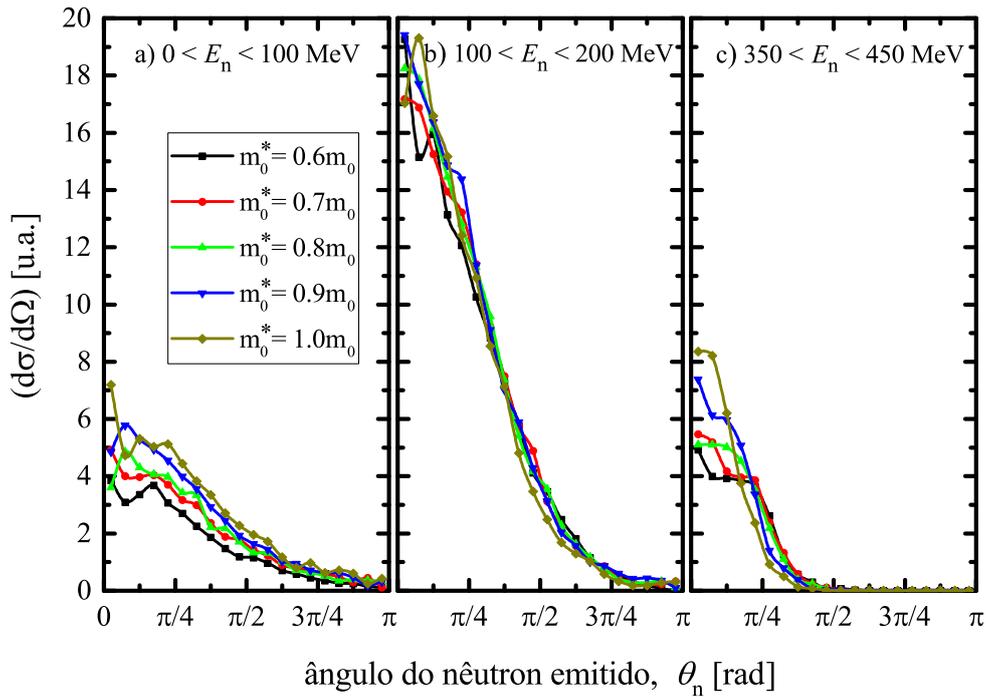


Figura 6.25: Distribuição angular de nêutrons para a fase de cascata. Os resultados são da reação p+Pb com 1 GeV de energia incidente.

A Figura 6.26 mostra o resultado para a distribuição angular de prótons emitidos durante a primeira fase da reação de spallation. O comportamento é semelhante ao das distribuições angulares observadas para nêutrons emitidos. A partir dos gráficos, observamos que prótons com energia entre 100 a 200 MeV são emitidos em maior quantidade na direção frontal.

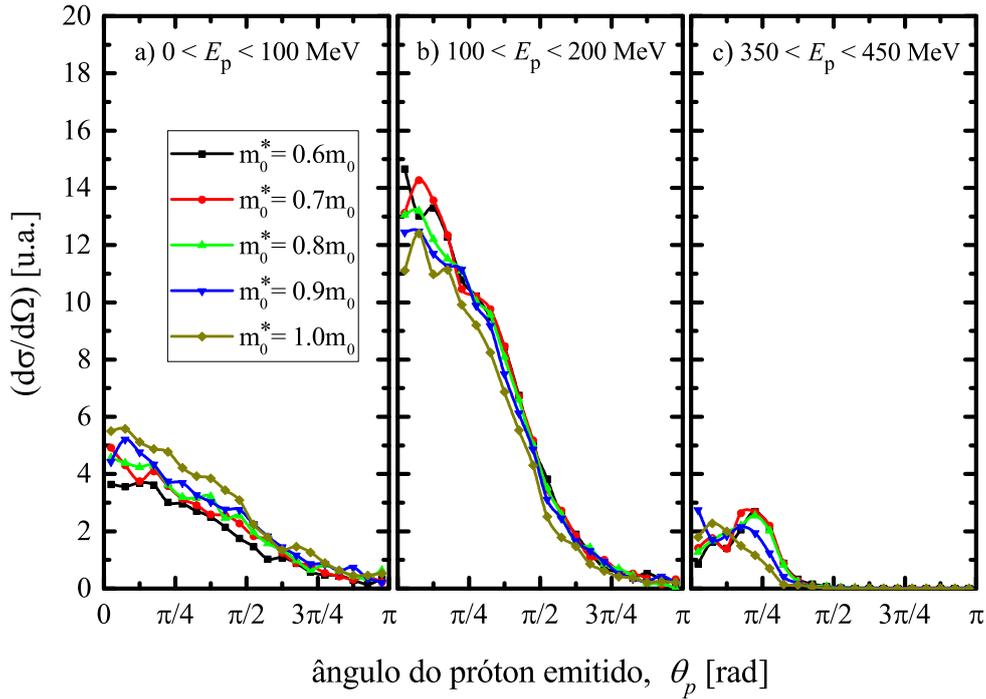


Figura 6.26: Distribuição angular de prótons para a fase de cascata. Os resultados são da reações p+Pb com 1 GeV de energia incidente.

Os resultados de distribuição angular mostram que as seções de choque é máxima para a janela de energia em que o detector está calibrado em 150 MeV. Com a energia incidente de 1 GeV, é produzido um número maior de partículas com energia cinética de 150 MeV. A diferença de intensidade entre as janelas não é devido existência de outros canais, porém os picos na mesma curva mostra um provável canal de ressonâncias e mésons aberto.

Um resultado interessante está mostrado na Figura 6.27. Apresentamos a frequência com que o núcleo residual aparece no final da fase de cascata para a reação p(1 GeV)+<sup>208</sup>Pb, usando um valor alto e baixo para massa efetiva, isto é,  $m_0^* = 0,6m_0$  e  $m_0^* = 0,9m_0$ . Algumas diferenças são observadas na distribuição de núcleos residuais, no entanto, o núcleo residual mais provável é o mesmo para ambos casos.

Em resumo, foram apresentados os principais resultados da implementação da fase de cascata e evaporação da reação de spallation através do código de MCMC. Foram avaliados o efeito sobre o rendimento partículas, espectros e distribuições angulares, e no relaxamento térmico do núcleo composto intermediário formado na reação de spallation. Nós comparamos os nossos resultados para a multiplicidade de nêutrons com dados da literatura para o núcleo de chumbo na faixa de energia tipicamente de reatores movidos

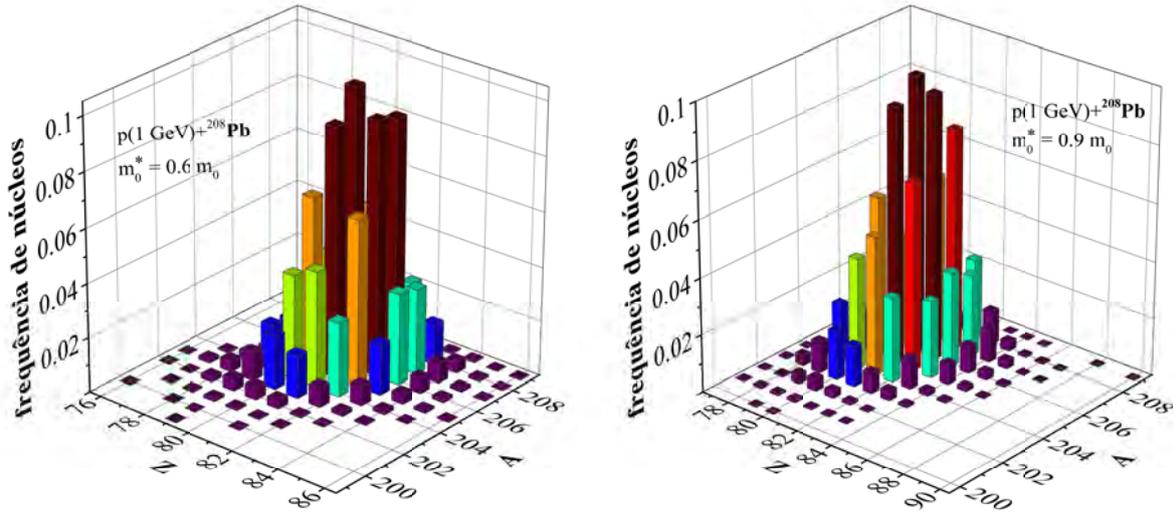


Figura 6.27: A distribuição dos núcleos residuais para a reação p+Pb (1 GeV) utilizando massas efetivas  $m_0^* = 0,6m_0$  e  $m_0^* = 0,9m_0$ .

por acelerador.

### 6.2.5 Efeito da Evaporação de Múltiplas Partículas

Todos os resultados anteriores são calculados usando apenas a evaporação sequencial de emissão simples de partículas e o processo de fissão. Um novo cálculo da cadeia de evaporação foi efetuado através da amostragem de cadeias de Monte Carlo de decaimento até convergência estatística de todas as quantidades de interesse. Até o momento, restringimos a aplicação do novo cálculo de evaporação apenas para regimes de altas energias com núcleos pesados. Os núcleos  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$  são considerados como núcleos representativos para mostrar a diferença entre o processo de evaporação, com e sem a inclusão de canais de emissão de multipartículas.

Uma maneira de ver o significado do efeito da emissão de multipartículas nos resultados, utilizamos três modelos de dados de massas nucleares, em que é um dado importante para determinar as energias de separação e barreira de fissão no nosso cálculo. Nós usamos dados do modelo Droplet de 1977 (DM-77) [64], do modelo Finite-Range Droplet de 1995 (FRDM-95) [65], e do Modelo de Weizsäcker-Skyrme (WSM) [63].

Recordamos que o rendimento de nêutrons ou a multiplicidade de nêutrons é dominante na produção de partículas na fase de evaporação. Assim, o nosso principal resultado nesta subseção é representado pela comparação da multiplicidade de nêutrons com emissão simples sequencial e com a inclusão de emissão multipartículas. A Figura 6.28 mostra

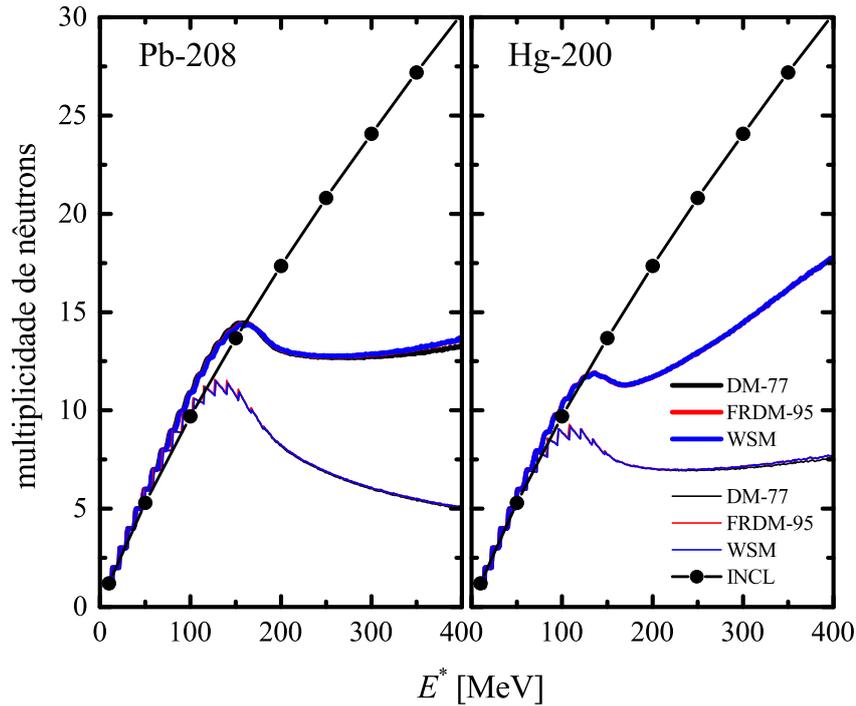


Figura 6.28: A multiplicidade de nêutrons ( $\langle N_n \rangle$ ) em relação a energia de excitação para  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$ . A figura também apresenta o cálculo para diferentes dados para o excesso de massa. O resultado do cálculo utilizando apenas emissão sequencial simples (linhas finas) é comparado com o de um cálculo incluindo emissão simultânea de várias partícula (linhas grossas). Diferentes cores são usadas para mostrar os resultados para diferentes dados nucleares de acordo com a legenda. Nossos resultados são comparados com o cálculo convencional da evaporação de emissão simples de partículas (sem a fissão) do grupo de Liège (curva com pontos preto).

este resultado e também a sua sensibilidade em relação à mudança de dados de massas nucleares. O rendimento de nêutrons é mostrado como uma função da energia de excitação para  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$ . Percebemos que torna-se evidente o efeito da emissão múltipla para o regime de altas energias de excitação. Observamos que ao mudar os dados de massa, não se altera significativamente o rendimento de nêutrons. Os degraus e comportamentos ziguezague de curvas para o regime de baixa energia é uma consequência do dominância do canal simples de nêutrons onde temos os limiar de emissão. No regime de altas energias os nêutrons se originam de outros canais. O efeito surge para multiplicidade total de nêutrons porque apenas quando o aumento da energia de excitação atinge valores múltiplos de  $S_n$ , é possível ter um de nêutron adicional evaporado.

Quando restringimos ao regime de baixa energia, a emissão simultânea de multipartículas no nosso cálculo se reduz ao resultado do processo de evaporação convencional e se

aproxima do resultado do grupo Liège, a partir do código INCL [10].

A multiplicidade de partículas carregadas é também calculada utilizando a emissão simples e de emissão de multipartículas. Os resultados são mostrados na Figura 6.29. Novamente para o  $^{208}\text{Pb}$  na esquerda e para o  $^{200}\text{Hg}$  no lado direito da figura. Note-se que os resultados de cálculo incluindo as emissões de multipartículas provoca um aumento no rendimento em altas energias, e não se muda com a fórmula de massa.

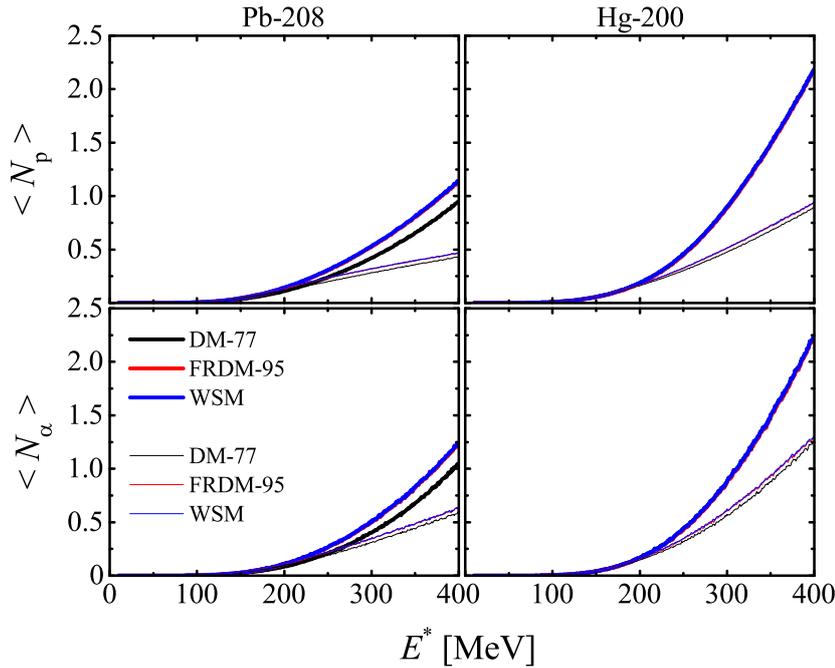


Figura 6.29: Comparação da multiplicidade de prótons e partículas alfa em função da energia de excitação para as três fórmulas de massa do excesso de massa para  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$ . No painel é apresentado o cálculo com emissão múltiplo (linhas espessas) e de emissão simples (linhas finas).

Para os casos do  $^{208}\text{Pb}$  o grau de competição entre os diferentes canais pode ser observado na Figura 6.30. Mostramos os razões de probabilidades  $\mathcal{P}^{(\lambda)}$ , definida na equação 4.31, dos canais dominantes como uma função da energia de excitação. Os resultados para a emissão de multipartículas estão à esquerda e para emissão simples à direita. Na verdade dentre estes canais, a emissão dupla e tripla de nêutrons são os canais dominantes para o cálculo da multiplicidade de nêutrons que contribuem para os resultados mostrado na Figura 6.28.

Com certeza, seria interessante comparar nossos resultados com alguns dados experimentais, no entanto, os dados para fase de evaporação do mecanismo de reação não são

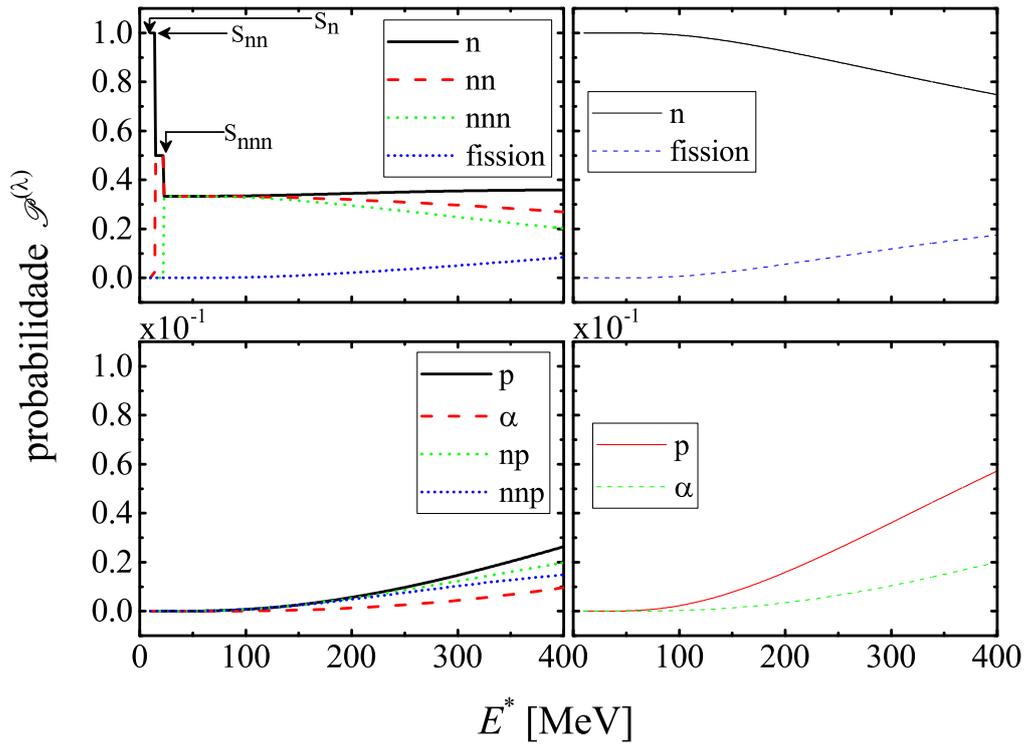


Figura 6.30: Comparação entre as razões de largura de decaimento dos principais canais para o  $^{208}\text{Pb}$  no estado excitado. Este resultado foi obtido incluindo a emissão simultânea de multipartículas na esquerda e na direita a emissão sequencial simples. Onde, a energia de separação de um nêutron é ( $S_n$ ), de dois nêutrons é ( $S_{nn}$ ) e a de três nêutrons é ( $S_{nnn}$ ).

limpos o suficiente para esta comparação. De fato, os resultados experimentais são subdivididos em dois estágios de energias cinéticas das partículas emitidas, um em energias baixas para o processo de evaporação e outro para o processo de cascata. O uso de alvos grossos nestas experiências, como no acelerador SATURNE em Saclay [104] ou em Jülich no acelerador COSY [109], impõe algumas dificuldades. Como um resultado, os dados experimentais oferecem somente limites superior e inferior para o nosso cálculo dos rendimentos de nêutrons. A Tabela 6.5 compara nossos resultados com dados experimentais para alvos de espessura grossa em reação p+Pb a 0, 8, 1, 2 e 1, 6 GeV.

Enquanto que na Tabela 6.6 comparamos as previsões teóricas dos modelos para a multiplicidade de nêutrons [10], para  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$ . Além disso mostramos nossos resultados dos cálculos para emissão de multi-partículas e emissão simples. Os valores de energias estão no intervalos de interesse para reações de spallation como fonte para reatores ADS.

Na Figura 6.31 observamos a frequência com que os núcleos participam na cadeia

Tabela 6.5: Multiplicidade média de nêutrons emitidos na fase de evaporação da reação experimental p+Pb. Comparação do nossos resultados: multiplicidade de nêutron com a emissão simples sequencial,  $\langle N_n^{(s)} \rangle$ , e com a emissão simultânea de multipartículas,  $\langle N_n^{(m)} \rangle$ . Estes resultados são obtidos incluindo o canal do processo de fissão.

$E_{feixe}$	$E^*$	$\langle N_n^{(m)} \rangle$	$\langle N_n^{(s)} \rangle$	Experimental
800	133.4	13.50	11.23	$6.5 \pm 0.7$
1200	193.5	13.19	8.42	$8.3 \pm 0.8$
1600	243.5	12.72	6.95	$10.1 \pm 1.0$

$E_{feixe}$  (em MeV) é a energia do feixe da reação experimental p+Pb.  
 $E^*$  (em MeV) é a energia final do modelo INCL.

Tabela 6.6: Multiplicidade média de nêutrons emitidos na fase de evaporação  $N_n^{evap}$  da reação experimental p+Pb e p+Hg, comparadas com nossos resultados. A multiplicidade de nêutrons com evaporação simples sequencial é indicada por  $N_n^{(s)}$ , e para o caso de emissão simultânea de multipartículas por  $N_n^{(m)}$ .

$E_{feixe}$	Pb-208				Hg-200			
	Cugnon $E^*$	$N_n^{evap}$	presente trabalho $N_n^{(m)}$	$N_n^{(s)}$	Cugnon $E^*$	$N_n^{evap}$	presente trabalho $N_n^{(m)}$	$N_n^{(s)}$
256	24.93	2.40	3.00	3.00	25.00	2.34	3.00	3.00
597	92.85	7.46	10.17	9.82	91.81	7.18	9.80	8.30
800	133.41	9.08	13.50	11.23	131.43	8.73	11.93	8.39
1200	193.55	11.92	13.19	8.42	189.89	11.41	11.59	7.06
1600	243.51	13.84	12.72	6.95	238.32	13.23	12.70	6.95
2000	283.21	15.74	12.69	6.25	276.72	15.02	13.80	6.98

$E^*$  (em MeV) é a energia final da cascata intranuclear de Liège.

evaporativa considerando a emissão múltipla e emissão simples. Podemos observar que com uma nova proposta para a fase de evaporação com canais de emissão multipartículas, a cadeia de decaimento explora estatisticamente uma amostragem de núcleos muito maior que no caso de cálculo convencional.

O processo de fissão nuclear em reatores nucleares é fundamental para a produção de energia. Na Figura 6.32, observamos a cadeia de núcleos em que o processo de fissão ocorre, tanto na evaporação simples quanto na consideração do processo de evaporação com múltiplos canais de decaimento. Quando consideramos a evaporação com múltiplas emissões simultaneamente, a cadeia de fissão é estendida para outros isótopos quando comparada a evaporação convencional.

Em resumo, foram apresentados os resultados para evaporação de um núcleo residual quente considerando a inclusão de vários canais de emissão simultânea de múltiplas partículas. Nós exploramos os resultados de rendimento de partículas para o caso de um núcleo

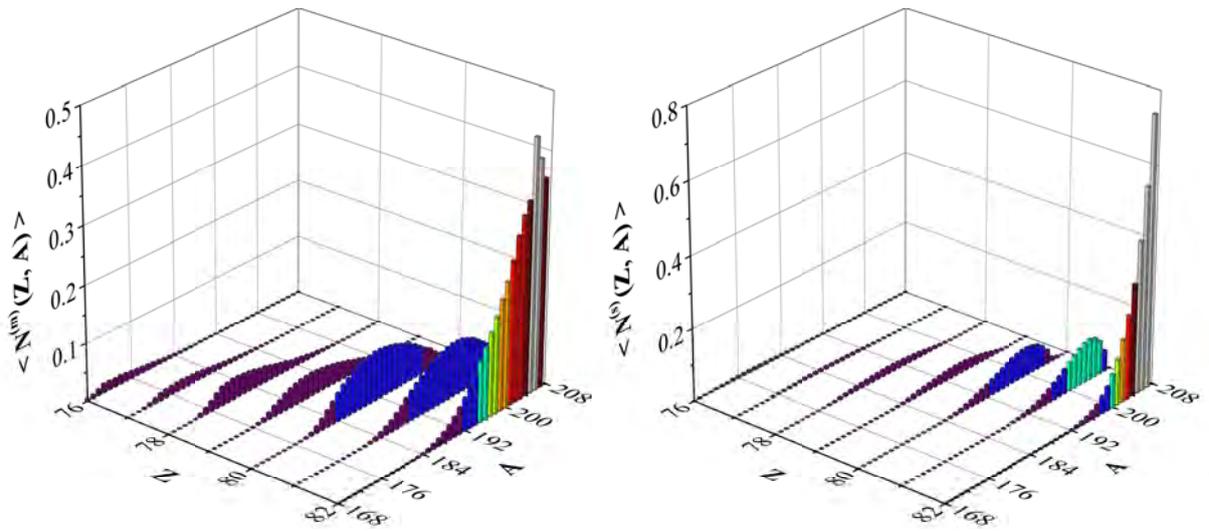


Figura 6.31: Frequência de núcleos participantes da cadeia de decaimento. A parte esquerda é a emissão de multipartículas ( $N^{(m)}(Z, A)$ ) e a direita os resultados para emissão simples ( $N^{(s)}(Z, A)$ ).

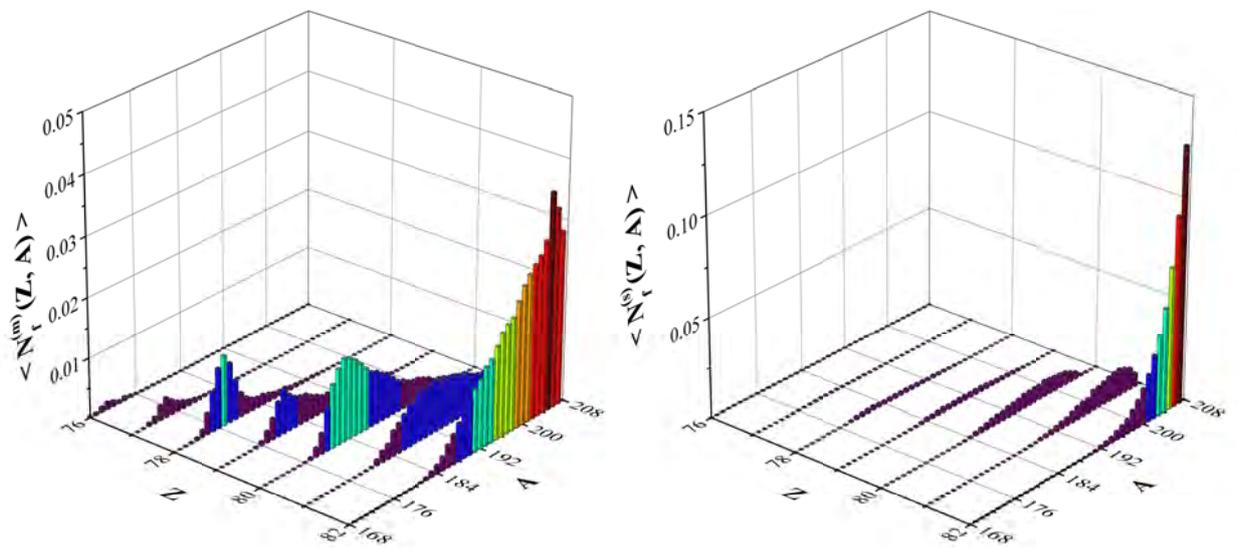


Figura 6.32: Frequência de núcleos em que participa na cadeia de fissão nuclear. A parte esquerda é a emissão de multipartículas ( $N^{(m)}(Z, A)$ ) e a direita os resultados considerando apenas emissão simples ( $N^{(s)}(Z, A)$ ).

pesado composto com energia de excitação no intervalo de energia 10 MeV a 400 MeV, para todo o núcleo residual. O rendimento médio de partícula é determinado e comparado com o caso do cálculo convencional. A importância relativa dos canais é obtida pelo cálculo das larguras de decaimento do canal como uma função da energia de excitação.

Neste capítulo, apresentamos diversos resultados para três observáveis mais importantes: rendimento ou multiplicidade de próton e de nêutrons, espectros e distribuições angulares. Nós consideramos esses observáveis como ingredientes-chave para a cálculo de produção de partículas secundárias em reações de spallation induzidas por feixes de prótons em uma ampla faixa de energia e diferentes núcleos alvo, conforme as diversas possíveis aplicações, seja em reatores ADS como para o cálculo de dose administrada na região de interesse no tratamento de tumores via protonterapia.

# Capítulo 7

## Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, apresentamos um estudo das reações nucleares de spallation induzidas por feixe de prótons em diferentes faixas de energia do próton incidente. A fase da cascata intranuclear e a evaporação nuclear da reação de spallation são implementadas através do código de Monte Carlo MultiColisional. Introduzimos uma massa efetiva para o nucleon em processos colisionais intranucleares. A energia de excitação do núcleo residual de cascata é obtida para diferentes valores iniciais da massa efetiva do nucleon. Foram avaliados os efeitos sobre o rendimento de partículas, espectros e distribuições angulares, e no tempo de relaxação térmico do núcleo composto na reação spallation. Comparamos os nossos resultados para a multiplicidade de nêutrons com escassos dados da literatura no caso do núcleo de  $^{208}\text{Pb}$ , na faixa de energia característica de funcionamento dos reatores acionados por aceleradores.

Apresentamos uma nova abordagem da fase de evaporação de um núcleo residual quente. Incluímos novos canais de emissão de múltiplas partículas simultaneamente. Exploramos os resultados para rendimentos de partículas no caso de um núcleo composto pesado com energia de excitação entre 10 MeV a 400 MeV. O rendimento médio de partícula é determinado e comparado com resultados do modelo convencional, além de modelos existentes na literatura e com dados experimentais de reações nucleares dos núcleos de  $^{208}\text{Pb}$  e  $^{200}\text{Hg}$ . A importância relativa dos canais é obtida pelo cálculo da razão das larguras dos canais em função da energia de excitação. Estes resultados foram obtidos a partir das simulações da fase de evaporação, independente da fase de cascata intranuclear.

Nos cálculos estatísticos de evaporação múltipla para os núcleos Pb e Hg excitados, observamos que os canais de múltiplas emissões são relevantes para energias de excitação

acima de 150 MeV. O resultado para a geração de nêutrons utilizando o cálculo das emissões de partículas múltiplas altera significativamente do resultado de um cálculo convencional. O rendimento de partículas carregadas e a extensão da cadeia de decaimento são afetados pela inclusão dos novos canais. A implementação do acoplamento da fase cascata à fase de evaporação/fissão com múltipla emissão está em curso, de forma a se obter um código do processo da reação de spallation com uma nova abordagem da evaporação.

Esperamos que a presente discussão da massa efetiva do nucleon permita determinar a produção de partículas em reações próton-núcleo, particularmente à produção de nêutrons, seus espectros e suas distribuições angulares que são o ponto de partida para obtenção do fluxo de nêutrons nos reatores nucleares com sistema ADS.

As reações de spallation foram analisadas em outro contexto de aplicação. Nos voltamos para a área de protonterapia de grande interesse internacional na atualidade. Esta técnica surgiu como uma das modalidades mais importante para o tratamento do câncer usando feixes de partículas carregadas. No presente trabalho, discutimos a interação de feixes de prótons com núcleos atômicos, a fim de investigar os aspectos de partículas secundárias produzidas quando o feixe de próton interage com o tecido, constituído principalmente de núcleos mais leves, tais como carbono, nitrogênio e oxigênio. Além desses, estudamos as reações de spallation induzidas por próton com alvo como fósforo e cálcio. O objetivo é oferecer subsídio no planejamento da radioterapia, realizamos simulações para a reação próton-titânio em energias incidentes entre 50 a 250 MeV. Uma vez que este elemento é frequentemente utilizado em próteses clínicas.

Os resultados mostraram que um número significativo de partículas secundárias é produzido em diferentes direções, após as interações do feixe de prótons com o núcleo. O efeito da alteração na massa efetivas dos bárions ligados foi analisado a partir do rendimento, espectros e distribuição angular destas partículas secundárias. Estes são elementos essenciais a serem considerados na determinação da dose secundária em um planejamento de protonterapia, uma vez que se estimam que 20% é devido as contribuições das interações nucleares dos prótons com o núcleo do material. Espera-se que os cálculos aqui desenvolvidos venham auxiliar na determinação da dose total administrada aos tecidos tumorais e saudáveis.

Como a principal conclusão do presente trabalho, temos que a radiação secundária

espalhada a partir da interação do feixe em processos nucleares são sensíveis a massa efetiva, que carregam os efeitos do campo médio nuclear na reação de próton-núcleo. Assim, um plano de tratamento mais preciso deve levar em conta este efeito nuclear.

Uma perspectiva mais imediatamente a ser concretizada é a implementação da evaporação com emissão simultânea de multi-partículas para reações com núcleo leves, visando a aplicação de protonterapia quando alcançamos energias superiores na faixa de tratamento. A extensão para aplicações desta evaporação múltipla para núcleos alvo leves requer cuidados especiais - estamos trabalhando no limite de aplicabilidade dos modelos estatísticos.

Consideramos os resultados apresentados do trabalho como um ensaio inicial para um cálculo de transporte completo desta radiação secundária no tecido. O cálculo de transporte elucidará totalmente o que diz respeito à dose total entregue ao paciente, comparando os valores calculados com esta abordagem e a dose planejada no tratamento. Futuramente, utilizaremos nossos resultados como input para um código de transporte (MCNP, FLUKA ou GEANT) voltando-se para o cálculo de doses, no tratamento protonterápico. No caso de reatores ADS, utiliza-los como condição inicial para neutrons.

Uma outra perspectiva é estudar as reações de spallation induzidas por feixes de píons e antiprótons em baixas energias com o objetivo nas aplicações em antiprotonterapia e em pionterapia, que são outras técnicas usadas para o de tratamento de tumores.

Portanto, podemos concluir que a presente tese fortalece e consolida o método para descrever reações nucleares de spallation usando a abordagem de cascata intranuclear e o método estatístico para o processo de decaimento do núcleo composto através da evaporação e fissão nuclear.

# Apêndice A

## Massa Efetiva numa Teoria de Campo Médio

A introdução da massa efetiva aos nucleons ligados no meio nuclear pode ser abordada do ponto de vista de uma teoria de campo médio, conhecida como a Hadrodinâmica Quântica [110]. Este modelo descreve a interação forte em termos de graus de liberdade hadrônicos fundamentais, o campo bariônico  $\psi$  e os campos mesônicos  $\phi$  e  $V_\mu$ . O campo escalar  $\phi$  descreve a parte atrativa da interação entre os nucleons, o campo vetorial  $V_\mu$  descreve a parte repulsiva da interação entre os nucleons. A troca destes mésons produz um potencial efetivo N-N da forma:

$$\mathcal{V} = \frac{g_\nu^2}{4\pi} \frac{e^{-m_\nu r}}{r} - \frac{g_\sigma^2}{4\pi} \frac{e^{-m_\sigma r}}{r}. \quad (\text{A.1})$$

Para uma escolha apropriada das constantes de acoplamento  $g_\nu$  e  $g_\sigma$  e das massas mesônicas escalar e vetorial  $m_\nu$  e  $m_\sigma$ , respectivamente. O potencial é atrativo a grandes distâncias, devido a troca de méson escalar, e é repulsivo a curtas distâncias devido a troca de mésons vetoriais.

A densidade lagrangeana do modelo é dada por:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} [\gamma_\mu (i\partial^\mu - g_\nu V^\mu) - (m_0 - g_\sigma \phi)] \psi + \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m_\sigma^2 \phi^2) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\nu^2 V_\mu V^\mu, \quad (\text{A.2})$$

onde, neste modelo de Walecka, o méson escalar neutro está acoplado a uma densidade escalar de bárions de acordo com  $g_s \bar{\psi} \psi \phi$ . O méson vetorial neutro está acoplado a uma corrente bariônica  $g_\nu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi V^\mu$ . O termo  $F_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu$  é o tensor antisimétrico, e  $\gamma_\mu$

são as matrizes de Dirac.

As equações de movimento para os campos são

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu - m_\sigma^2\right) \phi = g_\sigma \bar{\psi} \psi, \quad (\text{A.3})$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + m_\nu^2 V^\nu = g_\nu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \text{ e} \quad (\text{A.4})$$

$$[\gamma_\mu (i\partial^\mu - g_\nu V^\mu) - (m_0 - g_\sigma \phi)] \psi = 0. \quad (\text{A.5})$$

Estas são obtidas através das equações de Euler-Lagrange

$$\partial_\mu \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu q_i)} \right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0, \quad (\text{A.6})$$

onde  $q_i = \psi$ , ( $= \phi$ ) ou ( $= V_\mu$ ), representa as coordenadas generalizadas do sistema.

A Eq. A.3 é a Equação de Klein-Gordan com uma fonte escalar. A Eq. A.4 é a Equação de Proca com fonte de corrente bariônica conservada,  $J_B^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ , onde  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$  é o conjugado de Dirac associado ao operador  $\psi$ . A corrente bariônica é conservada desde que obedeça à equação de continuidade:

$$\partial_\mu J_B^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \left[ \vec{\partial}_\mu + \bar{\partial}_\mu \right] \psi = 0.$$

A última das equações de movimento é a Equação de Dirac, Eq. A.5, que carrega a interação entre os campos escalares e vetoriais.

A quantização das equações acima é obtida a partir de uma teoria de aproximação não perturbativa denominada de Teoria de Campo Médio, proposta por Walecka [62], conhecida por Mean-Filed Teory (MFT). As equações de movimento se tornam equações não lineares, quando os termos de fonte tomam valores cada vez maiores. Quando a densidade aumenta, os operados dos campos mênônicos podem ser substituídos pelos seus respectivos valores médios do estado fundamental do sistema, isto é:

$$\phi \longrightarrow \langle \phi \rangle = \phi_0 \quad (\text{A.7})$$

$$V_\mu \longrightarrow \langle V_\mu \rangle = \delta_{\mu 0} V_0. \quad (\text{A.8})$$

Com estas substituições, os operadores dos campos mesônicos passam a ser tratados como campos clássicos. Esta aproximação remove as flutuações quânticas dos mésons, impondo

aos nucleons movimentos como de partículas independentes, interagindo através de um campo médio comum a todos. Sendo assim, o problema de muitos corpos é reduzido a um problema de um corpo, submetido a um único potencial efetivo.

Para um sistema uniforme e estacionário, as equações de movimento podem ser resolvidas de forma exata quando os campos mesônicos  $\phi_0$  e  $V_0$  são constantes independentes de espaço-tempo. Estes campos são dados por:

$$\phi_0 = \frac{g_\sigma}{m_\sigma^2} \langle \bar{\psi} \psi \rangle \equiv \frac{g_\sigma}{m_\sigma^2} \zeta_\sigma \quad (\text{A.9})$$

$$V_0 = \frac{g_\nu}{m_\nu^2} \langle \psi^\dagger \psi \rangle \equiv \frac{g_\nu}{m_\nu^2} \zeta_B. \quad (\text{A.10})$$

Os campos mesônicos clássicos estão diretamente relacionados às fontes bariônicas. As soluções para os campos mesônicos são obtidas quando consideramos que os mésons  $\phi_0$  e  $V_0$  sejam massivos, isto é,  $m_\sigma^2 \neq 0$  e  $m_\nu^2 \neq 0$ . A fonte para  $V_0$  é a densidade bariônica,  $\rho_B = \langle \psi^\dagger \psi \rangle$ . Porém, a fonte para  $\phi_0$  envolve o valor médio da densidade escalar  $\rho_B = \langle \bar{\psi} \psi \rangle$ .

Substituindo os campos mesônicos clássicos  $\phi_0$  e  $V_0$  na Eq. A.5, obtemos a equação linear:

$$\left[ i\gamma_\mu \partial_\mu - g_\nu \gamma^0 V_0 - (m_0 - g_\sigma \phi_0) \right] \psi = 0, \quad (\text{A.11})$$

onde define-se a massa efetiva dos nucleons no meio por:

$$m^* = m_0 - g_\sigma \phi_0. \quad (\text{A.12})$$

De acordo com a Eq. A.12, a massa efetiva do nucleon é reduzida pela ação do campo médio  $\phi_0$ .

A solução para o campo quântico  $\psi$ , Eq. A.11, tem a forma de onda plana, ou seja:

$$\psi(x, t) = \psi(\vec{k}, \lambda) \exp \left[ i \left( \vec{k} \cdot \vec{r} - \epsilon(k)t \right) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Onde  $\psi(\vec{k}, \lambda)$  é o spinor de Dirac com momento  $\vec{k}$  e  $\lambda$  define a projeção do spinor ( $\lambda = \pm \frac{1}{2}$ ). Os autovalores de energia  $\epsilon(k)$  são dados por:

$$\epsilon(k) = g_\nu V_0 \pm E^*(k), \quad (\text{A.14})$$

onde  $E^* = (k^2 + m^{*2})^{1/2}$ . Após algumas manipulações matemáticas, obtemos uma expressão para a massa efetiva autoconsistente:

$$m^* = m_0 \frac{g_\nu^2}{m_\nu^2} \frac{\gamma m^*}{4\pi^2} \left[ k_F \epsilon_F^* - m^{*2} \ln \left( \frac{k_F + \epsilon_F^*}{m^*} \right) \right], \quad (\text{A.15})$$

onde  $\epsilon_F^*$  é a energia de Fermi. A solução da condição autoconsistente para a  $m^*$  leva a uma massa efetiva que decresce com a densidade, como mostra a Figura A.1. Os valores de massa efetiva próxima a densidade de equilíbrio da matéria nuclear foram tomados como valores típicos para variações da massa efetiva dos nucleons, na configuração inicial dos cálculos. Os valores utilizados para a massa efetiva inicial dos nucleons foram  $0,6m_0$ ,  $0,7m_0$ ,  $0,8m_0$ ,  $0,9m_0$  e  $m_0$ .

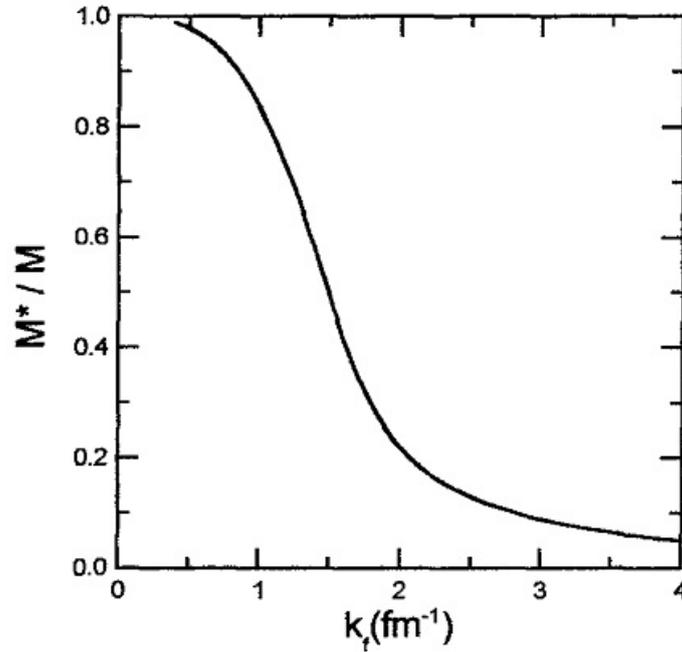


Figura A.1: Massa efetiva como função da densidade para matéria nuclear.

# Apêndice B

## Seções de Choque para Processos Elementares

As seções de choque associadas aos canais elementares, das dezesseis partículas envolvidas neste cálculo, serão apresentadas neste apêndice. Os processos fundamentais considerados estão representados novamente na tabela a seguir.

Tabela B.1: Todos processos de colisões considerados na descrição do código MCMC. A letra  $B$  representa um bárion,  $N$  especifica um nucleon,  $\Delta$  representa um dos estados da ressonância delta,  $N^*$  significa os estados da ressonância nucleônica de 1440 MeV,  $Y$  representa um dos híperons e por fim,  $K$  especifica o méson  $k^+$ .

Interação	Descrição
$B_1 B_2 \rightarrow B_1 B_2$	Colisão elástica bárion-bárion
$NN \rightarrow N\Delta$	Formação da ressonância delta
$N\Delta \rightarrow NN$	Recombinação da ressonância delta
$NN \rightarrow NN^*$	Formação da ressonância $N^*$
$NN^* \rightarrow NN$	Recombinação da ressonância $N^*$
$\Delta \rightarrow N\pi$	Produção de píons a partir do decaimento da ressonância delta
$N^* \rightarrow N\pi$	Produção de píons a partir do decaimento da ressonância $N^*$
$N\pi \rightarrow \Delta$	
$N\pi \rightarrow N^*$	Absorção de píons
$B_1 B_2 \rightarrow BYK$	Produção de híperons e káons em colisão bárion-bárion

No processo elástico bárion-bárion, a seção de choque é dada a partir do espalhamento elástico experimental próton-próton. A seção de choque correspondente ao processo de formação da delta é obtida de acordo com ajustes de dados experimentais do processo inelástico próton-próton. Sendo assim, a seção de choque é escrita em termos do isospin total inicial,  $I$ , e do isospin total dos dois nucleons,  $I'$ , acoplados ao pión do estado final,

conforme a parametrização de VerWest [69]. A seção de choque para o processo  $p - p$ ,  $\sigma_{II'}$  pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} pp &\rightarrow pp\pi^0 \quad (\sigma_{11}) \\ pp &\rightarrow pn\pi^+ \quad (\sigma_{10} + \sigma_{11}), \end{aligned}$$

considerando sempre que a ressonância é um estado intermediário do sistema de dois corpos nucleon-píon. Com isso, a seção de choque total para a formação de deltas via processos  $p - p$  é:

$$\sigma_{pp \rightarrow N\Delta} = \sigma_{10} + 2\sigma_{11}.$$

No processo de formação da ressonância  $N^*$ , o único processo viável do ponto de vista de conservação do isospin total é o processo  $n - p$ , a seção de choque é desintegrada nos seguintes canais:

$$\begin{aligned} np &\rightarrow nn\pi^+ \quad (0.5\sigma_{01}); \\ np &\rightarrow np\pi^0 \quad (0.5\sigma_{01}); \\ np &\rightarrow pp\pi^- \quad (0.5\sigma_{01}), \end{aligned}$$

também considerando a ressonância  $N^*$  como um estado intermediário do sistema  $N - \pi$ . Sendo assim, a seção de choque total para a formação de ressonância  $N^*$  através do processo nêutron-próton é:

$$\sigma_{pp \rightarrow NN^*} = \frac{3}{2}\sigma_{01}.$$

As seções de choque intermediárias ( $\sigma_{01}$ ,  $\sigma_{10}$  e  $\sigma_{11}$ ) são parametrizadas por VerWest como:

$$\sigma_{II'} = \frac{\pi\alpha(\hbar c)^2}{2p^2} \left[ \frac{p_r}{p_0} \right]^\beta \times \frac{m_0^2 \Gamma^2 (q/q_0)^3}{(s^* - m_0^2)^2 + m_0^2 \Gamma^2}, \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\begin{aligned}
s^* &= \langle M^2 \rangle, \\
s &= 4m_N^2 + 2m_N T_L, \\
p^2 &= \frac{s}{4} - m_N^2, \\
p_r^2(s) &= \frac{[s - (m_N - \langle M \rangle)^2][s - (m_N + \langle M \rangle)^2]}{4s}, \\
q^2(s^8) &= \frac{[s^* - (m_N - m_\pi)^2][s^* - (m_N + m_\pi)^2]}{4s^*}, \\
q_0 &= q(m_0^2),
\end{aligned}$$

em que

$$\langle M(s) \rangle = M_0 + (\arctan Z_+ - \arctan Z_-)^{-1} \times \frac{\Gamma_0}{4} \ln \left[ \frac{1 + Z_+^2}{1 + Z_-^2} \right],$$

sendo

$$\begin{aligned}
Z_+ &= (\sqrt{s} - m_N - M_0) \frac{2}{\Gamma_0}, \\
Z_- &= (m_N + m_\pi - M_0) \frac{2}{\Gamma_0}.
\end{aligned}$$

Aqui,  $T_L$  é a energia cinética da partícula incidente no sistema de laboratório. Nos cálculos das seções de choque, consideramos  $m_N = 938.9$  MeV e  $m_\pi = 138.0$  MeV, bem como:

Ressonância	$M_0$ (MeV)	$\Gamma_0$ (MeV)
$\Delta$	1232	115
*N	1440	200

Os parâmetros restantes dependem das seções de choque de isospin e energia, ou seja, os valores estão disponíveis na tabela abaixo:

	$\sigma_{11}$	$\sigma_{10}$	$\sigma_{01}$
$\alpha$	3.772	15.28	146.3
$\beta$	1.262	0	0
$m_0$ (MeV)	1188	1245	1472
$\Gamma$ (MeV)	99.02	137.4	26.49

A seção de choque do processo nêutron-nêutron,  $\sigma_{nn}$ , é considerada igual à  $\sigma_{pp}$ , devido a simetria de isospin. Para a seção inelástica nêutron-próton,  $\sigma_{np}$ , consideramos apenas os

estados finais de tripleto de isospin,

$$\sigma_{np} = \frac{1}{2}\sigma_{pp}.$$

Os processos correspondentes à recombinação de ressonâncias têm suas seções de choque obtidas considerando o balanço detalhado na equivalência temporal de Feynman, isto é,

$$\sigma_{cd \rightarrow ab} = \chi \sigma_{ab \rightarrow cd}.$$

O fator cinemático  $\chi$  é devido a mudança de quadri-momento entre processos direto e inverso [48]. Portanto, as seções de choque dos processos de recombinação de ressonância são obtidas das seções de choque dos processo  $NN \rightarrow N\Delta$  e  $NN \rightarrow NN^*$ . As massas das ressonâncias são sorteadas a partir da distribuição de Breit-Wigner,

$$p(m) = \frac{\eta \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(m - m_0)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}, \quad (\text{B.2})$$

com valor mais provável  $m_0 = 1232$  MeV e semi-largura  $\Gamma = 115$  MeV para as ressonâncias  $\Delta$ , e  $m_0 = 1440$  MeV e semi-largura  $\Gamma = 200$  MeV para as ressonâncias  $N^*$ , e  $\eta$  é o fator de normalização no intervalo  $[\bar{m}, M]$ , em que  $\bar{m}$  e  $M$  são, respectivamente, os limites inferior e superior associados a massa das ressonâncias. Portanto, a meia vida destas ressonâncias pode ser determinada a partir da semi-largura da distribuição, levando em conta o princípio de incerteza de Heisenberg, isto é, considerando que, no instante de decaimento da ressonância, tenhamos uma incerteza mínima nas variáveis conjugadas energias e tempo. Então, podemos escrever

$$\Delta E \Delta t = \hbar$$

ou simplesmente

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}.$$

O valor inferior da massa  $\bar{m}$  e a meia vida  $\tau$  das ressonâncias  $\Delta$  e  $N^*(1440)$  são apresentados na próxima tabela (considerando  $\hbar c = 197$  MeV fm).

Até o momento vimos a maioria dos processos listados na Tabela B.1 deste apêndice, restando apenas a produção de káons e híperons. Os káons são produzidos em associação

Ressonância	$\bar{m}$ (MeV)	$\tau$ (fm/c)
$\Delta$	1077	1.713
$N^*$	1077	0.985

com os híperons ( $\Lambda$  e  $\Sigma$ ), uma vez que a conservação de estranheza deve ser respeitada, pois para cada quark  $s$  devemos produzir sempre um antiquark  $\bar{s}$ . A escassez de dados experimentais para a formação de káons na faixa de energias intermediárias e, portanto, os ajustes destes poucos resultados experimentais, da seção de choque, devem ser orientados por modelos capazes de fornecer informações a respeito da dinâmica intranuclear do sistema de muitos corpos, formado numa reação.

Modelos baseados na troca de um bóson têm estabelecido diversas formas para a seção de choque de produção de káons na faixa de energias intermediárias. Na parametrização de Schürmann e Zwërmann [73], a seção de choque de interação nucleon-nucleon com formação de káons é dada por:

$$\sigma_{NN \rightarrow BYK} = 0,8 [p_{max}(GeV)]^4 \quad \text{mb},$$

onde  $p_{max}^2 = \frac{1}{4s} [s - (m_N + m_\Lambda + m_k)^2] [s - (m_N + m_\Lambda - m_k)^2]$  é o máximo momento possível para káon e  $m_N$ ,  $m_\Lambda$  e  $m_k$  são as massas do nucleon, da lambda e do káon, respectivamente. Seguindo a formulação de Batko e co-autores [111], a produção de káons pode ser atingida por outros canais incluindo as ressonâncias  $\Delta$ . A seção de choque de produção de káons pode ser escrita para qualquer tipo de processo bárion-bárion em termos da seção de choque nucleon-nucleon como

$$\sigma_{BB \rightarrow BYK} = \begin{cases} \sigma_{NN \rightarrow BYK}, & \text{para processos } NN \\ \frac{3}{4}\sigma_{NN \rightarrow BYK}, & \text{para processos } NR \\ \frac{1}{2}\sigma_{NN \rightarrow BYK}, & \text{para processos } RR \end{cases}$$

onde  $N$  representa um nucleon e  $R$  representa uma ressonância.

As seções de choque para os processo de absorção de píons são obtidas através de parametrizações por uma distribuição de probabilidade de formação de ressonâncias ( $\Delta$  e  $N^*$ ) através da distribuição de Breit-Wigner. Assim, a seção de choque de absorção de píons é:

$$\sigma_{\pi N \rightarrow \Delta} = \sigma^{max} \frac{(\Gamma/2)^2}{(\sqrt{s} - M_{N^*}^0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (\text{B.3})$$

onde  $\sigma^{max}$  é descrito em função dos processos individuais como

$$\begin{aligned}\sigma_{\pi^-n \rightarrow \Delta^-}^{max} &= 200 \text{ mb}, \\ \sigma_{\pi^0n \rightarrow \Delta^0}^{max} &= 135 \text{ mb}, \\ \sigma_{\pi^+n \rightarrow \Delta^+}^{max} &= 70 \text{ mb}, \\ \sigma_{\pi^-p \rightarrow \Delta^0}^{max} &= 70 \text{ mb}, \\ \sigma_{\pi^0p \rightarrow \Delta^+}^{max} &= 135 \text{ mb} \text{ e} \\ \sigma_{\pi^+p \rightarrow \Delta^{++}}^{max} &= 200 \text{ mb}.\end{aligned}$$

Os processos acima são os mais importantes nas reações intranucleares para a faixa de energias intermediárias (0.1 a 2.0 GeV/A). Outros processos, como o mecanismo de produção direta de píons em onda-s,

$$NN \rightarrow NN\pi,$$

não foram considerados porque a seção de choque experimental correspondente assume valores que são algumas ordens de grandeza inferior ao processo de menor seção de choque.

# Referências Bibliográficas

- [1] R. Serber, Nuclear reactions at high energies, *Phys. Rev.* 72 (1947) 1114–1115.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.72.1114>
- [2] G. Rudstam, Spallation of Medium Weight Elements, Ph.D. thesis, Uppsala University. (1956).
- [3] X. Campi, J. Hüfner, Nuclear spallation-fragmentation reactions induced by high-energy projectiles, *Phys. Rev. C* 24 (1981) 2199–2209.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.24.2199>
- [4] L. Husain, S. Katcoff, Interaction of 3- and 29-gev protons with vanadium, *Phys. Rev. C* 7 (1973) 2452–2461.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.7.2452>
- [5] J. Cugnon, Cascade models and particle production: A comparison, in: H. Gutbrod, J. Rafelski (Eds.), *Particle Production in Highly Excited Matter*, Vol. 303 of NATO ASI Series, Springer US, 1993, pp. 271–293.  
URL [http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-2940-8\\_12](http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-2940-8_12)
- [6] K. V. Riper, S. Mashnik, W. Wilson, A computer study of radionuclide production in high power accelerators for medical and industrial applications, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 463 (3) (2001) 576 – 585, accelerator driven systems.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900201001723>
- [7] M. Enke, C.-M. Herbach, D. Hilscher, U. Jahnke, O. Schapiro, A. Letourneau, J. Galin, F. Goldenbaum, B. Lott, A. Péghaire, D. Filges, R.-D. Neef, K. Nü-

- nighoff, N. Paul, H. Schaal, G. Sterzenbach, A. Tietze, L. Pienkowski, Evolution of a spallation reaction: experiment and monte carlo simulation, Nuclear Physics A 657 (3) (1999) 317 – 339.
- URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947499003450>
- [8] K.-H. Schmidt, J. Benlliure, T. Enqvist, A. Junghans, F. Rejmund, M. Ricciardi, Future prospects for secondary-beam production, Nuclear Physics A 701 (1–4) (2002) 115 – 122, 5th International Conference on Radioactive Nuclear Beams.
- URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947401015585>
- [9] H. W. Bertini, Low-energy intranuclear cascade calculation, Phys. Rev. 138 (1965) AB2–AB2.
- URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.138.AB2.2>
- [10] J. Cugnon, Proton-nucleus interaction at high energy, Nuclear Physics A 462 (4) (1987) 751 – 780.
- URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947487905756>
- [11] 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.
- [12] M. Gonçalves, E. Medeiros, S. Duarte, Effect of multiparticle collisions on pion production in relativistic heavy ion reactions, Physical Review C 55 (1997) 2625.
- [13] M. Gonçalves, S. de Pina, D. Lima, W. Milomen, E. Medeiros, S. Duarte, Many-body cascade calculation for photonuclear reactions, Physics Letters B 406 (1–2) (1997) 1 – 6.
- URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037026939700662X>
- [14] E. Medeiros, S. Duarte, T. Kodama, The effect of nuclear binding energy on pion yields in relativistic nuclear collisions, Physics Letters B 203 (1988) 205.

- [15] S. de Pina, E. de Oliveira, E. Medeiros, S. Duarte, M. Gonçalves, Photonuclear  $k^+$  production calculation near threshold, *Physics Letters B* 434 (1998) 1.
- [16] T. E. Rodrigues, O modelo de cascata intranuclear mcmc e aplicações para o mecanismo do quase-déuteron e a fotoprodução de pions em energias intermediárias e altas., Ph.D. thesis, Instituto de Física, Universidade de São Paulo (2005).
- [17] M. Gonçalves, E. d. Oliveira, E. Medeiros, S. d. Pina, S. Duarte, Hot hypernucleus formation in high-energy photonuclear reactions, *Brazilian Journal of Physics* 34 (2004) 919 – 923.  
 URL [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0103-97332004000500057&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-97332004000500057&nrm=iso)
- [18] K. Maeda, H. Yamazaki, S. Asano, T. Emura, I. Endo, S. Endo, S. Ito, H. Itoh, K. Ifuku, O. Konno, M. Koike, K. Maruyama, K. Niki, K. Niwa, H. Okuno, A. Sakaguchi, T. Sasaki, T. Suda, Y. Sumi, M. Takeya, T. Terasawa, H. Uchida, H. Yamashita, K. Yoshida, Proceeding of the international symposium on spin-isospin responses and weak processes in hadrons and nuclei quasi-free  $k^+$  photo-production in  $^{12}\text{C}$ , *Nuclear Physics A* 577 (1) (1994) 277 – 280.  
 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947494908672>
- [19] A. Deppman, et al., The CRISP package for intermediate- and high-energy photonuclear reactions, *J. Phys. G*30 (2004) 1991–2002.
- [20] A. Deppman, O. Tavares, S. Duarte, E. de Oliveira, J. Arruda-Neto, S. de Pina, V. Likhachev, O. Rodriguez, J. Mesa, M. Gonçalves, The {MCEF} code for nuclear evaporation and fission calculations, *Computer Physics Communications* 145 (3) (2002) 385 – 394.  
 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465502002783>
- [21] A. Deppman, O. Tavares, S. Duarte, J. Arruda-Neto, M. Gonçalves, V. Likhachev, J. Mesa, E. de Oliveira, S. de Pina, O. Rodriguez, 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) (2003) 15 – 21.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X03012655>
- [22] A. Leprêtre, H. Beil, R. Bergre, P. Carlos, J. Fagot, A. Veyssière, A study of the formation of compound nucleus states by absorption of 30 to 90 mev photons in sn, ce, ta and pb nuclei, Nuclear Physics A 390 (2) (1982) 240 – 252.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947482901609>
- [23] S. R. de Pina, J. Mesa, A. Deppman, J. D. T. Arruda-Neto, S. B. Duarte, E. C. de Oliveira, O. A. P. Tavares, E. L. Medeiros, M. Gonçalves, E. de Paiva, Nucleon effective mass effects on the pauli-blocking function, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 28 (8) (2002) 2259.  
URL <http://stacks.iop.org/0954-3899/28/i=8/a=311>
- [24] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. A. Dubois, M. Asai, Barrand, R. Capra, S. Chauvie, R. Chytracsek, G. A. P. Cirrone, G. Cooperman, G. Cosmo, G. Cuttone, G. G. Daquino, M. Donszelmann, M. Dressel, G. Folger, F. Foppiano, J. Generowicz, V. Grichine, S. Guatelli, P. Gumplinger, A. Heikkinen, I. Hrivnacova, A. H. S. I. V. Ivanchenko, T. Johnson, et al., Geant4 developments and applications, IEEE Transactions on Nuclear Science 53 (2006) 270– 278.
- [25] J. F. Briesmeister, Mcnp - a general monte carlo  $N$ -particle transport code, version 4b, Los Alamos National Laboratory Briesmeister, J F Editor.
- [26] A. R. Smith, Present status and future developments in proton therapy, AIP Conference Proceedings 1153 (1) (2009) 426–437.  
URL <http://link.aip.org/link/?APC/1153/426/1>
- [27] H. Palmans, J. Seuntjens, F. Verhaegen, J.-M. Denis, S. Vynckier, H. Thirens, Water calorimetry and ionization chamber dosimetry in an 85-mev clinical proton beam, Med. Phys. 23 (1996) 643.
- [28] L. Hong, M. Goitein, M. Bucciolini, R. Comiskey, B. Gottschalk, S. Rosenthal, C. Serago, M. Urie, A pencil beam algorithm for proton dose calculations, Phys. Med. Biol. 41 (1996) 1305.

- [29] P. L. Petti, Differential pencil-beam dose calculation for charged particles, *Med. Phys.* 19 (1992) 137.
- [30] T. Bortfeld, An analytical approximation of the bragg curve for therapeutic proton beams, *Med. Phys.* 24 (1997) 2024.
- [31] M. Urie, M. Goitein, M. Wagner, Compensating for heterogeneities in proton radiation therapy, *Phys. Med. Biol.* 29 (1983) 553.
- [32] M. Goitein, J. M. Sisterson, The influence of thick inhomogeneities on charged particle beams, *Radiat. Res.* 74 (1978) 217.
- [33] M. Lee, A. E. Nahum, S. Webb, An empirical method to build up a model of proton dose distribution for a radiotherapy treatment planning package, *Phys. Med. Biol.* 38 (1993) 989.
- [34] Y. Matsuzaki, H. Date, K. Sutherland, Y. Kiyonagi, Nuclear collision processes around the bragg peak in proton therapy, *Radiological Physics and Technology* 3 (2010) 84–92, 10.1007/s12194-009-0081-2.  
URL <http://dx.doi.org/10.1007/s12194-009-0081-2>
- [35] J. F. Janni, Proton range-energy tables, 1 kev–10 gev, *At. Data Nucl. Data Tables* 27 (1982) 147.
- [36] G. F. Bertsch, H. Kruse, S. D. Gupta, Boltzmann equation for heavy ion collisions, *Phys. Rev. C* 29 (1984) 673–675.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.29.673>
- [37] J. Aichelin, “quantum” molecular dynamics—a dynamical microscopic n-body approach to investigate fragment formation and the nuclear equation of state in heavy ion collisions, *Physics Reports* 202 (5) (1991) 233 – 360.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157391900943>
- [38] V. Weisskopf, Statistics and nuclear reactions, *Phys. Rev.* 52 (1937) 295–303.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.295>

- [39] E. Rutherford, Collision of  $\alpha$  particles with light atoms iv. an anomalous effect in nitrogen, *Phil. Mag.* 37 (1919) 581.
- [40] E. Deeson, *Internet-linked Dictionary of Physics*, Haper Collis, 2007.
- [41] N. Bohr, Neutron capture and nuclear constitution, *Nature* 137 (1936) 344.
- [42] M. L. Goldberger, The interaction of high energy neutrons and heavy nuclei, *Phys. Rev.* 74 (1948) 1269–1277.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.74.1269>
- [43] N. Metropolis, R. Bivins, M. Storm, A. Turkevich, J. M. Miller, G. Friedlander, Monte carlo calculations on intranuclear cascades. i. low-energy studies, *Phys. Rev.* 110 (1958) 185–203.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.110.185>
- [44] I. Dostrovsky, P. Rabinowitz, R. Bivins, Monte carlo calculations of high-energy nuclear interactions. i. systematics of nuclear evaporation, *Phys. Rev.* 111 (1958) 1659–1676.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.111.1659>
- [45] K. J. Le Couteur, The evaporation theory of nuclear disintegrations, *Proceedings of the Physical Society. Section A* 63 (3) (1950) 259.  
URL <http://stacks.iop.org/0370-1298/63/i=3/a=309>
- [46] S. G. Mashnik, On solar system and cosmic rays nucleosynthesis and spallation processes.
- [47] E. Wigner, On the quantum correction for thermodynamic equilibrium, *Phys. Rev.* 40 (1932) 749–759.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.40.749>
- [48] J. Cugnon, T. Mizutani, J. Vandermeulen, Equilibration in relativistic nuclear collisions. a monte carlo calculation, *Nuclear Physics A* 352 (3) (1981) 505 – 534.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947481904279>

- [49] H. Sorge, H. Stöcker, W. Greiner, Poincaré invariant hamiltonian dynamics: Modelling multi-hadronic interactions in a phase space approach, *Annals of Physics* 192 (2) (1989) 266 – 306.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000349168990136X>
- [50] A. A. Vlasov, The vibrational properties of an electron gas, *Soviet Physics Uspekhi* 10 (6) (1968) 721–733.  
URL <http://ufn.ru/en/articles/1968/6/a/>
- [51] E. A. Uehling, G. E. Uhlenbeck, Transport phenomena in einstein-bose and fermi-dirac gases. i, *Phys. Rev.* 43 (1933) 552–561.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.43.552>
- [52] K. Niita, W. Cassing, U. Mosel, Hard-photon production within a self-consistent transport approach to heavy-ion collisions, *Nuclear Physics A* 504 (2) (1989) 391 – 412.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947489903539>
- [53] C. M. Ko, G. Q. Li, Medium effects in high energy heavy-ion collisions, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 22 (12) (1996) 1673.  
URL <http://stacks.iop.org/0954-3899/22/i=12/a=002>
- [54] Y. Yariv, Z. Fraenkel, Intranuclear cascade calculation of high-energy heavy-ion interactions, *Phys. Rev. C* 20 (1979) 2227–2243.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.20.2227>
- [55] A. P. Arya, *Fundamentals of nuclear physics*, Allyn and Bacon, 1966.
- [56] Y. Sugahara, H. Toki, Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with non-linear  $\sigma$  and  $\omega$  terms, *Nuclear Physics A* 579 (3-4) (1994) 557 – 572.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947494909237>

- [57] J. W. Negele, The mean-field theory of nuclear structure and dynamics, *Rev. Mod. Phys.* 54 (1982) 913–1015.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.913>
- [58] P. Ring, Relativistic mean field theory in finite nuclei, *Progress in Particle and Nuclear Physics* 37 (1996) 193–263.
- [59] M. Centelles, X. Viñas, Semiclassical approach to the description of semi-infinite nuclear matter in relativistic mean-field theory, *Nuclear Physics A* 563 (1993) 173–204.
- [60] J. Blaizot, B. Friman, On the nucleon effective mass in nuclear matter, *Nuclear Physics A* 372 (1981) 69–89.
- [61] Z. Ma, J. Wambach, Implications of a dynamical effective mass on the nuclear shell model, *Nuclear Physics A* 402 (1983) 275–300.
- [62] J.D., Walecka, Equation of state for neutron matter at finite T in a relativistic mean-field theory, *Physics Letters B* 59 (2) (1975) 109 – 112.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269375906784>
- [63] M. Liu, N. Wang, Y. Deng, X. Wu, Further improvements on a global nuclear mass model, *Phys. Rev. C* 84 (2011) 014333.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.84.014333>
- [64] W. D. Myers, *Droplet Model of Atomic Nuclei*, IFI/Plenum, 1977.
- [65] P. Moller, J. Nix, W. Myers, W. Swiatecki, Nuclear ground-state masses and deformations, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 59 (2) (1995) 185 – 381.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X85710029>
- [66] Y. Kitazoe, M. Sano, Y. Yamamura, H. Furutani, K. Yamamoto, A cascade model analysis of collective motion in relativistic nuclear collisions, *Physical Review C* 29 (1984) 828.

- [67] J. Enstrom, L. B. Laboratory, NN and ND interactions: a compilation, Berkeley Particle Data Group, Lawrence Berkeley Laboratory, 1972.  
URL <http://books.google.com/books?id=S1inNAAACAAJ>
- [68] O. Benary, L. Price, G. Alexander, NN and ND interactions (above 0.5-GeV/c – A Compilation, UCRL Library, Berkeley, Ca, 1971.
- [69] B. J. VerWest, R. A. Arndt, NN single pion production cross sections below 1500 mev, Phys. Rev. C 25 (1982) 1979–1985.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.25.1979>
- [70] E. L. Medeiros, Energia de ligação e multiplicidade de pions em colisões nucleares relativísticas, Ph.D. thesis, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (1989).
- [71] G. J. Igo, Some recent intermediate-and high-energy proton-nucleus research, Rev. Mod. Phys. 50 (1978) 523–560.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.50.523>
- [72] G. Wolf, G. Batko, W. Cassing, U. Mosel, K. Niita, M. Schäfer, Dilepton production in heavy-ion collisions, Nuclear Physics A 517 (3) (1990) 615 – 638.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947490902228>
- [73] B. Schürmann, W. Zwermann, Subthreshold kaon production and compression effects, Physics Letters B 183 (1) (1987) 31 – 34.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269387914122>
- [74] B. M. Santos, Análise neutrônica de reatores com fontes estimulada por feixes de prótons em “accelerator -driven systems - ads”, Master’s thesis, Instituto Militar de Engenharia (2011).
- [75] A. R. C. Pinheiro, L. P. G. De Assis, S. B. Duarte, B. M. Santos, M. Gonçalves, Multiparticle versus single sequential emission in nuclear evaporation processes, Phys. Rev. C 93 (2016) 034612.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.93.034612>

- [76] O. A. P. Tavares, E. L. Medeiros, Level density parameter at the fission saddle point from intermediate-energy photofission cross section data, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 30 (4) (2004) 395.  
URL <http://stacks.iop.org/0954-3899/30/i=4/a=002>
- [77] O. A. P. Tavares, S. B. Duarte, A. Deppman, V. P. Likhachev, Nuclear photofissility of nat pb and 232 th at energies above the pion photoproduction threshold, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 30 (4) (2004) 377.  
URL <http://stacks.iop.org/0954-3899/30/i=4/a=001>
- [78] P. Montagna, G. Bendiscioli, V. Filippini, A. Fontana, A. Rotondi, P. Salvini, A. Panzarasa, M. Bargiotti, A. Bertin, M. Bruschi, M. Capponi, S. D. Castro, L. Fabbri, P. Faccioli, D. Galli, B. Giacobbe, U. Marconi, M. Piccinini, N. S. Cesari, R. Spighi, S. Vecchi, V. Vagnoni, M. Villa, A. Vitale, A. Zoccoli, A. Bianconi, G. Bonomi, M. Bussa, A. Donzella, L. Venturelli, A. Zenoni, C. Cicalò, A. D. Falco, A. Masoni, G. Puddu, S. Serci, G. Usai, O. Gorchakov, A. Rozhdestvensky, V. Tretyak, P. Gianotti, C. Guaraldo, A. Lanaro, V. Lucherini, C. Petruscu, V. Ableev, C. Cavion, G. Vedovato, F. Balestra, L. Busso, P. Cerello, O. Denisov, L. Ferrero, R. Garfagnini, A. Grasso, A. Maggiore, D. Panzieri, M. Astrua, E. Botta, T. Bressani, D. Calvo, A. Feliciello, A. Filippi, S. Marcello, M. Agnello, F. Iazzi, N. Mirfakhrai, Single and multinucleon antiproton-4He annihilation at rest, *Nuclear Physics A* 700 (1-2) (2002) 159 – 192.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947401013021>
- [79] C. Guaraldo, V. Lucherini, E. De Sanctis, A. S. Iljinov, M. V. Mebel, S. Lo Nigro, Excitation energy dependence of photofissility in preactinide nuclei, *Il Nuovo Cimento A (1965-1970)* 103 (4) (1990) 607–614.  
URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02820532>
- [80] T. E. Rodrigues, J. D. Arruda-Neto, A. Deppman, V. P. Likhachev, J. Mesa, C. Garcia, K. Shtejer, G. Silva, S. B. Duarte, O. A. Tavares, Photonuclear reactions at intermediate energies investigated via the Monte Carlo multicollisional intranuclear cascade model, *Physical Review C* 69 (6) (2004) 064611–+.

- [81] O. Tavares, M. Terranova, Analysis of  $^{209}\text{Bi}$  and  $^{238}\text{U}$  photofission cross section in the quasi-deuteron region of photonuclear absorption, *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 343 (4) (1992) 407–416.  
URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01289817>
- [82] N. Bohr, J. A. Wheeler, The mechanism of nuclear fission, *Phys. Rev.* 56 (1939) 426–450.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.56.426>
- [83] R. Vandenbosch, J. R. Huizenga, Nuclear fission [by] Robert Vandenbosch [and] John R. Huizenga, Academic Press, New York, 1973.
- [84] O. A. P. Tavares, S. B. Duarte, V. Morcelle, A. Deppman, Photofissility at 1 GeV for nuclei throughout the periodic table, *Brazilian Journal of Physics* 35 (2005) 915 – 918.  
URL [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0103-97332005000500054&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-97332005000500054&nrm=iso)
- [85] A. Tomasini, Multiple emission in nuclear reactions, *Il Nuovo Cimento* (1955-1965) 6 (2) (1957) 404–407.  
URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02832527>
- [86] D. B. Beard, A. McLellan, Quantitative nuclear evaporation theory and the nuclear potential, *Phys. Rev.* 131 (1963) 2664–2674.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.131.2664>
- [87] T. Mukhopadhyay, D. N. Basu,  $\gamma$  induced multiparticle emissions of medium mass nuclei at intermediate energies, *Phys. Rev. C* 79 (2009) 017602.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.79.017602>
- [88] E. N. Gazis, C. T. Papadopoulos, R. Vlastou, A. C. Xenoulis, pn to d and  $\alpha$  pn to  $\alpha$  d emission ratios in heavy-ion-induced reactions, *Phys. Rev. C* 34 (1986) 872–876.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.34.872>
- [89] W. C. Röntgen, On a new kind of rays, *Science* 3 (59) (1896) 227–231.  
URL <http://science.sciencemag.org/content/3/59/227>

- [90] H. Becquerel, On the rays emitted by phosphorescence, *Compt. Rend. Hebd. Seances Acad. Sci.* 122 (8) (1896) 420–421.
- [91] R. R. Wilson, Radiological use of fast protons, *Radiology* 47 (5) (1946) 487–491, PMID: 20274616.  
URL <http://dx.doi.org/10.1148/47.5.487>
- [92] D. Cussol, Hadron therapy, in: *Ecole Joliot-Curie (30 years) "Physics at the femto-meter scale"*, La Colle sur Loup, France, 2011, p. 46 p.  
URL <http://hal.in2p3.fr/in2p3-00623351>
- [93] K. S. Armoogum, N. Thorp, Dosimetric comparison and potential for improved clinical outcomes of paediatric cns patients treated with protons or imrt, *Cancers* 7 (2) (2015) 706.  
URL <http://www.mdpi.com/2072-6694/7/2/706>
- [94] E. M. Yoshimura, Radiation physics: interaction of radiation with matter, *Revista Brasileira de Física Médica* 3 (1) (2009) 57–67.  
URL <http://www.rbfm.org.br/index.php/rbfm/article/view/35>
- [95] P. Rinard, Neutron interactions with matter, *Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials* (1991) 537–377.
- [96] N. Bohr, Lx. on the decrease of velocity of swiftly moving electrified particles in passing through matter, *Philosophical Magazine Series 6* 30 (178) (1915) 581–612.  
URL <http://dx.doi.org/10.1080/14786441008635432>
- [97] U. Fano, *Studies in penetration of charged particles in matter*, Nucl. Sci., NAS, Washington, DC, 1964.
- [98] J. F. Ziegler, Stopping of energetic light ions in elemental matter, *Journal of Applied Physics* 85 (3) (1999) 1249–1272.  
URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/85/3/10.1063/1.369844>
- [99] W. D. Newhauser, R. Zhang, The physics of proton therapy, *Physics in Medicine and Biology* 60 (8) (2015) R155.  
URL <http://stacks.iop.org/0031-9155/60/i=8/a=R155>

- [100] H. Paganetti, Nuclear interactions in proton therapy: dose and relative biological effect distributions originating from primary and secondary particles, *Physics in Medicine and Biology* 47 (5) (2002) 747.  
URL <http://stacks.iop.org/0031-9155/47/i=5/a=305>
- [101] H. Nifenecker, O. Meplan, S. David, Accelerator Driven Subcritical Reactors, Series in Fundamental and Applied Nuclear Physics, Institute of Physics Publishing, London, 2003.
- [102] S. Anéfalos Pereira, Um conceito alternativo de um reator híbrido (conjunto subcrítico acoplado com acelerador), Ph.D. thesis, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo (2002).
- [103] B. Santos, A. Pinheiro, M. Gonçalves, S. Duarte, R. Cabral, On the nucleon effective mass role to the high energy proton spallation reactions, *Nuclear Physics A* 948 (2016) 78 – 92.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947416000622>
- [104] S. Leray, F. Borne, S. Crespin, J. Fréhaut, X. Ledoux, E. Martinez, Y. Patin, E. Petibon, P. Pras, A. Boudard, R. Legrain, Y. Terrien, F. Brochard, D. Drake, J. C. Duchazeaubeneix, J. M. Durand, S. I. Meigo, G. Milleret, D. M. Whittal, W. Wlazlo, D. Durand, C. Le Brun, F. R. Lecolley, J. F. Lecolley, F. Lefebvres, M. Louvel, C. Varignon, F. Hanappe, S. Ménard, L. Stuttge, J. Thun, Spallation neutron production by 0.8, 1.2, and 1.6 gev protons on various targets, *Phys. Rev. C* 65 (2002) 044621.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.65.044621>
- [105] B. O. Tierce: A code system for particles and radiation transport in thick targets, in: Proceedings of the 2. international conference on accelerator-driven transmutation technologies and applications. V.1.
- [106] A. Boudard, J. Cugnon, S. Leray, C. Volant, Intranuclear cascade model for a comprehensive description of spallation reaction data, *Phys. Rev. C* 66 (2002) 044615.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.66.044615>

- [107] X. Ledoux, F. Borne, A. Boudard, F. Brochard, S. Crespín, D. Drake, J. C. Duchazebeneix, D. Durand, J. M. Durand, J. Fréhaut, F. Hanappe, L. Kowalski, C. Lebrun, F. R. Lecolley, J. F. Lecolley, F. Lefebvres, R. Legrain, S. Leray, M. Louvel, E. Martinez, S. I. Meigo, S. Ménard, G. Milleret, Y. Patin, E. Petibon, F. Plouin, P. Pras, L. Stuttge, Y. Terrien, J. Thun, M. Uematsu, C. Varignon, D. M. Whittal, W. Wlazo, Spallation neutron production by 0.8, 1.2, and 1.6 GeV protons on Pb targets, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4412–4415.  
URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.4412>
- [108] M. Lone, P. Wong, Neutron yields from proton-induced spallation reactions in thick targets of lead, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 362 (2-3) (1995) 499 – 505.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900295002863>
- [109] A. Letourneau, J. Galin, F. Goldenbaum, B. Lott, A. Péghaire, M. Enke, D. Hilscher, U. Jahnke, K. Nünighoff, D. Filges, R. Neef, N. Paul, H. Schaal, G. Sterzenbach, A. Tietze, Neutron production in bombardments of thin and thick w, hg, pb targets by 0.4, 0.8, 1.2, 1.8 and 2.5 gev protons, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 170 (3–4) (2000) 299 – 322.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X00002597>
- [110] J. Walecka, A theory of highly condensed matter, *Annals of Physics* 83 (2) (1974) 491 – 529.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491674902085>
- [111] G. Batko, J. Randrup, T. Vetter, Effect of n-body collisions on subthreshold kaon production in high-energy nuclear reactions, *Nuclear Physics A* 546 (4) (1992) 761 – 772.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947492900066>