

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**FUSÃO COMPLETA E INCOMPLETA DE
NÚCLEOS FRACAMENTE LIGADOS**

GUILHERME DOMINGUES KOLINGER

Porto Alegre
2015

Guilherme Domingues Kolinger

**FUSÃO COMPLETA E INCOMPLETA DE NÚCLEOS
FRACAMENTE LIGADOS¹**

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Sergio Ricardo de Azevedo Souza

Co-orientador: Prof. Dr. Raul Donangelo^a

^aUniversidade Federal do Rio de Janeiro e Universidad de la Republica (Uruguai)

Porto Alegre
2015

¹O presente trabalho foi realizado com financiamento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Sumário

Agradecimentos

Resumo

Abstract

1	Introdução	p. 4
1.1	Reações nucleares e fusão	p. 5
1.2	Reações com núcleos exóticos	p. 8
1.3	Motivação	p. 11
2	Tratamento teórico	p. 13
2.1	Tratamento puramente clássico	p. 13
2.1.1	Espalhamento clássico	p. 13
2.1.2	Fusão clássica	p. 14
2.1.3	Modelos clássicos	p. 15
2.2	Tratamento puramente quântico	p. 16
2.2.1	Espalhamento ondulatório	p. 16
2.2.2	Seção de choque de fusão	p. 18
2.2.3	Ondas Parciais	p. 19
2.2.4	Matriz de espalhamento e <i>Phase Shift</i>	p. 20
2.2.5	Modelo óptico	p. 22
2.3	Canais Acoplados	p. 23
2.3.1	Acoplamento com estados do contínuo	p. 27
2.4	Aproximação semi-clássica	p. 29
2.4.1	Seção de choque semi-clássica	p. 29
2.4.2	Potencial de interação	p. 30
2.4.3	Auto-funções	p. 31
2.4.4	Evolução temporal	p. 32

2.4.5	Distribuição de momentum relativo	p. 33
2.4.6	Seções de choque de fusão	p. 34
3	Aplicação Computacional	p. 38
3.1	Funções de onda	p. 38
3.2	Fatores de forma	p. 39
3.3	Dinâmica	p. 40
3.4	Seções de choque	p. 41
3.5	Otimizações	p. 42
4	Resultados e Discussões	p. 44
4.1	O sistema	p. 44
4.2	Os potenciais ópticos de interação com o alvo	p. 45
4.3	Convergência dos resultados	p. 47
4.3.1	Energia máxima do contínuo	p. 47
4.3.2	Densidade de <i>bins</i> por MeV	p. 48
4.3.3	Número de ondas parciais	p. 48
4.3.4	Multipolaridade máxima	p. 50
4.4	Análise dos resultados	p. 51
4.4.1	Diferentes discretizações do contínuo	p. 51
4.4.2	Diferentes potenciais ópticos	p. 52
4.4.3	Outro projétil: ^{10}Be	p. 53
4.5	Comparação com dados experimentais	p. 54
5	Considerações finais	p. 57
	Apêndice A – Cálculo das funções de onda para os fatores de forma	p. 59
A.1	O método de Numerov	p. 59
A.2	Aplicação à solução dos estados ligados	p. 60
A.3	Determinação do auto-valor	p. 62
	Referências Bibliográficas	p. 65

Agradecimentos

Primeiramente agradeço à minha família, em especial aos meus pais, Harry e Miriam, pelo apoio incondicional às minhas escolhas pessoais, sempre ajudando com tudo que fosse possível e compreendendo a minha ausência em diversos momentos durante esses últimos anos. Não posso deixar de citar também minha vó Luci, meu irmão Luis Fernando e minha namorada, Débora, por todo apoio que me forneceram para que eu pudesse completar esse trabalho.

Essa dissertação certamente não existiria se não fosse a participação do meu orientador, Sergio, sempre presente, desde às reuniões semanais para discutir assuntos relacionados a este trabalho até às conversas triviais do dia-a-dia, tornado-se um amigo. Meu coorientador, Raul, também sempre esteve presente nas grandes discussões, mesmo morando em outro país. Sou muito grato por toda a atenção que eles sempre me deram.

Não posso deixar de agradecer aos meu grandes amigos, desde aqueles presentes diariamente para tomar um café após o almoço até aqueles que resolveram conquistar todos os continentes desse mundo afora, sejam eles Físicos ou não. Felizmente vivemos em um tempo em que distâncias físicas não significam distâncias nas amizades.

Um muito obrigado a todas essas pessoas, tenham elas influenciado a realização desse trabalho direta ou indiretamente.

*When everyone else is more comfortable remaining voiceless
Rather than fighting for humans that have had their rights stolen
I might not be the same, but that's not important
No freedom 'til we're equal, damn right I support it*

Macklemore and Ryan Lewis (featuring Mary Lambert)
Same Love

Resumo

Com a disponibilidade de feixes instáveis, o interesse em núcleos longe do vale de estabilidade cresceu consideravelmente [1] e abriu novas possibilidades na Física Nuclear [2, 3]. Um exemplo importante é o processo de fusão de núcleos exóticos, um mecanismo mais complexo do que a reação de fusão usual entre núcleos fortemente ligados. No primeiro caso há a possibilidade de quebra do projétil, podendo levar à fusão incompleta, onde um ou mais, porém não todos, os fragmentos do projétil são absorvidos pelo alvo enquanto parte da carga do projétil escapa da região de interação. Também pode ocorrer a absorção sequencial dos fragmentos, produzindo o mesmo núcleo composto de uma reação direta [2]. O entendimento dessa diversidade de processos pode fornecer informações importantes sobre propriedades nucleares.

No presente trabalho, estudamos um procedimento semi-clássico que considera a possibilidade de fusão incompleta, fusão completa direta e fusão completa sequencial, baseada nos trabalhos das Referências [1, 4], que estudam a colisão ${}^6\text{Li} + {}^{209}\text{Bi}$ e apresentam bom acordo com resultados experimentais. O desenvolvimento de um código simples, porém eficiente, que possibilite o uso deste procedimento semi-clássico pela comunidade científica é de grande importância, uma vez que sua aplicação a uma vasta gama de problemas possibilitará melhor entendimento dos diferentes mecanismos envolvidos em reações com núcleos exóticos. Neste trabalho estudamos as colisões dos projéteis ${}^{10,11}\text{Be}$ no alvo ${}^{209}\text{Bi}$, um sistema que nunca foi estudado com o modelo semi-clássico.

O objetivo desta dissertação é o desenvolvimento de tal código para o estudo da fusão de núcleos fracamente ligados e torná-lo disponível à comunidade da Física Nuclear através de uma base de programas científicos.

Abstract

With the availability of unstable beams, the interest in nuclei far from the stability valley has grown considerably [1] and has opened new possibilities in Nuclear Physics [2,3]. An important example is the fusion process of exotic nuclei, which is a much more complex mechanism than the usual fusion process that takes place between strongly bound nuclei. In the former situation there is the possibility of projectile breakup, leading to incomplete fusion, where one or more, but not all, of the breakup fragments are absorbed by the target whereas part of the projectile's charge escapes the interaction region. It can also happen that all the projectile's fragments are sequentially absorbed by the target, producing the same compound nucleus as in the case of direct fusion [2]. The understanding of this diversity of processes can provide important information on the properties of nuclei.

In the present work, we study a semiclassical procedure that takes into account the possibility of incomplete fusion, direct complete fusion and sequential complete fusion, based on References [1,4] that study the collision ${}^6\text{Li} + {}^{209}\text{Bi}$ and show good agreement with experimental data. The development of a simple, yet efficient code that enables the scientific community to use this semiclassical procedure is of great significance, since its application to a variety of systems will allow a better understanding of the different mechanisms involved in reactions with exotic nuclei. In this work we have studied the collisions of the projectiles ${}^{10,11}\text{Be}$ in the target ${}^{209}\text{Bi}$, a system never studied with the semi-classical model before.

The purpose of this dissertation is the development of such a code to study the fusion process of weakly bound nuclei and make it available to the Nuclear Physics community through a repository of scientific computer programs.

1 *Introdução*

As primeiras idéias sobre a composição da matéria vêm desde os antigos pensadores gregos. Até o Século XVIII, com Dalton, acreditou-se de que todo corpo com massa era constituído de uma unidade elementar e indivisível, que recebeu o nome de **átomo** [5]. Entretanto a história moderna da Física Nuclear começou no final do Século XIX, em 1896, com a descoberta da radioatividade na França por H. A. Becquerel [6]. Em 1909, Geiger e Mardsen estudaram o espalhamento de partículas alfa (núcleos de hélio) através de finas folhas de ouro e prata [7]. Nestes estudos foi verificado que a cada 8000 projéteis um era retroespalhado, enquanto a grande maioria dos outros sofria uma pequena deflexão na sua trajetória de até um grau. Analisando estes dados, Rutherford (1911) chegou à hipótese do núcleo atômico positivo (contendo essencialmente toda a massa do átomo) cercado por uma nuvem eletrônica com um raio aproximadamente cinco ordens de grandeza maior que o desse próprio núcleo [7]). Dois anos depois, a hipótese de Rutherford foi confirmada por Geiger e Mardsen, derrubando de vez o modelo de J. J. Thomson que afirmava que o átomo era uma esfera sólida contendo cargas positivas e negativas (o chamado modelo do “Pudim de Passas”) e reafirmando o modelo do átomo nuclear [8].

Em 1919 Rutherford verificou a emissão de prótons aos incidir partículas alfa em átomos de nitrogênio, realizando a primeira transmutação em laboratório [6, 7]. Com os trabalhos de de Broglie (1924), Schrödinger, Born, Heisenberg e Jordan (1926) houve o desenvolvimento da Mecânica Quântica [9] e foi possível avançar mais nos estudos do núcleo atômico. Até 1932, acreditava-se que o núcleo era composto apenas por prótons, porém os estudos de Chadwick mostraram a existência de outra partícula, essa de carga neutra: o **nêutron** [5–8]. No mesmo ano, Heisenberg propôs que ambos, próton e nêutron, formavam o núcleo [6] e então receberam o nome de nucleons. Em seguida, Niels Bohr propôs o Modelo da Gota Líquida (1936) para o núcleo [8], considerando interações coletivas entre os nucleons.

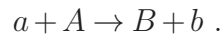
Em 1939, Hahn e Strassmann descobriram a fissão nuclear ao quebrar núcleos pesados em dois mais leves na captura de um nêutron. Fermi e colaboradores, nos EUA, construíram em 1942 o primeiro reator nuclear [6], possibilitando a geração de energia elétrica através da fissão induzida de átomos pesados. Tais estudos também levaram à possibilidade de fabricar armas nucleares de destruição em massa. Em 1945, na fase final da Segunda Guerra Mundial, foram usadas as únicas duas armas nucleares em uma guerra até hoje, dia 6 de agosto às 08:15 em Hiroshima e 9 de agosto às 11:02 em Nagasaki [10–12]. Ambas armas foram desenvolvidas e usadas pelos EUA.

Nos meados do Século XX vieram as outras contribuições importantes para a base teórica da estrutura nuclear, com o Modelo de Camadas (1949) de Mayer (EUA) e Haxel, Jensen e Suess (Alemanha), e o Modelo Coletivo (1953) de Aage Bohr e Ben Mottelson

(Dinamarca) [6].

1.1 Reações nucleares e fusão

A colisão entre dois núcleos é chamada de reação nuclear e, assim como numa reação química, os produtos finais podem ser diferentes dos iniciais [13]. Seja, genericamente, um projétil a incidindo em um alvo A que, por simplicidade, está em repouso em relação ao observador. Como resultado da colisão temos a formação de um núcleo B e a emissão de uma partícula b [8]:



Porém, reações nucleares não estão limitadas apenas a pares de núcleos. Reações entre um núcleo com qualquer partícula e radiação também são chamadas assim, mas nesta dissertação o foco será para colisões de núcleos. A Figura 1.1 representa esquematicamente um experimento de espalhamento, ou seja, pode também representar uma colisão nuclear.

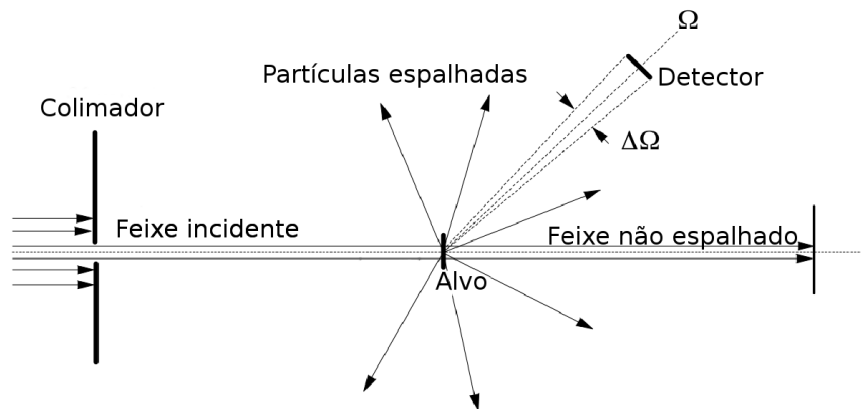


Figura 1.1: Representação esquemática de um experimento de espalhamento: incidência de um feixe de partículas em um alvo estacionário [14].

Os canais de reação descrevem a física envolvida em cada colisão, sendo de grande importância para o entendimento qualitativo e quantitativo de uma reação nuclear. Antes da colisão o sistema se encontra no canal de entrada com ambos núcleos no estado fundamental. Várias possibilidades existem no canal de saída, de acordo com a energia disponível para a colisão. No canal elástico, apenas as direções de movimento (e possivelmente os momentos angulares) das partículas são alteradas, mas não há a produção de excitações intrínsecas nos núcleos [15]. Quando o projétil e o alvo mantêm suas identidades mas um ou ambos ficam excitados (*i.e.*, com energia intrínseca mais alta) após a colisão, diz-se que tal colisão tem como canal de saída o espalhamento inelástico. A maioria das reações nucleares apresenta um núcleo excitado no canal de saída. Nos chamados canais de reação, o projétil e/ou alvo mudam de identidade, podendo ser observadas mais de duas partículas no final da colisão.

Uma quantidade importante nos canais inelástico e de reação é a diferença de energia entre os canais de entrada e de saída, chamado de valor- Q :

$$Q \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon_\beta \quad , \quad (1.1)$$

onde ε_0 é a energia do canal de entrada e ε_β é a energia do canal- β de saída (e $\varepsilon_i = m_i c^2$). De fato, dada a conservação de energia, o Q está diretamente relacionado com a diferença de energia cinética entre os canais de saída e entrada. Sendo $E = K_i + m_i c^2$ a energia total, a Eq.(1.1) assume a forma [8, 14]:

$$Q = K_\beta - K_0 \quad . \quad (1.2)$$

Um dos parâmetros importantes que define o resultado de uma reação nuclear é o parâmetro de impacto. A Figura 1.2 mostra uma representação dos possíveis canais de saída de uma colisão dados diferentes parâmetros de impacto. As colisões onde não há grande aproximação entre o projétil e o alvo levam ao canal elástico, enquanto um parâmetro de impacto menor leva aos canais inelásticos, como colisões profundamente inelásticas e fusões incompletas [16]. Colisões mais centrais podem levar à fusão. A Figura 1.3 mostra os mesmos mecanismos em termos do momento angular orbital associado a cada colisão. Nota-se que o espalhamento elástico está associado a maiores valores de momento angular [17].

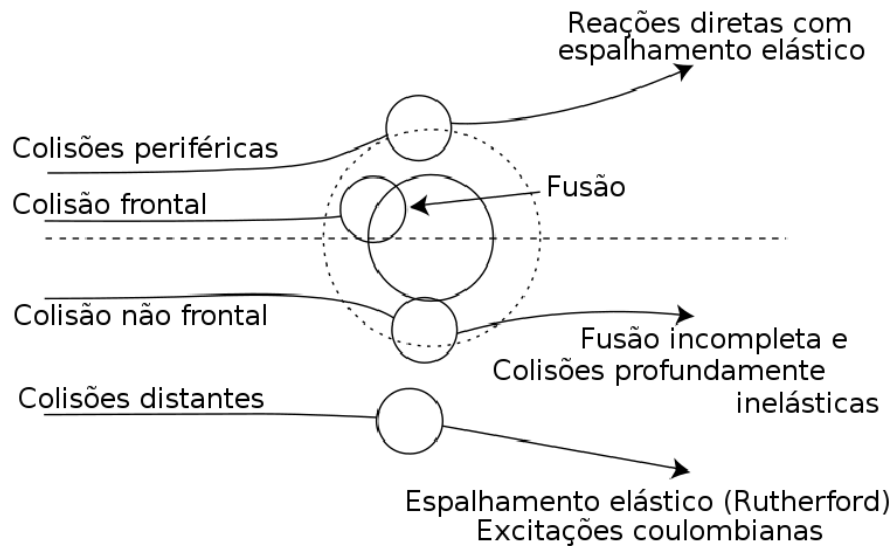


Figura 1.2: Esquema de classificação de colisões baseado no parâmetro de impacto [17].

As colisões quasi-elásticas estão associadas a grandes valores de momento angular e parâmetro de impacto (ainda menores que no caso do espalhamento elástico). Nelas, o

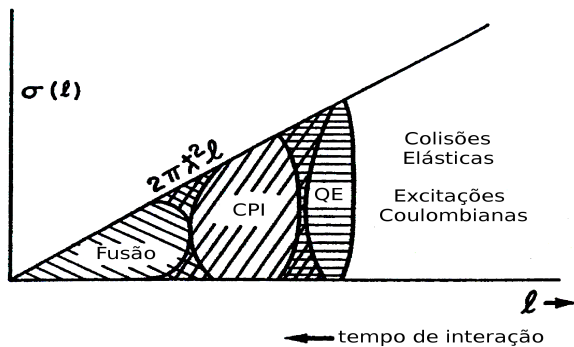


Figura 1.3: Esquema de classificação de colisões baseado no momento angular transferido. De menor transferência à maior: fusão, colisões profundamente inelásticas, colisões quasi-elásticas, colisões elásticas e excitações coulombianas [15].

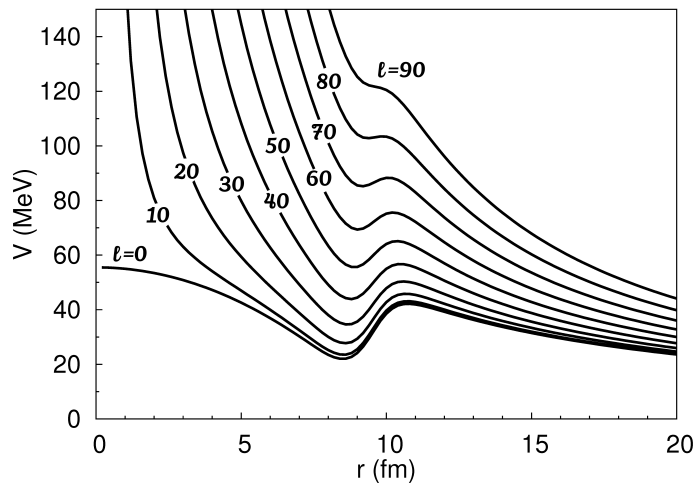


Figura 1.4: Soma dos potenciais nuclear, coulombiano e centrífugo para o sistema $^{11}\text{Be}+^{209}\text{Bi}$ para diversos valores de momento angular l (indicados no gráfico). Note que com o aumento de l o poço do potencial diminui até desaparecer quando o momento angular chega num valor crítico, aqui próximo de 80. Sem a existência do poço no potencial, não há fusão.

tempo de interação entre as partículas é razoavelmente pequeno e a interação projétil-alvo é superficial, incluindo apenas pequenas excitações e possivelmente transferência de massa. Caso o parâmetro de impacto seja um pouco menor, tem-se uma interação mais longa entre o alvo e o projétil, permitindo a transferência sequencial de massa e carga, o que caracteriza as colisões profundamente inelásticas [15]. Tais colisões são mais comuns quando o produto dos números atômicos dos íons/átomos colidindo é grande (maior que 2000) [17], e elas envolvem grandes perdas de energia cinética para as excitações intrínsecas do projétil e do alvo, mas não chegam a se fundir e formar um Núcleo Composto (CN, do inglês *Compound Nucleus*), no qual a memória do canal de entrada, excetuando-se as quantidades conservadas, é apagada.

A fusão é o processo no qual dois núcleos se unem em um só [16], que pode estar altamente excitado após sua formação e se tiver alto momento angular decairá preferencialmente através de emissões alfa ou fissão caso o CN seja suficientemente pesado. Se tiver um pequeno momento angular, deverá emitir partículas mais leves e/ou radiação gama [16]. Esse é um dos fatores limitantes para a produção de elementos super-pesados [13]. Na dinâmica que leva à fusão, os núcleos se aproximam a ponto de a interação nuclear ser relevante, porém para isso é necessário vencer a barreira coulombiana, resultante da soma do potencial nuclear com o coulombiano e centrífugo, como ilustrado na Figura 1.4, para o caso de um potencial Woods-Saxon¹. Durante a colisão, ocorre a conversão de parte da energia cinética em excitações intrínsecas dos núcleos. Caso a perda de energia seja suficientemente grande após a barreira de potencial ter sido ultrapassada, os núcleos ficam presos no potencial núcleo-núcleo e irão se fundir, criando o núcleo composto final [16]. Dado um certo parâmetro de impacto e uma energia do projétil, existe uma certa probabilidade finita de o sistema ficar preso no poço do potencial por tempo suficiente para ocorrer a fusão e a formação do CN. Naturalmente, tal probabilidade cresce com a profundidade e largura do poço [15].

Para estudar colisões é interessante analisar uma quantidade que seja independente das condições dos experimentos e dependa exclusivamente das propriedades físicas do projétil e do alvo. Tal quantidade é a seção de choque diferencial. Voltando à Figura 1.1

¹Este quadro não é realista caso os núcleos envolvidos na colisão sejam muito pesados, pois suas deformações dinâmicas devem ser consideradas [18] e pode ser necessário uma energia extra para que haja fusão [19].

e contando o número de eventos que levam à população do canal- β quando a partícula é emitida no ângulo sólido $\Delta\Omega$, $N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)$, algumas considerações precisam ser feitas [14]:

- Se a abertura do detector for pequena, então $N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)$ deve ser proporcional à $\Delta\Omega$;
- Se o alvo for fino o suficiente para desconsiderarmos espalhamentos múltiplos, então $N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)$ deve ser proporcional à densidade superficial n do alvo;
- Desprezando as interações entre as partículas do feixe incidente, $N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)$ deve ser proporcional ao fluxo incidente J .

Com isso, $N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)$ pode ser reescrita:

$$N_\beta(\Omega, \Delta\Omega) = \Delta\Omega \cdot n \cdot J \frac{d\sigma_\beta(\Omega)}{d\Omega},$$

onde a constante de proporcionalidade

$$\frac{d\sigma_\beta(\Omega)}{d\Omega} = \frac{N_\beta(\Omega, \Delta\Omega)}{\Delta\Omega \cdot n \cdot J}$$

é a seção de choque diferencial para o canal- β . Frequentemente estamos interessados na seção de choque total de algum canal, como por exemplo do canal elástico, então é feita a integração sobre o ângulo sólido:

$$\sigma_{el} = \int d\Omega \left[\frac{d\sigma_{el}(\Omega)}{d\Omega} \right].$$

O estudo sobre as seções de choque é importante porque a probabilidade de uma reação ter algum canal de saída específico está associada à seção de choque deste canal [14].

1.2 Reações com núcleos exóticos

A Figura 1.5 mostra uma distribuição de isótopos. A linha cheia na diagonal mostra a posição no gráfico onde o número de nêutrons e prótons é o mesmo. Vê-se, claramente, que os núcleos estáveis (quadrado preto) apresentam um número maior de nêutrons do que de prótons, e isso ocorre para que a força de atração nuclear consiga vencer a repulsão coulombiana entre os prótons. Os núcleos exóticos são aqueles que saem da linha de estabilidade, apresentando um excesso ou deficiência de nêutrons.

Quando uma reação nuclear apresenta um projétil e/ou alvo exótico se abre uma nova gama de possibilidades para os canais de saída, pois a reação - especialmente a fusão - se torna mais complexa [2]. Com projéteis radioativos existe uma grande possibilidade de quebra (seção de choque de quebra alta) e isso ocorre devido à baixa energia de ligação dos nucleons periféricos desses núcleos [21]. Com essa quebra existe a possibilidade de que apenas parte do projétil se funda com o alvo, um processo chamado de Fusão Incompleta (IF, do inglês *Incomplete Fusion*) [16]. Esse mecanismo compete com a Fusão Completa (CF, do inglês *Complete Fusion*), onde todo o projétil se funde com o alvo, seja de forma

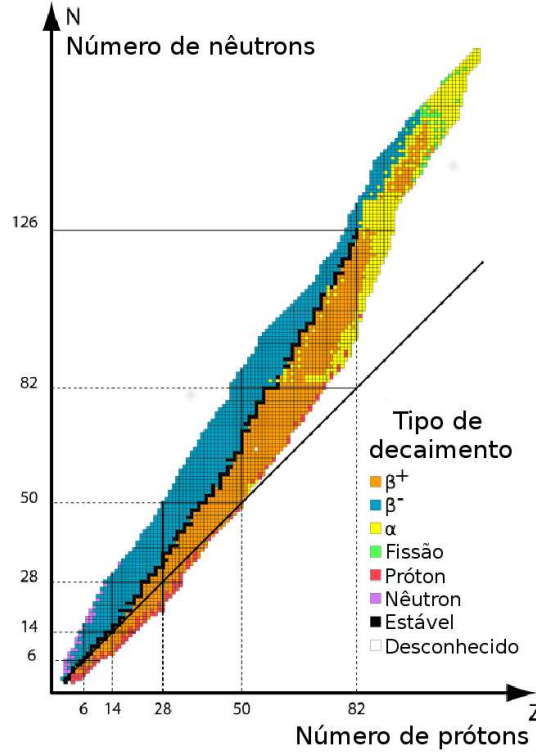


Figura 1.5: Tabela de isótopos e o decaimento esperado daqueles que são instáveis [20].

direta ou em sequência após sua quebra. O processo direto é chamado de Fusão Completa Direta (DCF, do inglês *Direct Complete Fusion*), enquanto o segundo é a Fusão Completa Sequencial (SQ) [2,3]. A Figura 1.6 mostra esquematicamente os possíveis canais de saída de uma colisão de um projétil fracamente ligado com um alvo mais pesado [3].

Diversos modelos teóricos já foram propostos para estudar reações de fusão com núcleos exóticos, desde modelos clássicos simples até outros inteiramente quânticos [2]. Tais modelos, entretanto, não permitem a separação entre a fusão incompleta e a completa sequencial, permitindo estudar apenas a seção de choque total para os processos. Nas referências [1,2,4] foi apresentado um tratamento semi-clássico que consiste em aproximar o projétil por dois núcleos fracamente ligados que interagem com o alvo através de um potencial, que pode ser separado:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) ,$$

onde r_i , $i = 1, 2$, representa a coordenada do núcleo 1 ou 2 em relação ao alvo e V_i o respectivo potencial de interação entre eles. Esse potencial é escrito como uma contribuição de um potencial óptico V_0 e uma interação de acoplamento $U(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, onde \mathbf{r} corresponde à separação relativa entre os núcleos 1 e 2 e \mathbf{R} representa a posição do centro de massa dos projéteis em relação ao alvo, cuja trajetória é descrita através da mecânica clássica.

A dinâmica intrínseca entre os fragmentos do projétil, por sua vez, é tratada quanticamente. A função de onda que descreve o movimento relativo dos núcleos fracamente ligados (em um determinado instante de tempo t e para um certo parâmetro de impacto b) é escrita como a contribuição de estados ligados ψ_i com energia ε_i e outra componente

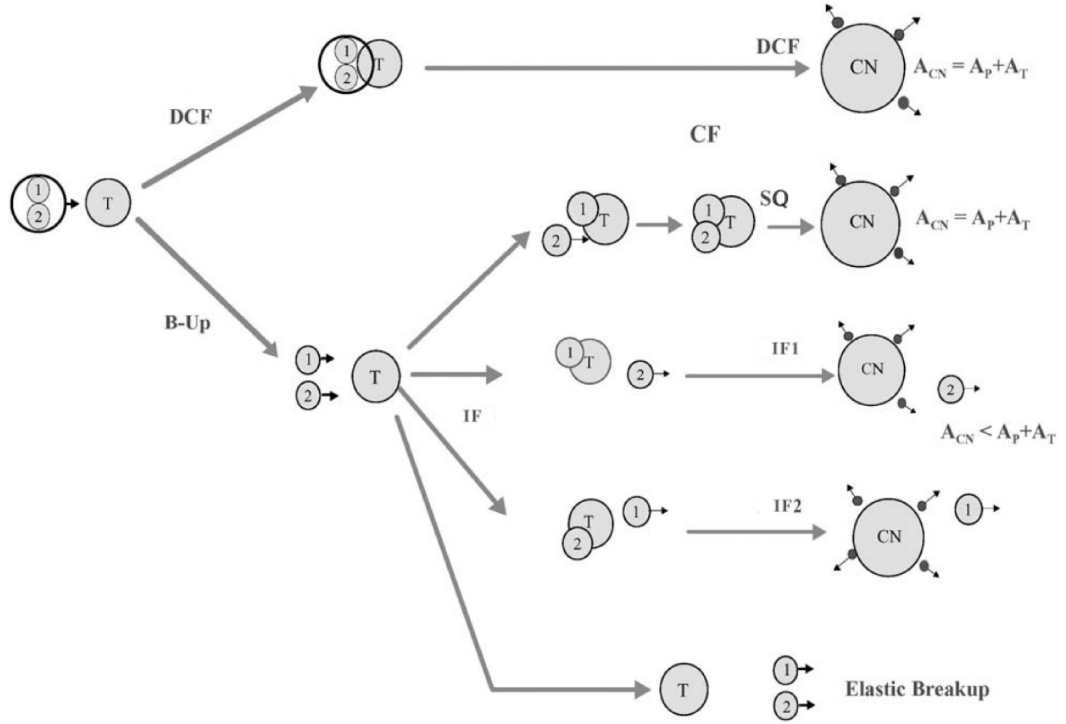


Figura 1.6: Representação esquemática da (possível) fusão e quebra de um projétil fracamente ligado em um alvo. Por simplicidade se assume que o projétil se quebra em dois fragmentos; a generalização de tal situação é direta [3].

no contínuo Ψ_C [2]:

$$\Psi(b, t) = \sum_i c_i(b, t) \psi_i e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} + \Psi_C(b, t) ,$$

onde $c_i(b, t)$ são as amplitudes associadas aos estados ligados, assim como $c_\alpha(b, t)$ são as amplitudes associadas à base de estados na discretização do contínuo [2], que será discutida mais adiante nas Seções 2.3.1 e 3.1:

$$\Psi_C(b, t) = \sum_{l_\alpha j_\alpha J_\alpha M_\alpha} \int d\varepsilon_\alpha c_\alpha(b, t) e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \Psi_\alpha .$$

Note que ambas amplitudes $c_i(b, t)$ e $c_\alpha(b, t)$ dependem tanto do tempo quanto da trajetória clássica, através do parâmetro de impacto e energia de colisão [4]. J_α representa o momento angular total, M_α a sua projeção ao longo do eixo z , enquanto l_α e j_α denotam os números quânticos do movimento angular do movimento relativo do fragmento 1 em torno de 2. O rótulo α representa o conjunto desses números quânticos, além da energia ε_α [1]. A função de onda Ψ_α representa um auto-estado com esses auto-valores.

O hamiltoniano do sistema é então descrito como

$$\mathcal{H} = h(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + U(t, \mathbf{r}) ,$$

onde $h(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ está associado ao movimento relativo dos núcleos fracamente ligados (projétil). Resolvendo a Equação de Schrödinger dependente do tempo se obtém as equações semi-clássicas dos canais acoplados (*i.e.*, a evolução temporal dos coeficientes da expansão) [4]:

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{c}_i(b,t) &= \sum_j U_{ij}(t)e^{i(\varepsilon_i-\varepsilon_j)t/\hbar}c_j(b,t) \\
&+ \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{i\beta}(t)e^{i(\varepsilon_i-\varepsilon_\beta)t/\hbar}c_\beta(b,t) \quad (1.3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{c}_\alpha(b,t) &= \sum_j U_{\alpha j}(t)e^{i(\varepsilon_\alpha-\varepsilon_j)t/\hbar}c_j(b,t) \\
&+ \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{\alpha\beta}(t)e^{i(\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta)t/\hbar}c_\beta(b,t) \quad (1.4)
\end{aligned}$$

onde,

$$U_{\alpha\beta} = \langle \Psi_\alpha | U | \Psi_\beta \rangle$$

são os Fatores de Forma, ou seja, são os elementos de matrix do potencial de acoplamento $U(t, \mathbf{r})$ [1]. Ao resolver as Equações (1.3) e (1.4) é possível obter as seções de choque da colisão e saber quais os canais de saída mais relevantes. Voltaremos a esse tratamento com mais detalhes mais adiante, uma vez que será um dos focos centrais dessa dissertação.

1.3 Motivação

A disponibilidade de feixes radioativos abriu novas possibilidades na Física Nuclear. Em particular, colisões de núcleos fracamente ligados ganharam grande interesse na última década. Tendo em vista as características exóticas de tais núcleos, o estudo desses processos possibilita uma compreensão mais aprofundada sobre a estrutura nuclear [3]. Uma vez que não é possível obter informações diretamente de um sistema microscópico, para estudar as interações entre tais sistemas é necessário [14]:

- a) alguma hipótese sobre a natureza da interação;
- b) usando tal hipótese, realizar previsões sobre o experimento de espalhamento;
- c) realizar o experimento e comparar as expectativas teóricas com os dados experimentais.

Porém, como tais sistemas são de muitos corpos, regidos pela mecânica quântica e têm um grande número de graus de liberdade interagentes, resolver a Equação de Schrödinger é algo extremamente complicado. Por isso são desenvolvidos modelos aproximados, mas que ainda devam reproduzir os principais aspectos do sistema, levando a equações de movimento mais simples [14]. A compreensão da fusão envolvendo núcleos radioativos vem crescendo com trabalhos recentes [2, 14], e um tratamento simples, porém eficaz, para o estudo dos canais de quebra na fusão de sistemas exóticos se torna fundamental neste momento.

Motivado por esses últimos avanços, este trabalho apresenta um método semi-clássico para calcular as seções de choque das fusões completa e incompleta em colisões de núcleos

fracamente ligados. Tal método já apresentou sucesso para reações de quebra [4] e consiste em tratar o movimento relativo entre o alvo e o projétil com mecânica clássica, enquanto a dinâmica intrínseca do projétil exótico é tratado quanticamente. As ferramentas computacionais disponíveis hoje em dia, como aqueles discutidos na referência [2], exigem vários dias de uso de CPU o que torna a aplicação do código muito difícil. O desenvolvimento de um código numérico baseado naquele das referências [1, 2, 4], porém mais eficiente e que permita a computação de tais colisões, e sua distribuição à comunidade é de grande importância para permitir o aprofundamento da compreensão de diferentes aspectos de núcleos exóticos, e este é o objetivo principal da presente dissertação.

2 *Tratamento teórico*

A compreensão de uma abordagem semi-clássica para a fusão nuclear necessita do entendimento dos tratamentos clássico e quântico. Em uma colisão, os núcleos podem passar por estados internos excitados e trocar partículas, processos que alteram a seção de choque de fusão do sistema. Tais processos de reação envolvem a participação ativa de diversos graus de liberdade, que devem ser incluídos na descrição teórica. Estes graus de liberdade interagem entre si, portanto é necessário incluir explicitamente seus acoplamentos no tratamento da fusão nuclear [3]. Esse estudo é denominado de Canais Acoplados.

Para realizar uma descrição semi-clássica precisamos definir quais partes do sistema serão tratadas classicamente ou quanticamente. Nas colisões nucleares, a trajetória do movimento relativo entre o projétil (ou seus fragmentos) e o alvo é tratada classicamente enquanto a dinâmica intrínseca do projétil é tratada utilizando a mecânica quântica e inclui explicitamente o acoplamento entre os graus de liberdade relevantes do sistema. Este capítulo tem o objetivo de descrever toda a base necessária para a compreensão da abordagem semi-clássica da fusão nuclear estudada nesse trabalho, começando pelo tratamento clássico, e seguido pelo quântico. A terceira seção apresenta o formalismo de Canais Acoplados e o capítulo se encerra com a apresentação da aproximação semi-clássica para a fusão de núcleos fracamente ligados.

2.1 Tratamento puramente clássico

2.1.1 Espalhamento clássico

Na fusão nuclear, sobre um ponto de vista clássico, podemos simplificar a colisão entre o projétil e o alvo em um problema de um único corpo de massa-reduzida μ e o espalhamento é tratado através de uma força central [22, 23]. Qualquer interação entre duas partículas sob influência de um potencial mútuo pode ser representada pela Figura 2.1.

A seção de choque clássica para diferentes parâmetros de impacto b e momentos angulares relativos J que levam ao mesmo ângulo de espalhamento θ tem a seguinte forma [7, 14, 23], onde $\Theta(b)$ é a função de deflexão clássica:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \frac{b_i}{\sin\theta} \left| \frac{d\Theta(b)}{db} \right|_{b=b_i}^{-1}.$$

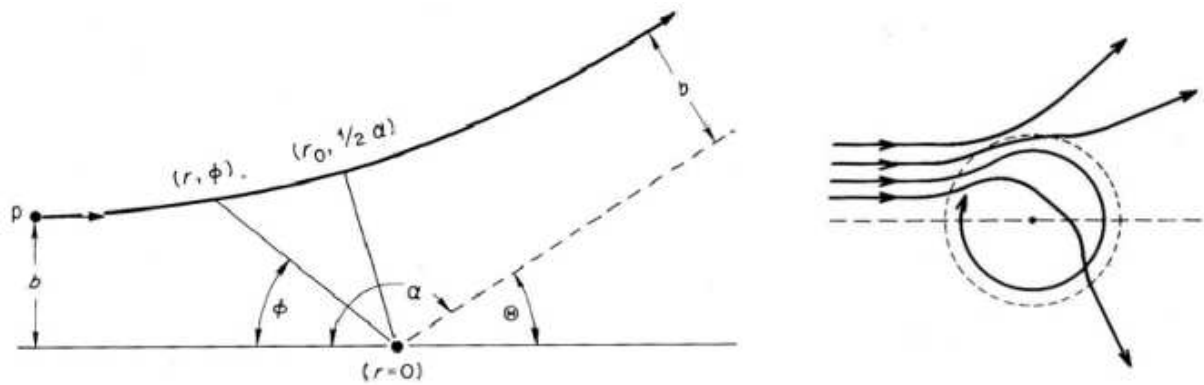


Figura 2.1: Esquerda: Coordenadas para a descrição de um espalhamento clássico. Direita: Possíveis trajetórias de uma colisão com diferentes parâmetros de impacto [7].

2.1.2 Fusão clássica

Em colisões de íons pesados grande parte da seção de choque de reação corresponde às colisões profundamente inelásticas. Entretanto as características (carga e massa) do projétil e do alvo são geralmente conservadas, apesar de grande parte da energia do sistema ficar armazenada em excitações internas. Em tais colisões, o comprimento de onda de *de Broglie* para o movimento relativo das partículas é muito menor do que os tamanhos geométricos do sistema, portanto se justifica um tratamento clássico desta dinâmica [24].

As seções de choque de fusão clássicas são calculadas através de modelos de dinâmica newtoniana que contém forças conservativas e dissipativas. A trajetória de cada projétil é uma função do tempo e suas características (energia, massa, parâmetro de impacto e momento angular) determinam se ele (o projétil) ficará preso no poço do potencial, caracterizando a fusão, ou se irá escapar da barreira após perder uma certa energia (colisão amortecida) [25]. A fusão poderá ocorrer se o projétil tiver um momento angular menor do que um valor crítico l_{cr} , pois acima desse valor não há mais o poço de potencial, como se pode ver na Figura 1.4. O poço diminui com o aumento do momento angular, até chegar no valor crítico. Esse valor crítico depende da natureza do projétil e do alvo. Quando há a fusão, a partícula perde energia devido às forças dissipativas ao se aproximar do alvo, mas ainda tem energia suficiente para vencer a barreira de potencial, e então entrará na sua região atrativa, de onde ele não conseguirá mais escapar [24] (veja a Figura 2.2).

É importante notar que a fusão neste contexto é determinada sem ambiguidade (ou seja, dados os parâmetros da colisão, sabe-se exatamente se haverá fusão ou não), e não produz um composto final nos termos usuais de um sistema em equilíbrio estático em todos seus graus de liberdade intrínsecos. A fusão que estes modelos prevêm é apenas um sistema preso dentro da barreira do potencial internuclear efetivo e não leva em consideração a evolução subsequente do sistema [25].

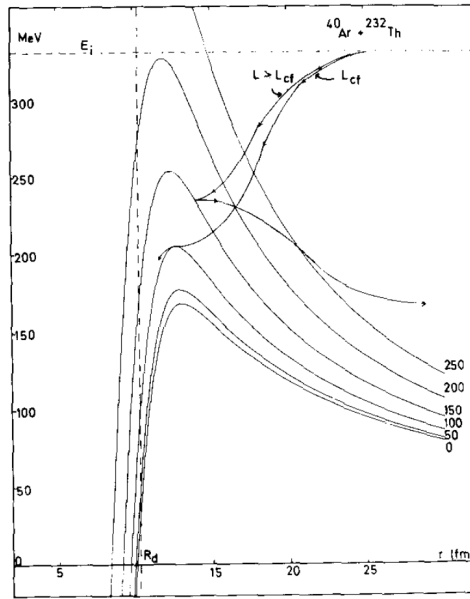


Figura 2.2: Potencial efetivo em colisões de $^{40}\text{Ar} + ^{232}\text{Th}$ com energia de 400 MeV. São esquematizadas trajetórias com diferentes momentos angulares [24].

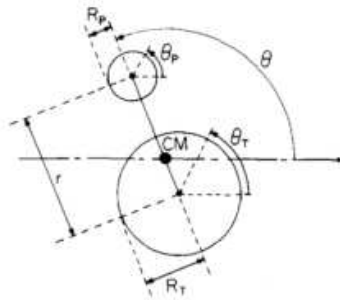


Figura 2.3: Graus de liberdade para dois íons pesados interagentes [25].

2.1.3 Modelos clássicos

Podemos comparar dois modelos clássicos e analisar suas diferenças e validades. A seção de choque de fusão clássica é [22, 24–26]:

$$\sigma_{\text{CF}} = \pi \lambda^2 \sum_{l=0}^{l_{\text{cr}}} (2l+1) = \pi \lambda^2 (l_{\text{cr}} + 1)^2, \quad (2.1)$$

onde $\lambda = \lambda/(2\pi)$. O modelo de Gross et al. [22, 24] assume que há perda de energia por atrito durante a trajetória do projétil em direção ao alvo. No contexto de um sistema de uma única partícula, a perda de energia ocorre enquanto ela se aproxima do centro do potencial. Haverá fusão se a partícula tiver energia suficiente para vencer a barreira do potencial, mas não consiga escapar posteriormente. O trabalho de Fröbrich [26] complementa este modelo incluindo as deformações dinâmicas dos núcleos e permite flutuações estatísticas dos graus de liberdade importantes. O modelo de Birkelund et al. [25] considera mais variáveis dinâmicas que os outros: a separação radial dos centros de massa do projétil e do alvo, a orientação angular do sistema e a orientação do alvo e do projétil (veja a Figura 2.3). A Figura 2.4 compara estes dois últimos modelos para dois diferentes sistemas.

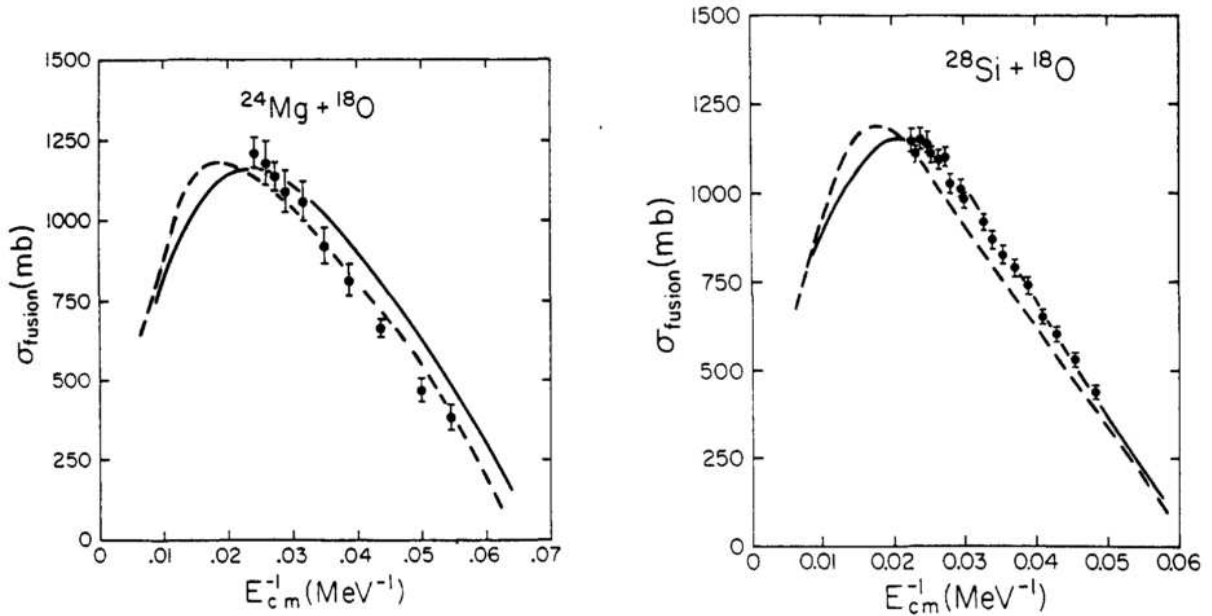


Figura 2.4: Medidas da seção de choque de fusão para $^{24}\text{Mg}+^{18}\text{O}$ à esquerda e $^{28}\text{Si}+^{18}\text{O}$ à direita. A linha contínua mostra o cálculo segundo o modelo de Fröbrich e a linha pontilhada mostra o cálculo de Birkelund et al. [26].

Estes modelos apresentam limitações devido suas simplicidades. Processos de colisões que levam a compostos instáveis são chamados de **captura**, e não fusão, e não são contemplados nestes tratamentos clássicos. Outra grande limitação ocorre em colisões de mais alta energia e/ou com íons mais leves, onde pode ocorrer a fusão incompleta, que é completamente ignorada por esses modelos. Para ver mais detalhes, recorra às referências de cada modelo.

2.2 Tratamento puramente quântico

2.2.1 Espalhamento ondulatorio

Pode-se, de forma genérica, descrever as colisões entre núcleos complexos incluindo fenômenos inelásticos e reações de troca através da Equação de Schrödinger e da função de onda do sistema. A onda plana incidente no alvo tem a seguinte forma, no caso em que a direção \hat{z} coincidir com a direção de propagação [7]:

$$\chi_a = A_0 \exp\{i(k_a z - \omega_a t)\} ,$$

onde $k_a = 2\pi/\lambda_a = 1/\lambda_a$ é o número de onda relacionado ao momento linear $\mathbf{p}_a = \hbar\mathbf{k}_a$, $\omega_a = 2\pi\nu_a = E_a/\hbar$ é a frequência angular relacionada à energia da partícula. A amplitude A_0 é determinada pelo fluxo do feixe. A parte espacial da função de onda pode assumir uma forma genérica, independente do alinhamento da direção de propagação do feixe com eixos escolhidos para análise:

$$\chi_a \sim A_0 \exp(ik_a z) = A_0 \exp(ik_a r \cos\theta) = A_0 \exp(i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}) .$$

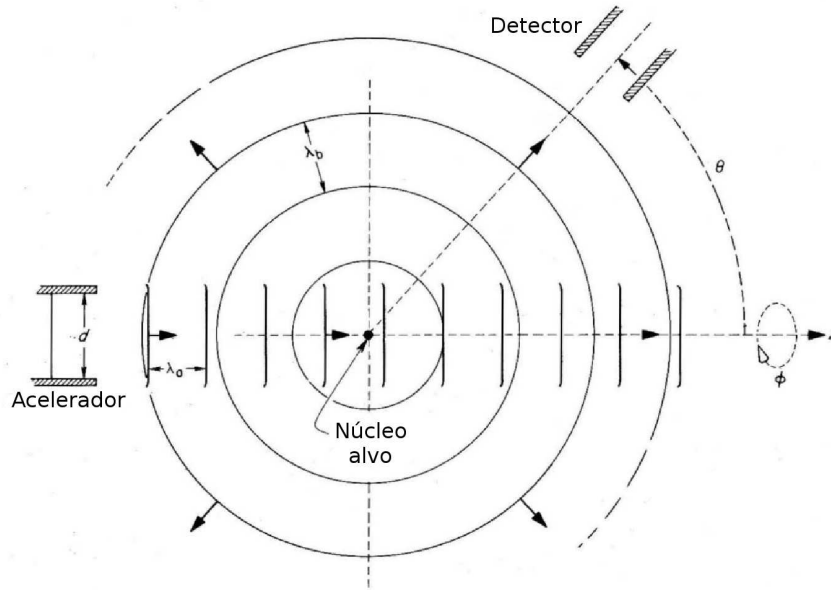


Figura 2.5: Representação esquemática de um espalhamento. As linhas contínuas representam as frentes de onda, as linhas retas e verticais são para o feixe incidente e as circulares são as ondas espalhadas pelo alvo. A escala de tamanhos das ondas e do equipamento experimental não é realista, mas essa representação forma facilita a compreensão [7].

O alvo é composto por núcleos A com momentum $\mathbf{p}_A = \hbar \mathbf{k}_A$ e energia $E_A = \hbar \omega_A$, portanto sua descrição se dá através de

$$\chi_A = N^{1/2} \exp\{i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_A - \omega_A t)\} ,$$

onde a normalização corresponde a N partículas alvo por unidade de volume. A representação desta colisão pode ser vista na Figura 2.5.

A função de onda do sistema completo antes do espalhamento é:

$$\begin{aligned} \chi &= \chi_a \chi_A \\ &= N^{1/2} A_0 \exp\{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_A)\} \exp\{i(\omega_a + \omega_A) t\} \\ &= N^{1/2} A_0 \exp\{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})\} \exp\{i(\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\alpha)\} \exp(i\omega t) , \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde $\hbar \omega = E_A + E_a$ é a energia total, $\mathbf{K} = \mathbf{k}_A + \mathbf{k}_a$ é momentum total em unidades de \hbar e \mathbf{R} é a posição do centro de massa:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_{CM} = \frac{m_A \mathbf{r}_a + m_a \mathbf{r}_A}{m_a + m_A} .$$

A separação entre projétil e alvo é dada por $\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_A$, enquanto o momentum relativo é descrito por [7]:

$$\mathbf{k}_\alpha = \frac{m_A \mathbf{k}_a - m_a \mathbf{k}_A}{m_a + m_A} .$$

Na ausência de campos externos há a conservação da energia total, portanto o fator $\exp(i\omega t)$ não é alterado pela colisão e então podemos omitir da notação daqui em diante. O mesmo ocorre com o momentum total \mathbf{K} , que também não precisa ser escrito

explicitamente. Portanto, quando há apenas a interação entre o projétil e o alvo, a função de onda que descreve seu movimento relativo é apenas:

$$\chi \sim N^{1/2} A_0 \exp\{i(\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\alpha)\} .$$

Os estados internos dos núcleos são descritos por funções de onda independentes: ψ_A e ψ_a . Elas descrevem o spin e o estado excitado, se houverem, do alvo e do projétil. A normalização é tal que $\int |\psi_i(\tau_i)|^2 d\tau_i = 1$, onde $i = a, A$. Portanto, a função de onda que descreve o sistema antes da colisão é, para $N = 1$,

$$\chi \sim A_0 \exp\{i(\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\alpha)\} \psi_a \psi_A , \quad (2.3)$$

que é chamada de onda incidente.

Após a colisão, haverá o espalhamento de ondas esféricas concêntricas centradas no alvo e em todos os canais de saída abertos, β . Sendo o núcleo residual B e outro mais leve b o espalhado, a onda representando esse sistema é:

$$\zeta \sim \sum_{\beta} \Psi_{scatt,\beta} ,$$

portanto a função de onda completa do sistema é dada por:

$$\Psi = A_0 \exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\alpha) \psi_a \psi_A + \sum_{\beta} \Psi_{scatt,\beta} . \quad (2.4)$$

O comprimento de onda das ondas espalhadas será igual ou diferente daquele da onda incidente dependendo se o canal de saída β representa um canal elástico ou inelástico, respectivamente. O alvo, por sua vez, sempre gera uma sombra na direção $\theta = 0$, porém uma sombra só existe caso haja interferência destrutiva entre a onda incidente e as espalhadas, o que apenas ocorre no espalhamento elástico ($\lambda_\beta = \lambda_\alpha$). Isso mostra que o espalhamento inelástico sempre estará acompanhado por um canal de saída elástico. Ao se afastarem, as partículas deixam de interagir uma com a outra e a dependência radial das ondas esféricas dos canais de saída têm a forma $\exp(ik_\beta r_\beta)/r_\beta$, portanto sua intensidade cai com o quadrado da distância entre os dois núcleos. Esta amplitude também é modulada por um fator que depende dos ângulos de espalhamento, θ e ϕ , e da energia de incidência. Portanto, neste limite, a onda espalhada fica:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_{scatt,\beta}(r, \theta, \phi) = A_0 f_\beta(\theta, \phi) \frac{e^{ik_\beta r_\beta}}{r_\beta} \psi_b \psi_B . \quad (2.5)$$

Caso nenhuma das partículas tenha spin, haverá simetria axial e a modulação f será dependente apenas do ângulo de espalhamento θ , sem depender do ângulo azimutal ϕ .

2.2.2 Seção de choque de fusão

Para sistemas com energias baixas, o modelo clássico descreve bem a seção de choque de fusão com a Equação (2.1). Porém, quando a energia cresce há um decréscimo da seção de choque de fusão, ou seja, duas reações com os mesmos parâmetros podem ou não

levar à fusão dependendo de sua energia. O potencial deixa de ter um mínimo capaz de aprisionar o sistema, mas a fusão pode ocorrer em uma fração dos eventos [15]. Partindo da Eq.(2.4), pode-se obter a seção de choque de fusão. Como estamos interessados em uma região do espaço onde o limite da Eq.(2.5) é válido e considera-se apenas um único núcleo-alvo por unidade de volume, a densidade de partículas espalhadas é dada pelo módulo quadrado da equação integrado sobre os graus de liberdade internos dos dois núcleos [7], ou seja, $\sim r^{-2} |A_0 f_\beta(\theta, \phi)|^2$. Estas partículas espalhadas se afastam do núcleo residual da colisão com velocidade relativa ν_β . Então o número de partículas emitidas sob um elemento de ângulo sólido $d\Omega$ por unidade de tempo é $\nu_\beta |A_0 f_\beta|^2 d\Omega$. Dividindo esta quantidade pelo fluxo incidente, $\nu_\alpha |A_0|^2$, temos a seção de choque diferencial para a reação $A(a, b)B$ [7]:

$$\frac{d\sigma_\beta}{d\Omega} = \frac{\nu_\beta}{\nu_\alpha} |f_\beta(\theta, \phi)|^2 ,$$

onde o índice β representa algum canal de saída e o α o canal de entrada.

Para ocorrer a fusão é necessário que haja uma troca suficientemente grande de massa e energia entre os núcleos. A seção de choque de fusão é:

$$\sigma_{\text{CF}} = \frac{\hbar\omega}{2E} R_B^2 \ln \left[\frac{1}{1 + \exp\{2\pi[E - V_B - (R_C/R_B)^2(E - V_B)/\hbar\omega]\}} \right] . \quad (2.6)$$

Na equação acima, $\hbar\omega$ mede a curvatura da barreira, R_C é a distância a partir da qual - no caso clássico - ocorre a fusão, $V_C \equiv V(R_C)$ é a chamada Barreira Coulombiana, R_B é a distância entre os núcleos que representa o máximo do potencial e $V_B \equiv V(R_B)$. O potencial na vizinhança da barreira é escrito como:

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 (r - R_B)^2 , \quad (2.7)$$

e ω é obtido a partir da derivada segunda do potencial aplicada no ponto da barreira (R_C). Para baixas energias, a Eq.(2.6) volta ao caso clássico (Eq.(2.1)), e para altas energias pode ser aproximada por:

$$\sigma_{\text{CF}} = \pi R_C^2 \left(1 - \frac{V_c}{E} \right) . \quad (2.8)$$

Estas últimas relações não são válidas para colisões de núcleos leves.

2.2.3 Ondas Parciais

A técnica de ondas parciais é uma expansão da função de onda de um sistema que descreve o movimento relativo de partículas envolvidas em um espalhamento na sua dependência em momento angular [7]. Esta expansão se justifica devido ao curto alcance das forças nucleares e às bordas bem definidas dos núcleos, fazendo com que apenas partículas com um momento angular relativo menor que certo valor crítico interajam efetivamente com o núcleo alvo. Este valor crítico, por sua vez, é (usualmente) baixo, portanto poucos termos precisam ser considerados na expansão. Além disso, a Equação de Schrödinger em três dimensões se reduz a uma série de equações independentes, cada uma para um valor de momento angular.

Considerando o espalhamento por um potencial central, o momento angular é uma constante do movimento, com isso a função de onda para um certo valor de l pode ser fatorada em partes radial e angular (m é a componente do momento angular na direção \hat{z}):

$$\phi_{lm}(\mathbf{r}) = \mathcal{R}_l(\mathbf{r}) Y_l^m(\theta, \phi) . \quad (2.9)$$

A função de onda total é, então, descrita por:

$$\phi(r, \theta, \phi) = \sum_{lm} c_{lm} \mathcal{R}_l(r) Y_l^m(\theta, \phi) , \quad (2.10)$$

onde Y_l^m são os harmônicos esféricos com autovalor $l(l+1)\hbar^2$ para \mathbf{L}^2 e $m\hbar$ para \mathbf{L}_z . A Equação de Schrödinger se divide em uma parte radial e outra angular. Para que a Equação (2.10) seja válida, as funções $\mathcal{R}_l(r)$ devem ser soluções da parte radial da Equação de Schrödinger, que pode ser melhor escrita em termos de $u(\mathbf{r}) \equiv r \mathcal{R}_l(\mathbf{r})$ [27]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l = E u_l . \quad (2.11)$$

O termo entre colchetes na equação acima mostra o potencial efetivo: soma do potencial coulombiano com um termo repulsivo dependente do momento angular. Por crescer junto com o momento angular e com a proximidade dos núcleos (valor maior quando r é menor), este termo é chamado de Potencial Centrífugo [7].

2.2.4 Matriz de espalhamento e *Phase Shift*

Esta seção segue a descrição realizada no trabalho da Ref. [7] e faz a descrição para um caso de potenciais de curto alcance, como o potencial nuclear, mas não abrange as complexidades de tratar potenciais de longo alcance, como o Coulombiano. A Matriz de Espalhamento (também chamada de Matriz-S) e o *Phase Shift* (em português, Mudança de Fase) descrevem a transição do sistema desde antes até depois da colisão. Se não há espalhamento, ou for puramente elástico, a amplitude da onda após a colisão deverá ser a mesma da onda incidente, por conservação de probabilidade, não importando o que aconteça na região de interação com o potencial. Entretanto, não existe a garantia de que as ondas terão a mesma fase [27]. Isso resulta em um *phase shift* que pode ser representado pelo termo δ da parte radial $u(r)$ da função de onda assintótica (onde já não há mais interação com o potencial) [28]:

$$u_{kl} \rightarrow \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) . \quad (2.12)$$

Sendo a função de onda para o canal elástico α a soma de um termo *de entrada* com um *de saída* temos [7]:

$$u_{l,\alpha}(r) \rightarrow N \left((-1)^l e^{-ik_\alpha r} - \eta_{l,\alpha} e^{ik_\alpha r} \right) , \quad (2.13)$$

onde N é um termo de normalização para \mathcal{R} tal que $\phi = \exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r})$. Os termos $\eta_{l,\alpha}$ são chamados de *amplitudes de espalhamento de onda parcial*, que são os elementos da

Matriz-S. Quando não há espalhamento temos:

$$\eta_{l,\beta} = \delta_{\beta,\alpha} = \begin{cases} 1, & \text{se } b + B = a + A \text{ (elástico)} \\ 0, & \text{se } b + B \neq a + A \text{ (inelástico)}, \end{cases} \quad (2.14)$$

onde $\eta_{l,\beta}$ acaba sendo igual à delta de Kronecker. É importante notar que um núcleo em um estado excitado é considerado como *diferente* de um no estado fundamental ($A^* \neq A$). Como não há alteração da amplitude da onda no espalhamento elástico [27], o *phase shift* e os elementos da Matriz-S se relacionam da seguinte forma [7]:

$$|\eta_{l,\alpha}| = 1 \rightarrow \eta_{l,\alpha} = e^{2i\delta_l} , \quad (2.15)$$

onde δ_l é o *phase shift* da onda parcial com momento angular l .

Quando há também espalhamento inelástico, a Eq.(2.15) não será verdadeira [29], uma vez que o fluxo no canal de saída elástico ($\alpha = \beta$) irá diminuir: $|\eta_{l,\alpha}| < 1$. Essa diferença aparecerá nos canais de saída inelásticos. Considerando uma reação simples ($a + A \rightarrow B + b$), para cada par $\alpha = (a, A)$ a menos no canal de saída elástico, tem-se um par $\beta = (b, B)$ a mais nos canais inelásticos. Entretanto, em um sistema sem spin, o momento angular relativo entre a e A deverá ser o mesmo que entre b e B . A onda de saída fica com o fluxo dependente da seguinte relação [7]:

$$\sum_{\beta \neq \alpha} |\eta_{l,\beta}|^2 = 1 - |\eta_{l,\alpha}|^2 , \quad (2.16)$$

ou ainda, incluindo todos os canais de saída (inclusive o elástico $\beta = \alpha$):

$$\sum_{\beta} |\eta_{l,\beta}|^2 = 1 . \quad (2.17)$$

Estas relações mostram a unitariedade da matriz de espalhamento, já que $\eta_{l,\beta}$ são os seus elementos. Quando conhecidos todos os elementos desta matriz para cada valor de momento angular, tem-se todo o conhecimento possível dos resultados do espalhamento do sistema $a + A$. Outra propriedade importante da Matriz-S é sua simetria, pois os elementos da reação $A(a, b)B$ são iguais aos da reação temporalmente inversa $b(B, A)a$ ¹. Para a matriz de espalhamento se usa a notação \mathbf{S} , então as propriedades de unidade e simetria podem escritas como:

$$\sum_{\beta} |S_{\beta,\alpha}^l|^2 = 1 , \\ S_{\alpha,\beta}^l = S_{\beta,\alpha}^l .$$

¹Se o sistema tiver spin, a reversão temporal precisa ser tomada com mais cuidado, pois o vetor de momento angular muda de sinal perante à troca de t por $-t$.

2.2.5 Modelo óptico

O modelo mais elementar para o estudo da fusão em termos ondulatórios é o Modelo Óptico (MO). Tal modelo descreve a interação de um projétil nuclear sob um núcleo alvo similar à forma que um feixe luminoso interage com um alvo opaco, sendo parcialmente absorvido e parcialmente espalhado. O MO apresenta um potencial fenomenológico de forma simples, com parâmetros ajustados de acordo com resultados experimentais. A absorção que ocorre na reação (ou seja, os canais inelásticos) é descrita através de uma parte imaginária no potencial². Apesar de sua simplicidade, o MO descreve bem diversos sistemas em uma grande gama de energias, mesmo mantendo os mesmos parâmetros, indicando uma base bastante sólida no seu significado físico.

Na sua forma mais simples, o MO tem a seguinte forma [30]:

$$V = (U + iW) f(r) \quad , \quad (2.18)$$

onde U e W são as intensidades das partes real e imaginária do potencial, respectivamente, e $f(r)$ é o fator de forma radial. A partir de sua dedução (que pode ser vista na Ref. [15]), o potencial óptico tem a forma de um potencial de *foldimg*, porém por simplicidade é comum assumir a geometria de Woods-Saxon:

$$f(r) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad . \quad (2.19)$$

Os parâmetros R e a são, respectivamente, o raio e a difusividade da distribuição. Esta forma do potencial pode ser utilizada na Equação de Schrödinger para obter a seção de choque elástica e de reação de partículas carregadas. Com partículas neutras, apenas se obtém a seção de choque total do espalhamento. Para energias mais baixas a interação ocorre principalmente na superfície dos núcleos, então se utiliza um fator de forma com um máximo nessa região para a parte imaginária do potencial:

$$g(r) = -4a \frac{df(r)}{dr} = \frac{4e^{(r-R)/a}}{\left[1 + e^{(r-R)/a}\right]^2} \quad . \quad (2.20)$$

O fator $-4a$ garante que $g(R) = 1$. O potencial imaginário com o fator de forma $f(r)$ é chamado de Absorção no Volume, e com $g(r)$ de Absorção na Superfície.

Adicionando uma interação spin-órbita, há a possibilidade de estudar a polarização das partículas espalhadas [30]:

$$V_{so}(r) = \left(\frac{\hbar}{m_{\pi}c}\right)^2 (U_s + iW_s) \frac{1}{r} \frac{df_s(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad . \quad (2.21)$$

O MO, como está descrito aqui, trata explicitamente apenas do espalhamento elástico, pois os canais inelásticos são tomados de forma indireta a partir da absorção do fluxo incidente por parte do potencial imaginário. Para tratar os canais inelásticos explicitamente é necessário utilizar o formalismo de Canais Acooplados, que será estudado

²Estendendo a analogia com a luz, esta parte imaginária do potencial é análoga à absorção de luz por um meio com índice de refração complexo.

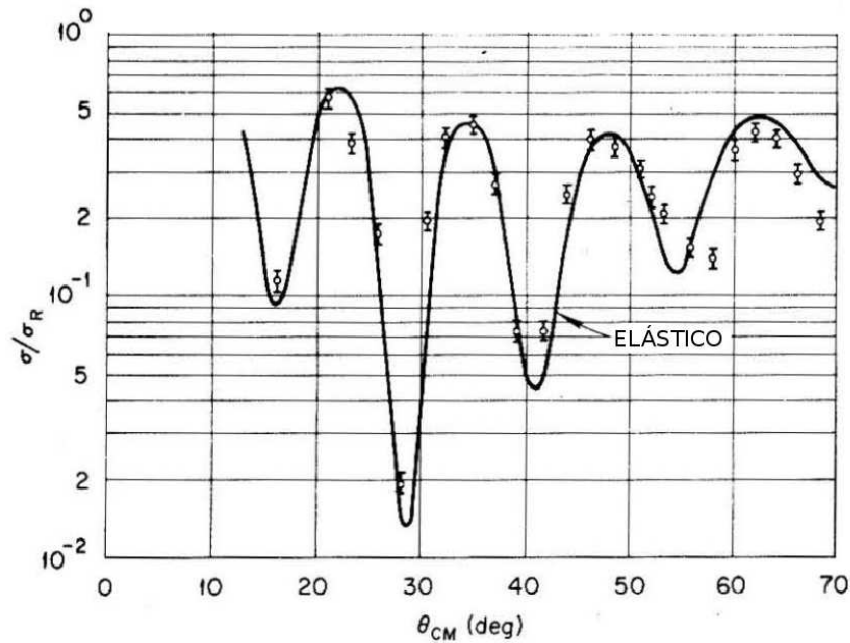


Figura 2.6: Distribuição angular e seção de choque elástica da reação $^{24}\text{Mg} + \alpha$ a 42 MeV [7].

a seguir. A Figura 2.6 mostra a relação entre a distribuição angular e seção de choque elástica da reação $^{24}\text{Mg} + \alpha$ com energia de 42 MeV e um ajuste utilizando o MO. Vê-se que o modelo descreve o sistema muito bem.

2.3 Canais Acoplados

Nas colisões em que a energia no centro de massa é muito inferior à altura da barreira coulombiana se esperaria que essa interação dominasse a reação, então seria possível calcular a seção de choque sem grande problemas. Entretanto, as previsões do modelo radial unidimensional subestima os resultados experimentais para a seção de choque de fusão para tais sistemas [15]. Essa diferença ocorre devido às excitações internas dos núcleos geradas pela colisão e também pela transferência de partículas, um processo que envolve diversos graus de liberdade e que devem ser inclusos na descrição da colisão. Assim, para avaliar a seção de choque de cada canal de saída, é necessário desenvolver um formalismo que considere explicitamente o acoplamento dos graus de liberdade relevantes [3,14]. Os canais menos importantes (fracamente acoplados) podem ser tratados com uma teoria de perturbação de ordem elevada. Porém, é mais conveniente resolver exatamente um conjunto de N equações acopladas para os N canais fortemente acoplados e tratar esses outros canais através da parte imaginária de um potencial complexo. Esse truncamento é chamado de Aproximação de Acoplamento Forte, que em inglês é chamado de *Strong Coupling Approximation* [7,14].

Para uma partícula sem estados internos, a Equação de Schrödinger é simplesmente

$$\mathcal{H}\chi(\mathbf{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \chi(\mathbf{r}) = E\chi(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.22)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema. Considerando estados internos, teremos os hamiltonianos respectivos do projétil \mathbf{a} e do alvo \mathbf{A} : h_a e h_A . As funções de onda que descrevem os estados intrínsecos de cada núcleo são ω_a e ω_A , e os auto-valores, caso não houvesse interação, são dadas pelas Equações de Schrödinger para cada núcleo: $h_i\omega_i = \varepsilon_i\omega_i$. O hamiltoniano completo da colisão é, então:

$$\mathcal{H} = h_a + h_A - \frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha} \nabla_\alpha^2 + \mathbb{U} , \quad (2.23)$$

onde $\alpha = \{a, A\}$ denota o par de núcleos nos estados a e A , o laplaciano ∇_α^2 age sobre a distância entre os dois núcleos \mathbf{r}_α e \mathbb{U} é o potencial de interação [7].

Os estados intrínsecos dos núcleos formam uma base na qual a função de onda total pode ser expandida:

$$\Psi = \sum_{\alpha'} \chi_{\alpha'} \varphi_{a'}(\xi) \varphi_{A'}(\xi) . \quad (2.24)$$

Assim a Eq.(2.22), agora com estados internos, é reescrita como [7]:

$$\sum_{\alpha'} \left[(\varepsilon_{a'} + \varepsilon_{A'} - E) - \frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha} \nabla_\alpha^2 + \mathbb{U} \right] \chi_{\alpha'}(\mathbf{r}_\alpha) \varphi_{a'}(\xi) \varphi_{A'}(\xi) = 0 . \quad (2.25)$$

A função de onda $\chi_{\alpha'}$ descreve o movimento relativo dos núcleos nos estados $\alpha' = \{a', A'\}$. Multiplicando à esquerda pelo complexo conjugado das funções de onda dos núcleos, φ_i^* , integrando sob todos os estados internos e usando a ortonormalidade $\int \varphi_i^*(\tau_i) \varphi_i(\tau_i) d\tau_i = \delta_{i i'}$, obtém-se:

$$\left[\nabla_\alpha^2 - U_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_\alpha) + k_\alpha^2 \right] \chi_\alpha(\mathbf{r}_\alpha) = \sum_{\alpha' \neq \alpha} \chi_{\alpha'}(\mathbf{r}_\alpha) U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_\alpha) , \quad (2.26)$$

que é a equação de canais acoplados para o canal α . Sem interação entre os núcleos, k_α é o número de onda e $k_\alpha^2 = (2\mu_\alpha/\hbar^2)(E - \varepsilon_a - \varepsilon_A)$. A diferença da energia total com as energias intrínsecas é a energia cinética do movimento relativo dos núcleos. Os elementos de matriz do potencial de interação são:

$$\begin{aligned} U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_\alpha) &= \frac{2\mu_\alpha}{\hbar^2} \iint \omega_a^*(\tau_a) \omega_A^*(\tau_A) \mathbb{U} \omega_{a'}(\tau_a) \omega_{A'}(\tau_A) d\tau_a d\tau_A \\ &\equiv \frac{2\mu_\alpha}{\hbar^2} \langle \phi_\alpha | \mathbb{U} | \phi_{\alpha'} \rangle \quad ; \quad \phi_{\alpha^{(\nu)}} \equiv \varphi_{a^{(\nu)}}(\xi) \varphi_{A^{(\nu)}}(\xi) . \end{aligned} \quad (2.27)$$

Esperamos que ao conhecer todos os elementos dessa matriz seja possível descrever por completo a reação, porém há infinitos termos na expansão. Portanto, é necessário realizar uma aproximação para poder truncar a expansão da função de onda em um número pequeno de N canais, aqueles que são fortemente acoplados. Os outros canais são inicialmente desconsiderados. Escrevendo a função de onda total como $\Psi(\mathbf{r}, \xi)$, onde \mathbf{r} é a separação entre o projétil e o alvo e ξ representa as coordenadas intrínsecas do sistema projétil-alvo, podemos escrever o hamiltoniano (Eq.(2.23)) de forma mais compacta [14]:

$$\mathcal{H} = h + K + \mathbb{U} , \quad (2.28)$$

onde h é o hamiltoniano que descreve os estados internos dos núcleos e K é a energia

cinética do movimento relativo. As autofunções de h , que descrevem o sistema com os núcleos nos estados a e A , são descritas por $|\alpha\rangle$ e $(\varepsilon_\alpha - h)|\alpha\rangle = 0$. A interação pode ser dividida em dois termos:

$$\mathbb{U} = \mathbb{U}^{(1)} + \mathbb{U}^{(2)} \quad , \quad (2.29)$$

onde $\mathbb{U}^{(1)}$ é diagonal no espaço de canais, porém usualmente construído tal que $\mathbb{U}^{(2)}$ seja completamente não-diagonal:

$$\mathbb{U}^{(1)} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle U_{\alpha\alpha} \langle\alpha| \quad , \quad (2.30)$$

$$\mathbb{U}^{(2)} = \sum_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle U_{\alpha\alpha'} \langle\alpha'| \quad , \quad (2.31)$$

onde os termos do potencial de dentro da somatória são similares à Equação (2.27), porém com o potencial dividido:

$$U_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}) = \int d\xi |\phi_\alpha(\xi)|^2 \mathbb{U}^{(1)}(\mathbf{r}, \xi)$$

$$U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) = \int d\xi \phi_\alpha^*(\xi) \mathbb{U}^{(2)}(\mathbf{r}, \xi) \phi_{\alpha'}(\xi) \quad .$$

Para garantir $U_{\alpha\alpha'}$ completamente não-diagonal:

$$U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) = \int d\xi \phi_\alpha^*(\xi) \mathbb{U}(\mathbf{r}, \xi) \phi_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}) \delta_{\alpha\alpha'} \quad .$$

Para obter as equações de canais acoplados, usamos a função de onda do sistema expandida em N canais,

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=0}^{N-1} |\psi_\alpha\rangle |\alpha\rangle \quad , \quad (2.32)$$

na Equação de Schrödinger.

Os canais que desconsideramos na expansão da função de onda são aqueles fracamente acoplados. Entretanto, eles não podem ser completamente ignorados. A sua influência na seção de choque poder ser tratada através da parte imaginária do potencial de interação complexo:

$$U_{\alpha\alpha} = V_{\alpha\alpha} - iW_{\alpha\alpha} \quad . \quad (2.33)$$

Da mesma forma que obtivemos a Equação (2.26), porém utilizando os termos da expansão da Eq.(2.32), $\psi_\alpha(\mathbf{r})$, temos:

$$\left[E_\alpha + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - U_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}) \right] \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'=0}^{N-1} U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.34)$$

onde $E_\alpha = E - \varepsilon_\alpha = E - \varepsilon_a - \varepsilon_A$.

Fazendo $[\psi_\alpha(\mathbf{r})]^* \times [\text{Eq.}(2.34)] - [\psi_\alpha(\mathbf{r})] \times [\text{Eq.}(2.34)]^*$ e usando o potencial complexo

da Eq.(2.33) [14]:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2\mu i} \left[\psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_\alpha(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \right] \\ = -\frac{2}{\hbar} W_\alpha(\mathbf{r}) |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 \\ + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha'=0}^{N-1} [\psi_\alpha^*(\mathbf{r}) U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r}) U_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{r})] . \end{aligned} \quad (2.35)$$

Podemos reescrever o lado esquerdo da Equação (2.35) como:

$$\nabla \cdot \left[\frac{\hbar}{2\mu i} (\psi_\alpha^* \nabla \psi_\alpha - \psi_\alpha \nabla \psi_\alpha^*) \right] \equiv \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}) , \quad (2.36)$$

onde \mathbf{j}_α representa o fluxo pelo canal α . Para obter a corrente total somamos sobre os N canais considerados. Caso não houvesse perda de fluxo devido aos canais fracamente acoplados, o lado direito da Equação (2.35) seria nulo e a equação da continuidade não seria quebrada, porém não é isso que ocorre:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\sum_{\alpha=0}^{N-1} \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}) \right) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{N-1} W_\alpha(\mathbf{r}) |\psi_\alpha|^2 \\ + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha,\alpha'=0}^{N-1} [\psi_\alpha^*(\mathbf{r}) U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r}) U_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{r})] . \end{aligned}$$

O último termo desta equação desaparece quando o potencial acoplado de interação, $U_{\alpha\alpha'}$, é hermitiano e resta apenas a expressão mais simples para a perda de fluxo devido aos canais fracamente acoplados:

$$\nabla \cdot \sum_{\alpha=0}^{N-1} \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{N-1} W_\alpha(\mathbf{r}) |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 . \quad (2.37)$$

A Equação (2.37) leva a uma expressão generalizada para a seção de choque de absorção, que ocorre devido à perda de fluxo através dos canais desprezados na expansão (Eq.(2.32)). Para obter a seção de choque de absorção a partir da Equação (2.37) precisamos avaliar o fluxo da corrente total através de uma superfície esférica S com raio grande o suficiente para englobar todo o sistema. O número de partículas saindo desta esfera é [14]:

$$N^{\text{total}} = - \sum_{\alpha=0}^{N-1} \int_S d\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}) = - \sum_{\alpha=0}^{N-1} \int_V d^3\mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{r}_\alpha(\mathbf{j}) , \quad (2.38)$$

onde foi usado o Teorema da Divergência. Aplicando a Eq.(2.37), temos:

$$N^{\text{total}} = \frac{2}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \int_V d^3\mathbf{r} W_\alpha(\mathbf{r}) |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 \equiv \frac{2}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \langle \psi_\alpha | W_\alpha | \psi_\alpha \rangle . \quad (2.39)$$

A seção de choque total de absorção σ_A , é dada pela razão entre N^{total} e o fluxo

incidente³ [14]:

$$\sigma_A = \frac{1}{|A|^2} \frac{2}{\hbar v_0} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \langle \psi_\alpha | W_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \frac{1}{|A|^2} \frac{k_0}{E} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \langle \psi_\alpha | W_\alpha | \psi_\alpha \rangle, \quad (2.40)$$

onde o fator $|A|^{-2}$ garante que a seção de choque de absorção seja independente da normalização da função de onda, v_0 é a velocidade da partícula incidente com momentum $p_0 = \hbar k_0$, então $2/(\hbar v_0) = k_0/E$.

Podemos, ainda, definir a seção de choque total da reação, σ_R , que está associada à probabilidade de que o sistema não se encontre no canal de entrada após a colisão:

$$\sigma_R = \sigma_A + \sum_{\alpha \neq 0} \sigma_\alpha, \quad (2.41)$$

onde σ_α é a seção de choque integrada do canal α :

$$\sigma_\alpha = \int d\Omega_{\mathbf{k}_\alpha} \left[\frac{d\sigma_\alpha(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_0)}{d\Omega} \right]. \quad (2.42)$$

É possível separar a parte imaginária do potencial de interação em uma parte responsável pela fusão e outra pela perda de fluxo devido às reações diretas, respectivamente: $W_\alpha = W_\alpha^F + W_\alpha^D$. Com isso a seção de choque de fusão, σ_F , pode ser escrita como:

$$\sigma_F = \frac{k_0}{E} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \langle \psi_\alpha | W_\alpha^F | \psi_\alpha \rangle. \quad (2.43)$$

2.3.1 Acoplamento com estados do contínuo

O conjunto de Equações (2.26) é suficiente para descrever os espalhamentos elástico e inelástico, porém não consegue descrever colisões em que há rearranjo ou quebra dos núcleos. Para poder descrever tal sistema é necessário incluir estados não-ligados, ou seja, do contínuo. Estados intrínsecos do contínuo são especialmente importantes na quebra de núcleos fracamente ligados, pois o canal de quebra influencia as seções de choque de diversos processos, como do espalhamento elástico, inelástico e da fusão [14]. Entretanto, com o acoplamento a canais não-ligados sendo relevante, aproximações perturbativas não são suficientes para a descrição de colisões com rearranjo e/ou quebra, então o tratamento com canais acoplados se torna importante. Contudo, a aplicação numérica deste método se torna inviável quando estamos no contínuo, pois teremos um número infinito de equações acopladas, mesmo se truncarmos a expansão em canais numa energia máxima. Portanto, é necessário utilizar outra aproximação: Canais Acoplados do Contínuo Discretizado (CDCC, do inglês *Continuum Discretized Coupled Channels*).

³A intensidade do feixe é dada pela corrente associada à onda plana incidente (j^{in}):

$$J = \hat{z} \cdot \mathbf{j}^{\text{in}} = \frac{\hbar}{2\mu i} \left[e^{-ikz} \frac{d}{dz} (e^{ikz}) - e^{ikz} \frac{d}{dz} (e^{-ikz}) \right] = v_0 |A|^2.$$

O método CDCC consiste em truncar o número de estados do contínuo limitando o espectro do contínuo em uma energia máxima. Cria-se, então, uma malha para discretizar esse espaço contínuo limitado, o que pode ser feito de duas formas: criando uma malha igualmente espaçada para o momentum ou para a energia [31]. Ao criar uma malha no espaço de energia, as funções de onda do contínuo são substituídas pelo conjunto de pacotes de onda [7]:

$$\phi_\beta(x) = \int d\varepsilon \Gamma(\varepsilon - \hat{\varepsilon}_\beta) \varphi_\varepsilon(x) \quad ; \quad \beta = 1, \dots, N_C \quad , \quad (2.44)$$

onde N_C é o número de estados do contínuo. Os pacotes no espaço de energia, $\Gamma(\varepsilon - \hat{\varepsilon}_\beta)$, são centrados em $\hat{\varepsilon}_\beta$ e têm largura $\Delta\varepsilon$.

A malha da discretização pode ter um espaçamento uniforme no espaço de momentum, resultando em uma malha na energia com as larguras crescendo quadraticamente e que não são mais centradas em $\hat{\varepsilon}_\beta$, pois esse valor se refere ao centro do pacote em momento: \hat{k}_β . Então as funções de onda do contínuo são discretizadas para ter a energia referente ao valor médio \hat{k}_β da largura Δk [31]:

$$\hat{\varepsilon}_\beta = \frac{\hbar}{2\mu} \left[\left(\frac{\hat{k}_{\beta-1} + \hat{k}_\beta}{2} \right)^2 + \frac{\Delta k^2}{12} \right] \quad . \quad (2.45)$$

Essas duas possibilidades podem ser vistas na Figura 2.7. A discretização em energia é mais conveniente quando há ressonâncias no sistema, assim se escolhe o espaçamento (que não será uniforme) de modo a fornecer mais detalhes na região da ressonância. Em sistemas mais simples, sem ressonância, a escolha entre a discretização no espaço de momento ou de energia não leva a consequências relevantes nos observáveis aqui estudados, como veremos mais adiante.

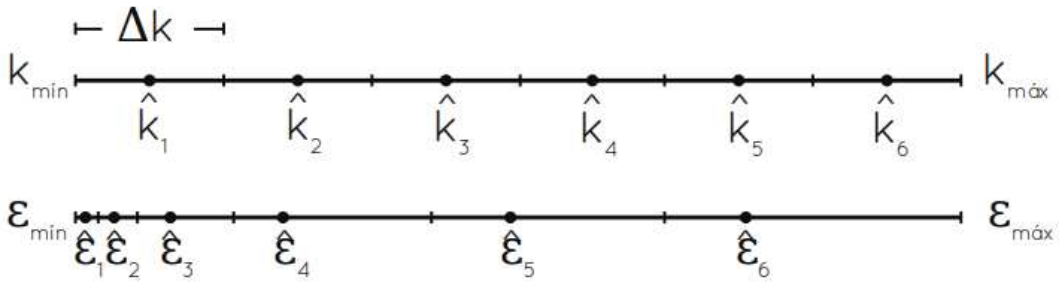


Figura 2.7: Representação gráfica da discretização do espaço contínuo de momento em um Δk fixo, resultando em um espaçamento quadrático na energia.

As funções de onda $\phi_\beta(x)$ obtidas da Eq.(2.44) não são auto-estados de energia, porém são funções localizadas compostas pela superposição de diferentes auto-estados φ_ε , que não são localizadas. Para obtermos mais detalhes do sistema no espectro de energia é necessário diminuir a largura dos canais do contínuo. Porém, devido ao Princípio de Incerteza, isso diminui a precisão no espaço, aumentando o alcance de $\phi_\beta(x)$, como podemos ver na Figura 2.8.

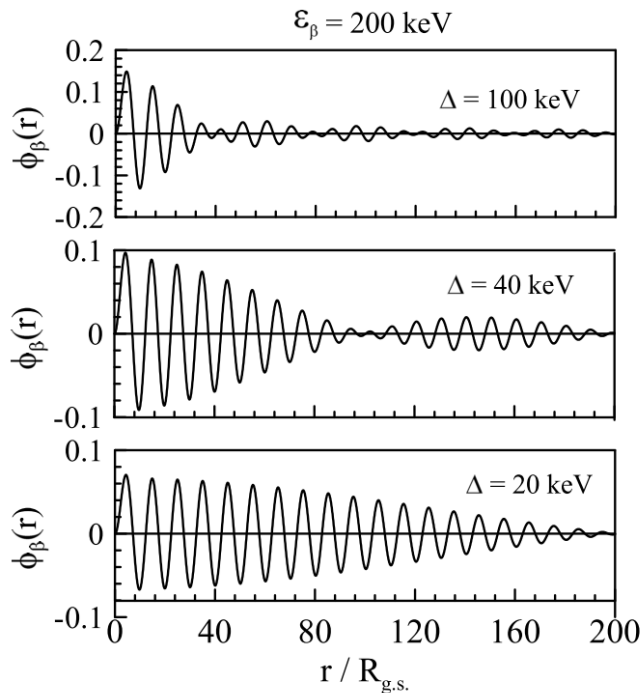


Figura 2.8: Funções de onda intrínsecas, $\phi_\beta(r)$, de um contínuo discretizado através dos pacotes de onda $\Gamma(\varepsilon - \hat{\varepsilon}_\beta)$ centrados em $\hat{\varepsilon}_\beta = 200$ keV para um modelo simplificado para a quebra de ^{11}Li em um núcleo ^9Li mais um di-nêutron. A figura mostra resultados utilizando três diferentes larguras para a malha de energias $\Delta\varepsilon = 100, 40$ e 20 keV [14].

2.4 Aproximação semi-clássica

Em certas circunstâncias pode ser interessante pensar nas colisões nucleares em termos de partículas clássicas se movendo por trajetórias localizadas. Entretanto, em grande parte dos sistemas não podemos desconsiderar certos efeitos ondulatórios, como a interferência, difração e tunelamento. Quando a teoria clássica é modificada para incluir tais fenômenos quânticos surge a descrição semi-clássica. O modelo semi-clássico utilizado aqui também é chamado de Aproximação de Trajetória Clássica, onde o movimento relativo entre o projétil e o alvo é tratado classicamente, enquanto os graus de liberdade intrínsecos são tratados quanticamente [14]. Porém, assim como qualquer outro modelo semi-clássico, o comprimento de onda de *de Broglie* associado ao sistema é pequeno comparado à algum comprimento característico da interação [7].

2.4.1 Seção de choque semi-clássica

De acordo com o Princípio da Correspondência os resultados da teoria quântica devem se aproximar àqueles da mecânica clássica quando muitos quanta são incluídos, ou seja, no limite $\hbar \rightarrow 0$ [9], porém isso não garante que a aproximação semi-clássica sempre dará um resultado satisfatório para as seções de choque, uma vez que para diversos potenciais de interação os valores quântico e clássico convergem de forma não-uniforme⁴. A seção de choque, considerando efeitos ondulatórios, pode ser escrita como [7]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_i \left(\frac{d\sigma_i}{d\Omega} \right)^{1/2} \exp(i\beta_i(\theta)) \right|^2,$$

⁴As seções de choque clássica e quântica convergem uniformemente para partículas não idênticas interagindo através de um potencial proporcional ao inverso do quadrado da distância.

onde $(d\sigma_i/d\Omega)$ representa a seção de choque clássica para a i -ésima trajetória e a exponencial contém a fase correspondente β_i .

Em colisões não-elásticas, as transições para canais excitados intrínsecos do sistema precisam ser tratadas quanticamente, porém se considera que as partículas têm trajetórias clássicas antes e depois desse evento (aproximação que só é válida caso o evento inelástico represente apenas uma pequena perturbação do movimento relativo alvo-projétil). Assim, a seção de choque para o canal de excitação α pode ser aproximado por:

$$\frac{d\sigma_\alpha(\theta)}{d\Omega} \simeq P_\alpha(b(\theta)) \frac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega}, \quad (2.46)$$

onde

$$\frac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega} = \frac{b}{\sin(\theta)} \frac{db(\theta)}{d\theta}$$

é a seção de choque elástica, que pode ser calculada classicamente, $P_\alpha(b)$ é a probabilidade do sistema entrar no estado intrínseco α , que é dada a partir dos coeficientes da expansão em canais da função de onda do sistema. Um mesmo ângulo de espalhamento (θ) pode ser obtido através de diferentes trajetórias, ou seja, diferentes parâmetros de impacto (b) podem resultar em um ângulo de espalhamento igual, portanto é necessário considerar todas essas possibilidades ao calcular a seção de choque total para o canal- α . Para potenciais esfericamente simétricos ela é dada por:

$$\sigma_\alpha = 2\pi \int P_\alpha(b) b db. \quad (2.47)$$

2.4.2 Potencial de interação

Para calcular a probabilidade de fusão de núcleos fracamente ligados é necessário calcular a cinemática completa do sistema de três corpos para poder considerar a possível quebra do projétil, e tal cálculo pode ser feito através da aproximação semi-clássica. Dado um certo parâmetro de impacto, o movimento relativo entre o projétil e o alvo é determinado unicamente por uma trajetória clássica, $\mathbf{R}(t)$. A interação é separada em duas partes, cada uma representando o potencial entre o alvo e um dos fragmentos do projétil, ou c_1 ou c_2 :

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2), \quad (2.48)$$

onde \mathbf{r}_i ($i=1,2$) representa a separação entre o fragmento c_i e o alvo e \mathbf{R} é a separação do centro-de-massa do projétil ao alvo. Utilizando as coordenadas da Figura 2.9 podemos escrever:

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = V_1\left(\mathbf{R} + \frac{A_2}{A_P} \mathbf{r}\right) + V_2\left(\mathbf{R} - \frac{A_1}{A_P} \mathbf{r}\right),$$

onde A_1 e A_2 são os números de massa de cada fragmento e $A_P = A_1 + A_2$ é o número de massa do projétil. Na aproximação semi-clássica a interação é dividida num Potencial Óptico, V_0 , e numa interação de acoplamento, $U(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, que é responsável pela (possível) quebra do projétil. A trajetória clássica é definida pela parte real do Potencial Óptico e sua parte imaginária é responsável por absorção ao longo da trajetória. Eles são dados por:

$$V_0(\mathbf{R}) = V(\mathbf{R}, \mathbf{r} = 0) = V_1(\mathbf{R}) + V_2(\mathbf{R}) \quad (2.49)$$

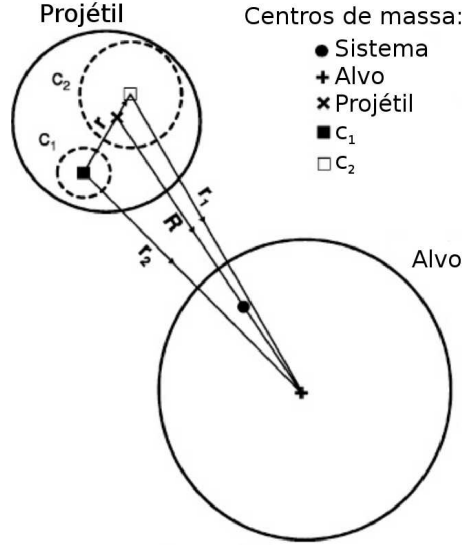


Figura 2.9: Coordenadas utilizadas para a representação da colisão nuclear onde o projétil é composto por dois fragmentos [4].

e

$$U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \Re\{V_0(\mathbf{R})\} . \quad (2.50)$$

2.4.3 Auto-funções

Nesta representação onde o projétil é considerado como dois fragmentos, as autofunções do contínuo com momento angular total J_α e projeção M_α na direção \hat{z} , e o spin e sua projeção em do i -ésimo fragmento são s_i e ν_i , então [1, 4]:

$$\Psi_\alpha \equiv \Psi_{\varepsilon_\alpha l_\alpha j_\alpha J_\alpha M_\alpha} = \sum_{m \nu_2} \langle j_\alpha m s_2 \nu_2 | J_\alpha M_\alpha \rangle \varphi_{\varepsilon_\alpha l_\alpha j_\alpha m} \chi_{s_2 \nu_2} \quad (2.51)$$

onde φ descreve o movimento do fragmento c_1 em torno de c_2 com momento angular orbital l_α :

$$\varphi_{\varepsilon_\alpha l_\alpha j_\alpha m}(\mathbf{r}) = \mathcal{R}_{\varepsilon_\alpha l_\alpha j_\alpha}(r) \sum_{m_l \nu_1} \langle l_\alpha m_l s_1 \nu_1 | j_\alpha m \rangle Y_{l_\alpha m_l}(\hat{r}) \chi_{s_1 \nu_1} , \quad (2.52)$$

com $\mathcal{R}(r)$ sendo a função de onda radial do movimento relativo entre os fragmentos do projétil. O índice α representa o conjunto de números quânticos $\alpha = \{\varepsilon_\alpha, l_\alpha, j_\alpha, J_\alpha, M_\alpha\}$. Como os spins dos fragmentos são fixos, eles não são incluídos explicitamente neste conjunto. A normalização é tal que

$$\langle \Psi_\alpha | \Psi_\beta \rangle = \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \delta(l_\alpha, l_\beta) \delta(j_\alpha, j_\beta) \delta(J_\alpha, J_\beta) \delta(M_\alpha, M_\beta) . \quad (2.53)$$

A função de onda dependente do tempo que descreve o movimento relativo entre os fragmentos c_1 e c_2 no referencial do projétil pode ser expandida em canais da seguinte forma:

$$\Psi(b, t) = \sum_i c_i(b, t) \psi_i e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} + \Psi_C(b, t) , \quad (2.54)$$

onde ψ_i representa os estados ligados e $\Psi_C(b, t)$ é a componente da função de onda no contínuo:

$$\Psi_C(b, t) = \sum_{l_\alpha j_\alpha J_\alpha M_\alpha} \int d\varepsilon_\alpha c_\alpha(b, t) e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \Psi_\alpha . \quad (2.55)$$

As amplitudes c_i e c_α dependem tanto do tempo quanto da trajetória clássica, que é especificada através da energia de colisão e do parâmetro de impacto. c_α está associada, também, à base dos estados do contínuo discretizado, Ψ_α . Seguindo essa notação, daqui em diante os índices gregos estarão associados a estados no contínuo, ao passo que i e j serão reservados para os estados ligados, a não ser que seja mencionado explicitamente algo contrário.

2.4.4 Evolução temporal

No início da colisão o projétil está no estado fundamental ($i = 0$), então as amplitudes têm os seguintes valores iniciais:

$$\begin{cases} c_0(b, t \rightarrow -\infty) & = 1 , \\ c_{i \neq 0}(b, t \rightarrow -\infty) & = 0 , \\ c_\alpha(b, t \rightarrow -\infty) & = 0 . \end{cases}$$

Estes coeficientes evoluem durante a colisão e seu estado final contém as informações relevantes sobre a seção de choque de quebra do sistema. As suas evoluções temporais são obtidas através da Equação de Schrödinger com o hamiltoniano $\mathcal{H} = h(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + U(t, \mathbf{r})$, onde $h(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ é o operador hamiltoniano associado ao movimento relativo entre os fragmentos e a interação $U(t, \mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{R}(t), \mathbf{r})$ corresponde ao potencial de acoplamento reponsável pela quebra do projétil em dois fragmentos (Eq.(2.50)). É importante salientar que as trajetórias clássicas são afetadas pelas partes coulombiana e nuclear do potencial óptico.

Usando as Equações (2.54) e (2.55) na Equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = [h + U(t)] \Psi(t) ,$$

temos as equações semi-clássicas de canais acoplados:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{c}_i(b, t) &= \sum_j U_{ij}(t) e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)t/\hbar} c_j(b, t) \\ &+ \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{i\beta}(t) e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_\beta)t/\hbar} c_\beta(b, t) \end{aligned} \quad (2.56)$$

e

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{c}_\alpha(b, t) &= \sum_j U_{\alpha j}(t) e^{i(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_j)t/\hbar} c_j(b, t) \\ &+ \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{\alpha\beta}(t) e^{i(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)t/\hbar} c_\beta(b, t) . \end{aligned} \quad (2.57)$$

Acima, os *fatores de forma* são dados por:

$$U_{\alpha\beta}(t) \equiv U_{\alpha\beta}(\mathbf{R}(t)) = \langle \Psi_\alpha | U(\mathbf{R}(t)) | \Psi_\beta \rangle \quad (2.58)$$

(U_{ij} , $U_{i\alpha}$ e $U_{\alpha j}$ são análogos). Estes termos são os elementos de matriz do potencial de acoplamento da Equação (2.50). Assumindo que o operador de acoplamento não dependa dos spins das partículas do sistema, usamos as auto-funções do contínuo (Eq.(2.51)) para escrever os fatores de forma [1, 4]

$$U_{\alpha\beta}(t) = \sum_{m m' \nu_2} \langle j_\beta m' s_2 \nu_2 | J_\beta M_\beta \rangle \langle J_\alpha M_\alpha | j_\alpha m s_2 \nu_2 \rangle f_{\alpha\beta, \nu_2}(t) , \quad (2.59)$$

onde

$$f_{\alpha\beta, \nu_2}(t) = f_{\alpha\beta, \nu_2}^{c_1}(t) + f_{\alpha\beta, \nu_2}^{c_2}(t) , \quad (2.60)$$

sendo

$$f_{\alpha\beta, \nu_2}^s(t) = \langle \varphi_{\varepsilon_\alpha l_\alpha j_\alpha (M_\alpha - \nu_2)} | U(|\mathbf{R}(r) - \kappa_s \mathbf{r}|) | \varphi_{\varepsilon_\beta l_\beta j_\beta (M_\beta - \nu_2)} \rangle , \quad (2.61)$$

com

$$\begin{aligned} \kappa_{c_1} &= \frac{-m_2}{m_1 + m_2} \\ \kappa_{c_2} &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} . \end{aligned}$$

Fazendo uma expansão multipolar, esses elementos de matriz podem ser escritos como [2]:

$$\begin{aligned} f_{\alpha\beta, \nu_2}^s &= \sqrt{\pi} \sum_{\lambda} (-1)^{-M_\beta + \nu_2 - 1/2} \left[\frac{1 + (-1)^{l_\alpha + l_\beta + \lambda}}{2} \right] \sqrt{\frac{(2j_\alpha + 1)(2j_\beta + 1)}{2\lambda + 1}} \\ &\quad \times \langle j_\alpha (\nu_2 - M_\alpha) j_\beta (M_\beta - \nu_2) | \lambda (M_\beta - M_\alpha) \rangle \\ &\quad \times \left\langle j_\alpha \frac{1}{2} j_\beta \frac{-1}{2} | \lambda 0 \right\rangle Y_{\lambda (M_\alpha - M_\beta)}^*(\hat{\mathbf{R}}) I_{\alpha\beta}^{\lambda s}(R) , \end{aligned} \quad (2.62)$$

onde

$$I_{\alpha\beta}^{\lambda s}(R) = \frac{2}{2\lambda + 1} \int_0^\infty dr r^2 \mathcal{R}_\alpha^*(r) \mathcal{F}_\lambda^s(r, R) \mathcal{R}_\beta(r) \quad (2.63)$$

e

$$\mathcal{F}_\lambda^s(r, R) = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin\theta P_\lambda(\cos\theta) U\left(\sqrt{\kappa_s^2 r^2 + R^2 - 2\kappa_s r R \cos\theta}\right) . \quad (2.64)$$

Nestas relações acima, $\mathcal{R}_\alpha(r)$ é a parte radial da função de onda $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$, $Y_{\lambda\mu}$ e P_λ são os harmônicos esféricos e os polinômios de Legendre, respectivamente.

2.4.5 Distribuição de momentum relativo

A partir das amplitudes calculadas nas equações semi-clássicas de canais acoplados (Eqs.(2.56) e (2.57)) é possível obter as seções de choque de fusão, mas para isso é necessário determinar a distribuição de momentum relativo antes. Para uma colisão com parâmetro de impacto b , em um certo tempo t , onde os spins dos fragmentos têm projeções

ν_1 e ν_2 , a distribuição de momentum relativo após a quebra é dada por [2]

$$A_{\nu_1 \nu_2}(\mathbf{k}, t, b) = \langle \Psi_{\nu_1 \nu_2}^{(-)}(\mathbf{k}, t) | \Psi_C(b, t) \rangle \quad (2.65)$$

onde $\Psi_{\nu_1 \nu_2}^{(-)}(\mathbf{k}, t)$ é a função de onda com condições de contorno de entrada que descreve o espalhamento dos fragmentos. Calculando a função de onda e expandindo a Equação (2.65) temos [4]:

$$A_{\nu_1 \nu_2}(\mathbf{k}, t, b) = \frac{-\hbar}{\sqrt{\mu k}} \sum_{l j J M} \langle J M | j(M + \nu_2) j_2(-\nu_2) \rangle \langle j(M + \nu_2) | l(M + \nu_1 + \nu_2) s(-\nu_1) \rangle \\ \times Y_{l(M + \nu_1 + \nu_2)}^*(\hat{\mathbf{k}}) e^{i\sigma_l} i^l (-1)^{J-M} c_{\varepsilon_k l j J(-M)}(b, t), \quad (2.66)$$

onde μ é a massa reduzida dos fragmentos do projétil. O módulo quadrado dessa distribuição pode ser interpretado como a densidade de probabilidade no espaço de momentum de que o projétil irá se quebrar em dois fragmentos com momentum relativo $\hbar \mathbf{k}$ em uma colisão com parâmetro de impacto b .

Nestes cálculos semi-clássicos não há a conservação de energia enquanto o projétil segue sua trajetória clássica pré-determinada pelas condições iniciais da colisão. Para corrigir isso, utiliza-se a teoria de Alder e Winther [32] para o espalhamento inelástico, na qual a trajetória do projétil é associada à energia do centro-de-massa, que é definido pela média geométrica entre a trajetória correspondente ao canal de entrada (com energia E_0) e a trajetória com uma energia igual à do canal de entrada descontando a média do valor da energia de quebra do projétil (ϵ), $E_0 - \epsilon$.

2.4.6 Seções de choque de fusão

A seção de choque para a fusão completa direta é calculada usando a probabilidade de que o projétil com momentum $\hbar K$ na onda parcial L vá se fundir com o alvo ($T_L^{(P)}(K)$) e sua probabilidade de quebra ($P_L^{bup} = \sum_{q \neq 0} |a_q(b, t \rightarrow \infty)|^2$) [2]:

$$\sigma_{\text{DCF}} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L + 1) (1 - P_L^{bup}) T_L^{(P)}(K). \quad (2.67)$$

As probabilidades de fusão são dadas pela fórmula aproximada de Hill-Wheeler se $R \geq r_{b_0}$:

$$T_L^{(P)}(K) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{2\pi}{\hbar\omega_0} \left(V_{B_0} + \frac{\hbar^2}{2\mu_{PT}} \frac{(L+1/2)^2}{r_{b_0}^2} - E \right) \right]}, \quad (2.68)$$

onde a energia é $E = \hbar^2 K^2 / 2\mu_{PT}$ e V_{B_0} , r_{b_0} e $\hbar\omega_0$ são, respectivamente, a altura, o raio e a curvatura da barreira de potencial do sistema projétil-alvo. Caso $R < r_{b_0}$, consideramos que a fusão é garantida, portanto $T_L^{(P)}(K) = 1$.

Para calcular a seção de choque de fusão incompleta onde o fragmento c_i se funde usamos:

$$\sigma_{\text{IF}_i} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L + 1) \int d^3 \mathbf{k} |A^L(\mathbf{k})|^2 P_{F_i}(\mathbf{k}), \quad (2.69)$$

e para a fusão completa sequencial temos a seguinte seção de choque:

$$\sigma_{\text{SQ}} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L+1) \int d^3\mathbf{k} |A^L(\mathbf{k})|^2 P_{\text{SQ}}(\mathbf{k}) . \quad (2.70)$$

Nas relações acima, $A^L(\mathbf{k})$ é a distribuição de momento relativo entre os fragmentos do projétil no instante de máxima aproximação (t_f) [2]:

$$A^L(\mathbf{k}) = \sum_{\nu_1 \nu_2} A_{\nu_1 \nu_2}(\mathbf{k}, t_f, b) , \quad (2.71)$$

ou seja, a soma da Equação (2.65) sobre as projeções dos spins dos fragmentos c_1 e c_2 .

Na Eq.(2.69), $P_{F_i}(\mathbf{k})$ é a probabilidade de que apenas o fragmento c_i vá fundir com o alvo. Sendo c_j o fragmento que não funde, tal probabilidade é dada por:

$$P_{F_i}(\mathbf{k}) = T_{l_i}^{(c_i)}(E_i) \left(1 - T_{l_j}^{(c_j)}(E_j) \right) . \quad (2.72)$$

A Eq.(2.70) descreve a probabilidade de que ambos os fragmentos acabem por se fundir com o alvo:

$$P_{\text{SQ}}(\mathbf{k}) = T_{l_1}^{(c_1)}(E_1) T_{l_2}^{(c_2)}(E_2) . \quad (2.73)$$

Nestas últimas equações, $T_{l_i}^{(c_i)}(E_i)$ é a probabilidade de que o fragmento c_i , com energia E_i e momento angular l_i , vá tunelar pela barreira do potencial de interação com o alvo. Note que $\left[1 - T_{l_j}^{(c_j)}(E_j) \right]$ é a probabilidade de **não** haver tunelamento do outro fragmento. A utilização da fórmula de Hill-Wheeler (Equação (2.68)) precisa ser tomada com cuidado, uma vez que é necessário considerar a trajetória clássica e a velocidade relativa entre os fragmentos do projétil e o alvo. A conservação de energia requer que a velocidade relativa entre o projétil e o alvo u seja modificada após a quebra do projétil, porém (por simplicidade) a direção é considerada como inalterada, de tal forma que os fragmentos seguem a mesma trajetória caso não tivesse ocorrido a quebra. A nova velocidade é descrita por [2]:

$$u' = \sqrt{u^2 - \frac{\mu_{12}}{\mu_{PT}} v^2 - \frac{2B}{\mu_{PT}}} , \quad (2.74)$$

onde μ representa a massa reduzida dos sistemas projétil-alvo e dos fragmentos c_1 e c_2 e $v = |\mathbf{v}|$ é a velocidade do projétil em relação ao alvo. A velocidade de cada fragmento (também em relação ao alvo) é dada por

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{u}' - \frac{m_i}{m_P} \mathbf{v} \quad (2.75)$$

e a energia do movimento relativo entre o projétil c_i e o alvo fica

$$E_i = \frac{1}{2} \mu_i v_i^2 + V_i(\mathbf{r}_i) , \quad (2.76)$$

onde μ_i é a massa reduzida do fragmento c_i com o alvo e $V_i(\mathbf{r}_i)$ é o potencial de interação entre esses nucleons na posição em que é feito o cálculo da fusão (usualmente na posição de máxima aproximação). O momento angular desse sistema c_i -alvo com respeito ao seu

centro de massa é

$$\hbar \mathbf{l}_i = \mu_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i . \quad (2.77)$$

Usando $l_i = |\mathbf{l}_i|$ e V_{B_i} , r_{b_i} e $\hbar\omega_i$ como a altura, raio e curvatura da barreira de potencial do sistema c_i -alvo, a formula de Hill-Wheeler pode ser usada nas Equações (2.72) e (2.73) para calcular a probabilidade da fusão de apenas um fragmento (fusão incompleta) ou de ambos os fragmentos após a quebra do projétil (fusão sequencial):

$$T_{l_i}^{(c_i)}(E_i) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{2\pi}{\hbar\omega_i} \left(V_{B_i} + \frac{\hbar^2}{2\mu_i} \frac{(l_i+1/2)^2}{r_{b_i}^2} - E_i \right) \right]} . \quad (2.78)$$

Quando o fragmento está dentro da barreira ($R < r_{b_i}$) se considera que há certamente o tunelamento: $T_{l_i}^{(c_i)}(E_i) = 1$.

As ferramentas descritas neste capítulo são aquelas necessárias para o estudo semi-clássico da colisão de íons fracamente ligados. Ela apresenta excelentes resultados quando comparados com outros modelos puramente quânticos ou com resultados experimentais, como podemos ver nas Figuras 2.10 e 2.11, respectivamente.

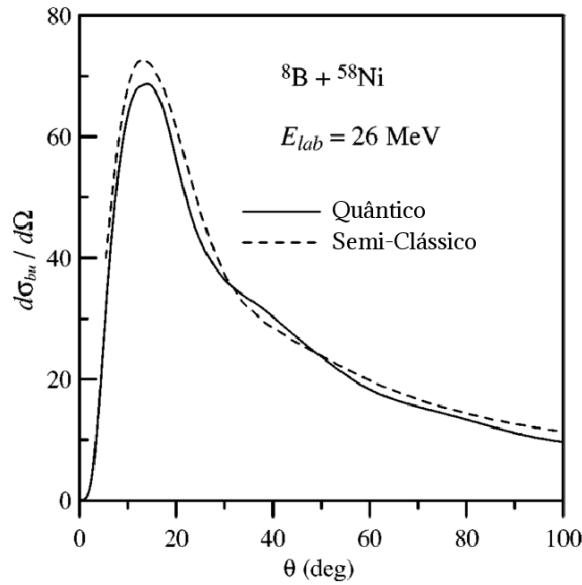


Figura 2.10: Seção de choque diferencial como função do ângulo de espalhamento do centro de massa do sistema $p+{}^7\text{Be}$. A linha contínua corresponde ao cálculo inteiramente quântico, enquanto os resultados dessa aproximação semi-clássica, representados pela linha pontilhada, estão em ótimo acordo com o primeiro [1].

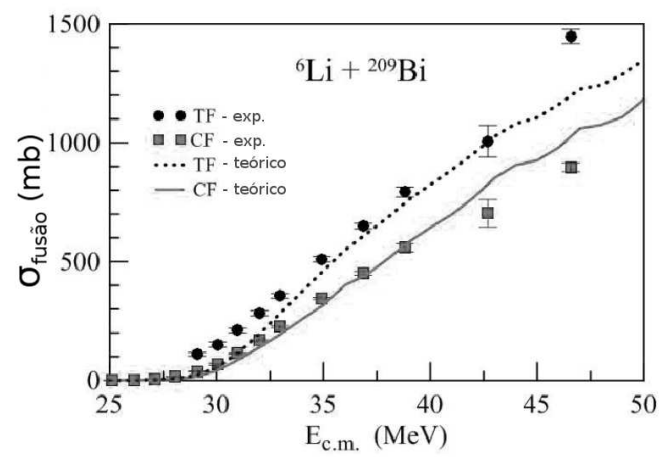


Figura 2.11: Seção de choque de fusão total e completa em função da energia do centro de massa da colisão ${}^6\text{Li} + {}^{209}\text{Bi}$ [2].

3 *Aplicação Computacional*

Com o desenvolvimento e popularização dos computadores digitais a partir da metade do Século XX houve um grande aumento na utilização de métodos numéricos para soluções de problemas do mundo real. Entretanto, grande parte dos problemas de interesse envolvem funções e variáveis em espaços contínuos, algo que é impossível de se fazer numericamente devido à limitação de memória nos computadores, além do tempo infinito necessário para se tratar infinitos graus de liberdade, e ao fato da informação ser armazenada em bits, uma variável discreta. Para contornar este problema é necessário discretizar o sistema a ser estudado, ou seja, adaptar as variáveis contínuas em seus homólogos discretos, um processo por vezes chamado de discretização ou quantização. Este processo faz um mapeamento de “muitos-para-poucos”, sendo então um processo não-linear e irreversível, uma vez que não é possível obter os dados de entrada a partir do resultado gerado por este método discreto [33]. É natural que surjam erros durante este processo, já que o sistema discreto não é exatamente igual ao contínuo, apesar de ser equivalente. O objetivo, então, é construir algoritmos e métodos computacionais que sejam eficientes e mantenham um limite razoável dos erros que surgem naturalmente.

Neste capítulo será apresentada a sequência de cálculos computacionais necessários para a computação das seções de choque fusão completa e incompleta de núcleos fracamente ligados, abordando as discretizações e métodos numéricos mais relevantes que foram utilizados. A apresentação deste conteúdo será na mesma sequência utilizada computacionalmente, facilitando a compreensão do cálculo realizado. No final do capítulo, serão apresentadas as otimizações computacionais realizadas em relação ao código numérico dos trabalhos de referência [1, 2, 4]. Com isso apresentado, será possível estudar a interação de núcleos fracamente ligados com alvos nucleares mais pesados. Estes resultados estão apresentados no capítulo seguinte.

3.1 Funções de onda

O cálculo das funções de onda de um determinado sistema necessita de dois métodos diferentes, um para as funções de onda do sistema ligado e outro para o sistema no contínuo. Para gerar estas funções de onda, precisa-se ter conhecimento sobre o potencial de interação entre os fragmentos do projétil. Estados excitados ligados também podem ser gerados, mas pode ser necessário usar diferentes parâmetros para o potencial.

As funções de onda do sistema ligado e seus auto-valores são obtidos utilizando o algoritmo de Numerov, que é um método eficiente para a integração de equações diferenciais [34]. Detalhes sobre a aplicação e solução numérica podem ser encontradas no

Apêndice A. Para obter as funções de onda dos estados do contínuo é necessário realizar a discretização desse espaço contínuo, que é feita seguindo o método CDCC [1, 4, 31], que já foi descrito na Seção 2.3.1, mas aqui será abordado em mais detalhes:

1. Divide-se o contínuo em um número finito de seções de momento ou energia (*bins*) (que podem ter diferentes larguras) $\Delta_n = \Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \dots$ centradas em:

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}_n &= \hat{\varepsilon}_1, \hat{\varepsilon}_2, \hat{\varepsilon}_3, \dots \text{ ou} \\ \hat{k}_n &= \hat{k}_1, \hat{k}_2, \hat{k}_3, \dots ;\end{aligned}$$

2. Cria-se o conjunto q , composto pelo n -ésimo *bin* e pelos números quânticos de momento angular: $q \equiv \{n, l, j, J, M\}$;
3. Verifica-se quais estados estão presentes no conjunto q . Diz-se que um estado α pertence a tal conjunto se $l_\alpha = l$, $j_\alpha = j$, $J_\alpha = J$ e $M_\alpha = M$ e seu momento (ou energia, dependendo da discretização), se encontra dentro do *bin* de momento (energia) q .

As funções de onda presentes no n -ésimo *bin* são aproximadas pela seguinte expressão:

$$\Psi_\alpha \rightarrow \Psi_n \quad . \quad (3.1)$$

Se não há ressonâncias no sistema, como nos casos estudados aqui, podemos discretizar o espaço de momentum em uma malha com espaçamento Δk fixo, o que resulta em uma discretização quadrática na energia $\hat{\varepsilon}_n$ [31]:

$$\hat{\varepsilon}_n = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\left(\frac{\hat{k}_{n-1} + \hat{k}_n}{2} \right)^2 + \frac{\Delta k^2}{12} \right] \quad . \quad (3.2)$$

Com o espaço do contínuo discretizado, sabe-se os auto-valores $\hat{\varepsilon}_n$ das funções de onda a serem calculadas. Para tal, é utilizado o método de Runge-Kutta de quarta ordem [34, 35].

3.2 Fatores de forma

Os fatores de forma são os elementos de matriz de acoplamento entre os estados ligados e do contínuo. Foram estudados na Seção 2.4.4 e vêm das Equações (2.56) e (2.57), resultando na Equação (2.58), repetida abaixo:

$$U_{\alpha\beta}(t) \equiv U_{\alpha\beta}(\mathbf{R}(t)) = \langle \Psi_\alpha | U(\mathbf{R}(t)) | \Psi_\beta \rangle \quad , \quad (3.3)$$

onde U_{ij} , $U_{i\alpha}$, $U_{\alpha j}$ são análogos, Ψ_i e Ψ_j representam os estados ligados e Ψ_α e Ψ_β os estados do contínuo. As Equações (2.62), (2.63) e (2.64) apresentam os cálculos que devem ser feitos para se obter os fatores de forma, que são realizados utilizando as funções de onda previamente calculadas. Uma consequência direta de utilizar funções de onda calculadas pelo método CDCC é que diferentes fatores de forma relacionados a funções

de onda que estão no mesmo *bin* q acabam tendo o mesmo fator de forma, isto é:

$$U_{\alpha\alpha'} = U_{\beta\beta'} \quad \text{se} \quad \begin{cases} \alpha, \beta \in q \\ \alpha', \beta' \in q' \end{cases} . \quad (3.4)$$

A parte nuclear do potencial da Eq.(3.3) é do tipo Woods-Saxon:

$$U_{\text{nuc}}(r) = \frac{-U_{\text{nuc}}^{(0)}}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} , \quad (3.5)$$

onde $U_{\text{nuc}}^{(0)}$ é a sua intensidade, R é o seu raio e a é a sua difusividade. O potencial Coulombiano, por sua vez, tem a seguinte forma:

$$U_{\text{coul}}(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} ; & r > R_0 \\ \frac{3}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_0} \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right] ; & r \leq R_0 . \end{cases} \quad (3.6)$$

3.3 Dinâmica

Para calcular a evolução do sistema é necessário discretizar as Eqs.(2.56) e (2.57), que são repetidas abaixo:

$$i\hbar\dot{c}_i(b,t) = \sum_j U_{ij}(t) e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)t/\hbar} c_j(b,t) + \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{i\beta}(t) e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_\beta)t/\hbar} c_\beta(b,t) \quad (3.7)$$

e

$$i\hbar\dot{c}_\alpha(b,t) = \sum_j U_{\alpha j}(t) e^{i(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_j)t/\hbar} c_j(b,t) + \sum_{l_\beta j_\beta J_\beta M_\beta} \int d\varepsilon_\beta U_{\alpha\beta}(t) e^{i(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)t/\hbar} c_\beta(b,t) . \quad (3.8)$$

Isso é feito utilizando o método CDCC [1, 31], que foi descrito nas Seções 2.3.1 e 3.1. Normalizando a função de onda para que haja apenas um estado com momento angular $\{l, j, J, M\}$ por unidade de energia, a população de estados em um certo *bin* q é dada por novas amplitudes: $a_i = c_i$ para os estados ligados e $a_q = \sqrt{\Delta_n} c_q$ para os estados do contínuo. A evolução destas amplitudes é descrita de forma similar às equações analíticas [1, 4]:

$$i\hbar\dot{a}_i(b,t) = \sum_j U_{ij}(t) e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)t/\hbar} a_j(b,t) + \sum_{q'} U_{iq'}(t) \sqrt{\Delta_{n'}} e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_{n'})t/\hbar} a_{q'}(b,t) \quad (3.9)$$

e

$$i\hbar\dot{a}_q(b,t) = \sum_i U_{qi}(t)\sqrt{\Delta_n} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_i)t/\hbar} a_i(b,t) + \sum_{q'} U_{qq'}(t)\sqrt{\Delta_n}\sqrt{\Delta_{n'}} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'})t/\hbar} a_{q'}(b,t) . \quad (3.10)$$

Para computar essa evolução é necessário utilizar o método de Runge-Kutta com passo adaptativo, visando obter uma boa acurácia do resultado com o menor esforço computacional possível [35]. Isso é feito com um Runge-Kutta com monitoramento do erro local de truncamento para garantir boa precisão e poder ajustar o tamanho do passo adequadamente. O passo da integração é controlado pelo algoritmo de Runge-Kutta Cash-Karp, que avalia o valor da função calculada em seis pontos e utiliza esses resultados parciais para garantir um passo adequado ao cálculo da equação diferencial de interesse [35, 36].

3.4 Seções de choque

O passo final para este estudo é o cálculo das seções de choque de fusão, para assim conseguir realmente analisar o comportamento do sistema e compreender como o projétil e seus fragmentos interagem com o alvo. Com essa informação será possível estudar as fusões completa, incompleta e sequencial da reação.

Iniciando o cálculo pelas fusões incompletas (onde apenas um dos fragmentos do projétil se funde com o alvo) e sequencial (onde ambos os fragmentos se fundem com o alvo após a quebra do projétil), é preciso calcular a probabilidade de haver a fusão de cada fragmento com a fórmula de Hill-Wheeler (Eq.(2.78)), que utiliza a separação, velocidade, energia e momento angular relativo de cada fragmento com o alvo. Com esses resultados, as Equações (2.72) e (2.73) calculam a probabilidade de haver a fusão de cada fragmento com o alvo. A seção de choque de fusão incompleta para cada fragmento é descrita pela Eq.(2.69):

$$\sigma_{\text{IF}_i} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L+1) \int d^3\mathbf{k} |A^L(\mathbf{k})|^2 P_{F_i}(\mathbf{k}) , \quad (3.11)$$

enquanto a de fusão completa sequencial é dada pela Eq.(2.70):

$$\sigma_{\text{SQ}} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L+1) \int d^3\mathbf{k} |A^L(\mathbf{k})|^2 P_{\text{SQ}}(\mathbf{k}) . \quad (3.12)$$

Em ambos os casos é calculada a distribuição de momento relativo, descrita pela Eq.(2.66), que utiliza os resultados da dinâmica calculada anteriormente.

A seção de choque de fusão completa direta, por sua vez, é calculada com a Eq.(2.67):

$$\sigma_{\text{DCF}} = \frac{\pi}{K^2} \sum_L (2L+1) (1 - P_L^{\text{bup}}) T_L^{(P)}(K) , \quad (3.13)$$

que utiliza a Eq.(2.68). Isso permite, então, estudar por completo como é a interação do sistema e em que casos ocorre fusão direta do alvo com o projétil, apenas algum dos seus

fragmentos ou ambos fragmentos sequencialmente.

3.5 Otimizações

A fim de tornar os cálculos numéricos mais eficientes em relação ao código original das referências [1, 2, 4], foram feitas diversas otimizações. Desde pequenas alterações nos limites máximos da malha radial na qual são feitos os cálculos, até grandes reformulações de certas partes do algoritmo original. Diversos arquivos originais foram unificados, adaptando o algoritmo original que usa diversos programas para os cálculos em um único programa, facilitando o uso dessa ferramenta.

Para calcular os fatores de forma (Eq.(2.58)) coulombianos realizamos os procedimentos a seguir. Substituindo-se $u \equiv \cos(\theta)$, a integral dessa expansão multipolar pode ser escrita como:

$$I_\lambda = \int_{-1}^{+1} du P_\lambda(u) U \left(\sqrt{\kappa_s^2 r^2 + R^2 - 2\kappa_s r R u} \right) . \quad (3.14)$$

Dada as condições das Eq.(3.6) com o argumento da Eq.(3.14) acima, temos três regiões distintas de interesse em relação ao raio de interação coulombiana do alvo (R_0):

1. $\kappa_s r + R < R_0$;
2. $|\kappa_s r - R| > R_0$;
3. $|\kappa_s r - R| \leq R_0$ e $\kappa_s r + R \geq R_0$.

Da primeira condição acima temos o resultado analítico completo de forma simples, pois os únicos termos sobreviventes da ortogonalidade dos Polinômios de Legendre são aqueles com $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$:

$$I_\lambda = \frac{3}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_0} \left\{ 2 \left[1 - \frac{1}{3R_0^2} (\kappa_s^2 r^2 + R^2) \right] \delta_{\lambda 0} + \frac{4\kappa_s R r}{9R_0^2} \delta_{\lambda 1} \right\} . \quad (3.15)$$

Da segunda condição temos:

$$I_\lambda = Z_1 Z_2 e^2 \int_{-1}^{+1} du P_\lambda(u) \frac{1}{\sqrt{\kappa_s^2 r^2 + R^2 - 2\kappa_s r R u}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\sqrt{2\kappa_s r R}} \int_{-1}^{+1} du \frac{P_\lambda(u)}{\sqrt{\chi - u}} , \quad (3.16)$$

onde foi definida a variável

$$\chi \equiv \frac{\kappa_s^2 r^2 + R^2}{2\kappa_s r R} . \quad (3.17)$$

A Eq.(3.16) pode ser calculada analiticamente, porém ao aumentar λ surgem polinômios de graus elevados nos resultados. Assim, surgem instabilidades numéricas, além de não ser um cálculo computacional eficiente, e por isso o cálculo a partir de $\lambda \geq 4$ é feito utilizando o método de Gauss-Legendre [34].

A última região de interesse apresenta um caso intermediário, que divide as integrações no ponto

$$u_0 = \frac{\kappa_s^2 r^2 + R^2 - R_0^2}{2\kappa_s r R} \quad , \quad (3.18)$$

então:

$$I_\lambda = \frac{3}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_0} \int_{u_0}^{+1} du P_\lambda(u) \left[1 - \frac{1}{3R_0^2} (\kappa_s^2 r^2 + R^2 - 2\kappa_s R r u) \right] + Z_1 Z_2 e^2 \int_{-1}^{u_0} du P_\lambda(u) \frac{1}{\sqrt{\kappa_s^2 r^2 + R^2 - 2\kappa_s R r u}} \quad . \quad (3.19)$$

Utilizando a Eq.(3.17):

$$I_\lambda = \frac{3}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_0} \int_{u_0}^{+1} du P_\lambda(u) \left[1 - \frac{2\kappa_s R r}{3R_0^2} (\chi - u) \right] + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\sqrt{2\kappa_s r R}} \int_{-1}^{u_0} du \frac{P_\lambda(u)}{\sqrt{\chi - u}} \quad . \quad (3.20)$$

Novamente, as integrais acima podem ser resolvidas analiticamente. O termo com a raiz no numerador é o mesmo que aparece na Eq.(3.16), exceto pelo limite da integral, e por isso surgem as mesmas limitações computacionais mencionadas anteriormente. Os outros termos não apresentam uma instabilidade numérica tão grande, porém também apresentam altos valores em expoentes quando λ cresce, o que é muito custoso para um cálculo computacional. Assim, se restringe o cálculo analítico apenas para $\lambda \leq 4$, utilizando a quadratura de Gauss-Legendre [34] novamente para os cálculos com termos elevados nessa expansão multipolar. As integrais dos fatores de forma não são feitas quando o seu integrando é muito pequeno, o que evita que sejam calculadas integrais que resultariam em um valor muito pequeno. Isso é particularmente importante no caso do potencial nuclear, cuja intensidade decai exponencialmente com a distância.

Outra implementação que afeta significativamente o tempo de computação foi a utilização de OpenMP com a sua API (Interface de Programação de Aplicações, do inglês *Application Programming Interface*) que permite que o cálculo seja feito em múltiplos processadores com memória compartilhada paralelamente. Com o estudo desta API foi possível utilizar melhor a tecnologia dos computadores modernos para otimizar a computação sem afetar a sua precisão. A construção dos fatores de forma, a evolução da dinâmica do sistema e a integração com o método de Gauss-Legendre puderam ser paralelizadas com esta API, alterando significativamente o tempo de computação necessária para os cálculos.

Com as ferramentas apresentadas nesse capítulo, é possível estudar a colisão de um projétil fracamente ligado em um núcleo alvo pesado sob a aproximação de trajetória semi-clássica. Isso permite que, de forma inédita, computações que tomavam diversos dias de uso de CPU necessitem de apenas algumas horas. Assim, a aplicação desse código se torna viável para o estudo de diversos sistemas, uma vez que é possível obter resultados em tempos muito menores do que os cálculos puramente quânticos de canais-acoplados, como o código FRESCO [37]. Esse estudo, juntamente com uma comparação com dados experimentais, será feito no capítulo seguinte.

4 *Resultados e Discussões*

O estudo de reações com quebra de núcleos fracamente ligados tem recebido muita atenção da comunidade de Física Nuclear devido à disponibilidade de feixes radioativos e pelo interesse em se compreender a influência dessa quebra nas seções de choque do sistema [1, 4]. Diversos estudos recentes, tanto teóricos quanto experimentais, foram realizados nas últimas décadas, como aqueles citados na Referência [38]. Entretanto, ainda não se encontrou uma conclusão definitiva sobre a influência da fusão completa e incompleta na total. Também há trabalhos que prevêem a supressão da seção de choque de fusão total devido ao acoplamentos do movimento relativo dos núcleos com os canais de quebra, enquanto outros prevêem o aumento dessa seção de choque [38].

4.1 O sistema

Os trabalhos das referências [1,4,39,40] já mostraram a importância que o acoplamento dos estados do contínuo tem para a fusão de núcleos fracamente ligados para o sistema ${}^8\text{B} + {}^{58}\text{Ni}$. A reação ${}^6\text{Li} + {}^{209}\text{Bi}$ foi estudada na referência [2] e também mostra a influência que a quebra do projétil tem sobre as seções de choque de fusão. Isso nos leva a crer que o acoplamento entre estados do contínuo também vá afetar o papel da quebra do projétil na fusão de núcleos com halo (ou seja, com um nucleon de valência), como é o caso do sistema ${}^{11}\text{Be} + {}^{209}\text{Bi}$, uma vez que o ${}^{11}\text{Be}$ é fracamente ligado. Esse sistema será estudado a seguir, com a abordagem semi-clássica revisada nos capítulos anteriores.

A reação ${}^{11}\text{Be} + {}^{209}\text{Bi}$ envolve três corpos: o caroço (C) ${}^{10}\text{Be}$, o nêutron de valência (v) e o alvo (T, do inglês *target*) ${}^{209}\text{Bi}$. Os potenciais de interação a cada par de partículas dependem apenas das suas coordenadas relativas: V_{CT} , V_{vT} e V_{vC} . O ${}^{11}\text{Be}$ apresenta dois possíveis estados ligados, o fundamental $1/2^+$ e um excitado $1/2^-$. Suas energias de ligação são, respectivamente, -0.50 e -0.18 MeV. Esses estados apresentam configuração $2s_{1/2}$ para o estado fundamental e $1p_{1/2}$ para o estado excitado ligado. Eles podem ser geradas a partir de dois diferentes potenciais Woods-Saxon incluindo um termo de spin-órbita para o estado excitado [38]. Para o fundamental, a intensidade do potencial é $V_0 = -51,51$ MeV, enquanto para o excitado é $V_0 = -30$ MeV, além do termo spin-órbita $V_0^{\text{SO}} = -17,7$ MeV. O alcance e a difusividade são iguais para ambos os estados: $r_0 = 1,3488$ fm e $a = 0,52$ fm, respectivamente. Estes parâmetros estão baseados nas Refs. [38, 41]. A Figura 4.1 mostra o módulo quadrado da função de onda dos estados ligados junto com os potenciais efetivos de cada estado. O cálculo das seções de choque de fusão são feitas considerando a distância máxima entre o projétil e o alvo de 200 fm e com o momento angular total máximo de $60\hbar$.

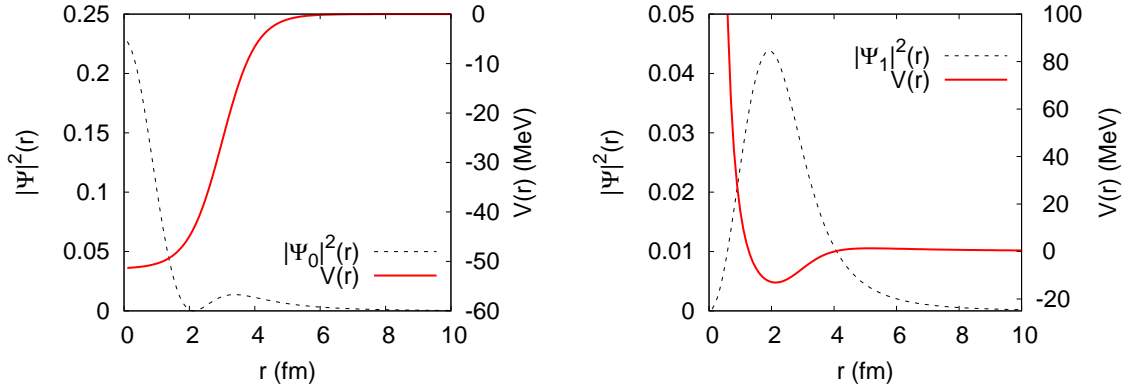


Figura 4.1: Funções de onda do estado fundamental (à esquerda) e do estado ligado excitado (à direita). Junto estão os potenciais efetivos para cada caso.

4.2 Os potenciais ópticos de interação com o alvo

A interação entre o caroço do projétil (^{10}Be) e o alvo (^{209}Bi) é dada por um potencial óptico com a geometria de Woods-Saxon [42]:

$$W(r) = \frac{W_0}{1 + e^{(r-R_0)/a}} \quad , \quad (4.1)$$

onde a profundidade do potencial é dada por:

$$W_0 = 16 \pi \gamma R_{red} a \quad , \quad (4.2)$$

com

$$R_{red} = \frac{R_C R_T}{R_C + R_T} \quad (4.3)$$

e γ é a tensão superficial:

$$\gamma = 0.95 \left[1 - 1.8 \left(\frac{N_C - Z_C}{A_C} \right) \left(\frac{N_T - Z_T}{A_T} \right) \right] \text{ MeV fm}^{-2} \quad (4.4)$$

A parametrização desse potencial pode ser feita de diferentes formas, gerando potenciais ópticos diferentes. Nesse trabalho vamos considerar duas parametrizações diferentes. A primeira, de Akyüz-Winther é [42]:

$$a^{-1} = 1,17 \left[1 + 0,53 \left(A_T^{-1/3} + A_C^{-1/3} \right) \right] \text{ fm}^{-1} \\ R_0 = R_T + R_C \quad , \quad (4.5)$$

onde $R_i = (1,20 A_i^{1/3} - 0,09)$ fm e A_i é o número de massa do i -ésimo núcleo da interação. A outra parametrização é a do potencial óptico de Christensen-Winther:

$$a = 0,63 \text{ fm} \\ R_0 = R_T + R_C + 0,29 \text{ fm} \quad , \quad (4.6)$$

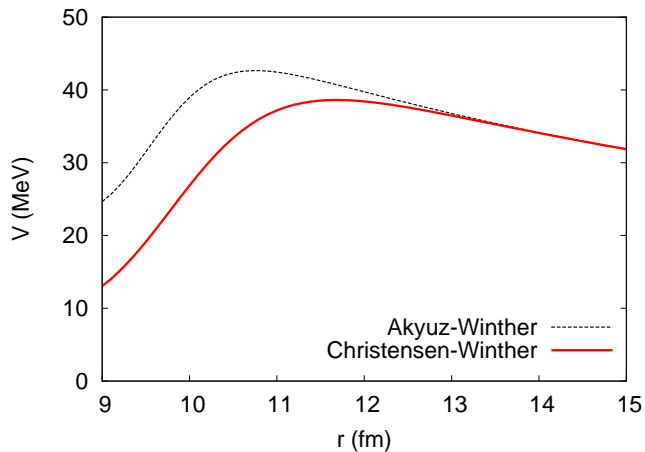


Figura 4.2: Potenciais ópticos de Akýuz-Winther e Christensen-Winther para a interação do caroço do projétil com o alvo.

com $R_i = 1,233 A_i^{1/3} - 0,98 A_i^{-1/3}$. Esses dois potenciais ópticos podem ser vistos na Figura 4.2, e nota-se que o potencial de Akýuz-Winther é menos atrativo do que o potencial de Christensen-Winther. Com isso, esperamos que esse último potencial leve a seções de choque de fusão levemente maiores, uma vez que ele é mais intenso e tem maior extensão espacial.

A interação entre o nêutron de valência e o alvo também tem a geometria de Woods-Saxon, porém sua parametrização vem de outro modelo óptico, que está descrito na referência [43]:

$$V_{vT} = \frac{-V_v(E)}{1 + e^{((r-R)/a)}} \quad , \quad (4.7)$$

onde a intensidade do potencial depende da energia de incidência do projétil através de uma relação polinomial:

$$V_v(E) = v_1 \left[1 - v_2(E - E_f) + v_3(E - E_f)^2 - v_4(E - E_f)^3 \right] \quad . \quad (4.8)$$

Os parâmetros v_i são calculados na referência [43]. O termo E_f é a energia de Fermi, definida como a energia entre a última camada ocupada e a primeira não-ocupada do núcleo. Para nêutrons:

$$E_f = -\frac{1}{2} [S_n(Z, N) + S_n(Z, N + 1)] \quad (4.9)$$

sendo S_n a energia de separação de um nêutron de um núcleo com Z prótons e N nêutrons. No presente trabalho, a faixa de energia estudada ($E_{\text{CM}}^{\text{mín}} = 30$ MeV e $E_{\text{CM}}^{\text{máx}} = 50$ MeV) variam pouco este parâmetro, que então é considerado fixo:

$$V_v = 46,5 \text{ MeV} \quad . \quad (4.10)$$

Os parâmetros retirados da referência [43] são:

$$r = 1,248 \text{ fm} \quad (4.11)$$

$$a = 0,642 \text{ fm} \quad (4.12)$$

$$v_1 = 50,1 \text{ MeV} \quad (4.13)$$

$$v_2 = 69 \times 10^{-4} \text{ MeV}^{-1} \quad (4.14)$$

$$v_3 = 15 \times 10^{-6} \text{ MeV}^{-2} \quad (4.15)$$

$$v_4 = 7 \times 10^{-9} \text{ MeV}^{-3} \quad (4.16)$$

4.3 Convergência dos resultados

Os observáveis estudados aqui são sensíveis a diferentes parâmetros do cálculo, como a energia máxima do contínuo que será permitida, a densidade de *bins* por MeV na discretização desse contínuo truncado, o número de ondas parciais que serão consideradas nos cálculos do movimento relativo entre os fragmentos do projétil e quais termos da expansão multipolar para os fatores de forma que serão considerados. É necessário avaliar todas esses parâmetros até encontrar a convergência dos resultados, para então poder comparar os cálculos feitos aqui com outros resultados da literatura. Para que a nomenclatura desse trabalho coincida com aquela da literatura, a partir de agora a seção de choque de fusão total será a soma da de fusão completa com a de fusão do ^{10}Be (diferente do que foi apresentado anteriormente, onde a seção de choque de fusão total era a soma de todas as seções de choque de fusão), ou seja:

$$\sigma_{\text{total}} = \sigma_{\text{CF}} + \sigma_{\text{IF2}} \quad (4.17)$$

É importante notar também que a seção de choque de fusão completa é a soma da seção de choque de fusão completa direta com a sequencial. O que chamamos de σ_{IF1} representa a seção de choque do nêutron (fragmento 1), enquanto σ_{IF2} representa a seção de choque do ^{10}Be (fragmento 2). Buscaremos, agora, os parâmetros de convergência utilizando o potencial Akçuz-Whinter (Eq.(4.5)). Após encontrar os parâmetros ótimos, utilizaremos-os com o potencial de Christensen-Winther (Eq.(4.6)), visando estudar as diferenças resultantes do uso de cada potencial óptico.

4.3.1 Energia máxima do contínuo

Ao discretizar as energias do contínuo é necessário determinar qual o valor máximo permitido para essas excitações. Considerando uma baixa energia máxima, espera-se que a fusão completa tenha um grande papel na fusão total. Aumentando essa energia, cresce a possibilidade de excitações no contínuo, e a seção de choque de quebra do projétil cresce. Na Figura 4.3 vemos as diversas seções de choque de fusão para cinco diferentes energias máximas do contínuo: 3, 5, 7, 10 e 12 MeV. Há convergência dos resultados quando $E_{\text{CM}} = 10 \text{ MeV}$, onde as variações dos resultados a partir desse valor se tornam pequenas. Os outros parâmetros estão fixos, sendo a densidade de 2 *bins*/MeV, foram incluídas ondas parciais no contínuo até onda parcial d e o termo de quadrupolo é o maior considerado na expansão multipolar.

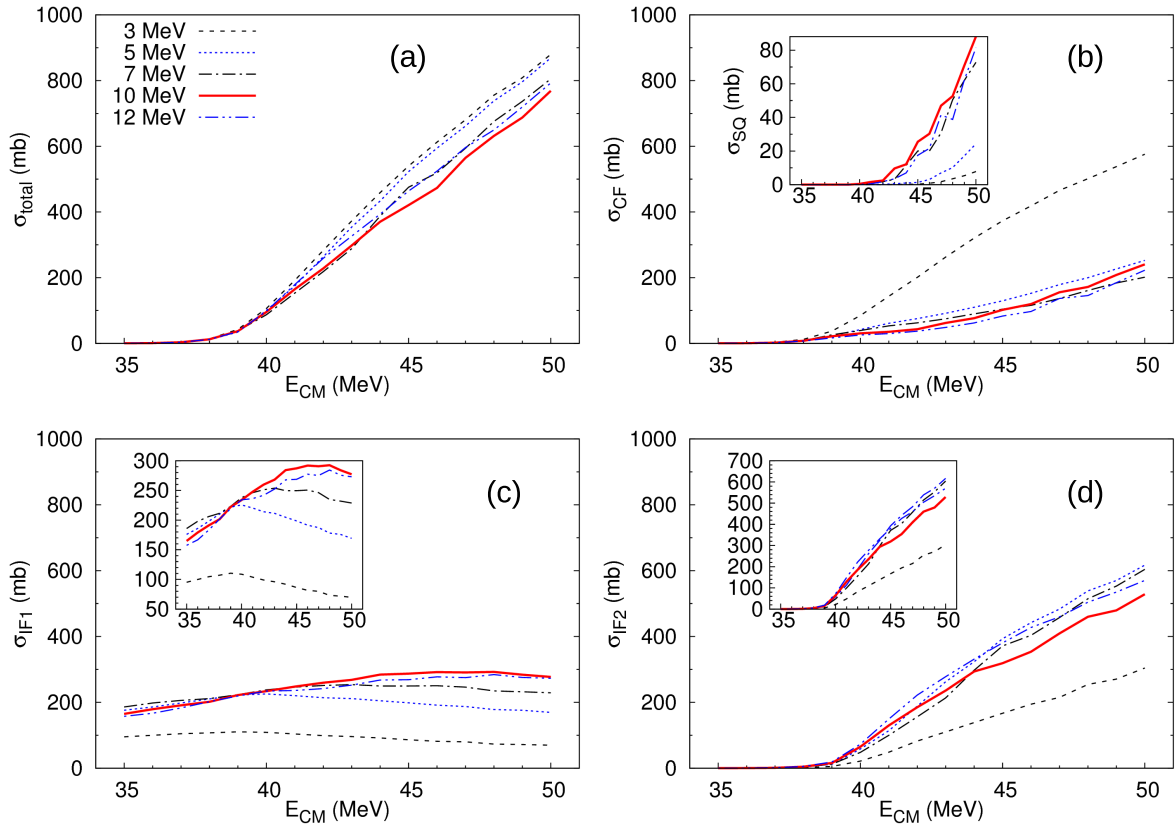


Figura 4.3: Seções de choque de (a) fusão total, (b) fusão completa (com o *inset* mostrando a contribuição da fusão sequencial), (c) fusão somente do nêutron e (d) fusão somente com o caroço (^{10}Be). São mostradas diversas energias máximas de discretização do contínuo. Concluímos que há a convergência dos resultados em $E_{\text{máx}} = 10$ MeV.

4.3.2 Densidade de *bins* por MeV

Usando o valor de convergência para a energia máxima do contínuo, pode-se estudar a influência da ganularidade da discretização, incluindo-se uma quantidade maior de *bins* por MeV na discretização do contínuo. A Figura 4.4 apresenta os resultados anteriores, com 2 *bins*/MeV, junto com uma malha mais fina, de 3 *bins*/MeV. Vê-se que há convergência já com o caso anterior. Junto com a $E_{\text{máx}} = 10$ MeV, 2*bins*/MeV passa a fazer parte do conjunto ótimo de parâmetros para os próximos cálculos.

4.3.3 Número de ondas parciais

O subespaço de quebra do projétil é alterado se forem incluídas mais ou menos ondas parciais para movimento relativo n- ^{10}Be . Os cálculos anteriores incluíam até a onda parcial d ($l_{\text{máx}} = 2$), enquanto a Figura 4.5 inclui os cálculos até a onda h ($l_{\text{máx}} = 5$). A convergência dos resultados é obtida ao se incluir até as ondas parciais g ($l_{\text{máx}} = 4$).

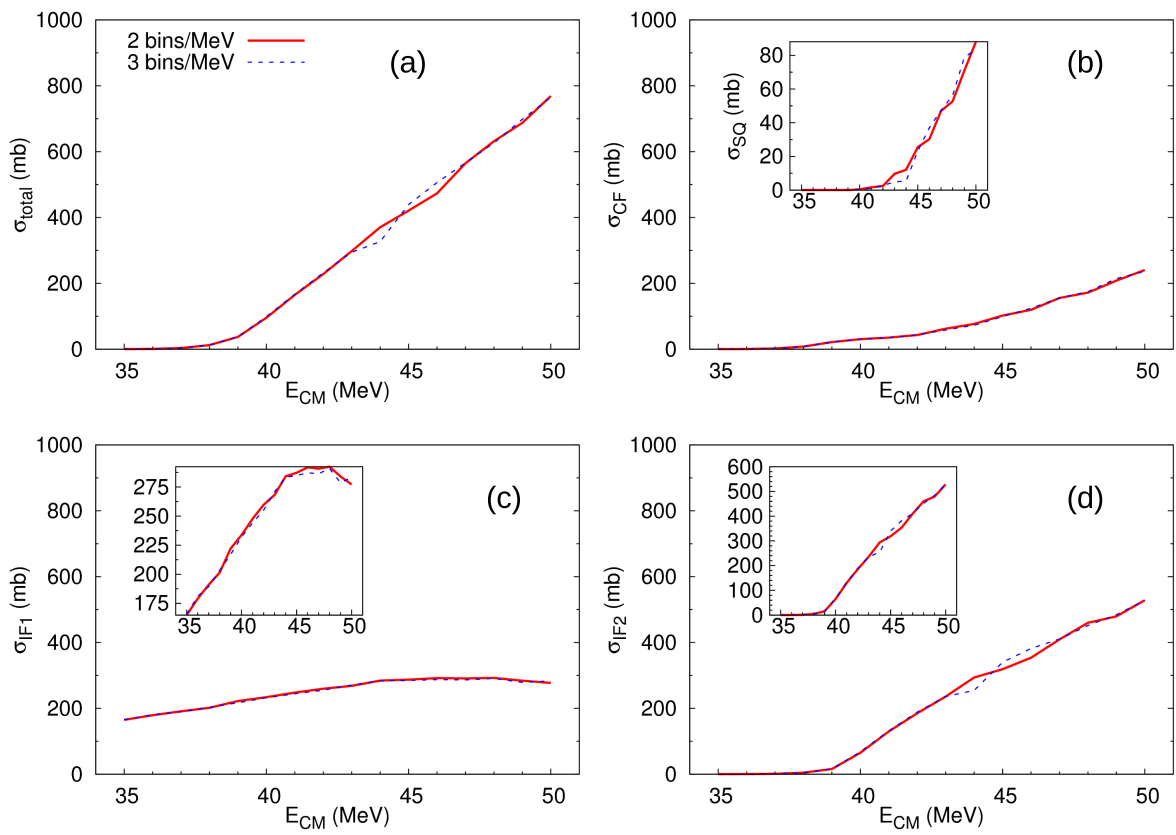


Figura 4.4: O mesmo que para a Figura 4.3, porém para $E_{CM} = 10$ MeV fixo. São estudadas duas malhas para a discretização do espaço contínuo, com 2 e 3 *bins* por MeV. A convergência ocorre quando $\rho_{bins} = 2 \text{ MeV}^{-1}$.

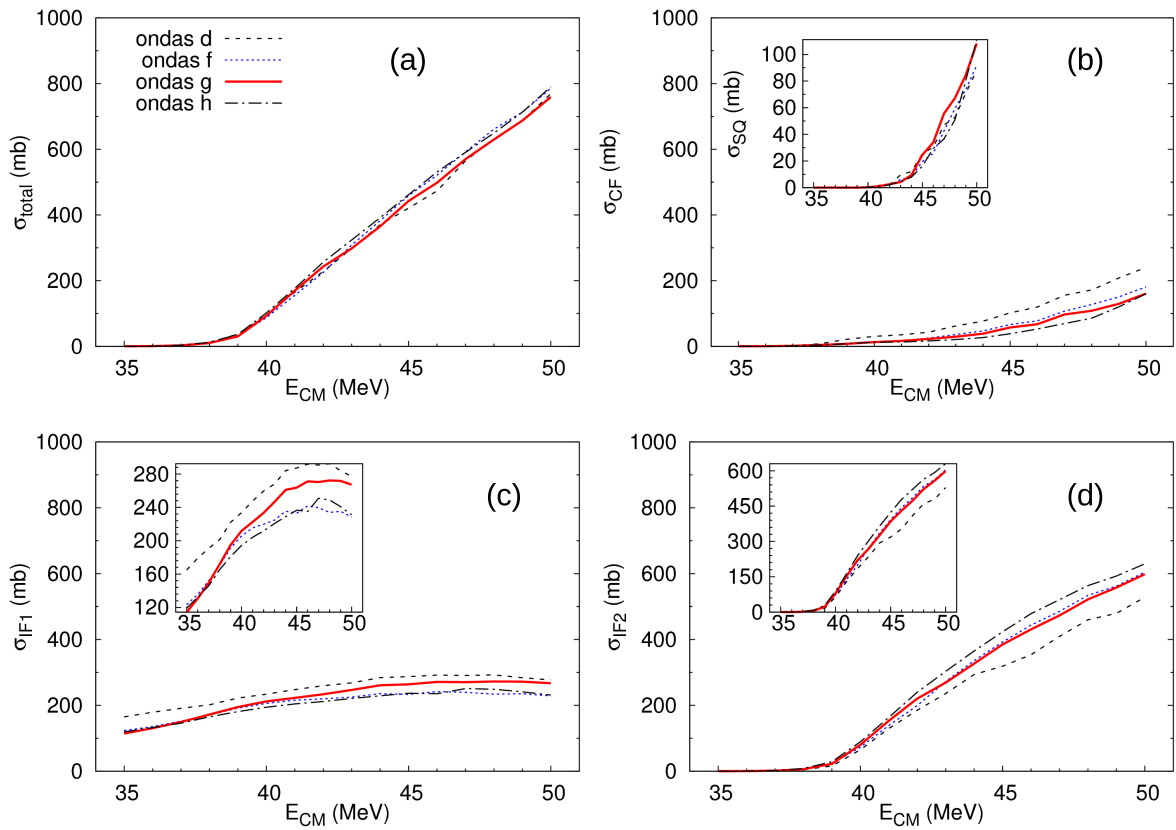


Figura 4.5: O mesmo que para a Figura 4.3, com $E_{CM} = 10$ MeV e $\rho_{bins} = 2$ MeV $^{-1}$ fixos. Vemos que há convergência apenas ao se incluir até as ondas parciais g ($l_{m\acute{a}x} = 4$).

4.3.4 Multipolaridade máxima

Para obter melhores resultados da expansão multipolar é necessário incluir diversos termos da expansão. Os cálculos até aqui foram feitos incluindo no máximo termos de quadrupolo ($\lambda = 2$). A Figura 4.6 inclui termos até $\lambda = 5$, enquanto os outros parâmetros são os ótimos já encontrados. Nota-se que a convergência é atingida no termo de octopolo ($\lambda = 4$), concluindo os parâmetros ótimos para o estudo das seções de choque de fusão:

$$\begin{aligned}
 E_{m\acute{a}x} &= 10 \text{ MeV} \\
 \rho_{bins} &= 2 \text{ MeV}^{-1} \\
 l_{m\acute{a}x} &= 4 \\
 \lambda_{m\acute{a}x} &= 4 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{4.18}$$

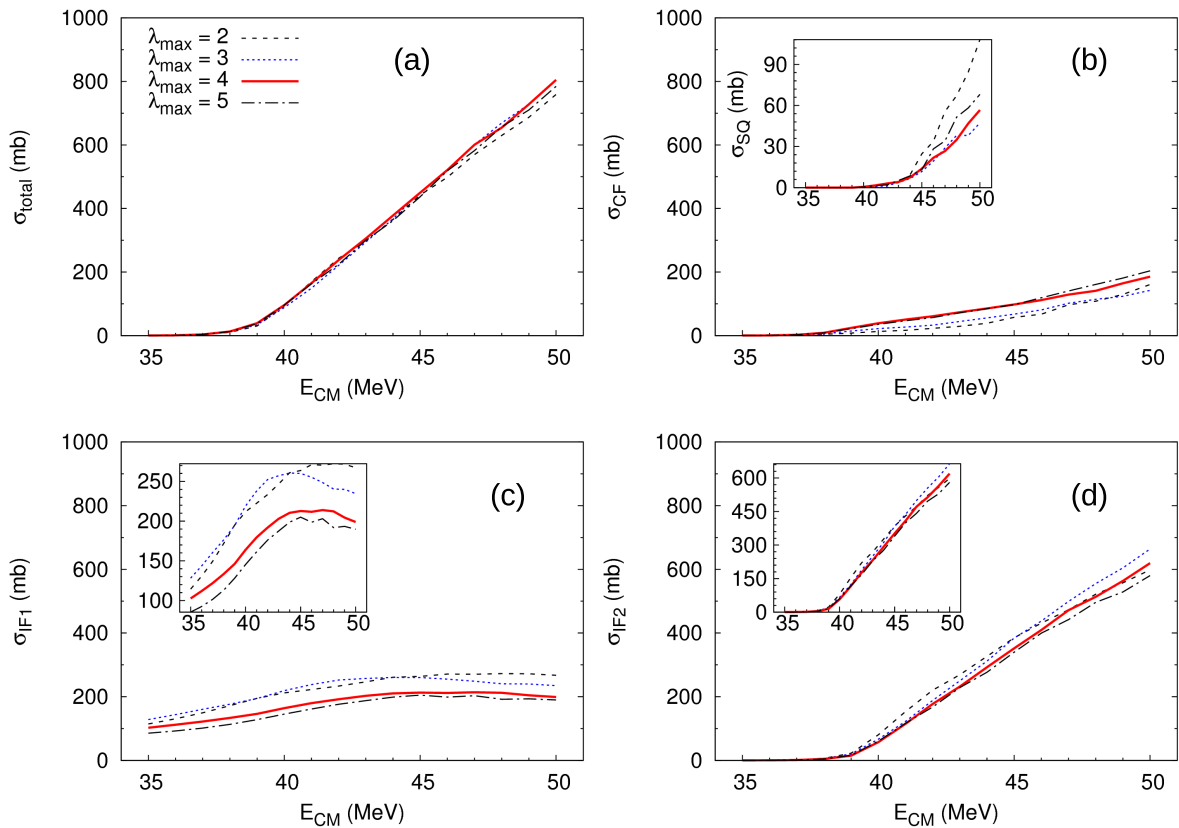


Figura 4.6: O mesmo que para a Figura 4.3, com $E_{CM} = 10$ MeV, $\rho_{bins} = 2$ MeV $^{-1}$ e $l_{m\acute{a}x} = 4$ fixos. A converg\ecencia dos resultados ocorre apenas ao incluir at\ec a o termo de octopolo ($\lambda_{m\acute{a}x} = 4$) para a expans\ec o multipolar.

4.4 An\acalise dos resultados

Agora que conhecemos os par\acmetaetros \acotimos para os c\acalculos num\acricos, podemos estudar as se\ccoes de choque de fus\ec o de cada fen\acmeno: fus\ec o total, completa, sequencial e incompleta de cada fragmento, al\ec m de realizar novos c\acalculos visando explorar melhor esse o modelo computacional. Nas an\acalises anteriores foi utilizada a discretiza\cc o do cont\acnuo com um espa\ccamento constante no espa\cc o de momento e o potencial \acotico de Ak\ccyuz-Winther. A seguir vamos estudar as diferen\ccas ao usar uma discretiza\cc o igualmente espa\ccada no cont\acnuo da energia e depois utilizando o potencial \acotico de Christensen-Winther. Al\ec m disso, ao final da se\cc o, utilizaremos o ^{10}Be como proj\ectil, que pode perder um n\ecutron, resultando num caro\cc o ^9Be .

4.4.1 Diferentes discretiza\cc oes do cont\acnuo

Como foi discutido nas Se\cc oes 2.3.1 e 3.1, podemos discretizar o espa\cc o cont\acnuo da energia de duas formas, fazendo espa\ccamentos iguais no espa\cc o de momento (o que resulta num espa\ccamento das energias que cresce quadraticamente) ou discretizar diretamente a energia em um $\Delta\epsilon$ constante, onde $\hat{\epsilon}$ \ac e a energia central desse *bin*. Vemos na Figura 4.7 que as diferentes formas de discretizar o cont\acnuo n\ac o alteraram significativamente as

seções de choque de fusão.

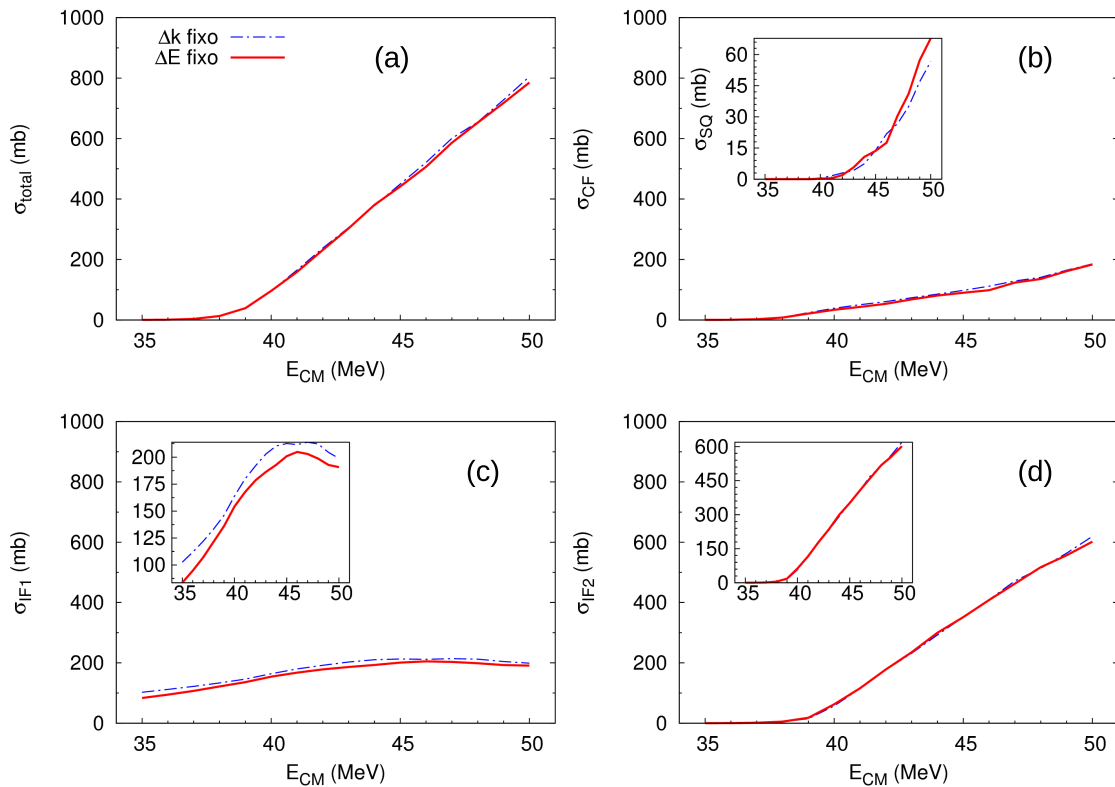


Figura 4.7: Seções de choque de fusão (a) total, (b) completa e sequencial (no *inset*), (c) do nêutron e (d) do ^{10}Be . Cálculos feitos com os parâmetros das Eqs.(4.18) para duas discretizações diferentes do contínuo, uma com espaçamento constante em momento (como vinha sendo feito anteriormente) e outra constante em energia.

4.4.2 Diferentes potenciais ópticos

Na Figura 4.2 vemos que o potencial de Christensen-Winther (CW) tem uma intensidade e alcance maior do que do de Akÿuz-Winther (AW), o que baixa a barreira do potencial efetivo e facilita a fusão. Assim, espera-se seções de choque de fusão maiores para esse potencial. Na Figura 4.8 vemos exatamente isso.

O quadro (b) da Figura 4.8 mostra a seção de choque de fusão completa do projétil com o alvo. Podemos ver que o potencial de CW realmente indica uma fusão completa levemente maior do que aquela gerada pelo potencial de AW. Para a fusão sequencial temos a mesma conclusão, o que indica que isso também acontece para a fusão completa direta (não mostrada nos gráficos). O quadro (c) apresenta a seção de choque de fusão do nêutron (fragmento 1 do projétil), que é pouco maior para o potencial de AW quando a energia cresce. Já para a seção de choque de fusão do caroço do projétil (^{10}Be), apresentada no quadro (d) da mesma figura, vemos que ambos os potenciais apresentam resultados muito parecidos, com o potencial de CW prevendo uma fusão levemente maior do caroço do que o potencial de AW.

Em relação à seção de choque de fusão total (apresentada no quadro (a) da Figura

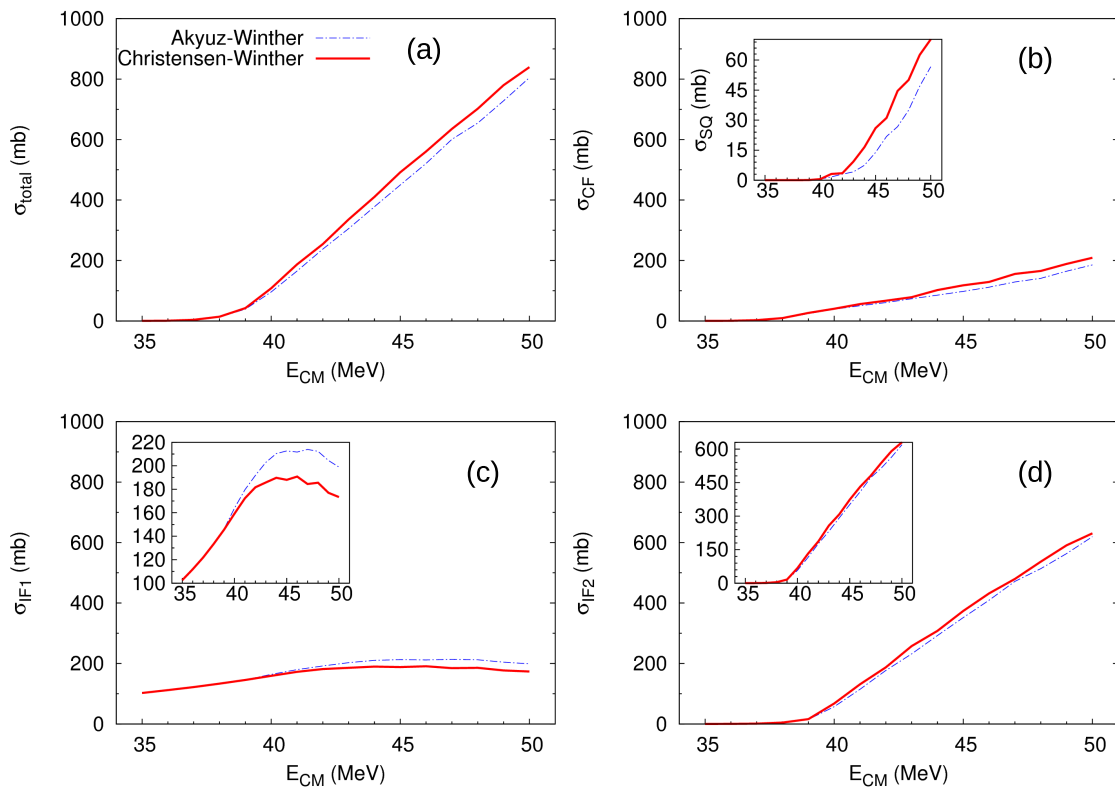


Figura 4.8: Seções de choque de fusão (a) total, (b) completa e sequencial (no *inset*), (c) do nêutron e (d) do ^{10}Be . Cálculos feitos com os parâmetros das Eqs.(4.18) para dois potenciais ópticos: Akyuz-Winther (Eq.(4.5)) e Christensen-Winther (Eq.(4.6)).

4.8), o potencial de AW mostra que a fusão do ^{10}Be corresponde à aproximadamente 75% do valor total. Para o potencial de CW esse valor é em torno de 70%. Então, em ambos os casos, a fusão incompleta do ^{10}Be é muito superior à fusão completa do ^{11}Be , contradizendo a afirmação feita na Ref. [41], que diz que a seção de choque de fusão do caroço do projétil corresponde a menos de 30% da fusão completa. Os resultados da Ref. [38], apesar de serem para outro alvo (^{208}Pb), apresentam um comportamento para as seções de choque similar ao apresentado aqui.

4.4.3 Outro projétil: ^{10}Be

Vamos agora estudar a fusão do projétil ^{10}Be com o alvo ^{209}Bi ¹. Esse projétil, assim como o anterior, pode perder um nêutron devido às excitações internas. Entretanto sua energia de ligação é muito maior (6,8 MeV), espera-se que as seções de choque de fusão incompleta sejam muito baixas. Os potenciais de interação nuclear entre cada par de partículas precisam ser alterados. O único estado ligado do projétil ^{10}Be é gerado a partir de um potencial com intensidade $V_0 = -48,5$ MeV e termo spin-órbita $V_0^{SO} = -35,36$ MeV. O raio e a difusividade são, respectivamente, $r_0 = 1,1575$ fm e $a = 0,5$ fm. Assim como no caso anterior, esses parâmetros são baseados nos trabalhos das Refs. [38,41].

¹Devido a limitações computacionais, limitamos a inclusão de ondas parciais do cálculos dessa seção até a onda f. Isso se deve ao aumento do número de estados oriundos do spin do caroço (^9Be).

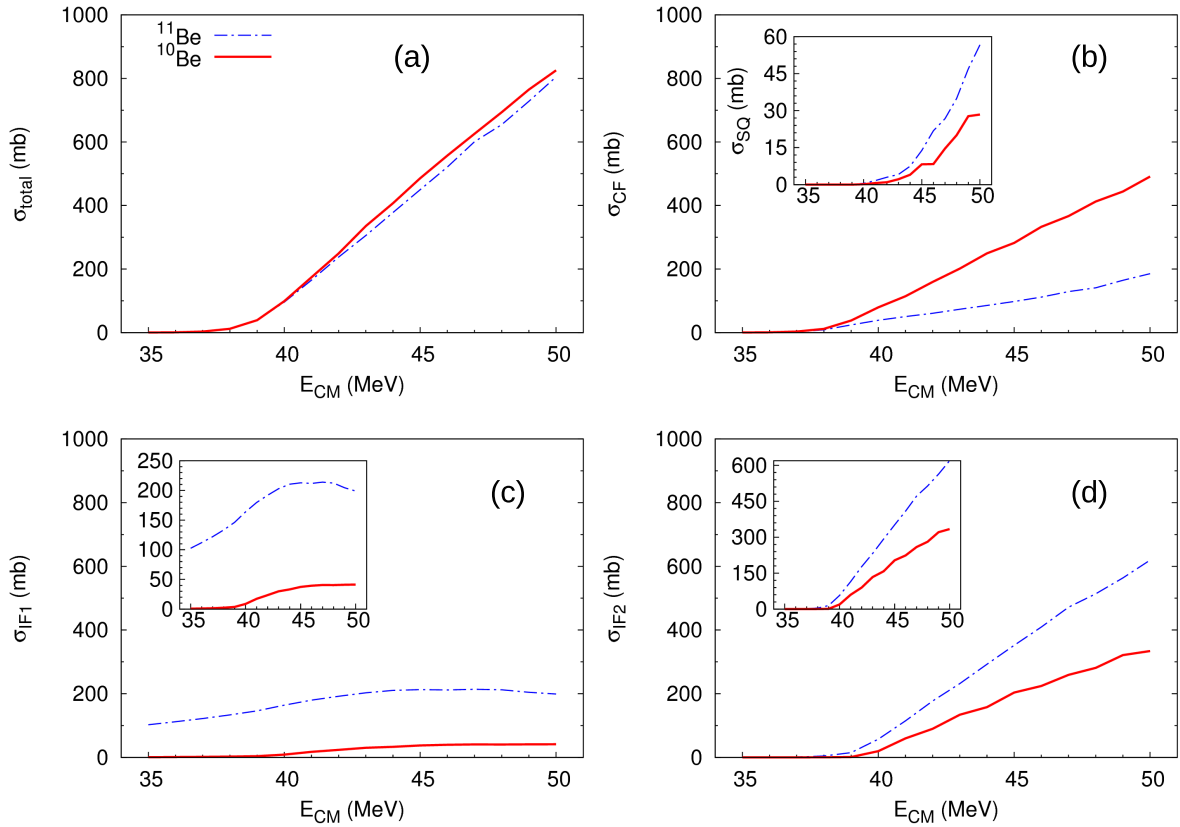


Figura 4.9: Seções de choque de fusão (a) total, (b) completa e sequencial (no *inset*), (c) do nêutron e (d) do caroço do projétil. Esse caroço é o ^{10}Be para a linha azul e ^9Be para a linha vermelha.

Na Figura 4.9 (quadro (a)) vemos que a seção de choque de fusão total (soma da completa com a do caroço) é essencialmente igual para os dois projéteis. Isso mostra que independente do projétil, a fusão total se mantém a mesma. No quadro (b) vemos que a fusão completa é muito maior para o ^{10}Be do que para o ^{11}Be , o inverso do que vemos para a fusão sequencial no *inset*. Isso era esperado uma vez que a energia de ligação do ^{10}Be é muito maior do que a do ^{11}Be . Pelo mesmo motivo, a fusão incompleta do nêutron (quadro (c)) e do caroço (quadro (d)) é maior para o projétil fracamente ligado: ^{11}Be . Isso vai de acordo com as conclusões da Ref. [38], indicando que o acoplamento dos estados ligados com os do contínuo mantém a seção de choque de fusão total igual, redistribuindo a completa e incompleta.

4.5 Comparação com dados experimentais

Da referência [41] podemos retirar dados experimentais para as reações do ^{11}Be e do ^{10}Be com o ^{209}Bi . Com isso podemos verificar a validade dos resultados computacionais obtidos nas seções anteriores. Os dados para a colisão do ^{11}Be podem ser vistos na Figura 4.10. Junto com os dados experimentais temos o cálculo da seção de choque de fusão total utilizando os potenciais ópticos de Akýuz-Winther e Christensen-Winther. Ambos os potenciais apresentam um bom acordo com os resultados experimentais.

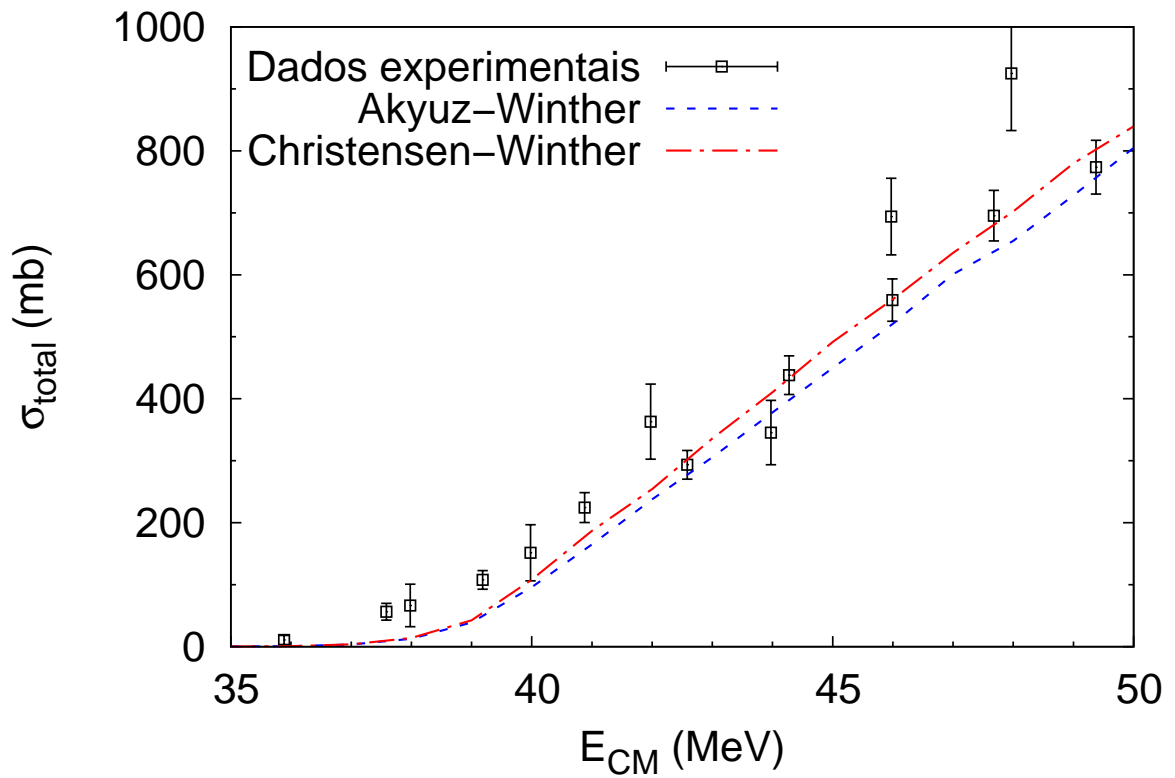


Figura 4.10: Comparação de dados experimentais para a seção de choque de fusão total retirados da Ref. [41] com o cálculo através de dois potenciais ópticos diferentes. Os dados e cálculos se referem à soma da fusão do fragmento ^{10}Be e da fusão completa do projétil ^{11}Be com o alvo ^{209}Bi .

Na Figura 4.11 temos o cálculo da seção de choque de fusão total do ^{10}Be com o ^{209}Bi junto com os dados experimentais (também retirados da Ref. [41]). Vemos que, novamente, há um bom acordo entre os resultados computacionais e experimentais.

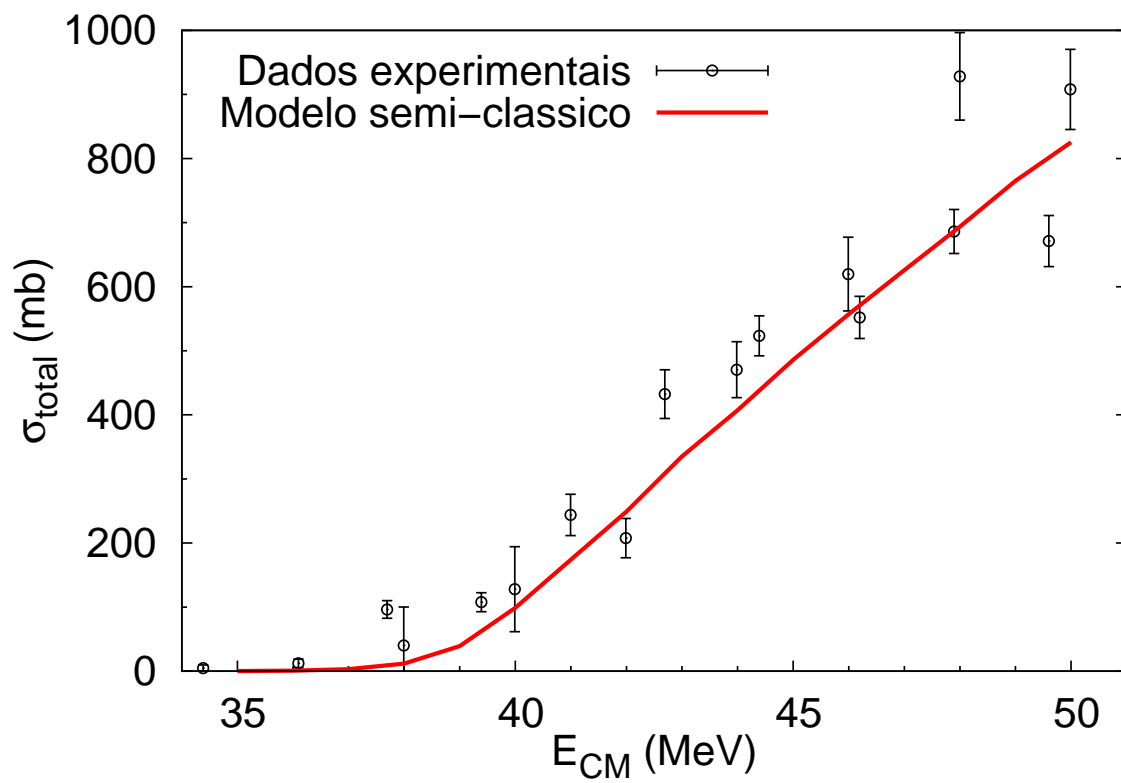


Figura 4.11: Comparação com dados experimentais para a seção de choque de fusão total retirados da Ref. [41] com o cálculo utilizando o potencial óptico de Akçuz-Winther para a reação $^{10}\text{Be}+^{209}\text{Bi}$.

5 *Considerações finais*

Com a recente disponibilidade de feixes instáveis, o estudo da fusão incompleta de núcleos cresceu consideravelmente na comunidade de Física Nuclear. Existem diversas formas de realizar esse estudo, sendo o método de CDCC um muito utilizado para discretizar o contínuo das energias de excitações que resultam na quebra do projétil. Entretanto, ainda não há uma conclusão definitiva sobre a influência do acoplamento dos estados do sistema (tanto ligados quanto do contínuo), alguns trabalhos prevêem a supressão da seção de choque de fusão enquanto outros indicam um aumento [38]. A seguir, vemos uma breve revisão daquilo que foi abordado no presente trabalho.

Nessa dissertação se buscou revisar diversos aspectos da interação de núcleos exóticos, iniciando em uma revisão histórica da Física Nuclear, seguido pelos modelos mais simples de fusão clássica, estudando a abordagem quântica do fenômeno e até chegar no modelo semi-clássico para a fusão completa e incompleta de núcleos fracamente ligados, baseado nos trabalhos das Refs. [1, 2, 4]. Com essa abordagem, a trajetória do projétil segue um caminho clássico e ao chegar no ponto de máxima aproximação é feito o cálculo das seções de choque de fusão através de modelos quânticos. Durante esses processos, entretanto, existe a possibilidade do projétil pular para um estado excitado, podendo até se quebrar no caso de núcleos fracamente ligados. Quando isso ocorre, o projétil deixa de estar ligado, e suas energias entram num espectro contínuo. Para poder trabalhar com essas energias do contínuo é necessário realizar uma discretização da energia, o que é conveniente para cálculos numéricos. O método CDCC trata dessa discretização e considera o acoplamento entre canais, ou seja, a influência que diferentes canais podem ter entre si, aumentando ou diminuindo a sua importância para as seções de choque de fusão.

O estudo numérico da interação entre o alvo e o projétil (incluindo a possibilidade de sua quebra) utilizando a aproximação semi-clássica foi realizado computacionalmente a partir do trabalho das Referências [1, 2, 4]. Tendo acesso ao código desses trabalhos, foi possível otimizá-los. Os resultados podem ser vistos em detalhe no Capítulo 4, onde são testados os limites mínimos para a convergência das seções de choque de fusão, podendo então obter resultados acurados com o menor esforço computacional possível. Tendo como referência diversos textos na literatura, pode-se estudar as colisões do ^{11}Be e do ^{10}Be com o ^{209}Bi . Também pode-se encontrar duas parametrizações diferentes para o potencial de interação entre o caroço do projétil com o alvo: os potenciais ópticos de Akyuz-Winther e de Christensen-Winther. Com isso foi possível comparar nossos cálculos com resultados experimentais da Ref. [41], que apresentaram um excelente acordo. Com ambos potenciais ópticos utilizados se chegou à conclusão de que a grande contribuição para a fusão total vem da fusão incompleta do fragmento ^{10}Be do projétil ^{11}Be , correspondendo a mais de 70% da seção de choque de fusão total, discordando da afirmação da Ref. [41]. Para a colisão do projétil ^{10}Be , que tem uma energia de ligação consideravelmente maior do que o

projétil anterior, confirmou-se que a fusão incompleta é muito pequena, porém mostrou-se não desprezível. Assim, contribuiu para que a seção de choque de fusão total calculada tenha um bom acordo com os dados experimentais.

Essa dissertação realizou uma nova abordagem computacional para os trabalhos das Refs. [1,2,4], aumentando o conhecimento sobre a aplicabilidade numérica da aproximação semi-clássica para o estudo da fusão de núcleos fracamente ligados. Facilitamos aplicação dessas ferramentas, permitindo que novos sistemas sejam abordados no futuro com o uso simples de um código que exige apenas algumas horas de CPU. Uma tarefa, aliás, que é necessária para poder aprofundar o conhecimento sobre a quebra de projéteis fracamente ligados e compreender qual fenômeno é o maior responsável pela fusão total (se é a fusão completa ou a fusão do caroço do projétil). Para isso, ainda será preciso testar melhor o programa computacional criado, analisando seus limites de aplicação e comparando seus resultados com outros da literatura, tanto experimentais quanto computacionais (como, por exemplo, o cálculo puramente quântico das colisões). Em particular, um ponto a ser melhorado é o cálculo de quebra e tunelamento. Ao invés de fazer isso no ponto de máxima aproximação, as contribuições ao longo da trajetória deveriam ser levadas em conta. Tendo em vista que os resultados são sensíveis ao ponto da trajetória em que esse cálculo é efetuado, essa modificação pode ser importante para melhorar a compreensão da fusão de núcleos fracamente ligados.

Apêndice A – Cálculo das funções de onda para os fatores de forma

Para obter os fatores de forma do sistema (Equação (2.58)) é preciso conhecer as funções de onda que o descrevem. A função de onda dos estados ligados do sistema aqui estudado possui simetria radial, de modo que:

$$\Psi = \frac{\Phi}{r} \quad \rightarrow \quad \frac{d^2\Phi}{dr^2} = -\frac{1}{B} [\varepsilon - U^{\text{eff}}] \Phi, \quad (\text{A.1})$$

onde

$$U^{\text{eff}} = U + B \frac{l(l+1)}{r^2} - V_0^{\text{SO}} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \right] \frac{1}{r} \frac{d}{dr} W(r), \quad (\text{A.2})$$

sendo $W(r)$ um potencial Woods-Saxon

$$W(r) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (\text{A.3})$$

com raio R e difusividade a . V_0^{SO} é um parâmetro e j , l e s são os momentos angulares total, orbital e o spin, respectivamente. $B = \hbar^2/2\mu$, onde μ é a massa reduzida dos fragmentos do projétil. O potencial U contém os termos dos potenciais coulombiano e nuclear (que tem a forma de um potencial Woods-Saxon), descritos na Seção 3.2, além do termo de spin-órbita explicitamente mostrado na Eq.(A.2).

A.1 O método de Numerov

Um método poderoso para a resolução numérica do problema é o método de Numerov, que tem precisão global da ordem $\mathcal{O}(h^5)$ e não requer um gasto computacional superior ao método de Runge-Kutta de quarta-ordem, que tem erro global da ordem de $\mathcal{O}(h^4)$ [34]. A equação diferencial a ser integrada possui a seguinte forma:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x), \quad (\text{A.4})$$

onde $S(x)$ é um termo de fonte e k^2 é uma função real. Para a solução da Equação (A.1) não há o termo de fonte

$$S(x) = 0 \quad (\text{A.5})$$

e

$$k^2(r) = (\varepsilon - U^{\text{eff}})/B . \quad (\text{A.6})$$

onde a energia ε é assumida como conhecida, isto é, um *ansatz* para o cálculo da função de onda correspondente. A partir disso, aproxima-se a derivada segunda dessa equação pela fórmula de diferenciação de três pontos [34]:

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12} y_n'''' + \mathcal{O}(h^4) , \quad (\text{A.7})$$

onde h é o espaçamento da malha discretizada em que está sendo feito o cálculo, e o termo proporcional a h^2 pode ser obtido da própria equação diferencial de segunda ordem:

$$y_n'''' = \frac{d^2}{dx^2}(-k^2 y) \Big|_{x=x_n} = -\frac{(k^2 y)_{n+1} - 2(k^2 y)_n + (k^2 y)_{n-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) . \quad (\text{A.8})$$

Com isso, pode-se reescrever a Equação (A.7):

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n+1}^2\right) y_{n+1} = 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_n^2\right) y_n - \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n-1}^2\right) y_{n-1} + \mathcal{O}(h^6) . \quad (\text{A.9})$$

Para simplificar a notação, o erro local $\mathcal{O}(h^6)$ passará a ser omitido e será definido o termo

$$f_n \equiv 1 + k_n^2 \frac{h^2}{12} . \quad (\text{A.10})$$

Com isso é possível escrever a recorrência do método de Numerov de forma bastante simples:

$$f_{n+1} y_{n+1} = (12 - 10f_n) y_n - f_{n-1} y_{n-1} . \quad (\text{A.11})$$

Assim, dado os valores de y em dois pontos no início (ou fim) da malha, os demais são obtidos por meio dessa relação de recorrência, incrementando-se (ou decrementando-se) o índice n .

A.2 Aplicação à solução dos estados ligados

Próximo à origem, as soluções da Eq.(A.1) tendem a:

$$\Phi \propto \begin{cases} r^{l+1} \\ \frac{1}{r^l} \end{cases} , \quad (\text{A.12})$$

sendo que a única solução fisicamente aceitável para o presente problema é $\Phi \propto r^{l+1}$, de modo que:

$$y(0) = y_0 = 0 . \quad (\text{A.13})$$

Para valores de $l \neq 1$, a recorrência pode ser feita diretamente com a Eq.(A.11), notando que y_1 tem valor arbitrário, uma vez que a função de onda será normalizada no final. De fato, embora o termo centrífugo do potencial introduza uma divergência na origem, para $l = 0$ não há problema uma vez que esse termo se torna identicamente nulo. Para $l \geq 2$,

o termo r^{l+1} no produto $y(r)f(r)$ domina o fator r^{-2} do potencial centrífugo, de modo que $y_0 k_0 \rightarrow 0$. Assim, y_2 é dado por:

$$y_2 = (10 - 12f_1) \frac{y_1}{f_2}, \quad (\text{A.14})$$

e para $n > 2$ usamos a Eq.(A.11).

No caso em que $l = 1$ é necessário um cuidado extra, uma vez que o termo centrífugo do potencial não é dominado pelo fator r^{l+1} :

$$f_0 y_0 = y_0 + k_0^2 \frac{h^2}{12} y_0 \quad (\text{A.15})$$

$$= \frac{1}{B} (\varepsilon - U^{\text{eff}}) y_0 \frac{h^2}{12} \quad (\text{A.16})$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2/(2m)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{h^2}{12} y_0, \quad (\text{A.17})$$

com $l = 1$ temos que $y_0 = r^2$, então

$$f_0 y_0 = -\frac{2}{r^2} r^2 \frac{h^2}{12} = -\frac{h^2}{6}. \quad (\text{A.18})$$

Por isso, quando $l = 1$, os dois primeiros termos são obtidos utilizando-se a simetria das funções f_n e y_n :

$$f_1 y_1 = (12 - 10f_0)y_0 - f_{-1} y_{-1} \quad (\text{A.19})$$

$$2f_1 y_1 = -10f_0 y_0 = 10 \frac{h^2}{6} \quad (\text{A.20})$$

$$\therefore y_1 = 10 \frac{h^2}{12} \frac{1}{f_1} \quad (\text{A.21})$$

e

$$f_2 y_2 = (12 - 10f_1)y_1 - y_0 f_0 \quad (\text{A.22})$$

$$= (12 - 10f_1)y_1 + \frac{1}{5} f_1 y_1 \quad (\text{A.23})$$

$$\therefore y_2 = \frac{y_1}{f_2} \left[12 - 10f_1 + \frac{1}{5} f_1 \right]. \quad (\text{A.24})$$

Como no caso anterior, a Eq.(A.11) é utilizada diretamente para $n \geq 2$.

Porém, ao se iterar a Eq.(A.11) se chega em uma região onde r é grande, onde a solução mais geral é uma combinação de dois termos exponenciais:

$$\Phi \propto \begin{cases} e^{br} \\ e^{-br} \end{cases}. \quad (\text{A.25})$$

Dessas, apenas a última é fisicamente aceitável. Entretanto, devido a erros numéricos, a solução indesejada é introduzida artificialmente e sua contribuição aumenta a medida que r cresce, eventualmente dominando a solução procurada, que decresce exponencialmente.

Iniciar a iteração no outro extremo da malha (em $r_{\text{máx}}$) não resolve o problema, uma vez que esses mesmo erros numéricos introduziriam a solução $1/r^l$ na região classicamente permitida, eventualmente dominando a solução física a medida que nos aproximamos da origem. A solução para o problema, então, consiste em se realizar uma iteração partindo da origem e incrementando r (“para fora”) e outra iniciando em $r_{\text{máx}}$ e o decrementando (“para dentro”), fazendo-as se encontrar em $r = r_k$, escolhido no início da região classicamente proibida.

Para a recorrência iniciando em $r_{\text{máx}}$, obtém-se $\Phi(r_{\text{máx}} - h)$ por meio de:

$$\Phi(r_{\text{máx}} - h) = \Phi(r_{\text{máx}})e^{-A(r - r_{\text{máx}})}, \quad (\text{A.26})$$

onde o valor da constante A pode ser obtido a partir da Eq.(A.1):

$$\left. \frac{d^2\Phi}{dr^2} \right|_{r=r_0=r_{\text{máx}}-h/2} = -A^2\Phi(r_0) \quad (\text{A.27})$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} [U(r_0) - \varepsilon] \Phi(r_0) \quad (\text{A.28})$$

$$\therefore A^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [U(r_0) - \varepsilon]. \quad (\text{A.29})$$

Definindo $U(r_0) = \frac{1}{2} [U_n + U_{n+1}] \equiv \bar{U}$, então

$$A = \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{\bar{U} - \varepsilon} \quad (\text{A.30})$$

e a função de onda fica:

$$\Phi(r_{\text{máx}} - h) = \Phi(r_{\text{máx}})e^{h\sqrt{2m(\bar{U}-\varepsilon)/\hbar^2}}, \quad (\text{A.31})$$

onde $\Phi(r_{\text{máx}})$ é escolhido arbitrariamente, uma vez que a função de onda será normalizada mais tarde.

Com esses dois valores calculados, que são $y_{N_{\text{máx}}}$ e $y_{N_{\text{máx}}-1}$, basta utilizar a recorrência da Eq.(A.11) invertida

$$y_{n-1} f_{n-1} = (12 - 10f_n)y_n - f_{n+1} f_{n+1} \quad (\text{A.32})$$

de $n = N_{\text{máx}} - 2$ até o ponto de encontro $n = k$, sendo que um dos lados da solução é então multiplicada por um fator apropriado para garantir a continuidade da função de onda.

A.3 Determinação do auto-valor

Por construção, esse método garante que no ponto $n = k$ a função de onda calculada “para fora” irá ter o mesmo valor que aquela calculada “para dentro”, porém não garante que as derivadas sejam iguais, a não ser que o auto-valor ε correto tenha sido encontrado. Existem diversas técnicas para se obter este auto-valor [34], e aqui será apresentado um método muito simples e eficiente que foi redescoberto por nós, embora tenha sido inventado nos antigos cálculos de Hartree-Fock. Infelizmente não encontramos nenhuma

referência formal sobre o assunto e por ser um tratamento pouco conhecido, os detalhes serão apresentados a seguir.

Devido à descontinuidade da derivada da função de onda no ponto de encontro, a solução não é exatamente a do problema de interesse, e sim de outro que naturalmente leva à descontinuidade da função de onda. Esse problema equivalente é um que tem um termo adicional no potencial, proporcional a uma Delta de Dirac no ponto da descontinuidade:

$$U^{\text{eff}} \rightarrow U^{\text{eff}} + \delta U = U^{\text{eff}} + U_0 \delta(r_d) . \quad (\text{A.33})$$

Para remover a contribuição referente a esta delta se utiliza a teoria de perturbações, de modo a buscar a correção para o problema de interesse:

$$\delta \varepsilon = \langle \Phi | \delta U | \Phi \rangle = \int_0^\infty dr |\Phi(r)|^2 \delta U \quad (\text{A.34})$$

$$\therefore \delta \varepsilon = |\Phi(r_d)|^2 \delta \bar{U} h , \quad (\text{A.35})$$

onde o último passo foi feito se levando em conta as propriedades da delta de Dirac e usando a Eq.(A.6):

$$\delta \bar{U} = -\delta k^2 B . \quad (\text{A.36})$$

A partir da Eq.(A.10) temos:

$$\delta f = \frac{h^2}{12} \delta k^2 . \quad (\text{A.37})$$

Usando as Equações (A.36) e (A.37), o incremento de energia devido à delta no potencial fica:

$$\delta \varepsilon = -B \frac{12}{h} \delta f |\tilde{y}_d|^2 . \quad (\text{A.38})$$

A diferença entre os valores de f modificado pelo termo introduzido no potencial (\tilde{f}_d) e o anterior (f_k) no mesmo ponto ($n = k = d$) se escreve:

$$\delta f = \tilde{f}_d - f_k = f_k \left(\frac{\tilde{f}_d}{f_k} - 1 \right) . \quad (\text{A.39})$$

Para calcular δf , notamos que o ponto $n = k$ é atingido vindo da iteração “para fora” ou “para dentro” através da fórmula de Numerov (Eq.(A.11)):

$$f_k y_k = (12 - 10 f_{k\pm 1}) y_{k\pm 1} - f_{k\pm 2} y_{k\pm 2} . \quad (\text{A.40})$$

Por outro lado, ao aplicar a mesma fórmula de Numerov (Eq.(A.11)) passando pela delta, teremos:

$$f_{k+1} y_{k+1} = (12 - 10 \tilde{f}_d) \tilde{y}_d - f_{k-1} y_{k-1} . \quad (\text{A.41})$$

Entretanto, como a Equação (A.40) mostra que apenas o produto $f_k y_k$ é determinado, e não o valor de y nesse ponto, fazemos:

$$f_d y_d = \tilde{f}_k \tilde{y}_k , \quad (\text{A.42})$$

o que permite escrever

$$\delta f = f_k \left(\frac{y_k}{\tilde{y}_d} - 1 \right) . \quad (\text{A.43})$$

Por sua vez, essa expressão pode ser facilmente calculada se utilizando a Eq.(A.41) que fornece \tilde{y}_d :

$$\tilde{y}_d = \frac{1}{12} [y_{k+1} f_{k+1} + y_{k-1} f_{k-1} + 10 f_k y_k] . \quad (\text{A.44})$$

Com isso, pode-se calcular $\delta\varepsilon$ através da Eq.(A.38) e o auto-valor da função de onda pode ser corrigido. Assim, o procedimento utilizando o método de Numerov para calcular as funções de onda dos estados ligados pode recomeçar com um novo *ansatz* para a energia. Isso é feito até que o erro na energia seja pequeno o suficiente para ser aceito. A tabela abaixo mostra a eficiência do método com os passos necessários até a convergência dos auto-valores calculados:

iteração	ε (MeV)	$\delta\varepsilon$ (MeV)
1	-12.81382	15.4836
2	-6.40691	8.0835
3	-3.20346	3.4692
4	-1.60174	1.2941
5	-0.30767	-1.8185E-01
6	-0.48951	-1.5371E-02
7	-0.50489	-7.6098E-05
8	-0.50496	-1.5150E-09

É importante salientar que esse método só deve ser aplicado uma vez que a faixa de valores na qual o número de nós desejado da função de onda tenha sido determinado. Esses limites devem ser levados em conta para restringir a energia caso $\delta\varepsilon$ leve além deles. Isso pode ocorrer eventualmente no início da iteração, quando $\delta\varepsilon$ ainda pode ser relativamente grande, como no exemplo acima.

Observe que o valor inicial foi escolhido bastante longe do final e a convergência a partir do quinto passo é extremamente rápida. Isso mostra que o método é muito eficiente quando aplicado próximo à solução, como deveria ser esperado de um tratamento perturbativo.

Referências Bibliográficas

- 1 MARTA, H. et al. Validity of the semiclassical approximation for the breakup of weakly bound nuclei. *Physical Review C*, v. 66, n. 2, p. 024605, 2002.
- 2 MARTA, H.; CANTO, L.; DONANGELO, R. Complete and incomplete fusion of weakly bound nuclei. Submitted to *Physical Review C*, 2013.
- 3 CANTO, L. et al. Fusion and breakup of weakly bound nuclei. *Physics Reports*, Elsevier, v. 424, n. 1, p. 1–111, 2006.
- 4 MARTA, H.; CANTO, L.; DONANGELO, R. Semiclassical calculations of observable cross sections in breakup reactions. *Physical Review C*, v. 78, n. 3, p. 034612, 2008.
- 5 PESSOA, E.; COUTINHO, F.; O., S. *Introdução à física nuclear*. 1. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1978. 286 p.
- 6 HALLIDAY, D. *Introductory Nuclear Physics*. 2. ed. London: Chapman and Hall, 1955. 493 p.
- 7 SATCHLER, G. *Introduction to nuclear reactions*. 1. ed. London: The Macmillan Press LTD, 1980. 316 p.
- 8 CHUNG, K. *Introdução à física nuclear*. 1. ed. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2001. 286 p.
- 9 MESSIAH, A. *Quantum Mechanics. VOL. I*. 1. ed. Amsterdam: John Wiley & Sons Inc., 1958. 504 p.
- 10 WIKIPEDIA. *Atomic bombings of Hiroshima and Nagasaki* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2015. [Online; acessado em 29-Janeiro-2015]. Disponível em: <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Atomic_bombings_of_Hiroshima_and_Nagasaki&oldid=644322081>.
- 11 WIKIPEDIA. *Hiroshima* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2015. [Online; acessado em 29-Janeiro-2015]. Disponível em: <<http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Hiroshima&oldid=644471235>>.
- 12 WIKIPEDIA. *Nagasaki* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2014. [Online; acessado em 29-Janeiro-2015]. Disponível em: <<http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Nagasaki&oldid=640119977>>.
- 13 BERTULANI, C. Nuclear reactions. *ArXiv e-prints*, jul 2010. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/0908.3275>>.
- 14 CANTO, L.; HUSSEIN, M. *Scattering Theory of Molecules, Atoms and Nuclei*. 1. ed. São Paulo: World Scientific, 2013. 647 p.

- 15 FESHBACH, H. *Theoretical Nuclear Physics: Nuclear Reactions*. 1. ed. New York: Wiley, 1992. 959 p.
- 16 MOSEL, U. Heavy-ion fusion reactions. In: BROMLEY, D. (Ed.). *Treatise on heavy-ion science*. New York and London: Plenum Press, 1984. v. 2.
- 17 LOVELAND, W.; MORRISSEY, D.; SEABORG, G. *Modern nuclear chemistry*. 1. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006. 671 p.
- 18 AGUIAR, C. E.; CANTO, L. F.; DONANGELO, R. Influence of neck formation on heavy ion subbarrier fusion. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 31, p. 1969–1971, May 1985. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.31.1969>>.
- 19 SWIATECKI, W. The dynamics of the fusion of two nuclei. *Nuclear Physics A*, v. 376, n. 2, p. 275 – 291, 1982. ISSN 0375-9474. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947482900653>>.
- 20 WIKIPEDIA. *Magic number (physics)* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2015. [Online; acessado em 4-Março-2015]. Disponível em: <[http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Magic_number_\(physics\)&oldid=649697043](http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Magic_number_(physics)&oldid=649697043)>.
- 21 BAUR, G.; S., T. Direct reactions with exotic beams. *ArXiv e-prints*, Apr 2005. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/nucl-th/0504068v1>>.
- 22 GROSS, D. H.; KALINOWSKI, H. Friction model of heavy-ion collisions. *Physics Reports*, Elsevier, v. 45, n. 3, p. 175–210, 1978.
- 23 GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. *Classical Mechanics*. 3. ed. San Francisco: Addison-Wesley, 2002. 680 p.
- 24 GROSS, D.; KALINOWSKI, H.; DE, J. Friction model for heavy-ion collisions and its application to heavy ion fusion and deep inelastic reactions. In: *Classical and quantum mechanical aspects of heavy ion collisions*. [S.l.]: Springer, 1975. p. 194–220.
- 25 BIRKELUND, J. et al. Heavy-ion fusion: Comparison of experimental data with classical trajectory models. *Physics Reports*, Elsevier, v. 56, n. 3, p. 107–166, 1979.
- 26 FRÖBRICH, P. Fusion and capture of heavy ions above the barrier: Analysis of experimental data with the surface friction model. *Physics Reports*, Elsevier, v. 116, n. 6, p. 337–400, 1984.
- 27 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2. ed. São Paulo: Pearson Education, 2005. 347 p.
- 28 LIBOFF, R. L. *Introductory quantum mechanics*. 4. ed. Índia: Peason Education India, 1980. 878 p.
- 29 ALTLAND, A. *Advanced Quantum Mechanics – notas de aula disponíveis online*. [Online; acessado em 18-Outubro-2015]. Disponível em: <<http://www.thp.uni-koeln.de/alexal/teaching.html>>.

- 30 HODGSON, P. E. The nuclear optical — introductory overview. In: NUCLEAR SCIENCE COMMITTEE OF THE OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY AND THE COMMISSARIAT À L'ENERGIE ATOMIQUE WITH THE COLLABORATION OF THE INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Proceedings of the Specialists's Meeting on the Nucleon Nucleus Optical Model up to 200 MeV*. Bruyères-le-Chatel, France, 1996. [Online; acessado em 17-Março-2015]. Disponível em: <<https://www.oecd-nea.org/science/om200/>>.
- 31 SAKURAGI, Y.; YAHIRO, M.; KAMIMURA, M. Chapter VI. microscopic coupled-channels study of scattering and breakup of light heavy-ions. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, Oxford University Press, v. 89, p. 136–211, 1986.
- 32 ALDER, K.; WINTHER, A. *Coulomb excitation: a collection of reprints*. 1. ed. New York: Academic Press Inc., 1966. 374 p.
- 33 WIKIPEDIA. *Quantization (signal processing)* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2015. [Online; acessado em 30-Setembro-2015]. Disponível em: <[https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Quantization_\(signal_processing\)&oldid=673804666](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Quantization_(signal_processing)&oldid=673804666)>.
- 34 KOONIN, S. E.; MEREDITH, D. *Computational Physics (Fortran Version)*. 1. ed. [S.l.]: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1990. 639 p.
- 35 PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 1992. 1010 p.
- 36 WIKIPEDIA. *Cash–Karp method* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. 2013. [Online; acessado em 30-Setembro-2015]. Disponível em: <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Cash%E2%80%93Karp_method&oldid=571706037>.
- 37 THOMPSON, I. *Fresco users' manual*. *University of Surrey*, 2000.
- 38 DIAZ-TORRES, A.; THOMPSON, I. Effect of continuum couplings in fusion of halo ^{11}Be on ^{208}Pb around the coulomb barrier. *Physical Review C*, APS, v. 65, n. 2, p. 024606, 2002.
- 39 NUNES, F.; THOMPSON, I. Multistep effects in sub-coulomb breakup. *Physical Review C*, APS, v. 59, n. 5, p. 2652, 1999.
- 40 TOSTEVIN, J.; NUNES, F.; THOMPSON, I. Calculations of three-body observables in ^8B breakup. *Physical Review C*, APS, v. 63, n. 2, p. 024617, 2001.
- 41 SIGNORINI, C. et al. Subbarrier fusion in the systems $^{11,10}\text{Be} + ^{209}\text{Bi}$. *Nuclear Physics A*, Elsevier, v. 735, n. 3, p. 329–344, 2004.
- 42 BROGLIA, R. A.; WINTHER, A. *Heavy Ion Reactions: The elementary processes*. 1. ed. California, USA: Addison Wesley Publishing Company, 1991. 524 p.
- 43 KONING, A.; DELAROCHE, J. Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV. *Nuclear Physics A*, Elsevier, v. 713, n. 3, p. 231–310, 2003.