



Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Impacto das predições das massas nucleares via redes neurais Bayesianas em núcleos do processo- r .

Mateus dos Santos

Rio de Janeiro - RJ, Agosto de 2025

Mateus dos Santos

Impacto das predições das massas nucleares via redes neurais Bayesianas em núcleos do processo- r .

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 (CBPF).

Coorientador : Dr. Arturo Rodolfo Samana (UESC).

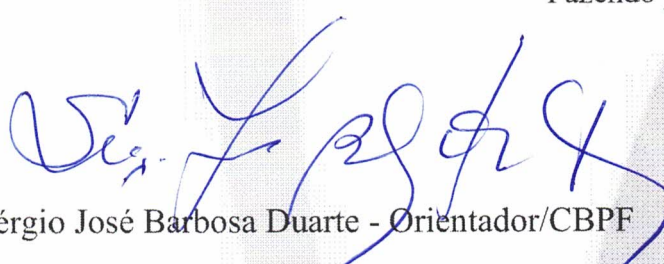
Rio de Janeiro - RJ

Agosto de 2025

"IMPACTO DAS PREDIÇÕES DAS MASSAS NUCLEARES VIA REDES
NEURAS BAYESIANAS EM NÚCLEOS DO PROCESSO-R"

MATEUS DOS SANTOS

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 - Orientador/CBPF

Airton Deppman – USP



Valdir Guimarães - USP



Documento assinado digitalmente

VALDIR GUIMARAES

Data: 03/10/2025 13:45:50-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>



Documento assinado digitalmente

ODILON LOURENCO DA SILVA FILHO

Data: 03/10/2025 14:29:50-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Odilon Lourenço da Silva Filho - ITA



Documento assinado digitalmente

BRETT VERN CARLSON

Data: 07/10/2025 09:32:42-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Brett Vern Carlson - ITA

Rio de Janeiro, 07 de agosto de 2025.

À minha esposa Iarisma Chaves

Agradecimentos

Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas por conceder a infraestrutura para o desenvolvimento da pesquisa.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de estudo.

Agradeço a Deus por ter me permitido chegar até aqui e finalizar mais este ciclo, levarei sempre comigo o aprendizado pessoal e profissional adquirido. Durante esta jornada contei com o apoio de muitas pessoas para suportar os momentos difíceis, a cada um deles meu sincero obrigado.

À minha esposa Iarisma Chaves, por seu amor, carinho e compreensão.

Um agradecimento especial a meu orientador Sérgio Duarte por todos esses anos de companheirismo, amizade, compreensão e principalmente por sua paciência para comigo. Sou muito grato pelos seus esforços para me ensinar e colaborar com o meu crescimento.

Ao professor Arturo Samana por seu apoio e motivação durante todos esses anos.

Aos professores Cláudio De Conti e Tiago de Jesus por suas contribuições e sugestões na formulação do código $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

Resumo

Neste trabalho, estudamos sistematicamente o impacto das massas nucleares e do decaimento- β em núcleos que participam do processo- r . No âmbito das massas nucleares, selecionamos os modelos mais bem ajustados aos dados experimentais disponíveis. Em seguida, aprimoramos cada um destes modelos com o método Bayesian Neural Network (BNN), incorporando dois novos inputs: termos de isospin e de superfície. A inclusão desses parâmetros no treinamento permitiu ao método BNN melhorar significativamente todos os modelos de massa analisados, alcançando o menor erro quadrático médio (root mean square) reportado na literatura, 0.113 MeV.

As predições das massas aprimoradas com o BNN apresentam uma melhoria em quantidades superiores a 50% em todos os modelos estudados. Para os modelos KTUY05 e DZ10, os aprimoramentos são de 80.3% e 79.5%, respectivamente. Estas correções reforçam a necessidade de se aprimorar os modelos de massa, principalmente em regiões de maior instabilidade.

Para estudar o decaimento- β , utilizamos o modelo proposto por Takahashi e Yamada, a Teoria grossa do decaimento beta. A este modelo, incorporamos as massas nucleares aprimoradas com o BNN e as primeiras transições proibidas. Observou-se que as transições proibidas e o BNN desempenham um papel fundamental na modelagem do decaimento- β , principalmente em núcleos ricos em nêutrons, reduzindo o gap entre o resultado teórico e o experimental em até 5 ordens de grandeza.

Em cenários onde não há dados experimentais disponíveis, como o de pré-supernova e supernova, os nossos resultados estão em excelente acordo com os modelos Shell Model e QRPA. Adicionalmente, incorporamos as mesmas transições proibidas na modelagem das seções de choque neutrino-núcleo. Os resultados obtidos estão em bom acordo com os modelos RPA e com o trabalho pioneiro de Itoh.

Por fim, aplicamos essas melhorias para calcular o tempo de congelamento do processo- r , considerando condições de temperatura e densidade de nêutrons suficientemente elevadas para sustentar o equilíbrio nuclear estatístico. Os resultados obtidos estão em linha com os sofisticados modelos hidrodinâmicos presentes na literatura, aproximadamente 1 s.

Palavras-chaves: Massa nuclear, redes neurais bayesianas, decaimento beta, processo- r .

Abstract

In this work, we systematically study the impact of nuclear masses and β -decay in nuclei that participate in the r -process. Regarding nuclear masses, we selected the models that best fit the available experimental data. Subsequently, we improved each of these models using the Bayesian Neural Network (BNN) method, incorporating two new inputs: isospin and surface terms. The inclusion of these parameters in the training allowed the BNN method to significantly enhance all the analyzed mass models, achieving the lowest root mean square error reported in the literature, 0.113 MeV.

The predictions of the masses improved by the BNN show enhancements greater than 50% for all studied models. For the KTUY05 and DZ10 models, the improvements are 80.3% and 79.5%, respectively. These corrections reinforce the need to refine mass models, especially in regions of greater instability.

To study β -decay, we employed the model proposed by Takahashi and Yamada, the Gross theory of beta-decay. To this model, we incorporated the nuclear masses improved by the BNN and the first-forbidden transitions. It was observed that both the forbidden transitions and the BNN play a fundamental role in modeling β -decay, particularly in neutron-rich nuclei, reducing the gap between theoretical predictions and experimental results by up to 5 orders of magnitude.

In scenarios where experimental data are not available, such as pre-supernova and supernova, our results are in excellent agreement with the Shell Model and QRPA. Additionally, we included the same forbidden transitions in the modeling of neutrino-nucleus cross sections. The obtained results are in good agreement with the RPA models and with the pioneering work of Itoh.

Finally, we applied these improvements to calculate the freeze-out time of the r -process, considering temperature and neutron density conditions high enough to maintain nuclear statistical equilibrium. The obtained results are consistent with the sophisticated hydrodynamic models reported in the literature, approximately 1 s.

Keywords: Nuclear masses, Bayesian Neural Network, β -decay, r -process.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Abundância dos elemetos formados no sistema solar através da captura de nêutrons (SNEDEN; COWAN, 2003).	1
Figura 2 – Visualização da órbita de um sistema binário contendo duas estrelas de nêutrons até o eventual colapso (FREBEL; BEERS, 2018).	2
Figura 3 – Visualização da órbita de um sistema binário contendo uma estrela de nêutron e um buraco negro (NISHIMURA et al., 2016).	3
Figura 4 – Trajetórias do processo- <i>s</i> e processo- <i>r</i> . Como podemos ver, o processo- <i>s</i> situa-se próximo a linha de estabilidade, enquanto o processo- <i>r</i> ocorre para os núcleos situados próximo à linha de gotejamento de nêutrons (MARTIN, 2017).	4
Figura 5 – Experimentos propostos nos últimos anos para a determinação das propriedades fundamentais dos núcleos sintetizados via processo- <i>r</i> (HOROWITZ et al., 2019).	5
Figura 6 – Abundâncias solares em diferentes processos de nucleossíntese. A região amarela mostra os elementos criados no Big Bang (MARTIN, 2017). . .	6
Figura 7 – Ciclo de vida de uma estrela (NASA, 2023).	6
Figura 8 – Representação esquemática dos ventos de neutrinos partindo da superfície de uma estrela de proto-nêutron. O eixo horizontal fornece informações sobre a massa e o vertical sobre o raio (LICCARDO et al., 2018).	8
Figura 9 – Mecanismos do processo- <i>r</i> e o ponto de espera (NIKAS, 2021).	10
Figura 10 – Comparação entre transições permitidas de Fermi e Gamow-Teller (ROCHA, 2018).	14
Figura 11 – Diagrama esquemático do elemento de matriz nuclear do decaimento- β^- . À esquerda temos a forma geral do decaimento- β^- entre estados discretos. E à direita o mesmo decaimento representado na GTBD. (ENDO; KOURA, 2019).	20
Figura 12 – Diagrama esquemático dos níveis de partícula simples do $^{131}_{49}\text{In}$ e $^{132}_{49}\text{In}$. Os estados fundamentais de cada núcleo estão indicados em rosa (KOURA; CHIBA, 2017).	25
Figura 13 – Esquema de decaimento do $^{208}_{127}\text{Tl}$ nos níveis de partícula simples. As linhas lilás representam os estados de paridade positiva e as verdes os estados de paridade negativas. As flechas pretas representam todos os canais de transição possíveis para o decaimento- β (ENDO; KOURA, 2019).	26

Figura 14 – Contribuição das primeiras transições proibidas para a taxa de decaimento- β , considerando apenas núcleos com meia-vida menor que 1 s. As linhas pretas indicam as posições das camadas fechadas de prótons e nêutrons (MARKETIN; HUTHER; MARTÍNEZ-PINEDO, 2016).	28
Figura 15 – Seções de choque para o espalhamento inelástico neutrino-núcleo em núcleos com temperatura finita (LANGANKE; THIELEMANN; WIESCHER., 2004). As temperaturas estão em MeV.	35
Figura 16 – Figura esquemática do decaimento- β e da emissão retardada de nêutrons (KOURA et al., 2017).	38
Figura 17 – Parâmetros da densidade efetiva determinados por dados experimentais (círculos, quadrados e triângulos) e calculados pela equação (2.76) (linha sólida) ambos plotados em função do número de nêutrons. Os subplots representam: (a) par-par, (b) A-ímpar, e (c) ímpar-ímpar. As linhas verticais pontilhadas representam os números mágicos (28, 50, 82) (MIERNIK, 2013).	40
Figura 18 – Parâmetros da densidade efetiva calculados por diferentes modelos (MIERNIK, 2013). (a) KHF (KRATZ; HERRMANN, 1973), (b) McCutchan (McCUTCHAN et al., 2012), (c) QRPA (MÖLLER; PFEIFFER; KRATZ, 2003) e (d) GTBD (TACHIBANA; YAMADA; YOSHIDA, 1990).	41
Figura 19 – Representação esquemática das conexões entre teoria, ciência computacional e experimentos (BOEHNLEIN et al., 2022).	44
Figura 20 – A imagem superior mostra um neurônio biológico. A imagem inferior representa um neurônio artificial (Fraidoon Omarzai, 2024).	45
Figura 21 – Arquitetura de uma perceptron multicamada com n entradas, duas camadas ocultas de neurônios e m saídas (CHAN et al., 2023).	46
Figura 22 – Diferentes tipos de funções de ativação (JADON, 2018).	47
Figura 23 – Diferenças entre uma rede neural convencional e uma rede neural bayesiana (Gabriel Costa, 2022).	49
Figura 24 – Resíduos ($M_{th} - M_{exp}$) das predições referente a sete modelos de massas comumente utilizados na literatura, os dados experimentais são referentes ao AME2012 (MUMPOWER et al., 2016).	51
Figura 25 – Dados de treino (círculos cinza) e dados de validação (círculos verdes) utilizados no modelo BNN. Em ambos os casos utilizamos dados experimentais retirados do AME2020, com a exceção dos núcleos com incertezas experimentais superiores à 100 keV e $Z \leq 21$	55
Figura 26 – Comparação entre os resultados obtidos por Niu <i>et al.</i> (Niu: BNN-I2 e Niu: BNN-I4) (NIU; LIANG, 2018) e os resultados obtidos neste trabalho (BNN-5 e BNN-6) para o conjunto de dados de treino.	58

Figura 27 – Comparação entre os resultados obtidos por Niu <i>et al.</i> (Niu: BNN-I2 e Niu: BNN-I4) (NIU; LIANG, 2018) e os resultados obtidos neste trabalho (BNN-5 e BNN-6) para o conjunto de dados de validação.	59
Figura 28 – Painel superior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e as massas experimentais. Painel inferior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o WS4+BNN-6 (após o treinamento) e as massas experimentais. Resultados obtidos para o conjunto de dados de treinamento.	60
Figura 29 – Painel superior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e as massas experimentais. Painel inferior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o WS4+BNN-6 (após o treinamento) e as massas experimentais. Resultados obtidos para o conjunto de dados de validação.	61
Figura 30 – Avaliação da zona de “confiança” da BNN através da incerteza oriunda do próprio método. A linha pontilhada representa o contorno da região de treinamento. σ_{error} representa a incerteza absoluta no cálculo da massa nuclear.	62
Figura 31 – Comparação do excesso de massa obtido com o modelo WS4+BNN-6, para isótopos de Tc, com dados experimentais do AME2020 e o resultado experimental mais recente do experimento ToF-B ρ (WANG et al., 2024). A região em azul representa os dados que não participaram do treinamento com BNN.	63
Figura 32 – Comparação do excesso de massa obtido com o modelo WS4+BNN-6, para isótopos de Zn, com dados experimentais do AME2020 e o resultado experimental mais recente do experimento TITAN (JACOBS et al., 2025). A região em azul representa os dados que não participaram do treinamento com BNN.	64
Figura 33 – Painel superior: diferença entre as energias de separação de nêutrons S_n obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e os dados experimentais. Painel inferior: diferença entre os resultados obtidos com o modelo WS4+BNN-6 (após o treinamento) e os dados experimentais. Estes resultados foram obtidos para o conjunto de dados de treino.	65
Figura 34 – Energia de separação de nêutrons para núcleos número de nêutrons mágicos $N = 50, 82, 126$ e 184 . Os resultados obtidos com o modelo WS4+BNN-6 (em preto) são comparados com os dados experimentais provenientes do AME2020. A região sombreada em cinza representa a região de treinamento do BNN.	66

Figura 35 – O painel superior apresenta uma comparação entre o rms antes (verde) e depois (salmão) do treinamento com BNN para S_n . O painel inferior segue a mesma lógica para Q_β	67
Figura 36 – O painel superior mostra uma comparação das meias-vidas do decaimento- β^- para o conjunto par-par, obtidas com o modelo GTBD1 (sem os aprimoramentos desenvolvidos neste trabalho) com os dados experimentais. O painel inferior apresenta a mesma comparação entre o modelo aprimorado $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$ e os dados experimentais.	71
Figura 37 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto par-ímpar. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$. . .	72
Figura 38 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto ímpar-par. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$. . .	73
Figura 39 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto ímpar-ímpar. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$. . .	74
Figura 40 – Comparação entre as meias-vidas para ambos os decaimentos, β^+ e β^- , obtidas com os modelos GTBD1 e $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$ com os dados experimentais.	75
Figura 41 – Comparação entre a meia vida teórica e experimental para o decaimento- β^- em isótopos de Fe, Co, Ni e Cu. Os resultados para as transições permitidas foram obtidos com o modelo GTBD1 e a inclusão das transições proibidas com o modelo $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$	76
Figura 42 – Comparação entre a meia vida teórica e experimental para o decaimento- β^+ em isótopos de Rb, Zr, Sn e Ho. Os resultados para as transições permitidas (Allowed) foram obtidos com o modelo GTBD1 e a inclusão das transições proibidas com o modelo $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$	77
Figura 43 – Razão entre as meias-vidas do decaimento- β obtidas com o modelo $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$ em temperaturas de a) $T_9 = 1.16$, b) $T_9 = 2.32$, c) $T_9 = 3.48$ e d) $T_9 = 4.64$. A temperatura $T_9 = 0.0$, representa a temperatura no ground-state. . . .	80
Figura 44 – Razão entre as meias-vidas do decaimento- β obtidas com o modelo $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$ em temperaturas de e) $T_9 = 5.8$, f) $T_9 = 11.6$, g) $T_9 = 17.4$ e h) $T_9 = 23.2$. A temperatura $T_9 = 0.0$, representa a temperatura no ground-state. . . .	81

Figura 45 – Seção de choque total para a reação $^{56}\text{Fe}(\nu_e, e^-) ^{56}\text{Co}$ em 10^{-42} cm^2 . As seções de choque obtidas neste trabalho estão dispostas em azul (GTBD), e são comparadas com o trabalho pioneiro de Itoh (ITOH; KOHYAMA, 1978), em vermelho.	82
Figura 46 – Seções de choque neutrino-núcleo para diferentes cadeias isotópicas. Nos painéis superiores estão dispostas as cadeias de Co e Ni. E nos painéis inferiores as cadeias de Cu e Zn. Os resultados foram obtidos com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$	83
Figura 47 – Comparação das seções médias de neutrinos calculadas com a distribuição de Fermi-Dirac (ver Eq. 2.62), para diferentes temperaturas de neutrinos. $\langle\sigma\rangle^{allow.+f.f.}$ representa as seções de choque com a inclusão das transições proibidas, já $\langle\sigma\rangle^{allow.}$ conta somente com as transições permitidas. Utilizamos como parâmetro fixo o produto $\rho Y_e = 10^9 \text{ g/cm}^3$	85
Figura 48 – Probabilidade de emissão de um nêutron retardado no decaimento- β em função da massa. Os triângulos em azul representam os resultados obtidos com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$ e em vermelho estão dispostos os dados experimentais.	87
Figura 49 – Evolução temporal das abundâncias normalizadas $P(Z, A)$ para o intervalo de massa $56 \leq A \leq 125$. Cada painel representa um instante de tempo diferente e consequentemente temperatura e densidade diferentes. Os cálculos foram realizados com o modelo aprimorado WS4+BNN-6.	89
Figura 50 – Tempo de congelamento do processo- r (ou freeze-out time) calculado com o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$. Cada painel mostra o tempo de congelamento em função da temperatura em 10^9 K , para uma densidade de nêutrons fixa.	90

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	A origem dos elementos	1
1.2	Sítios astrofísicos	2
1.2.1	Estrelas de nêutrons binárias (BNS)	3
1.2.2	Supernova	7
1.3	Os ventos de neutrinos	8
1.4	O papel da fissão nuclear	9
1.5	Mecanismos do processo-r	10
2	REAÇÕES NUCLEARES : DADOS NUCLEARES PARA O PROCESSO-r	13
2.1	Propriedades gerais e modelos de decaimento- β	13
2.2	A Teoria Grossa para o decaimento- β (GTBD)	18
2.3	Formalismo das transições proibidas	27
2.4	A Teoria Grossa para a captura de neutrinos	33
2.5	Emissão retardada de nêutrons no decaimento- β	37
3	APLICAÇÕES DO MACHINE LEARNING E MODELOS NUCLEARES DE MASSA	43
3.1	Redes neurais artificiais	45
3.2	Redes Neurais Bayesianas	48
3.3	O problema das massas nucleares	50
4	RESULTADOS E ANÁLISE	55
4.1	Aprimoramento das massas nucleares com BNN	55
4.2	Meia-vida do decaimento- β dentro do formalismo da GTBD	68
4.2.1	Meia-vida no ground-state	68
4.2.2	Meia-vida no ambiente astrofísico	78
4.3	Seções de choque neutrino-núcleo	81
4.4	Emissão de nêutrons retardados no decaimento- β	86
4.5	Tempo de freeze-out no processo- r	88
5	CONCLUSÕES	92
	REFERÊNCIAS	95

1 Introdução

1.1 A origem dos elementos

Sabe-se que a maior parte do hidrogênio e hélio presente no universo foi criada durante os três primeiros minutos depois do Big Bang, compondo cerca de 98% da sua matéria bariônica. Elementos como berílio e boro são sintetizados no meio interestelar por meio de colisões entre raios cósmicos e o gás nuclear. Todos os outros elementos que conhecemos, com a exceção de uma pequena quantidade de lítio, são formados no interior das estrelas (COWAN; THIELEMAN, 2004).

Elementos com massa menor que o ferro são sintetizados através do processo de fusão nuclear durante a evolução de algumas estrelas, especialmente nos últimos ciclos de uma estrela massiva. Em cenários como esse, uma das dificuldades enfrentadas para a produção de elementos pesados é o crescimento da barreira coulombiana com o aumento do número de prótons. Logo, o mecanismo principal para a formação de novos elementos passa a ser a

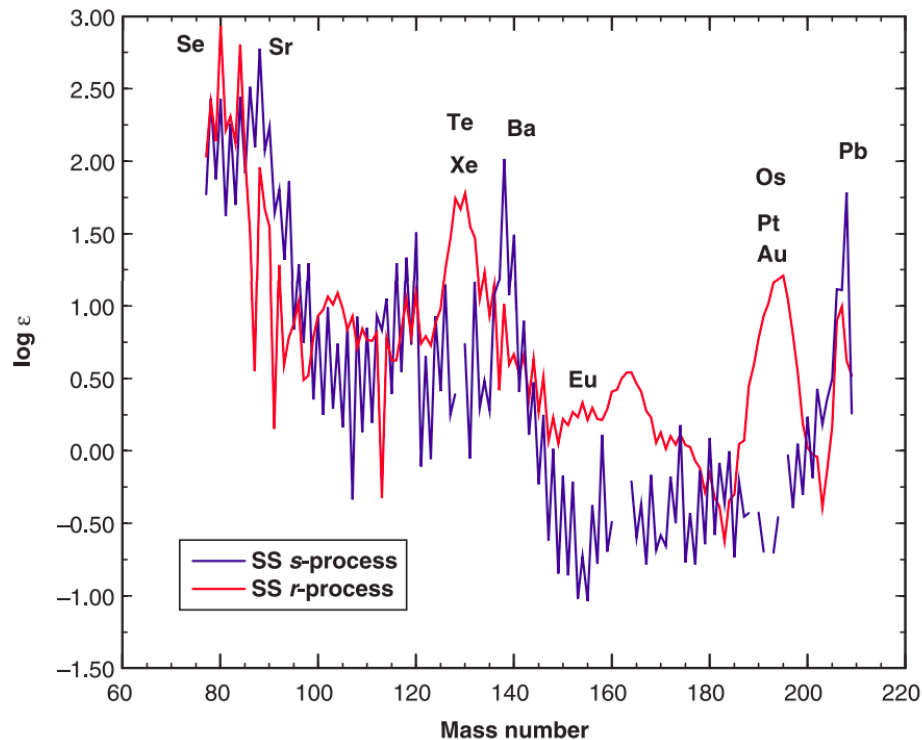


Figura 1 – Abundância dos elementos formados no sistema solar através da captura de nêutrons (SNEDEN; COWAN, 2003).

captura de nêutrons, desde que o sítio em questão possua uma grande quantidade de nêutrons livres. Como sabemos, nêutrons são mais fáceis de serem capturados do que prótons, uma vez que eles não sofrem repulsão coulombiana.

Os processos de captura de nêutrons em sítios astrofísicos foram identificados em 1957, no trabalho pioneiro de Margaret e Geoffrey Burbidge ([BURBIDGE et al., 1957](#)). Eles são chamados de processo-*r* (rapid neutron capture) e processo-*s* (slow neutron capture). Nestes processos, a subsequente captura de nêutrons livres por um núcleo semente conduzirá à formação de novos núcleos, mais pesados e instáveis, que consequentemente decairão em núcleos mais estáveis, formando então os elementos pesados que conhecemos ([FREBEL; BEERS, 2018](#)).

O processo-*r* e o processo-*s* contribuem quase que igualmente para a formação de elementos pesados, como pode ser observado nas medições das abundâncias isotópicas de alguns elementos que são formados por ambos os processos, como mostra a Figura 1. As condições físicas dos sítios astrofísicos e as propriedades nucleares para que o processo-*r* ocorra ainda não estão bem estabelecidas. Por outro lado, as condições para o processo-*s* já são conhecidas, seus sítios primários são estrelas de massa entre 0.8 e 8 $M_{\odot}$, e de longo tempo de evolução (bilhões de anos) ([MAGRINI et al., 2018](#)).

1.2 Sítios astrofísicos

A origem astrofísica do processo-*r* ainda é um tema em aberto, sendo nomeada como uma das onze questões a serem respondidas no presente século (*11 Science Questions for the new Century*) ([COUNCIL, 2003](#)). Durante muitos anos acreditou-se que a core-collapse supernova era o principal ambiente astrofísico para a nucleossíntese de elementos pesados. Esta ideia estava pautada nos ventos de neutrinos, que emergem depois do nascimento de uma proto-estrela de nêutrons, favorecendo a produção de elementos pesados ([TAKAHASHI; WITTI; JANKA, 1994](#); [QIAN; WOOSLEY, 1996](#)). Em 1974, Lattimer e Schramm sugeriram

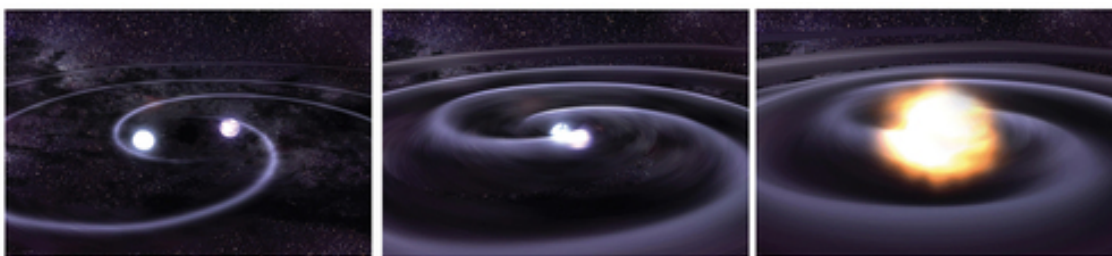


Figura 2 – Visualização da órbita de um sistema binário contendo duas estrelas de nêutrons até o eventual colapso ([FREBEL; BEERS, 2018](#)).

que nos halos das estrelas de nêutrons haveria um alto potencial para sintetizar elementos pesados (LATTIMER; SCHRAMM, 1974; LATTIMER; SCHRAMM, 1976). Em 2016, uma pequena galáxia chamada Reticulum II (Ret II), promoveu evidências de que uma explosão de supernova não poderia ser o principal mecanismo de produção desses elementos. A composição das estrelas presentes no Ret II sugere fortemente que a fusão de duas estrelas de nêutrons é o principal mecanismo de produção de elementos mais pesados do que o Fe (FREBEL; BEERS, 2018). Este cenário tem como suporte as observações feitas pelo Laser Interferometer Gravitational Wave Observatory (LIGO), que observaram pela primeira vez a kilonova (ZHU et al., 2021). Uma kilonova ocorre quando duas estrelas de nêutrons se fundem; isso acontece devido à perda de energia e momento angular através da emissão de ondas gravitacionais por parte das estrelas (ver Figura 2).

1.2.1 Estrelas de nêutrons binárias (BNS)

Neste sítio a nucleossíntese de elementos via processo- r ocorre de duas formas. A primeira é através da fusão de duas estrelas de nêutrons (NS + NS) (Figura 2) e a segunda é pela fusão de uma estrela de nêutron com um buraco negro (NS + BH) (Figura 3) (THIELEMANN et al., 2017; GORIELY; JANKA, 2011; NISHIMURA et al., 2016; KYUTOKU et al., 2018). Desde a observação das ondas gravitacionais GW170817 e sua kilonova associada, surgiram vários modelos com a proposta de descrever o processo- r em estrelas de nêutrons e a respectiva ejeção hidrodinâmica de matéria no meio interestelar. A matéria ejetada na fusão de duas estrelas de nêutrons pode ser extremamente rica em nêutrons ($\langle Z/A | Z/A \rangle \equiv Y_e \sim 0.1$), uma vez que o processo- r ocorre próximo à linha de gotejamento de nêutrons (ver Figura 4). Neste cenário pode ocorrer o que chamamos de “reciclagem de fissão”, isto é, após o término do processo- r por uma fissão induzida via decaimento- β ou captura de nêutrons, os fragmentos de fissão podem continuar a capturar novos nêutrons e formar novos núcleos, até novamente a fissão encerrar o processo. Este ciclo é repetido algumas vezes.

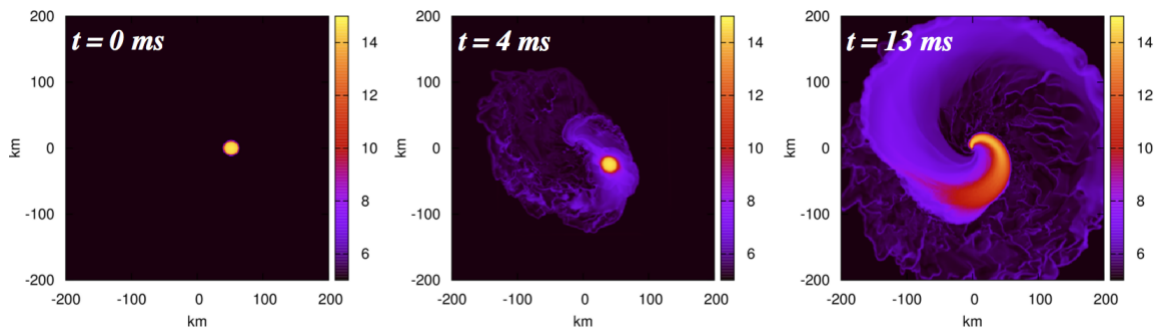


Figura 3 – Visualização da órbita de um sistema binário contendo uma estrela de nêutron e um buraco negro (NISHIMURA et al., 2016).

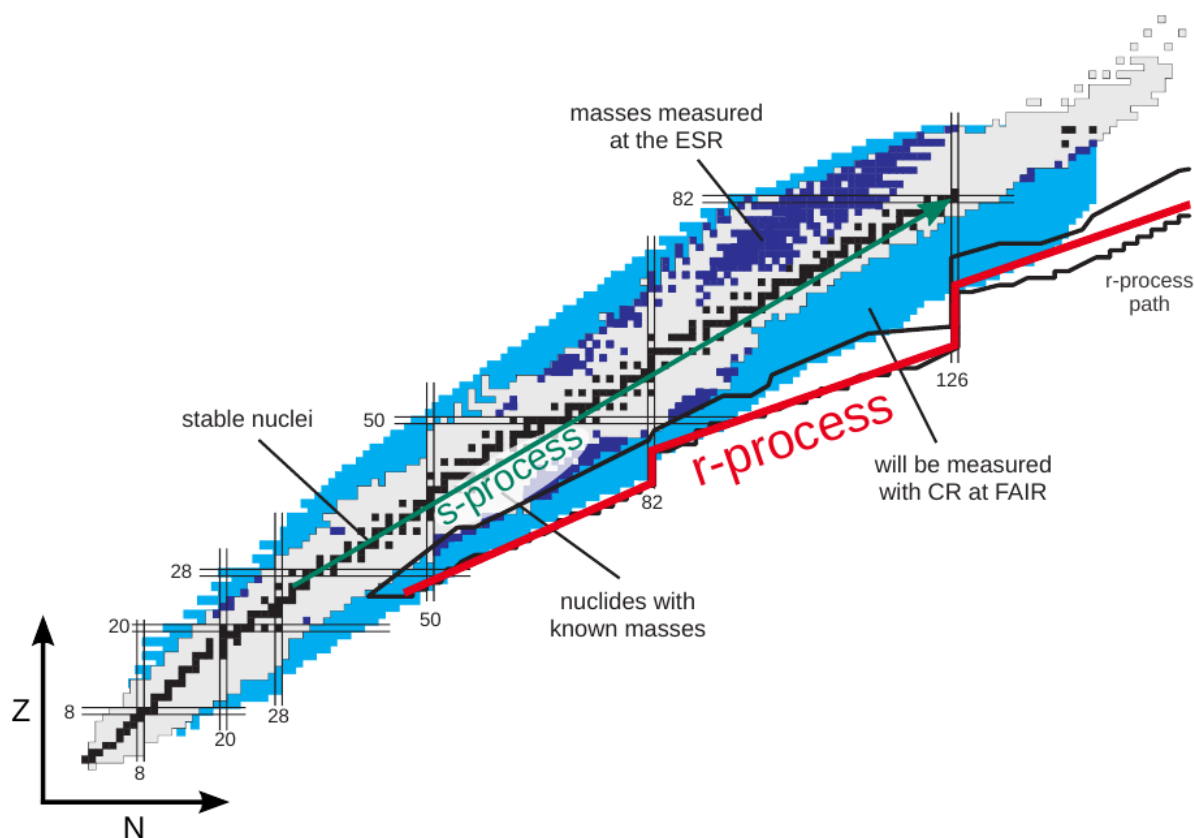


Figura 4 – Trajetórias do processo-*s* e processo-*r*. Como podemos ver, o processo-*s* situa-se próximo a linha de estabilidade, enquanto o processo-*r* ocorre para os núcleos situados próximo à linha de gotejamento de nêutrons (MARTIN, 2017).

Como sabemos, a física nuclear necessária para descrever a nucleossíntese dos elementos pesados em uma BNS é robusta. Sendo assim, os modelos de processo-*r* necessitam englobar todas as reações presentes em uma BNS de forma simultânea. Estes modelos, por muitas vezes, precisam fazer extrapolações de propriedades nucleares importantes, principalmente quando trata-se dos últimos núcleos de cada cadeia isotópica. Para testar a qualidade dos modelos de processo-*r*, será necessário obter, antes de tudo, medidas experimentais sólidas das propriedades fundamentais dos núcleos, como a massa, taxas de decaimento e as seções de choque das respectivas reações. Com o objetivo de medir essas quantidades, vários experimentos foram propostos nos últimos anos, como mostra a Figura 5. Um exemplo recente, é o Facility for Rare Isotope Beams ¹ que foi inaugurado em 2022, situado na Universidade de Michigan.

¹ <<https://frib.msu.edu/index.php>>

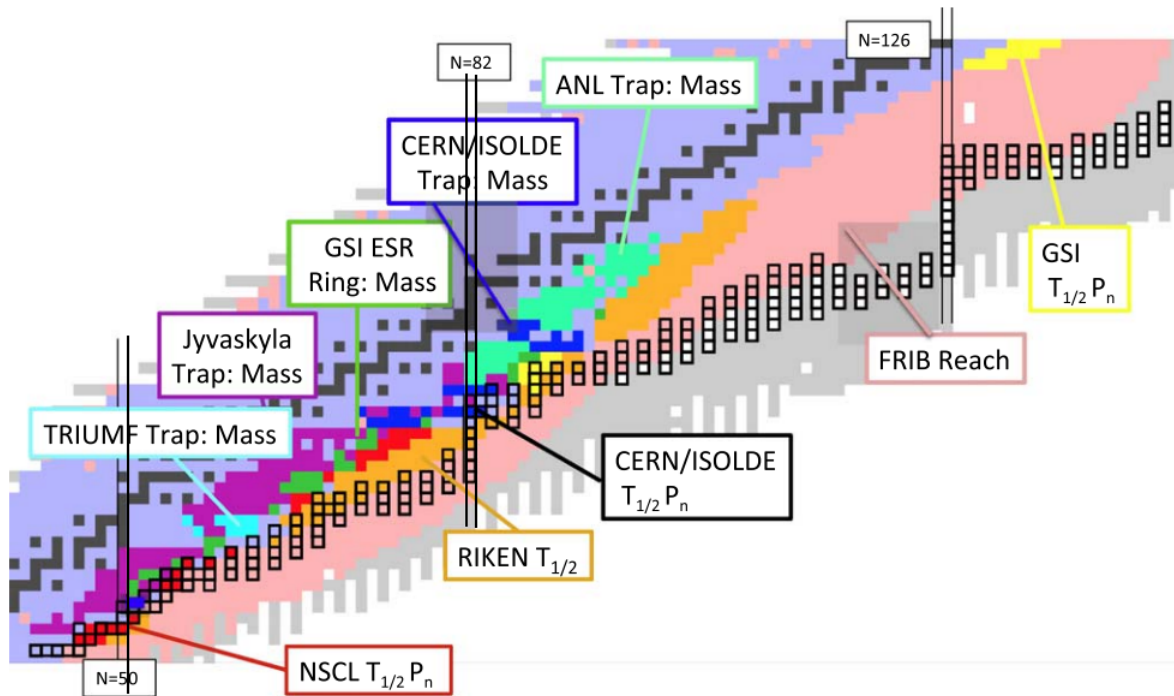


Figura 5 – Experimentos propostos nos últimos anos para a determinação das propriedades fundamentais dos núcleos sintetizados via processo-r (HOROWITZ *et al.*, 2019).

Nos últimos anos, simulações de nucleossíntese de elementos pesados em uma BNS indicaram que as abundâncias elementares, para núcleos com $A > 130$, produzidas neste sítio podem ser comparadas com as abundâncias solares (KOROBKIN *et al.*, 2012; GORIELY *et al.*, 2013; THIELEMANN *et al.*, 2017). É importante novamente mencionar que a distribuição dos fragmentos de fissão pode afetar o resultado final das abundâncias. Porém, as previsões destas distribuições ainda possuem muitas incertezas, pois os modelos microscópicos atuais tendem a produzir pequenas barreiras de fissão e distribuições estreitas dos fragmentos (MARTÍNEZ-PINEDO *et al.*, 2007). No entanto, Shibagaki *et al.* propôs um modelo para estudar a distribuição dos fragmentos de fissão usando as taxas de decaimento- β e as probabilidades de emissão de nêutrons e de fissão, ambas induzidas pelo decaimento- β retardado (beta-delayed) (SHIBAGAKI *et al.*, 2016). As taxas de fissão espontânea e as taxas do decaimento- α são consideradas no modelo proposto por Koura (KOURA, 2004).

Durante a fusão NS + BH, a matéria bariônica pode se desvincular do sistema. Esta matéria é extremamente rica em nêutrons, produzindo um cenário muito favorável ao processo- r e a nucleossíntese de elementos pesados (NISHIMURA *et al.*, 2016; KYUTOKU *et al.*, 2018). Neste sítio, alguns modelos como o proposto por Roberts *et al.*, constataram que o material ejetado durante a fusão pode produzir a captura rápida de nêutrons até para luminosidades extremamente altas de neutrinos, devido à alta velocidade da matéria ejetada (ROBERTS *et*

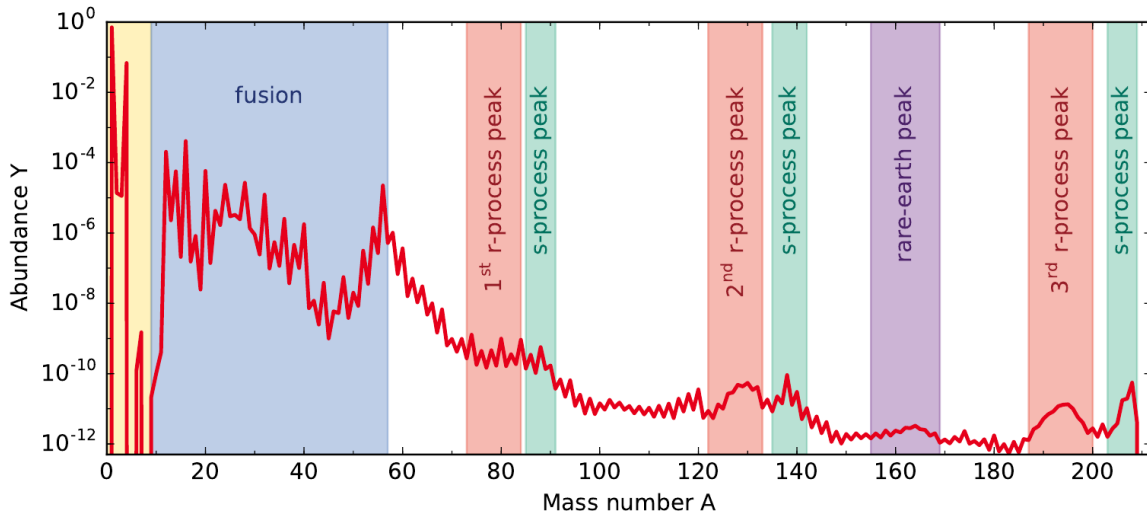


Figura 6 – Abundâncias solares em diferentes processos de nucleossíntese. A região amarela mostra os elementos criados no Big Bang (MARTIN, 2017).

al., 2016). Em cenários como este, os neutrinos possuem um papel fundamental, impactando diretamente no caminho do processo-*r*.

No trabalho desenvolvido por *Wu et al.*, o processo-*r* foi estudado nos discos de acreção de buracos negros e no sistema NS+BH. Eles realizaram simulações hidrodinâmicas com a inclusão de trajetórias termodinâmicas. Foi constatado que a matéria ejetada nesses sistemas podem reproduzir as abundâncias dos núcleos perto do segundo pico ($A \sim 130$) (WU et al., 2016). Especificamente, nos discos de acreção a matéria ejetada pode sintetizar núcleos com massa $A \sim 195$ e reproduzir o terceiro pico, como mostra a Figura 6.

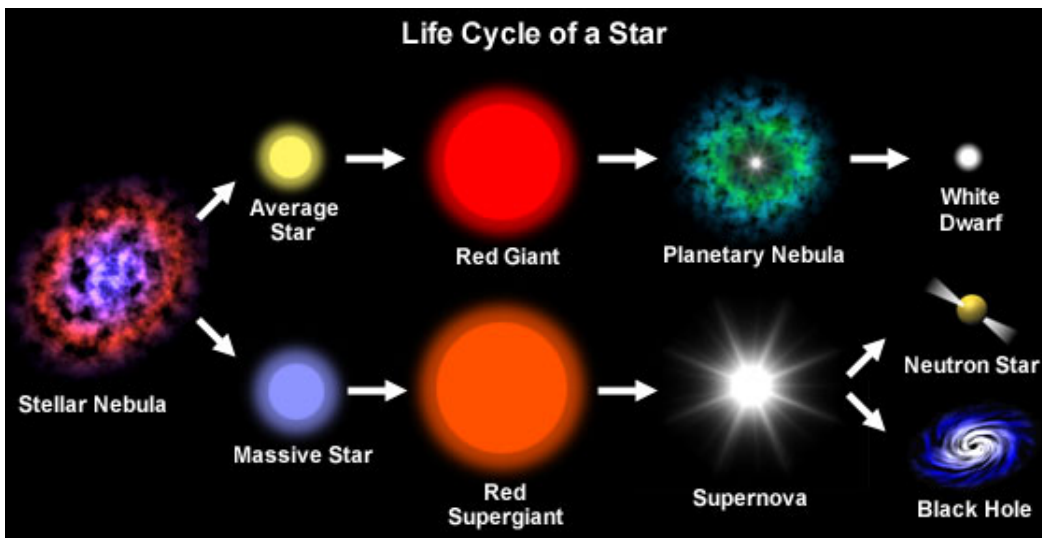


Figura 7 – Ciclo de vida de uma estrela (NASA, 2023).

1.2.2 Supernova

Toda estrela nasce a partir de uma nebulosa, que nada mais é do que uma grande nuvem de gás composta por He e H. A Figura 7 mostra a sequência de evolução das estrelas. Essa sequência depende, em um primeiro momento, da massa da estrela que se forma a partir da nebulosa. Estrelas muito massivas queimam seu combustível rapidamente, fazendo com que sua vida seja mais curta quando comparadas com as estrelas menos massivas.

O próximo estágio de uma estrela massiva é se tornar uma super gigante vermelha, essas estrelas possuem um caroço central onde ocorrem as reações nucleares, que são o combustível da estrela. O limite de massa de Chandrasekhar impõe uma densidade crítica para essa região, quando esta é atingida, o gás de elétrons degenerados não consegue suportar a pressão gravitacional, e um rápido colapso da estrutura é desencadeado.

Os núcleos presentes nessa estrutura capturam elétrons, e consequentemente emitem neutrinos a partir da reação:



Esses neutrinos são transportados para as camadas mais externas da estrela, fazendo com que ela perca energia, temperatura e pressão. Quando o colapso gravitacional é intensificado, também a captura eletrônica se intensifica, isso alimenta ainda mais o colapso da estrutura.

O processo dominante durante esta fase é a captura de neutrinos e antineutrinos por núcleos das camadas mais externas. A competição entre esses dois processos determina se a nucleossíntese irá ocorrer em um sítio rico em prótons (processo νp) (FRÖHLICH et al., 2006) ou rico em nêutrons. Este último, foi por muitos anos considerado o cenário mais provável para o processo- r (LANGANKE; MARTÍNEZ-PINEDO; SIEVERDING, 2020). Porém, resultados recentes de simulações de supernova indicaram que os ventos de neutrinos são somente suficientes para produzir o processo- r fraco, no qual os elementos formados possuem massa intermediária.

Os neutrinos de supernova possuem energia relativamente baixa, algo em torno de algumas dezenas de MeV. Nessa faixa de energia, as seções de choque neutrino-núcleo são dominadas pelas transições permitidas, ou seja, Fermi ($\Delta J = 0^+$) e Gamow-Teller ($\Delta J = 1^+$). As transições proibidas se tornam relevantes para neutrinos mais energéticos. Com isso, os modelos nucleares devem descrever bem esses dois tipos de transição. Durante a fase de colapso, o processo dominante é a captura eletrônica, como vimos anteriormente. Esse processo nada mais é do que o inverso da captura de neutrinos, assim como no caso anterior, as transições permitidas dominam o processo em baixas energias e as transições proibidas se tornam relevantes à medida que a energia aumenta (HIX et al., 2003; LANGANKE et al., 2003).

1.3 Os ventos de neutrinos

Os ventos de neutrinos têm atraído grande atenção durante os últimos anos, devido à sua possível contribuição para a formação de elementos pesados (ARCONES; THIELEMAN, 2012). De acordo com a teoria mais consolidada sobre o mecanismo de explosão de estrelas massivas, a energia da explosão é transmitida pelos neutrinos que são emitidos de forma abundante do interior de uma proto-estrela de nêutrons (PNS) recém-formada (ver Figura 8).

Esse transporte de energia pelos neutrinos e antineutrinos, ocasiona o resfriamento da PNS. É importante ressaltar que neutrinos e antineutrinos dos três sabores são emitidos nesse processo. À medida que esses neutrinos são emitidos e passam pela matéria quente, que consiste predominantemente de núcleons livres fora da PNS, uma fração de neutrinos e antineutrinos eletrônicos podem ser absorvidos pela matéria através das seguintes reações:



A energia adquirida pelo nucleon nessas reações é da ordem de 20 MeV. Para escapar da PNS, um nucleon precisa superar o potencial gravitacional de aproximadamente 200 MeV, o que implica em cerca de dez interações com neutrinos ou antineutrinos (LICCARDO et al., 2018).

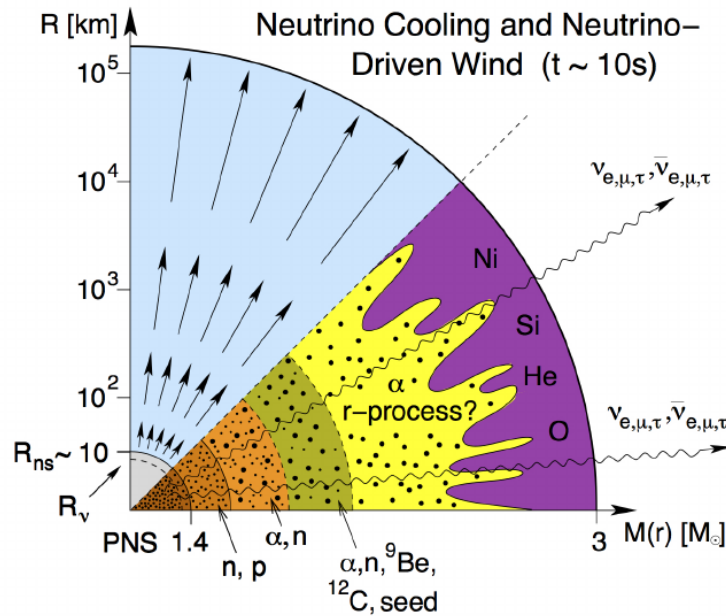


Figura 8 – Representação esquemática dos ventos de neutrinos partindo da superfície de uma estrela de proto-nêutron. O eixo horizontal fornece informações sobre a massa e o vertical sobre o raio (LICCARDO et al., 2018).

1.4 O papel da fissão nuclear

As condições de temperatura e densidade de nêutrons do sítio são determinantes para a continuidade do processo- r . Caso elas sejam favoráveis por um tempo suficientemente longo, núcleos fissionáveis serão formados. Neste ponto, o núcleo pode sofrer uma *fissão espontânea* ou induzida pela colisão com um outro nêutron do sítio, esta última chamamos de *fissão induzida*. Há também a fissão induzida pelo decaimento- β retardado e em ambientes com um fluxo de neutrinos elevado, a fissão induzida por neutrinos também pode ocorrer (MARTÍNEZ-PINEDO et al., 2007).

A partir da fissão, fragmentos de fissão são formados. Estes fragmentos são extremamente ricos em nêutrons, com isso tornam-se eficientes canais de decaimento- β . Com o decaimento radioativo, esses fragmentos avançam em direção à linha de estabilidade- β e o percurso do processo- r é interrompido, ocorrendo uma realimentação do processo com os novos fragmentos (SCHECHTER; BERTULANI, 2007). Chamamos de *ciclo do processo- r* o tempo necessário para que ocorra a realimentação.

Até que a situação de fissionabilidade dos núcleos seja alcançada, o tempo do ciclo do processo- r depende quase que exclusivamente dos tempos médios das cadeias isotópicas formadas

$$\tau_{\beta} = \frac{1}{\lambda_{\beta}(Z)}. \quad (1.3)$$

O papel da fissão no processo- r tem sido um tópico amplamente estudado nos últimos anos (PANOV et al., 2005). É necessário enfatizar que a fissão desempenha um papel fundamental na determinação final das abundâncias, com isso torna-se necessário utilizar modelos cada vez mais realistas para calcular as taxas de fissão dos núcleos que participam deste processo.

Há alguns anos atrás, Martínez-Pinedo et al. (MARTÍNEZ-PINEDO et al., 2007) mostraram que a fissão induzida por nêutrons é o processo de fissão dominante no processo- r . Eles mostraram que a porcentagem de núcleos na abundância final que sofrem fissão induzida por nêutrons é de 36% do total, para a fissão induzida pelo decaimento- β retardado 3% e para fissão induzida por neutrinos 0.3%. As taxas de fissão induzida por nêutrons foram obtidas com o código ABLA (GAIMARD; SCHMIDT, 1991; BENLLIURE et al., 1998) e as taxas de fissão induzidas pelo decaimento- β retardado foram obtidas com base no modelo FRDM (Finite Range Droplet Model) (MÖLLER; PFEIFFER; KRATZ, 2003). Já as taxas de fissão espontânea foram obtidas por meio de uma regressão linear dos dados experimentais (KODAMA; TAKAHASHI, 1975). Para verificar a influência dos processos de fissão nas

abundâncias finais, foram utilizados três modelos de massas nucleares: FRDM, Duflo-Zuker e ETFSI-Q.

1.5 Mecanismos do processo- r

Como descrevemos anteriormente, aproximadamente metade dos elementos pesados que conhecemos foram sintetizados através do processo- r . Nessa seção, discutiremos as condições astrofísicas e restrições para que esse processo ocorra.

A temperatura inicial no processo de fusão de duas estrelas de nêutrons, quando a matéria ainda está muito quente, é da ordem de $T \approx 10^{10}\text{K}$. Nosso objetivo é seguir esse processo acompanhando a evolução da temperatura desse sistema.

Como as temperaturas são muito altas nessa fase, a nucleossíntese acontece sob o equilíbrio nuclear estatístico (NSE). E a medida que a temperatura diminui, algumas reações se tornam menos frequentes. Eventualmente, essas reações se tornarão muito lentas para manter o equilíbrio. Quando esse equilíbrio termina, chamamos essa etapa de *freeze out*. Nessa fase, as abundâncias de cada elemento dependem inteiramente da competição entre o decaimento- β , a fotodesintegração e a captura de nêutrons. Quando a captura de nêutrons termina, os núcleos estão muito ricos em nêutrons e consequentemente muito instáveis, com isso decaem de volta para o vale de estabilidade- β , através do decaimento- β retardado.

A fotodesintegração desempenha um papel muito importante na trajetória do processo-

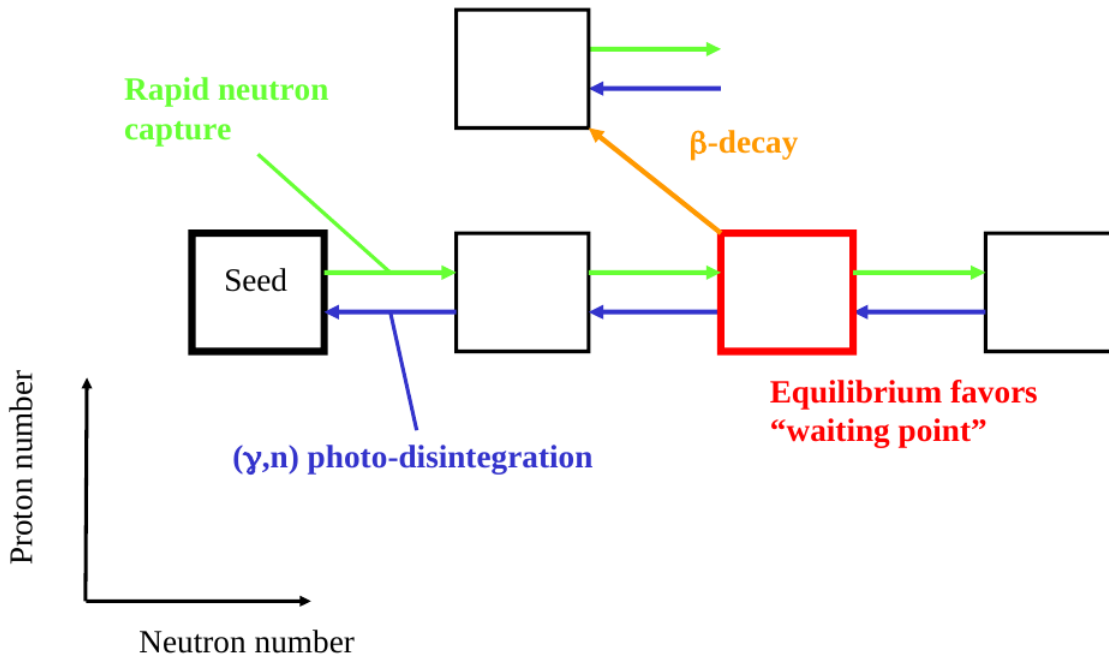


Figura 9 – Mecanismos do processo- r e o ponto de espera (NIKAS, 2021).

r. Podemos dizer que tudo começa com um núcleo semente (A, Z) , onde este captura nêutrons, como mostra a equação abaixo:

$$(A, Z) + n \rightarrow (A + 1, Z) + n \rightarrow (A + 2, Z) + n \dots (A + i, Z). \quad (1.4)$$

Com isso, quanto mais ricos em nêutrons os núcleos se tornam, mais (a) as seções de choque (n, γ) diminuem e (b) as seções de choque (γ, n) aumentam. Quando as taxas (n, γ) são iguais as taxas (γ, n) o equilíbrio é atingido (ver Figura 9). Esse equilíbrio dura cerca de 1 s, tempo este em que os núcleos deixam de capturar nêutrons. Durante a evolução do equilíbrio $(n, \gamma) \leftrightarrow (\gamma, n)$, a escala de tempo do decaimento- β é maior do que a captura de nêutrons e a fotodesintegração

$$\tau_{(n,\gamma)} \approx \tau_{(\gamma,n)} \ll \tau_{\beta}. \quad (1.5)$$

A este tipo de evolução chamamos de *hot r-process* (ARCONES; MARTÍNEZ-PINEDO, 2011).

A simulação da evolução dinâmica desse processo é extremamente sensível as propriedades nucleares, principalmente as energias de separação de nêutrons que são as quantidades chave para determinar o caminho do processo-*r* (ver Figura 5). Como sabemos, à medida que acontece a captura de nêutrons os núcleos vão se afastando da linha de estabilidade- β , diminuindo a energia de separação de nêutrons (S_n). Esta pode ser definida como:

$$S_n(Z, A + 1) = B(Z, A + 1) - B(Z, A) = [M(Z, A) - M(Z, A + 1) + m_n] c^2, \quad (1.6)$$

onde $B(Z, A)$ é a energia de ligação do núcleo (Z, A) , $M(Z, A)$ a sua massa e c a velocidade da luz.

A evolução temporal das abundâncias dos núcleos sintetizados nessa fase será determinada a partir dos processos de fotoemissão, captura de nêutrons e decaimento- β , como mostra a equação abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}n(Z, A) &= -\lambda_{\beta}(Z, A)n(Z, A) + \lambda_{n\gamma}(Z, A - 1)n(Z, A - 1) \\ &\quad - [\lambda_{n\gamma}(Z, A) + \lambda_{\gamma n}(Z, A)]n(Z, A) + \lambda_{\beta}(Z - 1, A)n(Z - 1, A). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Nesse sistema de equações acopladas em Z e A , $n(Z, A)$ representa a abundância do isótopo de número atômico Z e massa A em um dado instante de tempo. $\lambda_{n\gamma}(Z, A)$ e $\lambda_{\gamma n}(Z, A)$ representam as taxas de captura de nêutrons e fotoemissão, respectivamente (DUARTE, 1977).

Como visto na Eq. (1.5), $\lambda_{n\gamma}$ e $\lambda_{\gamma n}$ serão muito maiores do que λ_{β} . Porém, vamos considerar que as reações $(n, \gamma) \leftrightarrow (\gamma, n)$ entre isótopos do mesmo elemento alcançam o

equilíbrio antes do decaimento- β . Com essa simplificação, a Eq. (1.7) pode ser reescrita como:

$$\frac{d}{dt}n_Z = -\lambda_\beta(Z)n_Z + \lambda_\beta(Z-1)n_{Z-1} \quad (1.8)$$

onde $\lambda_\beta(Z)$ representa a média das taxas de decaimento- β dos isótopos que são β -instáveis

$$\lambda_\beta(Z) = \sum_A \lambda_\beta(Z, A)P(Z, A), \quad (1.9)$$

sendo $P(Z, A)$ as abundâncias em equilíbrio $(n, \gamma) \leftrightarrow (\gamma, n)$ normalizadas à abundância isotópica total

$$P(Z, A) = \frac{n^{eq}(Z, A+1)}{\sum_A n^{eq}(Z, A)}. \quad (1.10)$$

Para a determinação dos pesos $P(Z, A)$ será necessário fazer uso da equação de Saha (SAHA, 1920; SAHA; FOWLER, 1921), que relaciona as abundâncias de isótopos vizinhos.

$$\log \frac{n^{eq}(Z, A+1)}{n^{eq}(Z, A)} = \log n_n - 34.075 + \frac{3}{2} \log T_9 + \frac{5.04}{T_9} S_n(Z, A+1), \quad (1.11)$$

onde n_n e T_9 representam a densidade de nêutrons presente no sítio e a temperatura em 10^9K . Esta equação nos mostra que, fixadas a temperatura e a densidade de nêutrons, a abundância entre isótopos de uma mesma família dependerá exclusivamente da energia de separação de nêutrons ao longo dessa família.

Em cada cadeia isotópica, haverá um pico bem pronunciado na distribuição das abundâncias. Isso se deve à descontinuidade de S_n para núcleos com números mágicos de nêutrons (20, 28, 50, 82, 126, 184). No estágio final do processo- r , onde a temperatura e a densidade de nêutrons diminuem, o decaimento- β se torna dominante. Com isso, os núcleos formados decaem em direção à linha de estabilidade- β . A esta fase damos o nome de *congelamento do processo- r* . Considerando apenas o decaimento- β , podemos escrever as abundâncias relativas dos núcleos formados da seguinte forma

$$n(A) = \sum_Z P(Z, A)n_Z(\tau), \quad (1.12)$$

onde τ é o tempo decorrido até o congelamento e $n_Z(\tau)$ a abundância isotópica total do elemento Z no instante τ . É importante salientar que, durante essa fase, os núcleos resultantes dos processos de decaimento- β são deixados com energias de excitação elevadas. Com isso, se a energia de excitação destes núcleos for superior à energia de separação de nêutrons, ocorrerá o que chamamos de *emissão retardada de nêutrons*.

2 Reações nucleares : Dados nucleares para o processo- r

2.1 Propriedades gerais e modelos de decaimento- β

O decaimento- β é a forma mais comum de desexcitação nuclear, sendo observado em isótopos de praticamente todos os elementos, com a exceção dos mais pesados que se localizam ao final da carta de nuclídeos. Os três processos fracos de desexcitação de interesse neste trabalho são:

- Decaimento- β^-

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e, \quad (2.1)$$

esse processo descreve o decaimento de um nêutron livre em um próton livre. Esse decaimento acontece pela diferença de massa entre nêutron e próton. Como pode ser visto, a conservação de número bariônico e leptônico são conservadas. A energia associada ao decaimento, conhecida como *valor Q da reação*, pode ser escrita como:

$$Q_{\beta^-} = m_n c^2 - m_p c^2 - m_e c^2 > 0. \quad (2.2)$$

- Decaimento- β^+

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e, \quad (2.3)$$

nesse processo temos o decaimento de um próton em um nêutron, acompanhado de um lépton e um antilépton. Esse tipo de decaimento não é permitido para um próton livre, no entanto, é permitido nos núcleos atômicos onde a energia extra necessária para criar a diferença de massa nêutron-próton pode ser fornecida. Neste caso, teremos um valor Q negativo para a reação.

$$Q_{\beta^+} = m_p c^2 - m_n c^2 - m_{e^+} c^2 < 0. \quad (2.4)$$

- Captura eletrônica (EC)

$$p + e^- \rightarrow n + \nu_e, \quad (2.5)$$

onde o próton captura um elétron se transforma em um nêutron e libera um neutrino. Esse processo só pode ocorrer se o meio for capaz de fornecer a energia extra necessária. O valor Q dessa reação também é negativo:

$$Q_{EC} = m_p c^2 + m_e c^2 - m_n c^2 < 0. \quad (2.6)$$

Todos esses processos podem ocorrer no sistema de muitos corpos de um núcleo atômico. Porém, o decaimento- β^+ e a EC não pode ocorrer sem a contribuição energética do meio, pois possuem um valor Q negativo (SUHONEN, 2006). O processo nuclear associado a cada um destes decaimentos podem ser escritos como:

- Decaimento- β^- nuclear

$$(Z, N) \rightarrow (Z + 1, N - 1) + e^- + \bar{\nu}_e. \quad (2.7)$$

- Decaimento- β^+ nuclear

$$(Z, N) \rightarrow (Z - 1, N + 1) + e^+ + \nu_e. \quad (2.8)$$

- EC nuclear

$$(Z, N) + e^+ \rightarrow (Z - 1, N + 1) + \nu_e. \quad (2.9)$$

Como sabemos, nos núcleos as transições entre estados excitados não podem ocorrer de forma aleatória. Essas transições precisam obedecer a algumas regras de seleção, como a conservação do momento angular e da paridade. Uma exceção é feita no caso das transições proibidas, pois elas não obedecem à conservação da paridade nuclear.

Transições em que os léptons presentes na reação não possuem momento angular orbital ($l = 0$), são ditas *transições permitidas*. Essas transições podem ser divididas em duas classes: transições de Fermi (F) e transições de Gamow-Teller (GT) (ver Figura 10). Na primeira, o elétron e o neutrino têm spins antiparalelos e não contribuem para o balanço de momento angular, o que constitui um estado singlete ($S = 0$). Na segunda, temos spins dos léptons paralelos e contribuem em uma unidade para o balanço dos momentos, constituindo

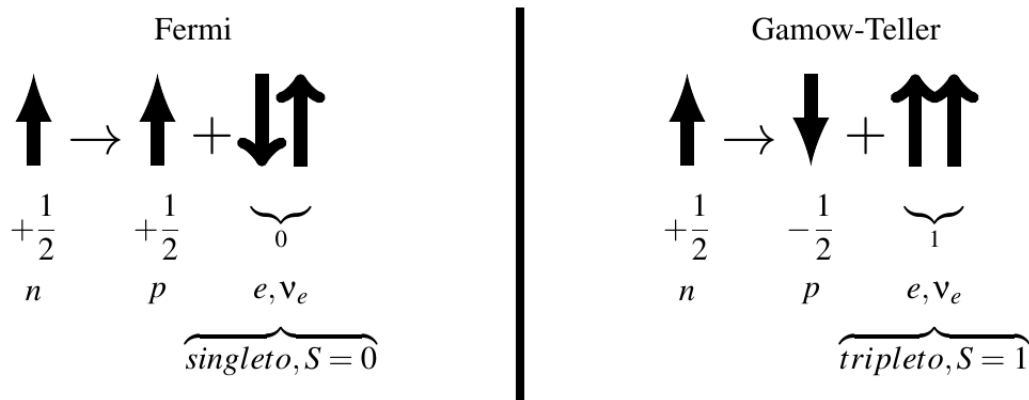


Figura 10 – Comparação entre transições permitidas de Fermi e Gamow-Teller (ROCHA, 2018).

Transição	$\Delta J = J_i - J_f $	$\Delta\pi$
Permitida	$0, \pm 1$	Não
Proibida de primeira ordem	$0, \pm 1, \pm 2$	Sim
Proibida de segunda ordem	$\pm 2, \pm 3$	Não
.....		
Proibida de ordem n	$\pm n, \pm(n+1)$	$(-1)^n$ [1=sim, -1=não]

Tabela 1 – Regras de seleção para o momento angular e paridade no decaimento beta (SCHECHTER; BERTULANI, 2007).

um estado de tripleto ($T = 1$).

Com relação à conservação de momento angular total nas transições de Gamow-Teller, o momento angular dos núcleos precisa mudar. De acordo com as regras de acoplamento temos que $\Delta J = 0, \pm 1$. Já para as transições de Fermi, o spin nuclear permanece o mesmo.

É necessário salientar que a designação *proibida* não se refere ao sentido literal da palavra, e sim para identificar transições que são menos prováveis de ocorrer. A Tabela 1 mostra as regras de seleção que devem ser obedecidas no decaimento- β . Como sabemos, os léptons carregam o momento angular orbital em relação ao núcleo e, à medida que estados de sigleto e tripleto são criados e adquirem uma órbita maior ($l > 1$), a probabilidade de ocorrer transições proibidas diminui. Com isso, as regras de seleção são : $\Delta J = 0, 1, 2$.

Diferentes aproximações foram propostas para explicar o decaimento- β de núcleos pesados. Dois deles podem ser claramente identificados como extremos um do outro: a Gross Theory of Beta-Decay (GTBD), um modelo macroscópico, e o Large Scale Shell Model (LSSM) um modelo totalmente microscópico. Existem vários outros modelos que transitam entre esses dois extremos, nos quais o caráter microscópico pode ser mais ou menos pronunciado. Em primeira instância, eles diferem na forma em que o estado fundamental e os estados excitados finais são descritos (ARNOULD; GORIELY; TAKAHASHI, 2007).

Dentro da aproximação macroscópica, a GTBD tem como objetivo descrever o comportamento geral das distribuições β -strength de forma estatística. Esse modelo assume um grande número de estados finais e as funções de β -strength para as transições permitidas e primeiras proibidas são construídas por funções de partícula-única. Isso acontece através de um esquema de emparelhamento muito simples, levando em conta as regras de soma e os efeitos de paridade par-ímpar. É importante ressaltar que a GTBD foi pioneira no cálculo das meias-vidas de núcleos afastados do vale de estabilidade- β , levando em consideração as Gamow-Teller Gigant Resonances (GTGR) (TAKAHASHI; YAMADA; KONDOH, 1973).

Com o avanço das técnicas experimentais ao longo dos anos, novas medidas de meia-vida foram obtidas, principalmente para a região dos núcleos ricos em nêutrons, essencial para os modelos astrofísicos. Esses novos resultados experimentais demonstraram que a GTBD superestimava as meias-vidas para núcleos dessa região da carta de nuclídeos. Alguns estudos sugeriram que essa superestimação teria origem na baixa precisão do valor Q_β , que na versão original da GTBD é predito por uma fórmula de massa do tipo modelo da gota líquida (MYERS; SWIATECKI, 1966). Considerando essa possibilidade, os cálculos originais foram refeitos utilizando o mesmo parâmetro ajustável σ_N (ver Eq. 2.28), porém utilizando uma fórmula de massa um pouco mais sofisticada. Foi constatado que, com essa simples modificação a GTBD passou a apresentar resultados satisfatórios quando comparada com os dados experimentais para a região dos núcleos ricos em nêutrons, ver Figura 27 de (ARNOULD; GORIELY; TAKAHASHI, 2007). O impacto das massas nucleares nas taxas de decaimento será abordado detalhadamente no capítulo 3.

Do ponto de vista microscópico, a forma mais eficiente de reproduzir as principais características de uma distribuição GT-strength é através da inclusão de uma interação nucleon-nucleon efetiva, como a do tipo spin-isospin (RING; SCHUCK, 2004). Essa interação efetiva permite excitações do tipo partícula-buraco. Dada a interação residual, o estado final de GT pode ser construído de forma aproximada a partir do estado fundamental. Essencialmente, a maior parte dos cálculos de processo- r utilizam Random Phase Approximation (RPA) ou uma de suas variações, devido à sua forma simples de descrever os estados excitados do núcleo. Isso permite o estado fundamental não ter uma característica puramente de partícula independente, mas de estado correlacionado. Dentro da RPA os estados excitados podem ser construídos criando ou destruindo pares de partícula-buraco no estado fundamental. Para núcleos de camada aberta, esse modelo possui excelentes previsões, uma vez que conta com a interação de emparelhamento em seu formalismo. No entanto, o modelo foi sendo aprimorado ao longo dos anos, com a inclusão do emparelhamento $T = 0$, o que o torna apto para realizar o emparelhamento no estado fundamental e também nos estados excitados sem violação de simetria (STAUDT et al., 1990). Tal abordagem recebe o nome de Quasi-particle RPA (QRPA).

Os modelos de QRPA vêm sendo cada vez mais aprimorados ao longo dos últimos anos, com descrições auto-consistentes do estado fundamental e da interação residual. Em geral, as variações desses modelos diferem na forma de descrever estas duas quantidades. Existem vários trabalhos na literatura que utilizam modelos de QRPA para cálculos de taxas de processos fracos em ambientes astrofísicos (SHEHZADI; NABI; FAROOQ, 2022; ROBIN; MARTÍNEZ-PINEDO, 2024). Dentre esses modelos podemos citar alguns que calculam a meia-vida do decaimento- β para núcleos ricos em nêutrons, o que é de extrema importância para o

processo- r . O primeiro que vamos citar aqui é o Continuum-QRPA (CQRPA) (BORZOV, 2006), esse modelo adota uma densidade funcional para descrever o estado fundamental de forma auto-consistente, enquanto utiliza uma versão semelhante a QRPA da Teoria de Migdal para determinar a interação nucleon-nucleon efetiva. No canal de partícula-buraco, possui uma interação local na qual a strength é calculada através do parâmetro Landau-Migdal g'_0 , em adição das trocas dos mésons π e ρ renormalizados pelo o meio nuclear. Essa abordagem proporciona um balanço apropriado dos termos repulsivos (g'_0) e atrativos (f_π), assim como as componentes locais de alcance finito que são de extrema importância para o cálculo do decaimento- β . Esse formalismo tem sido desenvolvido não somente para transições GT, mas também para as primeiras transições proibidas. Uma das primeiras versões do CQRPA com Skyrme-ETFSI, para tratar a interação residual, foi aplicada de forma extensiva para o cálculo das meias-vidas do decaimento- β em 800 núcleos aproximadamente esféricos (BORZOV; GORIELY, 2000).

Modelos com base no Relativistic Mean Field (RMF), como a RQRPA, têm ganhado cada vez mais espaço em cálculos de processos fracos (ENGEL et al., 1999). Principalmente por propôr uma descrição mais realista dos estados excitados. Nestes modelos, o estado fundamental é obtido através do método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), utilizando uma interação do tipo Skyrme para o estado fundamental e interação efetiva (NIKISĆ et al., 2005). Demonstrando assim ser uma ferramenta muito efetiva para o cálculo de taxas de decaimento- β , captura eletrônica e seções de espalhamento neutrino/antineutrino-núcleo (ĐAPO; PAAR, 2012). Recentemente o RQRPA têm sido utilizado para investigar o papel da interação residual, spin-órbita, splitting, correlações de emparelhamento e excesso de nêutrons em transições M1 (OISHI; RAVLIĆ; PAAR, 2022; OISHI; KRIZIĆ; PAAR, 2020; KRIZIĆ et al., 2020; KRIZIĆ; OISHI; PAAR, 2021). A temperatura do meio estelar também pode impactar significativamente as transições eletromagnéticas no núcleo, e consequentemente as quantidades de interesse astrofísico como as seções de choque de captura de nêutrons, taxas de reações nucleares e abundâncias isotópicas (KAUR; YÜKSEL; PAAR, 2024b). O efeito da temperatura têm sido investigado em estudos recentes, utilizando algumas extensões da RPA (KHAN; Van Giai; GRASSO, 2004; YÜKSEL et al., 2017). A Finite-Temperature QRPA (FT-QRPA), em especial, foi utilizada para estudar as mudanças no multipolo elétrico em núcleos a temperatura finita (YÜKSEL et al., 2017; YÜKSEL et al., 2019). Adicionalmente, o modelo auto-consistente Finite-Temperature Relativistic RPA (FT-RRPA) têm obtido relativo sucesso no estudo da evolução isoescalar e isovetorial dos multipolos elétricos com a temperatura, no entanto essa aproximação não conta com as correlações de emparelhamento. Por fim, o também modelo auto-consistente FT-RQRPA foi introduzido para o estudo de excitações sem troca de carga em temperatura finita, o qual possui correlações de emparelhamento para

núcleos de camada aberta (KAUR; YÜKSEL; PAAR, 2024a). Sendo utilizado para estudar os efeitos térmicos em excitações do tipo E1, demonstrando como as ressonâncias gigantes de dipolo e excitações de dipolo de baixa energia evoluem com a temperatura.

Muito provavelmente, a ferramenta mais poderosa para se estudar a estrutura do núcleo é o Shell Model (SM). Este modelo possui a capacidade de descrever com sucesso os elementos de matriz do decaimento- β e as distribuições de strength, bem como outras propriedades nucleares como o espectro de excitação. Tudo isso devido à sua interação efetiva realista de dois corpos, nas versões mais convencionais o Hamiltoniano do SM é construído através da teoria de perturbação de muitos corpos com algumas correções fenomenológicas a serem ajustadas a dados experimentais. Contudo, apesar de ser um modelo altamente eficaz, o SM apresenta sérias dificuldades quando o espaço de configurações é muito grande. Uma vez que resolver o problema de autovalor do SM não é uma tarefa computacionalmente simples, o que limita a aplicabilidade do modelo em algumas regiões de massa. No entanto, para o caso dos núcleos ricos em nêutrons, desde que os níveis de Fermi de prótons e nêutrons estejam em camadas diferentes, algumas adaptações são necessárias como a adição de mais uma camada. Mesmo com adaptações, a depender do espaço de configurações, a diagonalização exata do Hamiltoniano é inviável. Isto dificulta sua aplicação em núcleos pesados e em trabalhos de larga escala. Para tentar contornar esse problema, foi introduzido o Monte Carlo SM (MCSM) (OTSUKA et al., 2001; SHIMIZU et al., 2017), o qual possui algumas melhorias em relação ao SM convencional, como uma melhor descrição dos núcleos de massa intermediária. Em núcleos pesados a abordagem com o MCSM não é eficaz, uma vez que o MCSM não conta com as correlações de emparelhamento. Sendo necessário introduzir uma nova extensão do modelo, a quasi-particle vácuo SM (QVSM) (SHIMIZU et al., 2021). Com os avanços citados acima, e com a melhor capacidade de processamento dos computadores, muito progresso foi feito em direção à escalabilidade do SM, produzindo o Large Scale SM (LSSM) (CAURIER et al., 2005). Recentemente, algumas quantidades relacionadas ao decaimento- β de núcleos na vizinhança do núcleo duplo mágico ^{208}Pb foram calculadas utilizando o LSSM (SHARMA et al., 2022; KUMAR; SRIVASTAVA, 2021). Além disso, o LSSM tem sido utilizado para obter propriedades da estrutura nuclear em $^{135,137}\text{Tl}$ (SHARMA; SRIVASTAVA; KUMAR, 2023).

2.2 A Teoria Grossa para o decaimento- β (GTBD)

Os modelos nucleares podem ser fundamentalmente de duas naturezas: *modelos coletivos* ou *modelos de partícula independente*. A primeira classe admite que os núcleons interagem fortemente no interior do núcleo, tendo um pequeno livre caminho médio. A principal finalidade destes modelos é estudar os fenômenos que envolvem o núcleo como um todo. Já a segunda

classe sustenta que o princípio de exclusão de Pauli restringe as colisões dos núcleons na matéria nuclear; com isso, possuem um livre caminho médio maior.

É necessário enfatizar que o núcleo pode exibir fenômenos coletivos e de partícula independente, sendo que um único modelo nuclear não irá conseguir determinar todas as propriedades e informações necessárias do núcleo e suas reações. Com o objetivo de estudar de forma paramétrica as taxas de desintegração nuclear, por volta do ano 1969, Takahashi e Yamada propuseram um modelo que combina argumentos de partículas independente associada ao *modelo do gás de Fermi* de forma fenomenológica (TAKAHASHI; YAMADA, 1969). Neste modelo, podemos assumir a forma de uma função Gaussiana, Lorentziana e exponencial para as ressonâncias de Gamow-Teller. Sendo que as contribuições na parte final destas ressonâncias são ajustadas a dados experimentais (SAMANA et al., 2008).

Na versão original proposta por Takahashi e Yamada somente transições permitidas foram consideradas, uma vez que essas transições são as mais prováveis em nucleossíntese de elementos pesados. Porém, com o passar do tempo muitos aspectos foram aprimorados na versão original. Dentre eles, podemos destacar: (a) a incorporação de transições proibidas; (b) a inclusão dos efeitos de emparelhamento; (c) a modificação da função de energia de partícula simples na transição de Gamow-Teller; (d) a extensão feita para a aplicação em reações neutrino-núcleo mais realista. Duas das versões mais recentes são GT2 (KONDOH T. TACHIBANA, 1985) e Teoria Semi-Grossa (TACHIBANA; YAMADA; YOSHIDA, 1990).

Há alguns anos atrás, Samana *et al.* (SAMANA et al., 2008) revisaram a versão original da GTBD. Neste trabalho eles implementaram o modelo somente com as transições permitidas para estudar as taxas decaimento de processos fracos relevantes em estágios de pré-supernova. Neste trabalho, a principal melhoria foi a implementação de uma estimativa mais realista da localização do pico da ressonância de Gamow-Teller.

A GTDB reproduz com boa precisão as taxas de decaimento- β de uma grande quantidade de isótopos, isso permite uma comparação ampla do modelo com os dados experimentais. Sendo essa uma de suas principais características, a capacidade de trabalhar de forma sistemática com uma grande quantidade de núcleos, o que a diferencia de outros modelos nucleares. A Figura 11 mostra de forma esquemática o diagrama do elemento de matriz nuclear para o decaimento- β^- . Quando a energia de um nêutron é maior do que a de um próton, o nêutron decai em um próton. O lado esquerdo da figura mostra esse decaimento de uma forma generalizada. O lado direito, por sua vez, mostra os mesmos níveis nucleares só que dentro do formalismo da GTBD. Com a exceção do nível de Fermi, a abordagem com os níveis discretos passa a ser substituída por uma abordagem com níveis contínuos (região preenchida). Os níveis contínuos podem ser descritos por uma densidade de níveis, sendo esta

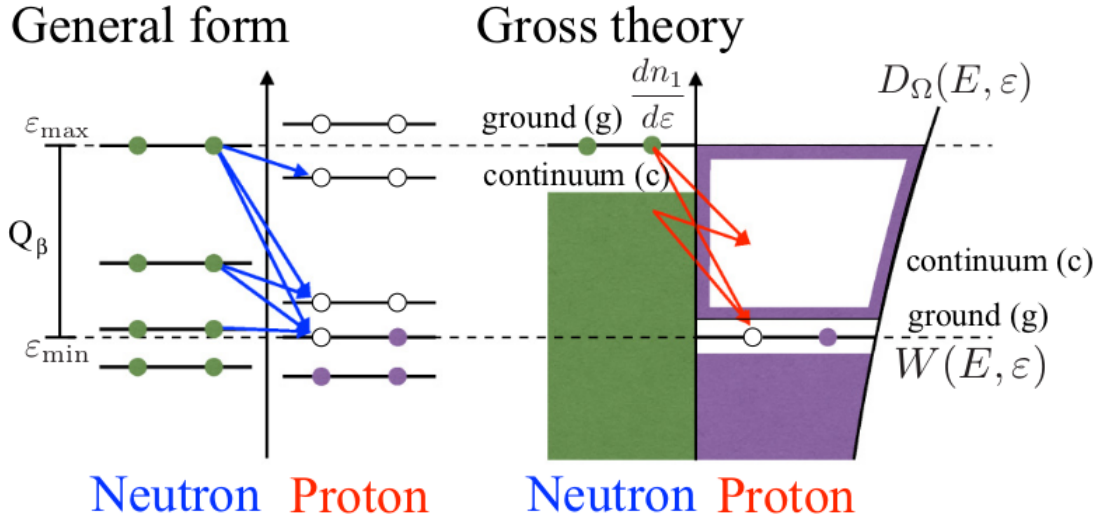


Figura 11 – Diagrama esquemático do elemento de matriz nuclear do decaimento- β^- . À esquerda temos a forma geral do decaimento- β^- entre estados discretos. E à direita o mesmo decaimento representado na GTBD. (ENDO; KOURA, 2019).

oriunda do modelo de gás de Fermi (ENDO; KOURA, 2019).

Este modelo nuclear toma como ponto de partida as taxas de decaimento- β , que pode ser definida como uma soma das contribuições de transições permitidas e transições proibidas, como mostra a equação abaixo:

$$\lambda_\beta = \lambda_{GT} + \lambda_F + \lambda_1^{(0)} + \lambda_1^{(1)} + \lambda_1^{(2)}, \quad (2.10)$$

onde:

- $\lambda_{GT} \rightarrow$ taxa para a transição de Gamow-Teller,
- $\lambda_F \rightarrow$ taxa para a transição de Fermi,
- $\lambda_1^{(0)} \rightarrow$ taxa para a primeira transição proibida de ordem 0,
- $\lambda_1^{(1)} \rightarrow$ taxa para a primeira transição proibida de ordem 1,
- $\lambda_1^{(2)} \rightarrow$ taxa para a primeira transição proibida de ordem 2.

Considerando apenas as transições permitidas, podemos escrever a taxa de decaimento- β como:

$$\lambda_\beta = \frac{G_F^2}{2\pi^3} \int_{-Q_\beta}^0 dE [g_V^2 \|\mathcal{M}_F(E)\|^2 + g_A^2 \|\mathcal{M}_{GT}(E)\|^2] f(-E), \quad (2.11)$$

onde $G_F = (3.034545 \pm 0.00006) \times 10^{-12}$ (em unidades naturais) e $f(E)$ são a constante de acoplamento fraca e a integral de Fermi, respectivamente. A interação coulombiana entre o

núcleo filho e o lépton emitido é dada pela função de Fermi $F(Z, E_e)$. A integral de Fermi pode ser escrita como:

$$f(-E) = \int_1^{-E+1} (-E + 1 - E_e)^2 E_e \sqrt{E_e^2 - 1} \times F(Z, E_e) dE_e, \quad (2.12)$$

Para a integral de Fermi $f(-E)$, Takahashi e Yamada na versão original da GTBD propuseram uma aproximação polinomial, dada por:

$$f(Z, E_0) \approx a(Z)E_0^3 + \frac{1}{g(Z, E_0)}E_0^4 + c(Z)E_0^5 + d(Z, E_0), \quad (2.13)$$

essa expressão é válida para $E_0 \geq 0$, onde $E_0 = -E$, e o Z é o número de prótons. Os outros termos são:

$$\begin{aligned} a(Z) &= 1.52 \times 10^{-2}Z + 6.4 \times 10^{-6}Z^3 + 8.5 \times 10^{-11}Z^5 + \\ &\quad + 1.7 \times 10^{-13}Z^7 + 2.5 \times 10^{-26}Z^{13}, \\ c(Z) &= 3.33 \times 10^{-2}Z \exp(3.11 \times 10^{-2}Z) \\ d(Z, E_0) &= \frac{0.132E_0^{7/2}}{1 + 2.805E_0^5} \exp(-0.5Z) \\ g(Z, E_0) &= b_1 + \left(\frac{E_0 - b_3(Z)}{b_2(Z)} \right)^5. \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde

$$\begin{aligned} b_1(Z) &= 5.26 \exp(-6.65674 \times 10^{-3}Z - 6.41863 \times 10^{-5}Z^3 - 7.00193 \times 10^{-6}Z^3 + \\ &\quad + 4.74649 \times 10^{-8}Z^4), \\ b_2(Z) &= 9.8 - 7.3 \times 10^{-2}Z - 1.28 \times 10^{-3}Z^2 + 2.84 \times 10^{-5}Z^3 \\ b_3(Z) &= 2 \exp(-0.5Z) + 8.5 + 6 \times 10^{-4}Z^2. \end{aligned} \quad (2.15)$$

A parametrização acima diz respeito a todo integrando no qual a função de Fermi se encontra (ver Apêndice B de (TAKAHASHI; YAMADA, 1969) para mais detalhes sobre a parametrização). Porém, anos depois, Aufderheide (AUFDERHEIDE et al., 1990) propôs uma função de Fermi mais aprimorada, sem o uso de simplificações. Sendo esta a mais comumente utilizada em aplicações astrofísicas.

$$F(Z, E_e) = 2(1 + \gamma) \left(\frac{(0, 511)2R\sqrt{E_e^2 - 1}}{c\hbar} \right)^{-2(1-\gamma)} \exp(\pi v) \frac{|\Gamma(\gamma + iv)|^2}{|\Gamma(2\gamma + 1)|^2}, \quad (2.16)$$

onde

$$\gamma = [1 - (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.17)$$

e

$$v = \frac{Z\alpha E_e}{\sqrt{E_e^2 - 1}}, \quad (2.18)$$

sendo $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ o raio nuclear, $\alpha = \frac{1}{137}$ a constante de estrutura fina e Γ a função Gama.

Para incorporar os efeitos de temperatura finita, nós adaptamos a integral de Fermi. Esta deve passar a considerar a influência das condições estelares na distribuição de estados dos elétrons. Podemos reescrever a Eq. 2.2 como:

$$f(-E) = \int_1^{-E+1} (-E + 1 - E_e)^2 E_e \sqrt{E_e^2 - 1} \times F(Z, E_e) \times f_{\pm}(E_e) dE_e, \quad (2.19)$$

onde

$$f_{\pm}(E_e) = \frac{1}{1 + e^{\mp\left(\frac{E_e - \mu_e}{T}\right)}}, \quad (2.20)$$

é a distribuição de Fermi-Dirac, a qual descreve a probabilidade de um elétron ter energia E_e em uma dada temperatura T . μ_e representa o potencial químico de elétrons, que pode ser determinado de forma aproximada como:

$$\mu_e = 1.11(\rho Y_e)^{1/3}, \quad (2.21)$$

onde Y_e é a fração de elétrons e ρ é a densidade bariônica.

O valor Q_{β} presente na Eq. (2.11) é a diferença de massa entre o núcleo pai e o núcleo filho

$$Q_{\beta} = M(A, Z) - M(A, Z + 1) = B(A, Z + 1) - B(A, Z) + m(nH), \quad (2.22)$$

onde $B(A, Z)$ e $B(A, Z + 1)$ representam as energias de ligação do núcleo filho e núcleo pai, respectivamente. Quanto ao elemento de matriz nuclear, utilizamos a regra da soma proposta por Takahashi, que por definição pode ser escrita como:

$$\|\mathcal{M}_X(E)\|^2 = \int_{\mathcal{E}_{min}}^{\mathcal{E}_{max}} D_X(E, \mathcal{E}) W(E, \mathcal{E}) \frac{dN_1}{d\mathcal{E}} d\mathcal{E}, \quad (2.23)$$

onde $\mathcal{E}$ é a energia do nucleon, que na equação acima é simbolizado pelo N_1 . $D_X(E, \mathcal{E})$ é a função de distribuição da probabilidade de transição da partícula independente, para essa função poderemos escolher três opções: gaussiana, lorentziana e exponencial. Samana *et al.* (SAMANA et al., 2008) demonstrou em seu trabalho que a forma gaussiana é a que melhor reproduz os dados experimentais, considerando os núcleos com $A < 70$.

$$D_X(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_X} e^{-\frac{(E - \Delta_X)^2}{2\sigma_X^2}}, \quad (2.24)$$

onde E_X é a energia de ressonância e σ_X é o desvio padrão. Para a energia de Fermi e Gamow-Teller, temos :

$$\Delta_F = \pm(1.44ZA^{-1/3} - 0.7825) \text{ MeV}, \quad (2.25)$$

$$\Delta_{GT} = \Delta_F + \delta, \quad \delta = 26A^{-1/3} - 18.5(N - Z)/A \text{ MeV}. \quad (2.26)$$

Seus respectivos desvios são dados por:

$$\sigma_F = 0.157ZA^{-1/3}\text{MeV}, \quad (2.27)$$

$$\sigma_{GT} = \sqrt{\sigma_F^2 + \sigma_N^2}, \quad (2.28)$$

onde σ_N representa um parâmetro que ajusta a largura da ressonância aos dados experimentais através de um método de minimização chamado *teste qui-quadrado* (χ^2)

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^{N_0} \left[\frac{\log(\tau_{1/2}^{cal}(n)/\tau_{1/2}^{exp}(n))}{\Delta \log(\tau_{1/2}^{exp}(n))} \right]^2, \quad (2.29)$$

onde $\tau_{1/2}^{cal}(n)$ e $\tau_{1/2}^{exp}(n)$ são as meias-vidas teórica e experimental, respectivamente. E $\Delta \log(\tau_{1/2}^{exp}(n))$ pode ser escrito como

$$\Delta \log(\tau_{1/2}^{exp}(n)) = \|\log[\tau_{1/2}^{exp}(n) + \delta\tau_{1/2}^{exp}(n)] - \log[\tau_{1/2}^{exp}(n)]\|, \quad (2.30)$$

onde δ é o erro na meia-vida experimental.

A densidade de níveis pode ser escrita como:

$$\frac{dN_1}{d\epsilon} = N_1 \left[1 - \left(1 - \frac{Q + E}{\epsilon_F} \right) \right], \quad (2.31)$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi do nucleon independente, em MeV

$$\epsilon_F = \frac{76.52}{(M_n^*/M_n)r_0^2} \left(\frac{N}{A} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (2.32)$$

sendo r_0 o raio do nucleon dado por

$$r_0 = 1.25(1 + 0.65A^{-2/3}). \quad (2.33)$$

M^* é a massa efetiva do nucleon e M_n a massa do nucleon, cuja a razão é:

$$\frac{M_n^*}{M_n} = 0.6 + 0.4A^{-1/3}. \quad (2.34)$$

A energia central da transição de Gamow-Teller é certamente Δ_{GT} diferente da transição de Fermi Δ_F . A versão original proposta por Takahashi e Yamada conta com uma simplificação

nesse aspecto, considerando $\Delta_{GT} = \Delta_F$. T. Suzuki (SUZUKI, 1981; SUZUKI, 1982), propôs uma forma mais realista de se calcular essa diferença, usando a seguinte expressão:

$$\Delta_{GT} - \Delta_F = \frac{1}{8(N-Z)} \langle \pi | \left[\sum_i^A \tau_+^i \sigma_+^i \left[H_1, \sum_j^A \tau_-^j \sigma_-^j \right] \right] | \pi \rangle, \quad (2.35)$$

onde $|\pi\rangle$ representa o núcleo pai. H_1 contém as interações dependentes do spin, isospin e spin-isospin do Hamiltoniano proposto por Suzuki. Com o mesmo objetivo de aprimorar a simplificação da teoria original, Samana *et al.* (SAMANA et al., 2008) propôs uma correção fenomenológica para a interação coulombiana e isospin, através da seguinte expressão:

$$\Delta_{GT} - \Delta_F = 26A^{-1/3} - 18.5 \frac{(N-Z)}{A} \quad (2.36)$$

Recentemente, novos aprimoramentos foram adicionados a GTBD. Como, por exemplo, a incorporação da divisão spin-órbita ou do inglês *spin-orbit splitting*, usando o modelo Relativistic Hatree-Bogoliubov (RHB) (FANG; CHEN; NIU, 2022). Semelhantemente ao que foi proposto por Suzuki, eles propuseram a seguinte expressão:

$$\Delta_{GT} - \Delta_F = \Delta_{ls} + \Delta_k, \quad (2.37)$$

onde Δ_{ls} é a contribuição spin-órbita, calculada por

$$\Delta_{ls} = \frac{2}{3(N-Z)} E_{ls}. \quad (2.38)$$

E_{ls} é a energia média da divisão spin-órbita, extraída do modelo RHB para cada núcleo. Δ_k pode ser obtido por:

$$\Delta_k = 2(\kappa_{\sigma\tau} - \kappa_\tau) \frac{(N-Z)}{A}, \quad (2.39)$$

onde o parâmetro $(\kappa_{\sigma\tau} - \kappa_\tau)$ é ajustado a dados experimentais de $\Delta_{GT} - \Delta_F$. Com essas modificações a GTBD passa a ter dois parâmetros a serem ajustados a dados experimentais, σ_n e $(\kappa_{\sigma\tau} - \kappa_\tau)$.

Também recentemente, Koura e Chiba introduziram uma correção microscópica na GTBD (KOURA; CHIBA, 2017). Especificamente, eles passaram a considerar a mudança de paridade nos níveis de partícula simples do estado fundamental dos núcleos. A Figura 12 exemplifica essa situação para os casos do $^{131}_{49}\text{In}$ e $^{132}_{49}\text{In}$. No primeiro caso, o $^{131}_{49}\text{In}$, o estado fundamental de nêutrons é $2d_{3/2}$ enquanto o de prótons é $1g_{9/2}$, ambos com paridade positiva. No entanto, para o caso do $^{132}_{49}\text{In}$, os estados fundamentais de nêutron e prótons são $2f_{7/2}$ e

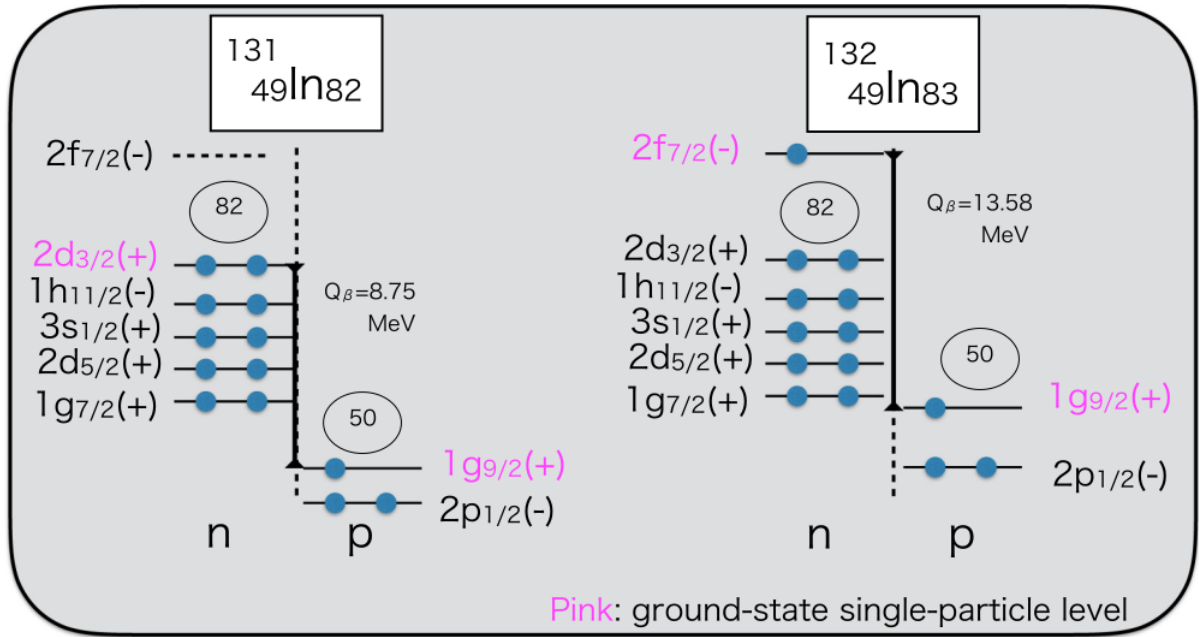


Figura 12 – Diagrama esquemático dos níveis de partícula simples do $^{131}_{49}\text{In}$ e $^{132}_{49}\text{In}$. Os estados fundamentais de cada núcleo estão indicados em rosa (KOURA; CHIBA, 2017).

$1g_{9/2}$, respectivamente. Note que nesse caso as paridades são diferentes e essa mudança de paridade afeta a transição, uma vez que no decaimento- β a taxa de decaimento é a soma sobre todas as transições possíveis entre os níveis de próton e nêutron. Contudo, é importante salientar que as transições entre estados fundamentais na maioria dos casos são dominantes, por conta do elevado peso da função integrada de Fermi, e de forma geral, uma transição permitida não pode ocorrer se as paridades do núcleo pai e do núcleo filho forem diferentes ou se a diferença de spin for maior do que 1.

Para adicionar esse aprimoramento na GTBD, Koura e Chiba suprimiram os elementos de matriz nucleares quando as paridades dos nêutrons e prótons são diferentes nas transições permitidas. Esse aprimoramento produziu uma relativa melhora nos resultados das meias-vidas para núcleos nas proximidades dos números mágicos de nêutrons e prótons. Região essa que a GTBD original sobrestimava as previsões.

Posteriormente, Endo e Koura (ENDO; KOURA, 2019) publicaram um aprimoramento desta correção microscópica, mostrando que somente a supressão das transições permitidas nas transições entre dois estados fundamentais com paridades diferentes não era o suficiente. Uma vez que, existem núcleos na carta de nuclídeos que não sofrem decaimento via transições permitidas. A mudança de paridade continua sendo um dos principais obstáculos para as transições permitidas, mas a mudança de spin também desempenha um papel importante e precisa ser considerada. Com isso, não somente os elementos de matriz das transições permitidas

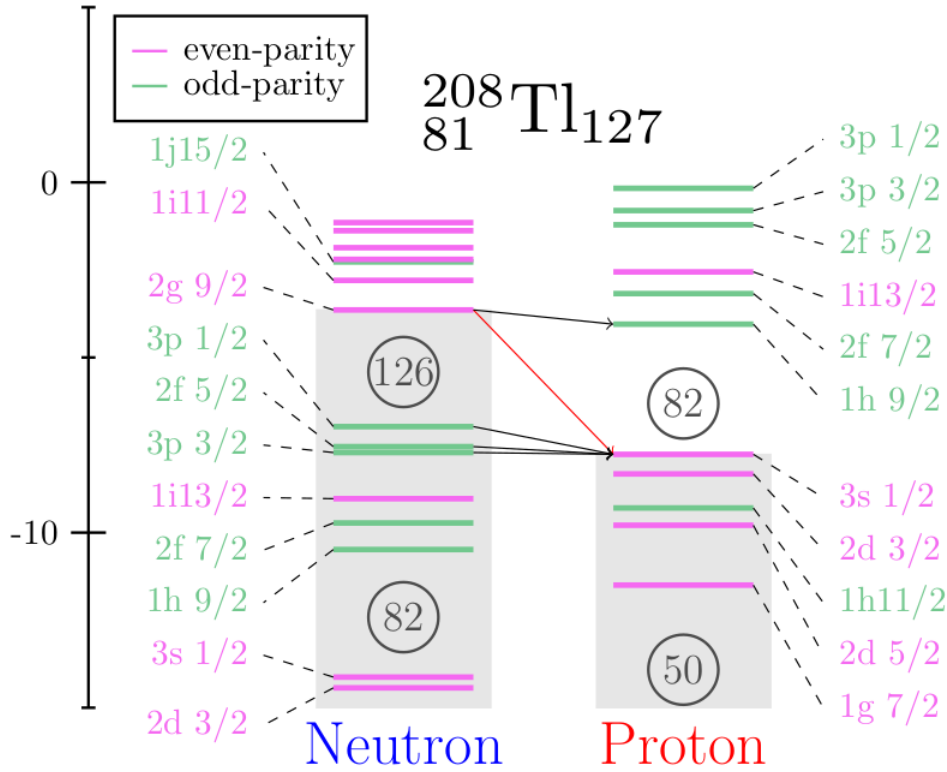


Figura 13 – Esquema de decaimento do $^{208}_{127}\text{Tl}$ nos níveis de partícula simples. As linhas lilás representam os estados de paridade positiva e as verdes os estados de paridade negativas. As flechas pretas representam todos os canais de transição possíveis para o decaimento- β (ENDO; KOURA, 2019).

precisam ser modificados, mas também das transições proibidas. Com essa inclusão, além de transições entre estados fundamentais do núcleo pai e do núcleo filho, também é necessário considerar as transições entre os estados excitados de baixa energia.

A Figura 13 mostra o esquema de decaimento do $^{208}_{127}\text{Tl}$ nos níveis de partícula simples. Como pode ser visto na figura, o $^{208}_{127}\text{Tl}$ possui cinco canais de decaimentos. O estado fundamental de nêutrons é $2g_{9/2}$ com paridade positiva e o estado fundamental de prótons é $3s_{1/2}$ também com paridade positiva. Assim, a diferença de paridade e de spin são $\Delta\pi = +$ e $\Delta J = 4$, indicando uma transição proibida de quarta ordem. Com base nesse tratamento de partícula simples, Endo e Koura demarcaram as regiões onde as transições proibidas são dominantes, regiões essas que se localizam nas vizinhanças dos núcleos ^{132}Sn , ^{208}Pb e ^{298}Fl . Adicionando todas essas correções spin-paridade na GTBD, as meias-vidas dos núcleos onde as transições entre dois estados fundamentais eram impedidas aumentaram, se aproximando um pouco mais dos dados experimentais.

Em condições astrofísicas, como por exemplo estrelas em estágio de pré-supernova, transições entre os primeiros estados excitados são tão importantes quanto transições entre

estados fundamentais. Nesse cenário, a GTBD tem sido extensivamente utilizada devido ao seu bom poder preditivo e baixo custo computacional. Porém, para tratar das transições entre os primeiros estados excitados têm-se utilizado a *Brink-Axel hypothesis* (BAH) (HERRERA; JOHNSON; FULLER, 2022). A BAH indica que se o estado fundamental possui uma ressonância de dipolo elétrica gigante, então os estados excitados também possuirão uma ressonância gigante. Inicialmente a BAH focou somente na descrição das ressonâncias gigantes de dipolo, mas posteriormente foi estendida para outras transições como M1 (transição magnética de ordem 1) e Gamow-Teller.

Recentes trabalhos investigaram a viabilidade de se utilizar a BAH em cenários astrofísicos, indicando que a hipótese falha em algumas condições de temperatura e densidade bariônica (NABI; NAYAB; JOHNSON, 2022; FAROOQ; NABI; SHEHZADI, 2023). Estes trabalhos sugerem que as mudanças na deformação do núcleo quando a energia aumenta poderia ser uma das razões pela qual a BAH falha. Nabi *et al.* explorou com detalhe a efetividade da BAH para a EC e o decaimento- β . Eles concluíram que para temperaturas acima de 5 GK e densidades superiores a 10^7 g/cm³, as taxas obtidas utilizando a BAH e o Shell Model (SM) começam a divergir (NABI; NAYAB; JOHNSON, 2022).

2.3 Formalismo das transições proibidas

Apesar de grande parte das propriedades do decaimento- β serem dominadas por transições permitidas, em algumas situações as transições proibidas são extremamente relevantes. Por exemplo, é esperado que em um cenário astrofísico as transições proibidas reduzam as meias-vidas dos isótonos $N = 126$ (SUZUKI *et al.*, 2012; ZHI *et al.*, 2013), esses núcleos fazem parte do ponto de espera. Estes isótonos são extremamente relevantes ao processo- r , pois os picos das abundâncias nucleares se localizam em núcleos com o número de nêutrons mágicos. Essas transições também são cruciais para determinar as taxas de decaimento- β dos núcleos pertencentes aos pontos de ramificação do processo- s , tais como o ^{151}Sm , ^{170}Tm , ^{185}W e ^{204}Ta (TAKAHASHI; YOKOI, 1987). Para os problemas espectrais dos reatores de antineutrinos, tais como a anomalia que corresponde a um déficit de 6% entre a taxa de contagem experimental e as previsões teóricas, o que equivale a 4-6 MeV de diferença em energia, é esperado que as primeiras transições proibidas sejam capazes de suavizar esse problema (FALLOT *et al.*, 2012; AN *et al.*, 2016; HAYEN *et al.*, 2019).

Para o decaimento- β em condições astrofísicas, os núcleos possuem a possibilidade de serem termicamente povoados em estados excitados, considerando sítios com altas temperaturas e densidade bariônica. Com isso, transições partindo de estados excitados são indispensáveis, contudo, estas transições estão além das capacidades experimentais atuais. Com base na

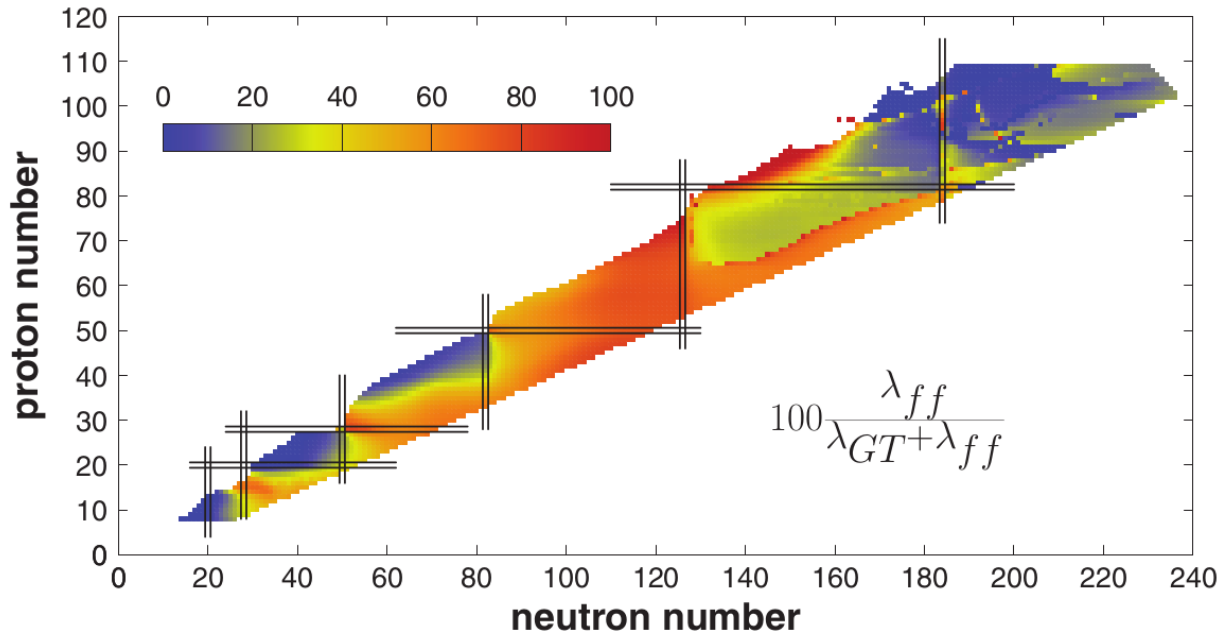


Figura 14 – Contribuição das primeiras transições proibidas para a taxa de decaimento- β , considerando apenas núcleos com meia-vida menor que 1 s. As linhas pretas indicam as posições das camadas fechadas de prótons e nêutrons (MARKETIN; HUTHER; MARTÍNEZ-PINEDO, 2016).

discussão acima, a descrição teórica das transições proibidas têm sido objeto de estudo intenso nos últimos anos, pois sua descrição não é tão direta como as transições permitidas (WANG; WANG, 2024). Em uma simples comparação, os operadores de transição e o espaço de fase correspondente para as primeiras transições proibidas são bem mais complicados (SUZUKI et al., 2012; SUHONEN, 2006), a mudança de paridade é ainda mais incorporada ao modelo, o que torna necessário utilizar um grande espaço de configurações para incluir os orbitais com paridade oposta. Nas últimas décadas, muitos métodos nucleares de muitos corpos foram utilizados para descrever transições permitidas e proibidas no decaimento- β . Esses métodos são em sua maioria baseados no SM convencional ou na QRPA (ZHI et al., 2013; MARKETIN; HUTHER; MARTÍNEZ-PINEDO, 2016; SHARMA et al., 2022; ENGEL et al., 1999).

A Figura 14 mostra um resultado interessante obtido por Marketin *et al.* (MARKETIN; HUTHER; MARTÍNEZ-PINEDO, 2016). Eles calcularam as meias-vidas do decaimento- β para todos os núcleos cujo as predições indicam uma meia-vida menor que 1 s. De forma geral, as primeiras transições proibidas não têm um impacto perceptível na taxa total de decaimento em núcleos próximos ao vale de estabilidade com $Z \leq 50$. Nessa região, os prótons e nêutrons preenchem as órbitas com a mesma paridade, e o decaimento passa a ser dominado pelas transições GT. É interessante notar que o mesmo comportamento se repete nas regiões próximas aos núcleos ^{78}Ni e ^{132}Sn . Olhando para a região com $Z < 28$, $N < 50$ e $Z < 50$, $N <$

82, as transições proibidas são inicialmente suprimidas. No entanto, uma vez que os prótons começam a ocupar órbitas com diferentes paridades ($Z < 20$ ou $Z < 40$) as contribuições das transições proibidas crescem de 40% à 60%, dependendo das características da estrutura de cada núcleo. Olhando para a região $N > 50$ e $N > 82$, podemos observar que as contribuições das transições proibidas não variam muito quando a camada fechada de prótons é atingida em $Z = 28$ e $Z = 50$. Nessas regiões, existem órbitas de valência com paridades positivas e negativas para nêutrons e prótons, e consequentemente transições GT e primeiras proibidas contribuem igualmente para o decaimento. Quando os prótons preenchem completamente a camada pf , para $Z > 40$, as primeiras proibidas são suprimidas e as transições GT dominam completamente o decaimento. Algo interessante acontece na região $N > 126$, para esses núcleos nêutrons e prótons ocupam órbitas que diferem umas das outras em duas unidades do número quântico $2n + l$. Partindo da simetria de isospin, as energias de partículas simples serão idênticas e consequentemente as transições GT serão exatamente iguais a zero. Na prática isso não acontece devido a quebra da simetria de isospin, e consequentemente as energias de partícula simples apresentarão uma pequena diferença, permitindo as transições GT ocorrerem mesmo que de forma suprimida.

Recentemente, o projected SM, que conta com um grande espaço de configurações foi estendido para conter configurações de quase-partículas de ordem superior, com a ajuda de algoritmos como o Pfaffian e outros. Esse modelo têm sido aplicado em estudos de física nuclear com spin elevado (WANG et al., 2016). Inicialmente o projected SM foi proposto para descrever transições GT, taxas de decaimento em condições estelares e o espectro do decaimento- β (TAN et al., 2020; GAO; CHEN; WANG, 2023). Em 2024, B.-L. Wang e L.-J. Wang propuseram uma extensão do modelo para descrever as primeiras transições proibidas do decaimento- β , obtendo bons resultados para as meias-vidas de núcleos pesados (WANG; WANG, 2024).

As primeiras transições proibidas possuem um papel importante na validação de algumas teorias relacionadas ao processo- r e duplo decaimento- β (BORZOV, 2003; BORZOV, 2006). Recentemente, transições permitidas e proibidas foram simuladas com o Pyatov Method (PM) e Schematic Model (ScM) para isotopos par-par de Zn (ÇAKMAK; ÇAKMAK, 2021). Esse trabalho foi importante para determinar o decaimento- β que alimenta os estados dos núcleos filhos $^{58-60}\text{Cu}$ e $^{62-84}\text{Ga}$ e investigar a competição entre as transições GT e primeiras proibidas. As transições de Fermi foram obtidas utilizando a versão pura do PM, sem a introdução de valores efetivos das constantes de acoplamento utilizadas no próton-nêutron QRPA (pn-QRPA). Foi verificado que as primeiras transições proibidas se tornam mais relevantes para os isótopos ricos em nêutrons, porém sua contribuição para os elementos de matriz nucleares são insignificantes em comparação com as transições spin-isospin permitidas.

No entanto, apesar de não contribuir muito para os elementos de matriz, as primeiras transições proibidas são fundamentais para determinar as meias-vidas do decaimento- β . É necessário enfatizar que, em todas as simulações feitas por Çakmak *et al.* assumiu-se um formato esférico para os núcleos envolvidos. Dentro dessa mesma ótica, estudos baseados na energia funcional Fayans, com QRPA, foram recentemente expandidos por Borzov para determinar as contribuições das transições permitidas e proibidas nas meias-vidas de núcleos do processo- r (BORZOV, 2006; NABI; ÇAKMAK; IFTIKHAR, 2016).

Diante da importância destas transições para o estudo do processo- r , neste trabalho incorporamos as primeiras transições proibidas. As transições de ordem 2, 1 e 0 podem ser escritas como (KOURA; CHIBA, 2017):

$$\begin{aligned}\lambda_1^2 &= \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} \left(\frac{m_e c}{\hbar}\right)^2 |g_A|^2 \int_{-Q_\beta}^0 \sum_{ij} |M_{ij}(E)|^2 f(-E) dE, \\ \lambda_1^1 &= \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} \left(\frac{m_e c}{\hbar}\right)^2 \left[|g_V|^2 \int_{-Q_\beta}^0 |M_{\mathbf{r}}(E)|^2 f_{1V}(-E) dE + |g_A|^2 \int_{-Q}^0 |M_{\sigma \times \mathbf{r}}(E)|^2 f_{1A}(-E) dE \right], \\ \lambda_1^0 &= \frac{m_e^5 c^4}{2\pi^3 \hbar^7} \left(\frac{m_e c}{\hbar}\right)^2 |g_A|^2 \int_{-Q_\beta}^0 |M_{\sigma \cdot \mathbf{r}}(E)|^2 f_{1A}(-E) dE,\end{aligned}\tag{2.40}$$

onde f_{1A} e f_{1V} são as integrais de Fermi corrigidas, correspondente às primeiras transições proibidas.

$$f_{1A} = \begin{cases} \int_1^W F_0(\rho) S_{1A}^\pm(p) p W q^2 dW, & \text{para o decaimento-}\beta^\pm, \\ \frac{\pi}{2} S_{1A}^+(0) g_k^2(\rho) q^2 & \text{para a captura eletrônica,} \end{cases}\tag{2.41}$$

$$f_{1V} = \begin{cases} \int_1^W F_0(\rho) S_{1V}^\mp(p) p W q^2 dW, & \text{para o decaimento-}\beta^\mp, \\ \frac{\pi}{2} S_{1V}^+(0) g_k^2(\rho) q^2 & \text{para a captura eletrônica,} \end{cases}\tag{2.42}$$

com os termos de correção $S_{1A}^\mp(p)$ e $S_{1V}^\pm(p)$ dados por:

$$\begin{aligned}S_{1A}^\mp(p) &\approx \left(\frac{\alpha Z_0}{2\rho^*}\right)^2 \left[1 - 2\Lambda_A \frac{\rho^*}{\rho} + \Lambda_A^2 \left(\frac{\rho^*}{\rho}\right)^2 \right] \pm \frac{2\alpha Z_0}{3} \frac{1}{2\rho^*} \left(1 - \frac{\rho^*}{\rho} \Lambda_A\right) \left(q + \frac{p^2}{W}\right) \\ &+ \frac{p^2 + q^2}{9} + \frac{2qp^2}{9W},\end{aligned}\tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}S_{1V}^\mp(p) &\approx \left(\frac{\alpha Z_0}{2\rho^*}\right)^2 \left[1 - 2\Lambda_V \frac{\rho^*}{\rho} + \Lambda_V^2 \left(\frac{\rho^*}{\rho}\right)^2 \right] \pm \frac{2\alpha Z_0}{3} \frac{1}{2\rho^*} \left(1 - \frac{\rho^*}{\rho} \Lambda_V\right) \left(q + \frac{p^2}{W}\right) \\ &+ \frac{p^2 + q^2}{9} + \frac{2qp^2}{9W}.\end{aligned}\tag{2.44}$$

Os momentos são definidos como: $p = (W^2 - 1)^{1/2}$ e $q = W_0 + W$. Onde

$$W_0 = \frac{-E}{m_e c^2 \pm 1}, \quad +1 \text{ for } e^- \text{ and } -1 \text{ for } e^+. \quad (2.45)$$

$Z_0 = Z$ para o decaimento- $\beta^\pm$ e $Z_0 = Z + 1$ para a captura eletrônica. Os fatores Λ_V e Λ_A são:

$$\begin{aligned} \Lambda_V &= \frac{\Lambda \mp (E \pm \Delta_{nH})}{\left(\frac{Ze^2}{2R}\right)}, \\ \Lambda_A &= \frac{\Lambda_0 \mp (E \pm \Delta_{nH})}{\left(\frac{Ze^2}{2R}\right)}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

onde $\Lambda = 2.4$ e $\Lambda_0 = 0; 2$. O raio nuclear efetivo ρ é dado por:

$$\rho = \frac{R}{\hbar/m_e c}, \quad (2.47)$$

onde $R = r_0 A^{1/3}$.

Calcular os elementos de matriz nucleares $|M_{ij}(E)|^2$, $|M_r(E)|^2$, $|M_{\sigma \times r}(E)|^2$ e $|M_{\sigma \cdot r}(E)|^2$ não é uma tarefa simples, principalmente pela complexidade do problema de muitos corpos associado à força nuclear. Diante da complexidade do problema, podemos abordá-lo através de teorias microscópicas, como QRPA e o modelo de camadas, ou através de uma teoria macroscópica, como a GTBD. Dentro do formalismo da GTBD, os elementos de matrizes nucleares das primeiras transições proibidas podem ser escritos como (TAKAHASHI; YAMADA; KONDOH, 1973):

$$\begin{aligned} |M_{\sigma \cdot r}(E)|^2 &= 3 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} D_A(E, \epsilon) W(E, \epsilon) \frac{dn_1}{d\epsilon} d\epsilon, \\ |M_{\sigma \times r}(E)|^2 &= 6 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} D_A(E, \epsilon) W(E, \epsilon) \frac{dn_1}{d\epsilon} d\epsilon \\ \sum_{ij} |M_{ij}(E)|^2 &= 20 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} D_A(E, \epsilon) W(E, \epsilon) \frac{dn_1}{d\epsilon} d\epsilon. \\ |M_r(E)|^2 &= 3 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} D_V(E, \epsilon) W(E, \epsilon) \frac{dn_1}{d\epsilon} d\epsilon. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Onde $|M_r(E)|^2$ representa a parte isovetorial, $|M_{\sigma \cdot r}(E)|^2$, $|M_{\sigma \times r}(E)|^2$ e $|M_{ij}(E)|^2$ representam a interação vetorial-axial. Nós assumimos que $D_A(E, \epsilon)$ e $D_V(E, \epsilon)$ possuem uma largura adicional devido às forças nucleares dependentes do spin. Assim,

$$\begin{aligned} D_V(E, \epsilon) &= \frac{1}{1+x} [D_V^+(E, \epsilon) + x D_V^-(E, \epsilon)], \\ D_A(E, \epsilon) &= \frac{1}{1+x} [D_A^+(E, \epsilon) + x D_A^-(E, \epsilon)]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

De forma geral, as *strength functions* $D_A^\pm(E, \epsilon)$ e $D_V^\pm(E, \epsilon)$ podem ser calculadas através de uma função gaussiana, de forma semelhante às transições permitidas.

$$D_\Omega^\pm(E, \epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\Omega} \exp\left[-(E - \Delta_\Omega^\pm)^2/2\sigma_\Omega^2\right], \quad (2.50)$$

onde $\Delta_\Omega^\pm$ é a energia da respectiva ressonância

$$\begin{aligned} \Delta_\Omega^\pm &= \Delta_F \pm \Delta, \\ \Delta_F &= \Delta_{GT} = \left[\frac{1.33}{r_0/1.3} Z A^{-1/3} - 0.7825 \right] \text{ MeV}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

e x é a razão entre os termos de emparelhamento

$$x = \frac{\Delta - \bar{\Delta}}{\Delta + \bar{\Delta}}. \quad (2.52)$$

Com base nos níveis de partícula simples de um oscilador harmônico, a posição dos picos da ressonâncias pode ser determinada a partir da seguinte expressão:

$$\Delta = \frac{60.6}{M^*/M} \frac{1 + A^{-1}}{r_0^2 A^{1/3}} \text{ MeV}, \quad (2.53)$$

onde M^*/M é a massa efetiva de um nucleon

$$M^*/M = 0.6 + 0.4 A^{-1/3}, \quad (2.54)$$

e r_0 é o raio nuclear

$$r_0 = 1.25(1 + 0.65 A^{-2/3}) \text{ fm}. \quad (2.55)$$

O desvio padrão de cada ressonância é dado por:

$$\begin{aligned} \sigma_V^2 &= \sigma_F^2 + \sigma^2, \\ \sigma_A^2 &= \sigma_F^2 + \sigma^2 + 5 \text{ MeV}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

onde

$$\begin{aligned} \sigma_F &= \frac{0.145}{r_0/1.3} Z A^{-1/3}, \\ \sigma^2 &= \frac{4}{3} \epsilon_F \bar{\Delta} - \Delta^2. \end{aligned} \quad (2.57)$$

A energia de Fermi ϵ_F pode ser escrita como

$$\epsilon_F = \frac{76.52}{(M^*/M)r_0^2} \left(\frac{N_i}{A} \right)^{2/3} \text{ MeV}, \quad (2.58)$$

e o termo de emparelhamento $\bar{\Delta}$ dado por:

$$\bar{\Delta} = \frac{103.8}{(M^*/M)r_0^2 A^{2/3}} \text{ MeV.} \quad (2.59)$$

Uma vez que as transições permitidas e as primeiras transições proibidas estão devidamente definidas. A *strength-function* total é dada pelo inverso do produto $ft_{1/2}$,

$$\frac{1}{ft_{1/2}}(Q + E) = \sum_{\Omega} \frac{\lambda_{\Omega}(E)}{f(-E) \ln 2}, \quad (2.60)$$

sendo $t_{1/2}$ a meia-vida do núcleo, λ_{Ω} a taxa de decaimento da respectiva transição por unidade de energia e $f(-E)$ a integral de Fermi para as transições permitidas.

2.4 A Teoria Grossa para a captura de neutrinos

Um elemento comum a todos os possíveis sítios de processo- r é a presença abundante de neutrinos, o que o torna uma parte crucial do input nuclear. Uma vez que os neutrinos interagem via interação fraca, eles podem transferir energia e entropia a longa distâncias. Além do mais, interações via corrente-carregada afetam a razão nêutron-próton no processo- r . Isso implica que parâmetros fundamentais dos neutrinos, como hierarquia da massa, ângulos de mistura e a possível existência dos férmions estéreis os quais se misturam com os neutrinos, podem influenciar o processo de nucleossíntese (KAJINO et al., 2019).

Os parâmetros citados acima determinam o espectro de energia do neutrino, sendo este o responsável direto pela determinação do valor da fração de elétrons, que é o principal parâmetro de controle do processo- r (BALANTEKIN; FULLER, 2013). Em muitos sítios astrofísicos as interações neutrino-neutrino no transporte e nas oscilações coletivas de neutrinos desempenham um papel importante, sendo fundamental para a abundante produção de neutrinos (DUAN; KNELLER, 2009). É importante ressaltar que esses neutrinos também podem induzir fissão durante o processo- r (QIAN, 2002; KOLBE; LANGANKE; FULLER, 2004).

Os neutrinos desempenham um papel fundamental no mecanismo de explosão de uma supernova. Foi constatado com a observação da supernova SN1987a (HIRATA et al., 1987; BIONTA et al., 1987), que a quantidade de neutrinos produzida neste sítio é esmagadoramente grande. Apesar da seção de choque neutrino-núcleo ser muito pequena (da ordem de 10^{-42} cm^2), os neutrinos podem induzir outros processos de nucleossíntese como o νp -process e o ν -process. O primeiro acontece juntamente com os ventos de neutrinos logo após o nascimento

da estrela de nêutrons. O segundo se inicia com neutrinos de todos os sabores produzidos no ambiente quente e denso do colapso estelar.

Os neutrinos interagem com os núcleos presentes nas camadas mais externas da estrela via corrente-carregada e corrente-neutra. As baixas energias dos neutrinos envolvidos nessas reações, até 20 MeV, limitam as reações de corrente-carregada a neutrinos e antineutrinos eletrônicos. Para energias maiores, pode haver excitações nucleares via corrente-neutra, nesses casos a desexcitação nuclear ocorre através da emissão de partículas leves (LANGANKE; MARTÍNEZ-PINEDO; SIEVERDING, 2020).

As reações neutrino-núcleo também desempenham um papel importante durante a fase de colapso e explosão, causando mudanças na composição do meio interestelar. Como dito anteriormente, as reações de corrente-carregada são bloqueadas pelo o elevado potencial químico. E o espalhamento inelástico neutrino-núcleo compete com o espalhamento neutrino-elétron em energias $E_\nu \geq 20$ MeV (BRUENN; HAXTON, 1991). Nessa faixa de energia as transições proibidas contribuem de forma relevante para as seções de choque total. Os efeitos de temperatura finita também são manifestados no espalhamento inelástico $\nu + A$ em energias $E \leq 10$ MeV, como mostra a Figura 15. Isto acontece quando os estados nucleares, que estão ligados ao estado fundamental e estados excitados de baixas energias por fortes transições de GT e um grande espaço de fase, ficam termicamente excitados. Como consequência, as seções de choque são significativamente aumentadas para neutrinos de baixas energias em temperatura finita e podem ser comparadas ao espalhamento inelástico neutrino-elétron (SAMPAIO et al., 2002). Desta forma, o espalhamento inelástico neutrino-núcleo, que outrora foi negligenciado, deve ser incluído no estudo da fase de colapso.

Os antineutrinos, assim como os neutrinos, desempenham um importante papel no processo-*r*. Os antineutrinos eletrônicos saem de uma camada mais profunda da estrela de nêutrons do que os neutrinos eletrônicos (MEYER; MCLAUGHLIN; FULLER, 1998). Sendo o resultado da maior opacidade dos antineutrinos no interior da estrela de nêutrons. A medida que os neutrinos e antineutrinos capturam nêutrons e prótons livres na matéria ejectada, mais quente os antineutrinos ficam ao conduzirem a matéria rica em nêutrons. As altas entropias, a rápida expansão, a matéria ejectada rica em nêutrons, todos esses ingredientes fornecem condições favoráveis para a nucleossíntese.

Em sítios astrofísicos, os núcleos são expostos a um fluxo térmico de neutrinos $\Phi_\nu(E_\nu)$ e a seção de choque média é dada por:

$$\langle \sigma_\nu \rangle = \int_{E_{th}}^{\infty} \Phi_\nu(E_\nu) \sigma(E_\nu) dE_\nu, \quad (2.61)$$

onde E_{th} é o limiar de energia para emissão de um elétron. Para modelar o fluxo de neutrinos,

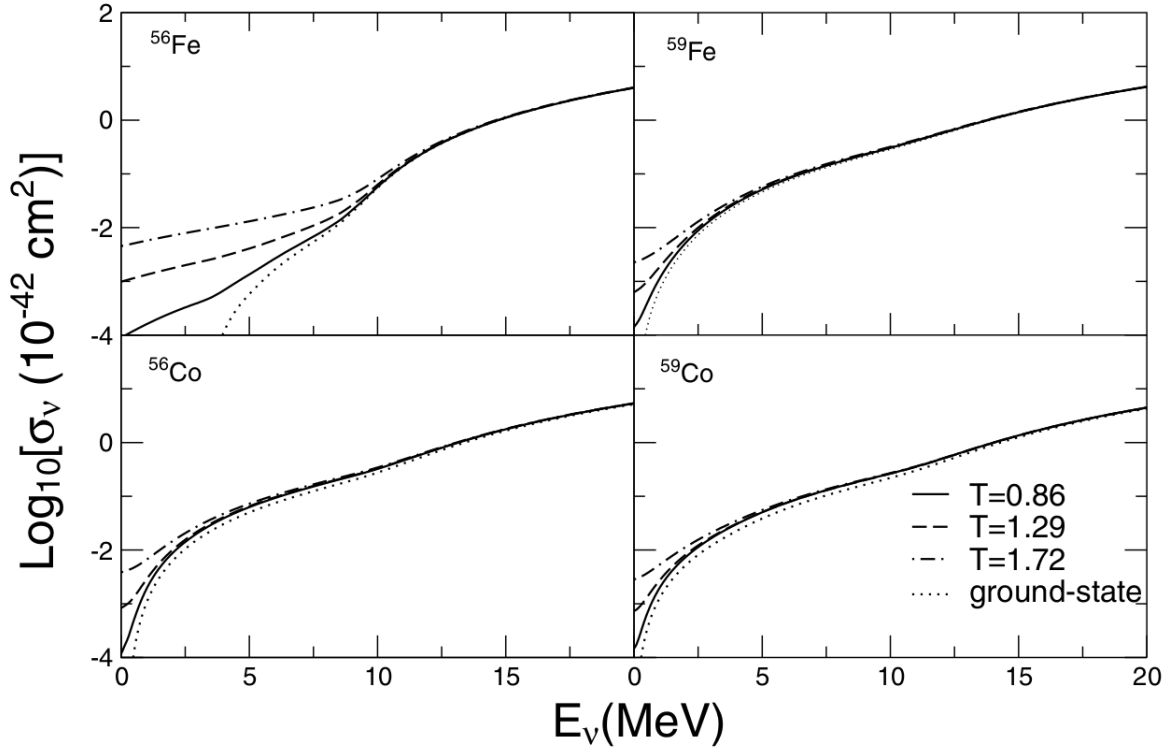


Figura 15 – Seções de choque para o espalhamento inelástico neutrino-núcleo em núcleos com temperatura finita (LANGANKE; THIELEMAN; WIESCHER., 2004). As temperaturas estão em MeV.

utilizaremos uma distribuição de Fermi-Dirac

$$\Phi_\nu(E_\nu) = \frac{1}{T_\nu^3} \frac{E_\nu^2}{\exp[E_\nu/T_\nu - \mu_\nu] + 1}, \quad (2.62)$$

onde T_ν é a temperatura do neutrino e μ_ν é o potencial químico do neutrino. Considerando um sítio de supernova, μ_ν pode ser escrito como:

$$\mu_\nu = 11.1(\rho_{10} 2Y_{\nu_e})^{1/3} \text{ MeV}, \quad (2.63)$$

onde ρ_{10} é a densidade em $10^{10} g \cdot cm^{-3}$ e Y_{ν_e} é a fração de neutrinos.

Seguindo o trabalho pioneiro de Woosley *et al.* (WOOSLEY *et al.*, 1990) e até recentemente, os espectros de neutrinos eram descritos por distribuições de Fermi-Dirac sem o potencial químico e com temperaturas independentes do tempo. De forma geral, simulações computacionais demonstraram que a hierarquia das energias médias de neutrinos é : $\langle E_{\nu_x} \rangle > \langle E_{\nu_{\bar{e}}} \rangle > \langle E_{\nu_e} \rangle$. Onde x se refere aos neutrinos do múon e do tau, suas temperaturas se relacionam com a energia média através da expressão: $T_\nu \approx 3.15 \langle E_\nu \rangle$. Com o aprimoramento dos modelos de supernova no decorrer dos anos, principalmente adicionando processos que afetam a opacidade dos neutrinos, os valores assumidos para as temperaturas dos neutrinos

do múon e do tau caíram de 8 MeV para 4 MeV. Para os antineutrinos e neutrinos eletrônicos esse valor caiu de 6 MeV para 4 MeV e de 5 MeV para 2.8 MeV, respectivamente. Os maiores valores citados são do trabalho pioneiro de Woosley *et al.*, enquanto os valores mais baixos foram obtidos por Sieverding *et al.* (SIEVERDING *et al.*, 2018) em recentes simulações de supernova. Heger *et al.* usaram valores intermediários, o que parecia apropriado no momento que o estudo foi feito: $T_{\nu_x} = 6$ MeV, $T_{\bar{\nu}_e} = 5$ MeV e $T_{\nu_e} = 4$ MeV.

De acordo com Woosley *et al.*, a luminosidade do neutrino no sítio de supernova pode ser representada por um decaimento exponencial em relação ao tempo, como mostra a equação abaixo:

$$L_\nu(t) = L_0 \exp\{(-t/\tau)\}, \quad (2.64)$$

onde $L_0 = 3 \times 10^{53}$ erg/ τ e $\tau = 3$ s, o que é consistente com as observações experimentais. A captura de neutrinos depende explicitamente da luminosidade, dada por

$$\lambda_\nu = \frac{L_\nu}{4\pi r^2} \frac{\langle \sigma_\nu \rangle}{E_\nu} \quad (2.65)$$

Como nós sabemos, alguns experimentos utilizam fontes de neutrinos provenientes do decaimento do pión em repouso (DAR) e em voo (DIF). Com o objetivo de comparar os nossos resultados com os dados experimentais disponíveis, iremos também fazer uso do fluxo de Michel que leva em conta o espectro do neutrino eletrônico e neutrino muônico. Para o DAR neutrino, podemos obter um fluxo de espectro contínuo para o neutrino eletrônico, o qual pode ser escrito como:

$$f(E_{\nu_e}) = \frac{96E_{\nu_e}^2}{m_\mu^4} (m_\mu - 2E_{\nu_e}), \quad (2.66)$$

onde m_e é a massa do elétron. A seção média com o fluxo de Michel é dada por:

$$\langle \sigma_\nu \rangle = \frac{\int dE_\nu \sigma_\nu(E_\nu) f(E_\nu)}{\int dE_\nu f(E_\nu)}. \quad (2.67)$$

A seção de choque total é composta pelo os mesmos elementos de matriz do decaimento- β . Considerando as transições permitidas, temos:

$$\sigma(E_\nu) = \frac{G^2}{\pi} \int_0^{E_\nu - m_e} p_e E_e F(Z + 1, E_e) [g_V^2 \|\mathcal{M}_F(E)\|^2 + g_A^2 \|\mathcal{M}_{GT}(E)\|^2] dE. \quad (2.68)$$

A integração cobre todos os estados nucleares possíveis permitidos pelas regras de seleção e os limites de integração são determinados pela condição de conservação de energia.

Um dos principais objetivos deste trabalho é a incorporação das primeiras transições proibidas para o decaimento- β e captura de neutrinos. De acordo com Itoh *et al.* (ITO; KOHYAMA, 1978), podemos escrever a seção de choque total como:

$$\sigma = \sigma_F + \sigma_{GT} + \sigma_1^{(0)} + \sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)}, \quad (2.69)$$

onde $\sigma_1^{(0)}$, $\sigma_1^{(1)}$ e $\sigma_1^{(2)}$ são as seções de choque para as primeiras transições proibidas de ordem 0, 1 e 2, respectivamente.

2.5 Emissão retardada de nêutrons no decaimento- β

A emissão retardada de nêutrons é um fenômeno que pode acompanhar o decaimento- β . A Figura 16 mostra de forma esquemática esse processo. Como sabemos, no decaimento- β o núcleo pai decai de um estado fundamental para um determinado estado particular do núcleo filho. Se a energia de separação de nêutrons, S_n , for menor que o valor Q_β , então o núcleo poderá emitir um nêutron com uma energia entre 0 e $Q_\beta - S_n$. Energia essa, que poderá ser medida do estado fundamental do núcleo pai (KOURA et al., 2017).

As probabilidades de emissão retardada de nêutrons no decaimento- β (P_n), principalmente na região $Z > 28$, representam um input de parâmetros importante para as operações em reatores de fissão nuclear. Esses parâmetros também desempenham um papel importante no processo- r e na estrutura nuclear de núcleos ricos em nêutrons, onde a emissão retardada de nêutrons no decaimento- β (βn) compete com o decaimento- β (LIANG et al., 2020).

A emissão βn foi descoberta em 1939 por Roberts *et al.* (ROBERTS; MEYER; WANG, 1939), logo após a descoberta do processo de fissão por Meitner, Han e Strassmann em 1938 (MEITNER; STRASSMANN; HAHN, 1938). Os processos de emissão de dois e três nêutrons retardados ($\beta 2n$ e $\beta 3n$) foram descobertos 40 anos depois, observado no ^{11}Li . É importante ressaltar que a palavra “retardado” significa que o nêutron é emitido com a meia-vida do decaimento- β do seu núcleo precursor AZ . Esse valor varia de alguns milissegundos para a maioria dos núcleos ricos em nêutrons até 80(18) s, que é a maior meia-vida βn observada até o momento.

O primeiro estudo detalhado do espectro de emissão βn foi publicado por Brady (BRADY, 1989). Neste estudo combinou-se o espectro medido com cálculos de modelos estatísticos, com o objetivo de complementar os dados experimentais que eram escassos e limitados quanto ao intervalo de energia. Esses resultados foram adicionados ao *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF/B) e posteriormente foram atualizados com resultados obtidos por Kawano *et al.* (KAWANO; MÖLLER; WILSON, 2008).

Até 2011 somente esforços esporádicos foram feitos para coletar dados de quantidade microscópicas relacionadas a emissão βn . Quantidades como meia-vida e branching ratio de nêutrons são cruciais para revelar propriedades importantes da estrutura nuclear em núcleos ricos em nêutrons longe do vale de estabilidade- β . Esses dados também são utilizados diretamente como input nuclear para cálculos de reações em cadeia no processo- r em ambientes

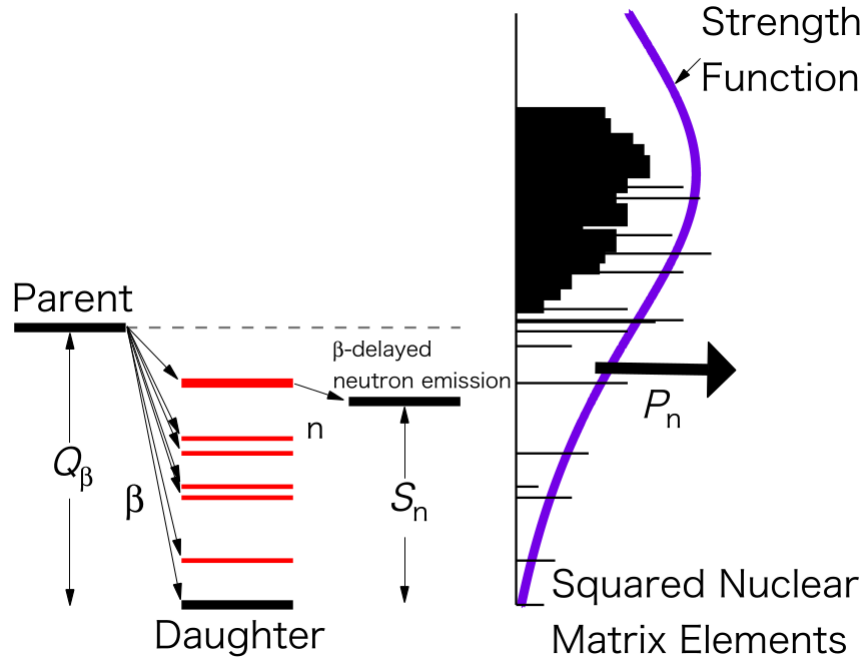


Figura 16 – Figura esquemática do decaimento- β e da emissão retardada de nêutrons (KOURA et al., 2017).

astrofísicos como CC supernova e BNS, ou até mesmo indiretamente para aprimorar previsões teóricas as quais são necessárias para extrapolar modelos em regiões inacessíveis da carta de núclídeos (DIMITRIOU et al., 2021).

De acordo com o Atomic Mass Evaluation em 2016 (AME2016) (WANG et al., 2017), 651 núcleos de um total de 3435 núcleos conhecidos são βn emissores. Algumas previsões teóricas estimam que deva existir cerca de 4000 núcleos adicionais entre as linhas de gotejamento de próton e nêutron, sendo a maioria deles ricos em nêutrons e consequentemente poderão ser βn emissores. Até 2011, somente 216 βn emissores possuíam medidas para o branching ratio de nêutrons. Sendo 81 núcleos na região de massa leve ($Z < 28$), 134 núcleos em regiões onde ocorrem a fissão (entre $Z = 29$ e $Z = 57$), e somente 1 núcleo com $Z > 57$, o ^{210}Tl . Até 2020, 653 núcleos entre ^8H e ^{237}Ac foram identificados como potenciais βn emissores, apenas 2 a mais do que em 2017.

Um dos maiores e mais direcionados esforços recentes para preencher esse gap entre os βn emissores identificados e aqueles que possuem medição é o projeto Beta-delayed neutrons at RIKEN (BRIKEN) (TARIFEÑO-SALDIVIA et al., 2017). Trata-se de uma colaboração internacional que está em atividade desde 2016, com o objetivo de medir as meias-vidas e branching ratio de nêutrons dos βn emissores mais “acessíveis”. Em resposta a essa urgente necessidade de dados, a International Atomic Energy Agency (IAEA) está coordenando uma colaboração internacional para produzir uma base de dados de referência em βn emissores

(DILLMANN; DIMITRIOU; SINGH, 2013).

Nos primeiros estudos (AMIEL; FELDSTEIN, 1970; KRATZ; HERRMANN, 1973) e em estudos recentes (McCUTCHAN et al., 2012; MIERNIK, 2013), a probabilidade de ocorrer uma emissão retardada de nêutrons P_{1n} está correlacionada com outras grandezas macroscópicas, como $T_{1/2}$, S_n e Q_β . A correlação básica entre P_{1n} e o decaimento- β é:

$$P_{1n} = \frac{\int_{S_n}^{Q_\beta} S_\beta(E) f(Z, Q_\beta - E) dE}{\int_0^{Q_\beta} S_\beta(E) f(Z, Q_\beta - E) dE}, \quad (2.70)$$

onde $S_\beta(E)$ é a função strength e $f(Z, Q_\beta - E)$ é a integral de Fermi. A integração é feita em todas as energias do decaimento- β conhecidas, $Q_\beta - E$.

Uma das primeiras expressões semi-empíricas foi proposta por Amiel *et al.* (AMIEL; FELDSTEIN, 1970). Desde aquela época já se sabia que a probabilidade de emissão de nêutrons depende de $Q_{\beta n}$, da densidade de níveis e da competição da emissão de nêutrons com a emissão gama. Porém, foi verificado uma dependência linear de P_{1n} com o $Q_{\beta n}$, mostrando que a dependência em $Q_{\beta n}$ é dominante nesse processo. Ao longo dos últimos anos as expressões semi-empíricas foram aprimoradas, sendo algumas delas empregada no Coordinate Reseach Project (CRP) da IAEA (DIMITRIOU et al., 2021). Segue abaixo a descrição das três fórmulas semi-empíricas mais empregadas:

- *Kratz-Hermann formula (KHF)*

Proposta por Kratz e Hermann em 1973 (KRATZ; HERRMANN, 1973), assume-se que a função β -strength é constante acima de certo valor de energia C e zero abaixo dessa mesma energia. Onde C é chamado de parâmetro de corte. Também assume-se que a integral de Fermi pode ser escrita em função do valor $Q_{\beta n}$. Com base nestas considerações, Kratz and Hermann propuseram a seguinte expressão para P_{1n} :

$$P_{1n} \approx a \left(\frac{Q_{\beta n}}{Q_{\beta n} - C} \right)^b, \quad (2.71)$$

onde a e b são parâmetros livres a serem ajustados a dados experimentais. De acordo com o último ajuste feito por Liang *et al.* (LIANG et al., 2020) os valores obtidos são $a = 106(20)$ e $b = 4.9(2)$. Os valores do parâmetro de corte depende da paridade do núcleo, sendo:

$$\begin{aligned} C &= 0, & \text{para núcleos par - par,} \\ C &= 13/\sqrt{A}, & \text{para núcleos par - ímpar ou ímpar - par,} \\ C &= 26/\sqrt{A}, & \text{para núcleos ímpar - ímpar.} \end{aligned} \quad (2.72)$$

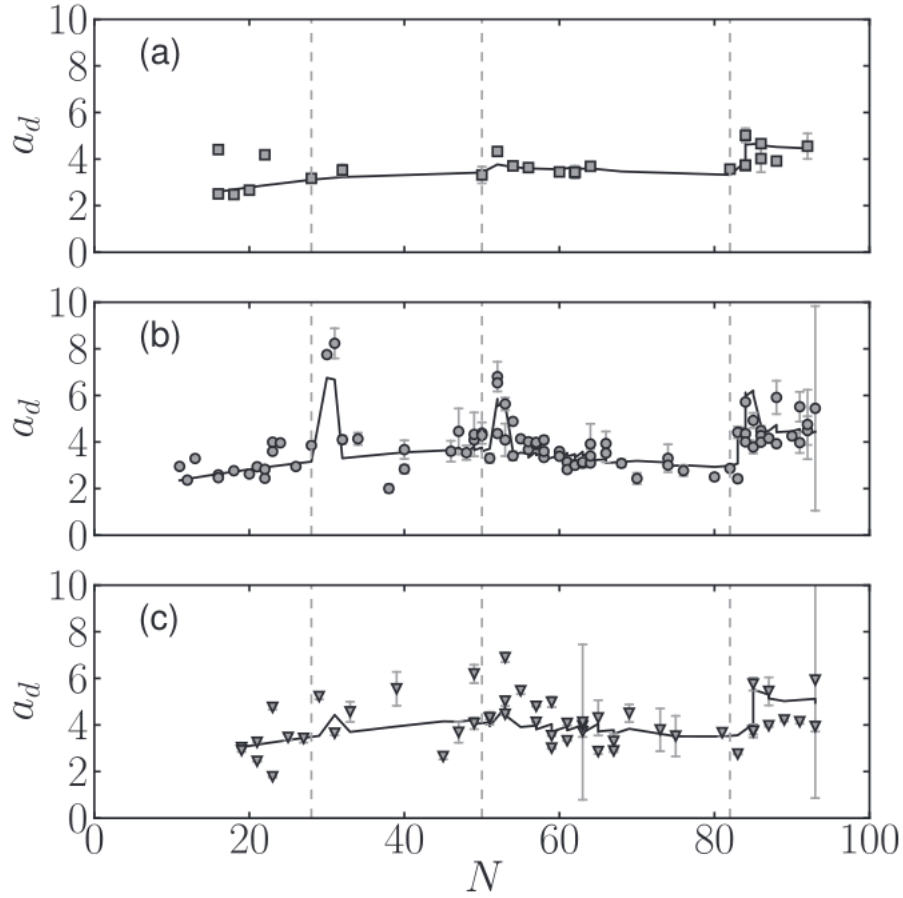


Figura 17 – Parâmetros da densidade efetiva determinados por dados experimentais (círculos, quadrados e triângulos) e calculados pela equação (2.76) (linha sólida) ambos plotados em função do número de nêutrons. Os subplots representam: (a) par-par, (b) A-ímpar, e (c) ímpar-ímpar. As linhas verticais pontilhadas representam os números mágicos (28, 50, 82) (MIERNIK, 2013).

- *McCutchan systematics*

A KHF fornece uma descrição das características gerais de P_{1n} em função de $Q_{\beta n}$, porém essa aproximação produz resultados com um χ^2 elevado. O que coloca em cheque a qualidade das previsões feitas com essa sistemática. Com o objetivo de fornecer uma sistemática mais confiável, McCutchan *et al.* (McCUTCHAN *et al.*, 2012) desenvolveram uma alternativa que incorpora P_{1n} e $T_{1/2}$. Como $T_{1/2}$ é inversamente proporcional ao valor Q_{β} , a expressão proposta é:

$$\frac{P_{1n}}{T_{1/2}} \approx c Q_{\beta n}^d, \quad (2.73)$$

onde c e d são parâmetros ajustados. Apesar de representar uma melhora nos resultados obtidos, quando comparados com a KHF, a sistemática proposta por McCutchan ainda

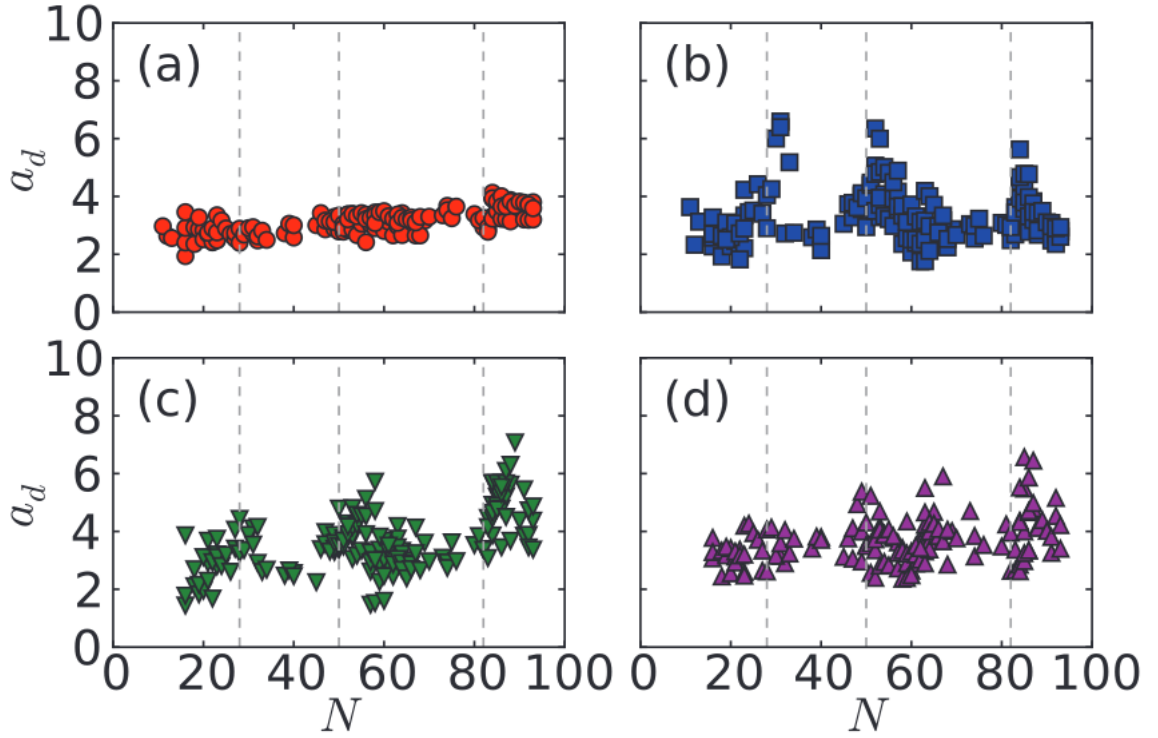


Figura 18 – Parâmetros da densidade efetiva calculados por diferentes modelos (MIERNIK, 2013). (a) KHF (KRATZ; HERRMANN, 1973), (b) McCutchan (McCUTCHAN et al., 2012), (c) QRPA (MÖLLER; PFEIFFER; KRATZ, 2003) e (d) GTBD (TACHIBANA; YAMADA; YOSHIDA, 1990).

apresenta desvios consideráveis.

- *Sistemática baseada no Effective Density Model (EDM)*

O modelo proposto por McCutchan é uma boa alternativa para calcular P_{1n} em algumas cadeias isotópicas específicas, no entanto uma sistemática que consiga fazer previsões de forma global ainda é necessária. Diante disso, foi proposto uma nova aproximação. O EDM assume que a função β -strength é proporcional a densidade de níveis no decaimento- β , o qual pode ser descrito por uma função similar ao modelo de gás de Fermi.

$$S_{\beta}(E) \propto \rho(E) = \frac{\exp(a_d \sqrt{E})}{E^{2/3}}, \quad (2.74)$$

onde a_d é o parâmetro que é ajustado aos dados experimentais. O resultado dessa fórmula pode ser usado para toda superfície de massa. O parâmetro fitado depende do número de

Tabela 2 – Valores de a_1 , a_2 , a_3 e m_n ajustados para núcleos com diferentes paridades, adotados em (LIANG et al., 2020).

	par-par	A-ímpar	ímpar-ímpar
a_1	0.0110	0.0013	0.0097
a_2	-0.0347	-0.0285	-0.0513
a_3	0.3600	0.4462	0.3908
m_n	4.7785	3.4462	6.1302

nêutrons N e prótons Z do núcleo pai, como mostra a expressão abaixo:

$$\begin{aligned}
 a_d &= a_1 N' + a_2 Z' + a_3 \sqrt{N} + \exp(m), \\
 N' &= N - (N_m^i + 2), \\
 Z' &= Z - Z_m^i,
 \end{aligned} \tag{2.75}$$

onde N_m^i e Z_m^i são as últimas camadas fechadas de próton e nêutron. O parâmetro m está presente somente em nuclídeos com dois ou três nucleons acima dos números mágicos 28, 50 e 82. Sendo calculado pela seguinte expressão:

$$m = \begin{cases} m_n / \sqrt{N} & \text{N é o número mágico} + 2 \text{ ou } 3, \\ 0 & \text{para os demais casos.} \end{cases}$$

No trabalho publicado por Liang *et al.* (LIANG et al., 2020), os valores adotados para o cálculo de a_d são apresentados na Tabela 2. Já no trabalho publicado por Miernik (MIERNIK, 2013) os valores da densidade efetiva estão representados na Figura 17, para efeitos de comparação a Figura 18 mostra o valor a_d calculados a partir de diferentes modelos.

A obtenção do parâmetro a_d para os núcleos de interesse é o primeiro passo para calcular P_{1n} . O próximo passo é calcular $Q_{\beta n}$ e S_n , que podem ser experimentais ou obtidos através de uma fórmula de massa. Com esses valores, pode-se precisamente calcular a integral de Fermi e posteriormente obter P_{1n} com a equação (2.70).

3 Aplicações do Machine Learning e modelos nucleares de massa

A Física nuclear é uma área da Física muito bem estabelecida, com mais de um século de descobertas fundamentais cobrindo uma enorme extensão de graus de liberdade, escalas de energia e comprimento, partindo dos constituintes fundamentais da matéria até a estrutura das estrelas na síntese de elementos no cosmos. Os experimentos atuais produzem um enorme volume de dados, sendo estes complexos e heterogêneos, representando uma enorme dificuldade de concepção, execução e análise de dados (ver Figura 19).

A modelagem de propriedades nucleares por vezes esbarra na grande quantidade de graus de liberdade dos cálculos de mecânica quântica. Sendo que esta, juntamente com a análise dos dados experimentais, visa descobrir as leis básicas necessárias para fazer previsões e estimativas. Diante dos grandes esforços para entender as propriedades fundamentais do universo, foram construídos laboratórios extremamente bem equipados ao redor do mundo. Cada um desses laboratórios possui uma forma particular de operação, aquisição de dados e métodos de análise. Similarmente, as diferentes escalas que abrangem a Física nuclear levam a uma ampla necessidade de métodos computacionais para quantificação de incertezas. Toda essa diversidade e quantidade de dados torna o cenário ideal para aplicações dos métodos de Machine Learning (ML) (BOEHNLEIN et al., 2022).

Em sua essência, o ML representa a ciência de construção de modelos para a execução de uma determinada tarefa sem que as instruções sejam explicitamente programadas. Esse método introduz na prática uma hierarquia de operações matemáticas que permitem o computador aprender conceitos complicados construindo-os a partir de conceitos mais simples. Dessa forma podemos definir o ML como *a criação ou uso de modelos que aprendem com dados*. Normalmente, o objetivo é usar dados existentes para desenvolver modelos e prever novos resultados. Existem muitos métodos de ML, sendo estes divididos em duas grandes categorias, supervisionados e não-supervisionados. No aprendizado supervisionado os dados de treinamento são rotulados com as respostas corretas para o aprendizado, permitindo aprender com os dados e fazer previsões sobre os futuros eventos (dados não inclusos no conjunto de dados de treinamento).

Por outro lado, o aprendizado não-supervisionado é um método utilizado para encontrar padrões e relações no conjunto de dados, sem nenhum conhecimento prévio do sistema. Muitos pesquisadores fazem uso de uma terceira categoria, o aprendizado semi-supervisionado, em

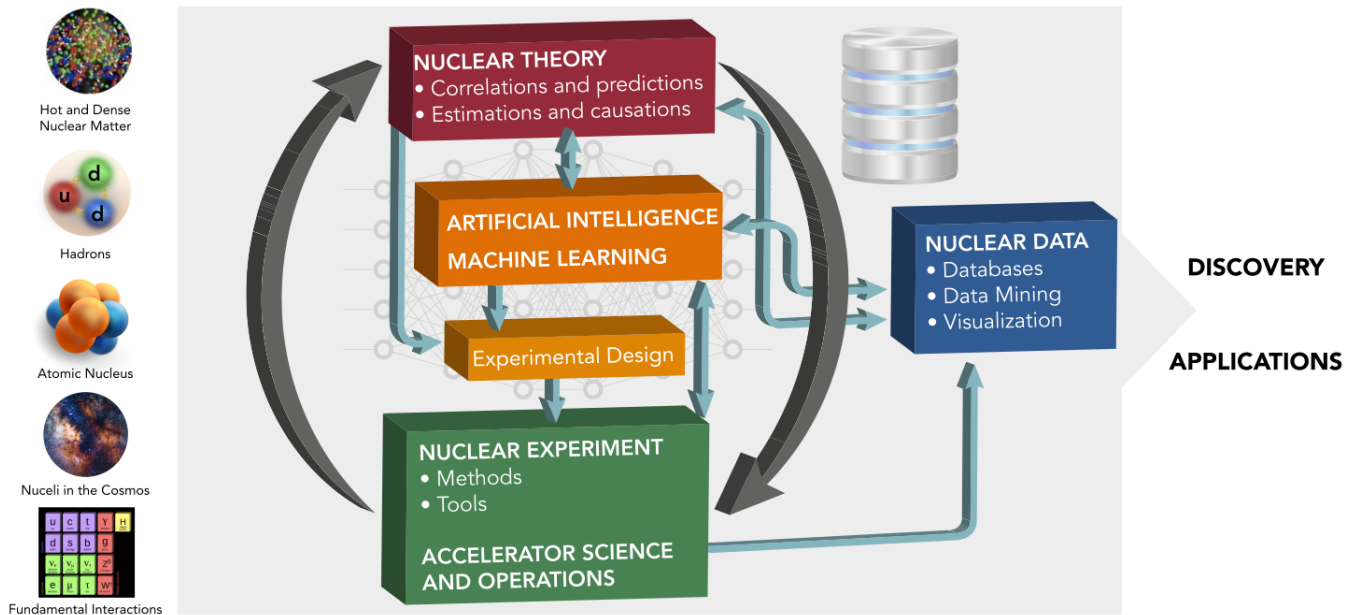


Figura 19 – Representação esquemática das conexões entre teoria, ciência computacional e experimentos (BOEHNLEIN et al., 2022).

que alguns dados são rotulados e outros não. Também existe o aprendizado por reforço; neste aprendizado, o modelo recebe um sinal indicando o seu nível de acerto depois de fazer uma série de previsões. Esse tipo de aprendizado é inspirado na psicologia comportamental, onde as ações são aprimoradas para maximizar o prêmio (GRUS, 2019).

Outra maneira de categorizar os modelos de ML é através do output desejado. Os mais comuns são:

- *Classificação*: As saídas são divididas em duas ou mais classes. O objetivo é produzir um modelo que atribua as entradas à uma dessas classes.
- *Regressão*: Aqui o objetivo é encontrar uma relação funcional entre um conjunto de dados de entrada e um conjunto de dados de referência. Com isso pode-se construir uma função que mapeie os dados de entrada em valores de saída contínuos.
- *Clusterização*: Os dados são divididos em grupos com determinadas características em comum, sem conhecer os diferentes grupos de antemão. Esta tarefa de ML se enquadra na categoria de aprendizagem não supervisionada.
- *Geração*: Constrói um modelo para gerar dados que são semelhantes a um conjunto de dados de treinamento. A maioria dos modelos generativos são tipos de aprendizagem não supervisionada.

3.1 Redes neurais artificiais

O termo *rede neural* é uma alusão à dinâmica do cérebro humano. Uma *rede neural artificial* pode ser definida como sendo um modelo de predição, onde há uma série de neurônios conectados. Neste modelo, cada neurônio analisa a saída do neurônio subsequente ligado a ele, podendo ser ativado ou não. As redes neurais são ferramentas poderosas para desempenhar tarefas complexas; além disso, são versáteis e escalonáveis.

O primeiro trabalho com redes neurais foi desenvolvido em 1943 pelo neurofisiologista Warren McCulloch e pelo matemático Walter Pitts (McCULLOCH; PITTS, 1943). Após este trabalho primordial, os avanços subsequentes nas pesquisas envolvendo redes neurais levaram a crer que dentro de poucos anos teria-se máquinas inteligentes capazes de conversar com o ser humano, o que na prática não ocorreu. Isso tornou-se mais evidente na década de 1960, e, conseqüentemente, os recursos que antes eram destinados às pesquisas de inteligência artificial passaram a ser destinados a outras áreas (GÉRON, 2021).

A Figura 20 mostra as semelhanças entre um neurônio artificial e um neurônio biológico. A representação biológica é composta por um corpo celular que contém o núcleo, prolongamentos ramificados chamados de dendritos e uma longa extensão chamada de axônio. Já para o neurônio artificial, a arquitetura mais simples é a *perceptron*, proposta por Frank Rosenblatt em 1957. Essa representação toma como base um neurônio ligeiramente diferente,

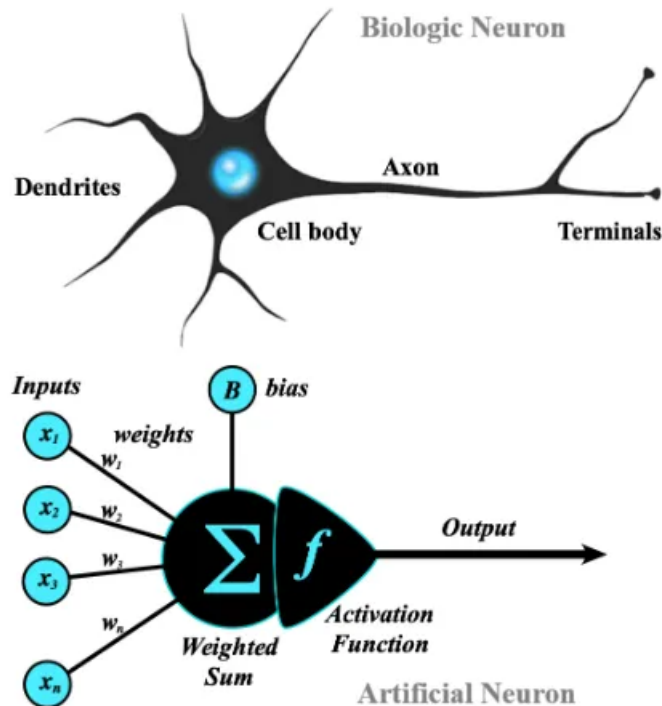


Figura 20 – A imagem superior mostra um neurônio biológico. A imagem inferior representa um neurônio artificial (Fraidoon Omarzai, 2024).

onde as entradas e as saídas são números e cada conexão de entrada está associada a um peso. Após estabelecer os inputs, calcula-se uma soma ponderada de suas entradas, como mostra a equação abaixo:

$$z = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 \cdots w_nx_n = \mathbf{x}^T \mathbf{w}. \quad (3.1)$$

Os perceptrons são compostos por apenas uma *unidade lógica de limiar* (TLU), como são conhecidos esse tipo de neurônio artificial. Cada TLU se conecta com todas as entradas do neurônio. As primeiras saídas geradas a partir de uma determinada entrada são fornecidas pelos neurônios de entrada. E a junção desses neurônios forma a camada de entrada. E como é feito o treinamento de um perceptron ? Cada perceptron é treinado utilizando uma variante da regra de Hebb. Em seu livro publicado em 1949, Donald Hebb mostrou que quando um neurônio biológico é acionado com frequência por outro neurônio, a conexão entre eles se fortalece (HEBB, 1949). Ou seja, quando dois neurônios são disparados simultaneamente, o peso da conexão entre eles aumenta.

Utilizando essa regra é possível avaliar o erro cometido pela rede quando esta faz uma predição. Quando isso acontece, a regra de aprendizado reforça ainda mais as conexões com a finalidade de reduzir o erro. Apesar de ser um método prático, os cientistas constataram algumas limitações determinantes das perceptrons, sendo incapazes até de resolver alguns problemas corriqueiros. Esses problemas foram posteriormente resolvidos ao empilhar diversas perceptrons. Desse processo surgiu a *perceptron multicamada* (MLP), comumente conhecida como redes *feed-foward*. Uma MLP é constituída de uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas e uma camada de saída, como mostra a Figura 21.

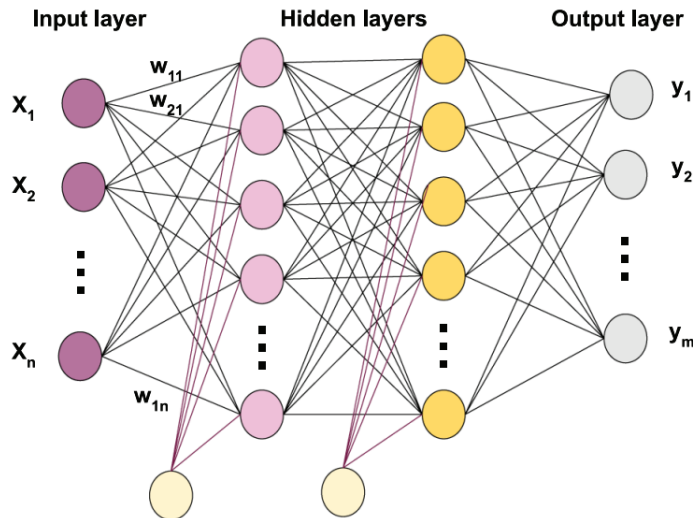


Figura 21 – Arquitetura de uma perceptron multicamada com n entradas, duas camadas ocultas de neurônios e m saídas (CHAN et al., 2023).

Para treinar uma MLP é necessário fazer uso de um algoritmo de *retropropagação*. Em resumo, esse algoritmo consiste em um método eficiente para calcular automaticamente o gradiente da função de erro em relação aos pesos da rede, permitindo aplicar o método do gradiente descendente para ajustá-los. O processo envolve duas passagens pela rede (forward e backward) para que seja possível determinar como cada peso deve ser ajustado de forma a minimizar o erro. Esse processo é repetido até que a rede possa convergir para uma solução.

Em modelos de regressão, é comum utilizar combinações lineares de bases de funções não lineares. Em uma rede neural, os coeficientes das combinações lineares são os parâmetros a serem ajustados. Tendo o vetor $\mathbf{x}$ como entrada e os parâmetros $w = \{a, b, c, d\}$ a serem ajustados, podemos escrever a seguinte combinação linear (RODRÍGUEZ, 2020):

$$y(\mathbf{x}, c_j, d_j) = c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij}x_i. \quad (3.2)$$

A este resultado, podemos aplicar uma função de ativação h , obtendo a seguinte função

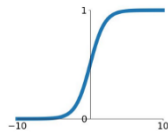
$$z(\mathbf{x}, c_j, d_j) = h(y(\mathbf{x}, c_j, d_j)) = h\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij}x_i\right). \quad (3.3)$$

A função de ativação de h é aplicada diretamente à saída de um neurônio, introduzindo uma não-linearidade ao modelo. Com isso, a rede aprende e representa a complexidade dos dados. É importante ressaltar que, sem a função de ativação, a rede neural se comportaria como um modelo de regressão linear. Existem vários tipos de funções de ativação disponíveis na literatura, e a escolha de uma determinada função dependerá do tipo de problema a ser resolvido com a rede neural. Na Figura 22 mostramos algumas das principais funções de ativação.

Activation Functions

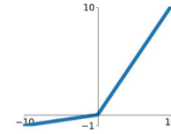
Sigmoid

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



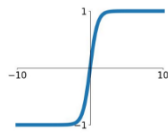
Leaky ReLU

$$\max(0.1x, x)$$



tanh

$$\tanh(x)$$

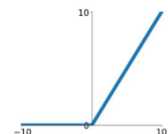


Maxout

$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

ReLU

$$\max(0, x)$$



ELU

$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$

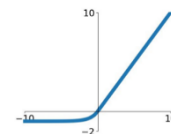


Figura 22 – Diferentes tipos de funções de ativação (JADON, 2018).

A contribuição de cada camada da rede neural será a combinação linear de seus nós, que pode ser escrita como:

$$\psi(x, \mathbf{w}) = a + \sum_{j=1}^H b_j h \left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i \right), \quad (3.4)$$

Onde H é o número de unidades ocultas da rede e I é o número de variáveis de entrada. Neste trabalho, utilizaremos a função $\tanh$, que é muito utilizada em problemas de regressão. A função $\tanh(x)$ assume valores no intervalo $[-1, 1]$ e retorna 0 para $x = 0$. Isso é importante em redes maiores, uma vez que evita a saturação dos pesos. Aplicando a função $\tanh$ à Eq. (3.4), temos:

$$\psi(x, \mathbf{w}) = a + \sum_{j=1}^H b_j \tanh \left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ij} x_i \right). \quad (3.5)$$

3.2 Redes Neurais Bayesianas

Apesar de existirem diferentes definições de Redes Neurais Bayesianas (BNN) na literatura, todas a representam como uma rede neural estocástica treinada utilizando a inferência bayesiana. Neste modelo, as conexões entre os neurônios são distribuições de probabilidade, enquanto que nas redes neurais convencionais as conexões são dadas por valores escalares (ver Figura 23). Este método ganhou força nas últimas décadas devido a alguns fatores importantes: a) sua capacidade de calcular incertezas via distribuição *posteriori*; b) generalização enquanto reduz o sobreajuste; c) permite o aprendizado sequencial enquanto retém o conhecimento passado da rede. A grande dificuldade desse método consiste na obtenção da função *posteriori*, sendo necessário utilizar métodos de Monte Carlo (MC) para o processo de *sampling*.

Quando se trata de inferência Bayesiana, o Teorema de Bayes desempenha um papel importante. Este teorema fornece uma regra matemática para inverter probabilidades condicionais. Dentro desta análise, podemos destacar conceitos importantes, como: a) a função de probabilidade *a priori*, que representa o conhecimento anterior a qualquer medição; b) a função de *verossimilhança*, responsável por relacionar os parâmetros do modelo com os dados experimentais e c) combinando essas duas funções, obtemos a função de distribuição *a posteriori*. O teorema de Bayes pode ser escrito como

$$p(\omega \mid x, t) = \frac{p(x, t \mid \omega) p(\omega)}{p(x, t)}, \quad (3.6)$$

onde $p(\omega \mid x, t)$ é a função *a posteriori*, $p(x, t \mid \omega)$ é a função de *verossimilhança*, $p(\omega)$ é a probabilidade *a priori* e $p(x, t)$ é um termo de normalização conhecido como *evidência do*

modelo. Em essência, a função posteriori reflete o refinamento de $p(\omega)$ baseado em uma nova evidência (UTAMA; PIEKAREWICZ, 2017).

Para definir a função de verossimilhança é necessário antes introduzir a função custo

$$\chi^2(\mathcal{D} | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{t_i - \psi(x_i, \boldsymbol{\theta})}{\delta t_i} \right]^2, \quad (3.7)$$

onde $t_i \equiv t(x_i)$ é o i -ésimo valor experimental, δt_i é o erro associado ao valor experimental e $\psi(x_i, \boldsymbol{\theta})$ é a função definida pela Eq. (3.5). A função de verossimilhança pode ser considerada como uma função de probabilidade com distribuição multivariada normal

$$\mathcal{L}(\mathcal{D} | \boldsymbol{\theta}) \propto \exp \left[-\frac{\chi^2(\mathcal{D} | \boldsymbol{\theta})}{2} \right]. \quad (3.8)$$

Devido a complexidade da função posteriori, são empregados algoritmos de integração com o método de MC para obter a sua solução. Neste trabalho, adotou-se o método Monte Carlo Markov Chain (MCMC) para o processo de sampling da distribuição posteriori. Uma vez que um número suficiente de samples é gerado, resultados confiáveis são gerados quantizando a rede neural através das funções densidade de probabilidade a posteriori

$$\langle \psi \rangle = \int \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \mathcal{P}(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{D}) d\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \psi(x_i, \theta_j). \quad (3.9)$$

A incerteza da predição é dada pela seguinte expressão:

$$\Delta\psi = \sqrt{\langle \psi^2 \rangle - \langle \psi \rangle^2}, \quad (3.10)$$

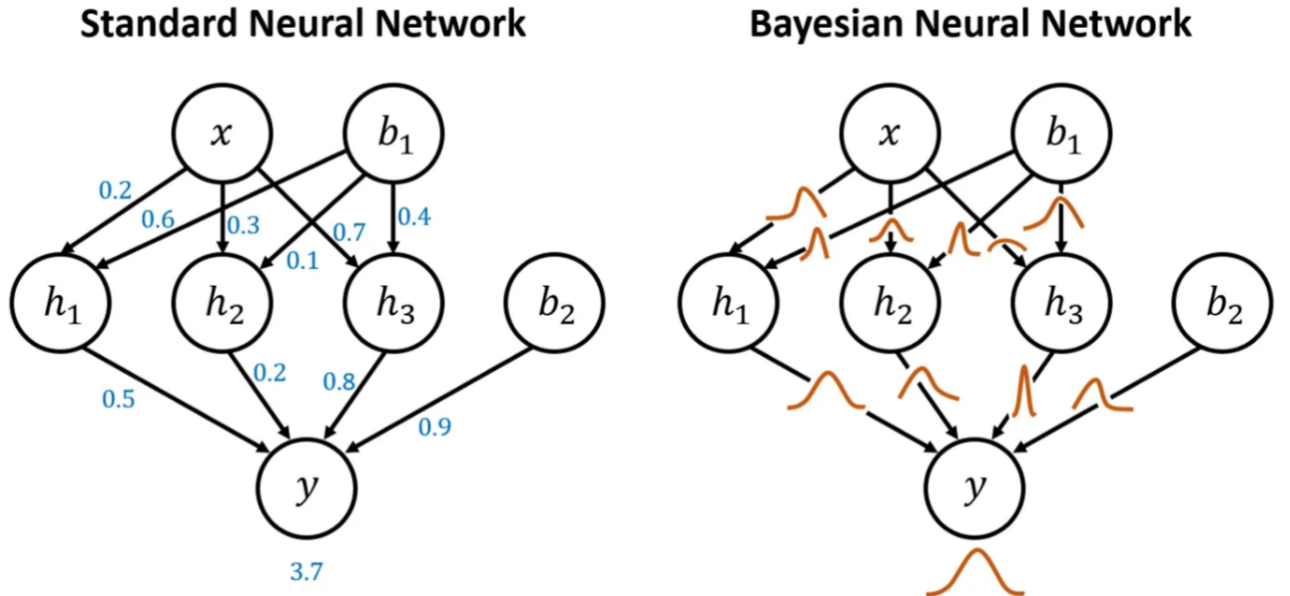


Figura 23 – Diferenças entre uma rede neural convencional e uma rede neural bayesiana (Gabriel Costa, 2022).

onde

$$\langle \psi^2 \rangle = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \psi^2(x_i, \theta_j). \quad (3.11)$$

A distribuição preditiva $\langle \psi \rangle$ é a predição da rede para x_i , sendo o resultado final da inferência bayesiana. Para a distribuição a priori do modelo, neste trabalho utilizamos uma distribuição gaussiana com média zero e desvio padrão σ_i , que é comumente adotada pela literatura. Como não sabemos previamente quais são os valores que σ_i pode assumir, o deixamos como parâmetro livre. Para a precisão do ruído adotou-se uma distribuição gama com dois parâmetros, que modela os desvios σ_i com o objetivo de melhorar as previsões.

3.3 O problema das massas nucleares

O caminho do processo- r é muito sensível às massas nucleares, uma vez que estas são os ingredientes principais para o cálculo da energia de separação de nêutrons e da energia liberada no decaimento- β . É a energia de separação de nêutrons que indicará a localização dos picos das abundâncias, mostrando as espécies químicas mais abundantes em determinadas condições astrofísicas. Já o decaimento- β é responsável por direcionar a síntese dos elementos químicos ao longo das cadeias isotópicas, principalmente nos pontos de espera.

Nos últimos anos, tivemos grandes avanços no refinamento das medidas de massas nucleares, inclusive com medições inéditas (SUN et al., 2015). Até o presente momento, temos aproximadamente 3000 medições de massas nucleares disponíveis na literatura (Wang et al., 2017). Ao longo do caminho do processo- r as regiões do ponto de espera, $N = 50$, $N = 82$ e $N = 126$ são cruciais. Apesar de novas medidas serem feitas nas duas primeiras regiões, a região próxima a $N = 126$ permanece com medições escassas (NIU; LIANG, 2022).

Além da escassez de dados experimentais, a modelagem do processo- r enfrenta um outro dilema relacionado às massas nucleares, a baixa acurácia dos modelos teóricos de massa. Neste ponto, ambos os problemas estão relacionados, uma vez que, com mais dados experimentais disponíveis, seria possível calibrar melhor os modelos. Mesmo em regiões da carta de núclídeos onde há dados experimentais de massa disponíveis, a acurácia dos modelos teóricos varia em torno de 500 keV (ver Figura 24). Isso está longe do que é requerido para a modelagem do processo- r . Em um estudo realizado por Mumpower, constatou-se que a acurácia ideal para quantificar as incertezas relacionadas ao processo- r é algo próximo de 100 keV (MUMPOWER et al., 2016). Com respeito às extrapolações, o cenário não é diferente. Em alguns casos, as previsões realizadas por diferentes modelos para núcleos próximos da linha de gotejamento de nêutrons chegam a divergir na casa dos MeV's.

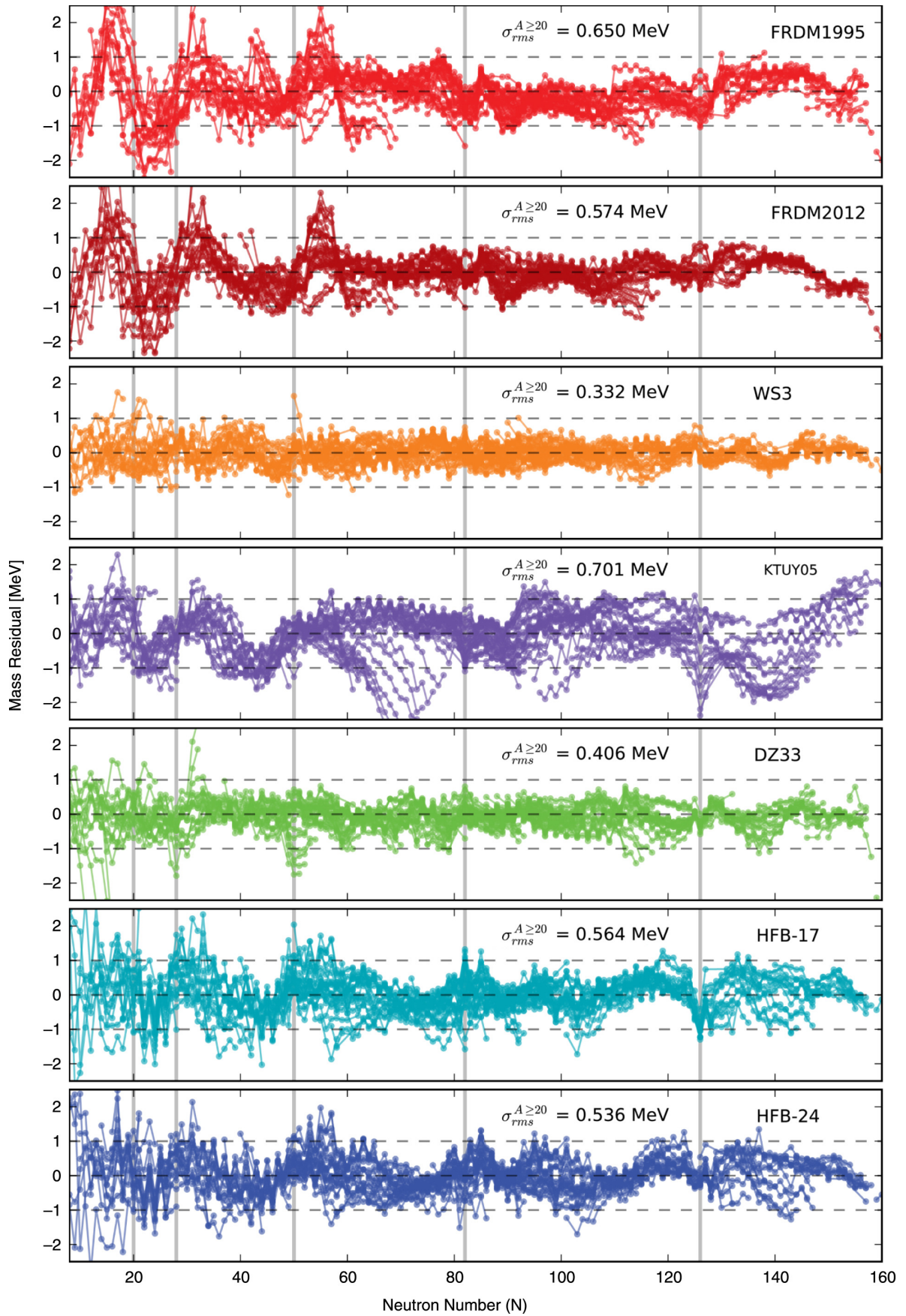


Figura 24 – Resíduos ($M_{th} - M_{exp}$) das predições referente a sete modelos de massas comumente utilizados na literatura, os dados experimentais são referentes ao AME2012 (MUMPOWER et al., 2016).

Durante as últimas décadas, surgiram indícios da existência de *picos raros* nas abundâncias do processo- r (SURMAN et al., 1997). Esses picos estariam localizados na região $N \approx 104$. Porém, o caminho do processo- r produzido pelos modelos teóricos de massa atuais não consegue reproduzir esses picos. Essa dificuldade pode estar relacionada com as incertezas associadas a cada modelo. O mesmo se aplica à produção de fragmentos de fissão na região $A \approx 278$ (GORIELY et al., 2013).

Ao longo dos anos, muitos modelos foram propostos com o objetivo de obter massas nucleares e localizar com precisão as linhas de gotejamento de prótons e nêutrons. Dentre esses, podemos mencionar os modelos macroscópico-microscópico (mic-mac), como o Weizsäcker-Skyrme (WS4) (WANG et al., 2014) e o Finite-Range Droplet Model (FRDM12) (MÖLLER et al., 2016), que são os mais comumente utilizados na modelagem do processo- r . Apesar da sua extensa aplicabilidade e relativo sucesso nas previsões das massas nucleares, o root mean square (rms) de cada modelo ainda não está no nível desejado (YÜKSEL; SOYDANER; BAHTIYAR, 2024). Os modelos WS4 e FRDM12 apresentam rms com relação aos dados experimentais de 0.298 MeV e 0.662 MeV, respectivamente. A Figura 24 mostra a acurácia de alguns modelos teóricos quando comparado com os dados experimentais da Atomic Mass Evaluation 2012 (AME2012).

O primeiro modelo teórico de massa foi proposto por Bethe-Weizsäcker (BW), nesse modelo assume-se que o núcleo é uma gota líquida carregada (BETHE-WEISZSÄCKER, 1935). O rms desse modelo é de 3 MeV, o que é muito elevado para os padrões dos modelos de massa. Esse valor se torna ainda maior quando se trata das regiões próximas aos números mágicos (NIU; LIANG, 2022). Posteriormente, foi-se aprimorando esse modelo, adicionando correções microscópicas na energia e o rms foi reduzido ao intervalo de 300 – 500 keV. As correções microscópicas na energia são geralmente extraídas dos níveis de partícula simples do campo médio, os quais são independentes da parte macroscópica.

Métodos mais sofisticados, como as teorias autoconsistentes de campo médio, surgiram com a proposta de equilibrar as inconsistências entre as partes macroscópicas e microscópicas dos modelos mic-mac. Esses modelos são baseados na aproximação Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) com densidade funcional de energia (GORIELY; CHAMEL; PEARSON, 2009). Trabalhos recentes demonstraram que sua acurácia é, geralmente, abaixo dos outros modelos. Apesar disso, vale ressaltar que os modelos baseados em densidade funcional de energia performam bem em regiões próximas ao vale de estabilidade- β , porém revelam discrepâncias significantes quando se trata de núcleos ricos em nêutrons, o que impacta diretamente na localização da linha de gotejamento de nêutrons. A Tabela 3 mostra algumas características dos modelos que serão abordados ao longo deste trabalho.

Tabela 3 – Breve descrição de cada modelo que será abordado neste trabalho.

Modelo	Nome do modelo	Comentários
Proposto por Moller <i>et al.</i>	FRDM (MÖLLER <i>et al.</i> , 2016)	Modelo mic-mac baseado no modelo de gota líquida com correções de camada.
Modelo Weizsäcker-Skyrme proposto por Wang <i>et al.</i>	WS3.4 (WANG; LIU; WU, 2010)	Modelo mic-mac baseado na densidade funcional de energia Skyrme com correções de Strutinsky.
Versão aprimorada do modelo Weizsäcker-Skyrme proposto por Liu <i>et al.</i>	WS3.6 (LIU <i>et al.</i> , 2011)	Inclusão do efeito de núcleo espelho, efeito de Wigner e emparelhamento.
Versão mais recente do modelo Weizsäcker-Skyrme proposto por Wang <i>et al.</i>	WS4 (WANG <i>et al.</i> , 2014)	Inclusão do efeito de difusibilidade para núcleos instáveis.
Modelo de massa Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear proposto por Goriely <i>et al.</i>	HFB27 (GORIELY; CHAMEL; PEARSON, 2013)	Modelo de massa microscópico baseado na aproximação Hartree-Fock-Bogoliubov não-relativística, com densidade funcional Skyrme.
Fórmula de massa nuclear com bases esféricas proposta por Koura <i>et al.</i>	KTUY05 (KOURA <i>et al.</i> , 2005)	Modelo de massa fenomenológico que trata o núcleo deformado como uma superposição de núcleos esféricos.
Duflo-Zucker versão com 31 parâmetros	DZ31 (DUFLO; ZUCKER, 1995)	Modelo de massa fenomenológico contém 28 termos de monopolo, coulombiano, energy, simmetria, superfície e dois termos de emparelhamento.
Duflo-Zucker versão com 10 parâmetros	DZ10 (DUFLO; ZUCKER, 1995)	Versão simplificada do DZ31, com seis termos de monopolo e quatro termos macroscópicos
Duflo-Zucker versão com 28 parâmetros	DZ28 (WANG <i>et al.</i> , 2017)	Ajustado aos dados experimentais de energia de ligação extraídos do AME2016.

Com o objetivo de melhorar as previsões e a acurácia dos modelos teóricos de massa, as técnicas de ML vêm sendo empregadas com relativo sucesso. Em particular, as redes neurais Bayesianas têm se demonstrado uma ferramenta importante na quantificação das incertezas relacionadas ao processo- r . Neste trabalho, iremos utilizar as BNN's para aprimorar os resultados dos modelos teóricos de massa através do treinamento sobre os resíduos,

$$M^{BNN}(\mathbf{x}) = M^{th}(Z, N) + \delta^{BNN}(\mathbf{x}), \quad (3.12)$$

onde M^{BNN} é a massa teórica aprimorada com o BNN, $M^{th}(Z, N)$ é a massa obtida através da fórmula de massa (sem aprimoramento) e $\delta^{BNN}(\mathbf{x})$ é a função de correção residual obtida com a metodologia Bayesiana. Neste trabalho, usaremos dois inputs:

- BNN-5 $\rightarrow \mathbf{x} = (Z, N, d_p, d_n, I)$,
- BNN-6 $\rightarrow \mathbf{x} = (Z, N, d_p, d_n, I, A^{2/3})$,

onde Z é o número de prótons, N o número de nêutrons, $d_p = \|Z - Z_k\|$ é a diferença do número de prótons ao número mágico de prótons mais próximo, $d_n = \|N - N_k\|$ é a mesma definição de d_p para o caso dos nêutrons, I é o isospin e $A^{2/3}$ é o termo de superfície. Adicionaremos esses inputs a uma BNN com quatro camadas ocultas e $H = 28$ neurônios.

Alguns trabalhos recentes aplicaram uma metodologia semelhante para aprimorar os resíduos, dentre estes podemos destacar: i) Baños (RODRÍGUEZ et al., 2019) utilizou $\mathbf{x} = (Z, N, d_p, d_n)$ para aprimorar o valor Q_α dos Super Heavy Elements (SHE). ii) Utama (UTAMA; PIEKAREWICZ, 2017) utilizou $\mathbf{x} = (Z, N)$ para o aprimoramento das massas nucleares, obtendo um $rms = 0.286$ MeV com DZ10+BNN, um aprimoramento de 40%. Niu (NIU; LIANG, 2018) acrescentou ao input termos de emparelhamento (δ) e efeito de camadas (P), utilizando $\mathbf{x} = (Z, A, \delta, P)$. O melhor rms obtido é para o modelo WS4+BNN, 0.176 MeV, representando uma melhoria de 38.3%.

4 Resultados e análise

4.1 Aprimoramento das massas nucleares com BNN

Utilizando os dados experimentais de massas de alta precisão do AME2020, realizamos o treinamento da rede neural Bayesiana. Para isso, adotamos dois critérios:

- Excluimos do treinamento os núcleos que possuem massas experimentais com incerteza superior a 100 keV;
- Escolhemos apenas núcleos participantes do processo- r , ou seja núcleos com $Z \geq 21$.

Após este pré-processamento, utilizamos a biblioteca do *scikit-learn* para realizar a divisão entre os dados de treino e validação. Procedemos com a divisão padrão e bem consolidada,

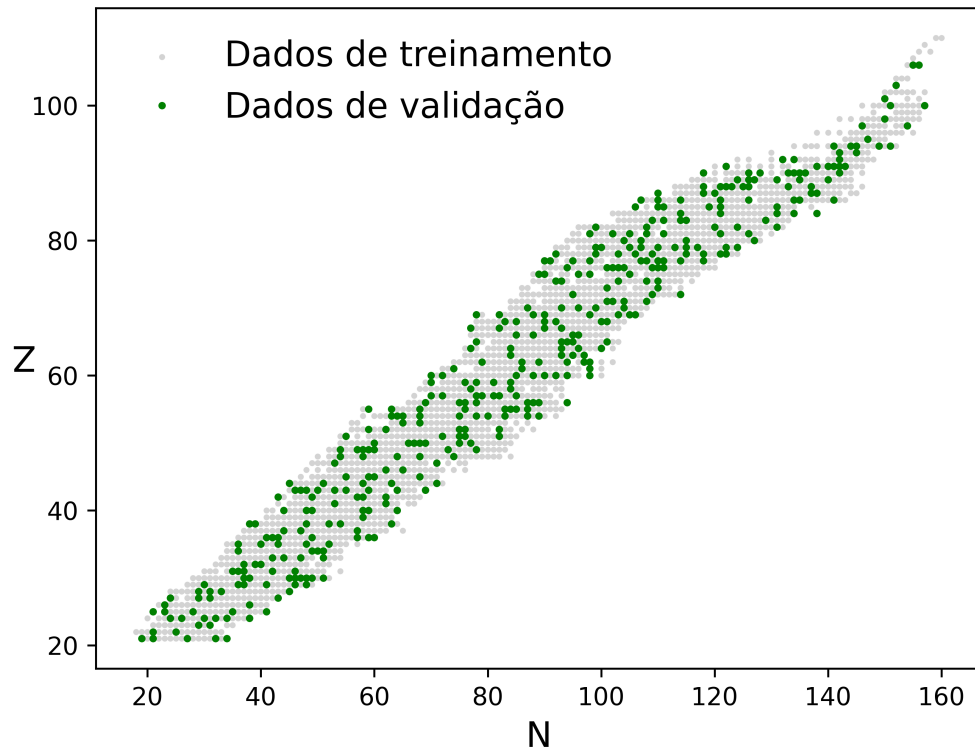


Figura 25 – Dados de treino (círculos cinza) e dados de validação (círculos verdes) utilizados no modelo BNN. Em ambos os casos utilizamos dados experimentais retirados do AME2020, com a exceção dos núcleos com incertezas experimentais superiores à 100 keV e $Z \leq 21$.

do ML, 80% dos dados foram destinados ao treinamento e 20% para a validação. Os núcleos que compõem cada um destes conjuntos foram escolhidos aleatoriamente. A Figura 25 mostra como ficou a distribuição dos dados após a divisão. Vale ressaltar que, apesar do método BNN evitar o sobreajuste através da introdução dos parâmetros de distribuição a priori, preferiu-se ainda assim, retirar 20% dos dados experimentais do treinamento, a fim de avaliar a capacidade preditiva do modelo.

Com os dados já pré-processados, realizou-se o treinamento da rede para cada modelo presente na Tabela 3, com 28 neurônios, 2000 samples e 4 cadeias de Markov. Calculou-se o *rms*, através da Eq. (4.1), de cada modelo com relação aos dados experimentais do AME2020. Estes resultados estão expostos na Tabela 4. A primeira coluna representa a identificação de cada modelo, σ_{pre} representa o *rms* que o próprio modelo apresenta antes do treinamento. $\sigma_{post}^{N=5}$ e $\sigma_{post}^{N=6}$ são o *rms* após o treinamento com BNN, para os inputs BNN-5 e BNN-6, respectivamente. $\Delta\sigma^{N=5}(\%)$ e $\Delta\sigma^{N=6}(\%)$ representam o aprimoramento percentual, com os inputs BNN-5 e BNN-6, de cada modelo após o treinamento com BNN.

$$\sigma_{rms} = \frac{1}{N_0} \sqrt{\sum_{j=1}^{N_0} [M_{th}(Z, N) - M_{exp}(Z, N)]^2} \quad (4.1)$$

Os resultados para os dados de treino estão expostos na primeira metade da Tabela 4. É notório que o treinamento com o método BNN produz resultados muito satisfatórios. Para o modelo KTUY05, por exemplo, o aprimoramento foi de aproximadamente 80%. Este modelo, inclusive, permaneceu com o *rms* invariante nos dados de treino, quando alteraram-se os inputs. Vale notar também os aprimoramentos dos modelos DZ10 e FRDM, que foram de 79.5% e 75.3%, respectivamente.

A segunda metade da Tabela 4 mostra os resultados para os dados de validação. Estes dados ficaram “escondidos” durante o treinamento, ou seja, a rede neural não sabia da existência deles. Com estes dados, avaliou-se a capacidade preditiva da BNN, obtendo-se resultados muito satisfatórios. Novamente, o melhor aprimoramento foi obtido para o modelo KTUY05, cerca de 70% em ambos os inputs. É neste conjunto que poderemos avaliar qual dos inputs possui o melhor aproveitamento. É notório que o input BNN-6 possui o maior impacto no treinamento do que o BNN-5, uma vez que sua capacidade preditiva é melhor (comparar colunas $\Delta\sigma^{N=5}(\%)$ e $\Delta\sigma^{N=6}(\%)$).

Como o objetivo deste trabalho é produzir um input nuclear confiável para o estudo do processo-*r*, não trabalharemos com os modelos que possuem os melhores aprimoramentos, mas sim, aqueles que possuem os menores *rms*. Ou seja, os modelos cujos resultados mais se

Tabela 4 – rms em MeV das massas nucleares com relação aos dados experimentais. σ_{pre} é o rms dos dados de treino, $\sigma_{post}^{N=5}$ e $\sigma_{post}^{N=6}$ são o rms com o BNN para os inputs BNN-5 e BNN-6, respectivamente. $\Delta\sigma$ representa o aprimoramento percentual realizado pelo o BNN.

Model	σ_{pre}	$\sigma_{post}^{N=5}$	$\sigma_{post}^{N=6}$	$\Delta\sigma^{N=5}$ (%)	$\Delta\sigma^{N=6}$ (%)
Treinamento					
DZ10	0.550	0.113	0.130	79.5	76.4
DZ28	0.354	0.127	0.131	64.2	63.0
DZ31	0.369	0.121	0.125	67.1	66.1
FRDM	0.498	0.123	0.119	75.3	76.0
HFB	0.455	0.183	0.175	59.7	61.6
KTUY05	0.691	0.136	0.136	80.3	80.3
WS3.4	0.487	0.145	0.137	70.3	71.9
WS3.6	0.300	0.122	0.124	59.2	58.5
WS4	0.268	0.121	0.113	54.9	57.7
Validação					
DZ10	0.457	0.213	0.182	53.5	60.2
DZ28	0.390	0.199	0.202	49.0	48.2
DZ31	0.358	0.191	0.178	46.7	50.3
FRDM	0.495	0.255	0.195	48.5	60.5
HFB	0.479	0.264	0.261	44.9	45.6
KTUY05	0.655	0.184	0.190	71.9	71.0
WS3.4	0.511	0.253	0.225	50.4	56.0
WS3.6	0.306	0.197	0.195	35.8	36.4
WS4	0.263	0.202	0.176	23.2	33.2

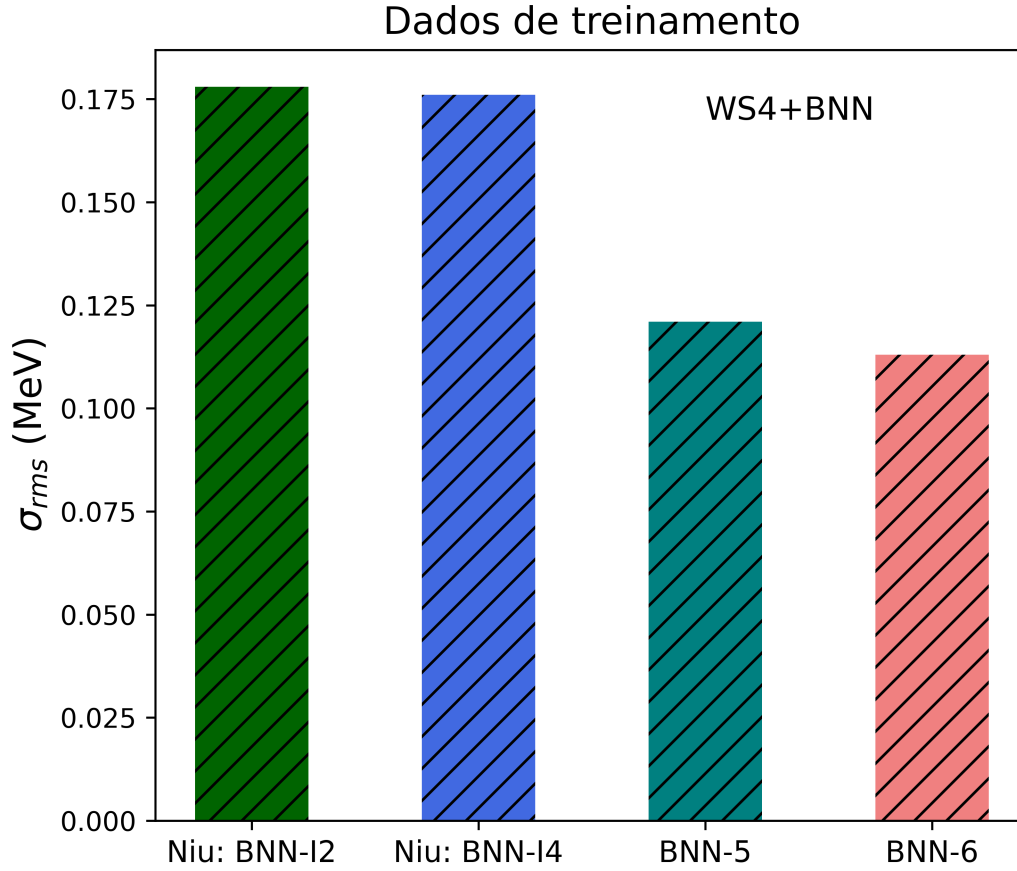


Figura 26 – Comparação entre os resultados obtidos por Niu *et al.* (Niu: BNN-I2 e Niu: BNN-I4) (NIU; LIANG, 2018) e os resultados obtidos neste trabalho (BNN-5 e BNN-6) para o conjunto de dados de treino.

aproximam dos dados experimentais. Como foi dito na Seção 3.3, é desejável que os modelos de massa apresentem *rms* próximo de 100 keV, para que os picos de abundâncias isotópicas sejam reproduzidos com precisão. Os modelos que apresentaram os menores *rms* no treinamento foram o DZ10 com o input BNN-5 e o WS4 com o input BNN-6, ambos 0.113 MeV. Dentre estes dois modelos, o WS4 apresentou melhor desempenho no conjunto de validação, ou seja, apresentou melhor capacidade preditiva.

Em trabalho recente, Niu *et al.* empregou o método BNN para aprimorar as massas nucleares de vários modelos, dentre eles o WS4, sendo este o seu melhor resultado (NIU; LIANG, 2018). No treinamento realizado por Niu *et al.*, foram utilizados dois diferentes inputs para a rede: BNN-I2 = $\{Z, A\}$ e BNN-I4 = $\{Z, A, \delta, P\}$ (ver seção 3.3). As Figuras 26 e 27 mostram uma comparação entre os resultados obtidos por Niu *et al.* e os resultados obtidos neste trabalho (BNN-5 e BNN-6). No conjunto de dados de treino (Figura 26), o nosso modelo performou melhor para ambos os inputs, com uma diferença considerável para o resultado

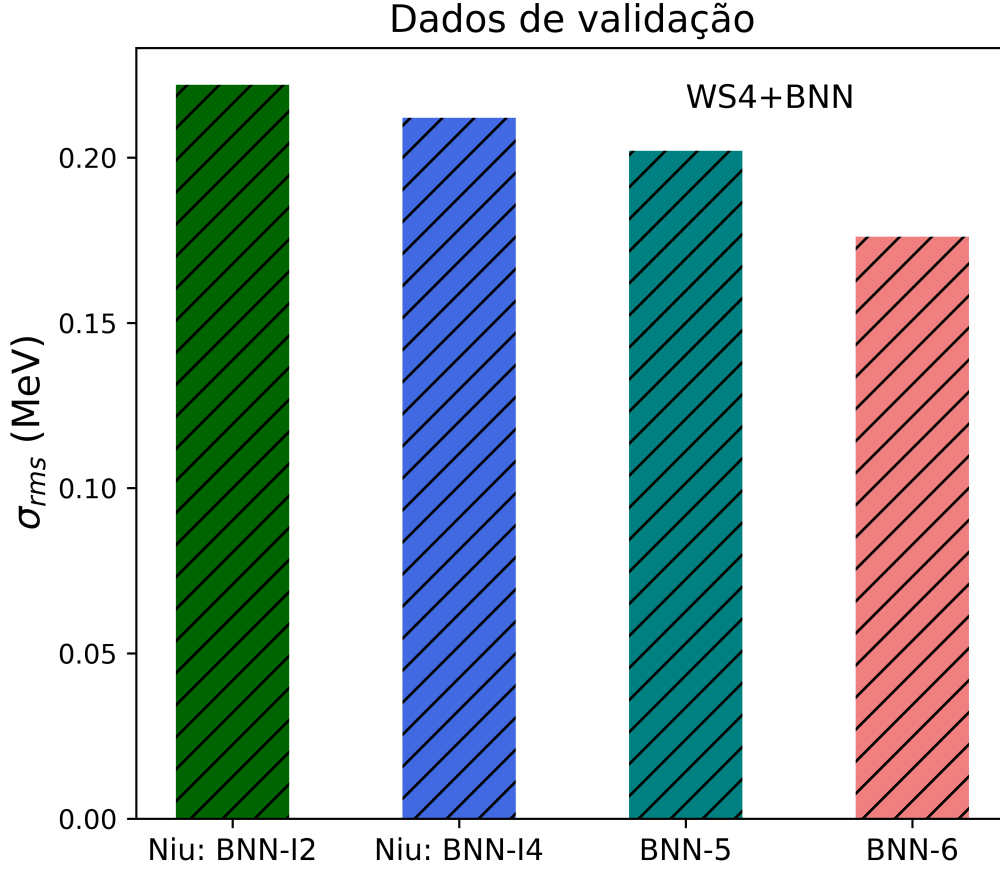


Figura 27 – Comparação entre os resultados obtidos por Niu *et al.* (Niu: BNN-I2 e Niu: BNN-I4) (NIU; LIANG, 2018) e os resultados obtidos neste trabalho (BNN-5 e BNN-6) para o conjunto de dados de validação.

obtido por Niu *et al.*, mostrando que o isospin e o termo de superfície são fundamentais no treinamento da rede Bayesiana. No conjunto de dados de validação (Figura 27), os nossos resultados ainda são melhores, porém apenas com uma pequena diferença separando os resultados dos modelos. Considerando apenas o treinamento com o método BNN puro, este resultado de 0.113 MeV obtido com o input BNN-6, constitui-se como o menor *rms* da literatura até o presente momento.

Com base nos resultados obtidos até então, e considerando todos os modelos da Tabela 4, pode-se dizer que o treinamento com o input BNN-6 apresenta os melhores resultados para o aprimoramento das massas nucleares. Considerando o mesmo conjunto de dados de treinamento da Figura 25, calculou-se a diferença entre a massa teórica obtida pelo modelo WS4 (sem BNN) e a massa experimental, para cada núcleo. Estes resultados estão dispostos no painel superior da Figura 28. Este modelo por si só, já apresenta um excelente desempenho, com *rms* de 0.267 MeV e o desvio máximo de 0.75 MeV. No painel inferior, estão os resultados

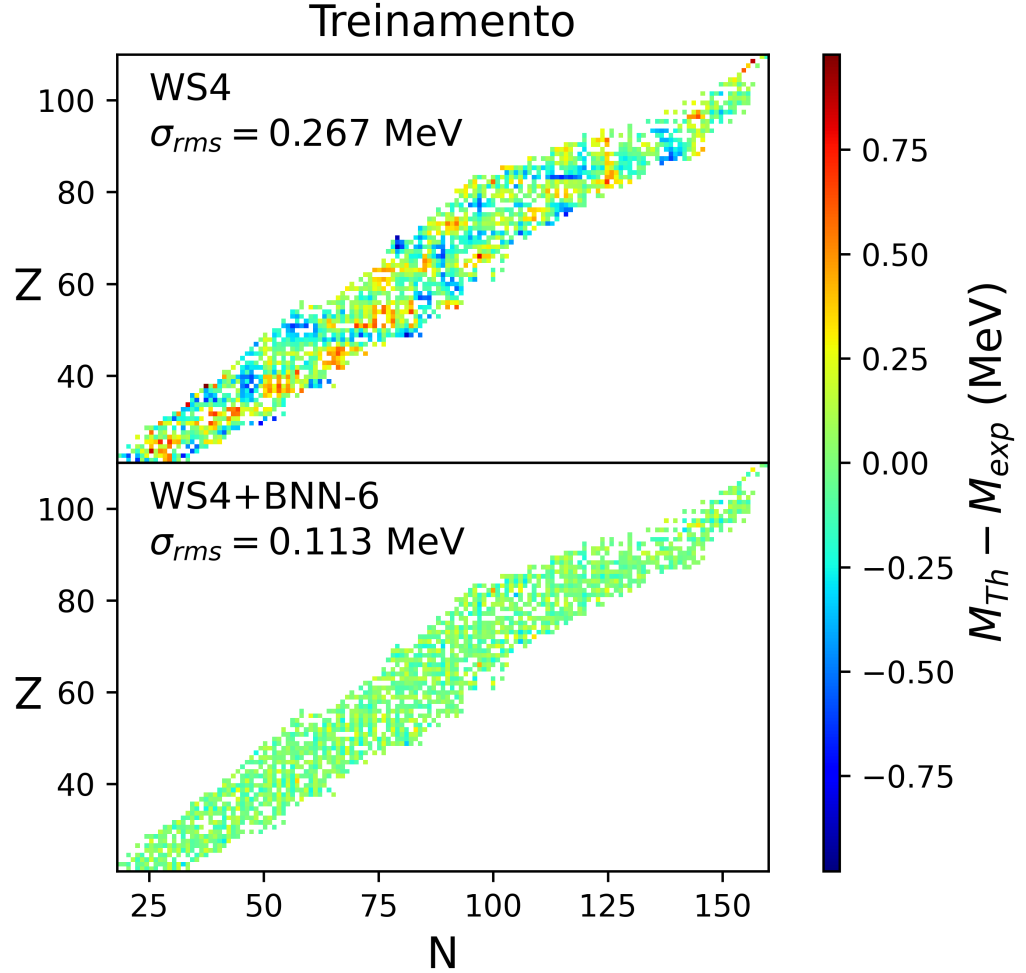


Figura 28 – Painel superior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e as massas experimentais. Painel inferior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o WS4+BNN-6 (após o treinamento) e as massas experimentais. Resultados obtidos para o conjunto de dados de treinamento.

do modelo WS4 após o aprimoramento com o BNN, o WS4+BNN-6. É possível notar que o método BNN aprimora as massas nucleares em todas as regiões de massa do conjunto de treinamento, reduzindo o rms de 0.267 MeV para 0.113 MeV, uma melhoria de 57.7%.

A Figura 29 mostra os resultados do aprimoramento para o conjunto de dados de validação. Novamente, vale destacar que estes dados não participaram do treinamento, justamente para testar a capacidade preditiva do modelo BNN. No painel superior são apresentados os resultados obtidos com o modelo WS4, antes do aprimoramento com BNN, o rms é de 0.263 MeV. De forma geral, esse é um bom resultado para o modelo de massa. Porém, existem regiões de massa em que as divergências se aproximam de 0.6 MeV. No painel inferior, estão os resultados obtidos após o aprimoramento com BNN, o WS4+BNN-6. O rms foi reduzido

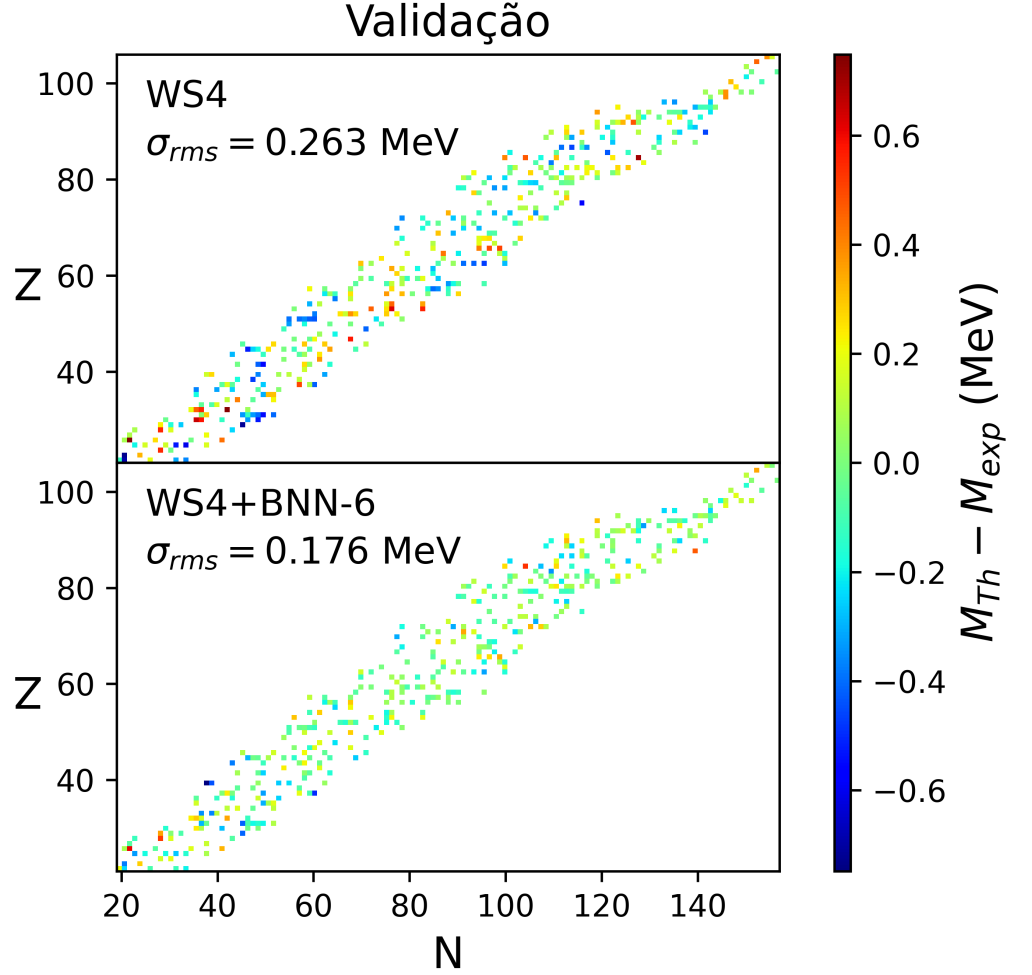


Figura 29 – Painel superior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e as massas experimentais. Painel inferior: diferença entre as massas nucleares obtidas com o WS4+BNN-6 (após o treinamento) e as massas experimentais. Resultados obtidos para o conjunto de dados de validação.

de 0.263 MeV para 0.176 MeV, o que representa uma melhoria de 33.2%. Validando assim, a capacidade preditiva do modelo WS4+BNN-6.

Como foi discutido no capítulo 3, uma das grandes vantagens da BNN frente aos outros métodos de ML, está na sua capacidade de quantificar as incertezas. A Figura 30 mostra a incerteza absoluta para cada massa nuclear calculada com o modelo WS4+BNN-6. Com isso, podemos definir uma região de “confiança” ou um alcance máximo para as predições com BNN. A região interior à linha pontilhada representa a região onde foi realizado o treinamento, ou seja, representa os dados de treino. Como podemos ver, essa região é a que apresenta a menor incerteza, uma vez que o BNN possui toda a informação do comportamento dos dados nessa região. Como o foco deste trabalho são os núcleos que participam do processo- r , ou

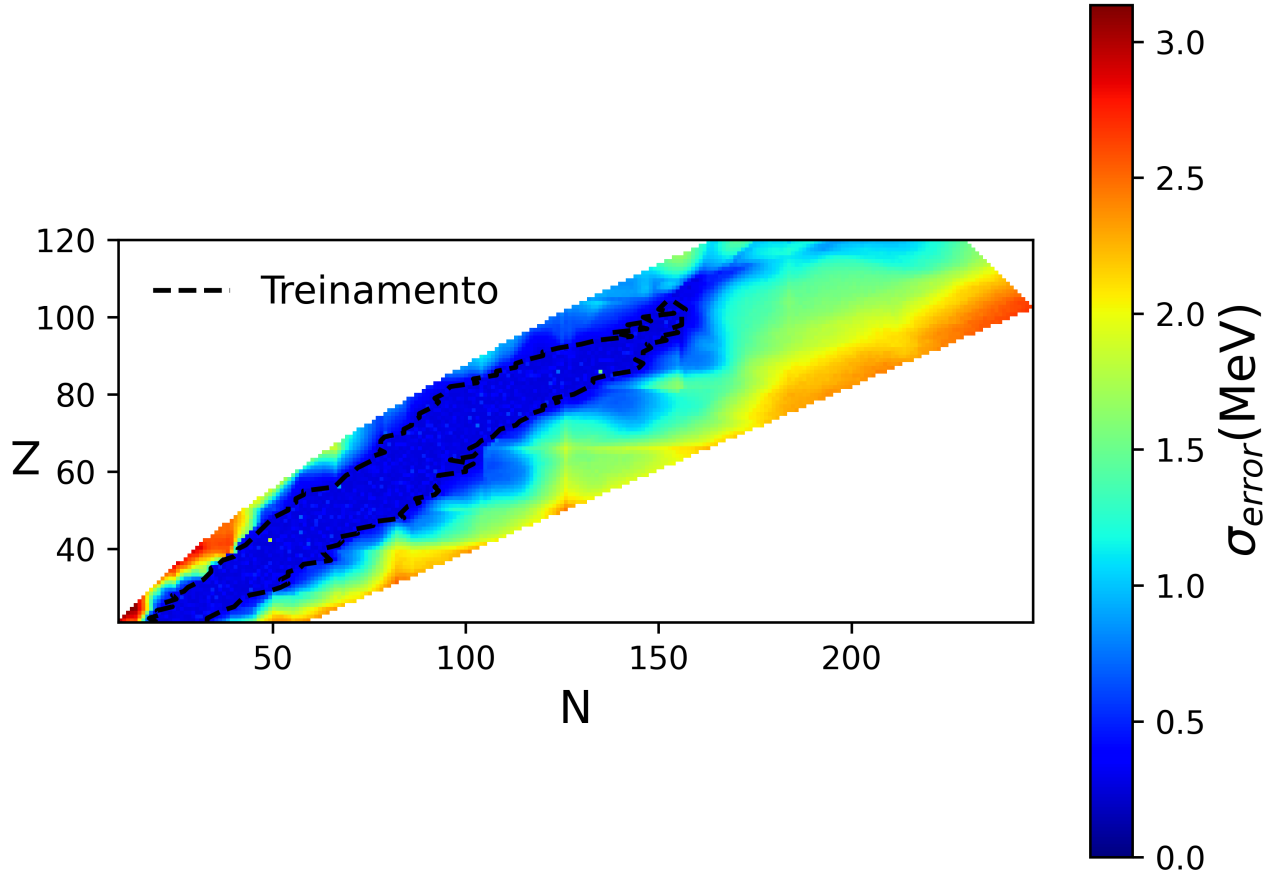


Figura 30 – Avaliação da zona de “confiança” da BNN através da incerteza oriunda do próprio método. A linha pontilhada representa o contorno da região de treinamento. σ_{error} representa a incerteza absoluta no cálculo da massa nuclear.

seja $Z \geq 21$, era de se esperar que a extrapolação para $Z \leq 21$ apresentasse incertezas um pouco mais elevadas, como é observado para núcleos com $Z \leq 21$ e $N \leq 30$. Já a extrapolação para núcleos ricos em nêutrons apresenta menores incertezas principalmente para núcleos nas proximidades da região de treinamento. É possível observar na Figura 30, regiões fora da zona de treinamento com incerteza menor que 1 MeV. Essa precisão é crucial para uma modelagem confiável do processo- r . Porém, à medida que os núcleos se afastam ainda mais da zona de treinamento, a incerteza aumenta e a capacidade preditiva do WS4+BNN-6 diminui, chegando a 3 MeV nas proximidades da linha de gotejamento de nêutrons. Podemos concluir a partir desse resultado que o modelo WS4+BNN-6 apresenta excelente capacidade preditiva nas proximidades da região de treinamento, porém, é necessário mais dados experimentais para

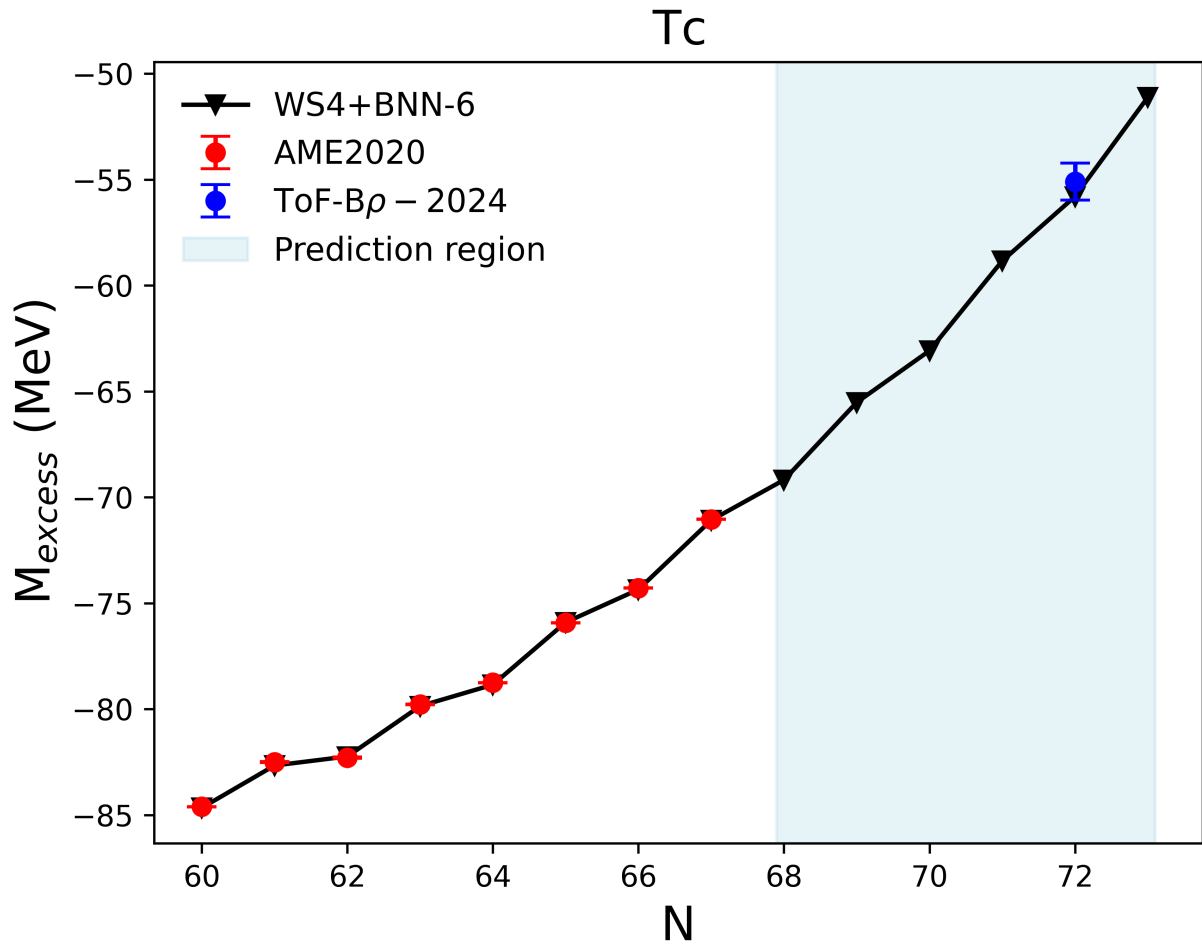


Figura 31 – Comparação do excesso de massa obtido com o modelo WS4+BNN-6, para isótopos de Tc, com dados experimentais do AME2020 e o resultado experimental mais recente do experimento ToF-B ρ (WANG *et al.*, 2024). A região em azul representa os dados que não participaram do treinamento com BNN.

poder ampliar esse poder preditivo para regiões ainda mais distantes do vale de estabilidade- β .

Em um trabalho recente, Wang *et al.* apresentou novas medições de massa e energia de separação de dois nêutrons, para os isótopos de Y e Tc (WANG *et al.*, 2024). Essas medições foram realizadas no National Superconducting Cyclotron Laboratory (NSCL), utilizando a técnica time-of-flight-magnetic-rigidity (ToF-B ρ). Essa técnica tem apresentado sucesso nas medições de massa de isótopos muito instáveis (MEISEL; GEORGE, 2013), sendo empregada em experimentos como Facility for Rare Isotope Beams (FRIB) (MATOŠ *et al.*, 2012) e SHARAQ spectrometer no experimento RIKEN (MICHIMASA *et al.*, 2018). O foco desses experimentos está na região dos núcleos ricos em nêutrons com $Z \leq 28$.

A Figura 31, mostra uma comparação dos resultados obtidos para o excesso de massa da cadeia

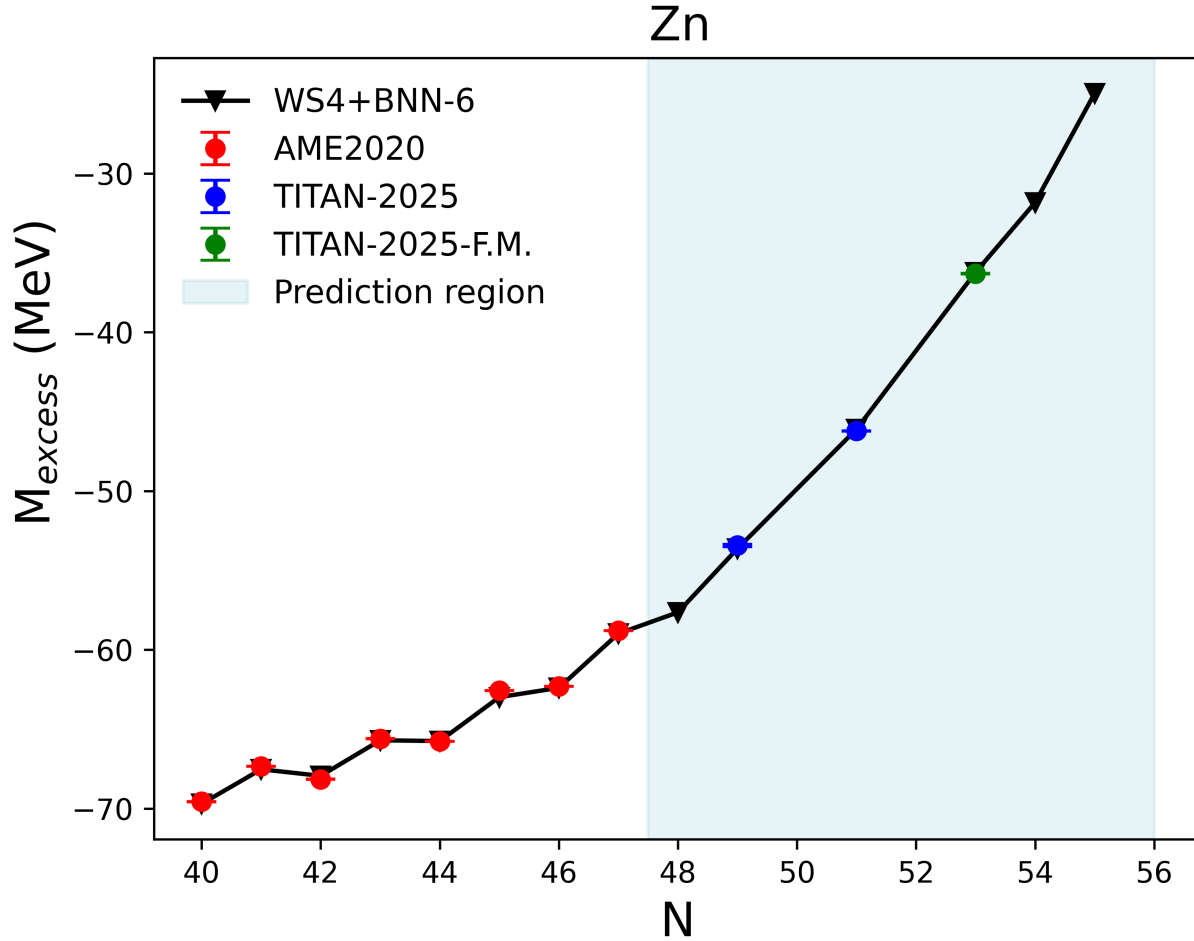


Figura 32 – Comparação do excesso de massa obtido com o modelo WS4+BNN-6, para isótopos de Zn, com dados experimentais do AME2020 e o resultado experimental mais recente do experimento TITAN (JACOBS et al., 2025). A região em azul representa os dados que não participaram do treinamento com BNN.

isotópica do núcleo Tc com o modelo WS4+BNN-6 (em preto), com os dados experimentais provenientes do AME2020 (em vermelho) e a recente medição do ToF-B ρ -2024 (em azul) para o isótopo ^{115}Tc . A região de predição do modelo WS4+BNN-6 está em azul claro, evidenciando os núcleos que não participaram do treinamento da rede neural. Com a recente medida do ToF-B ρ -2024, pudemos validar a capacidade preditiva do modelo WS4+BNN-6, uma vez que este reproduz a medição experimental com precisão. Na região de treinamento, em branco, todas as medições provenientes do AME2020 também são reproduzidas com sucesso pelo modelo.

Nos últimos anos, o experimento TITAN (TRIUMF's Ion Trap for Atomic and Nuclear science) tem obtido grande êxito em medir com alta precisão a massa de núcleos radioativos. Em trabalho recente, Jacobs et al. (JACOBS et al., 2025) divulgou resultados de medições

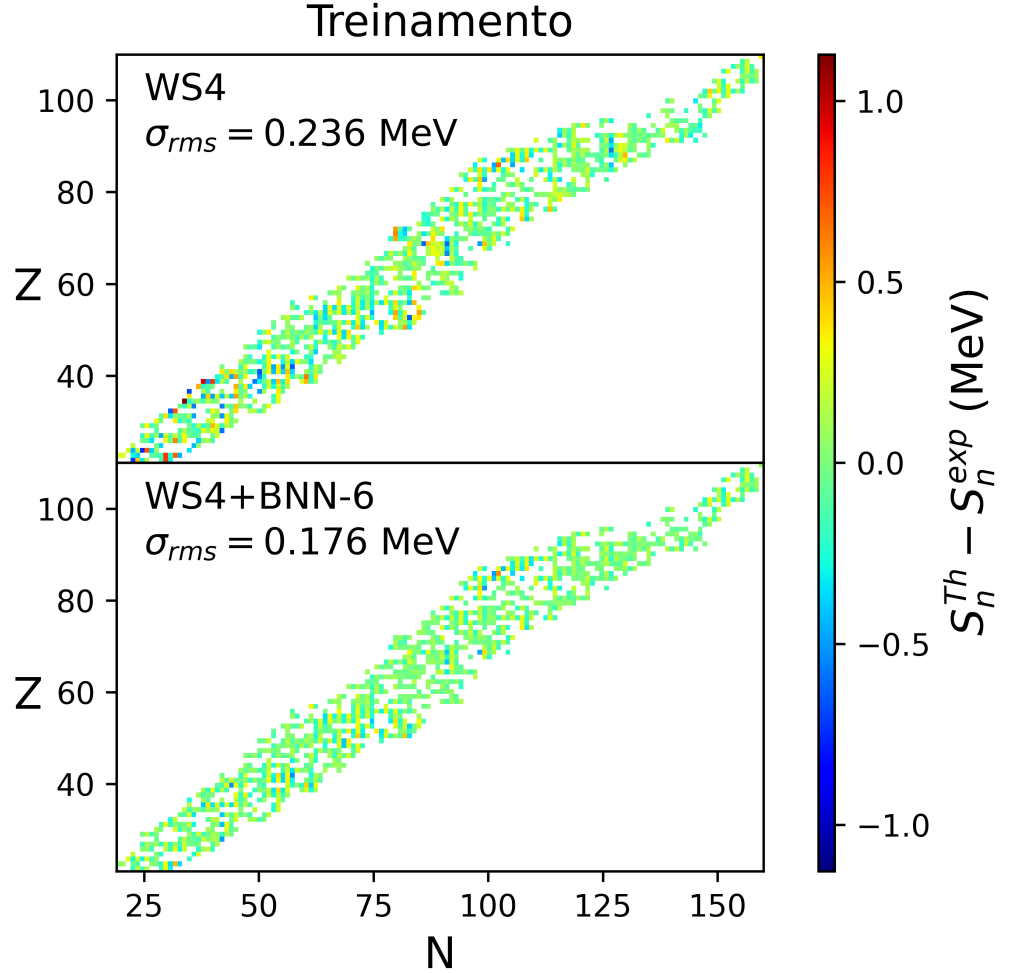


Figura 33 – Painel superior: diferença entre as energias de separação de nêutrons S_n obtidas com o modelo WS4 (antes do treinamento) e os dados experimentais. Painel inferior: diferença entre os resultados obtidos com o modelo WS4+BNN-6 (após o treinamento) e os dados experimentais. Estes resultados foram obtidos para o conjunto de dados de treino.

inéditas para o ^{83}Zn . Para o excesso de massa, o resultado experimental conta com uma incerteza de 18 keV, evidenciando a elevada qualidade do experimento. Além do resultado inédito para ^{83}Zn , foram publicadas atualizações de resultados anteriores para os demais isótopos. A Figura 32 compara a predição do modelo WS4+BNN-6 com essa recente medida (TITAN-2025-F.M). A predição reproduz com sucesso o novo resultado experimental, assim como os dados experimentais que foram atualizados pelo experimento para os demais isótopos (TITAN-2025).

Uma vez que possuímos as massas aprimoradas com o BNN, podemos estudar a energia de separação de nêutrons S_n , que é fundamental para determinar o caminho do processo- r .

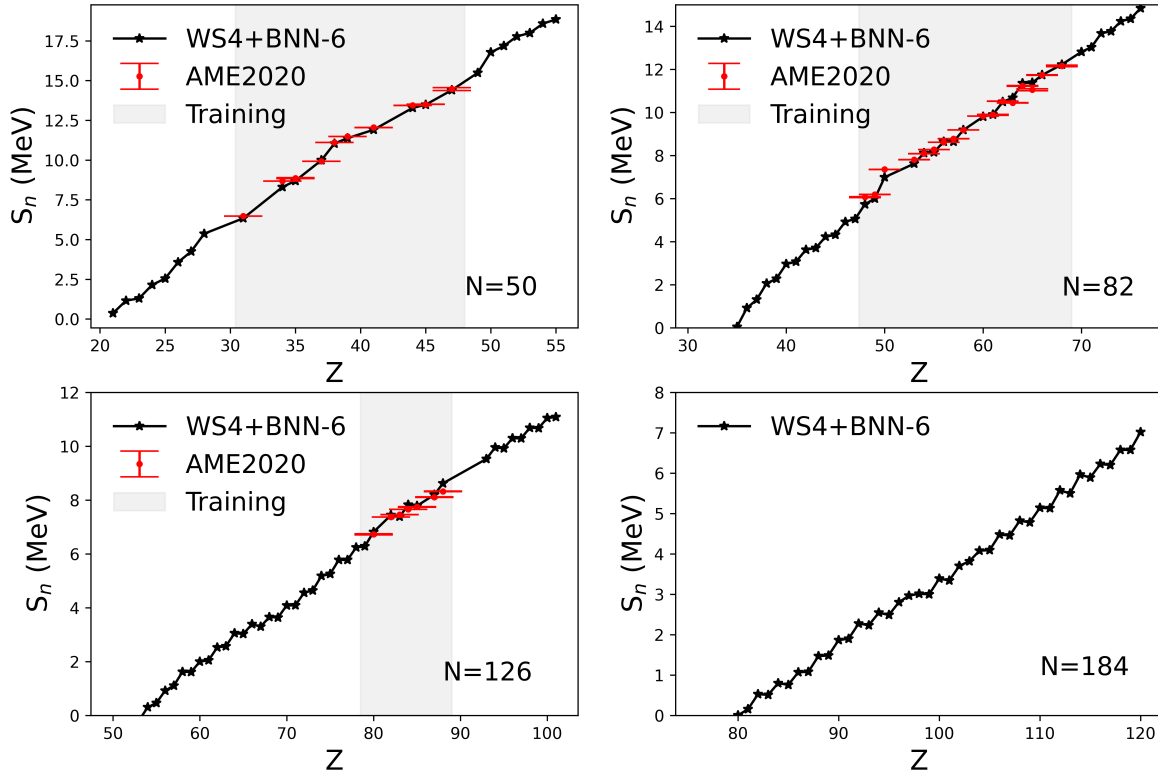


Figura 34 – Energia de separação de nêutrons para núcleos número de nêutrons mágicos $N = 50, 82, 126$ e 184 . Os resultados obtidos com o modelo WS4+BNN-6 (em preto) são comparados com os dados experimentais provenientes do AME2020. A região sombreada em cinza representa a região de treinamento do BNN.

Essa energia pode ser calculada por:

$$S_n = -M(A, Z) + M(A - 1, Z) + m_n, \quad (4.2)$$

onde m_n representa a massa do nêutron. Calculamos o valor de S_n utilizando os resultados teóricos da fórmula de massa WS4 e comparamos com os dados experimentais, como mostra o painel superior da Figura 33. O valor de $\sigma_{rms} = 0.236$ MeV obtido indica um resultado satisfatório para os padrões de simulações astrofísicas. No entanto, com a utilização das massas aprimoradas do modelo WS4+BNN-6 podemos obter um melhor resultado, como mostra o painel inferior da Figura 33. O valor obtido após o aprimoramento foi $\sigma_{rms} = 0.176$ MeV, que representa um aprimoramento de aproximadamente 74% em relação à fórmula de massa convencional.

S_n desempenha um papel crucial na localização dos picos das abundâncias isotópicas, sendo esses picos os pontos de espera para os decaimentos subsequentes. Deste modo, S_n

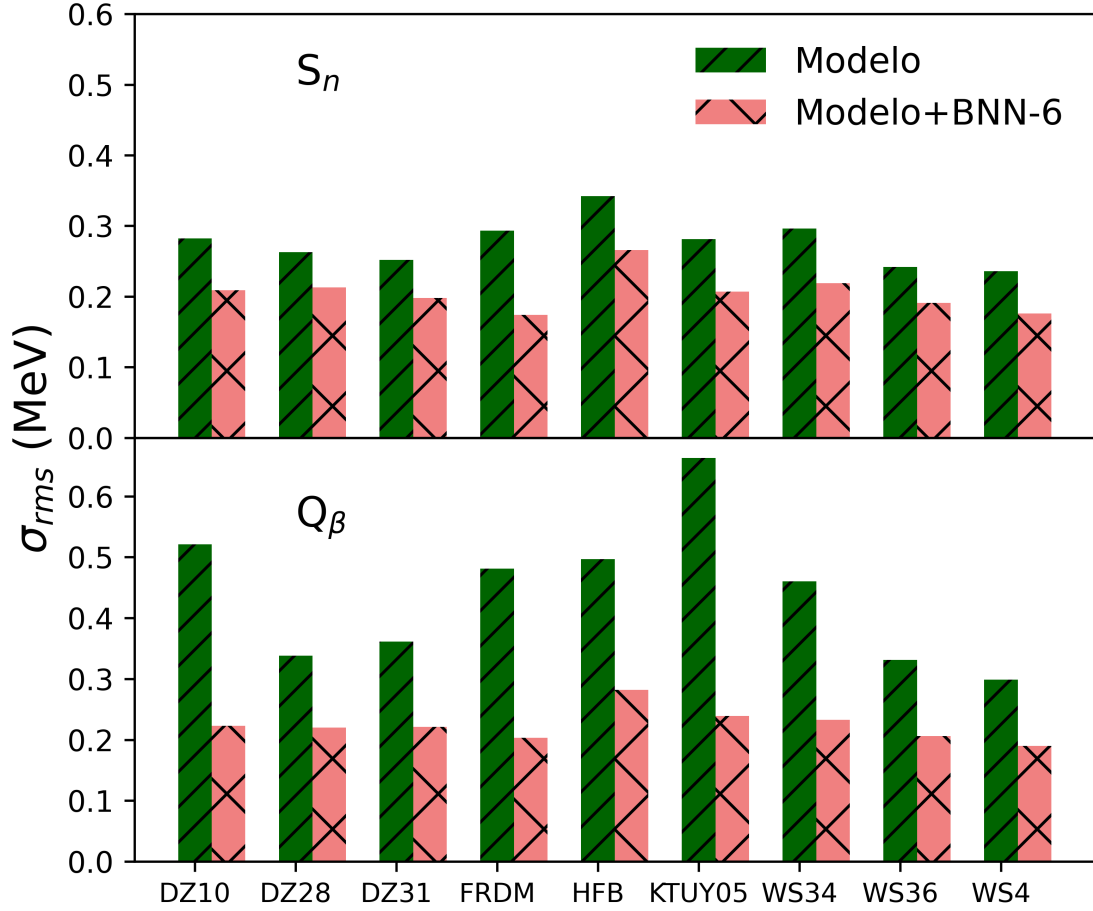


Figura 35 – O painel superior apresenta uma comparação entre o rms antes (verde) e depois (salmão) do treinamento com BNN para S_n . O painel inferior segue a mesma lógica para Q_β .

precisa ser determinado com precisão, pois uma localização ineficiente dos picos afetaria diretamente as abundâncias. A Figura 34 mostra uma comparação entre os resultados obtidos com o modelo WS4+BNN-6 para os núcleos com N mágico e os dados experimentais do AME2020. A região sombreada em cinza representa a região de treinamento. Como podemos observar, todos os dados experimentais que estão disponíveis são reproduzidos com precisão. É importante ressaltar que a escassez de dados experimentais para núcleos superpesados dificulta uma análise precisa do BNN nesta região.

O valor $Q_{\beta^\pm}$ da reação também pode ser determinado através das massas nucleares. Como mostra a Eq. abaixo:

$$\begin{aligned}
 Q_{\beta^-} &= [M(Z, A) - M(Z + 1, A)]c^2 \\
 Q_{\beta^+} &= [M(Z, A) - M(Z - 1, A) - 2m_e]c^2
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

Evidenciando que o decaimento- β^- só é possível se a massa atômica do núcleo pai for maior do que a do núcleo filho. No decaimento- β^+ há uma parcela adicional de duas massas eletrônicas. A Figura 35 mostra uma comparação entre os resultados obtidos com os modelos teóricos de massa e os resultados obtidos com BNN-6 para S_n (painel superior) e Q_β (painel inferior). Para cada modelo, o aprimoramento com o BNN-6 é evidenciado no valor do *rms*. Mostrando que o aprimoramento com ML realizado na massa nuclear se reflete de forma satisfatória no valor de S_n e Q_β .

4.2 Meia-vida do decaimento- β dentro do formalismo da GTBD

4.2.1 Meia-vida no ground-state

O formalismo da GTBD desenvolvido por Takahashi e Yamada representou um grande avanço no que se diz respeito ao estudo de processos fracos em larga escala. Devido à escalabilidade do modelo, simulações computacionais envolvendo uma grande quantidade de núcleos podem ser feitas de forma sistemática. Em 1971, esse formalismo foi estendido para incluir as primeiras transições proibidas (TAKAHASHI, 1971). Seguindo o formalismo desenvolvido por Takahashi, ampliamos o modelo desenvolvido por Samana et al. (SAMANA et al., 2008) para incluir as primeiras transições proibidas (ver seção 2.3).

Com essa extensão, novas possibilidades de estudo são acessadas. Dentre elas, o estudo de núcleos próximos da linha de gotejamento de nêutrons. Antes dessa extensão, o modelo era limitado a estudar somente núcleos com $\log(ft) \leq 6$, valor que pode estar associado a um decaimento via transição permitida.

Com o objetivo de avaliar a eficácia da extensão do modelo, selecionamos todos os núcleos com dados experimentais disponíveis que possuem exclusivamente 100% de probabilidade de sofrerem um decaimento- β . Esses dados foram retirados do NUBASE 2020 (KONDEV et al., 2021). Uma vez realizada a pré-seleção dos núcleos, dividiu-se em quatro grupos: *par-par*, *par-ímpar*, *ímpar-par* e *ímpar-ímpar*. Em cada grupo, calculou-se as meias-vidas da seguinte forma: a) somente com transições permitidas e fórmula de massa WS4 (Allow.) b) inclusão das transições proibidas (Allow.+f.f.) e massas aprimoradas pelo modelo WS4+BNN-6.

Para o cálculo de σ_N , definido pela Eq. (2.28), utilizamos o método de minimização do χ^2 . Esse método ajusta os resultados teóricos para a meia-vida com os dados experimentais disponíveis (ver Eq. (2.29)). Na versão original da GTBD proposta por Takahashi e Yamada, σ_N foi calculado com um método semelhante, através da minimização da quantidade $\sum_i \log(T_{1/2}^{cal}(i)/T_{1/2}^{exp}(i))$ onde $T_{1/2}^{cal}(i)$ e $T_{1/2}^{exp}(i)$ representam as meias-vidas teóricas e experimentais do i -ésimo núcleo, respectivamente.

Tabela 5 – Comparação dos resultados para o desvio padrão σ_N em unidades de MeV para o decaimento- β^- . Os resultados deste trabalhos estão representados por GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ e são comparados com os resultados obtidos por Samana *et al.* (GTBD1) (SAMANA *et al.*, 2008). N_0 representa a quantidade de núcleos utilizados em cada ajuste.

	GTBD1		GTBD $_{BNN}^{Allow.+f.f.}$	
N-Z (pai)	N_0	σ_N	N_0	σ_N
Ímpar-Ímpar	54	15.8	276	3.7
Ímpar-Par	43	15.8	236	3.3
Par-Ímpar	40	7.2	239	4.7
Par-Par	55	16.5	192	4.8

O conjunto amostral definido por Takahashi e Yamada partiu dos seguintes critérios: a) $Q > 10A^{-1/3}$ MeV, que assegura o tratamento grosso da densidade de níveis final e b) somente núcleos com A-ímpar e par-par foram selecionados, ou seja, núcleos ímpar-ímpar não foram considerados. Isso se deve à elevada flutuação na meia-vida entre os núcleos desta paridade. Adotando estes critérios, os valores de σ_N obtidos por eles foram 4.7 MeV para tipo Gaussiano e 12 MeV para o tipo Lorentziano. Vale ressaltar que após adotar esses critérios, a quantidade de núcleos qualificados para compor a amostra foi de apenas 32.

Neste trabalho adotamos a expressão proposta por Samana para o cálculo do χ^2 , como mostra a Eq. (2.29). Com ela, é possível incorporar as contribuições de dados experimentais com pequenas incertezas experimentais. As Tabelas 5 e 6 fazem uma comparação dos resultados obtidos neste trabalho (GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$) com os resultados obtidos por Samana (GTBD1). Em ambas as Tabelas N_0 representa a quantidade de núcleos presente em cada amostra. A partir destas comparações, vale ressaltar que o conjunto de núcleos utilizado por Samana é menor devido a dois critérios adotados: a) foram qualificados somente núcleos com $\log(ft) \leq 6$, restringindo as transições proibidas e b) somente núcleos com $A < 70$ foram considerados.

A Tabela 5 mostra a comparação para o decaimento- β^- . Em todas as quatro paridades, a quantidade de núcleos N_0 utilizados neste trabalho é no mínimo três vezes maior do que no modelo GTBD1. Pois, com as melhorias adicionadas neste trabalho, não há necessidade de se adotar os critérios de pré-seleção que foram adotados no modelo GTBD1. Como σ_N trata-se de um ajuste na largura da ressonância de Gamow-Teller, então um σ_N pequeno indica

Tabela 6 – Comparação dos resultados para o desvio padrão σ_N em unidades de MeV para o decaimento- β^+ . Os resultados deste trabalho estão representados por $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$ e são comparados com os resultados obtidos por Samana *et al.* (GTBD1) (SAMANA *et al.*, 2008). N_0 representa a quantidade de núcleos utilizados em cada ajuste.

	GTBD1		$\text{GTBD}_{BNN}^{\text{Allow.}+f.f.}$	
N-Z (pai)	N_0	σ_N	N_0	σ_N
Ímpar-Ímpar	23	10.4	131	6.0
Ímpar-Par	24	9.9	101	4.0
Par-Ímpar	32	11.8	135	5.5
Par-Par	17	12.2	78	4.5

uma boa predição. Sendo assim, em todas as paridades estudadas o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$ supera o GTBD1. Em alguns casos, o valor de σ_N obtido pelo modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$ é aproximadamente quatro vezes menor.

A Tabela 6 faz a mesma comparação para o decaimento- β^+ . Porém, a quantidade de dados experimentais para núcleos que possuem uma probabilidade 100% de decaírem via β^+ é reduzida em comparação com o β^- . Por esse motivo N_0 possui valores menores. Contudo, quando comparados com o GTBD1, esses valores chegam a ser aproximadamente seis vezes maiores. Novamente, os resultados obtidos para σ_N apresentam uma grande melhoria em relação a GTBD1, chegando a ser três vezes menor para o conjunto par-par.

De forma geral, temos mais dados experimentais disponíveis atualmente, o que permite realizar um melhor ajuste. Contudo, o aprimoramento das massas nucleares com BNN e a incorporação das primeiras transições proibidas possibilitam retirar os critérios de pré-seleção e modelar o decaimento de núcleos afastados do vale de estabilidade- β . As massas aprimoradas pelo BNN possibilitam a determinação do valor Q_β de forma precisa, mesmo em casos onde as diferenças entre as massas são muito pequenas. Já as transições proibidas possibilitam incorporar os núcleos com $\log(ft) \geq 6$, que são aqueles em que as taxas λ_1^0 , λ_1^1 e λ_1^2 são relevantes quando comparadas com λ_F e λ_{GT} .

Uma vez realizados os aprimoramentos na massa e a incorporação das primeiras transições proibidas, podemos avaliar de forma concreta o impacto destes nas meias-vidas. As Figuras 36, 37, 38 e 39 fazem uma comparação direta com os dados experimentais. Os painéis

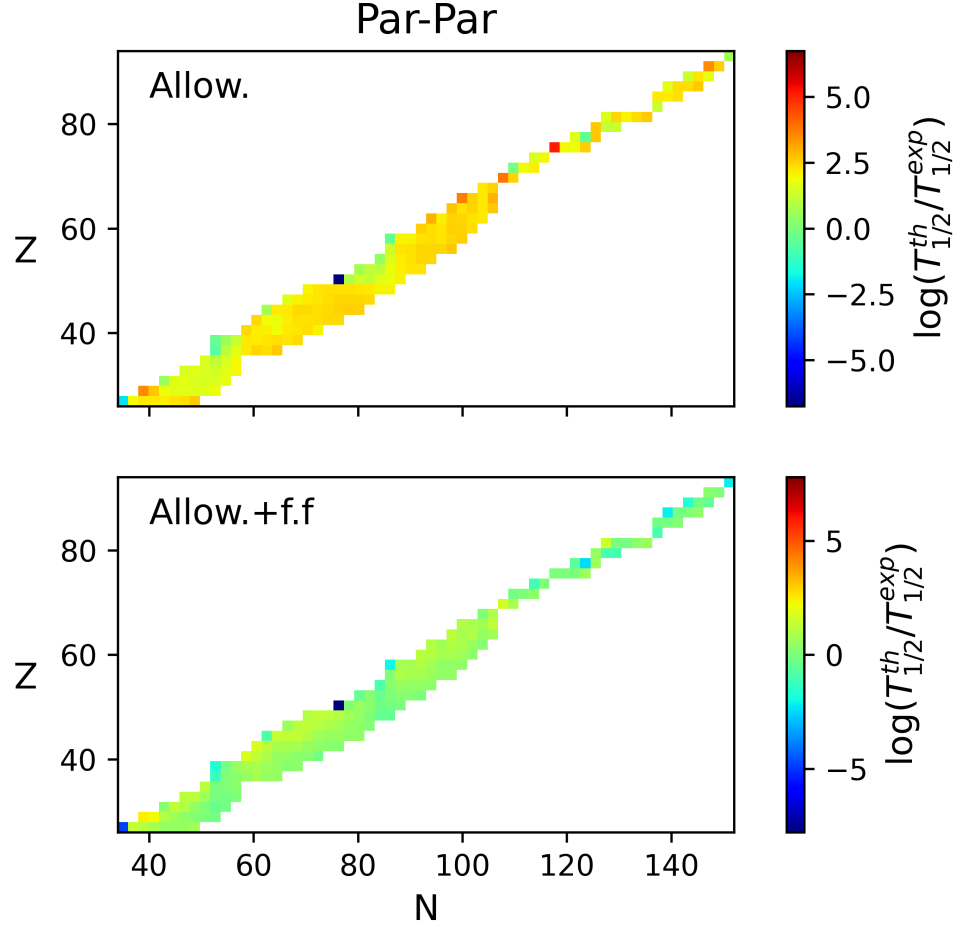


Figura 36 – O painel superior mostra uma comparação das meias-vidas do decaimento- β^- para o conjunto par-par, obtidas com o modelo GTBD1 (sem os aprimoramentos desenvolvidos neste trabalho) com os dados experimentais. O painel inferior apresenta a mesma comparação entre o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$ e os dados experimentais.

superiores de cada uma destas figuras utilizam a fórmula de massa WS4 para o cálculo do valor Q_β e consideram somente as transições permitidas. Já os painéis inferiores apresentam os aprimoramentos, com WS4+BNN e a incorporação das primeiras transições proibidas.

A Figura 36 apresenta os resultados para o conjunto par-par. Os resultados foram plotados na mesma escala para que a melhoria pudesse ser evidenciada. É notório que, em todas as regiões de massa o BNN e as transições proibidas aproximaram os resultados teóricos aos experimentais. Indicando que, nesse conjunto a antiga forma de se calcular as massas nucleares e a taxa de decaimento- β eram insuficientes.

As Figuras 37 e 38 fazem a mesma comparação para os conjuntos par-ímpar e ímpar-par.

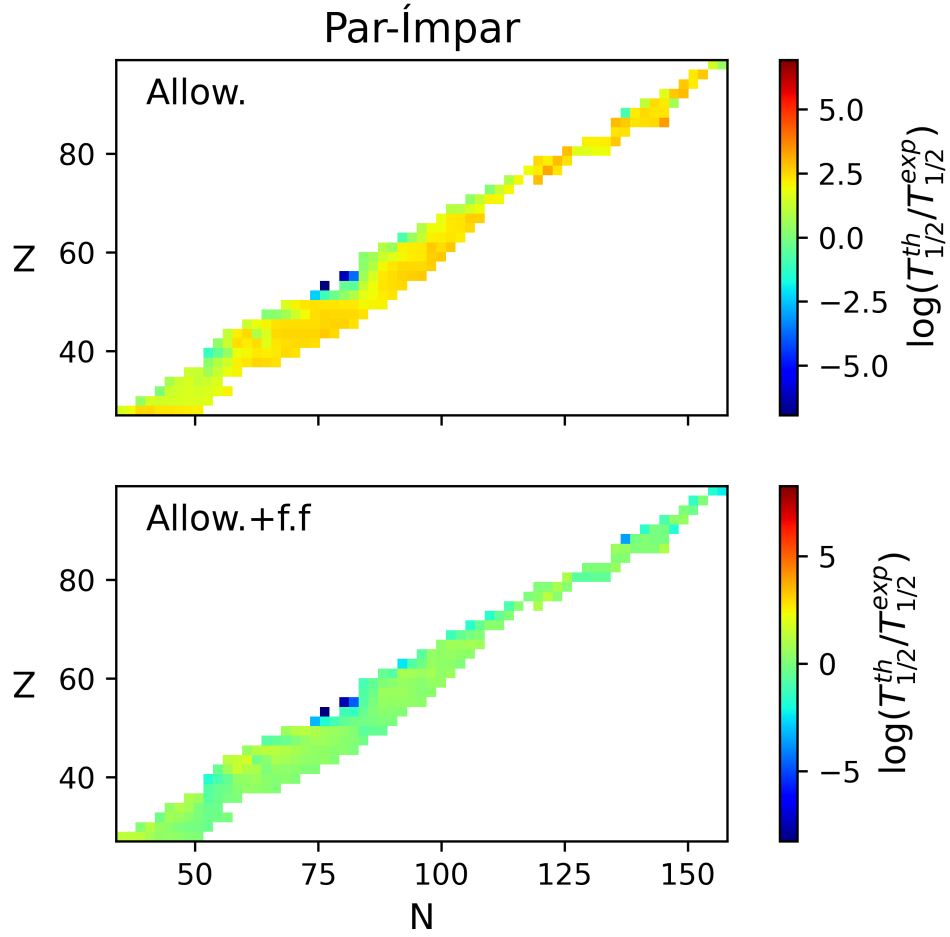


Figura 37 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto par-ímpar. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

Os desvios próximos à linha de estabilidade- β podem ser explicados pelo pequeno valor de Q_β , nas quais as previsões das meias-vidas representam uma dificuldade para todos os modelos teóricos (CHEN et al., 2023). Apesar disso, o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$ apresenta melhores resultados em todos os intervalos de massa. Vale destacar o caso ímpar-par, onde o modelo GTBD1 possui um erro máximo de 10 ordens de grandeza para um determinado núcleo, com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow.+f.f.}$ esse mesmo erro é reduzido para 5 ordens de grandeza. Estes erros elevados são para núcleos pontuais, onde modelos estatísticos como a GTBD não são capazes de fornecer uma reprodução dos mecanismos nucleares de forma satisfatória. Em casos como este, tratar o problema de forma microscópica pode ser uma opção viável. No entanto, modelos microscópicos demandam grande esforço computacional, os impedindo de serem aplicados em larga escala. Vale ressaltar que, dentro da GTBD estes erros elevados não

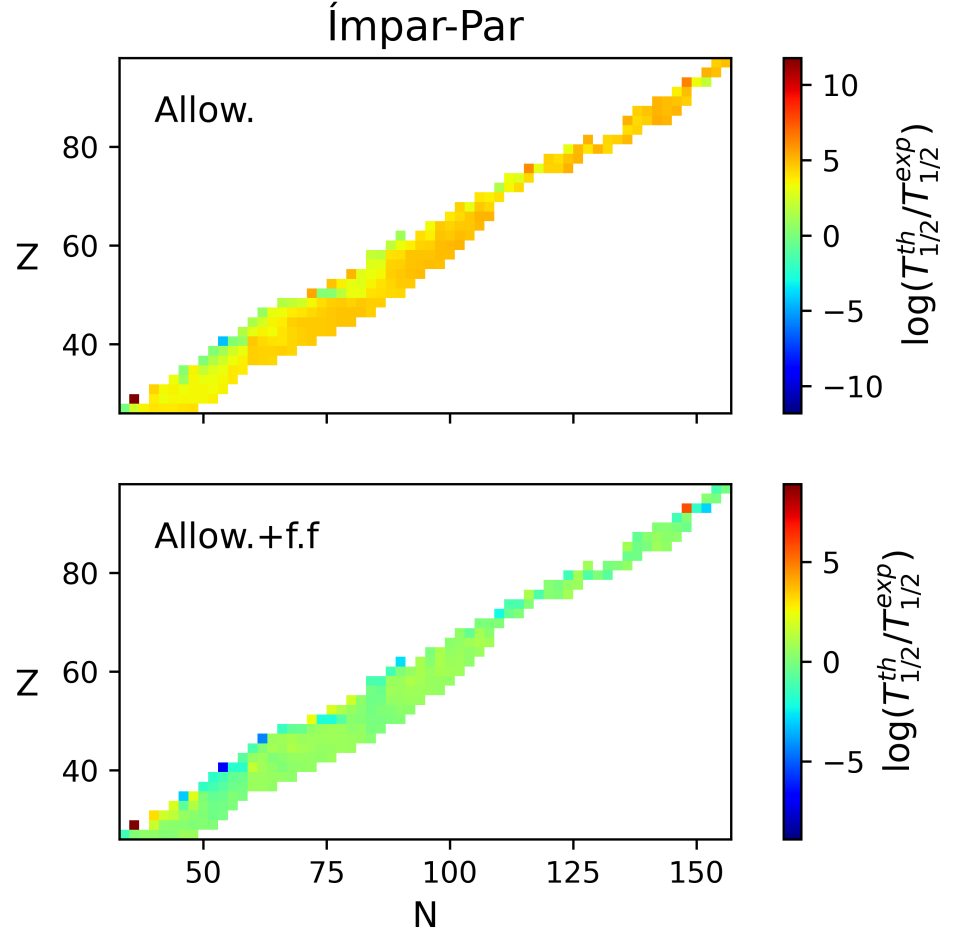


Figura 38 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto ímpar-par. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$.

são o padrão, como podemos ver nas Figuras 37 e 38.

Em trabalho recente, Mumpower *et al.* mostrou que mesmo em modelos microscópicos sofisticados, como QRPA e SM, a incerteza na predição das meias-vidas do decaimento- β é de no mínimo 1 ordem de magnitude (MUMPOWER *et al.*, 2016). Segundo o autor, à medida que as meias-vidas diminuem, se afastando da linha de estabilidade- β em direção à linha de gotejamento de nêutrons, a incerteza diminui gradualmente. Kondev *et al.* utilizando o modelo FRDM+QRPA obteve *rms* de aproximadamente 2 para núcleos com meia-vida $10^3 < T_{1/2} \leq 10^6$ s (KONDEV *et al.*, 2021). Uma vez que, há uma grande divergência nas predições fornecidas por diferentes modelos nucleares, é interessante investigar em um trabalho futuro, como esses desvios se propagam para as abundâncias no processo-*r*.

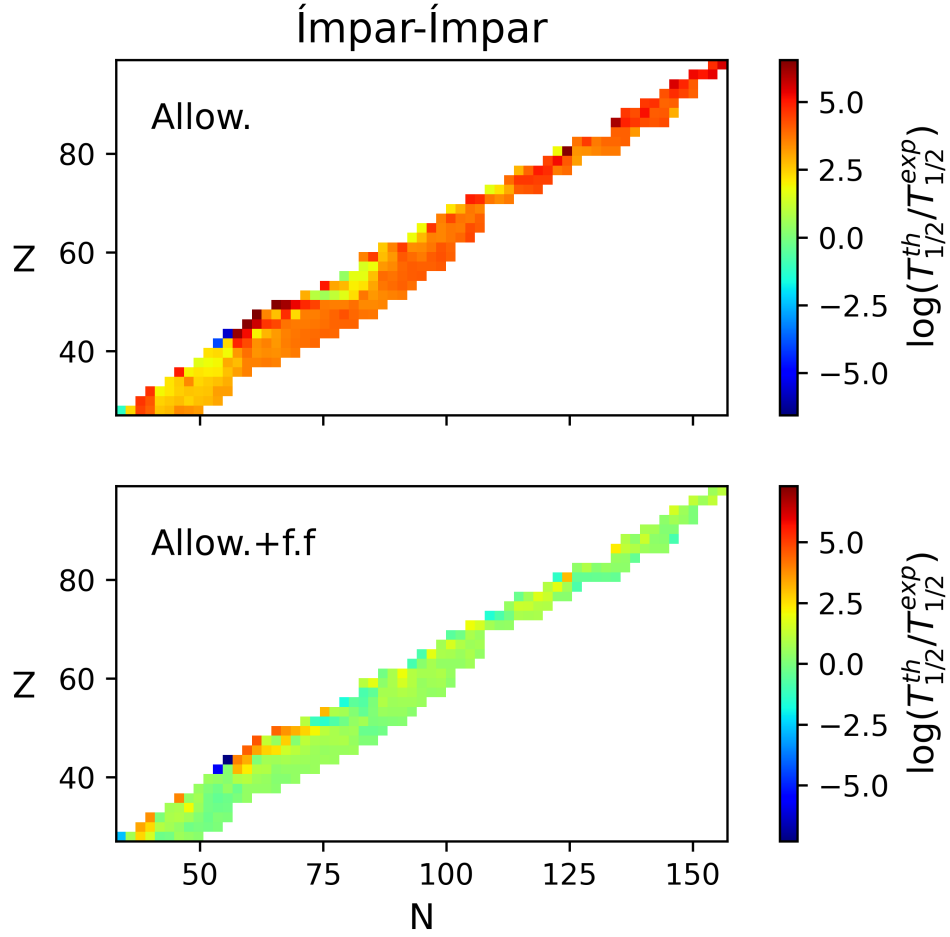


Figura 39 – Comparação entre as meias vidas teóricas e experimentais para o decaimento- β^- , utilizando o conjunto ímpar-ímpar. O painel superior mostra uma comparação entre o modelo GTBD1 e os dados experimentais. O painel inferior faz a mesma comparação para o modelo aprimorado $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

A Figura 39 apresenta os resultados para os núcleos ímpar-ímpar. De forma geral, esses núcleos possuem meia-vida menor quando comparados aos núcleos par-par. Uma possível explicação para isso seria a quantidade de nucleons desemparelhados no núcleo, o que o conduziria a uma instabilidade nuclear, elevando a taxa de decaimento. Como podemos observar, o modelo GTBD1 superestima a predição das meias-vidas em até 5 ordens de grandeza, com a exceção de alguns poucos núcleos. Essa superestimação é corrigida com o modelo $GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.}$, levando os resultados teóricos para a mesma ordem de grandeza dos dados experimentais. Existem algumas poucas exceções próximas a $N=75$, que podem ser estudadas de forma específica em um trabalho futuro.

Contando os decaimentos- β^- e β^+ , ao todo foram 1388 núcleos estudados. A Figura 40 mostra uma comparação geral entre os resultados obtidos para meias-vidas desses núcleos

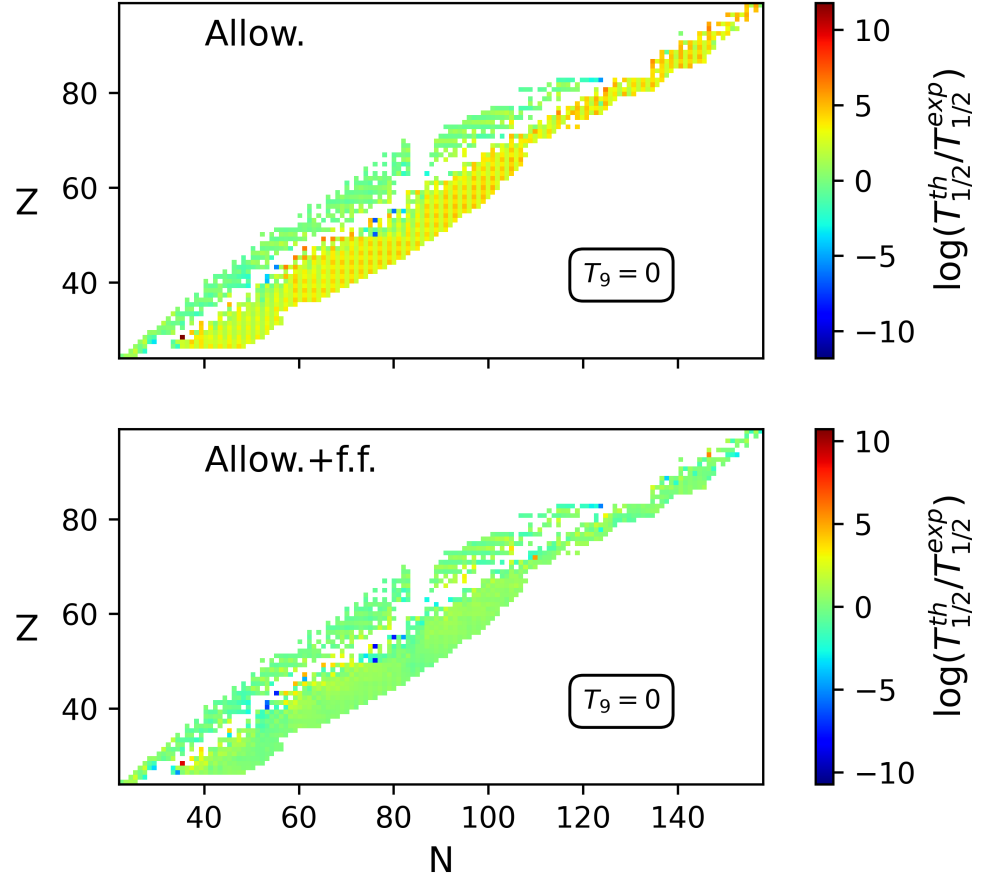


Figura 40 – Comparação entre as meias-vidas para ambos os decaimentos, β^+ e β^- , obtidas com os modelos GTBD1 e GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ com os dados experimentais.

e os dados experimentais. Observando a região de núcleos ricos em nêutrons, é notório que os aprimoramentos realizados pelo modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ são cruciais para se obter uma modelagem satisfatória destes decaimentos.

Em um cenário astrofísico, como a evolução de uma pré-supernova, os principais constituintes do núcleo estelar são os núcleos da camada pf . Os núcleos que fazem parte dessa camada possuem número de prótons ou nêutrons próximos de alguns dos números mágicos 20, 28 e 50. Como é o caso do ^{48}Ca , ^{56}Fe e ^{60}Ni . Estes núcleos controlam a fração de elétrons Y_e na fase final de progressão após os estágios de queima do silício dentro do núcleo estelar (SHEHZADI; NABI; FAROOQ, 2023).

Em um estudo realizado por Nabi (NABI; ULLAH; KHAN, 2021) e Aufderheide (Aufderheide et al., 1994), foram identificados os núcleos mais relevantes para a evolução de uma pré-supernova. Em particular, os núcleos com $53 \leq A \leq 63$ desempenham um papel

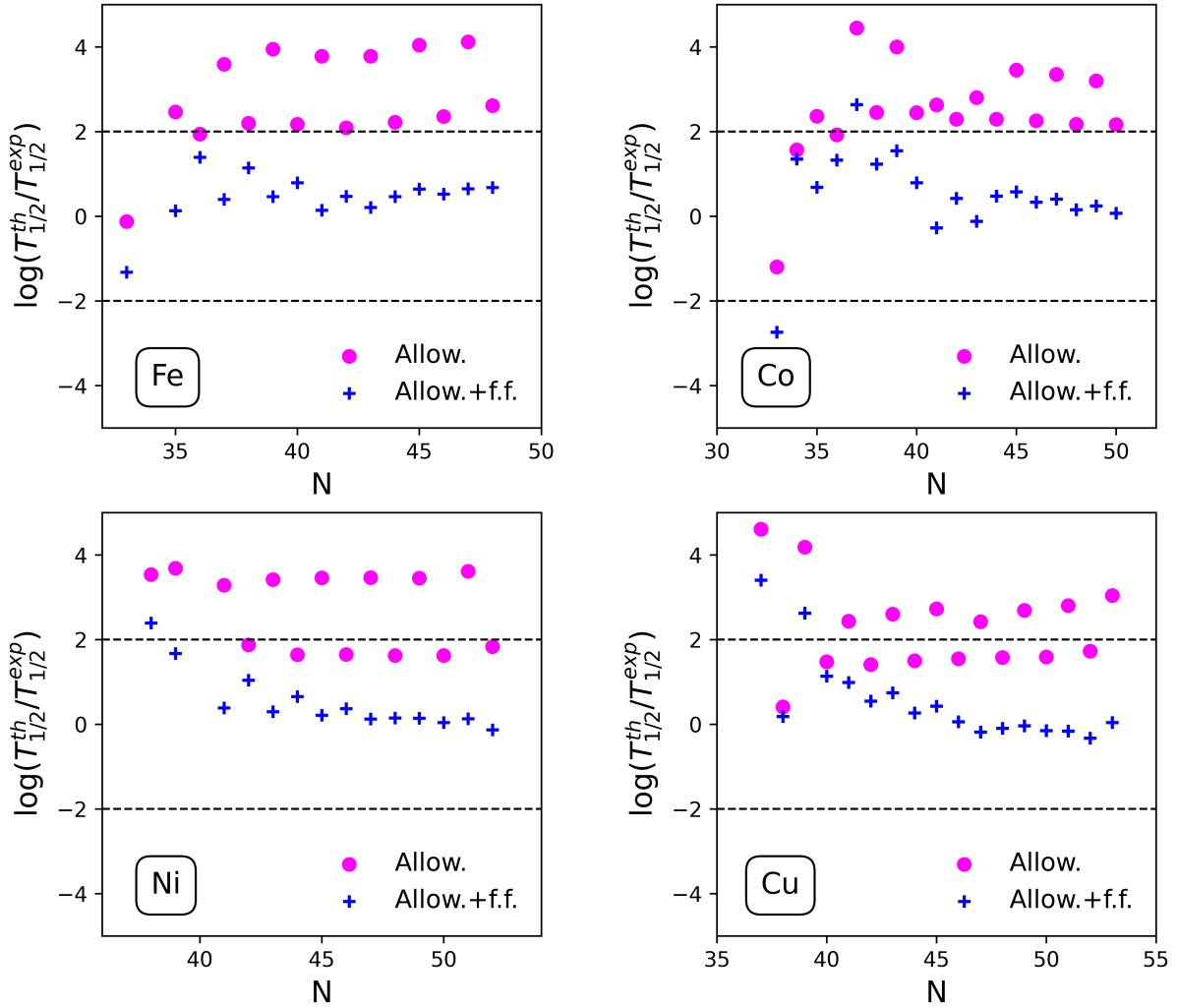


Figura 41 – Comparação entre a meia vida teórica e experimental para o decaimento- β^- em isótopos de Fe, Co, Ni e Cu. Os resultados para as transições permitidas foram obtidos com o modelo GTBD1 e a inclusão das transições proibidas com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

chave devido às suas contribuições na taxa de EC e decaimento- β .

As Figuras 41 e 42 apresentam uma comparação específica para algumas cadeias importantes que participam do processo- r . Nelas mostramos como as transições proibidas e as massas aprimoradas modificam as meias-vidas. Na Figura 41 tratamos do decaimento- β^- para as cadeias de Fe, Co, Ni e Cu. Como pode ser visto, em todas estas cadeias as transições proibidas desempenham um papel relevante, sendo fundamental para o cálculo das meias-vidas.

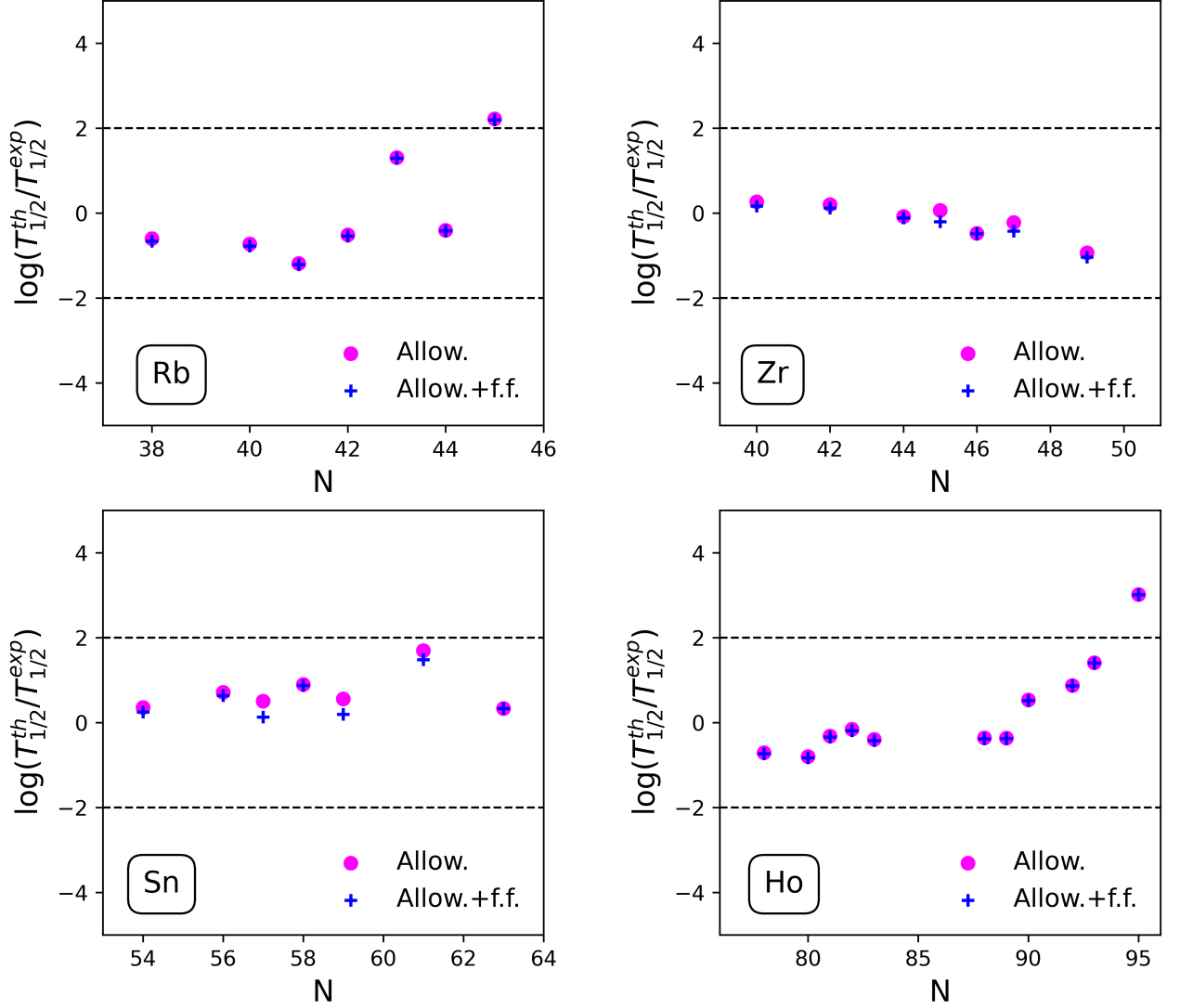


Figura 42 – Comparação entre a meia vida teórica e experimental para o decaimento- β^+ em isótopos de Rb, Zr, Sn e Ho. Os resultados para as transições permitidas (Allowed) foram obtidos com o modelo GTBD1 e a inclusão das transições proibidas com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

Com a incorporação das transições f.f., os desvios nas previsões são reduzidos em todas as cadeias analisadas. Na Figura 42 é realizada uma análise semelhante para o decaimento- β^+ . Dentre os núcleos que participam do processo- r , a quantidade de núcleos que decaem via β^+ é menor quando comparado ao decaimento- β^- . Utilizamos as cadeias isotópicas do Rb, Zr, Sn e Ho para avaliar o impacto das transições proibidas. No entanto, nestas cadeias o impacto

foi menor quando comparado ao decaimento- β^- .

4.2.2 Meia-vida no ambiente astrofísico

Um dos maiores desafios em estudar o processo- r está na escassez de dados experimentais, uma vez que este processo não pode ser reproduzido em laboratório. Com isso, a única alternativa é a calibração do modelo com dados terrestres. Com relação ao decaimento- β , muitos dos núcleos que compõem o processo- r não possuem meia-vida experimental, pois são extremamente ricos em nêutrons e incapazes de serem produzidos em condições terrestres.

Sendo assim, uma vez que o modelo é calibrado em condições terrestres aos dados experimentais disponíveis, o próximo passo é comparar os resultados em condições astrofísicas com outros modelos da literatura. Para esse próximo passo, selecionamos três modelos consolidados: Fuller-Fowler-Newman (FFN) pioneiros em cálculos de processos fracos em sítios astrofísicos (Fuller; Fowler; Newman, 1982), QRPA (NABI; KLAPDOR-KLEINGROTHAUS, 1999) e Shell Model (SM) (MARTÍNEZ-PINEDO; LANGANKE; DEAN, 2000).

Fuller, Fowler e Newman foram os primeiros a tentar tabular as taxas de decaimento de processos fracos em sítios astrofísicos de altas temperaturas e densidades. No caso da QRPA, os primeiros trabalhos se propuseram a calcular as taxas de decaimento- β em baixas temperaturas. Posteriormente, o modelo foi aprimorado para incorporar processos mais sofisticados (NABI; KLAPDOR-KLEINGROTHAUS, 1999).

A Tabela 8 apresenta uma comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os modelos citados acima. As condições astrofísicas do sítio, temperatura e densidade bariônica adotadas são características do estágio de pré-supernova, ρ_7 e T_9 que são equivalentes a 10^7 g/cm³ e 10^9 K, respectivamente. Os resultados obtidos com o modelo GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.} estão em acordo com todos os modelos comparados, apresentando resultados na mesma ordem de grandeza ou diferindo em 1 ordem de grandeza. Apenas duas exceções foram observadas, o ⁵⁹Fe e o ⁶¹Co, que diferem em 2 ordens de grandeza de pelo menos um dos modelos comparados. Quando comparamos os modelos GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.} e GTBD1, as diferenças podem chegar até 2 ordens de grandeza, como é o caso do ⁵⁹Fe. Porém, são os resultados provenientes do modelo GTBD_{BNN}^{allow.+f.f.} que mais se aproximam da QRPA, SM e FFN.

Depois de investigar os efeitos da temperatura nas meias-vidas do decaimento- β para alguns núcleos-chave do estágio de pré-supernova, estenderemos esta análise para o estágio de supernova, englobando todos os núcleos que participam do processo- r . Em trabalho recente, Ravlić *et al.* fizeram uma análise semelhante com o sofisticado modelo microscópico Finite-Temperature Proton-Neutron Relativistic QRPA (FT-PNRQRPA) (RAVLIĆ *et al.*, 2021). Porém, eles restringiram a análise a núcleos com meias-vidas menores que 10^4 s, em condições

Tabela 7 – Comparação das taxas de decaimento- β^+ e β^- obtidas neste trabalho, GTBD1 e GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$, com os principais modelos da literatura: QRPA (NABI; KLAPDOR-KLEINGROTHAUS, 1999), Shell Model (SM) (MARTÍNEZ-PINEDO; LANGANKE; DEAN, 2000) e Fuller-Fowler-Newman (FFN) (Fuller; Fowler; Newman, 1982). ρ_7 significa 10^7 g/cm^3 e T_9 é 10^9 K . Os números em parêntesis representam os expoentes. Todas as taxas estão em s^{-1} .

Nucleus	Decay mode	ρ_7	T_9	QRPA	SM	FFN	GTBD1	GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$
^{54}Cr	β^-	5.86	3.40	1.8 (-8)	2.2 (-7)	2.2 (-5)	4.4 (-7)	4.4 (-7)
^{58}Fe	β^-	10.7	3.65	7.3 (-9)	5.2 (-8)	2.6 (-6)	3.4 (-6)	3.4 (-6)
^{52}Ti	β^-	33.0	4.24	1.8 (-5)	1.3 (-3)	1.1 (-2)	1.2 (-6)	1.6 (-6)
^{59}Fe	β^-	33.0	4.24	6.2 (-5)	6.0 (-5)	6.3 (-3)	3.0 (-9)	1.7 (-7)
^{61}Fe	β^-	33.0	4.24	4.2 (-3)	1.7 (-3)	—	1.4 (-4)	1.0 (-3)
^{61}Co	β^-	33.0	4.24	2.1 (-5)	1.6 (-4)	—	3.4 (-7)	3.9 (-7)
^{63}Co	β^-	33.0	4.24	3.8 (-2)	1.6 (-2)	—	1.4 (-3)	2.0 (-3)
^{59}Mn	β^-	220	5.39	1.1 (-2)	2.2 (-2)	7.2 (-1)	4.6 (-4)	1.4 (-3)
^{58}Co	β^+	4.32	3.26	2.7 (-11)	2.7 (-6)	1.2 (-6)	6.4 (-8)	1.0 (-7)
^{54}Mn	β^+	5.86	3.40	1.8 (-10)	2.7 (-6)	1.6 (-6)	3.5 (-9)	3.9 (-9)
^{56}Mn	β^-	10.7	3.65	5.7 (-6)	3.4 (-3)	3.0 (-3)	3.7 (-5)	5.4 (-5)
^{60}Co	β^-	10.7	3.65	8.3 (-7)	6.6 (-4)	1.4 (-3)	3.1 (-8)	2.0 (-6)

terrestres. Neste trabalho, não faremos esta restrição.

Fixamos o produto ρY_e em 10^9 g/cm^3 , por se tratar de uma condição de supernova comprovada na literatura. Variamos a temperatura entre $T_9 = 1.16 - 23.2$, para garantir que os estágios de baixas e altas temperaturas fossem atingidos. Comparamos as meias-vidas variando com a temperatura ($t_{1/2}^{T_9}$) com as meias-vidas em condições terrestres ($t_{1/2}^{T_9=0.0}$). As variações são demonstradas em mapas de calor nas Figuras 43 e 44. Definimos $\mathcal{D}$ como:

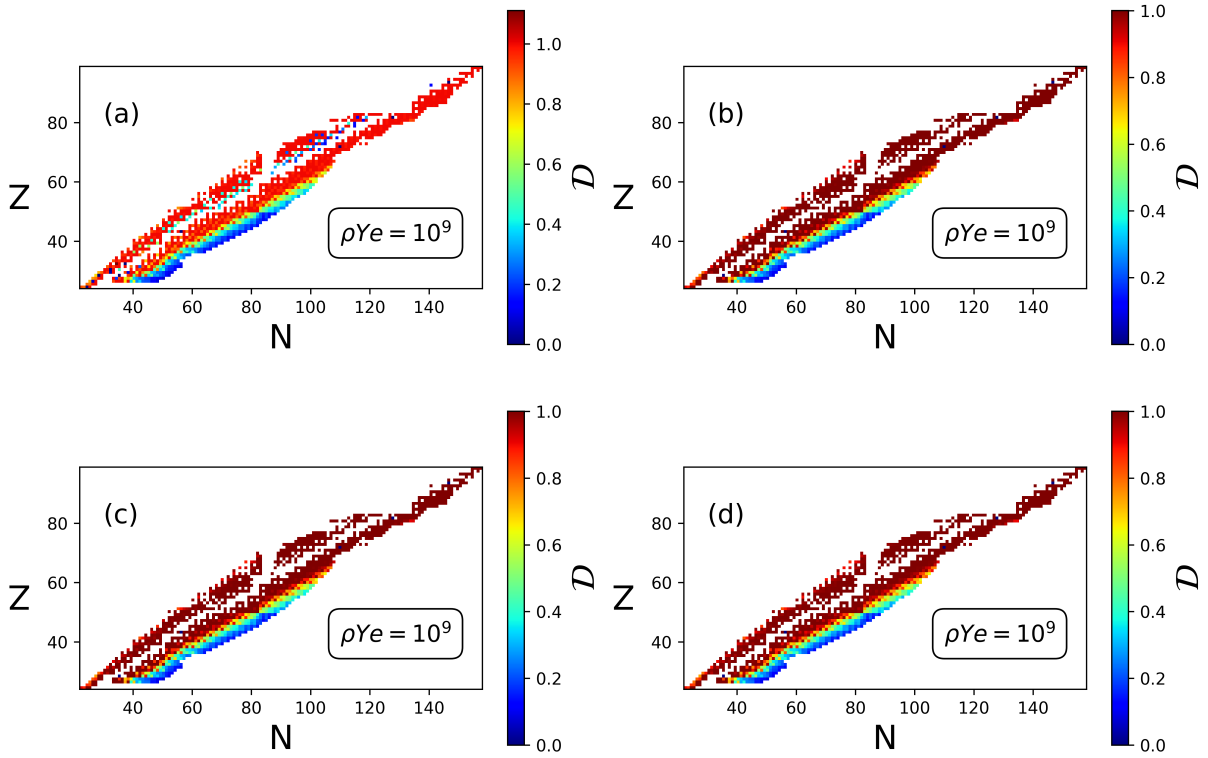


Figura 43 – Razão entre as meias-vidas do decaimento- β obtidas com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ em temperaturas de a) $T_9 = 1.16$, b) $T_9 = 2.32$, c) $T_9 = 3.48$ e d) $T_9 = 4.64$. A temperatura $T_9 = 0.0$, representa a temperatura no ground-state.

$$\mathcal{D} = \frac{t_{1/2}^{T_9} - t_{1/2}^{T_9=0.0}}{t_{1/2}^{T_9}} \quad (4.4)$$

Percebemos que já no início da análise, com $T_9 = 1.16$, o efeito da temperatura começa a aumentar as meias-vidas. Esse efeito é mais pronunciado em núcleos próximos do vale de estabilidade- β . Já em núcleos ricos em nêutrons, observamos que as variações são mais discretas, aproximadamente 30%. Quando a temperatura atinge $T_9 = 5.8$, acontece a diminuição das meias-vidas. Ou seja, a temperatura passa a agir de forma contrária. Isso é evidenciado de forma clara no último painel da Figura 44, para a temperatura de $T_9 = 23.2$.

Avaliando do ponto de vista microscópico, Ravlić *et al.* conclui que o efeito da temperatura sobre os núcleos não é universal, podendo aumentar, diminuir ou até mesmo não alterar as meias-vidas. O comportamento das meias-vidas dependerá fortemente da estrutura

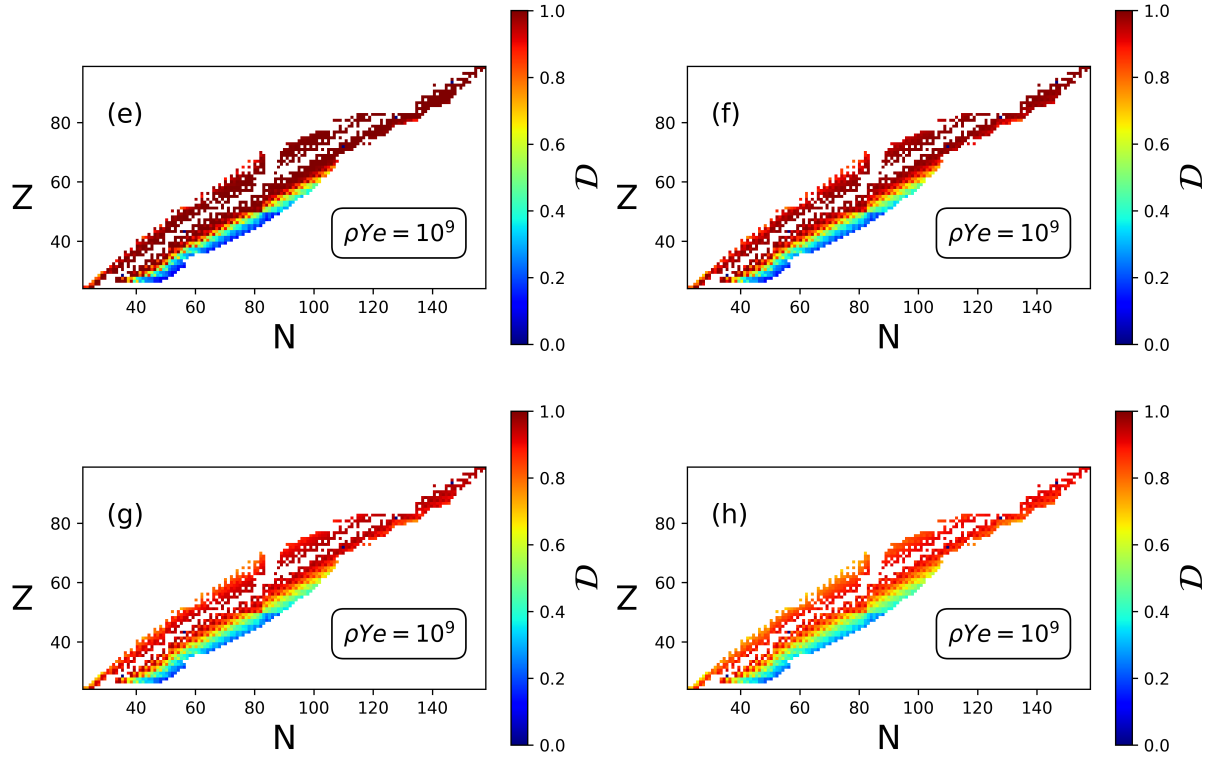


Figura 44 – Razão entre as meias-vidas do decaimento- β obtidas com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{Allow.}+f.f.}$ em temperaturas de e) $T_9 = 5.8$, f) $T_9 = 11.6$, g) $T_9 = 17.4$ e h) $T_9 = 23.2$. A temperatura $T_9 = 0.0$, representa a temperatura no ground-state.

de camadas e das propriedades de emparelhamento dos núcleos.

4.3 Seções de choque neutrino-núcleo

As seções de choque neutrino-núcleo desempenham um papel fundamental na dinâmica do colapso de uma supernova, onde a emissão de neutrinos é quem determina a taxa de resfriamento (ver Figura 8). Além do mais, um conhecimento preciso deste tipo de interação semileptônica com o núcleo permite testar implicações de uma física além do modelo padrão, como é o caso das oscilações de neutrinos.

Nesta seção, apresentaremos os resultados da implementação das primeiras transições proibidas para as seções de choque de neutrinos. O formalismo desta implementação está detalhado nas Seções 2.3 e 2.4. As seções de choque de neutrino-núcleo possuem os mesmos

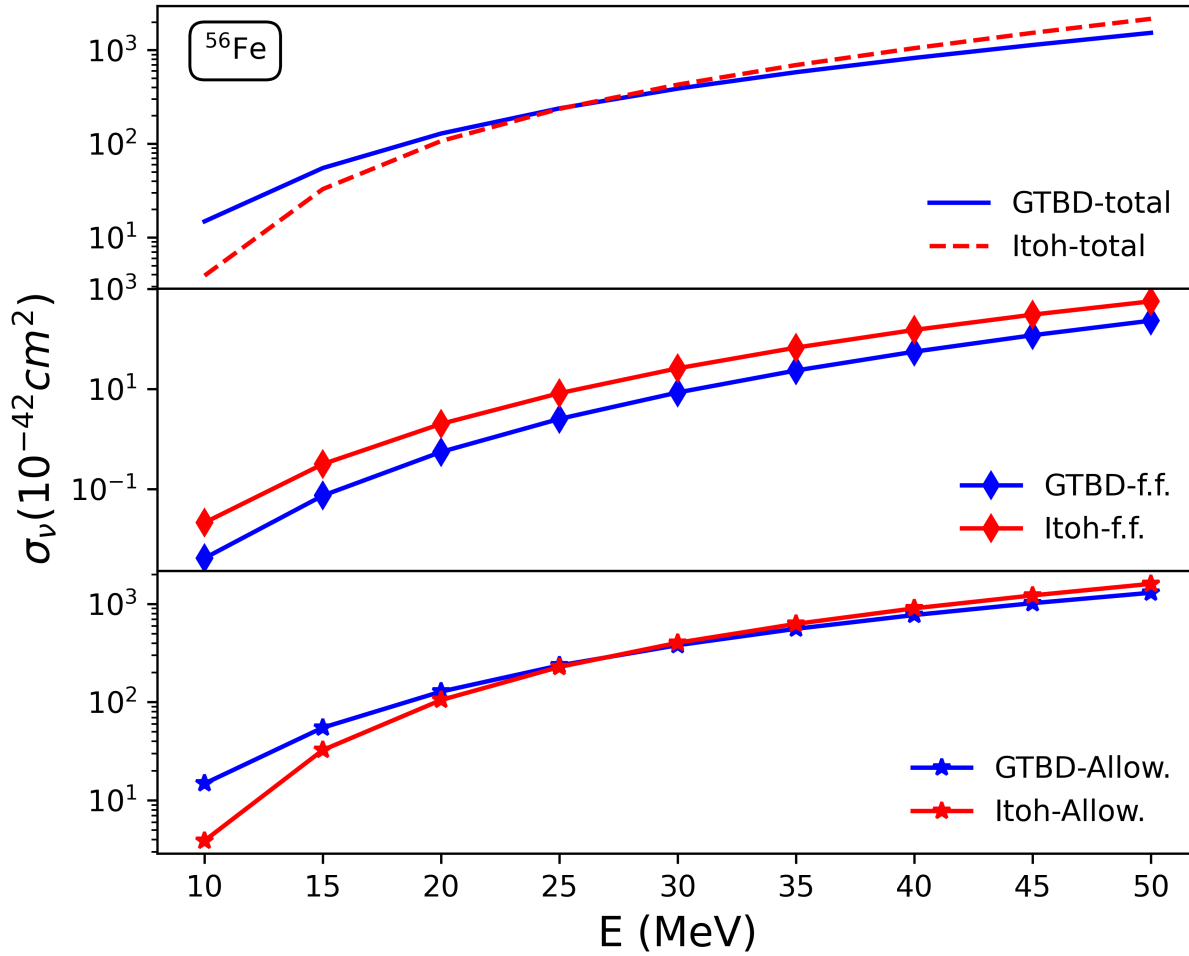


Figura 45 – Seção de choque total para a reação $^{56}\text{Fe}(\nu_e, e^-) ^{56}\text{Co}$ em 10^{-42} cm^2 . As seções de choque obtidas neste trabalho estão dispostas em azul (GTBD), e são comparadas com o trabalho pioneiro de Itoh (ITOH; KOHYAMA, 1978), em vermelho.

elementos de matriz nucleares do decaimento- β .

A Figura 45 mostra uma comparação com o trabalho pioneiro de Itoh e Kohyama, no que se diz respeito a transições proibidas em seções de choque de neutrinos (ITOH; KOHYAMA, 1978). Comparamos por etapas os resultados da seção de choque total para a reação $^{56}\text{Fe}(\nu_e, e^-) ^{56}\text{Co}$. No painel inferior, somente as contribuições das transições permitidas são mostradas, evidenciando que os modelos estão em completo acordo. No painel central, a mesma comparação é realizada para as transições proibidas, sendo que os nossos resultados (GTBD-f.f.) são levemente inferiores aos de Itoh e Kohyama. Por fim, o painel superior compara as seções totais, ou seja, a soma de todas as transições. Vemos claramente que, em energias até 15 MeV, os modelos divergem levemente. Porém, essa divergência desaparece para energias maiores que 20 MeV. Esses resultados evidenciam que a implementação das

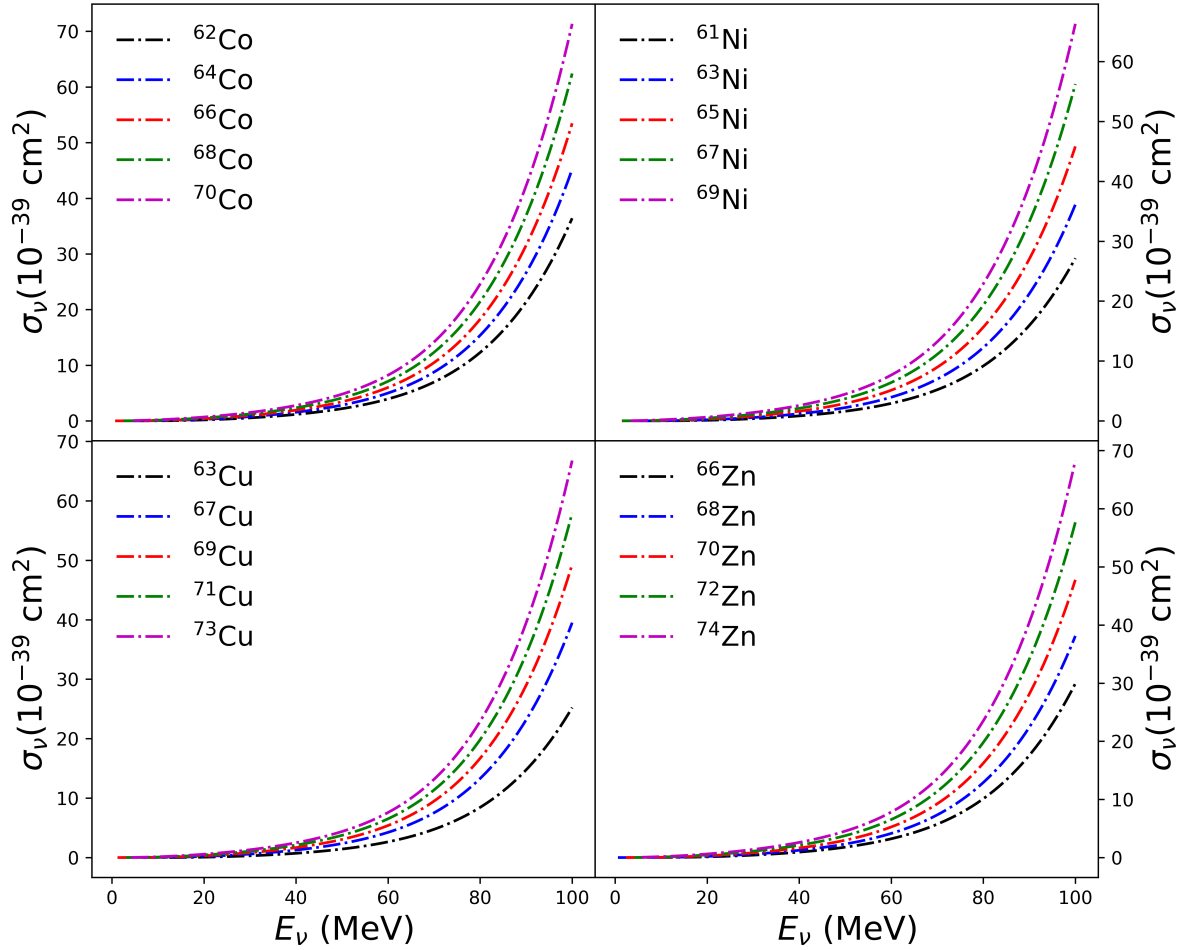


Figura 46 – Seções de choque neutrino-núcleo para diferentes cadeias isotópicas. Nos painéis superiores estão dispostas as cadeias de Co e Ni. E nos painéis inferiores as cadeias de Cu e Zn. Os resultados foram obtidos com o modelo $GTBD_{BN}^{allow.+f.f.}$.

transições proibidas para as seções de choque de neutrinos obteve êxito.

A Figura 46 mostra os resultados para a seção de choque total dos isótopos de Co, Ni, Cu e Zn. O comportamento das curvas segue a predição de Bahcall, tendo uma dependência em E_ν^2 (BAHCALL, 1989). De forma geral, podemos observar que as seções de choque em energias inferiores a 50 MeV são muito semelhantes. Porém, no intervalo $50 \leq E_\nu \leq 100$ MeV os núcleos mais pesados apresentam seções de espalhamento maior, em acordo com os resultados da literatura.

Em um trabalho recente, Athar e Singh calcularam as seções de choque neutrino-núcleo para núcleos de relevância experimental. Estes cálculos foram realizados com o modelo Local Density Approximation (LDA), que considera o bloqueio de Pauli, os efeitos dos movimentos

Tabela 8 – Seção de choque média $\langle\sigma\rangle$ calculada com o fluxo de Michel (ver Eq. 2.66) em 10^{-42} cm^{-2} . Comparação entre os resultados obtidos com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ com o trabalho realizado por Athar *et al.* (ATHAR; AHMAD; SINGH, 2006). $\langle\sigma\rangle_{NC}^{RPA}$ e $\langle\sigma\rangle_C^{RPA}$ são as seções choque médias calculadas com as correlações de RPA, sem o efeito coulombiano e com o efeito coulombiano. $\langle\sigma\rangle_C^N$ é a seção de choque média calculada sem as correlações de RPA e com efeito coulombiano.

Nucleus	$\langle\sigma\rangle_{NC}^{RPA}$	$\langle\sigma\rangle_C^N$	$\langle\sigma\rangle_C^{RPA}$	$\langle\sigma\rangle_{allow.+f.f.}^{GTBD}$
$^{46}_{26}\text{Fe}$	161.40	685.25	277	554.5
$^{59}_{27}\text{Co}$	244.70	1148.62	418.70	540.9
$^{71}_{31}\text{Ga}$	335.70	1762.91	596	885.3
$^{89}_{39}\text{Y}$	307.10	1912.11	633.50	1081
$^{93}_{41}\text{Nb}$	370	2332.71	760.10	1007
$^{98}_{42}\text{Mo}$	417.60	2261.25	854	1734
$^{115}_{49}\text{In}$	516.60	3836.37	1133	1717
$^{127}_{53}\text{I}$	545.40	4262.30	1253	1820
$^{139}_{57}\text{La}$	581.50	4787.43	1400	2795
$^{181}_{73}\text{Ta}$	907.30	7912.80	2358	4413
$^{209}_{83}\text{Bi}$	824.38	8257.85	2497	5893

fermiônicos e a renormalização das strengths no meio nuclear (ATHAR; AHMAD; SINGH, 2006). Neste tipo de modelo, assim como a GTBD, os efeitos da distorção coulombiana do lépton carregado emitido são considerados através da função de Fermi.

As seções médias obtidas por Athar e Singh foram calculadas com o fluxo de Michel (ver Eq. 2.66). Além disso, eles avaliaram os efeitos da distorção coulombiana e das correlações de RPA, como mostra a Tabela 8. As seções sem efeitos coulombianos e com correlações de RPA $\langle\sigma\rangle_{NC}^{RPA}$, possuem valores menores quando comparados com as demais. Já $\langle\sigma\rangle_C^N$ representam as seções com efeitos coulombianos e sem correlações de RPA. Por fim, as seções $\langle\sigma\rangle_C^{RPA}$ representam aquelas com efeito coulombiano e correlações de RPA. São estas as quais os resultados obtidos com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$ mais se aproximam.

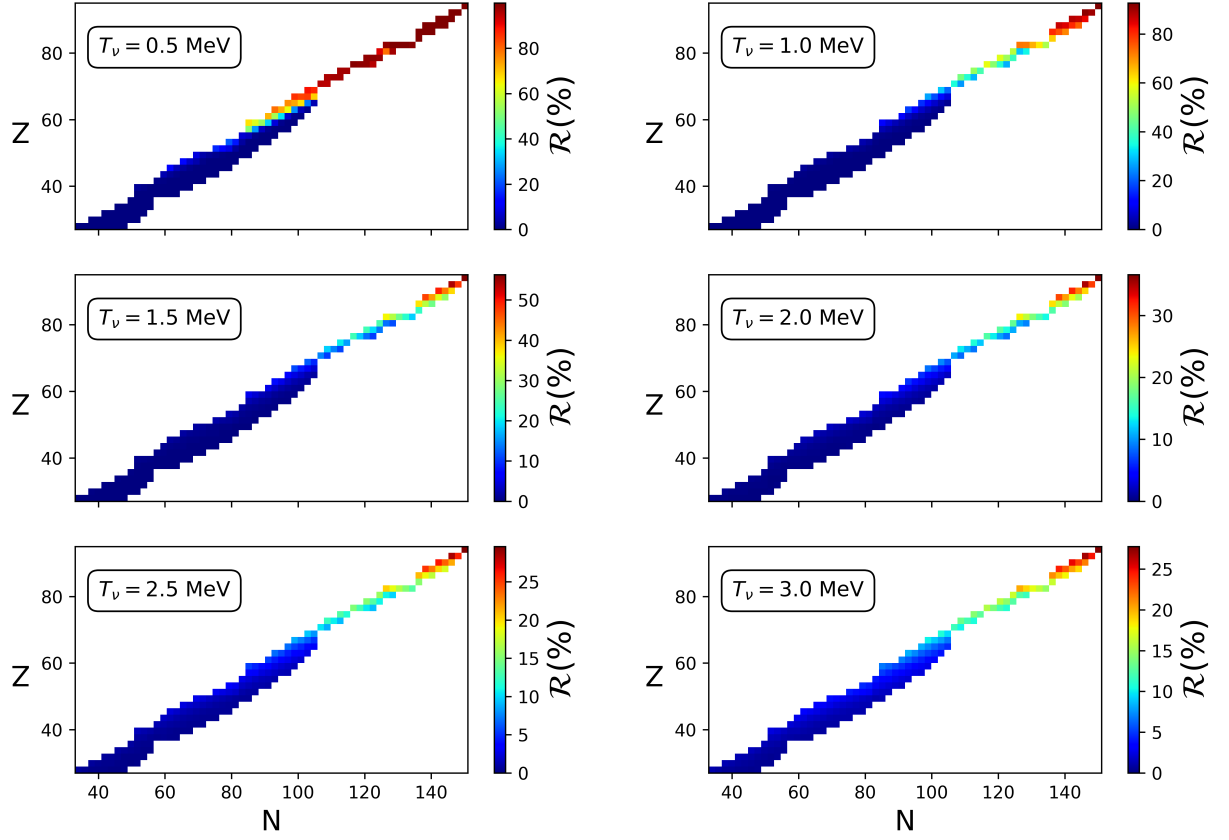


Figura 47 – Comparação das seções médias de neutrinos calculadas com a distribuição de Fermi-Dirac (ver Eq. 2.62), para diferentes temperaturas de neutrinos. $\langle\sigma\rangle^{allow.+f.f.}$ representa as seções de choque com a inclusão das transições proibidas, já $\langle\sigma\rangle^{allow.}$ conta somente com as transições permitidas. Utilizamos como parâmetro fixo o produto $\rho Y_e = 10^9 \text{ g/cm}^3$.

Em um ambiente astrofísico, como o colapso de uma supernova, a matéria ejetada através dos ventos de neutrinos é um mecanismo favorecido pela produção de elementos mais pesados que o Fe. Os neutrinos determinam a razão nêutron-próton, que é crucial para determinar a estabilidade do núcleo. Porém, se considerarmos as oscilações dos neutrinos, essa razão pode sofrer variações e, conseqüentemente, impactar as condições necessárias para o processo-*r* acontecer. Dentro desse contexto, Hoffman *et al.* demonstrou, através de um modelo semi-analítico, a dificuldade em atingir a quantidade de nêutrons livres requerida (HOFFMAN; WOOSLEY; QIAN, 1997).

Com o objetivo de avaliar o impacto das transições proibidas nas seções de choque média de neutrinos, calculamos as seções para um conjunto de núcleos no sítio de supernova.

Selecionamos o conjunto par-par e fixamos o produto ρY_e em 10^9 g/cm^3 . A Figura 47 mostra a comparação para neutrinos dentro do intervalo de temperatura $T_\nu = 0.5 - 3.0 \text{ MeV}$. Nos mapas de calor, comparamos a seguinte quantidade:

$$\mathcal{R} = \frac{\langle \sigma \rangle^{allow.+f.f.} - \langle \sigma \rangle^{allow.}}{\langle \sigma \rangle^{allow.+f.f.}} \times 100\%, \quad (4.5)$$

onde $\langle \sigma \rangle^{allow.+f.f.}$ representa as seções de choque média calculadas com a distribuição de Fermi-Dirac (Eq. 2.62) com a inclusão das transições proibidas, e $\langle \sigma \rangle^{allow.}$ representa as mesmas seções, porém somente com transições permitidas.

A partir desses resultados, podemos concluir que o efeito das transições proibidas é mais acentuado para núcleos ricos em nêutrons, principalmente na região $100 \leq N \leq 140$. Sua contribuição chega a ser de 80% para neutrinos com energias de 0.5 e 1.0 MeV. Para núcleos com $N \leq 100$, as contribuições das transições proibidas para as seções médias de neutrinos não são muito relevantes em nenhum dos cenários estudados, não ultrapassando a barreira dos 20%.

4.4 Emissão de nêutrons retardados no decaimento- β

A distribuição de massa ao longo das abundâncias solares indica a existência de três picos pronunciados nas regiões com $A = 80 - 90$, $130 - 138$ e $195 - 208$ (ARCONES; MARTÍNEZ-PINEDO, 2011). Apesar de alguns trabalhos pioneiros indicarem que esses picos estão fortemente relacionados com os efeitos das massas nucleares, trabalhos recentes indicam que somente os efeitos de massa são insuficientes para a reprodução dos picos (MINATO; MARKETIN; PAAR, 2021). O decaimento- β , a captura de nêutrons e outros modos de decaimento contribuem em grandes parcelas para o caminho do processo- r .

Como vimos na Seção 2.5, núcleos ricos em nêutrons podem emitir nêutrons após o decaimento- β . Isso acontece quando o valor Q_β é maior que S_n . Apesar de não ser um mecanismo principal de decaimento, este decaimento desempenha um papel subsidiário na determinação das abundâncias do processo- r . A emissão retardada de nêutrons produz dois tipos de efeitos diferentes nas abundâncias: 1) conduz os núcleos que participam do processo- r a um desvio no caminho do decaimento- β^- , reduzindo o número de nêutrons. Esse efeito suaviza as flutuações sobre os núcleos par-ímpar na abundância final. 2) Alimenta o sítio com nêutrons para que o processo- r ocorra. Esse efeito retarda o progresso do freeze-out e, consequentemente, o processo- r frio (MINATO; MARKETIN; PAAR, 2021).

A Figura 48 mostra as probabilidades de emissão de um nêutron (P_{1n}) calculadas com o modelo GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$. Selecionamos de todas as paridades, e comparamos os resultados

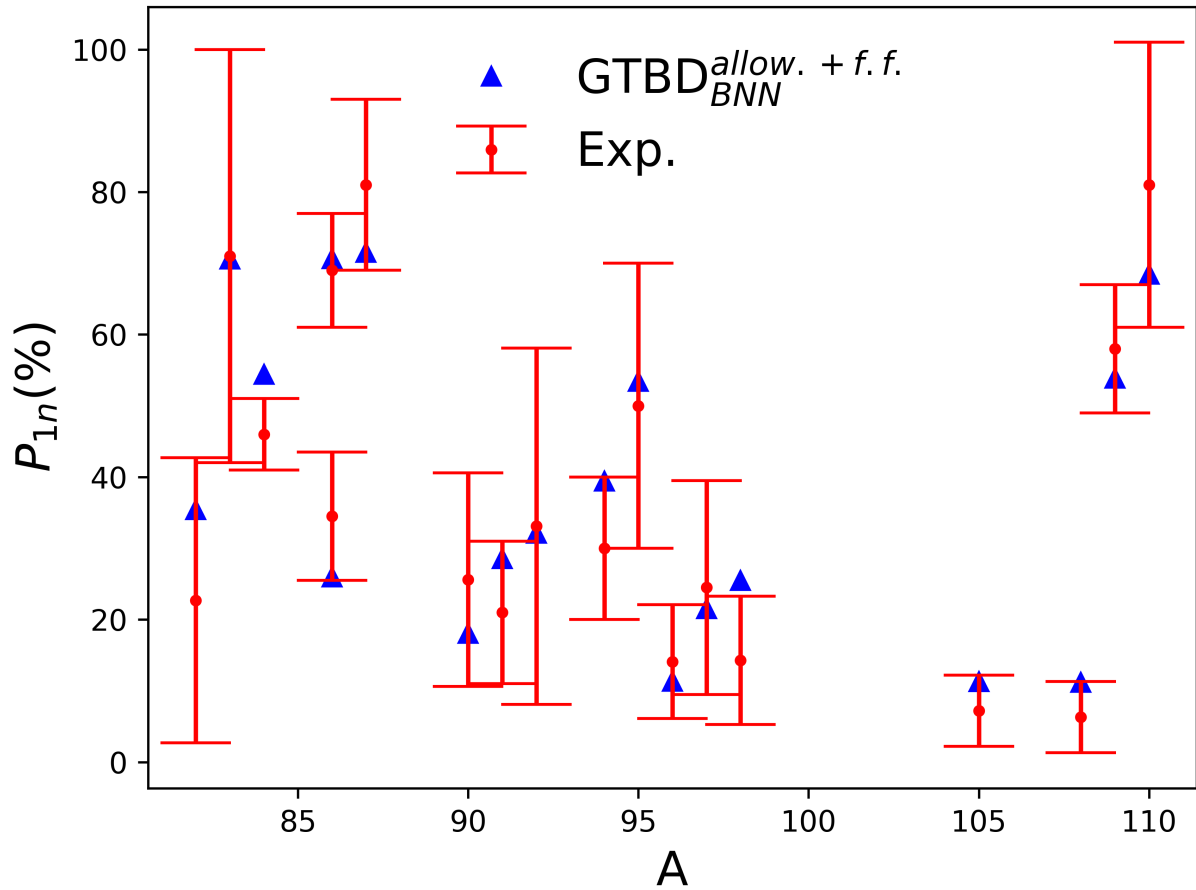


Figura 48 – Probabilidade de emissão de um nêutron retardado no decaimento- β em função da massa. Os triângulos em azul representam os resultados obtidos com o modelo GTBD_{BNN}^{allow. + f.f.} e em vermelho estão dispostos os dados experimentais.

com os dados experimentais disponíveis na literatura. Como podemos ver, as incertezas experimentais para alguns núcleos ainda são muito elevadas, dificultando uma comparação detalhada da performance do modelo para este canal de decaimento. Contudo, o modelo GTBD_{BNN}^{allow. + f.f.} apresenta resultados satisfatórios, estando dentro do limite de erro em quase todos os núcleos analisados.

Apesar de muitas medições experimentais para a emissão retardada de nêutrons terem sido divulgadas nos últimos anos, a quantidade ainda é insuficiente para uma calibração precisa dos modelos teóricos. Outro fator negativo são as elevadas incertezas nas medições. Neste ponto, as dificuldades aumentam ainda mais para núcleos ricos em nêutrons, que, devido à sua instabilidade, apresentam uma baixa estatística.

4.5 Tempo de freeze-out no processo- r

Nesta seção aplicaremos os resultados aprimorados com o BNN e as primeiras transições proibidas no decaimento- β ao cálculo do tempo de congelamento do processo- r (ou freeze-out time). Para que o processo- r ocorra, é necessário que uma condição básica seja atendida: a densidade de nêutrons e a temperatura durante a fase inicial devem se manter em níveis suficientemente altos. Sem essa condição, não podemos supor as aproximações de equilíbrio NSE entre as reações de captura e fotoemissão de nêutrons.

Para modelar as condições astrofísicas do sítio, ao longo dos anos vários modelos foram propostos. Dentre eles, o *modelo estático* do processo- r . Esse modelo introduz uma aproximação um tanto quanto grosseira, supondo que a temperatura e a densidade de nêutrons se mantêm constantes durante certo período de tempo e, após esse período, são imediatamente iguais a zero (DUARTE, 1977). No entanto, essa aproximação não é apropriada para a simulação do processo- r . Schramm *et al.* em 1973, propôs uma suposição de que a escala de tempo de expansão das camadas de uma supernova em expansão não difere muito da escala de tempo de queda livre das mesmas (SCHRAMM, 1973). Com isso, eles estabeleceram um decaimento exponencial para estas camadas,

$$n_n = n_0 \exp(-t/\tau), \quad (4.6)$$

$$T = T_0 \exp(-t/\tau), \quad (4.7)$$

onde $\tau \approx 10^{-4}$ s é o tempo característico de expansão, ρ_0 e T_0 representam a densidade de nêutrons inicial e a temperatura inicial, respectivamente.

Neste trabalho, utilizamos a suposição proposta por Schramm para a evolução temporal de n_n e T . Com o objetivo de calcular o tempo em que o congelamento do processo- r acontece, iniciamos nossa simulação em diferentes condições iniciais de densidade e temperatura. Com n_n variando entre $10^{26} - 10^{29}$ nêutrons/cm³. Já para T consideramos o intervalo de $1 - 10 \times 10^9$ K.

Após a definição das condições iniciais do sítio, supondo que elas são suficientes para a ocorrência do NSE, o primeiro passo é determinar as abundâncias de cada cadeia isotópica em equilíbrio. Para isso, utilizamos a equação de Saha (ver Eq. 1.11). Sendo assim, para uma mesma cadeia de isótopos, podemos ter diferentes abundâncias em equilíbrio, uma vez que elas dependem das condições iniciais do sítio. Porém, os picos de abundâncias são determinados pelo valor S_n , que é a parcela de maior peso na equação.

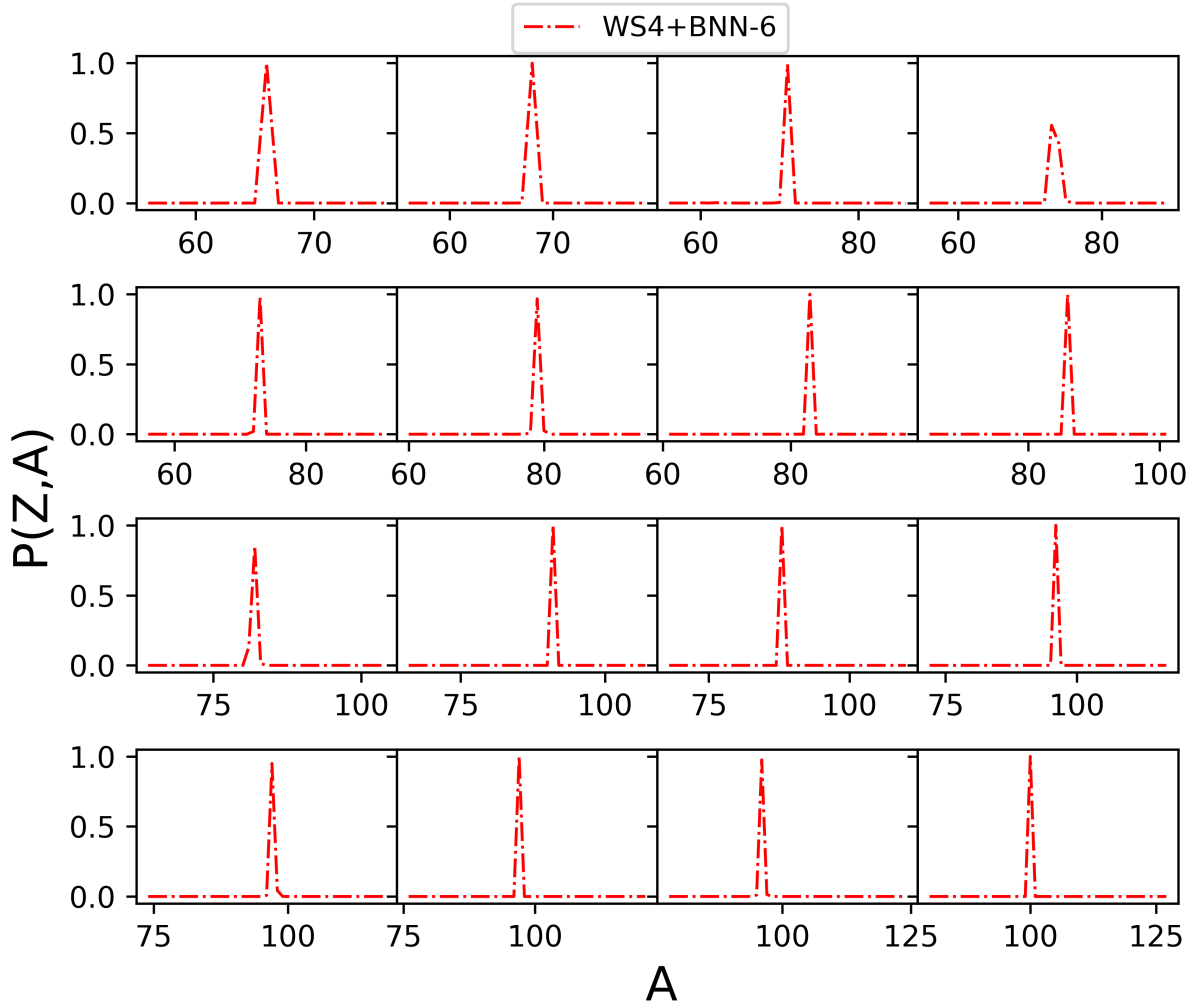


Figura 49 – Evolução temporal das abundâncias normalizadas $P(Z, A)$ para o intervalo de massa $56 \leq A \leq 125$. Cada painel representa um instante de tempo diferente e consequentemente temperatura e densidade diferentes. Os cálculos foram realizados com o modelo aprimorado WS4+BNN-6.

Uma vez determinadas as abundâncias em equilíbrio, calculamos os pesos, que são as abundâncias isotópicas normalizadas à abundância total (ver Eq. 1.10). A Figura 49 ilustra bem o comportamento das abundâncias elementares durante a evolução temporal. Cada painel representa um instante de tempo diferente e consequentemente, temperaturas e densidades diferentes. Podemos ver claramente o deslocamento do pico para núcleos mais pesados em cada instante de tempo, o que significa que cadeias mais pesadas estão sendo acessadas. A Figura 49 apresenta somente um recorte do intervalo de massa estudado, uma vez que calculamos as abundâncias para núcleos com $A \leq 220$.

Do ponto de vista do decaimento- β , a taxa de decaimento é calculada como sendo uma média da cadeia isotópica. Essa média leva em consideração os pesos de cada núcleo individual, como mostra a Eq. (1.9). Calculamos a taxa média com os modelos GTBD e GTBD $_{BNN}^{allow.+f.f.}$.

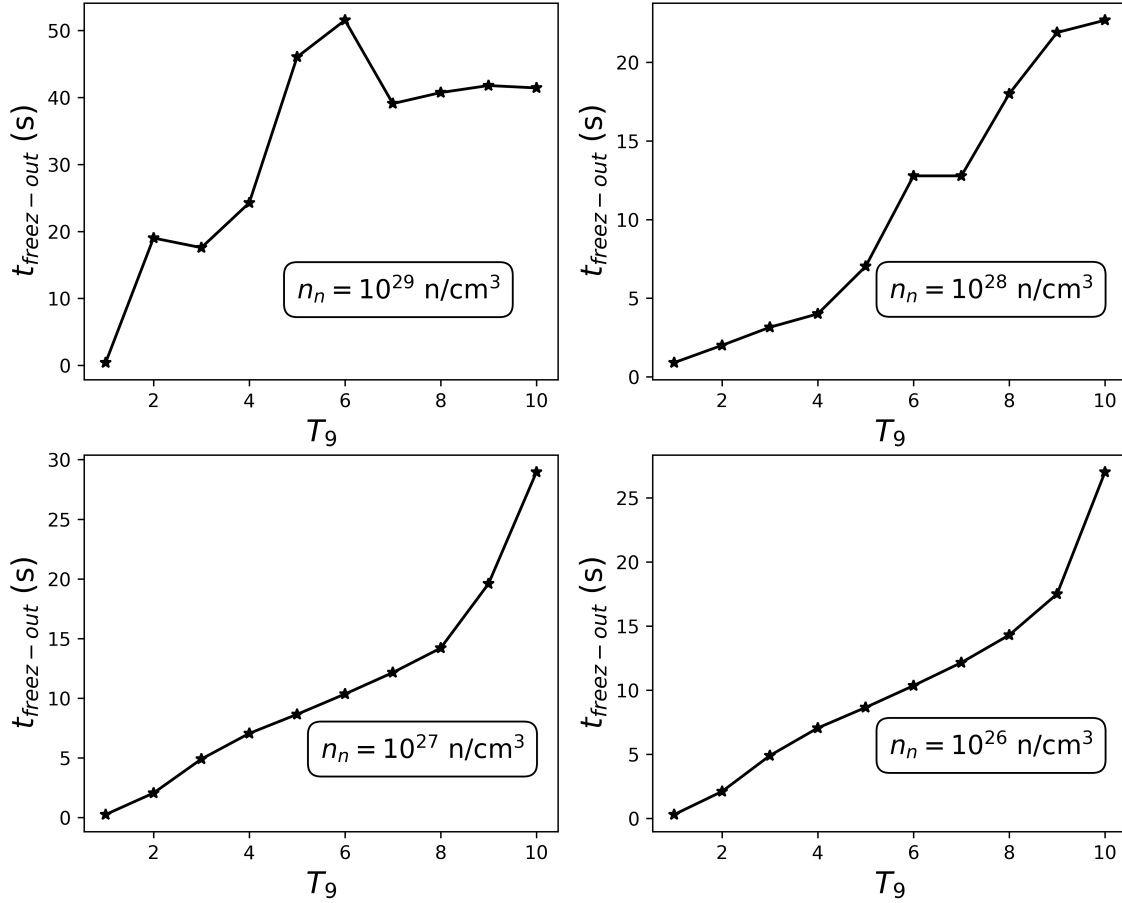


Figura 50 – Tempo de congelamento do processo- r (ou freeze-out time) calculado com o modelo aprimorado $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$. Cada painel mostra o tempo de congelamento em função da temperatura em 10^9 K, para uma densidade de nêutrons fixa.

para avaliar a importância do aprimoramento. Porém, os resultados obtidos com o modelo GTBD para as taxas são muito pequenos em comparação ao modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$. Isso se deve à imprecisão do modelo em tratar núcleos pesados, onde as transições proibidas são relevantes. Com isso, o modelo GTBD superestima e muito as meias-vidas desses núcleos, como mostra a Seção 4.2, fornecendo uma taxa de decaimento muito pequena. Na modelagem do processo- r , taxas de decaimento muito pequenas impedem que o modelo alcance cadeias isotópicas superiores (ver Figura 9), atingindo um máximo local.

Isso tornou o processo muito custoso computacionalmente e, principalmente, atingindo tempos de congelamento muito elevados, da ordem de horas, o que não faz sentido físico. Por esses motivos, seguiremos a análise com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{\text{allow.}+f.f.}$.

A equação de Bateman (1.5) fornece a relação entre o núcleo pai e filho nos processos radioativos em sítios astrofísicos. Nas condições de equilíbrio NSE, a equação (1.5) se reduz a um sistema de equações diferenciais acopladas, como mostra a Eq. (1.8). Resolvendo este sistema, podemos obter a abundância relativa de cada núcleo em qualquer instante de tempo. Para calcular o tempo de congelamento, utilizamos o método da variação relativa da abundância. Este método consiste em monitorar o quanto a abundância total varia entre dois intervalos de tempo consecutivos, como mostra a equação abaixo:

$$\left| \frac{Y_i(t + \Delta t) - Y_i(t)}{Y_i(t)} \right| < \epsilon, \quad (4.8)$$

onde $\epsilon \approx 0.1\%$.

A Figura 50 mostra o tempo de congelamento do processo- r para diferentes condições iniciais. O menor tempo de congelamento obtido em todos os casos é ≈ 1 s, o que está em acordo com os resultados obtidos com modelos mais sofisticados (CHEN et al., 2023). Percebe-se também que, de forma geral, o tempo de congelamento cresce com o aumento da temperatura e densidade de nêutrons, chegando a 50 s para $T_9 = 6$ e $n_n = 10^{29}$ n/cm³. Esse acréscimo no tempo de congelamento é natural para condições de densidade e temperatura mais elevadas, uma vez que nessas condições há um fluxo de nêutrons muito intenso, tornando o processo de captura mais provável do que o decaimento- β .

5 Conclusões

Os modelos teóricos de massas atuais são incapazes de fornecer a precisão necessária para os cálculos de processo- r , uma vez que as abundâncias relativas são extremamente sensíveis a pequenas variações na energia de separação de nêutrons. Mesmo nos modelos mais sofisticados, ainda persistem incertezas sistemáticas que estão relacionadas às limitações e aproximações de cada modelo. Estas incertezas se propagam produzindo desvios consideráveis no resultado final. Com o objetivo de obter uma solução viável para contornar esse problema, propomos a construção de um modelo híbrido baseado no aprimoramento de resultados teóricos e experimentais, utilizando a técnica de Bayesian Neural Network. Para realizar o treinamento, recorreremos aos modelos mais citados na literatura e aos dados experimentais disponíveis, selecionando apenas aqueles que possuem incerteza experimental inferior a 100 keV. Verificou-se que, após o treinamento, o modelo WS4+BNN-6 apresentou o menor rms tanto nos dados de treinamento quanto nos dados de validação, sendo o modelo escolhido para a sequência do trabalho. Destacamos que o rms de 0.113 MeV obtido com o modelo WS4+BNN-6 representa o melhor aprimoramento com BNN até o presente momento.

Em trabalhos recentes, Wang e Jacobs divulgaram alguns resultados inéditos de massa dos isótopos de Zn e Tc. Estes núcleos não fazem parte do conjunto de treinamento e nem do conjunto de validação, pois não constavam no repositório AME2020. Com isso, vimos uma excelente oportunidade de testar a capacidade preditiva do nosso modelo, comparando as nossas previsões para estes núcleos com os novos dados. O resultado da comparação foi muito satisfatório, o modelo WS4+BNN-6 reproduziu com precisão as novas massas.

Uma das grandes vantagens do BNN está na sua capacidade de calcular incertezas. Com isso, nós calculamos a incerteza na predição das massas nucleares para todo o conjunto de núcleos. Os resultados mostram que a incerteza é muito pequena em regiões onde há dados experimentais disponíveis, uma vez que estes núcleos, em sua grande maioria, participaram do treinamento. Porém, à medida que nos afastamos da região de treinamento, a incerteza aumenta de forma gradativa. Destacamos as regiões nas proximidades da zona de treinamento; nessas regiões, a incerteza ainda é pequena, ≤ 1 MeV. Esse é um forte indicativo de que o BNN fornece resultados confiáveis nas proximidades da região de treinamento.

Outro avanço importante obtido neste trabalho foi a incorporação das primeiras transições proibidas ao modelo GTBD. As transições proibidas desempenham um papel fundamental na modelagem do decaimento- β , principalmente em núcleos ricos em nêutrons. Para esta implementação, seguimos o formalismo proposto por Takahashi e Yamada. Calculamos as

meias-vidas para os decaimentos- $\beta^\pm$ com o modelo GTBD (sem aprimoramentos) e com o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow+f.f.}$ (com as transições proibidas e massas aprimoradas com BNN). Quando comparado com os dados experimentais, o modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow+f.f.}$ mostrou-se muito mais eficaz, reduzindo o desvio na meia-vida em até 5 ordens de grandeza. Destacamos as melhorias obtidas para os núcleos com A-ímpar e ímpar-ímpar, que por serem deformados, o tratamento é mais complicado. Em ambientes astrofísicos, como em sítios de pré-supernova e supernova, não há dados experimentais para realizar qualquer comparação. Neste cenário, nos resta comparar os nossos resultados com outros modelos disponíveis na literatura. O modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow+f.f.}$ apresentou resultados similares aos sofisticados modelos Shell Model e QRPA.

Seguindo o formalismo proposto por Itoh, adicionamos as primeiras transições proibidas às seções de choque neutrino-núcleo. Os neutrinos são essenciais para a dinâmica estelar, uma vez que são responsáveis pela taxa de resfriamento. Novamente, os resultados experimentais para seções de choque neutrino-núcleo são escassos, principalmente para núcleos que participam do processo- r . Com isso, comparamos nossos resultados com o trabalho pioneiro de Itoh e outros modelos presentes na literatura, como o RPA. As seções de choque neutrino-núcleo aprimoradas estão em concordância com os outros modelos, evidenciando a importância das transições proibidas.

Como foi visto no capítulo 4, os núcleos ricos em nêutrons podem emitir um ou até mesmo dois nêutrons após o decaimento- β . Essa emissão ocorre sempre que o valor Q_β é maior que S_n . Trabalhos recentes indicaram que, mesmo não se tratando de um mecanismo principal de decaimento, o decaimento- β retardado desempenha um papel subsidiário importante para a determinação das abundâncias. Adicionamos esse novo decaimento ao modelo $\text{GTBD}_{BNN}^{allow+f.f.}$ e comparamos os resultados com os dados experimentais. Vale ressaltar que, os dados experimentais para a probabilidade de emissão de nêutrons apresentam uma incerteza percentual elevada, o que dificulta uma comparação precisa. Contudo, os nossos resultados em sua grande maioria encontra-se dentro da margem de erro fornecida pelos dados experimentais.

Através dos aprimoramentos realizados no modelo WS4 e GTBD, conseguimos calcular o tempo de congelamento do processo- r . As transições proibidas e as massas aprimoradas reduziram a distância entre os resultados obtidos com o modelo e os dados experimentais. Com isso, conseguimos obter taxas de decaimento mais realistas. Estas taxas são cruciais para a dinâmica do processo- r , taxas de decaimento demasiadamente elevadas fazem com que o processo- r estacione em uma determinada cadeia isotópica, retardando o acesso a cadeias mais pesadas. Os resultados obtidos para o tempo de congelamento estão em acordo com modelos sofisticados da literatura, da ordem ≈ 1 s.

Ressaltamos que, para um estudo mais detalhado do processo- r é necessário expandir

o modelo para fora do equilíbrio nuclear estatístico, ou seja, estudar o processo- r frio. Isso significa incluir novos efeitos e decaimentos, como o decaimento- α , fissão espontânea e induzida, ventos de neutrinos, captura de nêutrons, fotoemissão e etc.

Referências

- AMIEL, S.; FELDSTEIN, H. A semi-empirical treatment of neutron emission probabilities from delayed neutron precursors. *Physics Letters B*, v. 31, n. 2, p. 59–60, 1970.
- AN, F. P. et al. Measurement of the reactor antineutrino flux and spectrum at daya bay. *Phys. Rev. Lett.*, v. 116, p. 061801, 2016.
- ARCONES, A.; MARTÍNEZ-PINEDO, G. Dynamical r -process studies within the neutrino-driven wind scenario and its sensitivity to the nuclear physics input. *Phys. Rev. C*, v. 83, 2011.
- ARCONES, A.; THIELEMANN, F.-K. Neutrino-driven wind simulations and nucleosynthesis of heavy elements. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 40, 2012.
- ARNOULD, M.; GORIELY, S.; TAKAHASHI, K. The r -process of stellar nucleosynthesis: Astrophysics and nuclear physics achievements and mysteries. *Physics Reports*, v. 450, n. 4, p. 97–213, 2007.
- ATHAR, M. S.; AHMAD, S.; SINGH, S. Neutrino nucleus cross sections for low energy neutrinos at sns facilities. *Nuclear Physics A*, v. 764, p. 551–568, 2006.
- AUFDERHEIDE, M. et al. Electron capture and β -decay in presupernova stars. *The Astrophysical Journal*, v. 362, 1990.
- Aufderheide, M. B. et al. Search for Important Weak Interaction Nuclei in Presupernova Evolution. *ApJs*, v. 91, p. 389, 1994.
- BAHCALL, J. *Neutrino Astrophysics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
- BALANTEKIN, A.; FULLER, G. Neutrinos in cosmology and astrophysics. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, v. 71, p. 162–166, 2013.
- BENLLIURE, J. et al. Calculated nuclide production yields in relativistic collisions of fissile nuclei. *Nuclear Physics A*, v. 628, n. 3, 1998.
- BETHE-WEISZSÄCKER, C. F. v. Zur theorie der kernmassen. *Phys.*, v. 96, 1935.
- BIONTA, R. M. et al. Observation of a neutrino burst in coincidence with supernova 1987a in the large magellanic cloud. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 1494–1496, 1987.
- BOEHNLEIN, A. et al. Colloquium: Machine learning in nuclear physics. *Rev. Mod. Phys.*, v. 94, p. 031003, 2022.
- BORZOV, I. Beta-decay rates. *Nuclear Physics A*, v. 777, p. 645–675, 2006.
- BORZOV, I. N. Gamow-teller and first-forbidden decays near the r -process paths at $n = 50, 82$, and 126 . *Phys. Rev. C*, v. 67, p. 025802, 2003.

- BORZOV, I. N.; GORIELY, S. Weak interaction rates of neutron-rich nuclei and the r-process nucleosynthesis. *Phys. Rev. C*, v. 62, p. 035501, 2000.
- BRADY, M. *Evaluation and Application of Delayed Neutron Precursor Data*. Tese (Doutorado) — Texas A & M University, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- BRUENN, S. W.; HAXTON, W. C. Neutrino-nucleus interactions in core-collapse supernovae. *ApJ*, v. 376, p. 678, 1991.
- BURBIDGE, E. M. et al. Synthesis of the elements in stars. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 29, 1957.
- CAURIER, E. et al. The shell model as a unified view of nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, v. 77, p. 427–488, 2005.
- CHAN, K. Y. et al. Deep neural networks in the cloud: Review, applications, challenges and research directions. *Neurocomputing*, v. 545, p. 126327, 2023.
- CHEN, J. et al. Impact of nuclear β -decay half-life uncertainties on the r-process simulations. *The Astrophysical Journal*, The American Astronomical Society, v. 943, n. 2, 2023.
- COUNCIL, N. R. *Connecting Quarks with the Cosmos: Eleven Science Questions for the New Century*. Washington, DC: The National Academies Press, 2003.
- COWAN, J. J.; THIELEMANN, F.-K. R-process nucleosynthesis in supernovae. *Physics Today*, v. 57, p. 47, 2004.
- DILLMANN, I.; DIMITRIOU, P.; SINGH, B. Summary report of 1st research coordination meeting on development of reference database for betadelayed neutron emission. *International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria*, Tech. Rep. INDC(NDS), n. 0643, 2013.
- DIMITRIOU, P. et al. Development of a reference database for beta-delayed neutron emission. *Nuclear Data Sheets*, v. 173, p. 144–238, 2021.
- ĐAPO, H.; PAAR, N. Neutral-current neutrino-nucleus cross sections based on relativistic nuclear energy density functional. *Phys. Rev. C*, v. 86, p. 035804, 2012.
- DUAN, H.; KNELLER, J. P. Neutrino flavour transformation in supernovae. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 36, n. 11, p. 113201, 2009.
- DUARTE, S. *Desequilíbrio (n, γ) $\leftrightarrow$ no processo-r de nucleossíntese*. Dissertação (Mestrado) — Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 1977.
- DUFLO, J.; ZUKER, A. Microscopic mass formulas. *Phys. Rev. C*, v. 52, p. R23–R27, 1995.
- ENDO, F.; KOURA, H. Analysis of nuclear structure in the nuclear chart and improvement to the gross theory of β decay. *Phys. Rev. C*, v. 99, p. 034303, 2019.
- ENGEL, J. et al. β decay rates of r-process waiting-point nuclei in a self-consistent approach. *Phys. Rev. C*, v. 60, p. 014302, 1999.

- FALLOT, M. et al. New antineutrino energy spectra predictions from the summation of beta decay branches of the fission products. *Phys. Rev. Lett.*, v. 109, p. 202504, 2012.
- FANG, J. Y.; CHEN, J.; NIU, Z. M. Gross theory of β decay by considering the spin-orbit splitting from relativistic hartree-bogoliubov theory. *Phys. Rev. C*, v. 106, p. 054318, 2022.
- FAROOQ, F.; NABI, J.-U.; SHEHZADI, R. Validity of brink-axel hypothesis for calculations of allowed stellar weak rates of heavy nuclei. *Physica Scripta*, v. 98, n. 8, p. 085313, 2023.
- Fraidoon Omarzai. *Artificial Neural Networks (ANNs) In Depth*. 2024. Acessado em: 13 fev. 2025. Disponível em: <<https://medium.com/@fraidoonomarzai99/artificial-neural-networks-anns-in-depth-8d10befcd43e>>.
- FREBEL, A.; BEERS, T. C. The formation of the heaviest elements. *Physics Today*, v. 71, n. 1, 2018.
- FRÖHLICH, C. et al. Composition of the innermost core-collapse supernova ejecta. *The Astrophysical Journal*, v. 637, n. 1, p. 415, jan 2006.
- Fuller, G. M.; Fowler, W. A.; Newman, M. J. Stellar weak interaction rates for intermediate-mass nuclei. II - $A = 21$ to $A = 60$. *Apj*, v. 252, p. 715–740, 1982.
- Gabriel Costa. *A first insight into Bayesian Neural Networks (BNNs)*. 2022. Acessado em: 16 fev. 2025. Disponível em: <<https://medium.com/@costaleirbag/a-first-insight-into-bayesian-neural-networks-bnn-c767551e9526>>.
- GAIMARD, J.-J.; SCHMIDT, K.-H. A reexamination of the abrasion-ablation model for the description of the nuclear fragmentation reaction. *Nuclear Physics A*, v. 531, n. 3, 1991.
- GAO, F.; CHEN, Z.-R.; WANG, L.-J. Nuclear β spectrum from the projected shell model: Allowed one-to-one transition. *Phys. Rev. C*, v. 108, p. 054313, 2023.
- GÉRON, A. *Mãos à Obra: Aprendizado de Máquina com Scikit-Learn, Keras e TensorFlow*. Rio de Janeiro: O'REILLY, 2021.
- GORIELY, A. B. S.; JANKA, H.-T. r-PROCESS NUCLEOSYNTHESIS IN DYNAMICALLY EJECTED MATTER OF NEUTRON STAR MERGERS. *The Astrophysical Journal*, v. 738, n. 2, 2011.
- GORIELY, S.; CHAMEL, N.; PEARSON, J. M. Skyrme-hartree-fock-bogoliubov nuclear mass formulas: Crossing the 0.6 mev accuracy threshold with microscopically deduced pairing. *Phys. Rev. Lett.*, v. 102, p. 152503, 2009.
- GORIELY, S.; CHAMEL, N.; PEARSON, J. M. Hartree-fock-bogoliubov nuclear mass model with 0.50 mev accuracy based on standard forms of skyrme and pairing functionals. *Phys. Rev. C*, v. 88, p. 061302, 2013.
- GORIELY, S. et al. New fission fragment distributions and r -process origin of the rare-earth elements. *Phys. Rev. Lett.*, v. 111, 2013.
- GRUS, J. *Data Science do Zero*. Rio de Janeiro: O'REILLY, 2019.

- HAYEN, L. et al. First-forbidden transitions in reactor antineutrino spectra. *Phys. Rev. C*, v. 99, p. 031301, 2019.
- HEBB, D. *The organization of behavior; a neuropsychological theory*. New York: Willey, 1949.
- HERRERA, R. A.; JOHNSON, C. W.; FULLER, G. M. Modified brink-axel hypothesis for astrophysical gamow-teller transitions. *Phys. Rev. C*, v. 105, p. 015801, 2022.
- HIRATA, K. et al. Observation of a neutrino burst from the supernova sn1987a. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 1490–1493, 1987.
- HIX, W. R. et al. Consequences of nuclear electron capture in core collapse supernovae. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, 2003.
- HOFFMAN, R. D.; WOOSLEY, S. E.; QIAN, Y.-Z. Nucleosynthesis in neutrino-driven winds. ii. implications for heavy element synthesis. *The Astrophysical Journal*, v. 482, n. 2, p. 951, 1997.
- HOROWITZ, C. J. et al. r-process nucleosynthesis: connecting rare-isotope beam facilities with the cosmos. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 46, n. 8, 2019.
- ITOH, N.; KOHYAMA, Y. Statistical theory of nuclear neutrino capture (ii). inclusion of first-forbidden transitions. *Nuclear Physics A*, v. 306, p. 527–535, 1978.
- JACOBS, A. et al. Direct mass measurements of neutron-rich zinc and gallium isotopes: An investigation of the formation of the first *r*-process peak. *Phys. Rev. Lett.*, v. 134, 2025.
- JADON, S. *Introduction to Different Activation Functions for Deep Learning*. 2018. Acessado em: 16 fev. 2025. Disponível em: <<https://medium.com/@shrutijadon/survey-on-activation-functions-for-deep-learning-9689331ba092>>.
- KAJINO, T. et al. Current status of r-process nucleosynthesis. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, v. 107, p. 109–166, 2019.
- KAUR, A.; YÜKSEL, E.; PAAR, N. Electric dipole transitions in the relativistic quasiparticle random-phase approximation at finite temperature. *Phys. Rev. C*, v. 109, p. 014314, 2024.
- KAUR, A.; YÜKSEL, E.; PAAR, N. Finite-temperature effects in magnetic dipole transitions. *Phys. Rev. C*, v. 109, p. 024305, 2024.
- KAWANO, T.; MÖLLER, P.; WILSON, W. Calculation of delayed-neutron energy spectra in a quasiparticle random-phase approximation–hauser-feshbach model. *Phys. Rev. C*, v. 78, n. 054601, 2008.
- KHAN, E.; Van Giai, N.; GRASSO, M. Collective motions in hot exotic nuclei: the finite temperature continuum-qrrpa. *Nuclear Physics A*, v. 731, p. 311–316, 2004.
- KODAMA, T.; TAKAHASHI, K. R-process nucleosynthesis and nuclei far from the region of β -stability. *Nuclear Physics A*, v. 239, n. 3, 1975.
- KOLBE, E.; LANGANKE, K.; FULLER, G. M. Neutrino-induced fission of neutron-rich nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 111101, 2004.

- KONDEV, F. et al. The nubase2020 evaluation of nuclear physics properties. *Chinese Physics C*, v. 45, n. 3, 2021.
- KONDOH T. TACHIBANA, M. Y. T. Improvement of the gross theory of β -decay. i: Formalism. *Progress of Theoretical Physics*, v. 74, n. 4, 1985.
- KOROBKIN, O. et al. On the astrophysical robustness of the neutron star merger r-process. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 426, n. 3, 2012.
- KOURA, H. Ground-state properties of heavy and superheavy nuclei predicted by nuclear mass models. *AIP Conference Proceedings*, v. 704, n. 1, 2004.
- KOURA, H.; CHIBA, S. Improvement to the gross theory of β decay by inclusion of change in parity. *Phys. Rev. C*, v. 95, p. 064304, 2017.
- KOURA, H. et al. Nuclidic mass formula on a spherical basis with an improved even-odd term. *Progress of Theoretical Physics*, v. 113, n. 2, p. 305–325, 2005.
- KOURA, H. et al. Improvement of gross theory of beta-decay for application to nuclear data. *EPJ Web of Conferences*, v. 146, n. 12003, 2017.
- KRATZ, K. L.; HERRMANN, G. Systematics of neutron emission probabilities from delayed neutron precursors. *Zeitschrift für Physik*, v. 5, n. 263, 1973.
- KRUZIC, G.; OISHI, T.; PAAR, N. Evolution of magnetic dipole strength in $^{100-140}\text{Sn}$ isotope chain and the quenching of nucleon g factors. *Phys. Rev. C*, v. 103, p. 054306, 2021.
- KRUZIC, G. et al. Magnetic dipole excitations based on the relativistic nuclear energy density functional. *Phys. Rev. C*, v. 102, p. 044315, 2020.
- KUMAR, A.; SRIVASTAVA, P. C. Shell-model description for the first-forbidden β^- decay of ^{207}Hg into the one-proton-hole nucleus ^{207}Tl . *Nuclear Physics A*, v. 1014, p. 122255, 2021.
- KYUTOKU, K. et al. Neutrino transport in black hole-neutron star binaries: Neutrino emission and dynamical mass ejection. *Phys. Rev. D*, v. 97, 2018.
- LANGANKE, K. et al. Electron capture rates on nuclei and implications for stellar core collapse. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, 2003.
- LANGANKE, K.; MARTÍNEZ-PINEDO, G.; SIEVERDING, A. Neutrino-nucleus reactions and their role in supernova nucleosynthesis. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 1643, n. 1, 2020.
- LANGANKE, K.; THIELEMANN, F.-K.; WIESCHER, M. Nuclear astrophysics and nuclei far from stability. *Lect. Notes Phys.*, v. 651, p. 383–467, 2004.
- LATTIMER, J. M.; SCHRAMM, D. N. Black-hole-neutron-star collisions. *Astrophys. J. Lett.*, v. 192, 1974.
- LATTIMER, J. M.; SCHRAMM, D. N. Tidal disruption of neutron stars by black-holes in close binaries. 1976.

LIANG, J. et al. Compilation and evaluation of beta-delayed neutron emission probabilities and half-lives for $z > 28$ precursors. *Nuclear Data Sheets*, v. 168, p. 1–116, 2020.

LICCARDO, V. et al. Nuclear processes in astrophysics: Recent progress. *The European Physical Journal A*, v. 54, 2018.

LIU, M. et al. Further improvements on a global nuclear mass model. *Phys. Rev. C*, v. 84, p. 014333, 2011.

MAGRINI, L. et al. The gaia-eso survey: the origin and evolution of s-process elements. *A&A*, v. 617, p. A106, 2018.

MARKETIN, T.; HUTHER, L.; MARTÍNEZ-PINEDO, G. Large-scale evaluation of β -decay rates of r -process nuclei with the inclusion of first-forbidden transitions. *Phys. Rev. C*, v. 93, p. 025805, 2016.

MARTIN, D. *r-process nucleosynthesis: on the astrophysical conditions and the impact of nuclear physics input*. Tese (Doutorado) — Technische Universität Darmstadt, 2017.

MARTÍNEZ-PINEDO, G.; LANGANKE, K.; DEAN, D. Competition of electron capture and beta-decay rates in supernova collapse. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 126, n. 2, p. 493, 2000.

MARTÍNEZ-PINEDO, G. et al. The role of fission in the r -process. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, v. 59, n. 1, 2007.

MATOŠ, M. et al. Time-of-flight mass measurements of exotic nuclei. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 696, p. 171–179, 2012.

McCULLOCH, W.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The Bulletin of Mathematical Biophysics*, v. 5, p. 115–133, 1943.

McCUTCHAN, E. A. et al. Improving systematic predictions of β -delayed neutron emission probabilities. *Phys. Rev. C*, v. 86, p. 041305, 2012.

MEISEL, Z.; GEORGE, S. Time-of-flight mass spectrometry of very exotic systems. *International Journal of Mass Spectrometry*, v. 349–350, p. 145–150, 2013.

MEITNER, L.; STRASSMANN, F.; HAHN, O. Kuenstliche umwandlungsprozesse bei bestrahlung des thoriums mit neutronen; auftreten isomerer reihen durch ab-spaltung von α -strahlen. *Physik*, v. 109, n. 538, 1938.

MEYER, B. S.; MCLAUGHLIN, G. C.; FULLER, G. M. Neutrino capture and r -process nucleosynthesis. *Phys. Rev. C*, v. 58, p. 3696–3710, 1998.

MICHIMASA, S. et al. Magic nature of neutrons in ^{54}Ca : First mass measurements of $^{55}\text{--}^{57}\text{Ca}$. *Phys. Rev. Lett.*, v. 121, p. 022506, 2018.

MIERNIK, K. Phenomenological model of β -delayed neutron-emission probability. *Phys. Rev. C*, v. 88, p. 041301, 2013.

- MINATO, F.; MARKETIN, T.; PAAR, N. *Phys. Rev. C*, v. 104, p. 044321, 2021.
- MÖLLER, P.; PFEIFFER, B.; KRATZ, K.-L. New calculations of gross β -decay properties for astrophysical applications: Speeding-up the classical r process. *Physical Review C*, v. 67, n. 5, 2003.
- MÖLLER, P. et al. Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM(2012). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, v. 109, 2016.
- MUMPOWER, M. et al. The impact of individual nuclear properties on r-process nucleosynthesis. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, v. 86, p. 86–126, 2016.
- MYERS, W. D.; SWIATECKI, W. J. Nuclear masses and deformations. *Nuclear Physics*, v. 81, n. 1, p. 1–60, 1966.
- NABI, J.-U.; KLAPDOR-KLEINGROTHAUS, H. Microscopic calculations of weak interaction rates of nuclei in stellar environment for $a = 18$ to 100. *EPJ A*, v. 911, n. 5, p. 337–339, 1999.
- NABI, J.-U.; NAYAB, M.; JOHNSON, C. W. How effective is the brink–axel hypothesis for astrophysical weak rates? *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 49, n. 6, p. 065201, 2022.
- NABI, J.-U.; ULLAH, A.; KHAN, A. A. Investigation of important weak interaction nuclei in presupernova evolution. *The Astrophysical Journal*, v. 911, n. 2, p. 93, 2021.
- NABI, J.-U.; ÇAKMAK, N.; IFTIKHAR, Z. First-forbidden β -decay rates, energy rates of β -delayed neutrons and probability of β -delayed neutron emissions for neutron-rich nickel isotopes. *The European Physical Journal A*, v. 52, 2016.
- NASA. 2023. <<https://www.nasa.gov/>>. Accessed: 2023-02-28.
- NIKAS, S. *Nucleosynthesis on the aftermath of neutron star mergers: The creation of the first r-process peak*. Tese (Doutorado) — Technische Universität Darmstadt, 2021.
- NIKISĆ, T. et al. β -decay rates of r -process nuclei in the relativistic quasiparticle random phase approximation. *Phys. Rev. C*, v. 71, p. 014308, 2005.
- NISHIMURA, N. et al. The r -process in black hole-neutron star mergers based on a fully general-relativistic simulation. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 665, 2016.
- NIU, Z.; LIANG, H. Nuclear mass predictions based on bayesian neural network approach with pairing and shell effects. *Physics Letters B*, v. 778, p. 48–53, 2018.
- NIU, Z. M.; LIANG, H. Z. Nuclear mass predictions with machine learning reaching the accuracy required by r -process studies. *Phys. Rev. C*, v. 106, 2022.
- OISHI, T.; KRUZIĆ, G.; PAAR, N. Role of residual interaction in the relativistic description of $m1$ excitation. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 47, n. 11, p. 115106, 2020.

OISHI, T.; RAVLIĆ, A.; PAAR, N. Symmetry breaking of gamow-teller and magnetic-dipole transitions and its restoration in calcium isotopes. *Phys. Rev. C*, v. 105, p. 064309, 2022.

OTSUKA, T. et al. Monte carlo shell model for atomic nuclei. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, v. 47, n. 1, p. 319–400, 2001.

PANOV, I. et al. Calculations of fission rates for r-process nucleosynthesis. *Nuclear Physics A*, v. 747, n. 2, 2005.

QIAN, Y.-Z. Neutrino-induced fission and r-process nucleosynthesis. *The Astrophysical Journal*, v. 569, n. 2, p. L103, 2002.

QIAN, Y.-Z.; WOOSLEY, S. Nucleosynthesis in neutrino-driven winds. i. the physical conditions. *The Astrophysical Journal*, v. 471, n. 1, 1996.

RAVLIĆ, A. et al. Evolution of β -decay half-lives in stellar environments. *Phys. Rev. C*, v. 104, p. 054318, 2021.

RING, P.; SCHUCK, P. *The nuclear many-body problem*. Berlin: Springer Science & Business Media, 2004.

ROBERTS, L. F. et al. The influence of neutrinos on r-process nucleosynthesis in the ejecta of black hole–neutron star mergers. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 464, n. 4, 2016.

ROBERTS, R.; MEYER, R.; WANG, P. Further observations on the splitting of uranium and thorium. *Physical Review*, v. 55, n. 510, 1939.

ROBIN, C. E. P.; MARTÍNEZ-PINEDO, G. Competition between allowed and first-forbidden β decay in r-process waiting-point nuclei within a relativistic beyond-mean-field approach. *Phys. Rev. C*, v. 110, 2024.

ROCHA, S. da. *Taxas de decaimento beta e captura de elétrons dos estados fundamental e primeiro excitado em núcleos de estrelas massivas no estágio de pré-supernova*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Santa Cruz, 2018.

RODRÍGUEZ, U. B. *Rede neural Bayesiana aplicada a dados nucleares na exploração de novos nuclídeos e decaimentos – Elementos superpesados em foco*. Tese (Doutorado) — Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2020.

RODRÍGUEZ, U. B. et al. 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*, v. 46, n. 11, p. 115109, 2019.

SAHA, M. N. Liii. ionization in the solar chromosphere. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 40, n. 238, 1920.

SAHA, M. N.; FOWLER, A. On a physical theory of stellar spectra. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, v. 99, n. 697, 1921.

- SAMANA, A. R. et al. The gross theory model for neutrino-nucleus cross-section. *New Journal of Physics*, v. 10, n. 3, 2008.
- SAMPAIO, J. M. et al. Neutral-current neutrino reactions in the supernova environment. *Physics Letters B*, v. 529, n. 1-2, p. 19–25, 2002.
- SCHECHTER, H.; BERTULANI, C. A. *Introdução à Física Nuclear*. Rio de Janeiro: Editora UFRJ, 2007.
- SCHRAMM, D. N. Explosive r-PROCESS Nucleosynthesis. *The Astrophysical Journal*, v. 185, 1973.
- SHARMA, S.; SRIVASTAVA, P. C.; KUMAR, A. Forbidden beta decay properties of $^{135,137}\text{Te}$ using shell-model. *Nuclear Physics A*, v. 1031, p. 122596, 2023.
- SHARMA, S. et al. Shell-model description for the properties of the forbidden β^- decay in the region “northeast” of ^{208}Pb . *Phys. Rev. C*, v. 106, p. 024333, 2022.
- SHEHZADI, R.; NABI, J.-U.; FAROOQ, F. Half-life prediction of some neutron-rich exotic nuclei prior to peak $a = 130$. *Physica Scripta*, v. 97, n. 11, 2022.
- SHEHZADI, R.; NABI, J.-U.; FAROOQ, F. Beta decay and electron capture rates of manganese isotopes in astrophysical environments. *New Astronomy*, v. 98, p. 101937, 2023.
- SHIBAGAKI, S. et al. Relative contributions of the weak, main, and fission-recycling r-process. *The Astrophysical Journal*, v. 816, n. 2, 2016.
- SHIMIZU, N. et al. Monte carlo shell model studies with massively parallel supercomputers. *Physica Scripta*, v. 92, n. 6, p. 063001, 2017.
- SHIMIZU, N. et al. Variational approach with the superposition of the symmetry-restored quasiparticle vacua for nuclear shell-model calculations. *Phys. Rev. C*, v. 103, p. 014312, 2021.
- SIEVERDING, A. et al. The ν -process in the light of an improved understanding of supernova neutrino spectra. *The Astrophysical Journal*, v. 865, n. 2, p. 143, 2018.
- SNEDEN, C.; COWAN, J. J. Genesis of the heaviest elements in the milky way galaxy. *Science*, v. 299, n. 5603, 2003.
- STAUDT, A. et al. Second-generation microscopic predictions of beta-decay half-lives of neutron-rich nuclei. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, v. 44, n. 1, p. 79–132, 1990.
- SUHONEN, J. *From Nucleons to Nucleus*. Berlin: Springer, 2006.
- SUN, B. et al. Toward precision mass measurements of neutron-rich nuclei relevant to r-process nucleosynthesis. *Front. Phys.*, v. 10, 2015.
- SURMAN, R. et al. Source of the rare-earth element peak in r -process nucleosynthesis. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, 1997.
- SUZUKI, T. Excitation energies of the giant gamow-teller resonance states. *Physics Letters B*, v. 104, n. 2, p. 92–94, 1981.

- SUZUKI, T. The giant gamow-teller resonance states. *Nuclear Physics A*, v. 379, n. 1, 1982.
- SUZUKI, T. et al. β decays of isotones with neutron magic number of $n = 126$ and r -process nucleosynthesis. *Phys. Rev. C*, v. 85, p. 015802, 2012.
- TACHIBANA, T.; YAMADA, M.; YOSHIDA, Y. Improvement of the gross theory of β -decay. ii: One-particle strength function. *Progress of Theoretical Physics*, v. 84, n. 4, 1990.
- TAKAHASHI, K. Gross theory of first forbidden β -decay. *Progress of Theoretical Physics*, v. 45, n. 5, 1971.
- TAKAHASHI, K.; WITTI, J.; JANKA, H.-T. Nucleosynthesis in neutrino-driven winds from protoneutron stars ii. the r -process. *Astronomy and Astrophysics*, v. 286, 1994.
- TAKAHASHI, K.; YAMADA, M. Gross theory of nuclear β -decay. *Progress of Theoretical Physics*, v. 41, n. 6, 1969.
- TAKAHASHI, K.; YAMADA, M.; KONDOH, T. Beta-decay half-lives calculated on the gross theory. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, v. 12, n. 1, 1973.
- TAKAHASHI, K.; YOKOI, K. Beta-decay rates of highly ionized heavy atoms in stellar interiors. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, v. 36, n. 3, p. 375–409, 1987.
- TAN, L. et al. A novel method for stellar electron-capture rates of excited nuclear states. *Physics Letters B*, v. 805, p. 135432, 2020.
- TARIFEÑO-SALDIVIA, A. et al. Conceptual design of a hybrid neutron-gamma detector for study of β -delayed neutrons at the rib facility of riken. *Journal of Instrumentation*, v. 12, n. 04, p. P04006, 2017.
- THIELEMANN, F.-K. et al. Neutron star mergers and nucleosynthesis of heavy elements. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, v. 67, n. 1, 2017.
- UTAMA, R.; PIEKAREWICZ, J. Refining mass formulas for astrophysical applications: A bayesian neural network approach. *Phys. Rev. C*, v. 96, p. 044308, 2017.
- WANG, B.-L.; WANG, L.-J. First-forbidden transition of nuclear β decay by projected shell model. *Physics Letters B*, v. 850, p. 138515, 2024.
- WANG, K.-L. et al. Mass measurements of neutron-rich nuclei near $n = 70$. *Phys. Rev. C*, v. 109, p. 035806, 2024.
- WANG, L.-J. et al. Reduction of collectivity at very high spins in ^{134}Nd : Expanding the projected-shell-model basis up to 10-quasiparticle states. *Phys. Rev. C*, v. 93, p. 034322, 2016.
- WANG, M. et al. The ame2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, v. 41, n. 3, p. 030003, 2017.
- Wang, M. et al. The AME2016 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. *Chinese Physics C*, v. 41, n. 3, 2017.

WANG, N.; LIU, M.; WU, X. Modification of nuclear mass formula by considering isospin effects. *Phys. Rev. C*, v. 81, p. 044322, 2010.

WANG, N. et al. Surface diffuseness correction in global mass formula. *Physics Letters B*, v. 734, p. 215–219, 2014.

WOOSLEY, S. et al. The nu-process. *ApJ*, v. 356, p. 272, 1990.

WU, M.-R. et al. Production of the entire range of r-process nuclides by black hole accretion disc outflows from neutron star mergers. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 463, n. 3, 2016.

YÜKSEL, E. et al. Multipole excitations in hot nuclei within the finite temperature quasiparticle random phase approximation framework. *Phys. Rev. C*, v. 96, p. 024303, 2017.

YÜKSEL, E. et al. Nuclear excitations within microscopic edf approaches: Pairing and temperature effects on the dipole response. *The European Physical Journal A*, v. 55, 2019.

YÜKSEL, E.; SOYDANER, D.; BAHTIYAR, H. Nuclear mass predictions using machine learning models. *Phys. Rev. C*, v. 109, 2024.

ZHI, Q. et al. Shell-model half-lives including first-forbidden contributions for *r*-process waiting-point nuclei. *Phys. Rev. C*, v. 87, p. 025803, 2013.

ZHU, J.-P. et al. Kilonova emission from black hole–neutron star mergers. II. luminosity function and implications for target-of-opportunity observations of gravitational-wave triggers and blind searches. *The Astrophysical Journal*, v. 917, 2021.

ÇAKMAK Şadiye; ÇAKMAK, N. Beta decay logft values for zinc isotopes by using pn-qrpa. *Nuclear Physics A*, v. 1015, p. 122287, 2021.