

Ubaldo Baños Rodríguez

Rede neural Bayesiana aplicada a dados
nucleares na exploração de novos
nuclídeos e decaimentos— Elementos
superpesados em foco

Rio de Janeiro
2020

Ubaldo Baños Rodríguez

Rede neural Bayesiana aplicada a dados nucleares na exploração de novos núclídeos e decaimentos— Elementos superpesados em foco

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

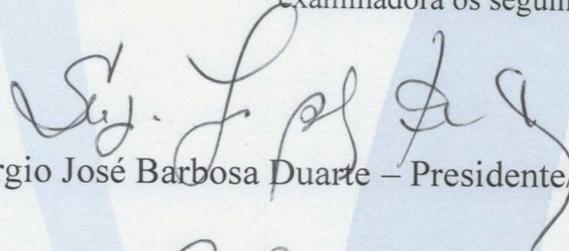
Orientador: Dr. Sérgio José Barbosa Duarte

Rio de Janeiro
2020

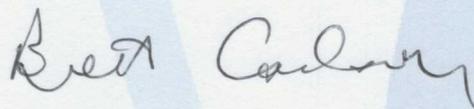
“REDE NEURAL BAYESIANA APLICADA À DADOS NUCLEARES NA
EXPLORAÇÃO DE NOVOS NUCLÍDEOS E DECAIMENTOS –
ELEMENTOS SUPERPESADOS EM FOCO”

UBALDO BAÑOS RODRÍGUEZ

Tese de Doutorado em Física apresentada no
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do
Ministério da Ciência Tecnologia e
Inovação. Fazendo parte da banca
examinadora os seguintes professores:



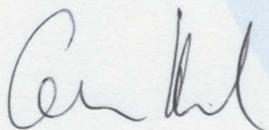
Sérgio José Barbosa Duarte – Presidente/Orientador/CBPF



Brett Vern Carlson - ITA



Luiz Felipe Alvahydo de Ulhoa Canto - UFRJ



Carsten Hensel - CBPF



Tobias Micklitz - CBPF

Rio de Janeiro, 06 de março de 2020.

A mis padres.

Agradecimentos

Aos meus pais, por seu apoio incondicional e irrestrito, que, mesmo distantes, são a minha razão de seguir adiante.

À minha esposa Gisell, pelo amor, paciência, apoio e compreensão durante toda esta jornada. Sem ela, este trabalho não seria possível.

Agradeço ao meu supervisor Sérgio José Barbosa Duarte, que com sua ajuda, orientação e paciência conseguiu me orientar na realização e conclusão deste trabalho. Seus conselhos foram muito importante para enfrentar as dificuldades apresentadas em minha estadia no Brasil. Gostaria de agradecer ao professor Marcello Gonçalves, por sua colaboração, pois foi essencial para o trabalho.

Aos meus do professores do InSTEC, Doris del Carmen Rivero Ramírez, Maikel Díaz Castro e Fernando Guzmán Martínez pelos bons conselhos.

Aos meus amigos por todos os bons momentos.

Agradeço ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas pela oportunidade e disponibilidade de recursos fundamentais para a conclusão do trabalho. Aos professores que contribuíram para a realização do trabalho e minha formação na instituição. Aos funcionários da secretaria da coordenação do COSMO e da CFC.

Finalmente, gostaria de agradecer apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

Resumo

Neste trabalho realizamos um estudo sistemático do processo de decaimento α do estado fundamental dos núcleos α -emissores, usando uma abordagem de rede neural bayesiana. Para isso é utilizada uma metodologia híbrida, na qual o treinamento da rede bayesiana é realizado com os valores residuais entre as previsões de um modelo teórico e os dados experimentais. Para ilustrar a metodologia, usamos o modelo de massa Duflo-Zuker de 10 parâmetros. Em seguida, estendendo o estudo para 9 outros modelos de massa. As previsões dos valores Q_α dos modelos de massa são aprimoradas, diminuindo os desvios quadráticos médios dos dados experimentais em quantidades superiores a 45 % para a maioria dos modelos. Essas correções, em alguns casos, podem resgatar alguns aspectos físicos que não estão presentes nos modelos utilizados, permitindo identificar algumas estruturas de maior estabilidade, possivelmente associadas a números mágicos ou sub-mágicos. Utilizando o modelo fenomenológico efetivo proposto por Gonçalves e Duarte, calculamos os valores de meia-vida para o decaimento alfa. Nesse modelo de decaimento, considera-se que a partícula alfa é formada no núcleo pai e é emitida em um processo de tunelamento através de uma barreira de potencial efetivo. Um elemento crucial no cálculo da meia-vida é a energia liberada no processo de decaimento, no nosso caso esse é o valor obtido usando a metodologia de aprendizado de máquina. Dos resultados obtidos, os mais destacados são as melhorias obtidas na região dos elementos transactinídeos, também chamados de elementos superpesados. Sendo esta uma região de grande interesse e atividade para físicos teóricos e experimentais na atualidade, esperamos que esses resultados sirvam de guia para futuros experimentos na busca de novos elementos e isótopos.

Palavras-chave: decaimento alfa, Elementos superpesados, redes bayesianas neurais

Abstract

In this work, we performed a systematic study of the α -decay process of the ground state of the α -emitter nuclei, using a Bayesian neural network approach. For this, a hybrid methodology is used, in which the training of the Bayesian network is carried out with the residual values between the predictions of a theoretical model and the experimental data. To illustrate the methodology, we used the 10-parameter Duflo-Zuker mass model. Then extending the study to 9 other mass models. The predictions of the Q_α values of the mass models are improved, decreasing the mean square deviations from the experimental data in quantities greater than 45% for most models. These corrections, in some cases, can rescue some physical aspects that are missing in the models used. Allowing to identify some structures of greater stability, possibly associated with magic or sub-magic numbers, which are not present in the original models. Using the effective phenomenological model proposed by Gonçalves and Duarte, we calculated the half-life values for alpha decay. In this decay model, it is considered that the alpha particle is formed in the parent nucleus and is emitted in a tunneling process through an effective potential barrier. A crucial element in the calculation of the half-life is the energy released in the decay process, in our case this is the value obtained using the machine learning methodology. Of the results, the most outstanding are the improvements obtained in the region of transactinide elements, also called Super-Heavy elements. As this is a region of great interest and activity for theoretical and experimental physicists today, we hope that these results will serve as a guide for future experiments in the search for new elements and isotopes.

Keywords: α -decay, Superheavy elements, Bayesian neural Network

Lista de Figuras

1.1	Comparação de diferentes cálculos teóricos para a reação de captura $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb}$. Os pontos representam os dados experimentais enquanto as linhas as diferentes previsões teóricas.	29
1.2	Diagrama mostrando os processos de decaimento por emissão de núcleons ou partículas leves em competição com o processo de fissão.	34
1.3	Representação ilustrativa da superfície de energia potencial de um núcleo, projetado no plano paramétrico (c, h - vide texto), para diferentes formas do sistema nuclear em diferentes configurações.	37
1.4	Comparação com dados experimentais de seções transversais de ER calculadas para as reações, (a) $^{48}\text{Ca} + ^{242}\text{Pu}$ (b) $^{48}\text{Ca} + ^{243}\text{Am}$ (c) $^{48}\text{Ca} + ^{244}\text{Pu}$ (d) $^{48}\text{Ca} + ^{245}\text{Cm}$ (e) $^{48}\text{Ca} + ^{248}\text{Cm}$ (f) $^{48}\text{Ca} + ^{249}\text{Bk}$	39
1.5	Secções transversais experimentais para as reações de fusão resultando na formação de SHE. Os dados obtidos para a reação de fusão a frio e as reações induzidas pelos íons de feixe de ^{48}Ca (fusão a quente) são apresentados nos painéis esquerdo (a) e direito (b) respectivamente. . .	41

2.1	Representação esquemática da fase molecular do sistema dinuclear. O núcleo filho e os fragmentos emitidos (menores) têm raio $R_{\mathcal{D}}$ e $R_{\mathcal{E}}$, respectivamente, e a distância entre seus centros geométricos é denotada por ζ . A variável ξ representa a distância entre o centro do fragmento mais pesado e o pescoço afiado circular do raio a . Todas essas variáveis são usadas na determinação da barreira potencial (Coulomb, superfície e total).	47
2.2	Representação esquemática da barreira potencial efetiva.	49
2.3	Diferença entre os tempos de meia-vida experimentais e calculados para o decaimento α , usados na calibração do ELDM. Em azul, são todos os pontos com diferença menor que 2 desvios padrão, enquanto em laranja são os que apresentam maior diferença. A linha cinza tracejada define o desvio padrão dos dados.	50
3.1	Rede neural multicamada com uma camada de unidades ocultas. Os valores de entrada são determinados pelos caso específicos de estudo de nosso interesse. Os valores de cada uma das unidades ou neurônios, são uma função da soma ponderada dos valores recebidos das outras unidades que estão conectadas a ele por meio de uma seta. No painel (a) da figura as conexões são valores escalares, no caso do painel (b) as conexões são distribuição de probabilidade.	57
3.2	Diferença entre a energia alfa liberada teórica e experimental. A sombra cinza define a região SHE onde as correções são mais significativas. . . .	63
3.3	Rede neural Bayesiana com uma única camada oculta de 17 neurônios ($z_1 \dots z_{17}$), com quatro vetores de entrada (Z, N, d_p, d_n) e uma única saída (ψ).	65

- 3.4 Desvio quadrático médio dos valores de Q_α em função da complexidade da rede, determinada pelo número de neurônios da camada oculta. . . . 67
- 3.5 Energia liberada no processo de decaimento alfa, Q_α , obtido com o modelo de massa DZ10 com base no número de nêutrons N , na região de SHE $104 \leq Z \leq 118$. As linhas e pontos representam os valores calculados e experimentais, respectivamente. As linhas pretas verticais tracejadas representam alguns possíveis números mágicos ou sub-mágicos reportados na literatura. 68
- 3.6 Como na Fig. 3.5 mas para os valores de Q_α obtido com a correção DZ10 + BNN. A área sombreada representa a incerteza Q_α^{BNN} 69
- 3.7 Mapa nuclear para a região SHE, que mostra os valores de meias-vidas do decaimento alfa. A meias-vidas experimental é marcada com quadrados pretos. A relação entre valores teóricos e experimentais é mostrada em escala de cinza. Na parte (a) os resultados foram obtidos com o modelo de massa DZ10 e em (b) os resultados foram obtidos com a correção DZ10 + BNN. 71
- 4.1 Desvio da fórmula da massas LDM, em função do número de nêutrons. . . 76
- 4.2 Diferença entre a energia alfa liberada teórica e experimental. Pontos marcados Q_α^{Th} e Q_α^{BNN} são os resultados de modelos teóricos e modelos teóricos + BNN respectivamente. Sombra verde define a região SHE onde as correções são mais significativas. 84

- 4.3 Desvios da energia alfa liberada calculada com os dez (incluso o modelo DZ10 opt do capitulo 3) modelos de massa. Os valores dos desvios considerando os 443 emissores alfa estão representados em azul e laranja, para os modelos sem e com correção BNN respectivamente. Em verde e vermelho, os valores dos desvios referentes aos núcleos da região SHE, para os modelos sem e com correção respectivamente. 87
- 4.4 Gráfico nuclear para a região SHE, mostrando os valores de meia-vida do decaimento alfa. A meia-vida experimental é representada como quadrados cinzas. No painel esquerdo, os resultados obtidos com os modelos de massa e no painel direito, os resultados obtidos com os modelos mais a correção do BNN. 90

Lista de Tabelas

3.1	Valores de parâmetro para o modelo de 10 parâmetros Duflo-Zuker, ajustando 1355 massas nucleares experimentais com $Z \geq 52$ e incerteza inferior a 100 keV. O desvio padrão correspondente (σ) em relação aos dados experimentais é mostrado na última coluna (em MeV).	62
3.2	Desvios da energia liberada no decaimento alfa. Separados em duas linhas, apresentamos os resultados para o subconjunto de treinamento e teste. Na segunda coluna, apresentamos o valor σ sem correção da BNN, na terceira coluna o valor σ com correção da BNN e na quarta coluna a diferença relativa entre eles.	66
4.1	Desvios da energia alfa liberada calculada com os nove modelos de massa, separados no subconjunto de treinamento e no subconjunto de testes. . .	85
4.2	Desvios da energia alfa liberada calculada com os nove modelos de massa. Na segunda coluna, apresentamos o valor σ anteriormente à correção BNN, na terceira coluna o valor σ com a correção BNN, e na quarta coluna a diferença relativa entre eles.	86
4.3	Os mesmos resultados da tabela 4.2, mas levando em conta apenas os núcleos superpesados.	87
4.4	Números mágicos encontrados na região SHE para os modelos estudados	88

Nomenclatura

BNN Bayesian Neural Network

CN Núcleo Composto

ELDM modelo efetivo da gota líquida

ML Machine Learning

SF Fissão Espontânea

SHE Elementos Superpesados

CC Coupled-Channels

CC root mean square

ER Evaporation Residue

IWBC Incoming Wave Boundary Condition

SEP Superfície de Energia Potencial

DZ-xx Fórmula de massa de Duflo-Zuker composta por xx parâmetros

FRDM Fórmula de massa Finite Range Drop Model

HFB Hartree-Fock-Bogoliubov

KTUY05 Fórmula da massa de Koura-Tachibana-Uno-Yamada

WKB aproximação de Wentzel-Kramers-Brillouin

WS Fórmula da massa de Weizsäcker-Skyrme

Sumário

Introdução	18
1 Síntese de elementos superpesados	23
1.1 Fusão de íons pesados e formação de núcleo composto	25
1.1.1 Etapa de captura	25
1.1.2 Etapa de formação do núcleo composto	28
1.2 Decaimento do núcleo composto excitado	30
1.2.1 Decaimento estatístico	30
1.2.2 Dissipação nuclear	33
1.3 Estado atual na síntese de SHE. Breve revisão experimental.	38
2 Decaimento alfa do estado fundamental dos SHEs	43
2.1 Teoria de decaimento α	44
2.1.1 Modelo efetivo para o decaimento, ELDM	45
2.1.2 Tempos de meia-vida α dos SHE.	48
2.2 Resultados do ELDM	50
3 Energia liberada no decaimento alfa - Redes neurais bayesianas	52
3.0.1 Fórmula de massa de Duflo-Zuker	53
3.1 Energia liberada no decaimento α	56
3.2 Redes neurais	57

3.2.1	Redes neurais Bayesianas	59
3.3	Resultados e discussão da BNN	62
3.3.1	Ajuste do modelo de 10 parâmetros de Duflo-Zuker	62
3.3.2	Energia liberada no decaimento α	62
3.3.3	Rede neural Bayesiana e sua aplicação ao processo de decaimento α	64
3.3.4	Tempos de meias-vidas	71
4	Modelos nucleares de Massa	73
4.1	Modelo da gota líquida (LDM)	74
4.2	Modelos macroscópicos com correções microscópicas	76
4.3	Fórmula de massa de Weizsäcker-Skyrme	80
4.4	Fórmula de massa de Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov	82
4.5	Resultados e discussão	83
4.5.1	Tempos de meias-vidas	88
5	Conclusões e Perspectivas	91
	Referências Bibliográficas	95

Introdução

Com a descoberta da radioatividade nos experimentos com sais de Urânio por Henri Becquerel em 1896 [1], marcando o nascimento da física nuclear, o homem estava mais perto de alcançar a transmutação dos elementos. As primeiras tentativas de sintetizar novos elementos começaram a meados da década de 1930, quando a composição do núcleo por prótons e nêutrons já era bem conhecida. Na Itália, Fermi e Segré e na Alemanha Hahn, Meitner e Strassmann começaram a experimentar com reações de captura de nêutrons pelo Urânio. Nesse processo, eles descobrem a fissão de ^{235}U em 1938, e posteriormente foi descrito por Meitner e Frisch em 1938 [2, 3]. Os primeiros elementos transurânicos foram sintetizados durante a Segunda Guerra Mundial nos Estados Unidos da América, por reações de captura de nêutrons e o subsequente decaimento β^- . Pela descoberta dos elementos transurânicos, em 1951 o Prêmio Nobel de Química é concedido a Glenn T. Seaborg e Edwin McMillan.

Com base nas previsões feitas com o modelo de gota líquida, são previstos os limites da carta de nuclídeos, com base no desaparecimento da barreira de fissão (B_f), para os elementos com $Z > 100$. No entanto, o panorama mudou com a necessidade de introduzir correções de partículas independentes nos modelos da época, a fim de explicar os aumentos na energia de ligação dos núcleos com números “mágicos” para prótons e nêutrons iguais a 2, 8, 20, 28, 50, 82 e 126 somente para nêutrons. Essas modificações permitiram prever maior estabilidade para núcleos com número de prótons e nêutrons duplamente mágicos. Além disso, os números mágicos 126 e 114 para prótons e 184

para nêutrons foram previstos, estendendo assim as previsões dos limites do horizonte nuclear. Desta forma, surge o conceito de elementos superpesados (SHE- do inglês *Superheavy Elements*), para chamar os núcleos com $Z \geq 104$. A existência desses elementos é inteiramente devida aos efeitos de partículas independentes em um campo médio nuclear .

Estudos dos estados básicos em função da deformação dos elementos pesados e superpesados mostram a existência de um máximo de estabilidade para o núcleo esférico localizado em $Z=114$ e $N=184$; bem como para o núcleo deformado com $Z=108$ e $N=162$. Essas regiões são conhecidas como ilhas de estabilidade de núcleos esféricos e deformados, respectivamente. Elementos pertencentes à ilha de estabilidade de núcleos esféricos também são conhecidos como núcleos superpesados.

Esses elementos só podem ser sintetizados a partir do bombardeio de alvos pesados com feixes intensos de íons pesados. Esses tipos de reações nucleares são classificados como reações de fusão por evaporação. Estas reações, com o alvo e o feixe apropriado, eventualmente levam à formação de um elemento superpesado, caso a fissão do núcleo composto formado não ocorra. A boa escolha da combinação projétil-alvo é essencial para a realização de tais experimentos. Dois tipos de reações de fusão-evaporação são cruciais na obtenção dos SHE: as reações de fusão a frio e fusão a quente. Nessas reações, a fusão completa do projétil com o alvo forma um núcleo composto (CN- do inglês *Compound Nucleus*), em um estado excitado altamente instável que decai por evaporação de nêutrons ou emissão de raios gama. No caso de ocorrer a fissão do núcleo, por se tratar de um processo que compete na desexcitação, o elemento SHE não é obtido e essas reações são chamadas de fusão-fissão.

Os elementos com $Z \geq 104$ até o mais pesado até hoje sintetizado pelo homem com $Z = 118$, foram atingidos com estes dois tipos de reações. Usando especificamente alvos de Pb ou Bi nas reações de fusão a frio e isótopos de elementos actínídeos nas de fusão a quente. Os elementos do 107 até 112 [4, 5] foram sintetizados no centro de pesquisa de

elementos pesados GSI em Darmstadt, Alemanha. O elemento 113 [6] no instituto de pesquisa RIKEN em Japão. Os elementos do 114 até 118 bem como vários isótopos dos elementos 112 e 113 [7] foram sintetizados no laboratório de reações nucleares FLNR em Dubna, Rússia.

Apesar de já se ter sintetizado, o núcleo $^{294}118$, a exploração da ilha de estabilidade dos núcleos esféricos, onde se espera um aumento na seção de produção efetiva, bem como um aumento no tempo de vida médio, ainda não foi explorada. As razões pelas quais isso ainda não aconteceu são limitações de natureza experimental, tais como: a disponibilidade de alvos adequados, intensidades baixa de feixes e, conseqüentemente, tempos de medição longos e valores de seção de choque abaixo dos picobarn pb .

No estudo da estabilidade de SHE, o decaimento α tem despertado grande interesse, uma vez que é, em competição com a fissão espontânea (SF- do inglês *Spontaneous Fission*), um dos principais mecanismos de decaimento desses núcleos. Ao mesmo tempo, o processo de desintegração α é uma das principais fontes de conhecimento de sua estrutura nuclear, pois permite confirmar experimentalmente as previsões dos modelos teóricos propostos. Nos últimos 20 anos, o número de artigos publicados com interesse na região SHE tem aumentado gradualmente (ver [7] e as referências citadas ali, bem como [8]).

Desde os primeiros trabalhos de Gamow [9], Condon e Gurney [10] até agora, vários modelos fenomenológicos e microscópicos têm sido propostos para explicar o processo de decaimento α de um núcleo em seu estado fundamental. O modelo efetivo da gota líquida (ELDM) tem sido aplicado com sucesso para determinar os tempos de vida médios do decaimento do estado fundamental por emissão α [11–20]. Neste modelo, a partícula alfa é formada no núcleo pai e emitida após um processo de tunelamento de uma barreira potencial efetiva. Nos últimos anos, vários tempos de vida médios α foram medidos experimentalmente [5, 21–23]. Esses valores de tempos de vida médios foram reproduzidos corretamente com o modelo ELDM. Um elemento crucial no cálculo

dos tempos de vida médios com estes modelos é a energia liberada no processo de decaimento, o valor Q_α . Quando esse valor não está disponível experimentalmente, pode ser determinado a partir da diferença de massa dos núcleos envolvidos.

Devido à limitação dos modelos de fórmulas de massa na descrição da estrutura de alguns núcleos, bem como às incertezas associadas aos dados experimentais, ainda existem desvios significativos entre os valores de massa experimentais e previstas. Para reduzir esses desvios, surgiram nos últimos anos vários trabalhos que utilizam métodos de aprendizado de máquina (ML- do inglês *Machine Learning*) para fazer descrições ou previsões com base nos dados disponíveis [24–30]. Nos trabalhos [29, 31–39] é proposta uma metodologia híbrida, na qual o aprendizado do algoritmo ML ocorre no espaço dos resíduos entre os modelos teóricos e os dados experimentais.

Neste trabalho, nosso objetivo é realizar um estudo do decaimento alfa do estado fundamental do SHE. Devido à falta de dados experimentais e às inconsistências sistemáticas dos modelos naquela região da carta de núclídeos, as previsões geralmente diferem em várias ordens de magnitude. Assim, pretendemos melhorar o poder preditivo de modelos de massa nuclear em relação ao cálculo da energia liberada alfa através do uso de técnicas de ML. Seguindo a metodologia desenvolvida nos trabalhos mencionados, desenvolvemos um modelo preditivo híbrido baseado em uma rede neural bayesiana (BNN- do inglês *Bayesian Neural Network*) [40, 41]. Dessa forma, construímos uma função de correção residual que nos permitirá modelar a energia liberada Q_α , usando valores disponíveis experimentalmente e um modelo teórico. Portanto, a partir do uso desse método robusto de extrapolação, podemos estender o cálculo de Q_α para regiões onde os dados experimentais não estão disponíveis. Assim, define-se o principal objetivo deste trabalho: realizar o estudo da região SHE através da energia liberada e dos valores médios de vida do processo de decaimento alfa, identificando, se possível, a partir da estabilidade do núcleo, possíveis números mágicos.

A tese está estruturado da seguinte forma, no capítulo 1 apresentaremos um modelo

simples que permite entender o processo de síntese de um núcleo superpesado. No capítulo 2 introduzimos o modelo efetivo da gota líquida ELDM para o estudo do decaimento do estado fundamental. No capítulo 3 apresentamos o modelo de massa de Duflo-Zuker como um caso de estudo para introduzir a metodologia ML na melhoria de Q_α , também obtemos os tempos médios de vida calculado com o ELDM. No capítulo 4 estendemos o estudo do capítulo 3 a nove modelos de massa. Como resultado desse trabalho, dois artigos já foram publicados [42, 43].

Capítulo 1

Síntese de elementos superpesados

As primeiras teorias nucleares propuseram que o núcleo poderia ser considerado como uma gota líquida carregada, atualmente esse modelo é conhecido como modelo da gota líquida. Com base nele, a fissão nuclear de núcleos pesados foi corretamente explicada e limitou o número de núcleons no núcleo atômico. Isso ocorre basicamente porque a barreira de fissão no modelo da gota líquida desaparece em torno de $Z = 103$, de modo que o núcleo fissiona. Essa previsão veio da competição entre dois componentes, as fortes forças nucleares que mantêm os núcleons unidos no núcleo, criando uma tensão superficial e a força repulsiva de Coulomb entre os prótons. Para núcleos pesados, o núcleo se tornou um sistema instável tendendo à fissão.

Apesar do sucesso do modelo de gota líquida, ele apresentava limitações fundamentais. Por exemplo, o modelo não previa o surgimento de núcleos extremamente estáveis associados a certas quantidades de prótons e nêutrons, chamados de números mágicos. Era conhecido que núcleos com número de prótons e nêutrons iguais a 2, 8, 20, 28, 50, 82 e 126 para nêutrons tinham um aumento na energia de ligação em comparação à média de seus vizinhos, estes são conhecidos como números mágicos. Esse fenômeno

foi explicado com sucesso posteriormente pelo modelo de camada nuclear. Através do modelo de camada, foi possível fazer extrapolações para as regiões desconhecidas do mapa de núclídeos, prevendo a possibilidade de produzir SHE (também chamados transactinídeos) com números atômicos maiores que $Z = 103$, os quais não existem naturalmente no planeta Terra. A existência de elementos superpesados foi um sucesso do modelo de camada e, portanto, é determinado exclusivamente por fenômenos quânticos (correções de camada), somente determinados pela existência de uma estrutura nuclear.

Desde o final da década de 60, intensos esforços, tanto experimentais quanto teóricos, foram feitos para sintetizar novos SHEs. Nas últimas décadas, graças ao desenvolvimento de instalações de íons pesados, núcleos exóticos foram explorados longe da região de estabilidade. Uma região que ainda não foi alcançada é a chamada “Ilha da Estabilidade”. Sua localização real permanece desconhecida, mas, a partir dos anos 60 diferentes modelos teóricos prevêem sua existência. Baseado em um modelo cujas bases são fenomenológicas, com ingredientes macroscópicos e microscópicos, o próximo número mágico é para núcleos esféricos, com um número de nêutrons igual a 184 [44]. No caso dos números mágicos para prótons, as previsões são mais incertas, sendo previstos 114, 120 e 126 [44], sendo um desafio para os físicos nucleares lidar com essas inconsistências dos diferentes modelos na previsão dos núcleos com números duplamente mágicos.

A escolha da combinação projétil-alvo é essencial para determinar a magnitude da seção de choque, geralmente na ordem de picobarn. Para a síntese dos SHE, são utilizados dois tipos de reações de fusão: fusão a frio e fusão a quente. Estas foram utilizadas para a síntese dos elementos com número atômico entre 104 e 118. Especificamente alvos de ^{208}Pb , ^{209}Bi foram bombardeados com projéteis maciços, mais pesados que o cálcio. Nessas reações, são alcançadas energias de excitação entre 10 e 20 MeV, permitindo que o núcleo composto formado evapore um ou dois núcleons.

Esse tipo de reação de fusão-evaporação pode ser dividida em duas etapas ou fases:

- fase de fusão: durante a qual é formado um núcleo composto excitado

- fase de evaporação: durante a qual o núcleo composto excitado é resfriado por evaporação de núcleons, fissão nuclear ou emissão de raios gama.

Embora exista um consenso sobre o mecanismo de reação na síntese dos SHE, ainda existem muitas discrepâncias nas previsões feitas com os diferentes modelos. Portanto, é necessário encontrar novas maneiras de avaliar os modelos, para que, previsões maiores possam ser feitas de forma mais precisa. Isso permitirá orientar os físicos experimentais na elaboração de futuros experimentos sobre a síntese de novos SHE.

1.1 Fusão de íons pesados e formação de núcleo composto

A reação de fusão de dois íons pesados, formando um núcleo composto, pode ser decomposta basicamente em duas etapas sucessivas:

- Etapa de captura: corresponde ao estágio de superação da barreira coulombiana
- Etapa de formação: corresponde à formação do núcleo composto, onde a energia incidente é distribuída por todos os núcleons. Esta etapa é introduzida para explicar o fenômeno “*fusion hindrance*”, um fenômeno que ocorre apenas em reações de íons pesados ($Z_p Z_t \geq 1600 - 1800$ [45, 46]). Para sistemas mais leves, os núcleos interagentes automaticamente se fundem após atravessar a barreira coulombiana.

1.1.1 Etapa de captura

O desenvolvimento de técnicas experimentais nas últimas décadas permitiu-nos medir com precisão as funções de excitação no processo de captura para uma ampla gama de energias, especialmente para energias abaixo da barreira. Isso permitiu o estudo detalhado dos efeitos dos canais acoplados (CC- do inglês *Coupled-Channels*) nas reações de captura. Tanto experimentos quanto estudos teóricos sugerem que esses

tipos de reações são fortemente influenciadas pelo acoplamento do movimento relativo dos núcleos reativos, com alguns estados coletivos.

Canais acoplados

A fusão de dois núcleos que interagem pode ser descrita por meio da equação de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) - E_{cm} \right] \phi_l(r) = 0, \quad (1.1)$$

onde μ é a massa reduzida do sistema e $V(r)$ é a energia potencial do sistema, composta por um termo nuclear, $V_N(r)$ e um termo coulombiano $V_C(r)$, portanto $V(r) = V_N(r) + V_C(r)$. Se considerarmos que o projétil e o alvo são núcleos esféricos,

$$V_C(r) = \frac{Z_p Z_t e^2}{r}, \quad (1.2)$$

e

$$V_N(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp[(r - R_0)/a]}, \quad (1.3)$$

onde foi introduzido o potencial fenomenológico do Wood-Saxon para descrever a interação nuclear. Aqui Z_p e Z_t são os números atômicos do projétil e do alvo, respectivamente, e “e” é a carga elétrica do elétron. Os três parâmetros do potencial R_0 , V_0 e a geralmente são ajustados a partir de dados experimentais, principalmente de dispersões elásticas de reações de íons pesados [47]. Para resolver 1.1 adotamos as seguintes condições de contorno:

$$\phi_l(r) = \sqrt{\frac{k}{k_l(r)}} T_l \exp \left[i \int_r^{r_{abs}} k_l(r') dr' \right], \quad \text{para } r \leq r_{abs} \quad (1.4)$$

$$\sim \frac{i}{2} \left[H_l^{(-)}(kr) - S_l H_l^{(+)}(kr) \right], \quad \text{para } r \rightarrow +\infty \quad (1.5)$$

Aqui $H_l^{(-)}(kr)$ e $H_l^{(+)}(kr)$ são as funções Coulomb de entrada e de saída respectiva-

mente, r_{abs} é o raio de absorção considerado dentro do potencial, k e $k_l(r)$ representam os números de onda, que podem ser escritos como:

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E_{cm}}{\hbar^2}}, \quad (1.6)$$

$$k_l = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E_{cm} - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right]}. \quad (1.7)$$

As condições de contorno 1.5, são conhecidas como condição de contorno da onda de entrada (IWBC- do inglês *Incoming Wave Boundary Condition*), que são geralmente usadas no estudo de reações de íons pesados. Essas condições representam o caso em que uma absorção forte aparece dentro da região interna do potencial, de modo que o fluxo de entrada nunca retorne. Usando o IWBC, podemos obter a seguinte expressão para estimar a seção de choque de captura:

$$\sigma_{cap}(E_{cm}) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l \geq 0} (2l+1) P_{cap}^{(l)}(E_{cm}) \quad (1.8)$$

onde $P_{cap}^{(l)}(E_{cm})$ é a probabilidade de captura da l -ésima onda parcial que pode ser obtida como $P_{cap}^{(l)}(E_{cm}) = |T_l|^2$. Aqui T_l é o coeficiente de transferência, cujos valores estão relacionados ao potencial nuclear introduzido no modelo de captura.

O método de canais acoplados, surge naturalmente da equação de Schrödinger total do sistema após a expansão da função de onda total na base de auto-estados internos. Para ilustrar o método, pode-se considerar uma colisão entre dois núcleos com o acoplamento do movimento relativo a um estado intrínseco nuclear, denotado por ξ . A Hamiltoniana resultante para este sistema pode ser expressada da seguinte forma:

$$H(r, \xi) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) + H_0(\xi) + V_{coupl}(r, \xi) \quad (1.9)$$

onde $H_0(\xi)$ e $V_{coupl}(r, \xi)$ correspondem ao Hamiltoniano intrínseco e ao potencial de

acoplamento, respectivamente. Então, com base nesse Hamiltoniano composto, seria fácil derivar um sistema de equações diferenciais acopladas para a função de onda radial:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) - E_{cm} \right] \phi_n^J(r) = \sum_{n'} [\varepsilon_n \delta_{nn'} + V_{nn'}(r)] \phi_{n'}^J(r) \quad (1.10)$$

onde n representa um certo estado quântico e J o momento angular total. Aqui, ε_n é o valor próprio de energia do Hamiltoniano intrínseco H_0 , e $V_{nn'} = \langle n | V_{coupl} | n' \rangle$ são os elementos da matriz de acoplamento. Juntamente com o IWBC, obtém-se a seguinte fórmula para estimar a probabilidade de captura:

$$P_{cap}^J(E_{cm}) = \sum_n |T_{nn_i}^J|^2 \quad (1.11)$$

onde n_i se refere ao estado quântico para o canal de entrada. Para este sistema a seção de choque de captura pode ser calculada da seguinte maneira:

$$\sigma_{cap}(E_{cm}) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{J \geq 0} (2J+1) P_{cap}^{(J)}(E_{cm}) \quad (1.12)$$

neste caso a probabilidade de captura agora é afetada por os estados intrínsecos; a equação 1.11 é o principal resultado da abordagem do CC. Na figura 1.1 são mostrados diferentes cálculos teóricos da seção de captura para a reação $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb}$ [48, 49], calculadas na faixa de energia de 160 MeV até 210 MeV. Como pode ser visto, existe uma reprodução bem-sucedida dos valores experimentais, especialmente do método CC, mostrando a validade das abordagens teóricas.

1.1.2 Etapa de formação do núcleo composto

A segunda fase no modelo de reações de fusão-evaporação é a etapa de formação. Esta começa depois que a barreira coulombiana é excedida e os núcleos atingem a configuração de ponto de contato. O próximo passo na evolução do sistema depende

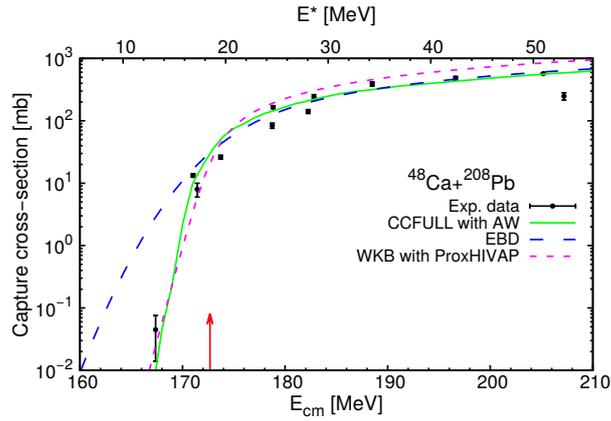


Figura 1.1: Comparação de diferentes cálculos teóricos para a reação de captura $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb}$. Os pontos representam os dados experimentais enquanto as linhas as diferentes previsões teóricas.

fortemente da massa dos núcleos em interação e de suas deformações nesse ponto. No caso de uma grande assimetria entre os núcleos, a probabilidade de formação de um núcleo composto é alta. No caso de reações com núcleos leves e médios, a probabilidade é próxima da unidade, $P_{CN} \approx 1$.

No caso em que a configuração nuclear é mais simétrica, o sistema pode evoluir com grande probabilidade diretamente para o canal de saída sem a formação intermediária de um núcleo composto. Esse processo é chamado de “fissão rápida” ou “quase-fissão”. A evolução do sistema nuclear é principalmente determinada por sua evolução na superfície de energia potencial do sistema. Esta é caracterizado pelos graus de liberdade coletivos. Para o estudo da evolução do sistema nuclear, a partir do momento em que os dois núcleos entram em contato, precisamos definir os graus de liberdade, obter a parametrização da superfície da energia potencial e a solução das equações de movimento dos graus de liberdade coletivos.

Supondo que, a partir do momento em que os dois núcleos entrem em contato, este perdem sua individualidade em favor da coletividade. Podendo considerar o sistema como um núcleo nitidamente deformado, evoluindo para a forma esférica do núcleo composto ou para a fissão. A definição de graus coletivos está intimamente relacionada à

escolha de coordenadas para a parametrização do sistema nuclear formado. Em modelos estatísticos a evolução da matéria nuclear pode ser descrita a partir de um movimento browniano acoplado a um banho térmico a temperatura constante. A evolução deste sistema é descrita pelas equações multidimensionais de Langevin [50–52]. A superfície da energia potencial é obtida considerando a energia potencial coulombiana, a tensão superficial do núcleo e as correções microscópicas devido à estrutura em camadas do sistema formado.

Por outro lado, esse estágio também pode ser descrito considerando que o núcleo no ponto de interação mantém essa configuração de contato, sendo conservada sua forma e as características individuais dos núcleons. Esse modelo em que a forma de contato é mantida é conhecido como sistema dinuclear (*di-nuclear system*). Aqui a evolução do sistema é devida à transferência de núcleons entre os dois núcleos que reagem. O estágio de formação do núcleo composto é dada pela transferência de todos os núcleons do fragmento leve para o mais pesado. Por outro lado, o processo de quase-fissão é definido pela transferência de núcleons do fragmento mais pesado para o mais leve e a subsequente separação dos dois núcleos.

1.2 Decaimento do núcleo composto excitado

1.2.1 Decaimento estatístico

O último passo nas reações de fusão-evaporação é a desexcitação pela evaporação de partículas leves (nêutrons, prótons, partículas α , etc) ou emissão de raios- γ para a formação de resíduos da evaporação (ER- do inglês *Evaporation Residue*), que são os SHE. No caso da fissão do núcleo, obtemos fragmentos de fissão. Uma característica importante a destacar é a diferença entre os tempos característicos entre as duas fases, $\sim 10^{-22}$ s a formação de núcleo composto versus $10^{-18} - 10^{-16}$ s o tempo de decaimento estatístico dele. Outra característica a ser observada é a hipótese de independência

de Bohr, na qual essas duas fases da reação podem ser considerados independentes uma da outra. Para uma melhor ilustração, considere a reação de um projétil a com um alvo A , formando um estado intermediário excitado C , chamado núcleo composto. Consequentemente, este estado inicia um processo de decaimento a partir da evaporação da partícula b , transformando-se no núcleo residual B .



A seção de choque de produção dos resíduos por evaporação desta reação pode ser expressada como:

$$\sigma_{\text{ER}}(E_{cm}) = \sum_{J_C \geq 0} \sigma_{fus}(E_{cm}, J_C) P_{\text{SUR}}(E_C^*, J_C), \quad (1.14)$$

com

$$\sigma_{fus}(E_{cm}) = \frac{\pi}{k^2} (2J_C + 1) P_{fus}(E_{cm}, J_C), \quad (1.15)$$

aqui J_C é o momento angular total do núcleo composto e k é o número da onda do movimento relativo entre o projétil e o núcleo alvo.

Quando o núcleo composto é formado, ele tem uma energia de excitação $E^* = E_{cm} + Q$, onde E_{cm} é a energia do centro de massa, e o valor Q é a energia de formação do CN ($Q = BE_{\text{CN}} - BE_a - BE_A$). Da teoria da transição estatística do núcleo, onde se pressupõe a equiprobabilidade de todos os estados acessíveis do sistema, podemos expressar as probabilidades de transição como as razões entre o número de estados. As larguras parciais de decaimento através dos diferentes canais de emissão podem ser obtidas pelas equações que veremos a seguir. No formalismo de Hauser-Feshbach [53], a largura parcial de decaimento do núcleo composto de energia de excitação E^* e momento angular total J_C para a evaporação da partícula leve a é:

$$\Gamma_a(E^*, J_C) = \frac{1}{2\pi\rho_C(E^*, J_C)} \int de_a \sum_{S_B} \sum_{j=|J_C-S_B|}^{J_C+S_B} \sum_{l=|j-s_a|}^{j+s_a} T_l(e) \rho_B(E^* - B_a^{sep} - E_a^{Coul} - e_a, S_B) \quad (1.16)$$

onde S_B é o spin do núcleo filho, s_a , l e j são os spins totais e momento angular da partícula evaporada, e_a , E_a^{Coul} e B_a^{sep} são as energias cinética, Coulombiana e de separação, T_l é o seu coeficiente de transmissão ou o fator barreira de penetração, ρ_B e ρ_C são as densidades de níveis do núcleo filho e do núcleo composto, respectivamente. Os somatórios incluem todos os momentos angulares acoplados entre os estados inicial e final.

Para energias de excitação muito baixas, as larguras parciais de decaimento por evaporação de partículas leves e radiação gama podem ser comparáveis e, portanto, pode ser importante incluir a emissão de raios gama para modelar corretamente o processo de desexcitação do núcleo. Quando a energia de excitação está abaixo da energia de ligação do último nucleon e também menor que a barreira de fissão ($E^* < B_f$), o núcleo não pode mais evaporar partículas leves ou sofrer a fissão. E o canal de desexcitação é apenas o de os raios gama. A largura do canal de emissão de raios gama pode ser obtida como [54, 55]:

$$\Gamma_\gamma^L(E^*, J_C) = \frac{1}{2\pi\rho_C(E^*, J_C)} \int_0^{E^*} \sum_{I=|J_C-j|}^{I=J_C+j} f_L(e_\gamma) e_\gamma^{2L+1} \rho_C(E^* - e_\gamma, I) de_\gamma, \quad (1.17)$$

onde I representa o momento de inércia do núcleo, L define a multipolaridade da radiação gama, é geralmente assumido que as transições sejam do tipo dipolo elétrico ($L = 1$), a função de intensidade (f_{E1}) pode ser parametrizada da seguinte forma [56]:

$$f_{E1} = 3.31 \cdot 10^{-6} (MeV^{-1}) \frac{(A-Z) \cdot Z}{A} \frac{e_\gamma \Gamma_0}{(E_0^2 - e_\gamma^2)^2 + (e_\gamma \Gamma_0)^2}, \quad (1.18)$$

com

$$E_0 = \frac{167.23}{A^{1/3}\sqrt{1.969 + 14.074 \cdot A^{-1/3}}}, \quad (1.19)$$

e

$$\Gamma_0 = 5 \text{ MeV (para núcleos pesados e superpesados)}. \quad (1.20)$$

A largura do canal de fissão é calculada a partir da teoria proposta por Bohr-Wheeler para a fissão simétrica [57]:

$$\Gamma_{fiss}^{BW}(E^*, J_C) = \frac{1}{2\pi\rho_C(E^*, J_C)} \int de \rho_C(E^* - B_f(J_C) - e, J_C, \beta_2^{s.d.}), \quad (1.21)$$

onde a densidade de nível no integrando é avaliada no ponto de sela $\beta_2^{s.d.}$, $B_f(J_C)$ é a barreira de fissão dependente do momento angular total (barreira de fissão + energia rotacional do estado fundamental) e “ e ” é a energia cinética do grau de liberdade na fissão.

A densidades de níveis núcleo ρ , pode ser expressada como [58]:

$$\rho(E, J, \beta_2) = \text{const} \cdot K_{coll}(\beta_2) \frac{2J+1}{E^2} \exp(2\sqrt{a \cdot [E - E_{rot}(J)]}) \quad (1.22)$$

onde K_{coll} define a contribuição dos efeitos coletivos. Esse termo é conhecido na literatura como “*density enhancement*” [59].

1.2.2 Dissipação nuclear

Na seção anterior 1.2, foi considerado o modelo de decaimento estatística proposto por Weisskopf [60], onde a largura do canal de fissão é calculada por 1.21, obtida a partir da teoria da fissão proposta por Bohr e Wheeler [57]. Essa maneira de descrever o processo de fissão foi extremamente bem sucedida até a década de 1980. Na época, melhoras nas técnicas e na instrumentação mostraram que as medições das multiplicidades de nêutrons eram menores do que as previstas pelo modelo estatístico. Esses resultados

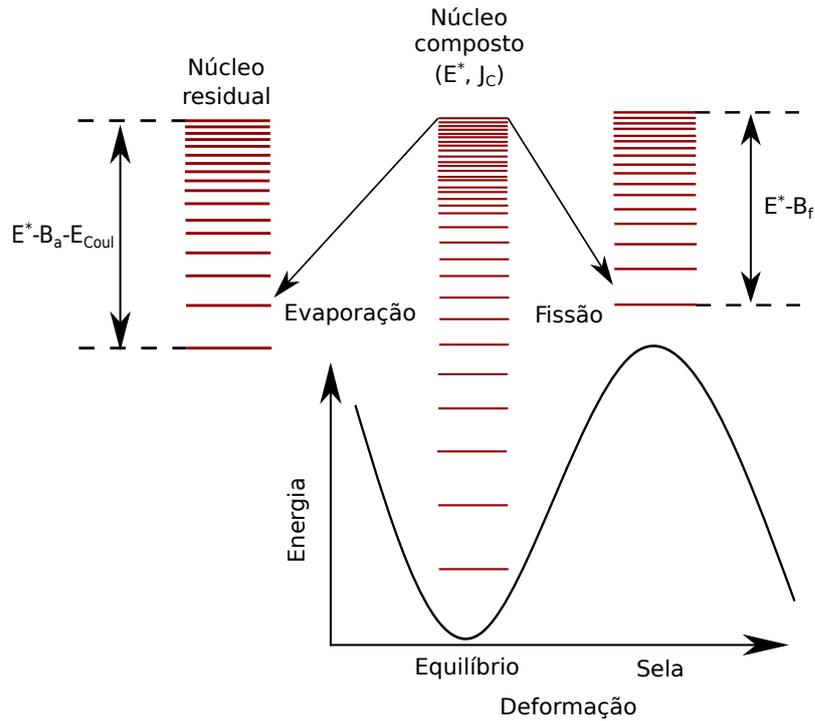


Figura 1.2: Diagrama mostrando os processos de decaimento por emissão de núcleons ou partículas leves em competição com o processo de fissão.

experimentais foram previstos pelos trabalhos teóricos de Kramers [61], Grangé e Weidenmüller [62–65]. Nestes trabalhos, foi presumida uma diminuição na largura do canal de fissão, o que causou um aumento na multiplicidade de nêutrons. Experimentos subsequentes sugeriram que os movimentos coletivos dos núcleos compostos excitados são superamortecidos (“*overdamped*”), e consistentes com os resultados obtidos por Kramers [61] na década de 40, onde sugeria a presença de efeitos de viscosidade na fissão nuclear. Consequentemente, excessos de partículas e raios γ provenientes do decaimento do CN passaram a ser analisados a partir da incorporação de um parâmetro de viscosidade e um efeito transitório (“*transient effect*”) permitindo obter o fluxo de fissão a partir de um valor zero.

A solução analítica proposta por Kramers [61] leva a uma largura do canal estacionário dependente do coeficiente de atrito β_{diss} . Esta largura corresponde a um regime

estacionário da equação de Fokker-Plank e é dado pela seguinte expressão:

$$\Gamma_{fiss}^K = \Gamma_{fiss}^{BW} \left(\sqrt{1 + \eta^2} - \eta \right) \quad (1.23)$$

onde Γ_{fiss}^{BW} é a largura da fissão definida em 1.21 por Bohr-Wheeler, $\eta = \frac{\beta_{diss}}{2\omega_{s.d.}}$ é o coeficiente reduzido de atrito e $\omega_{s.d.}$ é a frequência de oscilação para a aproximação da superfície de energia potencial do sistema no ponto de sela a um oscilador harmônico. A correção de Kramer é da ordem de $(1-30) \times 10^{21} s^{-1}$.

Outra abordagem do processo de dissipação nuclear é o estudo dinâmico e estocástico do processo de fissão realizado através da equação de Langevin [51, 66–71]. Esta descreve a evolução temporal da forma nuclear assumindo que forças conservativas, de atrito e flutuantes atuam sobre ela. Essas equações têm a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= (m^{-1})_{ij} p_j, \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial q_i} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} (m^{-1})_{jk} p_j p_k - \gamma_{ij} (m^{-1})_{jk} p_k + g_{ij} F_j(t) \end{aligned} \quad (1.24)$$

aqui q_i e p_i são as coordenadas generalizadas e os correspondentes momentos canônicos conjugados, respectivamente. Os termos $\gamma(q_i)$ [72], $m(q_i)$ [73] e $U(q_i)$ [74, 75, 75] são os termos macroscópicos da equação, os tensores de fricção, inércia e a superfície de energia potencial, respectivamente. Devido ao teorema da flutuação-dissipação que relaciona o coeficiente de difusão g_{ij} e a temperatura do banho térmico T , satisfaz-se a relação $D_{ij} = \gamma_{ij} T$ [76]. A temperatura de banho térmico é obtida considerando o núcleo como um sistema fermiônico e, portanto, $T = \sqrt{E_{int}/a(q)}$ onde E_{int} é a temperatura nuclear e $a(q)$ o parâmetro de densidade dos níveis. Por último F_i é uma força aleatória que cumpre as condições $\langle F_j(t) \rangle = 0$ e $\langle F_i(t_1) F_j(t_2) \rangle = 2\delta_{ij}(t_1 - t_2)$. Assim, assume-se que a aproximação Markoviana é válida.

Nesta abordagem, um dos pontos essenciais é a parametrização da forma nuclear,

que deve permitir descrever a evolução contínua da forma de matéria nuclear. Uma parametrização normalmente usada neste tipo de estudo é a chamada “*Funny Hills parametrization*”, onde os parâmetros são (c, h, α_{asim}) . Estes caracterizam o núcleo da seguinte forma [77]:

$$\rho(z)^2 = \begin{cases} c^{-2}(c^2 - z^2)(Ac^2 + Bz^2 + \alpha_{asim}zc), & B \geq 0 \\ c^{-2}(c^2 - z^2)(Ac^2 + \alpha_{asim}zc) \exp(Bcz^2), & B < 0 \end{cases} \quad (1.25)$$

Aqui a superfície nuclear é construída em coordenadas cilíndricas, onde $\rho(z)$ é o raio polar definido da superfície ao eixo de simetria, neste caso o eixo z . O parâmetro c define alongamento nuclear (alongamento do núcleo, em unidades do raio nuclear esférico R_0 , é $2c$), h descreve a variação na largura do pescoço para um determinado alongamento, finalmente α_{asim} estabelece a assimetria de massa dos fragmentos. O parâmetro B é definido em [77] e é obtido com base em restrições geométricas, enquanto o parâmetro A é obtido a partir da condição de preservação do volume do núcleo deformado em relação ao volume do núcleo esférico inicial. Na figura 1.3 pode-se ver uma representação da evolução da forma de matéria nuclear em um processo de fissão obtido com essa parametrização. Além disso, é mostrada a superfície da energia potencial obtida com a parametrização projetada no plano c, h .

A evolução dos graus de liberdade coletivos é realizada seguindo a abordagem estocástica governada pelas equações de Langevin 1.24. O modelo dinâmico é proposto em analogia com o movimento de uma partícula Browniana; essa abordagem é possível porque a troca de energia entre graus de liberdade coletivos e o restante dos graus da liberdade de partículas independentes é pequena.

O tensor de inércia m_{ij} é obtido a partir da aproximação de Werner-Wheeler para um fluido incompressível e irrotacional, consulte o trabalho realizado de Davies et. al. [78]. Para o estudo do fenômeno da dissipação nuclear, supõe-se que o ambiente nuclear comporte-se como um gás de Knudsen. Onde os núcleons devidos ao valor do

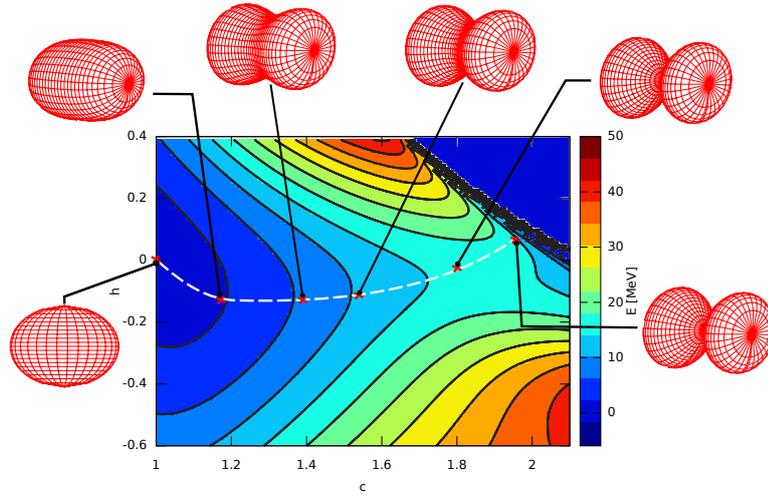


Figura 1.3: Representação ilustrativa da superfície de energia potencial de um núcleo, projetado no plano paramétrico (c, h - vide texto), para diferentes formas do sistema nuclear em diferentes configurações.

caminho livre médio são considerados não interagindo entre si, mas sim consideram sua interação com as paredes do núcleo, produzindo assim o amortecimento do movimento da superfície nuclear. A dissipação de energia resultante das colisões dos núcleons com as paredes do núcleo pode ser quantificada como:

$$\frac{dE}{dt}(t) = \rho_M \bar{v} \oint \dot{n}^2 d\sigma \quad (1.26)$$

onde ρ_M é a densidade da matéria nuclear, \bar{v} é a velocidade média dos núcleons, \dot{n} é o componente normal da velocidade da superfície nuclear e $d\sigma$ é o elemento da superfície. Essa abordagem é conhecida como “*One-body dissipation*”.

Probabilidade de decaimento

A teoria das transições de estados pressupõe a acessibilidade de todos os estados. Então a probabilidade de decaimento do núcleo composto excitado por um determinado canal pode ser obtida a partir das larguras dos canais, $P_{decay} = \Gamma_{canal}/\Gamma_{total}$ onde Γ_{total} é a soma de todas as larguras dos canais, incluindo o de fissão: $\Gamma_{total} = \Gamma_f + \Gamma_n + \Gamma_\gamma$.

Por exemplo, se buscamos a probabilidade de sobrevivência (P_{SUR} - do inglês *Probability Survival*) de um resíduo de evaporação B , pela emissão de x nêutrons seria multiplicar as probabilidades de cada canal:

$$P_{\text{SUR}} = \prod_{i=1}^x \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f} \right). \quad (1.27)$$

Desta forma, todos os elementos da equação 1.14 são definidos a partir da seção de choque de produção de resíduos por evaporação. Como um exemplo na figura 1.4 são mostradas comparações das seções efetivas de produção de ER calculadas com modelos estatísticos de decaimento com dados experimentais. As reações mostradas são $^{249}\text{Bk}(^{48}\text{Ca}, xn)$, $^{243}\text{Am}(^{48}\text{Ca}, xn)$, $^{245}\text{Cm}(^{48}\text{Ca}, xn)$, $^{248}\text{Cm}(^{48}\text{Ca}, xn)$, $^{242}\text{Pu}(^{48}\text{Ca}, xn)$ e $^{244}\text{Pu}(^{48}\text{Ca}, xn)$, onde são estudados 4 canais de saída, $xn = 2n, 3n, 4n$ e $5n$ [79]. Como pode ser visto, os resultados experimentais são razoavelmente reproduzidos pelos cálculos teóricos.

1.3 Estado atual na síntese de SHE. Breve revisão experimental.

Reações de fusão fria

Como mencionado na introdução, dois tipos de reações de fusão por evaporação têm sido amplamente utilizados nas últimas décadas na síntese de SHE. Dependendo da energia de excitação, eles podem ser classificados como quente (*hot*) ou fria (*cold*). Desde os anos 70, a fusão a frio de ^{208}Pb e do ^{209}Bi , com feixes de íons pesados de massa média (^{48}Ca , ^{50}Ti , ^{54}Cr , etc), tem sido amplamente utilizada para a síntese de elementos pesados. Devido ao aumento do número atômico do par projétil-alvo, a energia cinética do projétil é basicamente usada para superar a barreira coulombiana do sistema. Como consequência, a energia de excitação do CN formado varia de 10 a 20 MeV, o que

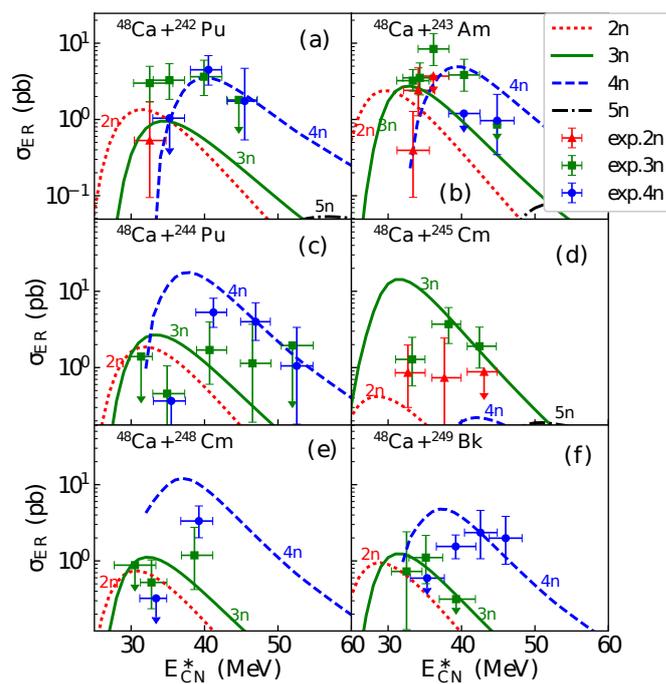


Figura 1.4: Comparação com dados experimentais de seções transversais de ER calculadas para as reações, (a) $^{48}\text{Ca} + ^{242}\text{Pu}$ (b) $^{48}\text{Ca} + ^{243}\text{Am}$ (c) $^{48}\text{Ca} + ^{244}\text{Pu}$ (d) $^{48}\text{Ca} + ^{245}\text{Cm}$ (e) $^{48}\text{Ca} + ^{248}\text{Cm}$ (f) $^{48}\text{Ca} + ^{249}\text{Bk}$.

corresponde a uma temperatura nuclear relativamente baixa. Portanto, esse tipo de reação é chamada “fria”.

Aumentando o valor do produto da multiplicação dos números atômicos do projétil e do alvo $Z_t Z_p$, a seção de choque da produção de SHE diminui drasticamente devido ao rápido aumento da repulsão coulombiana. A figura 1.5 [80] mostra os resultados das seções de choque de produção em função do número atômico dos núcleos compostos. Pode-se ver que a partir do elemento Rf ($Z = 104$), produto de reação $^{50}\text{Ti} + ^{208}\text{Pb}$ ($Z_p Z_t = 1804$) até o elemento 112 produzido na reação $^{70}\text{Zn} + ^{208}\text{Pb}$ ($Z_p Z_t = 2460$), a seção de choque diminui em 4 ordens de grandeza. Outra desvantagem dessa abordagem é que os núcleos compostos produzidos nas reações de fusão a frio têm um número relativamente baixo de nêutrons, o que geralmente é próximo à linha de estabilidade por emissão de prótons (*proton drip line*). Portanto, os SHEs produzidos por esse método seriam núcleos com vida média curta e longe da região de maior estabilidade esperada. Por exemplo, para produzir o elemento 112, o núcleo sintetizado possui apenas 165 nêutrons, enquanto a “ilha da estabilidade” está prevista em uma região de núcleos ricos em nêutrons, em torno de $N = 184$ [81–85]. Portanto, para sintetizar SHEs ricos em nêutrons, outro tipo de reação de síntese, a reação de fusão a quente, deve ser considerada.

Reações de fusão quente

Para obter núcleos próximos à “ilha da estabilidade”, isótopos mais ricos em nêutrons devem ser produzidos. Na realidade, é extremamente difícil produzir esses núcleos por reações de fusão fria. As reações de fusão a quente são usadas para alcançar a região da tabela de nuclídeos, que utiliza feixes de ^{48}Ca com alvos actínídeos (elementos com $89 \leq Z \leq 103$). O cálcio natural contém aproximadamente 97% do isótopo ^{40}Ca , mas apenas 0.187% de ^{48}Ca que é o isótopo mais pesado do elemento. Além da estrutura duplamente mágica de ^{48}Ca também desempenha um papel crucial na absorção da

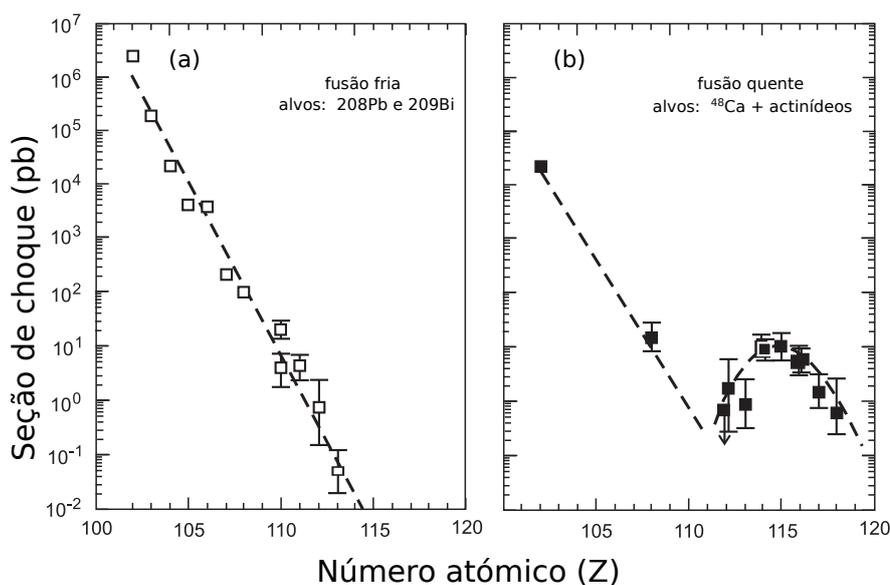


Figura 1.5: Seções transversais experimentais para as reações de fusão resultando na formação de SHE. Os dados obtidos para a reação de fusão a frio e as reações induzidas pelos íons de feixe de ^{48}Ca (fusão a quente) são apresentados nos painéis esquerdo (a) e direito (b) respectivamente.

energia incidente. Resultando em uma energia de excitação superior à obtida com as reações de fusão fria, sendo entre 30 e 60 MeV, o que leva à emissão de mais partículas leves no processo de desexcitação. Para sintetizar núcleos mais pesados, a reação de fusão quente seria favorecida porque o produto das cargas que interagem é geralmente menor que 2000 ($Z_1 Z_2 < 2000$), o que leva a uma diminuição da repulsão coulombiana em comparação às reações de fusão fria e, portanto, a probabilidade de fusão é relativamente maior. Como mostra a figura 1.5 [80], dados experimentais de reações de fusão quente comportam-se de maneira diferente quando o número atômico é maior que $Z \sim 112$. A seção de choque aumenta e parece atingir um máximo de dezenas de picobares no elemento $Z \sim 114$. No entanto, deve-se levar em consideração que a probabilidade de sobrevivência é menor devido à quantidade de nêutrons que evaporam no processo de resfriamento.

Atualmente, a reação de fusão quente parece ser a maneira mais eficiente de pro-

duzir elementos mais pesados. Entretanto, comparadas às reações de fusão fria, as quentes requerem instrumentação experimental mais sensível para separar os núcleos de interesse do fundo indesejado gerado durante a reação. Além disso, a identificação de elementos superpesados recém produzidos também é um problema a ser superado, dado que suas cadeias de decaimento α geralmente acabam em uma região da tabela de nuclídeos também desconhecida. Este é realmente um dos maiores desafios para os físicos experimentais desde que a cadeia de desintegração α é a principal maneira de identificar esses elementos, como veremos no próximo capítulo.

Concluindo, utilizando isótopos enriquecidos com o número máximo de nêutrons do grupo dos actinídeos (Pu, Am, Cm e Cf) com vida média grande, os elementos que vão de $Z = 114$ até $Z = 118$ foram sintetizados com sucesso no laboratório FLNR e confirmados em outros laboratórios com experimentos independentes (ver referências citadas em [86]).

Capítulo 2

Decaimento alfa do estado fundamental dos SHEs

O estudo da estabilidade de elementos pesados e superpesados por decaimento alfa é abordado neste capítulo. Este tipo de estudo, em conjunto com o decaimento por emissão de cluster, tem sido utilizado para identificar os efeitos do fechamento de camadas e sub-camadas. Comparando as meias-vidas em uma cadeia de decaimento alfa, uma vida media mais curta pode indicar a presença de um fechamento de camada no núcleo filho, enquanto um valor mais alto indica o fechamento da camada do núcleo pai fornecendo também informações sobre a da estabilidade do núcleo.

Verificou-se experimentalmente que a emissão de partículas alfa pode ocorrer com o núcleo filho estando em um estado excitado. No caso de núcleos par-par, esses processos geralmente ocorrem com uma probabilidade muito menor, uma vez que o valor de Q é reduzido. No entanto, a situação tende a ser mais complicada no caso de núcleos par-ímpar e ímpar-ímpar. Nestes últimos casos, devido a que é menos provável que um núcleon não emparelhado participe da formação de uma partícula alfa, e seu estado pode fazer parte de uma configuração excitada do núcleo filho. Nesse caso, é provável que o núcleo filho esteja nesse estado excitado após a emissão de uma partícula alfa.

Neste trabalho, consideraremos apenas as transições do estado fundamental do núcleo pai para estado fundamental do núcleo filho (*ground-state to ground-state transition*), excluindo assim do estudo as considerações acima assinaladas.

2.1 Teoria de decaimento α

A seguir faremos uma pequena apresentação de algumas das relações empíricas mais usadas na literatura, na obtenção dos tempos médios de vida por decaimento alfa de um núcleo em seu estado fundamental.

Relação semi-empírica de Viola-Seaborg-Sobiczewski (VSS)

Uma das relações mais famosas para calcular o tempo de meia-vida para o decaimento α é a fórmula de cinco parâmetros de Viola e Seaborg [87]:

$$\log_{10}(T_{1/2}) = (aZ + B)Q^{-\frac{1}{2}} + cZ + D + h_{\log} \quad (2.1)$$

onde o tempo de meia-vida é em segundos, Z é o número atômico do núcleo pai, os parâmetros a, b, c e d são determinados com um procedimento de ajuste a partir dos dados experimentais disponíveis. Na referência [88] estes parâmetros são obtidos, sendo $a = 1.66175, b = -85166, c = 0.20228$ e $d = -33.9069$. A quantidade h_{\log} assume valores diferentes, dependendo da paridade do núcleo:

- $h_{\log} = 0$ para Z-par e N-par
- $h_{\log} = 0.772$ para Z-ímpar e N-par
- $h_{\log} = 1.066$ para Z-par e N-ímpar
- $h_{\log} = 1.114$ para Z-ímpar e N-ímpar

Fórmula analítica proposta por Royer

Outra expressão analítica para obter os tempos de meia-vida para o decaimento α foi proposto por Royer [89]:

$$\log_{10}(T_{1/2}) = a + bA^{\frac{1}{6}}\sqrt{Z} + \frac{cZ}{\sqrt{Q_\alpha}} \quad (2.2)$$

onde A e Z são a massa atômica e a carga nuclear do núcleo pai, respectivamente. As constantes a, b e c são:

- $a = -25.31$ $b = -1.1629$ $c = 1.5864$ para Z-par, N-par,
- $a = -26.65$ $b = -1.0859$ $c = 1.5848$ para Z-par, N-ímpar,
- $a = -25.68$ $b = -1.1423$ $c = 1.5920$ para Z-ímpar, N-par,
- $a = -29.48$ $b = -1.1130$ $c = 1.6971$ para Z-ímpar, N-ímpar.

Lei do decaimento universal

Uma nova lei de decaimento universal foi proposta por Qi et al. [90, 91] para o estudo do decaimento por emissão de uma partícula alfa e emissão de cluster. Esta pode ser escrita como:

$$\log_{10}(T_{1/2}) = aZ_cZ_d\sqrt{\frac{A}{Q_c}} + b\sqrt{AZ_cZ_d(A_d^{\frac{1}{3}} + A_c^{\frac{1}{3}})} + c \quad (2.3)$$

onde $A = \frac{A_cA_d}{A_c+A_d}$ e as constantes $a = 0.4314$, $b = -0.4087$ e $c = -25.7725$ são determinadas por um procedimento de ajuste.

2.1.1 Modelo efetivo para o decaimento, ELDM

O modelo efetivo da gota líquida (ELDM) proposto por Gonçalves e Duarte tem sido aplicado com sucesso para determinar as meias-vidas do decaimento α [11, 16]. Também tem sido utilizado com sucesso no estudo de outros modos de decaimentos hadrônicos.

Do modelo ELDM proposto foi utilizado o modo de decaimento de cluster [16], já que esse modo descreve melhor o estudo do decaimento α . Nesse modo de decaimento, a partícula alfa, ou qualquer que seja o decaimento hadrônico, é considerada pré-formada no núcleo pai e depois emitida através de um processo de tunelamento através da barreira potencial efetiva. A massa dos fragmentos pode variar durante a fase molecular do processo de fragmentação, e o coeficiente de inércia do sistema é determinado pela aproximação de Werner-Wheeler ou de forma efetiva através da conservação da massa total do sistema dinuclear em separação. Uma descrição detalhada do modelo, pode-se encontrar nas referências [11–20]. A seguir, destacaremos apenas algumas das principais características do modelo.

Parametrização da forma nuclear

Para a construção da superfície de energia potencial (SEP) de deformação do NC, precisamos realizar uma parametrização da forma nuclear. No trabalho desenvolvido por Gonçalves e Duarte [11, 16] é descrita uma parametrização na qual, o processo de deformação de um núcleo pai divide-se em dois fragmentos, e na construção do SEP são consideradas as contribuições da energia Coulombiana, a tensão superficial entre os fragmentos e a energia potencial centrífuga, $V_{\text{eff}}(r) = V_c(r) + V_s(r) + V_\ell(r)$. Nessa construção tanto o núcleo pai quanto a fase final dos fragmentos são considerados esféricos. No entanto, durante a fase de pré-cisão os fragmentos são considerados calotas esféricas em contato por um círculo de base comum no qual pode haver transferência de massa e carga entre as partes do sistema. A parametrização usada é mostrada na figura 2.1, descrevendo o sistema durante a fase de separação. Nelas as coordenadas $R_{\mathcal{D}}$ e $R_{\mathcal{E}}$ são os raios das calotas do fragmento emitido e do núcleo filho respectivamente, ζ corresponde a distância entre os centros geométricos das calotas e ξ é a distância entre o centro do fragmento maior e o plano do círculo de base de raio a .

Tendo em conta os vínculos do movimento aos quais o sistema está sujeito, é possível

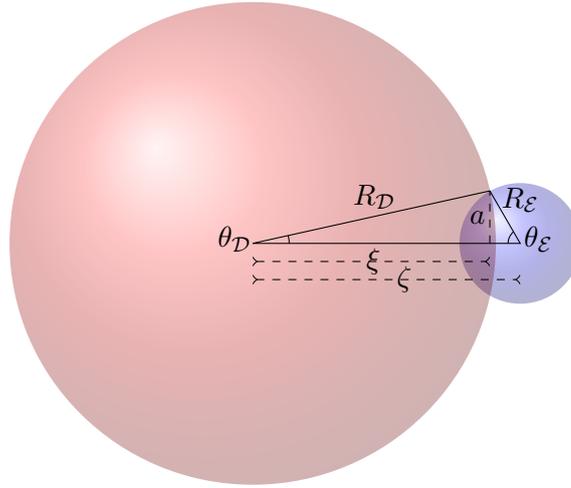


Figura 2.1: Representação esquemática da fase molecular do sistema dinuclear. O núcleo filho e os fragmentos emitidos (menores) têm raio R_D e R_E , respectivamente, e a distância entre seus centros geométricos é denotada por ζ . A variável ξ representa a distância entre o centro do fragmento mais pesado e o pescoço afiado circular do raio a . Todas essas variáveis são usadas na determinação da barreira potencial (Coulomb, superfície e total).

reduzir os graus de liberdade a um sistema unidimensional. Para isso foram criadas restrições nas relações de vínculo durante a dinâmica do processo. Uma dessas restrições é manter o volume total do sistema, outra é considerar que as calotas têm uma base comum e finalmente considerou-se que o fragmento emitido têm o raio constante ao longo do processo.

Na construção da deformação SEP, são explicitamente consideradas as contribuições das energias Coulombiana e de tensão superficial. No modelo foi usada a expressão de Gaudin [92] para calcular energia Coulombiana para duas esferas com distribuições de carga uniformes. Enquanto o potencial de superfície é similar ao potencial do modelo de gota líquida, diferindo apenas na definição da constante de tensão superficial que nesse caso tem a seguinte forma:

$$\sigma_{\text{eff}} = \frac{Q - \frac{3}{5}e^2 \left[\frac{Z_p^2}{R_p} - \frac{Z_\xi^2}{R_\xi} - \frac{Z_D^2}{R_D} \right]}{4\pi \left(R_p^2 + \bar{R}_\xi^2 + \bar{R}_D^2 \right)}, \quad (2.4)$$

onde $Z_i e$ ($i = \mathcal{P}, \mathcal{E}, \mathcal{D}$) é a carga do núcleo pai, filho e emitido respectivamente. O raio final dos fragmentos é dado em termos do raio do núcleo pai:

$$\bar{R}_i = \left[\frac{Z_i}{Z_{\mathcal{P}}} \right]^{1/3} R_{\mathcal{P}}, \quad i = \mathcal{E}, \mathcal{D}, \quad (2.5)$$

onde $R_{\mathcal{P}} = r_0 A_{\mathcal{P}}^{1/3}$ é o raio do núcleo pai e r_0 é o parâmetro do raio nuclear. Este último parâmetro no modelo é livre e seu valor é determinado pelos dados experimentais. Esta definição da tensão superficial (σ_{eff}) estabelece o caráter efetivo do modelo, uma vez que a diferença entre as energias das configurações inicial e final do sistema reproduz a energia liberada, $Q = M_{\mathcal{P}} - M_{\mathcal{E}} - M_{\mathcal{D}}$. Os efeitos das camadas, por sua vez, são introduzidos no modelo através das massas dos núcleos.

2.1.2 Tempos de meia-vida α dos SHE.

Com a redução dos graus de liberdade do sistema para um problema unidimensional, a taxa de transição quântica do estado inicial para o estado final do sistema foi determinada a partir da teoria do decaimento alfa de Gamow [9]. Onde o fator de penetração é calculado sob a suposição de que o sistema realiza um tunelamento da barreira potencial de altura $V - Q_{\alpha}$. As contribuições das partículas independentes são levadas em consideração a partir dos efeitos das camadas que aparecem no valor Q_{α} . Eles atuam diretamente na altura e largura da barreira efetiva. O fator de penetrabilidade (\mathcal{P}), é calculado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{P} = \exp(-G), \quad (2.6)$$

onde G é fator de Gamow, relacionado ao tunelamento da barreira. Isto é obtido a partir da aproximação de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB), e é calculado como:

$$G_{\alpha} = -\frac{2}{\hbar} \int_{R_1}^{R_2} \sqrt{2\mu_{\text{ww}}(r)[V_{\text{eff}}(r) - Q]} dr, \quad (2.7)$$

aqui r é a separação entre os centros da partícula emitida e o núcleo residual; $V_{\text{eff}}(r) = V_c(r) + V_s(r) + V_l(r)$ é o potencial efetivo [11, 16]; μ_{ww} é a massa reduzida do sistema obtida a partir da aproximação de Werner-Wheeler [11] para um fluido nuclear incompressível e irrotacional. Os limites de integração R_1 e R_2 são pontos de retorno clássicos definidos pela condição $V_{\text{eff}}(R_1) = V_{\text{eff}}(R_2) = Q$.

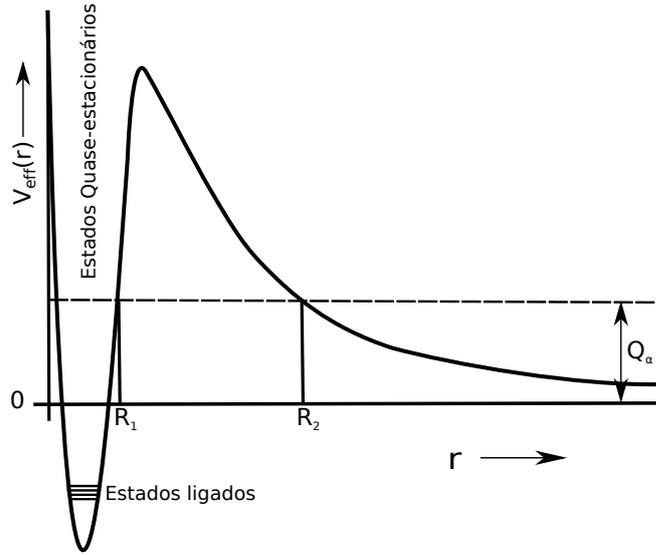


Figura 2.2: Representação esquemática da barreira potencial efetiva.

Definindo a constante de decaimento $\lambda = \nu_0 \mathcal{P}$, o tempo de meia-vida do sistema pode ser obtido como:

$$\tau = \frac{\ln(2)}{\nu_0 \mathcal{P}}, \quad (2.8)$$

onde ν_0 é um parâmetro livre associado à probabilidade de pré-formação do fragmento emitido. O valor deste parâmetro juntamente com o valor de r_0 , são determinados por procedimentos de ajuste, a fim de obter a melhor concordância com os tempos de meia-vida experimentais na regiões de núcleos bem conhecidos.

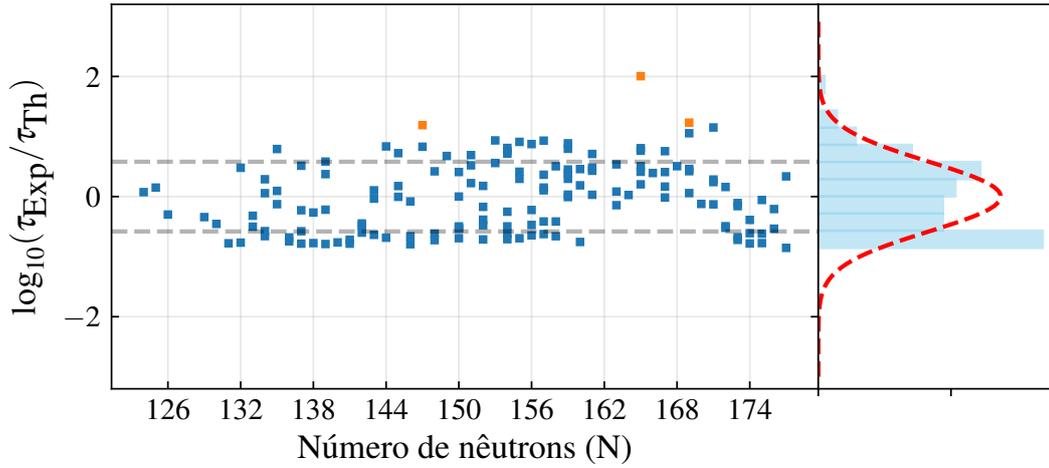


Figura 2.3: Diferença entre os tempos de meia-vida experimentais e calculados para o decaimento α , usados na calibração do ELDM. Em azul, são todos os pontos com diferença menor que 2 desvios padrão, enquanto em laranja são os que apresentam maior diferença. A linha cinza tracejada define o desvio padrão dos dados.

2.2 Resultados do ELDM

Devido ao sucesso na descrição dos processos de decaimento hadrônico do ELDM, apresentaremos apenas os resultados desse modelo. Para fazer previsões dos tempos de meia-vida do decaimento α , precisamos determinar os valores dos parâmetros ν_0 e r_0 . A escolha desses valores é feita em virtude da obtenção de uma reprodução dos valores experimentais, para isso minimizamos a raiz média quadrática:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{w-1} \sum_{i=1}^w [\log_{10}(\tau_{\text{Exp}}^i / \tau_{\text{Th}}^i)]^2}, \quad (2.9)$$

encontrando o par de valores (ν_0, r_0) desejado. Na expressão anterior, τ_{Exp}^i e τ_{Th}^i representam os tempos de meia-vida do decaimento alfa, experimental e calculado respectivamente, w é o número de dados experimentais disponíveis. Na calibração, usamos

um total de 149 elementos transurânicos emissores alfa, obtidos do banco de dados NUBASE2016 [93], do trabalho de Cui et al. [94] e referências citadas nesses trabalhos. Os valores obtidos foram $\nu_0 = 1.1 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ e $r_0 = 1.12 \text{ fm}$, com estes se obteve um desvio padrão entre os valores experimentais e teóricos igual a $\sigma = 0.56$. A figura 2.3 mostra os resíduos (desvio padrão), versus o número de nêutrons do núcleo pai. Como pode ser visto, existe uma concordância muito boa entre os dados experimentais e os calculados com o ELDM, tendo apenas 3 núcleos com valores superiores a dois desvios padrão, que são ^{248}Md , ^{274}Mt , ^{280}Rg . Estes foram representados na figura em cor laranja.

Capítulo 3

Energia liberada no decaimento alfa - Redes neurais bayesianas

Como foi mostrado no capítulo anterior, um dos elementos mais importantes no cálculo do tempo de meias-vidas através da equação 2.8, é a energia liberada durante o decaimento. Com isso, os efeitos da camada são introduzidos no modelo ELDM. Essa quantidade pode ser determinada experimentalmente em laboratório, mas se seu valor não estiver disponível, pode ser obtido por meio da diferença de massa dos núcleos envolvidos na reação:

$$Q_\alpha \equiv [M_p - (M_d + M_\alpha)], \quad (3.1)$$

onde M_p , M_d , M_α são as massas dos núcleos pai, filho e da partícula alfa emitida respectivamente. Como as massas dos núcleos também é uma quantidade determinada no laboratório com incertezas, da ordem dos keV, a determinação de Q_α mediante 3.1 implica uma incerteza pequena no valor obtido. No entanto, muitos núcleos dos quais existem evidências experimentais de sua existência, não têm determinados com precisão o valor de suas massas. Nesses casos, é necessário usar algum modelo de massa que permita estimar o valor da massa. Dada a importância crítica do valor previsto pelo

modelo de massa, diferentes modelos foram propostos ao longo dos anos.

3.0.1 Fórmula de massa de Duflo-Zuker

Neste capítulo, usaremos o modelo de massa de 10 parâmetros de Duflo-Zuker [95] (DZ). Escolhemos esse modelo por sua simplicidade e por apresentar um pequeno desvio padrão em relação aos dados experimentais. A robustez deste modelo de massa foi comprovada em várias ocasiões [96, 97]. Nas diferentes versões do modelo, ele é apresentado com diferentes quantidades de parâmetros: em sua versão original possui 28, outra 33 e a que usaremos neste trabalho 10 parâmetros. A seguir, discutiremos os diferentes componentes da formulação proposta no modelo DZ. Para mais detalhes, consulte as referências [95, 97–99].

A fórmula de massa DZ é um modelo de massa inspirado no modelo de camada. Isso simplesmente introduz correções microscópicas. A parte macroscópica do modelo de massa contém 6 termos:

$$E_{DZ_{mac}} = a_1(M^{\text{HO}} + S) - a_2 \frac{M^{\text{HO}}}{\rho} - a_3 V_C - a_4 V_T + a_5 V_{\text{TS}} + a_6 V_P \quad (3.2)$$

onde o termo “master” M^{HO} é definido como:

$$M^{\text{HO}} = \frac{1}{\rho} \left[\left(\sum_p \frac{n_\nu}{\sqrt{D_p^{\text{HO}}}} \right)^2 + \left(\sum_p \frac{n_\pi}{\sqrt{D_p^{\text{HO}}}} \right)^2 \right] \quad (3.3)$$

a soma ocorre para todos os orbitais ocupados por prótons e nêutrons até o nível de Fermi, $D_p^{\text{HO}} = (p+1)(p+2)$ é a degeneração da camada principal do oscilador harmônico do número quântico principal p , $n_\nu(p)$ e $n_\pi(p)$ são o número de nêutrons e prótons, respectivamente, na camada p do oscilador harmônico. O termo ρ é um fator de escala definido como:

$$\rho = A^{1/3} \left[1 - \left(\frac{T}{A} \right)^2 \right]^2 \quad (3.4)$$

O termo de *Coulomb* é definido como:

$$V_C = \frac{Z(Z-1) + 0.76[Z(Z-1)^{2/3}]}{r_c}, \quad (3.5)$$

onde

$$r_c = A^{1/3} \left[1 - \left(\frac{T}{A} \right)^2 \right]. \quad (3.6)$$

O termo de *assimetria* é expressado em termos de $T(T+1)$ onde $T = |N - Z|/2$, em vez da maneira usual $(N - Z)^2$, ficando:

$$V_T = \frac{4T(T+1)}{A^{2/3}\rho}. \quad (3.7)$$

O termo de *assimetria superficial* tem a forma:

$$V_{TS} = \frac{4T(T+1)}{A^{2/3}\rho^2} - \frac{4T(T-\frac{1}{2})}{A\rho^4}. \quad (3.8)$$

Finalmente, o termo de *paridade* é definido como:

$$V_P = \begin{cases} 2 - |I| & \text{para } N \text{ e } Z \text{ par} \\ |I| & \text{para } N \text{ e } Z \text{ ímpar} \\ 1 - |I| & \text{para } N \text{ par, } Z \text{ ímpar e } N > Z \\ 1 - |I| & \text{para } N \text{ ímpar, } Z \text{ par e } N < Z \\ 1 & \text{para } N \text{ par, } Z \text{ ímpar e } N < Z \\ 1 & \text{para } N \text{ ímpar, } Z \text{ par e } N > Z \end{cases} \quad (3.9)$$

Com esses 6 termos, define-se a componente macroscópica do modelo, construída a partir das contribuições de prótons e nêutrons abaixo do nível de Fermi, de acordo com a equação 3.3. Para uma descrição correta das massas nucleares, é necessário incluir

as correções microscópicas no modelo. Estas, no âmbito do modelo, são incluídos após considerar as interações entre 3 e 4 corpos. Para núcleos esféricos, o termo devido às interações de 3 corpos é:

$$s_3 = \frac{1}{A^{1/3}} \left[\frac{n_v \hat{n}_v (n_v - \hat{n}_v)}{D_v} + \frac{n_\pi \hat{n}_\pi (n_\pi - \hat{n}_\pi)}{D_\pi} \right], \quad (3.10)$$

e para 4 corpos:

$$s_4 = \frac{1}{A^{1/3}} \left[2^{(\sqrt{n_v} + \sqrt{n_\pi})} \left(\frac{n_v \hat{n}_v}{D_v} \right) \cdot \left(\frac{n_\pi \hat{n}_\pi}{D_\pi} \right) \right]. \quad (3.11)$$

A contribuição microscópica dos núcleos esféricos para a equação 3.2 é,

$$E_{DZ_s} = a_7 s_3 - a_8 \frac{s_3}{A^{1/3}} + a_9 s_4. \quad (3.12)$$

No caso de núcleos deformados

$$d_4 = \frac{1}{A^{1/3}} \left[\left(\frac{n'_v \hat{n}'_v}{D_v^{3/2}} \right) \cdot \left(\frac{n'_\pi \hat{n}'_\pi}{D_\pi^{3/2}} \right) \right], \quad (3.13)$$

com

$$E_{DZ_d} = a_{10} d_4. \quad (3.14)$$

Nessas expressões n_v e n_π são o número total de nêutrons e prótons de valência, $\hat{n}_i = D_i - n_i$ com $i = v, \pi$, onde $D_v(D_\pi)$ é a degenerescência de nêutrons e prótons na camada de valência, respectivamente.

Finalmente, a fórmula de massa Duflo-Zuker com 10 termos (DZ10) é calculada da seguinte forma:

$$\begin{aligned} E_{DZ} &= E_{DZ_{mac}} + E_{DZ_s} && \text{para } Z < 50 \\ E_{DZ} &= E_{DZ_{mac}} + \max(E_{DZ_s}, E_{DZ_d}) && \text{para } Z \geq 50 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Os diferentes coeficientes a_i da fórmula da massa, são obtidos a partir da minimização do desvio médio quadrático da expressão 3.15 em relação aos dados experimentais bem conhecidos.

3.1 Energia liberada no decaimento α

O principal objetivo deste trabalho é o estudo de SHE e, em particular, neste capítulo, utilizando a fórmula de massa DZ10 para obter os valores de Q_α da equação 3.1. O cálculo dos tempos de meias-vidas feitos a partir da equação 2.8, é uma quantidade extremamente sensível ao valor Q_α . Portanto, o uso dos valores obtidos com esse desvio padrão implicaria em várias ordens de grandeza na diferença entre o tempo de vida médio calculado e experimental. Por esse motivo, neste trabalho, propomos a construção de uma função residual que corrige a energia liberada Q_α^{Th} , a partir da diferença entre os dados experimentais e os previstos pelo modelo. Construimos a diferença a ser trabalhada pela rede neural bayesiana como:

$$\delta_\alpha^{\text{BNN}}(\mathbf{x}) = Q_\alpha^{\text{Exp}}(Z, N) - Q_\alpha^{\text{Th}}(Z, N), \quad (3.16)$$

Dessa forma, obteríamos valores de Q_α com menores valores para o desvio padrão. Nesta expressão, a energia teórica, $Q_\alpha^{\text{Th}}(Z, N)$, é definido da seguinte forma:

$$Q_\alpha^{\text{Th}}(Z, N) = M^{\text{Th}}(Z, N) - M^{\text{Th}}(Z - 2, N - 2) - M_\alpha, \quad (3.17)$$

onde $M^{\text{Th}}(Z, N)$ y $M^{\text{Th}}(Z - 2, N - 2)$ são as massas dos núcleos pai e filho, respectivamente, obtidas a partir do modelo de massa DZ10 [95], no caso do valor da massa da partícula alfa, M_α , é tomado seu valor experimental. Finalmente, nossa energia liberada

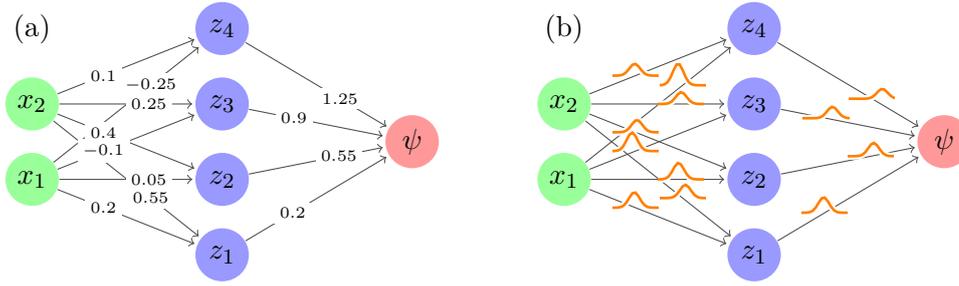


Figura 3.1: Rede neural multicamada com uma camada de unidades ocultas. Os valores de entrada são determinados pelos caso específicos de estudo de nosso interesse. Os valores de cada uma das unidades ou neurônios, são uma função da soma ponderada dos valores recebidos das outras unidades que estão conectadas a ele por meio de uma seta. No painel (a) da figura as conexões são valores escalares, no caso do painel (b) as conexões são distribuição de probabilidade.

corrigida seria construída da seguinte maneira:

$$Q_{\alpha}^{\text{BNN}}(Z, N) \equiv Q_{\alpha}^{\text{Th}}(Z, N) + \delta_{\alpha}^{\text{BNN}}(\mathbf{x}) . \quad (3.18)$$

3.2 Redes neurais

Dada a necessidade de modelar os valores $\delta_{\alpha}^{\text{BNN}}(\mathbf{x})$, recorreremos às redes neurais devido à sua flexibilidade e uso como “aproximadores universais” [100], capazes de modelar qualquer função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. As redes neurais mais comumente usadas são as chamadas redes *multilayer perceptron*, também conhecidas como redes *feed-forward*. Esse tipo de rede consiste em um conjunto de unidades de processamento, *nós*, *neurônios* ou também conhecidos como *perceptrões* organizados em camadas. Cada unidade em uma camada está conectada a todas as unidades na camada anterior. Essas conexões entre unidades são diferentes umas das outras e determinam o “conhecimento” da rede. Nesse tipo de rede neural, a informação flui em apenas uma direção, das unidades de entrada até as unidades de saída. Uma representação gráfica geralmente usada é mostrada no painel a da figura 3.1.

O modelo mais simples em problemas de regressão ou de classificação, usa uma

combinação linear de bases de funções não lineares. Em uma rede neural, esse conceito de modelo linear é estendido, onde cada função base é uma função não linear de combinações lineares das variáveis de entrada. Os coeficientes das combinações lineares são parâmetros a serem ajustados. Para manter a clareza, consideraremos as variáveis de entrada \mathbf{x} e os parâmetros $w = \{a, b, c, d\}$, portanto:

$$y(\mathbf{x}, c_j, d_j) = c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i. \quad (3.19)$$

Aplicando a função de ativação (h) ao resultado da combinação linear anterior, $y(\mathbf{x}, c_j, d_j)$, teremos:

$$z(\mathbf{x}, c_j, d_j) = h(y(\mathbf{x}, c_j, d_j)) = h\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i\right) \quad (3.20)$$

A expressão 3.20 é a operação básica de cada nó da rede. Devido ao fato de que cada camada da rede é composta por nós, a contribuição de cada camada é o resultado da combinação linear de seus nós e, portanto:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{w}) &= a + \sum_{j=1}^H b_j z_j \\ &= a + \sum_{j=1}^H b_j h\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i\right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

As funções de ativação são funções não lineares que são escolhidas de acordo com o objetivo da rede neural, em nosso caso, usaremos a função tanh a qual é amplamente utilizada em problemas de regressão, portanto, nossa rede neural de uma camada é definida como:

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = a + \sum_{j=1}^H b_j \tanh\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i\right), \quad (3.22)$$

onde $\mathbf{w} = \{a, b, c, d\}$ são os parâmetros da rede neural, H é o número de unidades ocultas da rede e, finalmente, I é o número de variáveis de entrada.

3.2.1 Redes neurais Bayesianas

Os métodos convencionais para obter os parâmetros das redes neurais são interpretados como uma implementação dos métodos estatísticos de máxima verossimilhança; essas abordagens podem sofrer de várias deficiências [41, 101]. Por outro lado, o uso de métodos estatísticos Bayesianos na obtenção dos parâmetros tem a virtude de descrever esses relacionamentos com base nas funções de distribuição [101], veja-se painel (b) da figura 3.1. Isso permite que as aproximações das funções sejam feitas com uma estimativa de suas incertezas.

Teoria de Bayes

Basicamente, existem 3 conceitos fundamentais na estatística Bayesiana: a função de probabilidade “a priori”, a função de “verossimilhança” e a função de probabilidade “a posteriori”. A probabilidade a priori representa o conhecimento anterior a qualquer medição que possuímos dos parâmetros. A função de verossimilhança relaciona os parâmetros do modelo com os dados experimentais. Essa função tem o papel de transformar conhecimento a priori sobre os parâmetros dos dados. Combinando a probabilidade a priori e a verossimilhança, obtemos a distribuição a posteriori. Esta representa uma melhoria do conhecimento que temos dos parâmetros do modelo a partir da observação dos dados. O teorema de Bayes pode ser expresso matematicamente da seguinte maneira:

$$p(w|x,t) = \frac{p(x,t|w)p(w)}{p(x,t)}. \quad (3.23)$$

Aqui $p(w|x,t)$ é a probabilidade a posteriori, $p(x,t|w)$ a função verossimilhança, $p(w)$ é a probabilidade a priori, finalmente o denominador $p(x,t)$ é conhecido como evidência do modelo e nada mais é do que um termo de normalização. A média (mediana ou moda) da distribuição a priori informa sobre as crenças a priori dos parâmetros, a variância desta distribuição inclui a incerteza sobre essas crenças. Portanto, no caso de ter uma

crença a priori forte, a variância é definida com um valor pequeno e, se a crença for fraca, a variação será grande. Na ausência de informações disponíveis, ou quando há informações fracas ou pouco confiáveis, normalmente é especificada uma distribuição que não influencia a distribuição a posteriori, deixando os dados “falarem por si”. Tais distribuições são conhecidas como priori não informativa ou distribuição a priori difusa ou vaga.

Nas redes neurais Bayesianas, o objetivo é construir a função de distribuição de probabilidade a posteriori dos parâmetros da rede, com base nos dados disponíveis. Dessa maneira, densidades de probabilidade são construídas em cada ponto do espaço de parâmetros da rede. Seguindo práticas padrão [101], assumimos que a função de probabilidade é uma distribuição multivariada normal

$$\mathcal{L}(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) \propto \exp\left[-\frac{\chi^2(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})}{2}\right], \quad (3.24)$$

onde a função objetivo χ^2 é definido como:

$$\chi^2(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{t_i - \psi(\mathbf{x}, \mathbf{w})}{\delta t_i} \right]^2, \quad (3.25)$$

aqui $t_i \equiv t(x_i)$ é o i -ésimo valor experimental com seu erro associado δt_i . A função $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ define nossa hipótese e relaciona os valores de entrada e saída da rede, essa função é definida em 3.22.

Inferência

A obtenção da distribuição a posteriori é o centro da análise bayesiana e toda a informação sobre os parâmetros é obtida a partir dela. Para prever o valor de uma quantidade desconhecida, x' , nosso modelo $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ é ponderado com o conhecimento acumulado sobre os parâmetros \mathbf{w} , quantizado na distribuição a posteriori $\mathcal{P}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D})$. Dessa forma, a chamada distribuição preditiva a posteriori é obtida, cuja função de distribuição é

obtida como:

$$\langle \psi(x') \rangle = \int \psi(\mathbf{x}', \boldsymbol{\theta}) \mathcal{P}(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{D}) d\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \psi(x'_j, \theta_j). \quad (3.26)$$

Esta *distribuição preditiva* para x' , é o resultado completo de uma inferência bayesiana, que pode ser usada para vários propósitos, dependendo da necessidade do usuário. A possibilidade de produzir essa distribuição é uma das vantagens da abordagem Bayesiana. Infelizmente, a solução dessa expressão pelos métodos tradicionais é praticamente intratável, devido à alta dimensionalidade do espaço dos parâmetros. É por isso que a solução da integral em 3.26 é aproximado pelos métodos de integração de Monte Carlo. Para amostrar a função a posteriori, usamos o método Monte Carlo Hamiltoniano (HMCMC) desenvolvido por Neal [101]. A grande vantagem da abordagem bayesiana é que a inferência é uma função de distribuição, que permite estimar a incerteza da previsão teórica:

$$\Delta\psi(x') = \sqrt{\langle \psi(x')^2 \rangle - \langle \psi(x') \rangle^2}. \quad (3.27)$$

Como foi mencionado anteriormente, a especificação do a priori é uma parte importante da análise Bayesiana. A função de distribuição a priori deve conter todas as informações que conhecemos sobre os parâmetros da rede neural. A priori, esses parâmetros podem assumir valores positivos e negativos e, com exceção do parâmetro a na equação 3.22, estes devem ser limitados a valores perto de zero para obter uma aproximação de $\delta_\alpha^{\text{BNN}}(\mathbf{x})$ que seja o mais suave possível. Seguindo o trabalho de Neal [101] atribuímos a cada parâmetro da rede um a priori Gaussiano com média zero e desvio padrão $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d$ respectivamente. Como não sabemos os valores que esses desvios padrão podem assumir, os deixamos como parâmetros livres positivos (os desvios são sempre positivos), sendo capazes de assumir valores definidos por uma distribuição a priori no intervalo $[0, 1/\sigma^2]$. Essas distribuições a priori, que são parâmetros de outra função de distribuição a priori, são chamadas de *hyper-priori*. Cada um dos quatro desvios padrão é modelado como uma distribuição gama definida com dois parâmetros

fixos [101], eles são escolhidos para maximizar as previsões.

3.3 Resultados e discussão da BNN

3.3.1 Ajuste do modelo de 10 parâmetros de Duflo-Zuker

Dado que a precisão da fórmula de massa DZ10 depende da região nuclear onde é feito o ajuste do coeficiente a_i , decidimos considerar os núcleos disponíveis no banco de dados AME2016 [102] com $Z \geq 52$. Além disso, levamos em consideração apenas dados com incerteza experimental de massa, σ_{exp} , menor que 100 keV. Com essas considerações, um total de 1355 núcleos foram escolhidos para o processo de ajuste de parâmetros. Os valores dos parâmetros que melhor ajustam o modelo aos dados experimentais são mostrados na tabela 3.1, o desvio padrão entre os resultados do modelo e os dados, σ , na última coluna da tabela.

Tabela 3.1: Valores de parâmetro para o modelo de 10 parâmetros Duflo-Zuker, ajustando 1355 massas nucleares experimentais com $Z \geq 52$ e incerteza inferior a 100 keV. O desvio padrão correspondente (σ) em relação aos dados experimentais é mostrado na última coluna (em MeV).

a_3	a_1	a_2	a_4	a_5	a_7	a_8	a_9	a_{10}	a_6	σ (MeV)
0.699	17.577	15.557	36.333	48.291	0.370	1.585	0.021	41.033	6.261	0.445

A escolha dessa região da tabela de núcleos para o ajuste foi devido a duas razões: 1) evitar a região de rápida flutuação de massa (em relação a Z e A), que está localizado na região dos núcleos leves; 2) concentrar o ajuste na região onde a maior quantidade de dados experimentais Q_α e $T_{1/2}$ de emissores alfa está disponível.

3.3.2 Energia liberada no decaimento α

O principal objetivo deste trabalho é o estudo dos SHEs e, em particular, neste capítulo, utilizando a fórmula de massa DZ10 calculada com os parâmetros da tabela 3.1 para

obter os valores de Q_α da equação 3.1. Para comparar as previsões do modelo, temos 443 emissores alfa com $52 \leq Z \leq 118$ extraídos do banco de dados NUBASE2016 [93], de [94] e referências citadas lá. Destes, 131 são par-par, 95 são ímpar-ímpar, 121 são par-ímpar e 96 ímpar-par. Para estimar a qualidade das previsões, analisamos a diferença entre as previsões e os resultados. O desvio padrão considerando os dados 443 foi de 0.44 MeV, essa diferença pode ser vista na figura 3.2. Como pode ser visto na região de interesse (região dos SHE), marcada em cor cinza, as diferenças entre o valor da previsão e o experimental são maiores que o restante dos núcleos. Nesta região, o desvio padrão foi de 0.73 MeV. Essa diferença não é apenas uma deficiência desse modelo e, como será

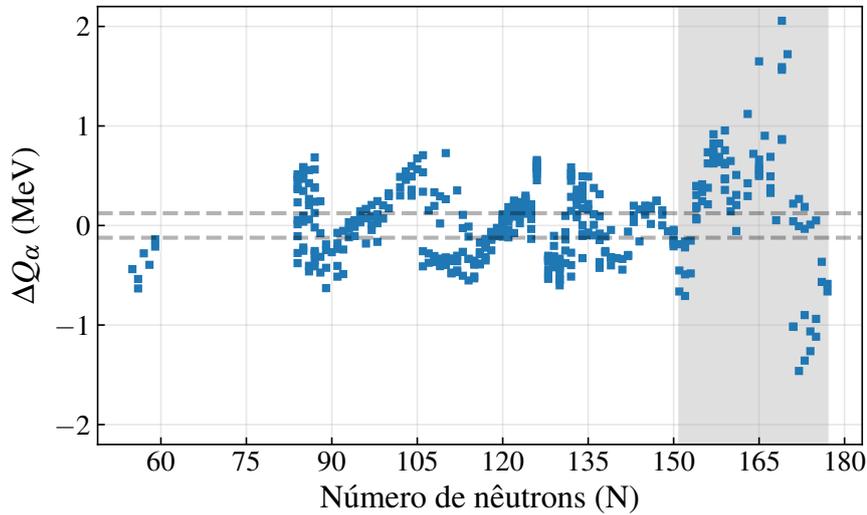


Figura 3.2: Diferença entre a energia alfa liberada teórica e experimental. A sombra cinza define a região SHE onde as correções são mais significativas.

visto no próximo capítulo, em maior ou menor grau, ela está presente nos modelos de massa que iremos estudar. Em grande parte, essa diferença é devido ao desconhecimento das estruturas internas dos núcleos naquela região quase desconhecida e, portanto, não é alcançada uma descrição correta de suas propriedades. Esses núcleos, devido ao seu alto número atômico, têm uma grande repulsão Coulombiana entre seus prótons, o que leva a uma forma nuclear extremamente deformada. Essas deformações implicam

configurações do estado básico que os modelos não conseguem descrever corretamente. Também permite o surgimento de novos números sub-mágicos que alteram a estabilidade dos núcleos e não são previstos pelos modelos.

3.3.3 Rede neural Bayesiana e sua aplicação ao processo de decaimento α

Para definir nossa rede bayesiana, tentamos usar o máximo possível de informações físicas no treinamento do algoritmo. Para isso, definimos um vetor de entrada tetradimensional composto por: (i) o número atômico, (ii) o número de nêutrons, (iii) a diferença entre o número de nêutrons e o número mágico mais próximo $\{8, 20, 28, 50, 82, 126\}$, (iv) a diferença entre o número de prótons e o número mágico mais próximo $\{8, 20, 28, 50, 82, 126, 184\}$. Portanto, os quatro componentes do nosso vetor de entrada são $\mathbf{x} = (Z, N, d_p, d_n)$, onde $d_p = |Z - Z_k|$ e $d_n = |N - N_k|$ (Z_k e N_k são os números mágicos mais próximos para prótons e nêutrons, respectivamente). Devido à quantidade limitada de dados com os quais temos que realizar nosso estudo (443 emissores alfa), uma consideração importante é o princípio da parcimônia estatística como princípio para melhorar a robustez. Portanto, limitamos o número de parâmetros que devem ser estimados em nossa rede, considerando apenas uma camada oculta de nós. O número de parâmetros em um BNN é a chave para seu desempenho. Devido à pequena quantidade de dados que temos, um aumento no número de parâmetros compromete o desempenho da rede. Em uma rede neural com L camadas e H neurônios em cada camada, o número de parâmetros pode ser calculado como: $(1 + |x|)H + [H(H + 1)]^{L-1} + (H + 1)|y|$, onde $|x|$ e $|y|$ são as dimensões dos vetores de entrada e saída da rede, respectivamente. Não há critério para determinar o número de parâmetros que devem ser usados em uma regressão linear para descrever um determinado conjunto de dados. Mas existem algumas recomendações, uma delas é conhecida como *One in ten rule* [103–106], que afirma que para cada parâmetro deve haver um mínimo de ~ 10 dados (eventos) no

caso de usar estatística frequentista, e ~ 4 dados no caso de estatística Bayesiana [37]. Portanto, com os 443 dados experimentais que temos a topologia da nossa rede Bayesiana é definida com uma camada ($L = 1$), um vetor tetra-dimensional de entrada ($|x| = 4$), e um unidimensional de saída ($|y| = 1$), tendo então um total de 17 neurônios ($H = 17$), veja figura 3.3.

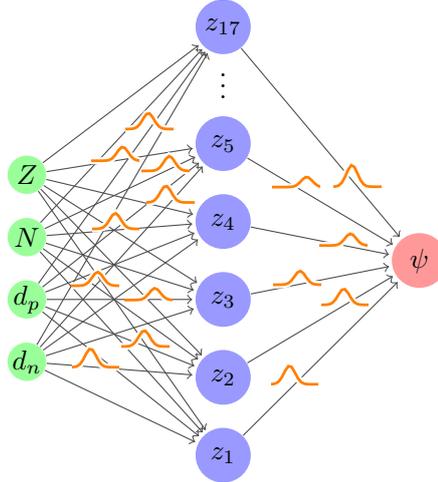


Figura 3.3: Rede neural Bayesiana com uma única camada oculta de 17 neurônios ($z_1 \dots z_{17}$), com quatro vetores de entrada (Z, N, d_p, d_n) e uma única saída (ψ).

Após selecionar os dados experimentais, definir nosso modelo de massa e a topologia de nossa rede, iniciamos o processo de implementação. O primeiro passo é o treinamento da rede neural ¹, o que requer a separação dos dados em dois conjuntos mutuamente exclusivos: (i) dados de aprendizado e (ii) dados de validação. O conjunto de aprendizado consiste em 364 núcleos selecionados aleatoriamente dos 443 que compõem nosso banco de dados. O conjunto de validação inclui os 79 núcleos restantes do banco de dados, com os quais avaliaremos o desempenho da rede após as distribuições de probabilidade que definem os parâmetros terem sido determinadas no processo de aprendizado. Para a construção da BNN, usamos o conjunto de códigos fbm (*Flexible*

¹O treinamento da rede neural é o processo de calibração em que, utilizando algoritmos de otimização, exploramos o espaço dos parâmetros em busca dos possíveis valores dos parâmetros da rede que resultem em um bom desempenho da mesma. No nosso caso, usando um BNN, usamos o algoritmo HMCMC e obtemos uma função de distribuição de probabilidade para cada parâmetro da rede.

Bayesian Modeling) descrito na referência [101] e que pode ser encontrado no endereço <https://www.cs.toronto.edu/~radford/fbm.software.html>.

Para avaliar a qualidade das previsões obtidas, calculamos o desvio quadrado médio entre os valores de energia liberados experimentais e os obtidos com a equação 3.18,

$$\sigma^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [Q_{\alpha}^{\text{Exp}}(Z,N) - Q_{\alpha}^{\text{BNN}}(\mathbf{x})]^2, \quad (3.28)$$

onde K é o número de dados usados ($K = 364$ no conjunto de treinamento e $K = 79$ no de validação.)

Tabela 3.2: Desvios da energia liberada no decaimento alfa. Separados em duas linhas, apresentamos os resultados para o subconjunto de treinamento e teste. Na segunda coluna, apresentamos o valor σ sem correção da BNN, na terceira coluna o valor σ com correção da BNN e na quarta coluna a diferença relativa entre eles.

		σ_{pre} (MeV)	σ_{post} (MeV)	$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$
Subconjunto de treinamento	de	0.444	0.178	0.60
Subconjunto de teste	de	0.403	0.247	0.38

Como pode ser visto na tabela 3.2, no conjunto de treinamento, a melhoria obtida foi de 60%, diminuindo o desvio quadrado médio de $\sigma_{\text{pre}} = 0.444$ MeV a $\sigma_{\text{post}} = 0.178$ MeV. No caso do conjunto teste quando aplicamos a correção da BNN, a melhora obtida foi um pouco menor (cerca de 38 %), com a diminuição do desvio de $\sigma_{\text{pre}} = 0.403$ MeV a $\sigma_{\text{post}} = 0.247$ MeV. Esses resultados mostram o poder preditivo da aplicação de BNN aos resíduos de Q_{α} . Além disso, a robustez do método é evidenciada mostrando um baixo nível de sobreajuste, melhorando os resultados no conjunto de treinamento e no conjunto de teste.

Além da análise realizada com base nas recomendações *One in ten rule*, em que

descobrimos que a rede deveria ter cerca de 17 neurônios, representamos o comportamento do desvio quadrático médio em função do número de neurônios na rede. Como pode ser visto na figura 3.4 com o aumento da complexidade da rede, os valores σ_{test} começam a diminuir quase monotonamente. No entanto, o comportamento dos valores σ_{treina} é diferente, atingindo um mínimo em torno da rede que possui 17 neurônios. Esse comportamento valida o raciocínio com base nas recomendações *One in ten rule*.

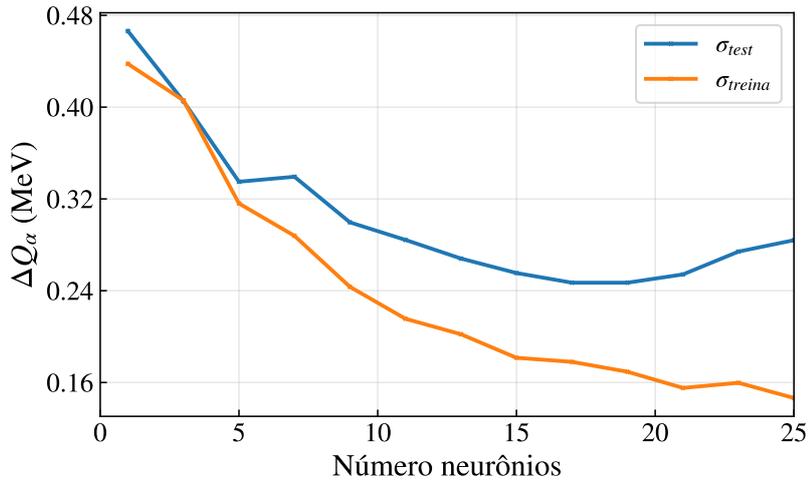


Figura 3.4: Desvio quadrático médio dos valores de Q_α em função da complexidade da rede, determinada pelo número de neurônios da camada oculta.

A validade dos resultados obtidos nos permite, então, calibrar a rede neural com o conjunto de dados completo (os 443 núcleos disponíveis) e prever valores de Q_α nas regiões do mapa do núcleo onde não há dados experimentais disponíveis. A diminuição do desvio padrão, levando em consideração todo o conjunto de dados, foi $\sigma = 0.432$ MeV a $\sigma = 0.122$ MeV, representando uma melhoria de 72%. Essa diferença entre os valores calculados e experimentais de Q_α , pode ser representada na figura 3.2 com cor laranja. Desvios entre o modelo de massa corrigido com o algoritmo BNN (Q_α^{BNN}) e os resultados experimentais diminuem claramente, reafirmando a importância da correção da BNN. É importante observar como o maior desvio encontrado na região de SHE (os núcleos sob a região cinza na figura 3.2) foi drasticamente diminuído. Esses resultados

destacam a importância de focar a atenção nas previsões nessa região, onde os dados são muito escassos e as previsões divergentes.

Além da melhoria óbvia na previsão dos valores Q_α , é possível revelar alguns aspectos da estrutura dos núcleos na região SHE, principalmente na identificação de alguns números mágicos ou sub-mágicos que não estavam presentes nas previsões do modelo de massa DZ10. Os núcleos que possuem números mágicos ou sub-mágicos devem ser relativamente mais estáveis que os núcleos adjacentes a ele. Podemos identificar esses valores a partir dos mínimos locais na curva Q_α vs o número de nêutrons no núcleo pai, N . Nas figuras 3.5 e 3.6 apresentamos a energia liberada no decaimento alfa em função do número de nêutrons, para os núcleos entre o Rf ($Z = 104$) e o Og ($Z = 118$), separados em quatro grupos de isótopos que cobrem o conjunto de dados experimentais existente.

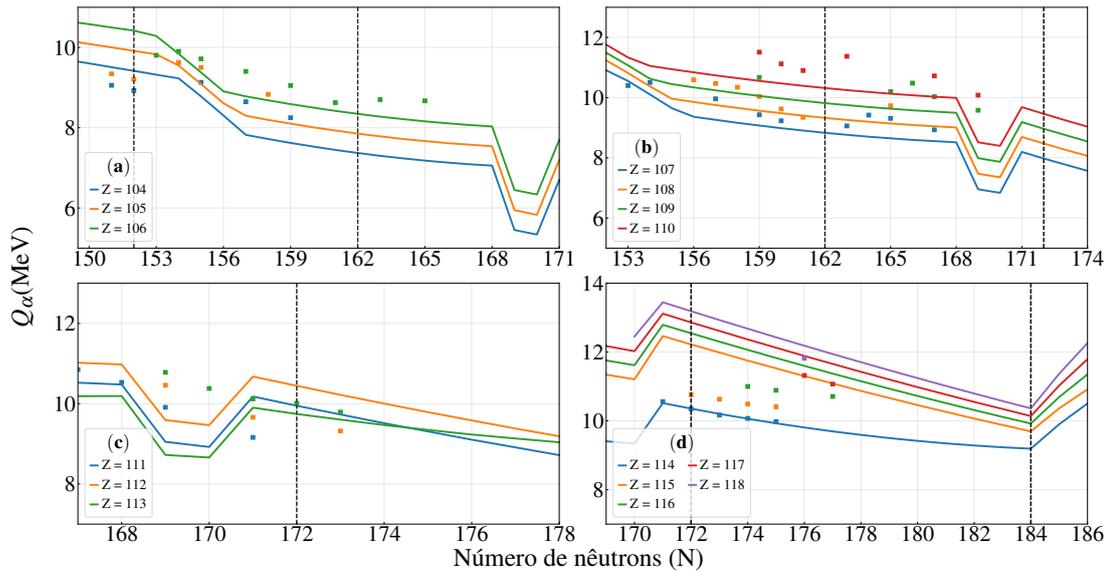


Figura 3.5: Energia liberada no processo de decaimento alfa, Q_α , obtido com o modelo de massa DZ10 com base no número de nêutrons N , na região de SHE $104 \leq Z \leq 118$. As linhas e pontos representam os valores calculados e experimentais, respectivamente. As linhas pretas verticais tracejadas representam alguns possíveis números mágicos ou sub-mágicos reportados na literatura.

Na figura 3.5 mostramos a energia liberada no decaimento alfa calculada com o

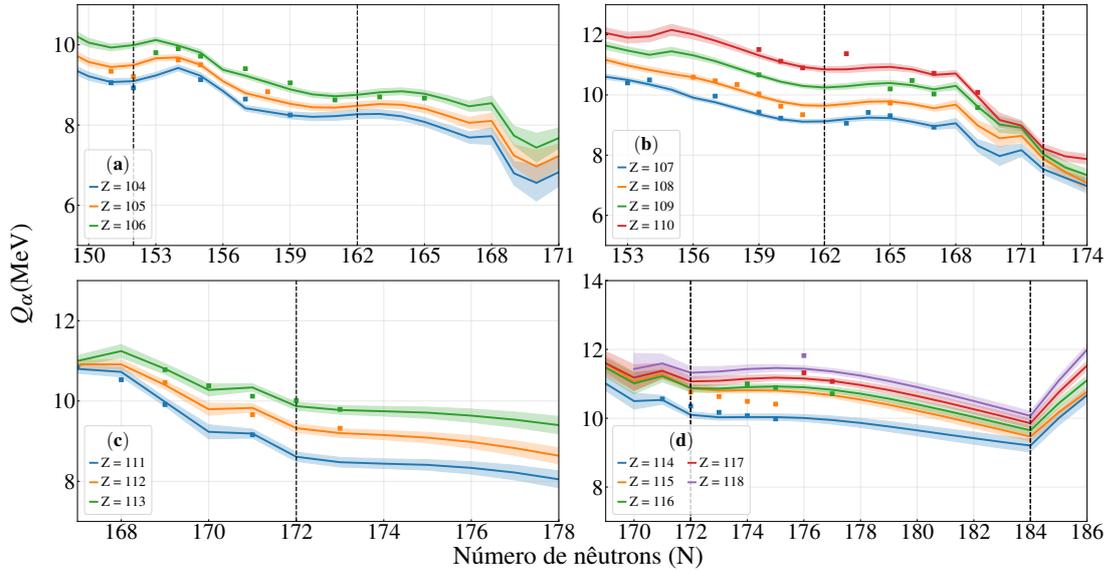


Figura 3.6: Como na Fig. 3.5 mas para os valores de Q_α obtido com a correção DZ10 + BNN. A área sombreada representa a incerteza Q_α^{BNN} .

modelo DZ10. Podemos ver que o modelo de massa DZ10 descreve aproximadamente o comportamento dos dados, embora, quantitativamente, o desvio permaneça significativo entre os valores teóricos e experimentais. Para esta região, o desvio padrão é $\sigma = 0.73$ MeV. Outro elemento importante a considerar é a diminuição significativa no valor de Q_α na região $168 \leq N \leq 171$ para todos SHE, e em $N = 184$ para os elementos na região compreendida entre os elementos Cn ($Z = 112$) e Og ($Z = 118$). Essa última diminuição é mostrada apenas no painel (d). De acordo com essas previsões do modelo DZ10, as duas regiões mencionadas acima mostram um aumento em sua estabilidade, o que pode resultar na conclusão de uma camada ou subcamada de nêutrons.

Na figura 3.6 os resultados da energia liberada com a correção BNN para decaimento alfa são mostrados. Nesta figura, a área sombreada representa a incerteza de um desvio padrão, associada ao cálculo da abordagem BNN. Como podemos ver, a maioria dos dados é reproduzida por previsões aprimoradas ou permanece dentro da faixa de incerteza de um desvio padrão. Os núcleos que apresentam o maior desvio entre valores

teóricos e experimentais, ΔQ_α , são ^{259}Sg , ^{269}Hs , ^{273}Ds , ^{272}Rg , ^{289}Mc , ^{290}Mc e ^{294}Og , onde $|\Delta Q_\alpha| = 0.32, 0.31, 0.52, 0.31, 0.32, 0.39$ e 0.38 MeV, respectivamente. Apesar dessas diferenças, nessa região, a abordagem BNN proporcionou uma diminuição da raiz do valor quadrático médio (rms- do inglês *root mean square*) para $\sigma = 0.16$ MeV, o que significa uma melhoria de 78 % em comparação com a anterior $\sigma = 0.73$ MeV. Na figura 3.6 se mostra que o comportamento qualitativo das curvas muda e a curva corrigida com o BNN parece ser mais precisa no número de nêutrons mágicos ou sub-mágicos.

Na região (a) da figura 3.6, também se observam três mínimos locais, dois deles estão muito próximos do número mágico de nêutrons relatado anteriormente em outros trabalhos (ver [5] e as referências citadas lá) . Aqui esses mínimos são destacados pelo procedimento BNN e estão próximos de $N \sim 152$ e 162 . Por outro lado, o modelo também prevê o mínimo localizado na região $168 \leq N \leq 171$ e persiste em todas as regiões da figura 3.6. Na região (b), um novo mínimo local pouco profundo aparece em $N \sim 162$, em trabalhos anteriores (ver [5] e as referências citadas lá) foi relatado como o número de nêutrons correspondente à ilha de estabilidade dos núcleos deformados centrados em ^{270}Hs . Nas regiões (b), (c) e (d), a profundidade do mínimo local em $168 \leq N \leq 171$ é suavizada significativamente em relação à região correspondente na figura 3.5. Portanto, o uso do modelo BNN claramente faz os valores teóricos de Q_α mais próximos dos dados. Essa melhoria resulta em uma suavização das curvas, principalmente à medida que o número atômico do núcleo pai aumenta. O número mágico esperado $N = 172$ não é evidente na figura e mais pesquisas experimentais são necessárias para confirmar o caráter mágico desse valor. Contudo, o candidato ao número mágico previsto pelo modelo de massa DZ em $N \sim 184$ indubitavelmente persistiu com a correção da BNN, permitindo prever que outros elementos mais pesados que o Og possam ser encontrados em experimentos futuros, tendo também número mágico de nêutrons $N = 184$.

3.3.4 Tempos de meias-vidas

Dos principais objetivos deste trabalho, consiste em fazer previsões dos tempos de meias-vidas do decaimento α para os SHE a partir da utilização do modelo ELDM [11, 16], e fazer uso dos valores, Q_α^{BNN} obtidos com a correção da BNN. No capítulo 2 encontramos os valores do par (ν_0, r_0) do ELDM que permite uma melhor reprodução dos dados experimentais. Sendo estes $\nu_0 = 1.1 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ e $r_0 = 1.12 \text{ fm}$, fornecendo rms do tempo de meia-vida $\sigma = 0.56$.

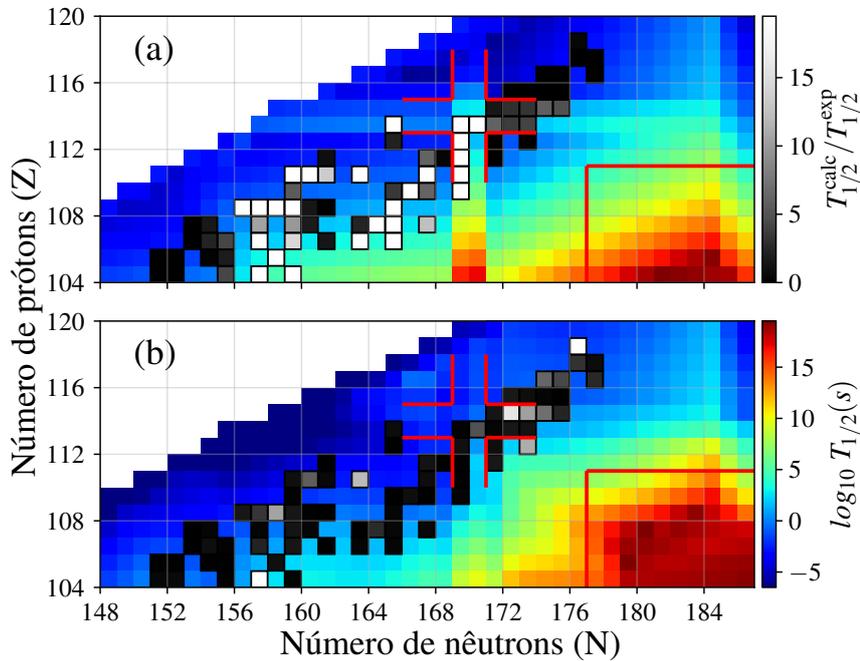


Figura 3.7: Mapa nuclear para a região SHE, que mostra os valores de meias-vidas do decaimento alfa. A meias-vidas experimental é marcada com quadrados pretos. A relação entre valores teóricos e experimentais é mostrada em escala de cinza. Na parte (a) os resultados foram obtidos com o modelo de massa DZ10 e em (b) os resultados foram obtidos com a correção DZ10 + BNN.

O cálculo da meias-vidas do decaimento alfa é extremamente sensível ao valor Q_α , portanto, uma incerteza significativa nos valores Q_α pode levar a grandes desvios nos valores de meias-vidas calculados pelo ELDM. Portanto, esses valores de meias-vidas

podem diferir dos dados em algumas ordens de magnitude. Na figura 3.7 mostramos os resultados das meias-vidas com base no número atômico e no número de nêutrons no núcleo pai. A figura 3.7(a) mostra as meias-vidas calculadas com os valores Q_α extraídos do modelo DZ10, enquanto a figura 3.7(b) apresenta os resultados obtidos com os valores Q_α^{BNN} . A maior diferença entre os dois painéis está na região de estabilidade em torno de ^{284}Fl ($Z = 114$ e $N = 170$). Esta região de estabilidade não é reproduzida na figura 3.7(b). A segunda diferença está na localização e topografia da região dos núcleos previstos de maior estabilidade. Na figura 3.7(a) esta região está abaixo de $Z = 108$ centralizada em $N = 184$, enquanto que na figura 3.7(b), esta região a região muda e seu centro fica em uma região mais ampla, possivelmente entre $106 \leq Z \leq 108$ e $N \geq 180$.

É importante esclarecer que neste trabalho estamos discutindo estabilidade em relação a um único modo de decaimento nuclear na região SHE. Por exemplo, o principal mecanismo de decaimento do Ds ($Z = 110$) parece ser o canal α , embora outros modos de emissão de cluster possam competir com o processo α , bem como a fissão espontânea e contribuir para a meias-vidas [107–109]. Para esses modos de decaimento, as correções microscópicas são mais relevantes. Portanto, é necessário um estudo detalhado sobre eles para melhor analisar a estabilidade de SHE perto da região $Z = 114$ e $N = 184$ mencionado acima.

Capítulo 4

Modelos nucleares de Massa

No capítulo anterior, foi proposto a construção de uma função residual que corrige a energia liberada Q_α^{Th} obtida com um modelo teórico de fórmula de massa, a partir da diferença entre os dados experimentais e os previstos pelo modelo. Para melhorar as previsões teóricas feitas com o modelo, usamos uma rede neural bayesiana como um aproximador universal. A diferença a ser trabalhada pela rede neural bayesiana, foi construída como:

$$\delta_\alpha^{\text{BNN}}(\mathbf{x}) = Q_\alpha^{\text{Exp}}(Z, N) - Q_\alpha^{\text{Th}}(Z, N), \quad (4.1)$$

neste capítulo, estenderemos o estudo a um conjunto maior de modelos nucleares.

Os modelos de massa nuclear têm sido uma das ferramentas mais importantes na compreensão das propriedades microscópicas e coletivas dos núcleos. Esses modelos, baseados nas relações locais, conseguem fazer previsões de núcleos a partir das regiões de núcleos conhecidos. No entanto, como as previsões são feitas longe desses núcleos, as incertezas das previsões começam a aumentar e as previsões divergem.

Até o momento, existem principalmente três categorias de modelos de massa nuclear: modelos macroscópico-microscópicos, modelos microscópicos e modelos macroscópicos. Modelos macroscópicos são capazes de fazer uma descrição das propriedades coletivas

das massas nucleares com discrepâncias da ordem de 3 MeV, mas não conseguem introduzir no modelo informações sobre estruturas de partículas independentes. Os modelos microscópicos baseiam-se fundamentalmente na teoria não-relativística de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) com o uso das forças de Skyrme ou Gogny; esses modelos atingiram precisão de cerca de 500 keV. Por outro lado, modelos macroscópicos-microscópicos são capazes, até o momento, de fazer uma descrição mais precisa das massas nucleares. Esses modelos são elaborados a partir da combinação das propriedades coletivas das massas e das correções de partículas independentes. Esses modelos conseguem prever massas nucleares com precisão inferior a 300 keV. Outro tipo de modelo de massa é o descrito no capítulo 3 (modelo de Duflo-Zuker [95]), que trataremos como fenomenológico. A seguir, serão introduzidas algumas das principais características dos diferentes modelos que iremos usar. .

4.1 Modelo da gota líquida (LDM)

A ideia de considerar o núcleo como uma gota de um fluido líquido uniformemente carregado e incompressível é atribuída a George Gamow [110]. Neste modelo, todos os constituintes são mantidos juntos devido à existência de tensão superficial. Essa abordagem baseia-se nas idéias de que a densidade da matéria nuclear é aproximadamente constante e independente do número de núcleons e, por outro lado, em que a energia de ligação por núcleon, exceto para núcleos leves ($A < 12$) é praticamente constante, $B(A, Z)/A \approx 8$ MeV/núcleon. A consequência da primeira é que o núcleo possui um raio nuclear proporcional ao número de núcleons, e ambos contribuem para explicar o caráter de saturação das forças nucleares. Com base nessas idéias, Carl Friedrich von Weizsäcker [111] em 1935 desenvolve o conhecido modelo de massa semi-empírica da gota líquida. Posteriormente Bethe e Bacher em 1936 [112] simplificaram os cálculos de von Weizsäcker e chegaram a versão da energia de ligação que é até hoje uma das

expressões mais familiares entre os físicos nucleares. Uma versão da referida formulação para energia de ligação pode ser escrita da seguinte maneira:

$$BE(A, Z) = a_V \cdot A - a_S \cdot A^{2/3} - a_C \cdot \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_A \cdot \frac{(A-2Z)^2}{A}, \quad (4.2)$$

onde os coeficientes da expressão a_V , a_S , a_C , a_A , são determinados empiricamente e correspondem aos termos volumétrico, superficial, coulumbiano e assimetria respectivamente. Apesar da simplicidade da expressão, os resultados obtidos fornecem uma descrição qualitativa e quantitativa aceitável das energias de ligação, massas nucleares, posição das linhas de estabilidade de prótons e nêutrons (*proton, neutron drip lines*), previsões de regiões de instabilidade devido ao decaimento alfa, etc. Mas, sem dúvida, seu maior sucesso ocorreu no final de 1938, após os primeiros resultados do trabalho de Meitner, Hahn e Strassmann bombardeando urânio com nêutrons [2]. Em janeiro de 1939 Meitner e Frisch publicaram um trabalho [3] em que explicam os resultados obtidos, com base na interpretação de que a fissão do núcleo pode ser explicada por meio do modelo da gota líquida.

O desvio quadrado médio de 1768 massas experimentais disponíveis em AME1995 [113] para núcleos com $N, Z \geq 8$ foi, $\sigma = 2.97$ MeV [114]. Na figura 4.1 pode-se ver os resíduos das previsões feitas com o modelo e os dados experimentais, os padrões observados em 8, 14, 28, 50, 82, 126 para nêutrons (ver figura) e para 8, 14, 20, 28, 50, 82 indicam a necessidade da inclusão dos efeitos das camadas, que foram omitidos na expressão. Esses conjuntos de valores são conhecidos como números mágicos e representam o número de núcleons que completam as diferentes camadas nucleares.

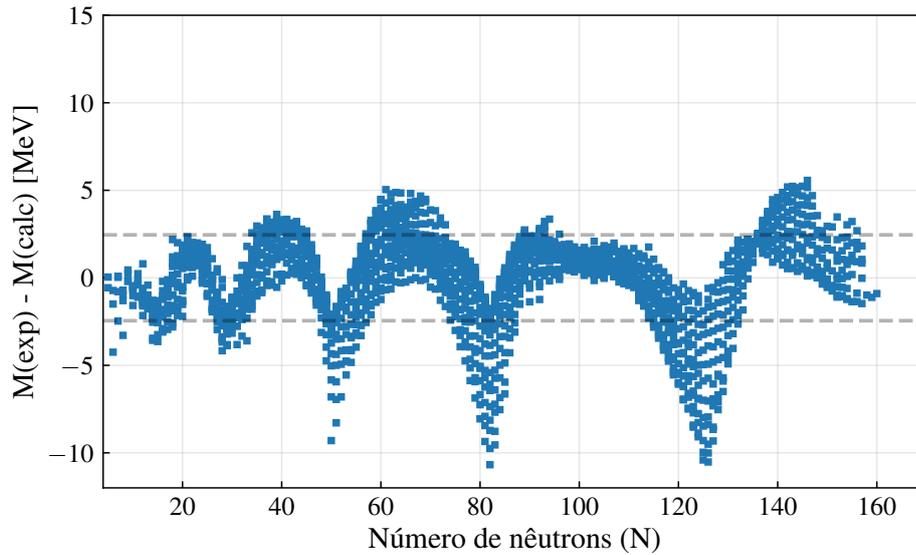


Figura 4.1: Desvio da fórmula da massas LDM, em função do número de nêutrons.

4.2 Modelos macroscópicos com correções microscópicas.

Finite Range Drop Model (FRDM)

Um elemento fundamental na melhoria desta formulação (LDM), foi a inclusão de maneira fenomenológica de correções microscópicas. Em 1966 Myers e Swiatecky propoem um modelo de gota líquida com a inclusão de correções de camadas e efeitos de deformações da matéria nuclear, este é conhecido pelo nome *droplet model* [81]. Posteriormente Strutinsky propõe o teorema de Strutinsky [115], o qual dá uma fundamentação teórica a estas correções microscópicas sendo visto como uma aproximação ao método do Hartree-Fock (HF) [116]. Para entender o teorema de Strutinsky, podemos pensar que a energia do núcleo pode ser dividida em duas contribuições, uma contribuição suave dada pela parte macroscópica, e uma contribuição oscilatória local devido ao fechamento das camadas, sendo máxima em algumas combinações de nêutrons e prótons, os números mágicos. As correções microscópicas são formadas pela soma das contribuições de

prótons e nêutrons.

$$B_{mic}(A, Z, \beta) = B_{shell}(A, Z, \beta) + B_{pairing}(A, Z, \beta) \quad (4.3)$$

Além de adicionar as correções de partículas independentes, Myers-Swiatecky não mais consideram o núcleo como esferas carregadas parametrizando a forma da matéria nuclear. Como consequência, os termos de Coulomb, energia superficial e contribuições microscópicas são parametrizados dependendo da forma da matéria nuclear. Na expressão 4.3 o parâmetro β representa o conjunto de coordenadas em que a deformação da matéria nuclear é parametrizada, aqui usamos os nomes do inglês para as camadas (*shell*) e emparelhamento (*pairing*). Portanto, a energia de ligação pode ser separada em dois termos, um macroscópico e um termo microscópico (eq. 4.3),

$$BE(A, Z, \beta) = B_{mac}(A, Z, \beta) + B_{mic}(A, Z, \beta). \quad (4.4)$$

Onde a parte macroscópica é expressada da seguinte forma [117]:

$$\begin{aligned} B(A, Z, \beta) &= a_V(1 - k_V I^2)A + a_S(1 - k_S I^2)B_1(\beta)A^{2/3} + f(k_{FrP})\frac{Z^2}{A} \\ &+ a_0 A^0 + c_1 \frac{Z^2}{A^{1/3}} B_3(\beta) - c_4 \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}} - c_a(N - Z) \\ &+ W \left(|I| + \frac{1}{A} \delta_{ZN} \delta_{Z_{odd}} \right) \\ &+ \begin{cases} \bar{\Delta}_p + \bar{\Delta}_n - \delta_{np} & \text{para } Z \text{ ímpar e } N \text{ ímpar} \\ \bar{\Delta}_p & \text{para } Z \text{ ímpar e } N \text{ par} \\ \bar{\Delta}_n & \text{para } Z \text{ par e } N \text{ ímpar} \\ 0 & \text{para } Z \text{ par e } N \text{ par} \end{cases} \\ &- a_{el} Z^{2.39} \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde

$$c_1 = \frac{3}{5} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \quad (4.6)$$

e

$$c_4 = \frac{5}{4} c_1 \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \quad (4.7)$$

As funções adimensionais dependentes da parametrização da forma nuclear em 4.5 $B_1(\beta)$ e $B_3(\beta)$ são dadas por:

$$B_1(\beta) = \frac{A^{-2/3}}{8\pi^2 r_0^2 a^4} \int_V d^3\vec{r}_1 \int_V d^3\vec{r}_2 \left(2 - \frac{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|}{a} \right) \frac{e^{-\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|/a}}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|/a} \quad (4.8)$$

$$B_3(\beta) = \frac{15A^{-5/3}}{32\pi^2 r_0^2} \int_V d^3\vec{r}_1 \int_V \frac{d^3\vec{r}_2}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|}{a_{den}} \right) e^{-\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|/a_{den}} \right] \quad (4.9)$$

Os valores do conjunto de parâmetros do modelo podem ser encontrados em [117].

Correções microscópicas

A obtenção da contribuição da componente microscópica segue os trabalhos de Strutinsky [115, 118]. A seguir, mencionaremos as principais idéias do método. Nele, uma densidade média dos níveis de energia é extraída dos níveis discretos de energia. O número de níveis de estado para uma determinada energia de Fermi ϵ , é dado por:

$$n(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} \frac{dn}{d\epsilon'} d\epsilon' = \int_{-\infty}^{\epsilon} g(\epsilon') d\epsilon', \quad (4.10)$$

onde a densidade de níveis discretos $g(\epsilon)$ pode ser expressa em termos dos níveis de partículas independentes ϵ_n como:

$$g(\epsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\epsilon - \epsilon_n). \quad (4.11)$$

O cálculo da correção de camadas requer a introdução de uma densidade média dos níveis de energia $\bar{g}(\epsilon)$. Para isso, as funções deltas do Dirac (δ) em $g(\epsilon)$ são substituídos por alguma função centrada no valor de energia apropriado ϵ . Uma opção simples e frequentemente usada para substituir a função $\bar{g}(\epsilon)$, é uma gaussiana:

$$\bar{g}(\epsilon) = \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp -(\epsilon - \bar{\epsilon}_i)^2/\gamma^2, \quad (4.12)$$

onde o parâmetro γ tem a função de suavizar os efeitos oscilatórios em \bar{g} e deve ser pelo menos maior que o maior valor médio de espaçamento entre as camadas. A partir dessa distribuição de nível médio suavizada, é possível obter a distribuição suavizada de energia de Fermi ($\bar{\lambda}$) que satisfaça:

$$\bar{n}(\bar{\lambda}) = N \quad (4.13)$$

onde N é o número total de núcleons considerados, nêutrons e prótons são tomados em separados. Finalmente, a correção de Strutinsky é:

$$\delta E_{shell} = \sum_{n=1}^N \epsilon_n - \int_0^N \bar{\epsilon}(n) dn, \quad (4.14)$$

onde $\bar{\epsilon}$ é a energia suavizada equivalente a ϵ_n . O segundo termo pode ser transformado usando \bar{g} como:

$$\int_0^N \bar{\epsilon}(n) dn = \int_{-\infty}^{\bar{\lambda}} \epsilon \bar{g}(\epsilon) d\epsilon. \quad (4.15)$$

Portanto, a equação 4.14 Pode ser reescrita em termos de níveis discretos de energia, deixando a correção em sua forma final:

$$\delta E_{shell} = \sum_{n=1}^N \epsilon_n - \int_{-\infty}^{\bar{\lambda}} \epsilon \bar{g}(\epsilon) d\epsilon \quad (4.16)$$

Finalmente o modelo FRDM de 1995, possui um total de 31 parâmetros indepen-

dentos, dos quais apenas 19 são ajustáveis por um procedimento de ajuste direto em dados experimentais de massa [117]. Os demais parâmetros foram obtidos a partir de dados de dispersão de íons pesados e de medições dos níveis de energia de partículas independentes [114]. Com o conjunto de dados experimentais disponíveis na base de dados do AME1995 [113], o desvio médio quadrático foi de $\sigma = 0.669$ MeV.

4.3 Fórmula de massa de Weizsäcker-Skyrme

A fórmula da massa de Weizsäcker-Skyrme (WS) como os modelos de natureza macroscópica-microscópica, é composta por um componente macroscópica e outra microscópica. Este modelo foi desenvolvido por Wang e Liu [119–123, 123] na tentativa de consolidar a formulação macroscópica-microscópica. Esta formulação em seu componente macroscópico contém pequenas modificações nos termos da contribuição Coulombiana, paridade, assimetria e contribuição de Wigner do LDM, para mais detalhes ver [119]. Para incorporar as deformações na descrição LDM, usam uma abordagem estendida de Thomas-Fermi juntamente com uma função de densidade de energia de Skyrme, considerando apenas deformações axiais dos núcleos, β_k :

$$E_{mac}(Z, N, \beta) = E_{LDM}(Z, N) \prod_{k \geq 2} (1 + b_k^2 \beta_k^2). \quad (4.17)$$

Os coeficientes b_k descrevem a contribuição da deformação nuclear para a energia macroscópica. Estes podem ser aproximados pela relação empírica [119]:

$$b_k = \left(\frac{k}{2}\right) g_1 A^{1/3} + \left(\frac{k}{2}\right)^2 g_2 A^{-1/3}, \quad (4.18)$$

onde os parâmetros g_1 e g_2 são determinados ajustando a fórmula da massa aos valores experimentais. Essa abordagem reduz bastante o tempo de cálculo dos núcleos deformados.

A componente microscópica incorpora as correções de camadas com o procedimento tradicional de Strutinsky. Considerando além das correções da camada principal (E_{sh}), as correções de camada de seu núcleo espelho (E'_{sh}) tem-se:

$$\Delta E_{mic} = c_1 E_{sh}(Z, N, \beta) + |I| E'_{sh}(Z, N, \beta). \quad (4.19)$$

O termo $|I|$ da conta das limitações de núcleos espelhos por simetria de isospin. Com isso, a precisão do modelo de massa melhora em 10%. Os níveis de energia de partículas independentes são obtidos a partir de um potencial de Wood-Saxon deformado axialmente. Simultaneamente, outras correções microscópicas são adicionadas empiricamente:

$$\Delta_{res}(Z, N) = \Delta_M(Z, N) + \Delta_P(Z, N) + \Delta_T(Z, N). \quad (4.20)$$

O primeiro termo, $\Delta_M(Z, N)$, considera os efeitos da simetria isospin nas correções de camadas. A melhoria do modelo de massa devido a essa correção é de cerca de 50 keV [122]. O segundo termo $\Delta_P(Z, N)$, considera as correções residuais de paridade dos núcleos e é proposto fenomenologicamente em [122]. Este termo melhora a previsão entre um 4% e 6 % respeito às massas e a energia de separação de nêutrons, respectivamente. O terceiro termo $\Delta_T(Z, N)$, explica a influência da deformação triaxial (ou tetraédrica). Finalmente, a fórmula de massa WS pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} E(Z, N, \beta) = -BE(Z, N, \beta) &= E_{mac}(Z, N, \beta) + \Delta E_{mic}(Z, N, \beta) + \Delta_{res}(Z, N) \\ &= E_{LDM}(Z, N) \prod_{k \geq 2} (1 + b_k^2 \beta_k^2) + \Delta E_{mic}(Z, N, \beta) \\ &+ \Delta_M(Z, N) + \Delta_P(Z, N) + \Delta_T(Z, N). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Esta apenas contém 16 parâmetros e fornece um desvio quadrado médio 0.336 keV [122] para 2149 núcleos do banco de dados AME03 [124]. Finalmente Wang e Liu [125] obtiveram uma melhora no poder preditivo da fórmula de massa usando técnicas de

reconstrução de imagem e as relações de Garvey-Kelson [126], sendo o rms obtido de 200 keV.

4.4 Fórmula de massa de Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov

O método HFB fornece uma teoria generalizada de partícula independente que unifica os procedimentos de Hartree-Fock e BCS. Portanto, esta formulação pode ser usada para descrever aspectos de deformação (interações de longo alcance das forças núcleon-núcleon), bem como correlações de paridade devido à atração de curto alcance. Os modelos HFB conseguiram atingir desvios quadráticos médios, perto de 0.6 MeV [127]. O ponto de partida da metodologia é a escolha de uma forma adequada de força efetiva. No modelo de massa HFB a usada é uma força estendida de Skyrme (contendo os termos dependentes do momento t_4 e t_5) [127, 128]:

$$\begin{aligned}
v_{ij} = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 P_\sigma) \frac{1}{\hbar^2} [p_{ij}^2 \delta(\mathbf{r}_{ij}) + \delta(\mathbf{r}_{ij}) p_{ij}^2] \\
& + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{p}_{ij} \cdot \delta(\mathbf{r}_{ij}) \mathbf{p}_{ij} + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 P_\sigma) n(\mathbf{r})^\alpha \delta(\mathbf{r}_{ij}) \\
& + \frac{1}{2} t_4(1 + x_4 P_\sigma) \frac{1}{\hbar^2} [p_{ij}^2 n(\mathbf{r})^\beta \delta(\mathbf{r}_{ij}) + \delta(\mathbf{r}_{ij}) n(\mathbf{r})^\beta p_{ij}^2] \\
& + t_5(1 + x_5 P_\sigma) \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{p}_{ij} \cdot n(\mathbf{r})^\gamma \delta(\mathbf{r}_{ij}) \mathbf{p}_{ij} \\
& + \frac{1}{\hbar} W_0(\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_j) \cdot \mathbf{p}_{ij} \times \delta(\mathbf{r}_{ij}) \mathbf{p}_{ij}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

onde $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2$, $\mathbf{p}_{ij} = -i\hbar(\nabla_i - \nabla_j)/2$ (é o momento relativo), P_σ é o operador de intercâmbio de spin e $n(\mathbf{r}) = n_n(\mathbf{r}) + n_p(\mathbf{r})$ é a densidade local total, onde $n_n(\mathbf{r})$ e $n_p(\mathbf{r})$ são as densidades de nêutrons e prótons, respectivamente. As correlações de paridade são introduzidas através do uso do método Bogoliubov. O termo de Wigner é introduzido adicionando dois parâmetros à expressão. A energia de ligação total $E_{tot} = E_{\text{HFB}} + W_W$, onde E_{HFB} é a energia de ligação obtida com o modelo HFB. O conjunto final de parâmetros chamado BSk27, onde 27 é o número de

parâmetros, obtidos a partir da otimização da fórmula de massa em relação às massas experimentais. No trabalho de Goriely, Chamel e Pearson [129] realizam o ajuste em relação a 2353 massas experimentais pertencentes ao banco de dados AME12 [130] obtendo um rms de 0.5 keV.

4.5 Resultados e discussão

Neste capítulo, usaremos um conjunto de 9 modelos de massa nuclear para obter os valores de Q_α da equação 3.1. Com os desvios dos valores experimentais, construiremos uma função residual de um BNN, com a qual corrigiremos a energia liberada obtida com os modelos. Os 9 modelos de massa estão agrupados em 3 categorias:

1. Cinco modelos macroscópicos-microscópicos: o modelo FRDM [131] na versão de 2016 [132], e quatro versões do modelo de massa de Weizsäcker-Skyrme (WS) proposto por Wang [119] i) WS3.2 [120], ii) WS3.6 [122], iii) WS4 [133] e iv) WS4RBF [121, 133].
2. Um modelo de massa puramente microscópico baseado na teoria não-relativista de Hartree-Fock-Bogoliubov com uma densidade de energia de Skyrme (HFB27 [128, 129]).
3. Finalmente, quatro modelos de massa fenomenológicos: o modelo de massa de Koura-Tachibana-Uno-Yamada (KTUY05 [134]), e três versões do modelo de Duflo-Zuker [95] [i] a versão de 31 parâmetros (DZ31), ii) a versão de 10 parâmetros (DZ10).

Para ilustrar a diferença entre as energias liberadas no decaimento alfa obtida com os 10 modelos de massa, consulte a figura 4.2. Em geral, pode-se observar que todos os modelos na região de SHE apresentam a maior diferença. Portanto, a importância de encontrar uma correção para as previsões teóricas nessa região é mantida.

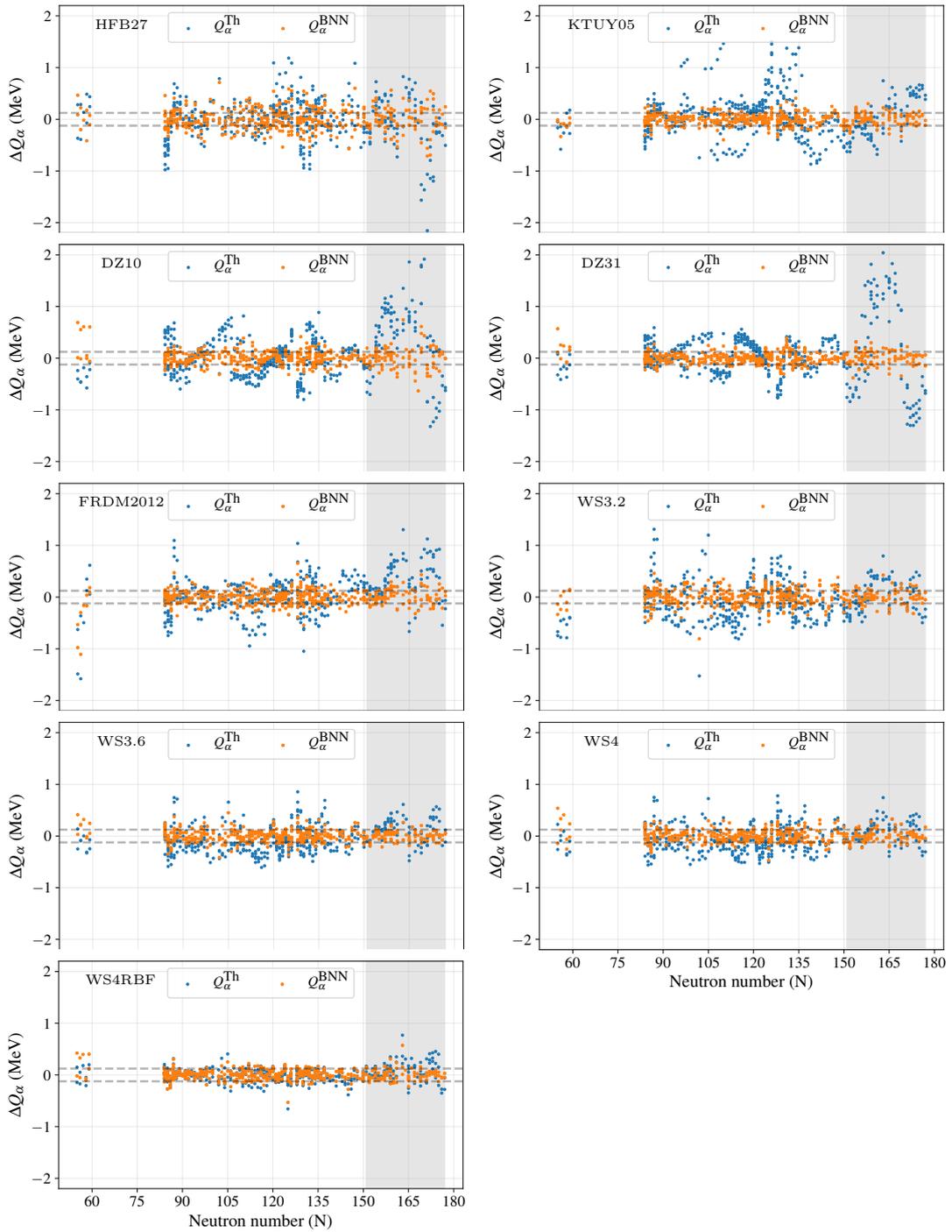


Figura 4.2: Diferença entre a energia alfa liberada teórica e experimental. Pontos marcados Q_α^{Th} e Q_α^{BNN} são os resultados de modelos teóricos e modelos teóricos + BNN respectivamente. Sombra verde define a região SHE onde as correções são mais significativas.

Seguindo a metodologia explicada no capítulo 3, onde separamos o conjunto de dados em dois conjuntos mutuamente exclusivos (conjunto de treinamento e teste), a fim de verificar o poder preditivo da rede neural. Os valores dos desvios quadráticos médios para os dois grupos podem ser vistos na tabela 4.1. Como pode ser visto em todos os modelos, são obtidas reduções nos desvios quadráticos médios nos dois grupos. Isto confirma o poder preditivo da rede neural e valida a flexibilidade da metodologia a ser aplicada com sucesso em todos os modelos.

Tabela 4.1: Desvios da energia alfa liberada calculada com os nove modelos de massa, separados no subconjunto de treinamento e no subconjunto de testes.

Modelo	HFB27	KTUY05	DZ10	DZ31	FRDM12	WS3.2	WS3.6	WS4	WS4RBF
Conjunto de treinamento									
σ_{pre} (MeV)	0.43	0.42	0.49	0.51	0.36	0.36	0.26	0.25	0.14
σ_{post} (MeV)	0.22	0.13	0.14	0.11	0.15	0.15	0.11	0.11	0.09
$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$	0.49	0.69	0.71	0.78	0.58	0.58	0.58	0.56	0.36
Conjunto de teste									
σ_{pre} (MeV)	0.29	0.43	0.43	0.44	0.31	0.37	0.26	0.24	0.12
σ_{post} (MeV)	0.21	0.37	0.17	0.14	0.21	0.20	0.14	0.14	0.11
$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$	0.27	0.14	0.60	0.68	0.32	0.46	0.46	0.42	0.08

Para fazer previsões de Q_α em regiões mais distantes dos núcleos com valores experimentais, calibramos a rede com todo o conjunto de valores experimentais. Os desvios obtidos após as correções podem ser vistos em laranja na figura 4.2, novamente, o algoritmo contribui para reduzir drasticamente os desvios entre previsões teóricas e valores experimentais. Na coluna 2 da tabela 4.2 os valores dos desvios antes da correção podem ser vistos e, na coluna 3 observamos os valores após a correção. A melhoria obtida em relação aos modelos teóricos é superior a 45% em todos os modelos, exceto no modelo WS4RBF. Para este modelo, a melhoria foi de 23%, mesmo que esse aumento relativo seja menor que o apresentado pelo restante dos modelos, podemos considerar que é uma melhoria significativa. Deve-se notar que este modelo é considerado um dos mais precisos atualmente, especialmente no estudo de núcleos superpesados [135–137].

Por outro lado, o modelo de massa DZ31 é o que apresenta maior melhoria, em torno do 77%. Isso pode ser atribuído em parte ao seu baixo poder preditivo em algumas regiões nucleares e portanto ter um grande desvio antes da correção, $\sigma = 0.50$ MeV.

Tabela 4.2: Desvios da energia alfa liberada calculada com os nove modelos de massa. Na segunda coluna, apresentamos o valor σ anteriormente à correção BNN, na terceira coluna o valor σ com a correção BNN, e na quarta coluna a diferença relativa entre eles.

Modelo	σ_{pre} (MeV)	σ_{post} (MeV)	$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$
HFB27	0.41	0.22	0.47
KTUY05	0.42	0.11	0.73
DZ10	0.48	0.15	0.68
DZ31	0.50	0.11	0.77
FRDM12	0.37	0.16	0.56
WS3.2	0.36	0.16	0.55
WS3.6	0.26	0.12	0.53
WS4	0.25	0.12	0.51
WS4RBF	0.14	0.11	0.23

Da figura 4.2, também podemos ver que os maiores desvios dos modelos ocorreram na região de SHE. Analisando as melhorias quantitativas apresentadas pelos modelos nessa região, vemos que elas são ainda mais impressionantes. Na coluna 2 da tabela 4.3 podemos ver os desvios dos modelos e, na coluna 3, os desvios após as correções. Novamente, o modelo que apresentou maior melhora foi o DZ31, sendo esta de 87%, enquanto o WS4RBF aprimorou um 44%.

Para uma representação gráfica desses resultados, mostramos os desvios quadráticos médios na figura 4.3. Deve-se notar que essas melhorias quantitativas são referentes à análise com os 443 núcleos com dados experimentais, variando de $Z=52$ até $Z=118$. Isso significa que um modelo com um desvio padrão do conjunto completo de dados não sendo

Tabela 4.3: Os mesmos resultados da tabela 4.2, mas levando em conta apenas os núcleos superpesados.

Modelo	σ_{pre} (MeV)	σ_{post} (MeV)	$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$
HFB27	0.60	0.27	0.55
KTUY05	0.38	0.12	0.68
DZ10	0.78	0.23	0.71
DZ31	1.00	0.14	0.87
FRDM12	0.40	0.16	0.61
WS3.2	0.29	0.14	0.51
WS3.6	0.23	0.10	0.56
WS4	0.22	0.11	0.49
WS4RBF	0.20	0.11	0.44

a menor, pode fazer uma previsão mais precisa em certas regiões nucleares do que outro modelo com um desvio global menor [137]. Isso ocorre porque determinados modelos podem fazer melhores descrições de estruturas microscópicas e coletivas localmente por regiões do que outros modelos.

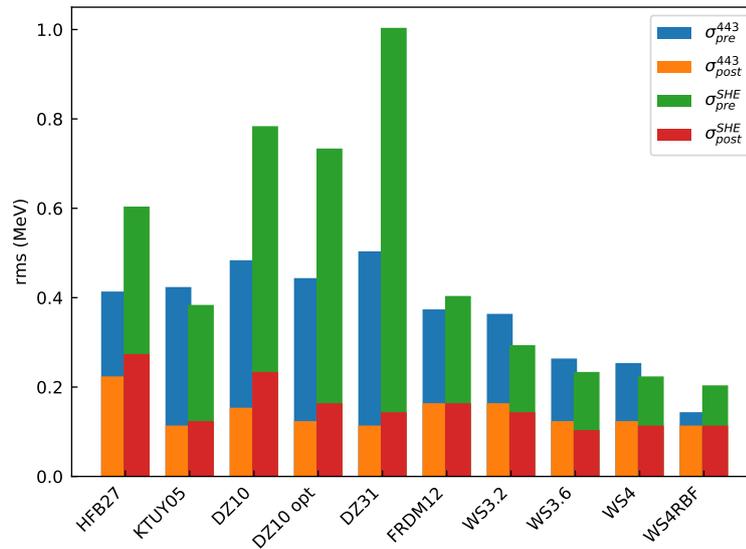


Figura 4.3: Desvios da energia alfa liberada calculada com os dez (inclusive o modelo DZ10 opt do capítulo 3) modelos de massa. Os valores dos desvios considerando os 443 emissores alfa estão representados em azul e laranja, para os modelos sem e com correção BNN respectivamente. Em verde e vermelho, os valores dos desvios referentes aos núcleos da região SHE, para os modelos sem e com correção respectivamente.

4.5.1 Tempos de meias-vidas

A obtenção dos tempos de meias-vidas foi realizada com o ELDM, com os valores dos parâmetros $\nu_0 = 1.1 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ e $r_0 = 1.12 \text{ fm}$, encontrado no capítulo 2. A função de correção desempenha um papel importante em todos os modelos. Especialmente em torno dos números mágicos, nos quais é possível trazer de volta, física ao modelo que na versão não corrigida não estava contemplada. Embora a localização desses na região de SHE não seja bem conhecida, podemos identificar alguns possíveis candidatos a partir das estabilidades que eles apresentam. Vários modelos fornecem números mágicos para prótons em $Z = 114, 120$ o 126 , neste trabalho, não somos capazes de identificá-los a partir de Q_α ou do tempo de meia-vida e outras análises com as fórmulas de massa são necessárias para identificá-los. No caso dos números mágicos ou submágicos das camadas de nêutrons, a partir do aumento da estabilidade dos núcleos em relação aos seus vizinhos, encontramos previsões diferentes. Mostramos isso para cada modelo na tabela 4.4. Os núcleos com $N = 179$ em WS3.6 e em WS4, e $N = 180$ em WS4RBF

Tabela 4.4: Números mágicos encontrados na região SHE para os modelos estudados

Modelo/ N_{magico}	162	166	170	172	174	178	182	184
HFB27	-	-	-	-	✓	✓	✓	-
KTUY05	✓	-	-	-	✓	-	✓	-
DZ10	-	-	✓	-	-	✓	-	✓
DZ31	✓	-	-	-	-	✓	-	-
FRDM12	✓	-	-	-	✓	✓	-	✓
WS3.2	✓	-	-	-	✓	✓	✓	✓
WS3.6	✓	✓	-	✓	✓	✓	✓	✓
WS4	✓	-	-	-	✓	✓	✓	✓
WS4RBF	✓	-	-	-	✓	✓	✓	✓

para o elemento Db ($Z = 105$) apresentam um aumento na estabilidade pontualmente, sem ter correspondência com o tempo de meia-vida dos núcleos vizinhos, o que nos leva a pensar que pode ser um erro de modelo e não o relatamos como efeito de alguma magicidade, esse efeito pode ser visto na figura 4.4.

Na figura 4.4 o mapa dos tempos de meias-vidas dos SHEs é representado com $104 \leq Z \leq 120$. À esquerda da figura, os mapas obtidos com os modelos sem correção; e à direita, os obtidos com os modelos com correção. Como pode ser visto à esquerda dos núcleos conhecidos, marcados com quadrados cinza, espera-se que os núcleos tenham um tempo de meia-vida extremamente curto, da ordem de $\sim 10^{-5}$ s. Pesquisas experimentais nessa direção está focadas na determinação dos limites do mapa nuclear, ou seja, na localização da linha de estabilidade por decaimento por prótons (*proton drip line*). No entanto, olhando na outra direção dos núcleos conhecidos, aumentando o número de nêutrons nos núcleos superpesados, a estabilidade nuclear devido ao decaimento alfa aumenta em várias ordens. Esse comportamento é antecipado com todas as fórmulas de massa nuclear. Por exemplo, adicionando ao núcleo conhecido experimentalmente ^{278}Mt ($Z = 109$) 5 nêutrons a estabilidade aumenta cerca de 7 ordens. Este comportamento se acentua ainda mais quando nos aproximarmos a $N = 184$, onde a estabilidade aumenta em 9 ordens ou mais, dependendo do modelo. No caso da fórmula de massa DZ31, esse comportamento muda abruptamente em torno de $N=184$, e foi relatado que o modelo não prevê um aumento da estabilidade no $N=184$ [99]. No modelo HFB27, o comportamento dos tempos de vida é oscilatório, dificultando a observação da estabilidade local devido à possível existência de números mágicos ou submágicos.

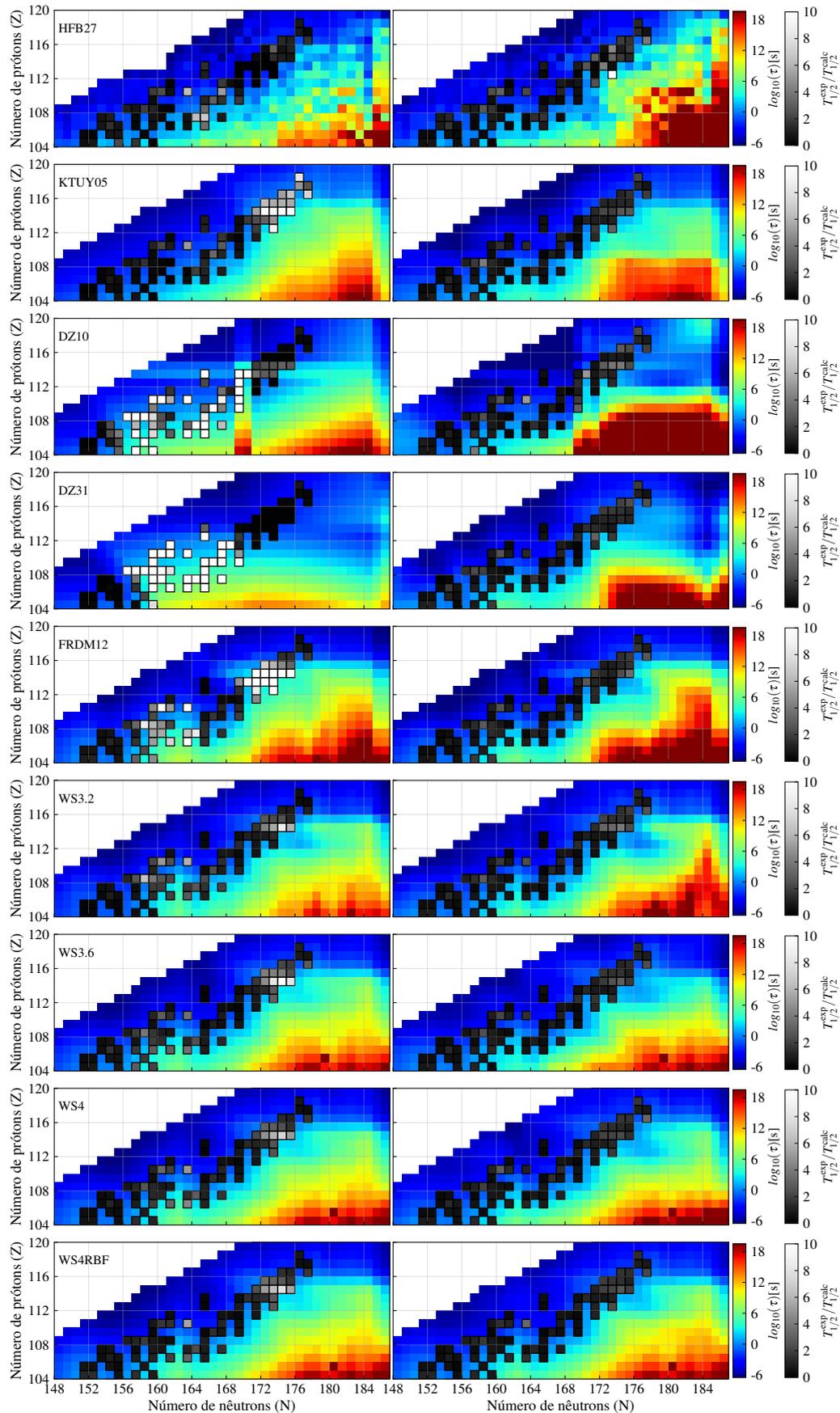


Figura 4.4: Gráfico nuclear para a região SHE, mostrando os valores de meia-vida do decaimento alfa. A meia-vida experimental é representada como quadrados cinzas. No painel esquerdo, os resultados obtidos com os modelos de massa e no painel direito, os resultados obtidos com os modelos mais a correção do BNN.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Começamos as conclusões lembrando que o objetivo do nosso trabalho era realizar um estudo do decaimento do estado fundamental dos núcleos superpesados por emissão de uma partícula alfa. Para isso, recorreremos ao uso do modelo de tunelamento (ELDM) para obter os tempos de meia-vida. Como o valor da energia liberada durante o decaimento alfa é um elemento importante para este tipo de modelo, precisávamos de valores precisos dessa magnitude para fazer uma previsão correta dos tempos médios de vida. Para melhorar as previsões teóricas feitas com os modelos, usamos redes neurais bayesianas como aproximadores universais.

Nos últimos anos, os modelos de fórmulas de massa apresentaram diferenças entre previsões e valores experimentais inferiores à barreira dos 0.3 MeV, melhorando a capacidade preditiva da teoria nuclear. Apesar disso, a precisão necessária ainda não foi alcançada em algumas áreas, como em estudos ligados às regiões de núcleos superpesados. Para eles, foram desenvolvidas técnicas teóricas e numéricas, que nos permitiram obter melhores descrições das massas dos núcleos. No entanto, apesar da sofisticação e sucesso desses modelos de massas nucleares, persistem incertezas sistemáticas associadas às restrições e limitações de cada modelo. Além disso, essas incertezas sistemáticas aumentam à medida que os modelos são extrapolados para regiões inexploradas do

mapa nuclear. Dado que em muitas áreas da física nuclear o conhecimento das massas nucleares longe dos núcleos atualmente conhecidos é necessário, é essencial conciliar as diferenças entre as previsões do modelo.

A fim de contribuir para a redução da discrepância entre previsão teórica e valor experimental, foi proposta uma abordagem híbrida que combina modelos teóricos com redes neurais bayesianas. O princípio básico desse método é começar com um modelo físico que faça uma descrição teórica que seja pelo menos aceitável para o observável e que depois seja refinada pela construção de um modelo de rede neural bayesiana. O método BNN como aproximador universal baseia-se na aplicação do teorema de Bayes na determinação dos coeficientes de uma rede neural artificial.

Para isso, no capítulo 3 usamos a fórmula de massa Duflo-Zuker na versão de 10 parâmetros, que tem sido amplamente utilizada na previsão de massas nucleares no passado. Com um desvio padrão da quantidade Q_α de $\sigma = 0.43$ MeV, alcançamos uma melhoria de 72% chegando a obter $\sigma = 0.12$ MeV. Para os núcleos da região dos superpesados, a diminuição foi ainda mais significativa e igual a 78%, sendo a diminuição do desvio padrão de $\sigma = 0.73$ MeV até $\sigma = 0.16$ MeV.

A partir do sucesso das previsões ainda melhores do que os obtidos com outros modelos mais sofisticados de massas disponíveis, estendemos o estudo no capítulo 4 a nove modelos de fórmulas de massa disponíveis na literatura. O objetivo era o de superar ou reduzir as limitações inerentes de qualquer um desses modelos, através da construção de uma função de rede neural de Bayesian para explicar os desvios dos valores experimentais. Além disso, devido à natureza probabilística da abordagem bayesiana, as previsões aprimoradas são agora acompanhadas de estimativas de incertezas teóricas. Apesar da qualidade das previsões dos modelos de massa originais, foram observadas melhorias significativas em todos os casos estudados após a implementação da correção pelo método BNN. Obtendo em oito dos nove modelos melhorias relativas acima de 47%, e 23% no WS4RBF o qual é atualmente o melhor modelo na comunidade científica.

Da mesma forma, na região de SHE, as melhorias foram maiores do que 44% nos nove modelos.

A abordagem híbrida para o aprimoramento de modelos com base no uso de um BNN é flexível e poderosa o suficiente para se estender na comunidade científica, a fim de obter as previsões de qualquer observável para regiões onde faltam dados experimentais. O requisito básico é a existência de um modelo teórico suficientemente robusto em suas previsões, para que os resíduos entre a teoria e o experimento sejam utilizados na construção de uma função a partir do método BNN, que corrige o modelo original.

Finalmente, através do uso do ELDM, conseguimos reproduzir os tempos de vida médios experimentais dos decaimentos alfa, com um desvio padrão $\sigma = 0.56$. Para isso calibramos o modelo através da otimização do mesmo no espaço de parâmetros (ν_0, r_0) , encontrando os valores ótimos que representam o mínimo global em $\nu_0 = 1.1 \times 10^{22} s^{-1}$ e $r_0 = 1.12$ fm. Juntamente com os valores de Q_α obtidos com o procedimento de utilização de um BNN, estendemos a análise do cálculo de tempos de vida médios a regiões onde não existem valores experimentais, obtendo quase invariavelmente em todos os modelos que a região de maior estabilidade na área estudada é em torno $N=184$. Nestes núcleos, espera-se que os tempos de vida médios por decaimento alfa seja da ordem entre 10^{10} s e 10^{18} s.

Outro resultado importante do nosso trabalho foi a identificação de núcleos que mostram maior estabilidade ao decaimento alfa. Esses resultados são, em alguns dos modelos estudados, produto da correção do BNN. Destacando a importância da metodologia, ao permitir identificar física da estrutura interna dos núcleos, que não era contemplada no modelo original. Essas regiões de mudança de estabilidade podem representar possíveis números mágicos ou sub-mágicos e os possíveis candidatos identificados foram: $N = 162, 166, 170, 172, 174, 178, 182$ e 184 . Observou-se que estes dependem do modelo utilizado, daí a importância de escolher modelos teóricos que originalmente permitiam fazer previsões robustas.

À medida que o número atômico dos elementos aumenta, a emissão de clusters começa a competir com o canal de decaimento alfa. Por isso em trabalhos futuros, pretendemos estender a metodologia desenvolvida, ao estudo de outros modos de decaimento de SHE.

Referências Bibliográficas

- [1] Henri Becquerel. On the rays emitted by phosphorescence. *Compt.Rend.Hebd.Seances Acad.Sci.*, 122:420–421, feb 1896. Citado na página 18.
- [2] O. Hahn and F. Strassmann. ber den Nachweis und das Verhalten der bei der Bestrahlung des Urans mittels Neutronen entstehenden Erdalkalimetalle. *Die Naturwissenschaften*, 27(1):11–15, jan 1939. Citado 2 vezes nas páginas 18 and 75.
- [3] Lise Meitner and O. R. Frisch. Disintegration of uranium by neutrons: A new type of nuclear reaction [1], 1939. Citado 2 vezes nas páginas 18 and 75.
- [4] G. Münzenberg. Recent advances in the discovery of transuranium elements, 1988. Citado na página 19.
- [5] S. Hofmann and G. Münzenberg. The discovery of the heaviest elements. *Reviews of Modern Physics*, 72(3):733–767, jul 2000. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20, and 70.
- [6] Kosuke Morita. SHE research at RIKEN/GARIS. *Nuclear Physics A*, 944:30–61, 2015. Citado na página 20.
- [7] Yu Ts Oganessian and V K Utyonkov. Super-heavy element research. *Reports on Progress in Physics*, 78(3):036301, feb 2015. Citado na página 20.

- [8] Yuri Ts. Oganessian and Krzysztof P. Rykaczewski. A beachhead on the island of stability. *Physics Today*, 68(8):32–38, 2015. Citado na página 20.
- [9] G. Gamow. Zur Quantentheorie des Atomkernes. *Zeitschrift für Physik*, 51(3-4):204–212, mar 1928. Citado 2 vezes nas páginas 20 and 48.
- [10] R. W. Gurney and E. U. Condon. Quantum mechanics and radioactive disintegration. *Physical Review*, 33(2):127–140, sep 1929. Citado na página 20.
- [11] M. Gonçalves and S. B. Duarte. Effective liquid drop description for the exotic decay of nuclei. *Physical Review C*, 48(5):2409–2414, nov 1993. Citado 5 vezes nas páginas 20, 45, 46, 49, and 71.
- [12] S. B. Duarte and M. G. Gonçalves. Effective inertial coefficient for the dinuclear regime of the exotic decay of nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 53(5):2309–2312, may 1996. Nenhuma citação no texto.
- [13] M. Gonçalves, S.B. Duarte, F. Garcia, and O. Rodriguez. PRESCOLD: Calculation of the half-life for alpha decay, cluster radioactivity and cold fission processes. *Computer Physics Communications*, 107(1-3):246–252, dec 1997. Nenhuma citação no texto.
- [14] S B Duarte, F García, O Rodríguez, F Guzmán, O A P Tavares, and M Gonçalves. Effective liquid drop description for alpha decay of atomic nuclei. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 24(9):1757–1775, sep 2002. Nenhuma citação no texto.
- [15] F García, O Rodríguez, M Gonçalves, S B Duarte, O A P Tavares, and F Guzmán. Alpha decay and nuclear deformation: the case for favoured alpha transitions of even-even emitters*. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 26(6):755–769, jun 2000. Nenhuma citação no texto.

- [16] S. B. Duarte, O. A.P. Tavares, F. Guzmán, A. Dimarco, F. García, O. Rodríguez, and M. Gonçalves. Half-lives for proton emission, alpha decay, cluster radioactivity, and cold fission processes calculated in a unified theoretical framework. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 80(2):235–299, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 45, 46, 49, and 71.
- [17] S. B. Duarte, O. A.P. Tavares, M. Gonçalves, O. Rodríguez, F. Guzmán, T. N. Barbosa, F. García, and A. Dimarco. Half-life predictions for decay modes of superheavy nuclei. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 30(10):1487–1494, oct 2004. Nenhuma citação no texto.
- [18] O. A.P. Tavares, E. L. Medeiros, and M. L. Terranova. Alpha decay half-life of bismuth isotopes. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 31(2):129–139, feb 2005. Nenhuma citação no texto.
- [19] E. L. Medeiros, M. M.N. Rodrigues, S. B. Duarte, and O. A.P. Tavares. Systematics of alpha-decay half-life: New evaluations for alpha-emitter nuclides. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 32(8):B23–B30, aug 2006. Nenhuma citação no texto.
- [20] S. B. Duarte and N. Teruya. α -Decay systematics for superheavy elements. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 85(1):1–5, jan 2012. Citado 2 vezes nas páginas 20 and 46.
- [21] Robert C. Barber, Paul J. Karol, Hiromichi Nakahara, Emanuele Vardaci, and Erich W. Vogt. Discovery of the elements with atomic numbers greater than or equal to 113 (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 83(7):1485–1498, jun 2011. Citado na página 20.
- [22] Paul J. Karol, Robert C. Barber, Bradley M. Sherrill, Emanuele Vardaci, and Toshimitsu Yamazaki. Discovery of the element with atomic number $Z = 118$

- completing the 7th row of the periodic table (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 88(1-2):155–160, jan 2016. Nenhuma citação no texto.
- [23] Paul J. Karol, Robert C. Barber, Bradley M. Sherrill, Emanuele Vardaci, and Toshimitsu Yamazaki. Discovery of the elements with atomic numbers $Z = 113$, 115 and 117 (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 88(1-2):139–153, jan 2016. Citado na página 20.
- [24] S. Gazula, J. W. Clark, and H. Bohr. Learning and prediction of nuclear stability by neural networks. *Nuclear Physics, Section A*, 540(1-2):1–26, 1992. Citado na página 21.
- [25] Klaus A. Gernoth and John W. Clark. Neural networks that learn to predict probabilities: Global models of nuclear stability and decay. *Neural Networks*, 8(2):291–311, 1995. Nenhuma citação no texto.
- [26] N. J. Costiris, E. Mavrommatis, K. A. Gernoth, and J. W. Clark. Decoding β -decay systematics: A global statistical model for β half-lives. *Physical Review C*, 80(4):044332, oct 2009. Nenhuma citação no texto.
- [27] Tuncay Bayram, Serkan Akkoyun, and S. Okan Kara. A study on ground-state energies of nuclei by using neural networks. *Annals of Nuclear Energy*, 63:172–175, jan 2014. Nenhuma citação no texto.
- [28] P. Baldi, P. Sadowski, and D. Whiteson. Searching for exotic particles in high-energy physics with deep learning. *Nature Communications*, 5(1):4308, dec 2014. Nenhuma citação no texto.
- [29] R. Utama, J. Piekarewicz, and H. B. Prosper. Nuclear mass predictions for the crustal composition of neutron stars: A Bayesian neural network approach. *Physical Review C*, 93(1):1–13, 2016. Citado na página 21.

- [30] G.F. Bertsch and Derek Bingham. Estimating Parameter Uncertainty in Binding-Energy Models by the Frequency-Domain Bootstrap. *Physical Review Letters*, 119(25):252501, dec 2017. Citado na página 21.
- [31] S. Athanassopoulos, E. Mavrommatis, K. A. Gernoth, and J. W. Clark. Nuclear mass systematics using neural networks. *Nuclear Physics A*, 743(4):222–235, nov 2004. Citado na página 21.
- [32] R. Utama, Wei Chia Chen, and J. Piekarewicz. Nuclear charge radii: Density functional theory meets Bayesian neural networks. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 43(11):1–14, 2016. Nenhuma citação no texto.
- [33] R. Utama and J. Piekarewicz. Refining mass formulas for astrophysical applications: A Bayesian neural network approach. *Physical Review C*, 96(4), 2017. Nenhuma citação no texto.
- [34] R. Utama and J. Piekarewicz. Validating neural-network refinements of nuclear mass models. *Physical Review C*, 97(1):1–6, 2018. Nenhuma citação no texto.
- [35] Hai Fei Zhang, Li Hao Wang, Jing Peng Yin, Peng Hui Chen, and Hong Fei Zhang. Performance of the Levenberg-Marquardt neural network approach in nuclear mass prediction. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 44(4):045110, 2017. Nenhuma citação no texto.
- [36] Z. M. Niu and H. Z. Liang. Nuclear mass predictions based on Bayesian neural network approach with pairing and shell effects. *Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics*, 778:48–53, 2018. Nenhuma citação no texto.
- [37] Léo Neufcourt, Yuchen Cao, Witold Nazarewicz, and Frederi Viens. Bayesian approach to model-based extrapolation of nuclear observables. *Physical Review C*, 98(3):1–18, jun 2018. Citado na página 65.

- [38] Z. M. Niu, H. Z. Liang, B. H. Sun, W. H. Long, and Y. F. Niu. Predictions of nuclear β -decay half-lives with machine learning and their impact on r -process nucleosynthesis. *Physical Review C*, 99(6):064307, jun 2019. Nenhuma citação no texto.
- [39] Léo Neufcourt, Yuchen Cao, Witold Nazarewicz, Erik Olsen, and Frederi Viens. Neutron drip line in the Ca region from Bayesian model averaging. *Physical Review Letters*, 122(6), jan 2019. Citado na página 21.
- [40] Radford M. Neal. *Bayesian Learning for Neural Networks*, volume 118 of *Lecture Notes in Statistics*. Springer New York, New York, NY, 1996. Citado na página 21.
- [41] Christopher M Bishop. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford University Press, Birmingham, UK, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 21 and 59.
- [42] Ubaldo Baños Rodríguez, Cristofher Zuñiga Vargas, Marcello Gonçalves, Sergio Barbosa Duarte, and Fernando Guzmán. Alpha half-lives calculation of superheavy nuclei with Q_α -value predictions based on the Bayesian neural network approach. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 46(11):115109, nov 2019. Citado na página 22.
- [43] Ubaldo Baños Rodríguez, Cristofher Zuñiga Vargas, Marcello Gonçalves, Sergio Barbosa Duarte, and Fernando Guzmán. Bayesian Neural Network improvements to nuclear mass formulae and predictions in the SuperHeavy Elements region. *EPL (Europhysics Letters)*, 127(4):42001, sep 2019. Citado na página 22.
- [44] Sigurd Hofmann. Super-heavy nuclei. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 42(11), 2015. Citado na página 24.
- [45] K. H. Schmidt and W. Morawek. The conditions for the synthesis of heavy nuclei, 1991. Citado na página 25.

- [46] A. B. Quint, W. Reisdorf, K. H. Schmidt, P. Armbruster, F. P. Heßberger, S. Hofmann, J. Keller, G. Münzenberg, H. Stelzer, H. G. Clerc, W. Morawek, and C. C. Sahm. Investigation of the fusion of heavy nearly symmetric systems. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 346(2):119–131, jun 1993. Citado na página 25.
- [47] R. A. Broglia and Aage Winther. *Heavy ion reactions : lecture notes*. Benjamin/Cummings Pub. Co., Advanced Book Program, 1981. Citado na página 26.
- [48] A. J. Pacheco, J. O. Fernández Niello, D. E. DiGregorio, M. Di Tada, J. E. Testoni, Y. Chan, E. Chávez, S. Gazes, E. Plagnol, and R. G. Stokstad. Capture reactions in the $\text{Ca}40,48+197\text{Au}$ and $\text{Ca}40,48+208\text{Pb}$ systems. *Physical Review C*, 45(6):2861–2869, jun 1992. Citado na página 28.
- [49] V. V. Sargsyan, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, and Z. Kohley. Isotopic trends in capture reactions with radioactive and stable potassium beams. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 92(5):054613, nov 2015. Citado na página 28.
- [50] Y. Aritomo, T. Wada, M. Ohta, and Y. Abe. Diffusion mechanism for synthesis of superheavy elements. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 55(3):R1011–R1014, mar 1997. Citado na página 30.
- [51] P. Fröbrich and I. I. Gontchar. Langevin description of fusion, deep-inelastic collisions and heavy-ion-induced fission. *Physics Report*, 292(3-4):131–237, jan 1998. Citado na página 35.
- [52] Yasuhisa Abe, David Boilley, Bertrand G. Giraud, and Takahiro Wada. Diffusion over a saddle with a Langevin equation. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 61(2):1125–1133, feb 2000. Citado na página 30.

- [53] Walter Hauser and Herman Feshbach. The inelastic scattering of neutrons. *Physical Review*, 87(2):366–373, jul 1952. Citado na página 31.
- [54] P. Fröbrich and I. I. Gontchar. Langevin description of fusion, deep-inelastic collisions and heavy-ion-induced fission. *Physics Report*, 292(3-4):131–237, jan 1998. Citado na página 32.
- [55] V. I. Zagrebaev and W. Greiner. Cross sections for the production of superheavy nuclei. *Nuclear Physics A*, 944:257–307, 2014. Citado na página 32.
- [56] K A Snover. Giant Resonances in Excited Nuclei. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 36(1):545–603, dec 1986. Citado na página 32.
- [57] Niels Bohr and John Archibald Wheeler. The mechanism of nuclear fission. *Physical Review*, 56(5):426–450, sep 1939. Citado na página 33.
- [58] Aage Bohr and Ben Roy Mottelson. *Nuclear Structure*. Scientific, World, 1998. Citado na página 33.
- [59] A. R. Junghans, M. De Jong, H. G. Clerc, A. V. Ignatyuk, G. A. Kudyaev, and K. H. Schmidt. Projectile-fragment yields as a probe for the collective enhancement in the nuclear level density. *Nuclear Physics A*, 629(3-4):635–655, feb 1998. Citado na página 33.
- [60] V. Weisskopf. Statistics and nuclear reactions. *Physical Review*, 52(4):295–303, aug 1937. Citado na página 33.
- [61] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7(4):284–304, apr 1940. Citado na página 34.
- [62] P. Grangé and H. A. Weidenmüller. Fission probability and the nuclear friction constant. *Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics*

, 96(1-2):26–30, oct 1980. Citado na página 34.

- [63] P. Grangé, Li Jun-Qing, and H. A. Weidenmüller. Induced nuclear fission viewed as a diffusion process: Transients. *Physical Review C*, 27(5):2063–2077, may 1983. Nenhuma citação no texto.
- [64] P. Grangé, S. Hassani, H. A. Weidenmüller, A. Gavron, J. R. Nix, and A. J. Sierk. Effect of nuclear dissipation on neutron emission prior to fission. *Physical Review C*, 34(1):209–217, 1986. Nenhuma citação no texto.
- [65] Pierre Grange. Effects of transients on particle emission prior to fission in a transport description of the fission process. *Nuclear Physics, Section A*, 428(C):37–62, oct 1984. Citado na página 34.
- [66] Y. ABE, C. GRÉGOIRE, and H. DELAGRANGE. Langevin Approach To Nuclear Dissipative Dynamics, 1986. Citado na página 35.
- [67] N. D. Mavlitov, P. Fröblich, and I. I. Gonchar. Combining a langevin description of heavy-ion induced fission including neutron evaporation with the statistical model. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 342(2):195–198, jun 1992. Nenhuma citação no texto.
- [68] D. Boilley. *Approches stochastiques de la dynamique des collisions nucléaires*. PhD thesis, 1993. Nenhuma citação no texto.
- [69] David Boilley, Eric Suraud, Abe Yasuhisa, and Sakir Ayik. Nuclear fission with a Langevin equation. *Nuclear Physics, Section A*, 556(1):67–87, may 1993. Nenhuma citação no texto.
- [70] J. Bao, Y. Zhuo, and X. Wu. Systematic studies of fission fragment kinetic energy distributions by Langevin simulations. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 352(3):321–325, 1995. Nenhuma citação no texto.

- [71] Arnold J. Sierk. Langevin model of low-energy fission. *Physical Review C*, 96(3):034603, sep 2017. Citado na página 35.
- [72] H. Feldmeier. Transport phenomena in dissipative heavy-ion collisions: The one-body dissipation approach. *Reports on Progress in Physics*, 50(8):915–994, aug 1987. Citado na página 35.
- [73] K. T R Davies and J. R. Nix. Calculation of moments, potentials, and energies for an arbitrarily shaped diffuse-surface nuclear density distribution. *Physical Review C*, 14(5):1977–1994, nov 1976. Citado na página 35.
- [74] H.J. Krappe and J.R. Nix. Modified definition of the surface energy in the liquid-drop formula. *Third IAEA Symposium on the Chemistry and Physics of Fission, Rochester, New York., 77(August), 1973*. Citado na página 35.
- [75] H. J. Krappe, J. R. Nix, and A. J. Sierk. From heavy-ion elastic scattering to fission: A unified potential for the description of large-scale nuclear collective motion. *Physical Review Letters*, 42(4):215–218, jan 1979. Citado na página 35.
- [76] R. Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on Progress in Physics*, 29(1):255–284, 1966. Citado na página 35.
- [77] M. BRACK, JENS DAMGAARD, A. S. JENSEN, H. C. PAULI, V. M. STRUTINSKY, and C. Y. WONG. Funny Hills: The Shell-Correction Approach to Nuclear Shell Effects and Its Applications to the Fission Process. *Reviews of Modern Physics*, 44(2):320–405, apr 1972. Citado na página 36.
- [78] K. T.R. Davies, A. J. Sierk, and J. R. Nix. Effect of viscosity on the dynamics of fission. *Physical Review C*, 13(6):2385–2403, jun 1976. Citado na página 36.
- [79] Zhi-Han Wu, Long Zhu, Fan Li, Xiao-Bin Yu, Jun Su, and Chen-Chen Guo. Synthesis of neutron-rich superheavy nuclei with radioactive beams within the

dinuclear system model. *Physical Review C*, 97(6):064609, jun 2018. Citado na página 38.

- [80] Sigurd Hofmann, Sergey N. Dmitriev, Claes Fahlander, Jacklyn M. Gates, James B. Roberto, and Hideyuki Sakai. On the discovery of new elements (IUPAC/IUPAP Provisional Report). *Pure and Applied Chemistry*, 90(11):1773–1832, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 40 and 41.
- [81] William D. Myers and Wladyslaw J. Swiatecki. Nuclear masses and deformations. *Nuclear Physics*, 81(1):1–60, jun 1966. Citado 2 vezes nas páginas 40 and 76.
- [82] A. Sobiczewski, F. A. Gareev, and B. N. Kalinkin. Closed shells for $Z > 82$ and $N > 126$ in a diffuse potential well. *Physics Letters*, 22(4):500–502, sep 1966. Nenhuma citação no texto.
- [83] S. G. Nilsson, J. R. Nix, A. Sobiczewski, Z. Szymański, S. Wycech, C. Gustafson, and P. Möller. On the spontaneous fission of nuclei with Z near 114 and N near 184. *Nuclear Physics, Section A*, 115(3):545–562, jul 1968. Nenhuma citação no texto.
- [84] Sven Gösta Nilsson, Chin Fu Tsang, Adam Sobiczewski, Zdzislaw Szymański, Slawomir Wycech, Christer Gustafson, Inger Lena Lamm, Peter Möller, and Björn Nilsson. On the nuclear structure and stability of heavy and superheavy elements. *Nuclear Physics, Section A*, 131(1):1–66, jun 1969. Nenhuma citação no texto.
- [85] S. G. Nilsson, S. G. Thompson, and C. F. Tsang. Stability of superheavy nuclei and their possible occurrence in nature. *Physics Letters B*, 28(7):458–461, jan 1969. Citado na página 40.
- [86] Vladimir Utyonkov, Yuri Oganessian, Sergey Dmitriev, Mikhail Itkis, Kenton Moody, Mark Stoyer, Dawn Shaughnessy, James Roberto, Krzysztof Rykaczewski,

- and Joseph Hamilton. The discovery of elements 113 to 118. *EPJ Web of Conferences*, 131:06003, dec 2016. Citado na página 42.
- [87] V. E. Viola and G. T. Seaborg. Nuclear systematics of the heavy elements-II Lifetimes for alpha, beta and spontaneous fission decay. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 28(3):741–761, mar 1966. Citado na página 44.
- [88] A. Sobiczewski, Z. Patyk, and S. Cwiok. Deformed superheavy nuclei. *Physics Letters B*, 224(1-2):1–4, jun 1989. Citado na página 44.
- [89] G. Royer. Alpha emission and spontaneous fission through quasi-molecular shapes. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 26(8):1149–1170, aug 2000. Citado na página 45.
- [90] C. Qi, F. R. Xu, R. J. Liotta, R. Wyss, M. Y. Zhang, C. Asawatangtrakuldee, and D. Hu. Microscopic mechanism of charged-particle radioactivity and generalization of the Geiger-Nuttall law. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 80(4), oct 2009. Citado na página 45.
- [91] C. Qi, F. R. Xu, R. J. Liotta, and R. Wyss. Universal decay law in charged-particle emission and exotic cluster radioactivity. *Physical Review Letters*, 103(7), aug 2009. Citado na página 45.
- [92] M. Gaudin. Énergie Coulombienne Du Solide Uniformément Chargé Limité Par Deux Sphères Sécantes. *Journal de Physique*, 35(12):885–894, 1974. Citado na página 47.
- [93] W. J. Huang, G. Audi, Meng Wang, F. G. Kondev, S. Naimi, and Xing Xu. The AME2016 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data; And adjustment procedures. *Chinese Physics C*, 41(3):030002, mar 2017. Citado 2 vezes nas páginas 51 and 63.

- [94] J. P. Cui, Y. L. Zhang, S. Zhang, and Y. Z. Wang. α -Decay Half-Lives of Superheavy Nuclei. *Physical Review C*, 97(1):014316, jan 2018. Citado 2 vezes nas páginas 51 and 63.
- [95] J. Duflo and A.P. Zuker. Microscopic mass formulas. *Physical Review C*, 52(1):R23–R27, jul 1995. Citado 4 vezes nas páginas 53, 56, 74, and 83.
- [96] Jorge G. Hirsch, Irving Morales, Joel Mendoza-Temis, Alejandro Frank, Juan Carlos Lopez-Vieyra, Jose Barea, Stuart Pittel, Piet Van Isacker, and Victor Velazquez. The art of predicting nuclear masses. *International Journal of Modern Physics E*, 17(SUPPL. 1):398–411, dec 2008. Citado na página 53.
- [97] Joel Mendoza-Temis, Jorge G. Hirsch, and Andrés P. Zuker. The anatomy of the simplest Duflo–Zuker mass formula. *Nuclear Physics A*, 843(1-4):14–36, oct 2010. Citado na página 53.
- [98] J. Duflo and A. P. Zuker. Microscopic mass formulae. apr 1994. Nenhuma citação no texto.
- [99] Andrés P. Zuker. Shell formation and nuclear masses, nov 2008. Citado 2 vezes nas páginas 53 and 89.
- [100] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366, 1989. Citado na página 57.
- [101] Radford M Neal. *Lecture Notes in Statistics: Bayesian Learning for Neural Networks*. 1996. Citado 5 vezes nas páginas 59, 60, 61, 62, and 66.
- [102] Meng Wang, G. Audi, F. G. Kondev, W.J. Huang, S. Naimi, and Xing Xu. The AME2016 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, 41(3):030003, mar 2017. Citado na página 62.

- [103] FRANK E. HARRELL, KERRY L. LEE, and DANIEL B. MARK. MULTI-VARIABLE PROGNOSTIC MODELS: ISSUES IN DEVELOPING MODELS, EVALUATING ASSUMPTIONS AND ADEQUACY, AND MEASURING AND REDUCING ERRORS. *Statistics in Medicine*, 15(4):361–387, feb 1996. Citado na página 64.
- [104] Peter Peduzzi, John Concato, Elizabeth Kemper, Theodore R. Holford, and Alvan R. Feinstein. A simulation study of the number of events per variable in logistic regression analysis. *Journal of Clinical Epidemiology*, 49(12):1373–1379, dec 1996. Nenhuma citação no texto.
- [105] F. E. Harrell, K. L. Lee, D. B. Matchar, T. A. Reichert, E Frank, L Kgrry, David Malchar, and Thomas A Roichorl. Regression models for prognostic prediction : advantages , problems , and suggested solutions. *Cancer Treatment Reports*, 69(January 2014):1071–1077, 1985. Nenhuma citação no texto.
- [106] Andreas Laupacis, Nandita Sekar, and Ian G. Stiell. Clinical prediction rules: A review and suggested modifications of methodological standards. *Journal of the American Medical Association*, 277(6):488–494, feb 1997. Citado na página 64.
- [107] D. N. Poenaru, R. A. Gherghescu, and W. Greiner. Cluster decay of superheavy nuclei. *Physical Review C*, 85(3):034615, mar 2012. Citado na página 72.
- [108] D. N. Poenaru, R. A. Gherghescu, and W. Greiner. Heavy-particle radioactivity of superheavy nuclei. *Physical Review Letters*, 107(6):995–1007, jun 2011. Nenhuma citação no texto.
- [109] D. N. Poenaru, H. Stöcker, and R. A. Gherghescu. Cluster and alpha decay of superheavy nuclei. *European Physical Journal A*, 54(2), 2018. Citado na página 72.

- [110] G Gamow. Mass defect curve and nuclear constitution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 126(803):632–644, 1930. Citado na página 74.
- [111] C. F.v. Weizsäcker. Zur Theorie der Kernmassen. *Zeitschrift für Physik*, 96(7-8):431–458, jul 1935. Citado na página 74.
- [112] H. A. Bethe and R. F. Bacher. Nuclear Physics A. Stationary states of nuclei. *Reviews of Modern Physics*, 8(2):82–229, apr 1936. Citado na página 74.
- [113] G. Audi and A. H. Wapstra. The 1995 update to the atomic mass evaluation. *Nuclear Physics, Section A*, 595(4):409–480, dec 1995. Citado 2 vezes nas páginas 75 and 80.
- [114] D. Lunney, J. M. Pearson, and C. Thibault. Recent trends in the determination of nuclear masses. *Reviews of Modern Physics*, 75(3):1021–1082, aug 2003. Citado 2 vezes nas páginas 75 and 80.
- [115] V. M. Strutinsky. Shell effects in nuclear masses and deformation energies. *Nuclear Physics, Section A*, 95(2):420–442, apr 1967. Citado 2 vezes nas páginas 76 and 78.
- [116] M. Brack and P. Quentin. Self-consistent average density matrices and the Strutinsky energy theorem. *Physics Letters B*, 56(5):421–423, may 1975. Citado na página 76.
- [117] P. Möller, J. R. Nix, W. D. Myers, and W. J. Swiatecki. Nuclear ground-state masses and deformations. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 59(2):185–381, mar 1995. Citado 3 vezes nas páginas 77, 78, and 80.
- [118] V. M. Strutinsky. "Shells" in deformed nuclei. *Nuclear Physics, Section A*, 122(1):1–33, dec 1968. Citado na página 78.

- [119] Ning Wang, Zuoying Liang, Min Liu, and Xizhen Wu. Mirror nuclei constraint in nuclear mass formula. *Physical Review C*, 82(4):044304, oct 2010. Citado 2 vezes nas páginas 80 and 83.
- [120] Ning Wang, Min Liu, and Xizhen Wu. Modification of nuclear mass formula by considering isospin effects. *Physical Review C*, 81(4):044322, apr 2010. Citado na página 83.
- [121] Ning Wang and Min Liu. Nuclear mass predictions with a radial basis function approach. *Physical Review C*, 84(5):051303, nov 2011. Citado na página 83.
- [122] Min Liu, Ning Wang, Yangge Deng, and Xizhen Wu. Further improvements on a global nuclear mass model. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 84(1):1–21, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 81 and 83.
- [123] Ziyu Wang and Nando de Freitas. Theoretical Analysis of Bayesian Optimisation with Unknown Gaussian Process Hyper-Parameters. jun 2014. Citado na página 80.
- [124] A. H. Wapstra, G. Audi, and C. Thibault. The Ame2003 atomic mass evaluation - (I). Evaluation of input data, adjustment procedures. *Nuclear Physics A*, 729(1):129–336, dec 2003. Citado na página 81.
- [125] Na Na Ma, Hai Fei Zhang, Peng Yin, Xiao Jun Bao, and Hong Fei Zhang. Weizsäcker-Skyrme-type nuclear mass formula incorporating two combinatorial radial basis function prescriptions and their application WEIZSÄCKER-SKYRME-TYPE NUCLEAR MASS FORMULA ... MA, ZHANG, YIN, BAO, and ZHANG. *Physical Review C*, 96(2):1–21, 2017. Citado na página 81.
- [126] GARVEY GT, GERACE WJ, JAFFE RL, and TALMI I. Set of Nuclear-Mass Relations and a Resultant Mass Table. *Reviews of Modern Physics*, 41(4 pt 2), 1969. Citado na página 82.

- [127] N. Chamel, S. Goriely, and J. M. Pearson. Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. XI. Stabilizing neutron stars against a ferromagnetic collapse. *Physical Review C*, 80(6):065804, dec 2009. Citado na página 82.
- [128] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson. Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. XII. Stiffness and stability of neutron-star matter. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 82(3), sep 2010. Citado 2 vezes nas páginas 82 and 83.
- [129] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson. Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear mass model with 0.50 MeV accuracy based on standard forms of Skyrme and pairing functionals. *Physical Review C*, 88(6):061302, dec 2013. Citado na página 83.
- [130] M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. The Ame2012 atomic mass evaluation. *Chinese Physics C*, 36(12):1603–2014, dec 2012. Citado na página 83.
- [131] P. Möller, J. R. Nix, W. D. Myers, and W. J. Swiatecki. Nuclear ground-state masses and deformations. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 59(2):185–381, 1995. Citado na página 83.
- [132] P. Möller, A. J. Sierk, T. Ichikawa, and H. Sagawa. Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM(2012). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 109-110(2012):1–204, 2016. Citado na página 83.
- [133] Ning Wang, Min Liu, Xizhen Wu, and Jie Meng. Surface diffuseness correction in global mass formula. *Physics Letters B*, 734:215–219, jun 2014. Citado na página 83.
- [134] H. Koura, T. Tachibana, M. Uno, and M. Yamada. Nuclidic Mass Formula on

- a Spherical Basis with an Improved Even-Odd Term. *Progress of Theoretical Physics*, 113(2):305–325, feb 2005. Citado na página 83.
- [135] Na Na Ma, Hai Fei Zhang, Xiao Jun Bao, Peng Hui Chen, Jian Min Dong, Jun Qing Li, and Hong Fei Zhang. Weizsäcker-Skyrme-type mass formula by considering radial basis function correction. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 42(9):0–15, 2015. Citado na página 85.
- [136] A. Sobiczewski. Theoretical predictions for the nucleus 118 296. *Physical Review C*, 94(5):051302, nov 2016. Nenhuma citação no texto.
- [137] A. Sobiczewski, Yu A. Litvinov, and M. Palczewski. Detailed illustration of the accuracy of currently used nuclear-mass models. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 119(May 2017):1–32, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 85 and 87.