

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UM SISTEMA DE REAÇÕES ACOPLADAS DE FISSÃO E FUSÃO NUCLEAR:  
A INFLUÊNCIA DO PROCESSO DE FUSÃO NO DESLOCAMENTO DA MEIA  
VIDA DOS PRODUTOS DE FISSÃO.

por

Júlio Bialkowski Bardaji

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Julho de 2013.

UM SISTEMA DE REAÇÕES ACOPLADAS DE FISSÃO E FUSÃO NUCLEAR:  
A INFLUÊNCIA DO PROCESSO DE FUSÃO NO DESLOCAMENTO DA MEIA  
VIDA DOS PRODUTOS DE FISSÃO.

por

Júlio Bialkowski Bardaji  
Engenheiro Químico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann.

Aprovada por:

Prof Dr Antônio Carlos Marques Alvim

UFRJ/RJ

Prof Dr Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

PROMECC/UFRGS

Prof Dr Ricardo Carvalho de Barros

UERJ/RJ

Prof Dr Rogério José Marczak  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 12, Julho de 2013.

## RESUMO

O objetivo dessa dissertação foi analisar a influência de possíveis reações de fusão nuclear quando elementos leves, definidos como alvos são adicionados ao combustível nuclear. A energia cinética dos produtos de fissão, na concepção desse estudo, é utilizada para vencer a repulsão elétrica entre os núcleos. Para esse trabalho foram considerados a adição de hidrogênio, deutério, lítio e berílio em fração mássica de 0,30. A escolha desses elementos foi realizada através da análise da energia de ligação, do número atômico e das seções de choque experimentais de fusão. A avaliação da fusão nuclear foi realizada via princípio da incerteza, pois não há um modelo que pudesse cobrir um grande número de reações possíveis. A probabilidade de reação foi aproximada como uma função da probabilidade de um produto de fissão encontrar determinado elemento leve. Adicionalmente foram calculados os tempos de freamento eletrônico para os produtos de fissão com isso verificou-se que a escala de freamento não representa limitação para a fusão. A principal alteração, devido à adição dos alvos, foi na distribuição dos tempos de meia vida dos produtos de fissão, na direção de maiores tempos. A alteração nessa grandeza indica que é possível reduzir a atividade média do rejeito nuclear, em especial o de alto nível de radioatividade, tornando sua manipulação mais segura. Os alvos de hidrogênio e lítio apresentaram os melhores resultados para o aumento do tempo de meia vida médio dos produtos de fissão, conseguindo altera-la em média duas ordens de grandeza. Outras alterações, que não foram alvo desse estudo, são esperadas devido à inserção desses alvos, como por exemplo, na cinética.

**Palavras-chaves:** Fusão, produtos de fissão, meia vida.

## **ABSTRACT**

The objective of this dissertation was to analyze the influence of possible nuclear fusion reactions when light elements, defined as targets are added to the nuclear fuel. The kinetic energy of the fission products, in the conception of this study, is used to overcome the electrical repulsion between the nuclei. For this work were considered the addition of hydrogen, deuterium, lithium and beryllium in mass fraction of 0.30. The choice of these elements was performed by analyzing the binding energy, the atomic number and experimental fusion cross sections. The assessment of fusion was performed via the uncertainty principle, since there is no model that could cover a large number of possible reactions. The probability of reaction was approximated as a function of the probability of fission product find a particular light element. Additionally times were calculated for the electronic stopping fission products where was found that scale of stopping does not impose limits on fusion. The main change due to the addition of the targets was the distribution of halflives of the fission products, towards longer times. The change in this magnitude indicates that it is possible to reduce the average activity of the nuclear waste, in particular the high level of radioactivity, making handling safer. The targets of hydrogen and lithium showed the best results for increasing the half-life of the average fission products, managing change a on the average of two orders of magnitude. Other modifications, which were not discussed in this study, are expected due to the insertion of these targets, e.g. kinetics.

**Keywords:** fusion, fission products, half-life.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTOS.....</b>	<b>2</b>
2.1	Defeito de massa e energia de ligação.....	5
2.2	Reações nucleares.....	6
2.3	Fissão.....	7
2.4	Fusão.....	9
2.5	Defeito de massa e energia de ligação.....	10
2.6	Reações nucleares.....	11
2.6.1	Freamento nuclear.....	12
2.6.2	Freamento eletrônico.....	17
2.6.3	Alcance e tempo de freamento.....	24
<b>3</b>	<b>PROCEDIMENTO.....</b>	<b>26</b>
3.1	Determinação dos produtos de fissão e de sua energia cinética.....	26
3.2	Escolha dos elementos alvos.....	28
3.3	Fissão.....	32
3.4	Determinação do produto final da reação de fusão nuclear.....	33
3.5	Resultados.....	35
3.5.1	Simulação para $^1\text{H}$ .....	35
3.5.2	Simulação para $^2\text{H}$ .....	38
3.5.3	Simulação para $^6\text{Li}$ .....	41
3.5.4	Simulação para $^9\text{Be}$ .....	44
3.5.5	Análise.....	47
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO .....</b>	<b>49</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>52</b>
	<b>APÊNDICE A .....</b>	<b>55</b>
	<b>APÊNDICE B .....</b>	<b>72</b>
	<b>APÊNDICE C .....</b>	<b>73</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Distribuição dos produtos de fissão para $10^5$ partículas.....	27
Figura 3.2	Distribuição dos produtos de fissão e dos isotópos estáveis.....	27
Figura 3.3	Distribuição da energia cinética dos produtos de fissão.....	28
Figura 3.4	Comparação entre a curva de freamento para $^{136}\text{I}$ em $^{235}\text{U}$ e valores máximos para barreira de Coulomb.....	30
Figura 3.5	Distribuição dos produtos de fissão e dos isotópos estáveis referente à energia de ligação para o intervalo de A entre 70 e 160.....	31
Figura 3.6	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	36
Figura 3.7	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	37
Figura 3.8	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	39
Figura 3.9	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	40
Figura 3.10	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	42
Figura 3.11	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	43
Figura 3.12	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	45
Figura 3.13	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	46
Figura A.1	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	56
Figura A.2	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	57
Figura A.3	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	58

Figura A.4	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^1\text{H}$ (30%).....	59
Figura A.5	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	60
Figura A.6	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	61
Figura A.7	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	62
Figura A.8	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^2\text{H}$ (30%).....	63
Figura A.9	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	64
Figura A.10	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	65
Figura A.11	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	66
Figura A.12	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^6\text{Li}$ (30%).....	67
Figura A.13	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	68
Figura A.14	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	69
Figura A.15	Relação entre os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	70
Figura A.16	Detalhe ampliado para os $t_{1/2}$ para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de $^9\text{Be}$ (30%).....	71
Figura C.1	Esquema simplificado da estrutura da rotina utilizada para avaliação da reação de fusão nuclear.....	74

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Valores do potencial de Coulomb clássico e percurso do nuclide de $^{136}\text{I}$ .	29
Tabela 3.2	Alcance e tempo de freamento para alguns produtos de fissão.....	32
Tabela 3.3	Comparação entre os valores calculados para o alcance (Rcal), valores experimentais (Rexp) e valores obtidos pelo software SRIM (RSRIM).....	33
Tabela 3.4	Probabilidade de perda de nêutrons para a reação $^{80}\text{Ge}+^6\text{Li}$ avaliados pela Equação 2.17. Ereagentes = 722112; 567keV.....	34
Tabela 3.5	Resultado para alvo composto por $^1\text{H}$ (30%).....	35
Tabela 3.6	Resultado para alvo composto por $^2\text{H}$ (30%).....	38
Tabela 3.7	Resultado para alvo composto por $^6\text{Li}$ (30%).....	41
Tabela 3.8	Resultado para alvo composto por $^9\text{Be}$ (30%).....	44
Tabela 3.9	Resultados obtidos para os tempos de meia-vida em função dos diferentes alvos e resultados normalizados pelo alvo de $^1\text{H}$ .....	47
Tabela 3.10	Comparação entre as distribuições dos estados inicial e final das partículas que reagiram e do total de partículas.....	48
Tabela 4.1	Resultados para misturas.....	72
Tabela 4.2	Resultados obtidos para os tempos de meia-vida dos demais alvos.....	72



## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

HWF	Funções de onda de hidrogênio
IAEA	International Atomic Energy Agency
LDA	Aproximação de densidade local
PUREX	Plutonium Uranium Extraction
SRIM	The Stopping and Range of Ions in Matter
ZBL	Ziegler, Biersack and Littmark

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Caracteres Latinos

$a_0$	Raio de Bohr	$0,53 \cdot 10^{-10}$	m
$a_{TF}$	Comprimento de blindagem de Thomas-Fermi		
$A_1$	Massa atômica do íon		amu
$A_2$	Massa atômica do alvo		amu
$b$	Parâmetro de impacto		
$c$	Velocidade da luz no vácuo	29972458	m/s
$C/Z_2$	Termo de correção para a Equação 2.47		
$e$	Carga do elétron	$1,60217653 \cdot 10^{-19}$	C
$\langle E(Z_1, A_1) \rangle$	Energia cinética mais provável do produto de fissão		MeV
$E_c$	Energia do centro de massa		MeV
$f(t^{1/2})$	Função de escala de Lindhard		
$h, \hbar$	Constante de Planck, $\hbar = h/2\pi$	$1,05457168 \cdot 10^{-34}$	J.s
$\bar{I}$	Potencial de ionização médio		keV
$I_s$	Potencial de ionização da camada $s$		keV
$m_{at}$	Massa do átomo		amu
$m_e$	Massa do elétron	0,00054859	amu
$m_n$	Massa do nêutron	1,008665	amu
$m_p$	Massa do próton	1,007277	amu
$n(U_s)$	Número de orbitais eletrônicos com velocidade menor que $U_s$		
$N$	Densidade atômica		$\text{cm}^{-3}$
$N$	Número médio de nêutrons liberados na fusão nuclear		
$N_0$	Número de Avogadro	$6,022 \cdot 10^{23}$	$\text{mol}^{-1}$
$p$	Momento linear da partícula		
$P(\theta_c, b)$	Probabilidade de espalhamento de um íon		
$P(E, T)$	Probabilidade de colisão de um íon		
$P_r$	Produtos de fissão que reagiram		
$P_t$	Produtos totais		
$Q_{ab}$	Energia associada a massa de repouso		MeV
$R$	Alcance		m
$S$	Seção de choque de freamento		
$t$	Parâmetro de colisão adimensional		

$t_{1/2}$	Tempo de meia vida		
$t_f$	Tempo de freamento		s
$U_s$	Velocidade do elétron na órbita s		$10^8 \text{ cm/s}$
$v$	Velocidade do íon		$10^8 \text{ cm/s}$
$v_0$	Velocidade da primeira órbita de Bohr	2,184	$10^8 \text{ cm/s}$
$Z_1$	Número atômico do íon		
$Z_2$	Número atômico do alvo		

### Caracteres Gregos

$\chi_U$	Função de espalhamento universal		
$\Delta m$	Defeito de massa		amu
$\overline{\Delta B}$	Variação da energia de ligação durante a fusão		MeV
$\sigma(E)$	Seção de choque de transferência de energia		
$\theta_c$	Ângulo de espalhamento do centro de massa do projétil		
$\varepsilon$	Energia reduzida		
$\rho_e/2$	Termo de correção para Equação 2.47		

## 1 INTRODUÇÃO

O combustível nuclear produz energia através de uma variedade de reações nucleares. As reações que podem ser encontradas naturalmente são os decaimentos  $\alpha$ ,  $\beta^\pm$  e  $\gamma$ . Outros exemplos são a fusão nuclear e a fissão nuclear que são processos de formação de um composto nuclear a partir de núcleos leves e fragmentação de um núcleo pesado, respectivamente. Enquanto a fissão é uma fonte de energia consolidada, a fusão ainda não passou da fase pioneira. A quantidade de energia liberada em processos nucleares é tipicamente superior a de outras formas de conversões de energia, o que torna esse tipo de energia uma fonte atrativa e que requer tecnologias adequadas para seu controle.

Durante a operação de um reator nuclear são produzidos grandes volumes de rejeitos nucleares, que englobam desde equipamentos utilizados para manuseio de material radioativo até o combustível nuclear usado. Todo o rejeito é classificado segundo seu nível de radiação, podendo ser de baixa, de média ou de alta atividade.

Os rejeitos de baixa atividade são materiais de proteção individual e equipamentos que, após serem descartados passam por um processo de descontaminação e se necessário são isolados em recipientes especiais. Classificados como resíduos de média atividade estão os resíduos sólidos dos efluentes líquidos que foram solidificados, por exemplo, e normalmente são armazenados em uma matriz de cimento. O combustível nuclear usado é classificado como resíduo de alto nível de radioatividade, sendo entre os três níveis, o que possui relevância para esse trabalho.

O rejeito de alta atividade pode ser armazenado em locais e recipientes apropriados. Quando o material é disposto sem nenhum tipo de tratamento, o ciclo de combustível é dito aberto. Em ciclos fechados, o combustível usado é reprocessado e seus constituintes de interesse são separados. Os elementos de interesse que estão no rejeito, como U-235 e Pu-239 podem ser utilizados novamente como combustível, sendo o sistema de reprocessamento mais aceito e utilizado o PUREX (*Plutonium Uranium Extraction*) [IAEA, 2009]. Além disso, outros componentes podem ser utilizados na medicina, na indústria, etc. O restante do material que não possui valor comercial é armazenado como rejeito de alta atividade. A decisão entre a disposição direta e o reprocessamento é dado por uma fa-

tor de custo/benefício, que envolve o método de reprocessamento e o tipo de reator que originou o rejeito, além das políticas nacionais de resíduos nucleares. Como exemplo de estudos nessa área podemos citar [Bunn et al., 2003], [Orszag, 2007] e [Hogselius, 2009].

Independente dos métodos aplicados no reprocessamento do material radioativo essa etapa envolve a manipulação desse material e, portanto expõe os operadores e o ambiente aos riscos da radiação. A alteração na distribuição dos tempos de meia vida dos produtos de fissão de um reator nuclear podem ter implicações tanto na segurança quanto nas opções de uso do material após reprocessamento.

Embora parte do rejeito nuclear possa ser reaproveitado através do reprocessamento, o objetivo dos reatores nucleares de potência não é a produção desse material. Radioisótopos podem ser produzidos em reatores ou sistemas destinados para esse fim. Nesses sistemas o tipo de radioisótopo e seu volume são controlados e a geração de rejeitos é minimizada. Assim, é de interesse o estudo de opções para redução do passivo ambiental, seja pelo emprego do reprocessamento ou por outras tecnologias.

Este trabalho apresenta um estudo inicial das consequências que surgem quando possíveis reações de fusão nuclear ocorrem entre produtos de fissão e materiais mais leves (de baixo número atômico) misturados ao combustível nuclear. Como questão principal destaca-se a influência da combinação das reações de fissão e fusão com a alteração na distribuição das meia vidas dos produtos finais dessas reações e sua contribuição no balanço de energia.

O autor dessa dissertação está ciente que muitas questões pertinentes serão deixadas de lado, como a questão da produção da mistura do combustível com elementos leves e garantir a criticalidade do reator, as propriedades mecânicas e térmicas adequadas entre outros aspectos. Pelo conhecimento do autor, não existem estudos semelhantes na literatura, de modo que a discussão apresentada aqui é uma tentativa de explorar perspectivas em uma nova direção.

A ideia de construção de sistemas híbridos fissão-fusão nuclear é antiga, em [Bethe, 1979], Bethe propôs utilizar a fusão de trítio e deutério como fonte de nêutrons rápidos para converter Th-232 e U-238, após captura de um nêutron, em U-233 e Pu-239, respectivamente, para serem utilizados como combustível em reatores convencionais de fissão. A proposta de Bethe era prolongar a duração das reservas de urânio. O híbrido teria dessa forma o papel de uma fábrica de combustível. Outro exemplo de sistema hí-

brido são os reatores ADS (*Accelerator Driven System*) que tem por objetivo a utilização de U-233 como combustível e a redução do tempo de meia-vida de elementos oriundos de outros reatores. Para a redução da meia vida utiliza-se o processo de transmutação. Nesse reator o material absorve um ou mais nêutrons, passa a um estado excitado e é transmutado a outro material com meia-vida menor. A vantagem desse tipo de reator é que o material a ser transmutado pode ser adicionado ao combustível.

A presente discussão, como já mencionado, também tem como ponto de partida a ideia de combinar os dois processos, porém parte da observação que as reações de fissão têm como produtos nuclídeos que se encontram deslocados da região de estabilidade. A região de estabilidade refere-se ao número de prótons ( $Z$ ), ao número de nêutrons ( $N$ ) e ao número de massa ( $A = Z + N$ ), que resulta na maior energia de ligação para um valor específico de  $A$ . Para núcleos leves ( ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{14}\text{N}$ ) a razão próton-nêutron é próxima a um ( $Z/N \sim 1$ ), para núcleos pesados a proporção esta em torno de  $2/3$ . No processo de fragmentação de núcleos pesados os núcleos resultantes tem a proporção alterada para  $Z/N \sim 2/5$  que classificam estes elementos como instáveis. Decaimentos sucessivos,  $\alpha$  e  $\beta^-$ , aproximam esses nuclídeos da região de estabilidade. Para processos de fusão nuclear o produto final é um composição de dois nuclídeos leves, que têm probabilidade maior de formação quanto maior for a energia de ligação por nucleon, ou seja, a tendência é que o produto final se encontre na região de estabilidade. Conforme esse raciocínio, se for possível combinar reações de fissão e fusão seria viável reduzir a radioatividade do rejeito nuclear.

Para esse estudo foi considerado a adição de uma fração mássica de 0,3 dos elementos alvo, os parceiros para a fusão nuclear. Devido as considerações neste trabalho, o valor da fração mássica possui um relação linear com os efeitos calculados, de maneira que seu valor foi definido apenas para evidenciar o tipo de efeito esperado devido a adição dos alvos. A adição de outro material ao combustível nuclear pode alterar a dinâmica do reator, e a fusão nuclear pode contribuir de duas formas para a população de nêutrons: atuando como fonte de nêutrons, sendo eles um dos produtos da reação ou como sumidouro, quando um precursor de nêutrons atrasados reage com um alvo, ele deixa de contribuir na dinâmica de nêutrons.

A metodologia de cálculo pode ser dividida em duas partes: a primeira envolve o cálculo das seções de choque de fusão, o alcance do produto de fissão e a probabilidade do

produto de fissão encontrar o elemento alvo, a segunda envolve a determinação do produto final da reação entre os dois elementos. Como o objetivo deste trabalho é analisar se irá ocorrer aumento do tempo de meia vida dos produtos de fissão, na primeira etapa não foram calculadas as seções de choque de fusão nuclear, e a probabilidade de encontro entre os elementos foi aproximada como uma função da densidade atômica do elemento alvo, de sua fração mássica e dos demais constituintes do meio.

A determinação do produto final da fusão nuclear é estimado via princípio da incerteza e da variação da energia de ligação, assumindo somente a variação de nêutrons, pois os produtos de fissão possuem excesso dessas partículas. A determinação dos produtos finais após a fissão e a possível fusão permite analisar as respectivas distribuições de meias vidas de ambos os processos separadamente. O deslocamento da distribuição incluindo a fusão para meias vidas maiores em comparação a distribuição dos fragmentos indica uma tendência de tornar o rejeito nuclear, proveniente do combustível nuclear, mais estável com as demais consequências possíveis relacionadas. Como exemplo, podemos citar a redução da radioatividade e a consequente redução da taxa de produção de calor residual por este material.

## 2 FUNDAMENTOS

A Seção 2.1 apresenta o conceito de energia de ligação que será utilizado nas discussões ao longo desse trabalho. Nas Seções 2.3 e 2.4 serão apresentadas as noções básicas das reações nucleares, mais especificamente o balanço de massa e energia que serão necessários para elaborar o critério de estabilidade para selecionar e analisar as reações nucleares possíveis. A Seção 2.5 apresenta o critério que será utilizado para determinar uma escala de tempo para uma dada transição de uma reação nuclear em consideração. O transporte de partículas, nesse caso os fragmentos de fissão, através de um meio composto pelo combustível nuclear e os possíveis alvos de fusão é apresentado na Seção 2.6. Nessa última seção, é possível calcular, através do alcance e das velocidades associadas, uma segunda escala de tempo associada ao freamento através do meio. Da comparação entre as escalas de tempo nas Seções 2.5 e 2.6 resulta uma estimativa para a probabilidade de ocorrência da reação de fusão.

### 2.1 Defeito de massa e energia de ligação

A diferença entre a massa de um átomo e a massa de seus constituintes separadamente é chamada de defeito de massa. O defeito de massa é definido na Equação 2.1.

$$\Delta m = [Z(m_p + m_e) + (A - Z)m_n] - m_{at} \quad (2.1)$$

onde,  $\Delta m$  é o defeito de massa,  $Z$  e  $A$  são o número atômico e o número de massa, respectivamente,  $m_p$ ,  $m_e$ ,  $m_n$  e  $m_{at}$  são as massas do próton, do elétron, do nêutron e do átomo, respectivamente. Todas as massas são dadas em *amu*.

O defeito de massa é a massa convertida em energia de ligação quando um núcleo é formado. A energia de ligação representa a energia necessária que deve ser fornecida a um átomo para separação total de seus constituintes.



## 2.2 Reações nucleares

Uma forma geral de uma reação nuclear pode ser escrita considerando-se o estado inicial e final de energia e de massa (reação 2.2) ou, ainda, representando as espécies envolvidas (reação 2.3):

$$E_o + M_o \rightarrow E_f + M_f \quad (2.2)$$

onde a massa é expressa em unidades de energia, isto é, multiplicada pela velocidade da luz ao quadrado. Nessa reação genérica são válidas as desigualdades:  $E_o < E_f$  e  $M_o > M_f$ .

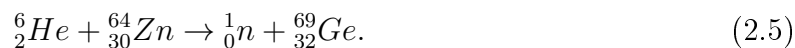
$$a + b \rightarrow d + e \quad (2.3)$$

A avaliação quantitativa do processo nuclear é realizada através das condições de conservação do número atômico e da energia associada ao estado inicial das espécies presentes na reação 2.3.

Uma forma mais completa para expressar a reação 2.3 é a inclusão de todos os nucleons participantes. Considerando a notação  ${}^A_Z X$ , onde X é uma espécie nuclear contendo A nucleons dos quais Z são prótons, podemos reescrever a reação em questão como

$${}^{A_a}_{Z_a} X_a + {}^{A_b}_{Z_b} X_b \rightarrow {}^{A_d}_{Z_d} X_d + {}^{A_e}_{Z_e} X_e \quad (2.4)$$

um exemplo dessa reação é dada na reação 2.5:



O número de nucleons, A, é a soma dos prótons (Z) e dos nêutrons (N); para uma espécie  $j$ :  $A_j = Z_j + N_j$ . A conservação de massa e de carga da reação 2.4 requer, respectivamente, que

$$A_a + A_b = A_d + A_e \quad (2.6)$$

$$Z_a + Z_b = Z_d + Z_e \quad (2.7)$$

A energia de um conjunto de partículas é a soma da energia cinética,  $E_k$ , e da energia associada à massa,  $E_r = mc^2$ , onde  $m$  é a massa de repouso da partícula e  $c$  é a velocidade da luz no vácuo. Aqui existe a possibilidade de criar um produto no estado excitado, sendo a energia em excesso contemplada na massa do produto. Para uma reação nuclear a conservação de energia exige que as quantidades dessa grandeza sejam mantidas constantes ao longo da reação. Com base nesses conceitos podemos escrever a conservação de energia para a reação 2.4 da seguinte forma

$$(E_{k,a} + m_a c^2) + (E_{k,b} + m_b c^2) = (E_{k,d} + m_d c^2) + (E_{k,e} + m_e c^2) \quad (2.8)$$

Rearranjando os termos:

$$(E_{k,d} + E_{k,e}) - (E_{k,a} + E_{k,b}) = [(m_a + m_b) - (m_d + m_e)] c^2 \quad (2.9)$$

Essa equação relaciona as diferenças de energia cinética antes e depois da reação com as diferenças da massa de repouso, assim uma variação na energia cinética causa uma variação na massa de repouso. Escrevendo  $Q_{ab}$  como a energia associada à massa de repouso

$$Q_{ab} = [(m_d + m_e) - (m_a + m_b)] c^2 = (-\Delta m) c^2 \quad (2.10)$$

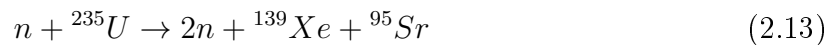
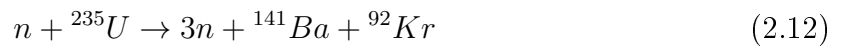
onde  $\Delta m$  é o defeito de massa. Essa grandeza, da forma como calculada, considera a energia cinética desprezível, ou seja zero.

### 2.3 Fissão

Um reator nuclear mantém a taxa de produção de energia através da fissão do U-235. A fissão é um dos eventos que podem ocorrer quando um nêutron é absorvido pelo urânio. Algumas reações possíveis são: absorção, que pode envolver captura e fissão, e espalhamento elástico ou inelástico, entre outras. O nêutron absorvido pode forçar um

rearranjo da estrutura nuclear do  $^{236}\text{U}$  causando sua fragmentação, na maioria das vezes em dois núcleos. Além dos elementos formados há liberação de 2,5 nêutrons em média,

Um esquema geral de uma reação de fissão nuclear é apresentado na reação 2.11, onde um nêutron ( $n$ ) é absorvido pelo  $^{235}\text{U}$  e provocando a fissão do composto formado. Nesse processo são liberados  $\nu$  nêutrons e fragmentos são formados ( $P_i$ ). As reações 2.12 e 2.13 são exemplos desse processo.



Os nêutrons produzidos nessa etapa são denominados nêutrons prontos. Essas partículas possuem elevada energia cinética e quase não causam nova fissão do urânio antes de serem moderados e entrarem na faixa de energia térmica ( $\sim 0,02\text{keV}$ ). Uma segunda fonte de nêutrons tem origem no decaimento de alguns produtos de fissão, denominados de precursores, e os nêutrons gerados por esses nuclídeos são denominados de nêutrons atrasados.

Enquanto os nêutrons prontos são gerados em um tempo da ordem de  $10^{-14}\text{s}$ , os nêutrons atrasados podem atingir algumas dezenas de segundos e contribuem com menos de 1% do total de nêutrons gerados. Apesar da pequena contribuição esses nêutrons são fundamentais para o controle efetivo das reações em cadeia.

Em uma sucessão de reações em cadeia, a razão do número de nêutrons em uma geração em relação à geração que a precedeu é denominada de fator de multiplicação, definido na Equação 2.14. Esse parâmetro indica se um determinado arranjo do combustível nuclear autossustenta as reações em cadeia.

$$k = \frac{\text{número de fissões induzidas por nêutrons em uma geração}}{\text{número de fissões induzidas por nêutrons na geração anterior}} \quad (2.14)$$

Para  $k < 1$  o reator é dito subcrítico e não consegue manter a reação em cadeia; se  $k = 1$  o reator é dito crítico e as reações em cadeia mantêm-se à taxa estacionária; e se  $k > 1$  o reator é supercrítico e a taxa de energia gerada aumenta a cada geração e um efeito multiplicativo no número de fissões entre as gerações se manifesta.

A energia cinética mais provável ( $\langle E(Z, A) \rangle$ ), em  $MeV$ , de um fragmento de fissão é dada por uma relação apresentada em [Viola et al., 1985] e representada na Equação 2.15. A energia é função do número atômico do elemento,  $Z$ , e de seu número de massa,  $A$ .

$$\langle E(Z, A) \rangle = 0,1166MeV \frac{Z^2}{A^{1/3}} + 9,0MeV. \quad (2.15)$$

## 2.4 Fusão

A energia proveniente da fusão nuclear, assim como o processo de fissão, é associada à variação de massa antes e depois de uma reação. No processo de fusão nuclear a reação ocorre entre dois núcleos. A fusão é exemplificada na reação 2.16. No exemplo, os núcleos participantes,  ${}^2H$  e  ${}^3H$ , devem possuir uma energia mínima para vencer a repulsão eletrostática entre as cargas positivas dos núcleos.



Segundo [Beckerman, 1988] a dinâmica de fusão em baixas energias (da ordem do potencial clássico) é governada pelo "tunelamento quântico" através da barreira de Coulomb. Esse processo ocorre sob condições onde os movimentos relativos são fortemente acoplados a graus de liberdade internos: vibração da superfície nuclear, rotação de núcleos deformados, transferência de núcleons.

O fenômeno de tunelamento, que na verdade representa a dinâmica (ou flutuação) da própria barreira de Coulomb, permite que taxas substanciais de reações de fusão nuclear sejam atingidas sem temperaturas elevadas para partículas reagentes com energia cinética média da ordem de apenas algumas dezenas de  $keV$ . Essas taxas envolvem o cálculo da seção de choque de fusão e do efeito de tunelamento quântico. Entretanto, a resolução do problema de mecânica quântica associado, ou mesmo, de seu equivalente semi-clássico,

com certa exatidão é difícil.

Alguns algoritmos numéricos para a resolução das equações de Schrödinger acopladas foram desenvolvidos: [Niello et al., 1989] utilizou um modelo simplificado para cálculo das seções de choque considerando as deformações estáticas do núcleo e diagonalizando a matriz de acoplamento, já em [Hagino et al., 1999b] uma solução numérica foi obtida diretamente a partir das equações diferenciais relevantes. Em [Hagino et al., 1999a] foi proposto um algoritmo que estima as seções de choque de fusão considerando os acoplamentos não lineares de todas as ordens. Esse algoritmo apresenta boa concordância com valores experimentais para energias cinéticas relativas na faixa de algumas dezenas de  $MeV$ . Os resultados que reproduziram melhor os dados experimentais foram obtidos por [Zagrebaev e Samarin, 2004], que utilizou um método explícito para cálculo dos elementos da matriz de interação e considerou a dinâmica do tunelamento multidimensional. Outros estudos para reações específicas de fusão nuclear foram realizados, como por exemplo em [Navin et al., 2004], [Vinodkumar et al., 2009] e [Sinha et al., 2010], que avaliaram as reações de  ${}^6He + {}^{65}Cu$ ,  ${}^9Li + {}^{208}Pb$  e  ${}^6Li + {}^{28}Si$ , respectivamente.

## 2.5 Princípio da incerteza

Para calcular as probabilidades que descrevem as taxas de reação para a fusão nuclear deve-se utilizar modelos nucleares. Um dos problemas atuais é que não há nenhum modelo que possa ser utilizado de uma forma "universal", ou seja para uma diversidade de reações nucleares possíveis. Devido á falta de uma teoria quântica que descreva interação nuclear, tendo papel semelhante a teoria de Maxwell para o eletromagnetismo, as probabilidades para as reações de fusão podem apenas ser estimadas. Como os fenômenos nucleares são caracterizados por propriedades quânticas, um método para estimar as probabilidades provém do princípio de incerteza, que relaciona grandezas duais, onde para as considerações presentes são a relação entre energia e tempo. A Equação 2.17 mostra a relação entre energia ( $\Delta E$ ) e tempo ( $\Delta t$ ),

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.17)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

Energia e massa são relacionados pela equação de Einstein ( $E = mc^2$ ) que permite

relacionar diferenças de energia, mais especificamente energia de ligação com o defeito de massa. Combinando o princípio da incerteza com o defeito de massa é possível obter estimativas para escalas de tempo que caracterizam a transição entre o estado inicial dado pelo fragmento da fissão e o nuclide alvo leve e o estado final, o resultado da fusão e eventualmente nêutron(s) livre(s).

Este raciocínio não é novo (podendo ser encontrado em livros de texto sobre Mecânica Quântica quando a chamada Regra de Ouro por Fermi é apresentada, como em [Schwabl, 2004]), e como exemplo é tipicamente aplicado para estimar a vida média de um núcleo radioativo utilizando a medição da energia liberada no processo. Desta forma uma vez que o  $\Delta E$  é determinado através do defeito de massa

$$\Delta E = \Delta M c^2 = (M_{\text{fragmento fissão}} + M_{\text{alvo leve}} - (M_{\text{produto fusão}} + n m_n)) c^2$$

onde  $n$  é o número de nêutrons produzidos neste processo e  $m_n$  a massa do nêutron; o  $\Delta t$  é relacionado ao inverso da taxa de transição que por sua vez é relacionado com a matriz de transição quântica  $\langle \beta | V | \alpha \rangle$  ao quadrado e a densidade de estados  $\rho_{\alpha\beta}$ . A matriz de transição  $V$  representa a interação nuclear responsável pelo processo de fusão (o qual não é conhecido). Para ilustrar esta relação estabelecida será dada a fórmula que descreve a probabilidade por unidade de tempo  $\Gamma_{\alpha\beta}$  com que uma reação com estado inicial  $\alpha$  e estado final  $\beta$  acontece e a sua relação com a incerteza no tempo.

$$\frac{1}{\Delta t} \approx \Gamma_{\alpha\beta} \frac{1}{h} \rho_{\alpha\beta} |\langle \beta | V | \alpha \rangle|^2$$

Observa-se que  $\Delta t$  é correlacionado com a probabilidade de transição e portanto pode ser utilizado numa comparação de escalas de tempo para obter uma estimativa para a probabilidade com que esta reação ocorra, o que será apresentado na Seção 3.4 .

## 2.6 Interações de partículas com a matéria

Quando íons com uma determinada energia atravessam um sólido, ocorrem uma série de colisões entre o íon e os átomos e os elétrons do alvo. Durante essas colisões, energia é perdida a uma taxa por unidade de comprimento  $dE/dx$ ; geralmente expressa em  $MeV/(mg/cm^2)$ . Além da taxa de energia perdida, outra grandeza de interesse, definida como *alcance* ( $R$ ) pode ser calculada pela integral

$$R = \int_{E_i}^0 \frac{1}{dE/dx} dE \quad (2.18)$$

onde  $E_i$  é a energia inicial do íon ( $MeV$ ). O alcance não representa o percurso total do íon, mas a distância projetada normal entre a superfície do alvo até o ponto em que a energia cinética do íon é nula. Na equação (2.18)  $R$  possui unidades de  $mg/cm^2$ , podendo ser convertida para uma unidade de comprimento pela divisão da massa específica do alvo.

A taxa com que a energia é perdida pode ser separada em duas contribuições: (i) colisões nucleares e (ii) colisões eletrônicas. Logo,

$$\frac{dE}{dx} = \frac{dE}{dx}|_n + \frac{dE}{dx}|_e \quad (2.19)$$

onde o subíndice  $n$  representa a contribuição nuclear e o subíndice  $e$ , a eletrônica, representando assim o freamento nuclear e o freamento eletrônico, respectivamente

A seção de choque de freamento é definida como

$$S \equiv \frac{dE/dx}{N} \quad (2.20)$$

onde  $N$  representa a densidade atômica do meio.

As colisões nucleares podem envolver grandes perdas discretas de energia com significativa deflexão angular da trajetória do íon, já as colisões eletrônicas envolvem perdas pequenas de energia a cada colisão e provocam uma deflexão na trajetória dos íons que pode ser negligenciada. A contribuição de ambos os tipos de freamento difere bastante com o aumento da energia e com o número atômico do íon. Para baixas energias e altos números atômicos o freamento nuclear predomina. No caso contrário, o freamento dos íons é devido às colisões eletrônicas.

### 2.6.1 Freamento nuclear

O freamento nuclear de íons ocorre devido a colisões elásticas com os átomos do alvo, essas colisões são avaliadas por unidade de comprimento percorrido pelo íon no alvo. A probabilidade de uma partícula com energia  $E$  colidir enquanto percorre o alvo é

$$dP(E, T) \equiv \frac{dP(E)}{dT} dT = N \frac{d\sigma(E)}{dT} dT dx = \frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (2.21)$$

onde  $dP(E, T)$  é a probabilidade de que um íon com energia  $E$ , em  $MeV$ , irá sofrer uma colisão produzindo uma transferência de energia no intervalo  $T$  e  $T + dT$  enquanto percorre uma distância  $dx$ ,  $d\sigma(E)/dT$  é a secção de choque diferencial microscópica de transferência de energia, em  $cm^2/MeV$  e  $N$  é a densidade atômica ( $1/cm^3$ ).

A energia média perdida por uma partícula em movimento em um comprimento  $dx$  é obtido multiplicando a Equação 2.21 pela energia transferida  $T$  e integrando sobre todos os valores possíveis de  $T$

$$\langle dE \rangle = \int T \frac{dP(E)}{dT} dT = N \int_{T_{Max}}^{T_{min}} T \frac{d\sigma(E)}{dT} dT dx. \quad (2.22)$$

Para um infinitesimal  $dx$

$$\frac{dE}{dx} |_{n=} = N \int_{T_{Max}}^{T_{min}} T \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (2.23)$$

onde  $T_{Min}$  é a mínima energia transferida e  $T_{Max}$  é definido na Equação 2.24.

$$T_{Max} = \frac{4A_1 A_2}{(A_1 + A_2)^2} E \quad (2.24)$$

Para um potencial de Coulomb blindado, a seção de choque diferencial de transferência de energia é definida por uma notação reduzida

$$d\sigma = -\frac{\pi a_{TF}^2 f(t^{1/2})}{2t^{3/2}} dt \quad (2.25)$$

onde  $t$  é um parâmetro de colisão adimensional (Equação 2.26),  $f(t^{1/2})$  é a função de escala de Lindhard,  $a_{TF}$  é o comprimento de blindagem de Thomas-Fermi (Equação 2.28).

$$t = \varepsilon^2 \frac{T}{T_{Max}} = \varepsilon^2 \sin^2 \left( \frac{\theta_c}{2} \right) \quad (2.26)$$



$$\varepsilon = \frac{A_1}{A_1 + A_2} \frac{a_{TF}}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (2.27)$$

$$a_{TF} = \frac{1}{2} \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{3/2} \frac{\hbar^2}{m_e e^2 Z^{1/3}} = \frac{0,885}{Z^{1/3}} a_0 \quad (2.28)$$

Nas Equações 2.26, 2.27 e 2.28  $e$  e  $m_e$  são a carga e a massa do eletron, respectivamente,  $a_0$  é o raio de Bohr,  $\varepsilon$  é a energia reduzida e  $\theta_c$  é o ângulo de espalhamento do projétil em relação ao centro de massa.

Aplicando essas definições podemos reescrever a Equação 2.23 como

$$\frac{dE}{dx} \Big|_n = -\frac{N\pi a_{TF}^2 T_M}{\varepsilon^2} \int_0^{T_M} f(t^{1/2}) dt \quad (2.29)$$

A Equação 2.29 pode ser reescrita em um formato universal pela introdução da seção de choque reduzida de freamento,  $S(\varepsilon)$ , e um comprimento reduzido,  $\rho_L$ , dado por

$$S(\varepsilon) = \frac{d\varepsilon}{d\rho_L} \quad (2.30)$$

com

$$\rho_L = LN A_2 4\pi a_{TF}^2 \frac{A_1}{(A_1 + A_2)^2}. \quad (2.31)$$

Uma relação entre  $S_n(\varepsilon)$  e  $S_n(E)$  pode ser obtida reescrevendo  $dE/dx$  em função da diferencial definida na Equação 2.30:

$$\frac{dE}{dx} \Big|_n = \frac{dE}{dL} \equiv \frac{d\varepsilon}{d\rho_L} \left( \frac{d\rho_L}{dL} \frac{dE}{d\varepsilon} \right)$$

Isolando  $d\varepsilon/d\rho_L$ ,

$$\frac{d\varepsilon}{d\rho_L} = \frac{dE}{dx} \left( \frac{dL}{d\rho_L} \frac{d\varepsilon}{dE} \right) \quad (2.32)$$

Substituindo na Equação 2.32 as Equações 2.31, 2.27, tomando as derivadas e

por fim substituindo as Equações 2.20 e 2.30, encontramos a relação procurada,

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi a_{TF}^2 y E} S_n(E) \quad (2.33)$$

onde

$$y = \frac{4A_1 A_2}{(A_1 + A_2)^2} \quad (2.34)$$

A Equação 2.33 é uma aproximação razoável para o cálculo da seção de choque. Uma modificação dessa teoria foi proposta por [Ziegler et al., 1985] (Modelo ZBL). As modificações proporcionaram um alto nível de acurácia ao cálculo de  $S_n(\varepsilon)$  e aumentaram o espectro de energias para qual essa nova proposta poderia ser aplicada [Nastasi et al., 1996].

O modelo ZBL substitui  $a_{TF}$  na Equação 2.33 por um comprimento de blindagem universal,  $a_U$ , definido

$$a_U = \frac{0,8854a_0}{(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \quad (2.35)$$

e reescreve a Equação (2.33) como

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi a_U^2 y E_0} S_n(E_0) \quad (2.36)$$

A Equação 2.36 pode ser reescrita a partir das Equações 2.20 e 2.23

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi a_U^2 y E_0} \int_0^{T_{Max}} T \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (2.37)$$

onde

$$T = T_{Max} \sin^2 \left( \frac{\theta_c}{2} \right) = y E_0 \sin^2 \left( \frac{\theta_c}{2} \right) \quad (2.38)$$

$\theta_c$  é o ângulo de espalhamento do centro de massa para o projétil e  $E_0$  é a sua

energia.

A seção de choque para um processo de espalhamento é determinada pelas funções de probabilidade, Equações 2.21 e 2.39. A última equação representa a probabilidade de uma colisão produzir uma deflexão na trajetória do projétil entre  $\theta_c$  e  $\theta_c + d\theta_c$  enquanto percorre uma distância  $dx$ .

$$P(\theta_c, b) \equiv \frac{dP(\theta_c)}{dp} = N \frac{d\sigma(\theta_c)}{dp} dp dx = \frac{1}{\sigma(\theta_c)} \frac{d\sigma(\theta_c)}{dp} dp \quad (2.39)$$

onde  $b$  é um parâmetro de impacto e  $p$  é o momento linear da partícula.

Como  $P(E, T)$  e  $P(\theta_c, b)$  são iguais a unidade podemos escrever a identidade  $\sigma(E) = \sigma(\theta_c)$ , que equivale a

$$\int_{T_{Min}}^{T_{Max}} \frac{d\sigma(E)}{dT} dT = \int_{b_{Max}}^0 \frac{d\sigma(\theta_c)}{db} db \equiv \int_0^{b_{Max}} 2\pi b db. \quad (2.40)$$

Utilizando as Equações 2.37, 2.38 e 2.40 a seção de choque de freamento nuclear reduzida é escrita como

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{a_U^2} \int_0^\infty \sin^2 \left( \frac{\theta_c}{2} \right) d(b^2). \quad (2.41)$$

O ângulo de espalhamento  $\theta_c$  é determinado a partir da Equação 2.42 e é função do potencial interatômico,  $V(r)$ , da energia do íon e do parâmetro de impacto,

$$\theta_c = \pi - 2b \int_0^{1/r_{min}} \frac{1}{\left(1 - \frac{V(u)}{E_c} - (bu)^2\right)^2} du \quad (2.42)$$

$r$  é a distância de aproximação do íon e do alvo e  $u = 1/r$ .

[Ziegler et al., 1985] utilizou a função de espalhamento universal,  $\chi_U$  (Equação 2.43) e os resultados da integração numérica das Equações 2.41 e 2.42 para determinar a seção de choque de freamento nuclear com energia reduzida (Equação 2.44).

$$\begin{aligned} \chi_U = & 0,1818 \exp(-3,2x) + 0,5099 \exp(-0,9423x) + \\ & 0,2802 \exp(-0,4028x) + 0,02817 \exp(-0,2016x) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$S_n(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{\ln(1+1,1383\varepsilon)}{2(\varepsilon+0,01321\varepsilon^{0,21226}+0,19593\varepsilon^{0,5})} & \text{para } \varepsilon \leq 30keV \\ \frac{\ln(\varepsilon)}{2\varepsilon} & \text{para } \varepsilon > 30keV \end{cases} \quad (2.44)$$

Para o freamento nuclear de um íon com energia  $E_0$ :

$$S_n(E_0) = \frac{8,462Z_1Z_2A_1S_n(\varepsilon)}{(A_1 + A_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \frac{0.6022}{A_2}. \quad (2.45)$$

onde  $\varepsilon$  representa a energia reduzida do íon. O termo a direita da equação 2.45 é um fator de conversão para a unidade de  $MeV/(mg/cm^2)$ .

Com a energia reduzida do íon definida por

$$\varepsilon = \frac{32,53A_1A_2(E/A_1)}{Z_1Z_2(A_1 + A_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (2.46)$$

Nas equações (2.45), (2.46) e (2.44)  $E$  e  $\varepsilon$  tem unidade de  $keV$ .

### 2.6.2 Freamento eletrônico

O freamento eletrônico de uma partícula em um meio sólido, é normalmente, tratado pelo modelo de Bethe-Bloch, apresentado na Equação 2.47.

$$\frac{dE}{dx}|_e = \frac{4\pi e^4 Z_2 Z_1^2}{m_e v^2} \frac{N_0}{10^{21} M_2} \left[ \ln \left( \frac{2m_e v^2}{\bar{I}} \right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\rho_e}{2} \right] \quad (2.47)$$

onde  $e$  e  $m_e$  são a carga e a massa do elétron,  $v$  é a velocidade da partícula,  $Z_1$  e  $Z_2$  são os números atômicos da partícula e do alvo,  $M_2$  é a massa do alvo,  $N_0$  é o número de Avogadro,  $\beta = v/c$  onde  $c$  é a velocidade da luz,  $\bar{I}$  é a energia média de excitação,  $C/Z_2$  é a correção para as camadas eletrônicas e  $\rho_e/2$  é termo de correção para o efeito de densidade.

A correção para as camadas eletrônicas assume que a velocidade da partícula é muito maior do que a velocidade dos elétrons no alvo. Esse termo é calculado para cada órbita eletrônica que interage com a partícula. O cálculo da correção  $C/Z_2$  para efeitos não relativísticos é comumente estimada pelas funções de onda do hidrogênio (HWF) ou pela aproximação de densidade local (LDA). O método HWF considera que a partícula interage individualmente com os elétrons do átomo alvo, os quais são descritos por funções de onda de hidrogênio. Para o método LDA considera-se que a partícula

interage com um gás de elétrons livres com várias densidades.

O termo de efeito de densidade ( $\rho_e/2$ ) corrige os efeitos de polarização no alvo, esse efeito é notado para partículas relativísticas com energia cinética que excedem sua massa de repouso. Uma parametrização para fator foi proposta por [Sternheimer, 1965b], [Sternheimer, 1965a] e [Sternheimer et al., 1982].

Apesar da Equação 2.47 possuir um conjunto de parâmetros que corrigem o freamento eletrônico sua aplicação possui alguns limites:

- Para valores de  $\beta\gamma < 0,3$  os resultados podem apresentar desvio considerável dos valores experimentais;
- O cálculo de  $C/Z_2$  para camadas mais externas é obtido via comparação de dados teóricos e dados experimentais;
- O desenvolvimento das equações se deu para freamento de íons leves tais como  $H$ ,  $He$  e  $Li$ .

Para o cálculo do freamento eletrônico optou-se pelo modelo proposto pelos autores [Srivasta e Mukherji, 1976], descrito a seguir, por apresentar boa concordância com valores experimentais e ser de fácil reprodutibilidade. O cálculo dessa grandeza combina duas formulações. A primeira, dada por Bohr, é mostrada na Equação (2.48)

$$\frac{dE}{dx}|_e = \frac{4\pi z^2 e^4 N}{m_e v} Z_2 \ln \left( \frac{1,123 m_e v^3}{z e^2 \bar{\omega}} \right) \quad (2.48)$$

onde  $e$  é a carga do elétron,  $m$  é a massa do elétron,  $N$  é o número de átomos por  $cm^3$  do alvo,  $z$  é a carga do íon,  $Z_2$  é o número de massa do alvo e  $\bar{\omega}$  é a frequência cíclica média geométrica.

Uma formulação semelhante, obtida por Bethe, através da mecânica quântica tem a forma

$$\frac{dE}{dx}|_e = \frac{4\pi z^2 e^4 N}{m_e v} Z_2 \ln \left( \frac{2m_e v^2}{I(1 - \beta^2)} - \beta^2 \right) \quad (2.49)$$

o parâmetro  $I$  inserido por Bethe representa o potencial médio de excitação do meio e  $\beta = v/c$ , onde  $c$  é a velocidade da luz.

As Equações 2.48 e 2.49 são válidas quando  $\chi \gg 1$  ou  $\chi \ll 1$ , onde  $\chi = 2zv_0/v$  e  $v_0 = e^2/\hbar$ . Uma formulação apresentada por Bohr posteriormente para o freamento eletrônico combinou ambas equações na Equação 2.50.

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi z^2 e^4 N}{m_e v^2} \left( \sum_s \ln(\eta_s^2 [\chi]^{-2}) + \sum_s \ln(\eta_s^2 [\chi/\eta_s]^{-1}) \right) \quad (2.50)$$

onde  $\eta_s = 2v/v_0$ ,  $\chi = 2zv_0/v$  e  $U_s$  é a velocidade do elétron na órbita  $s$ .

Segundo [Mukherji e Srivasta, 1974] a Equação 2.50 pode ser aplicada para partículas parcialmente ou totalmente ionizadas (sem nenhum elétron) caso em que  $\chi \gg 1$  ou  $\chi \ll 1$  não são rigorosamente válidos, a exemplo do que ocorre nos produtos de fissão. Quando  $\chi/\eta_s \leq 1$  ou  $U_s \leq 2v\chi^{-1}$  a razão  $(\chi/\eta_s)^{-1}$  é igual a unidade e o termo entre parênteses da Equação 2.50 é reescrito como

$$\sum_{U_s=0}^{U'_s} \ln(\eta_s^2 \chi^{-2}) + \sum_{U_s=0}^{U_s=2v\chi^{-1}} \ln(\eta_s^2) + \sum_{U_s=2v\chi^{-1}}^{U''_s} \ln(\eta_s^3 \chi^{-1}). \quad (2.51)$$

o limite inferior  $U_s = 0$  é uma aproximação dada por Bohr e os limites superiores  $U'_s$  e  $U''_s$  correspondem aos valores que zeram os termos logarítmicos, esse limite superior representa a impossibilidade da perda de energia ser negativa. Para tornar a notação simplificada define-se:

$$J_1 \equiv \sum_{U_s=0}^{U'_s} \ln(\eta_s^2 \chi^{-2}) \quad (2.52)$$

$$J_2 \equiv \sum_{U_s=0}^{U_s=2v\chi^{-1}} \ln(\eta_s^2) \quad (2.53)$$

$$J_3 \equiv \sum_{U_s=2v\chi^{-1}}^{U''_s} \ln(\eta_s^3 \chi^{-1}) \quad (2.54)$$

A seguir é apresentada a parametrização para o cálculo do *Alcance*, que é, basicamente, função de  $\chi$ ,  $z$ ,  $Z_2$  e  $v$ .

$$(i) \chi > 1 \text{ e } v \geq \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi$$

Para  $\chi > 1$ ,  $J_1$  inclui todos valores de  $U_s$  até a velocidade dos elétrons na camada

K, os quais podem ser dados como  $Z_2 v_0$ , quando  $v \geq \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi$ . Escrevendo  $\eta_s^2 = (2v/U_s)^2 = 2mv^2/I_s$ , onde o potencial de ionização do meio da camada  $s$  ( $I_s$ ) é dado por  $I_s = mU_s^2/2$ , pode-se reescrever  $J_1$ :

$$J_1 = \sum_{s=1}^{Z_2} \ln(\eta_s^2 \chi^{-2}) = Z_2 \ln \left( \frac{2mv^2}{\bar{I} \chi^2} \right) \quad (2.55)$$

onde  $\bar{I}$  é o potencial de ionização médio definido na Equação 2.56.

$$Z_2 \bar{I} = \sum_{s=1}^{Z_2} \ln I_s \quad (2.56)$$

Quando  $v = \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi$  o limite superior do somatório de  $J_2$ ,  $U_s = 2v\chi^{-1}$ , é igual a  $U_s = Z_2 v_0$ . Assim,

$$J_2 = \sum_{U_s=0}^{Z_2 v_0} \ln \left( \frac{2v}{U_s} \right)^2 = \sum_{s=1}^{Z_2} \ln \left( \frac{2mv^2}{I_s} \right) = Z_2 \ln \left( \frac{2mv^2}{\bar{I}} \right). \quad (2.57)$$

No somatório de  $J_3$  o limite inferior é também o valor máximo, assim não é necessário escreve-lo, pois essa situação é inclusa em  $J_2$ . Então,

$$J_1 + J_2 + J_3 = 2Z_2 \ln \left( \frac{2mv^2}{\bar{I} \chi} \right). \quad (2.58)$$

Substituindo a Equação 2.58 na Equação 2.50, simplificando e convertendo as unidades tem-se a expressão para o freamento eletrônico segundo as condições estabelecidas:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{63,65 \frac{\text{MeV cm}^3}{\text{gs}^2} z^2 Z_2}{A_2 v^2} \log_{10} \left( \frac{11,39 \frac{\text{keV s}^2}{\text{cm}^2} v^2}{I \chi} \right) \quad (2.59)$$

onde é dado nas unidades  $\text{MeV cm}^2 \text{mg}$ .

(ii)  $\chi > 1$  e  $\frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi^{1/3} \leq v < \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi$

Quando  $v < \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi$  o valor de  $U_s'$  para  $J_1$  é  $2v\chi^{-1}$  e  $J_1$  é negativo para  $U_s >$

$2v\chi^{-1}$ . De acordo com [Bohr e Selsk, 1948], o somatório pode ser substituído pela integral

$$J_1 = \sum_{U_s=0}^{2v\chi^{-1}} \ln \left( \frac{2v\chi^{-1}}{U_s} \right)^2 = \int_{U_s=0}^{U_s=2v\chi^{-1}} \ln \left( \frac{2v\chi^{-1}}{U_s} \right)^2 dn(U_s) \quad (2.60)$$

onde  $n(U_s)$  é o número de orbitais eletrônicos com velocidade menor do que  $U_s$ .

[Mukherji e Srivasta, 1974] mostrou que para um meio de número atômico  $Z_2$ ,  $n(U_s)$  é descrito pela Equação 2.61:

$$n(U_s) = \frac{f(Z_2)U_s}{v_0} \begin{cases} f(Z_2) = 0, 28Z_2^{2/3} & \text{se } Z_2 \leq 45,5 \\ f(Z_2) = Z_2^{1/3} & \text{se } Z_2 \geq 45,5 \end{cases} \quad (2.61)$$

A Equação 2.61 não consegue representar corretamente a velocidade dos elétrons nos extremos, interno e externo, das camadas eletrônicas e, assim, não satisfaz a condição de normalização dada pela Equação 2.62.

$$\int_{U_s=0}^{2v_0Z_2} dn(U_s) = Z_2. \quad (2.62)$$

Para contornar esse problema [Mukherji, 1975] aplicou a Equação 2.61 aos todos os elétrons, exceto aos dois elétrons da camada K. A partir dessa consideração podemos aplicar a Equação 2.61 na Equação 2.60:

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_{U_s=0}^{2v\chi^{-1}} \ln \left( \frac{2v\chi^{-1}}{U_s} \right)^2 dn(U_s) \\ &= \frac{f(Z_2)}{v_0} \int_{U_s=0}^{2v\chi^{-1}} \ln \left( \frac{2v\chi^{-1}}{U_s} \right)^2 dU_s \\ &= \frac{4f(Z_2)\chi^{-1}v}{v_0} \end{aligned} \quad (2.63)$$

O termo correspondente a  $J_2$  é obtido de modo semelhante:

$$J_2 = \int_{U_s=0}^{2v\chi^{-1}} \ln \left( \frac{2v}{U_s} \right)^2 dn(U_s) = \frac{4f(Z_2)\chi^{-1}(1 + \ln\chi^{-1})v}{v_0}. \quad (2.64)$$

Para  $J_3$  o limite superior corresponde a  $U_s'' = 2v\chi^{-1/3}$  quando  $v \geq Z_2v_0\chi^{1/3}/2$ , e



a expressão fica

$$J_3 = \sum_{U_s=2v\chi^{-1}}^{U_s''} \ln(\eta_s^3 \chi^{-1}) = \int_{U_s=2v\chi^{-1}}^{Z_2 v_0} \ln\left(\frac{2v}{U_s \chi^{1/3}}\right)^3 dn(U_s). \quad (2.65)$$

Como a Equação 2.61 não inclui os eletrons da camada K é necessário separar a contribuição desses dois eletrons dos outros  $(Z_2 - 2)$  eletrons do alvo na Equação 2.65:

$$J_3 = \frac{f(Z_2)}{v_0} \int_{U_s=2v\chi^{-1}}^{(Z_2-2)v_0/f(Z_2)} \ln\left(\frac{2v}{U_s \chi^{1/3}}\right)^3 dU_s + 2 \ln\left(\frac{2v}{Z_2 v_0 \chi^{1/3}}\right) \quad (2.66)$$

resolvendo a integral da Equação 2.66 e somando as expressões de  $J_1$  e  $J_2$ , das Equações 2.63 e 2.64, respectivamente:

$$\begin{aligned} J_1 + J_2 + J_3 &= \\ &= 3(Z_2 - 2) + \frac{2f(Z_2)v}{v_0\chi} + 3(Z_2 - 2) \ln \frac{f(Z_2)}{(Z_2 - 2)v_0} - Z_2 \ln \chi - 6 \ln(Z_2 v_0) + 3Z_2 \ln(2v) \end{aligned} \quad (2.67)$$

Substituindo a Equação 2.67 na Equação 2.50, simplificando e convertendo as unidades tem-se a expressão para o freamento eletrônico segundo as condições estabelecidas em (ii):

$$\frac{dE}{dx} = \frac{13,79 \frac{MeVcm^3}{gs^2} z^2}{A_2 v^2} \left( 3(Z_2 - 2) + 3(Z_2 - 2) \ln \frac{2f(Z_2)v}{(Z_2 - 2)v_0} + 6 \ln \frac{2v}{Z_2 v_0} + \frac{2f(Z_2)v}{v_0\chi} - Z_2 \ln \chi \right) \quad (2.68)$$

$$(iii) \chi > 1 \text{ e } v < \frac{1}{2} Z_2 v_0 \chi^{1/3} Z_2 v_0 \chi$$

Esse caso foi tratado com detalhes por [Bohr e Selsk, 1948] e uma expressão geral (Equação 2.69) foi dada por [Mukherji e Srivasta, 1974], os detalhes são omitidos nessa parte, pois a determinação dos limites  $U_s'$  e  $U_s''$  são relativamente longos.

$$J_1 + J_2 + J_3 = \frac{2f(Z_2)}{v_0} (3\chi^{-1/3} + \chi^{-1}) v \quad (2.69)$$

Substituindo a Equação 2.69 na Equação 2.50, tem-se a expressão para o freamento eletrônico:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{12,68 \frac{MeVcm^2}{gs} f(Z_2) z^2}{A_2 v} (3\chi^{-1/3} + \chi^{-1}) \quad (2.70)$$

$$(iv) \chi < 1 \text{ e } v \geq \frac{1}{2} Z_2 v_0$$

Com  $v \geq \frac{1}{2} Z_2 v_0$  a Equação 2.50 se comporta como a Equação 2.49, excluindo os termos  $\ln(1 - \beta^2)$  e  $\beta^2$  e se  $\chi < 1$  a partícula é capaz de ionizar os eletrons mais internos do alvo. A velocidade máxima transferida por uma partícula com velocidade  $v$  a um elétron é  $2v$  e se a velocidade de um elétron da camada K é  $Z_2 v_0$ , então a segunda condição é satisfeita para  $v \geq \frac{1}{2} Z_2 v_0$ . Assim,  $J_1$  e  $J_2$  são iguais e  $J_3$  é redundante, logo

$$J_1 + J_2 + J_3 = 2 \sum_{s=1}^{2v} \left( \frac{2v}{U_s} \right)^2 = 2Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I}. \quad (2.71)$$

Substituindo a Equação 2.71 na Equação 2.50 temos uma expressão que atende a condição de freamento eletrônico para partículas relativísticas:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{63,65 \frac{MeVcm^3}{gs^2} z^2 Z_2}{A_2 v^2} \left( \log_{10} \frac{11,39 \frac{keVs^2}{cm^2} v^2}{I(1 - \beta^2)} - \frac{\beta^2}{2,303} \right). \quad (2.72)$$

$$(v) \chi < 1 \text{ e } v < \frac{1}{2} Z_2 v_0$$

Nesse caso o limite apropriado para  $U'_s$  para  $J_1$  e  $J_2$  deve ser utilizado, pois nem todos os elétrons são capazes de participar do processo de freamento eletrônico. Os termos logaritmos em  $J_1$  e  $J_2$  são nulos para  $U'_s = 2v$ , assim, segundo [Bohr e Selsk, 1948], [Mukherji e Srivasta, 1974] e [Bethe e Ashkin, 1953]

$$J_1 = J_2 = \int_{U_s=0}^{2v} \ln \left( \frac{2v}{U_s} \right) dn(U_s) = \frac{4f(Z_2)v}{v_0} \quad (2.73)$$

e

$$J_1 + J_2 + J_3 = \frac{8f(Z_2)v}{v_0}. \quad (2.74)$$

Substituindo a Equação 2.74 na Equação 2.50 temos uma expressão que atende a condição ( $v$ ):

$$\frac{dE}{dx} = \frac{50,6 \frac{MeVcm^2}{gs} f(Z_2)z^2}{A_2v} \quad (2.75)$$

A carga efetiva ( $z$ ) de uma partícula com velocidade  $v$  é calculada pela Equação 2.76 proposta por [Northcliffe, 1960]. Os valores de excitação média ( $\bar{I}$ ) para o alvo dados por [Srivasta e Mukherji, 1976] foram substituídos pelos valores de [Ahlen, 1980] devido a maior confiabilidade dos valores.

$$z = Z_1 \left( 1 - 2,03 \exp \left( \frac{-2vf(Z_1)}{Z_1v_0} \right) \right)^{1/2} \begin{cases} f(Z_1) = 0,28Z_1^{2/3} & \text{se } Z_1 \leq 45,5 \\ f(Z_1) = Z_1^{1/3} & \text{se } Z_1 \geq 45,5 \end{cases} \quad (2.76)$$

### 2.6.3 Alcance e tempo de freamento

As Equações 2.59, 2.68, 2.70, 2.72 e 2.75 são válidas para qualquer velocidade instantânea  $v$ , assim, podemos calcular todos os valores de  $dE/dx$  para pequenos intervalos de energia durante o freamento eletrônico. O alcance total, expresso em  $mg/cm^2$  pode ser obtido pela soma das divisões dos intervalos de energia onde uma equação para o freamento eletrônico é válida. O alcance total de uma partícula que inicia com uma energia  $E_0$  é dada por

$$R = \sum_{E_0}^{E_1} \frac{\delta E}{(dE/dx)_1} + \sum_{E_1}^{E_2} \frac{\delta E}{(dE/dx)_2} + \dots + \sum_{E_{n-1}}^{E_n} \frac{\delta E}{(dE/dx)_n} \quad (2.77)$$

onde  $\delta E$  é uma pequena quantidade de energia ( $\sim 10keV$ ). A energia final  $E_n$  corresponde a velocidade  $v_0 = e^2/\hbar$ , para velocidades menores que  $v_0$  o freamento nuclear passa a ser importante, entretanto o valor adicionado ao alcance é insignificante. A conversão de  $R$  para unidades de comprimento é realizado pela divisão do valor encontrado pela massa específica do alvo,  $\rho$ .

O tempo de freamento eletrônico de uma determinada partícula é caculada em cada intervalo  $\delta E$ . Para cada intervalo o tempo de freamento é estimado pela mecânica clássica, pois as velocidades envolvidas não são relativísticas. A expressão final, para o tempo de freamento ( $t_f$ ) em segundos, é

$$t_f = \sum_{j=1}^n \frac{1,44 \cdot 10^{-12} R_j}{\rho \left[ \left( \frac{(E_1 - (j-1)\delta E)}{A_1} \right)^{0.5} + \left( \frac{(E_1 - j\delta E)}{A_1} \right)^{0.5} \right]} \quad (2.78)$$

### 3 PROCEDIMENTO

Neste capítulo serão utilizados os conceitos apresentados no último capítulo para estimar a probabilidade para que uma reação de fusão ocorra após a produção dos fragmentos de fissão. O procedimento de cálculo da distribuição dos tempos de meia vida finais para um conjunto de partículas dividiu-se em três etapas: Definição de material físsil e composição do alvo, cálculo da distribuição dos produtos de fissão e avaliação das reações de fusão nuclear. Para esse objetivo foram reconstruídos e desenvolvidos programas para avaliação das etapas. Uma estrutura geral dos programas computacionais é apresentada no Apêndice 4. Os dados para os tempos de meia vida foram dados por [IAEA, 2013] e as energias de ligação foram dados por [Audi e Wapstra, 1993].

#### 3.1 Determinação dos produtos de fissão e de sua energia cinética

Para esse trabalho foram gerados  $10^5$  produtos de fissão, seguindo a distribuição de probabilidades dada por [England e Rider, 1994] para fissão de  $^{235}\text{U}$  com nêutrons térmicos; cobrindo 197,4% dos produtos totais. Os dados de probabilidades foram normalizados e os produtos de fissão foram determinados via números aleatórios. A distribuição gerada é representada na Figura 3.1. Do total dos produtos gerados apenas 0,209% apresentaram tempo de meia-vida maior que um ano.

Na Figura 3.2 é possível comparar a distribuição dos produtos de fissão com a distribuição dos isotópos estáveis, a qual indica que os produtos gerados possuem excesso de nêutrons. As energias cinéticas mais prováveis dos produtos de fissão foram determinadas pela Equação 2.15. Um histograma com a distribuição da energia é dado na Figura 3.3.

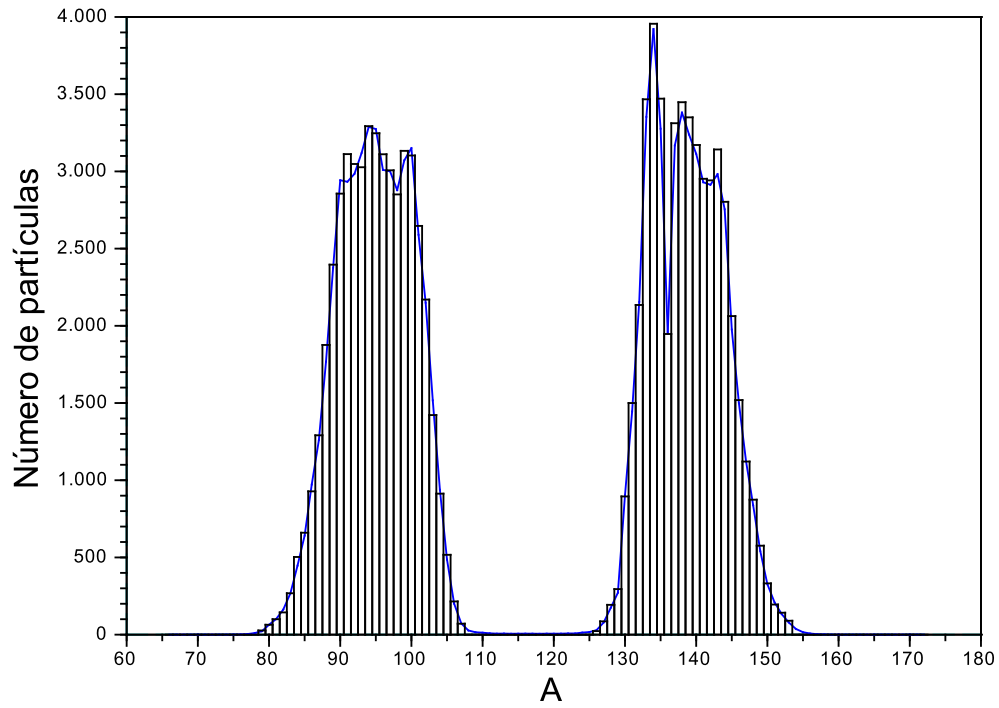


Figura 3.1: Distribuição dos produtos de fissão para  $10^5$  partículas.

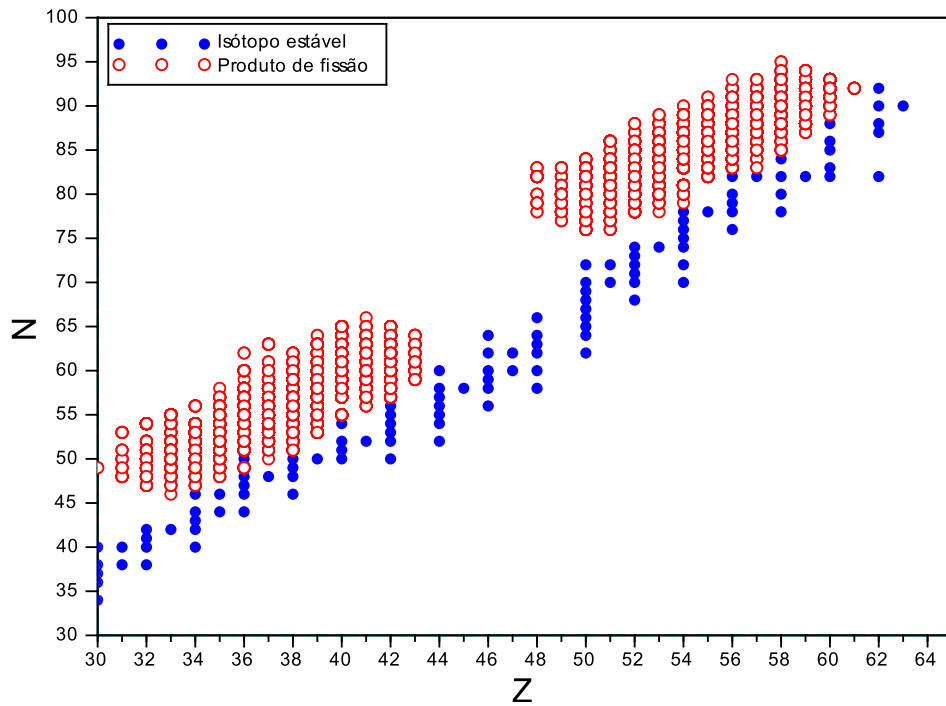


Figura 3.2: Distribuição dos produtos de fissão e dos isotópos estáveis.

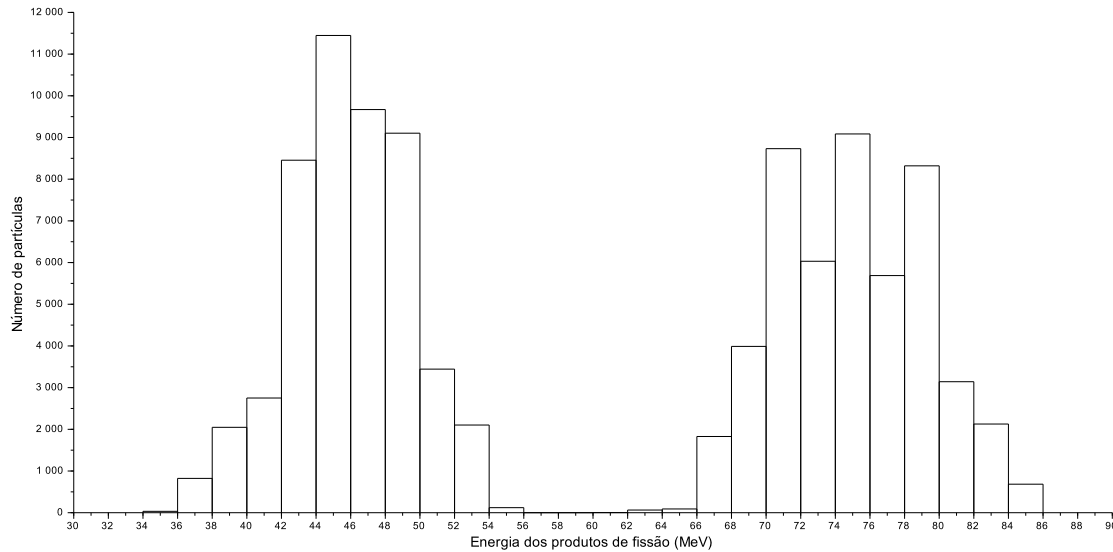


Figura 3.3: Distribuição da energia cinética dos produtos de fissão.

### 3.2 Escolha dos elementos alvos

A primeira estimativa para a escolha dos elementos foi baseada em sua relação  $Z/N$  optando-se por elementos estáveis com número de nêutrons semelhante ao número de prótons, ou para o caso do alvo  $^1H$ , a ausência de nêutrons. Essa escolha tem por objetivo facilitar, após a fusão, o deslocamento do produto final em direção à linha de estabilidade.

A escolha considerou, adicionalmente, produtos de baixo  $Z$  a fim de evitar que alguns produtos formados ultrapassassem a linha de estabilidade em direção à região de instabilidade oposta, formado por elementos com relação  $Z/N < 2/3$ . Elementos de baixo número atômico também possuem maior chance de vencer a repulsão elétrica devido às cargas nucleares. A Tabela 3.1 e a Figura 3.4, apresentam os valores clássicos para a barreira de Coulomb para duas partículas ( $^{136}I$ +alvos), esse valor é um limiar clássico que não corresponde à realidade, mas serve para mostrar que os produtos de fissão e os elementos alvo possuem energia mínima para vencer a repulsão clássica. Efeitos como transferência de núcleons, vibrações das superfícies nucleares e o efeito de blindagem que são considerações da mecânica quântica, reduzem a carga efetiva e, conseqüentemente, reduzem o valor da barreira de Coulomb em uma ordem de grandeza. Como se trata de um sistema dinâmico, essas flutuações no potencial podem apresentar valores baixos em pequenos intervalos de tempo, proporcionando o aumento das taxas de reações de fusão.

A Tabela 3.1 apresenta os valores do potencial de Coulomb clássico para reação do fragmento  $^{136}I$  com os quatro alvos analisados. O fragmento inicia a trajetória com  $72.7 MeV$  e tem alcance total de  $4,98\mu m$ . Para o caso extremo de repulsão ( $^9Be + ^{136}I$ ) verifica-se que durante 44,18% da trajetória o valor da energia cinética é suficiente para vencer a barreira de Coulomb ( $V_c$ ). O termo  $R_b$  representa o valor da trajetória percorrida acima do limiar clássico. Considerando-se um ordem de grandeza menor para o potencial, todo o trajeto é realizado com energia maior, e assim, nenhuma correção se faz necessária. Apesar de ser uma análise qualitativa a proposta é razoável, devido às alterações no potencial discutidas nessa seção. A Figura 3.4 apresenta a curva de freamento para o nuclídeo e os valores máximos de repulsão para cada combinação nuclídeo e alvo.

Tabela 3.1: Valores do potencial de Coulomb clássico e percurso do nuclídeo de  $^{136}I$ .

Alvo	$V_c (MeV)$	$R_b (\mu m)$	% $R$
$^1H$	9,94	4,00	80,32
$^2H$	9,54	4,05	81,33
$^6Li$	26,32	2,53	50,80
$^9Be$	33,81	2,20	44,18

Dados de seções de choque experimentais foram utilizadas como uma segunda ferramenta para a escolha dos alvos, obtidas a partir do *Joint Institute for Nuclear Research* através de seu endereço eletrônico. Embora a quantidade de dados experimentais fosse limitada os dados puderam ser utilizados como comparativo quando as energias envolvidas estavam na mesma faixa das energias cinéticas dos produtos de fissão. Além disso, outro fator importante na escolha está relacionado a energia de ligação nuclear, a distribuição dos produtos de fissão estava, em média, afastada  $125keV$  da energia de ligação da linha de estabilidade local. A energia de ligação possui um patamar em torno de  $8,7MeV$ , e quanto maior seu valor, maior a estabilidade nuclear. A energia de ligação máxima que poderia ser adicionada pelos alvos escolhidos é maior que o valor de  $125keV$ , a exceção do  $^1H$ , que possui valor zero, entretando possui a vantagem de aumentar a relação  $Z/N$  na reação de fusão, o que acaba contribuindo no aumento da energia de ligação final. A Figura 3.5 ilustra a distribuição das energias de ligação.



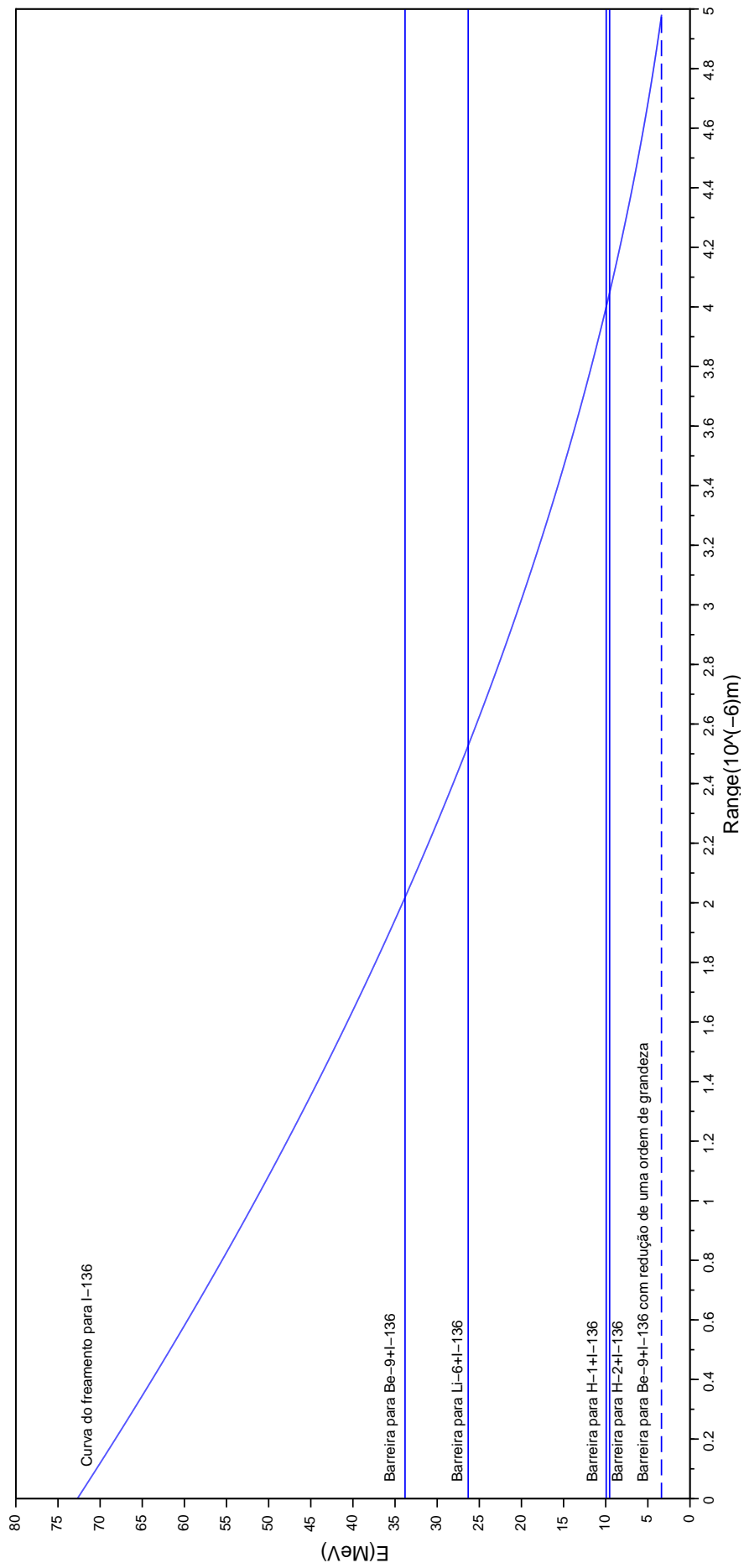


Figura 3.4: Comparação entre a curva de freamento para  $^{136}I$  em  $^{235}U$  e valores máximos para barreira de Coulomb.

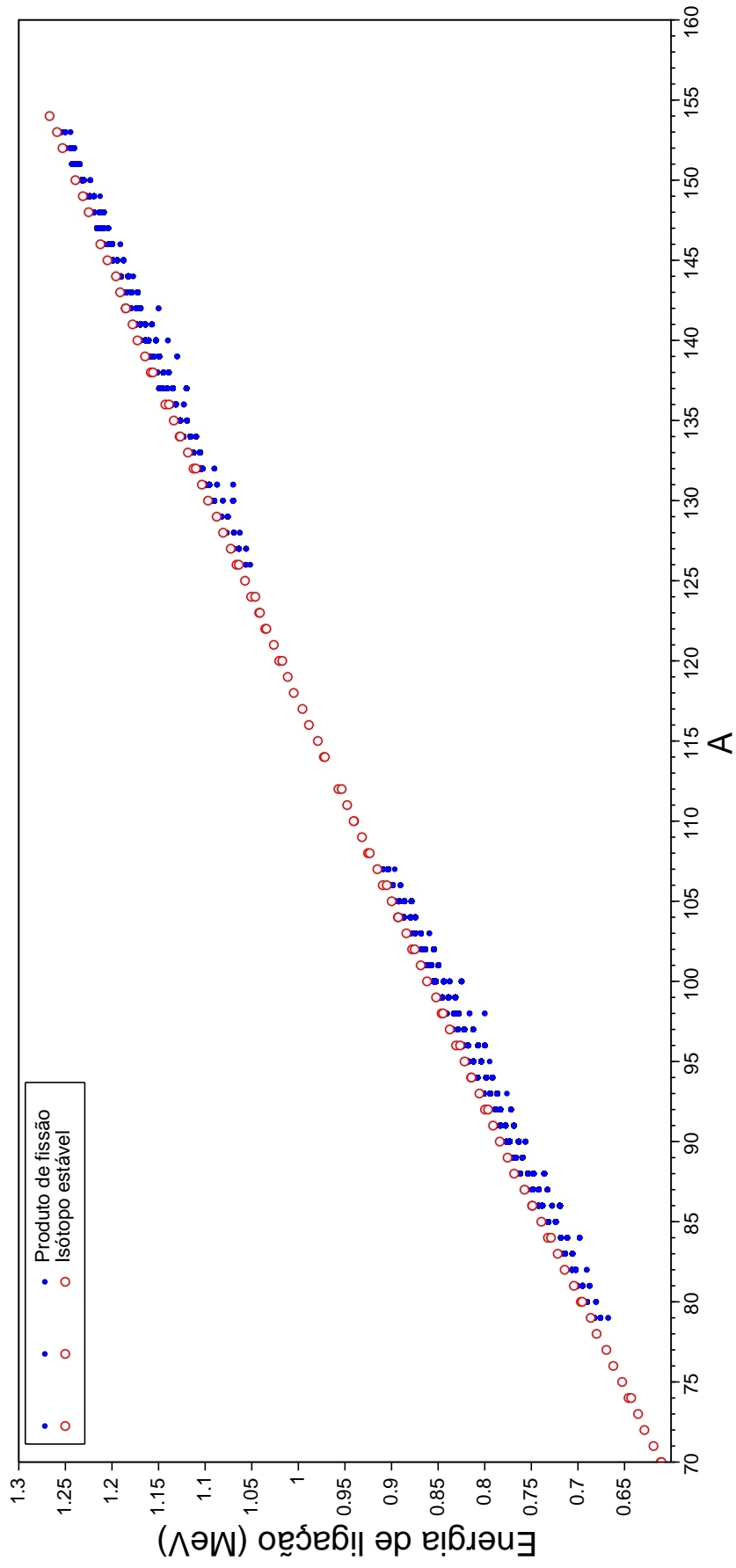


Figura 3.5: Distribuição dos produtos de fissão e dos isótopos estáveis referente à energia de ligação para o intervalo de A entre 70 e 160.

### 3.3 Cálculo do tempo de freamento dos produtos de fissão

O cálculo do alcance e do tempo de freamento dos produtos de fissão com energia cinética  $\langle E(Z_1, A_1) \rangle$  foram calculados pelas Equações 2.77 e 2.78, respectivamente. Alguns resultados são apresentados na Tabela 3.2. O tempo de freamento foi calculado para comparar com a escala de tempo do processo de fusão nuclear, as reações de fusão calculadas foram cerca de doze ordens de grandeza menor, assim o tempo de freamento não representa limitação ao processo. Não foi estimado o tempo de colisão de cada partícula a fim de determinar se isso representaria alguma limitação. Como a escala de tempo de decaimento inicia em torno de  $ns$  é razoável, analisar em uma primeira etapa, somente os produtos de fusão, sem considerar a evolução temporal desses novos núclídeos, no que se refere a distribuição dos tempos de meia vida.

A Tabela 3.3 compara os resultados calculados e experimentais com os resultados do *software* SRIM (*The Stopping and Range of Ions in Matter*). Essa comparação é realizada para poder estimar a confiabilidade dos dados calculados que não possuem referência na literatura, nesse caso, para as partículas de  $^{86}Se$ ,  $^{100}Zr$  e  $^{153}Pm$  utilizadas como exemplo.

Tabela 3.2: Alcance e tempo de freamento para alguns produtos de fissão.

Produto de fissão	$\langle E \rangle$ (MeV)	$R$ ( $\mu m$ )	$t_f$ (ns)
$^{86}Se$	39,54	5,73	0,92
$^{97}Sr$	45,64	5,83	1,08
$^{100}Zr$	49,19	5,85	1,15
$^{126}Sn$	67,15	6,42	1,67
$^{149}Ce$	82,99	7,21	2,28
$^{163}Pm$	90,12	7,47	2,51

Tabela 3.3: Comparação entre os valores calculados para o alcance ( $R_{cal}$ ), valores experimentais ( $R_{exp}$ ) e valores obtidos pelo *software* **SRIM** ( $R_{SRIM}$ ).

Íon	Alvo	E (MeV)	$R_{cal}(\mu m)$	$R_{exp}(\mu m)$	$R_{SRIM}(\mu m)$	Referência
$^{12}C$	$^{27}Al$	124,8	239,49	231,68	230,10	[Brustad, 1962]
$^{20}Ne$	$^{27}Al$	208,0	162,10	156,92	151,98	[Brustad, 1962]
$^{16}O$	$^{63}Cu$	75,2	21,02	21,08	23,96	[Oganesyan, 1959]
$^{12}C$	$^{12}C$	24,0	24,32	23,80	18,83	[Tai et al., 1997]
$^{86}Se$	$^{238}U$	39,54	4,25	-	3,53	-
$^{100}Zr$	$^{238}U$	49,19	4,34	-	4,02	-
$^{153}Pm$	$^{238}U$	90,12	5,53	-	5,47	-

### 3.4 Determinação do produto final da reação de fusão nuclear

A probabilidade de formação de uma determinada partícula por uma reação de fusão nuclear é dada na Equação 3.1

$$P_{(Z,A)} = \frac{N_i \tau_i \frac{4\pi}{h} \Delta E_j}{\sum_{k=1}^n \sum_{l=0}^m N_k \tau_k \frac{4\pi}{h} \Delta E_l} \quad (3.1)$$

onde o produto  $N_i \tau_i$  representa a probabilidade de um produto de fissão encontrar o elemento alvo  $i$  ( $H$ ,  $Li$  ou  $Be$ ). Também são computadas as probabilidades de encontro com os demais componentes (U-235 e U-238), entretanto, a fusão com esses elementos não é avaliada. O termo  $4\pi/h\Delta E_j$  representa a probabilidade de perda de nêutrons do produto de fusão nuclear. Ambos os termos são normalizados e a colisão e o produto da fusão nuclear foram avaliados através de Monte Carlo. Somente a perda de nêutrons é avaliada, pois os produtos de fissão apresentam excesso dessas partículas.

Na Equação 3.1 o termo  $\Delta E_j$  representa a variação da energia de ligação para a reação de fusão nuclear. A reação considera a perda de  $j$  nêutrons, com  $j$  variando de zero até um número de nêutrons perdidos em que a desigualdade  $E_{reagentes} \leq E_{produtos}$  seja válida. Os dados para energia de ligação são dados por [Audi e Wapstra, 1993]. A Tabela 3.4 exemplifica essas probabilidades para a reação de fusão nuclear de gêrmânio

com lítio.

Tabela 3.4: Probabilidade de perda de nêutrons para a reação  $^{80}\text{Ge} + ^6\text{Li}$  avaliados pela Equação 2.17.  $E_{reagentes} = 722112,567\text{keV}$ .

Reação	$E_{produto}(keV)$	t (ys)	Probabilidade
$^{80}\text{Ge} + ^6\text{Li} \rightarrow ^{86}\text{Br}$	742386,902	16,23	0,5629
$^{80}\text{Ge} + ^6\text{Li} \rightarrow ^{85}\text{Br} + 1n$	737287,894	21,69	0,4214
$^{80}\text{Ge} + ^6\text{Li} \rightarrow ^{84}\text{Br} + 2n$	728384,015	58,07	0,0157
$^{80}\text{Ge} + ^6\text{Li} \rightarrow ^{83}\text{Br} + 3n$	721545,735	-	0 ( $\Delta E < 0$ )

A probabilidade de colisão com os elementos alvos  $H$ ,  $Li$  ou  $Be$ , considerando uma composição de 30% desses elementos, é 0,277, 0,377 e 0,523, respectivamente.

### 3.5 Resultados

Nesta seção são apresentados os resultados para os alvos simulados. Para cada alvo foram executadas três simulações a fim de analisar possíveis flutuações entre elas. Os dados analisados para cada alvo foram:

- A energia média liberada por reação de fusão,  $\overline{\Delta B}$ , em  $MeV$ , relacionada à variação de energia de ligação;
- O número médio de nêutrons liberados em cada reação de fusão,  $\mathbf{N}$ ;
- Do total de núclídeos que reagiram, a proporção dos que aumentaram o tempo de meia vida,  $P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$  e
- O estado final do conjunto das  $10^5$  partículas com tempo de meia vida maior que um ano ( $P_t t_{1/2} > 1$ ), sendo que o valor inicial foi de 0,209%.

#### 3.5.1 Simulação para $^1H$

A Tabela 3.5 mostra os resultados para a simulação com alvo composto de  $^1H$ . Utilizando  $^1H$  a energia média e o número médio de nêutrons liberados por fusão é de  $9,62MeV$  e  $0,297$ , respectivamente. O tempo de meia vida, maior que um ano, do conjunto total de partículas aumentou por um fator de  $7,58$ , passando de  $0,209\%$  para  $1,584\%$ .

A Figura 3.6 apresenta a alteração da meia-vida dos produtos de fissão que reagiram, através de fusão nuclear, com o alvo de  $^1H$  na primeira simulação. Os pontos abaixo da reta  $\log(t_{1/2}^{fissão}) = \log(t_{1/2}^{fusão})$  representam os produtos que aumentaram o tempo de meia-vida. A Figura 3.7 é um detalhe ampliado da Figura 3.6.

Tabela 3.5: Resultado para alvo composto por  $^1H$  (30%).

Simulação	$n^\circ$ fusões	$\overline{\Delta B}(MeV)$	$\mathbf{N}$	$\% P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$	$\% P_t t_{1/2} > 1\text{ano}$
1	27868	9,47	0,294	81,91	1,572
2	27818	9,67	0,299	81,85	1,622
3	27599	9,71	0,297	81,95	1,562

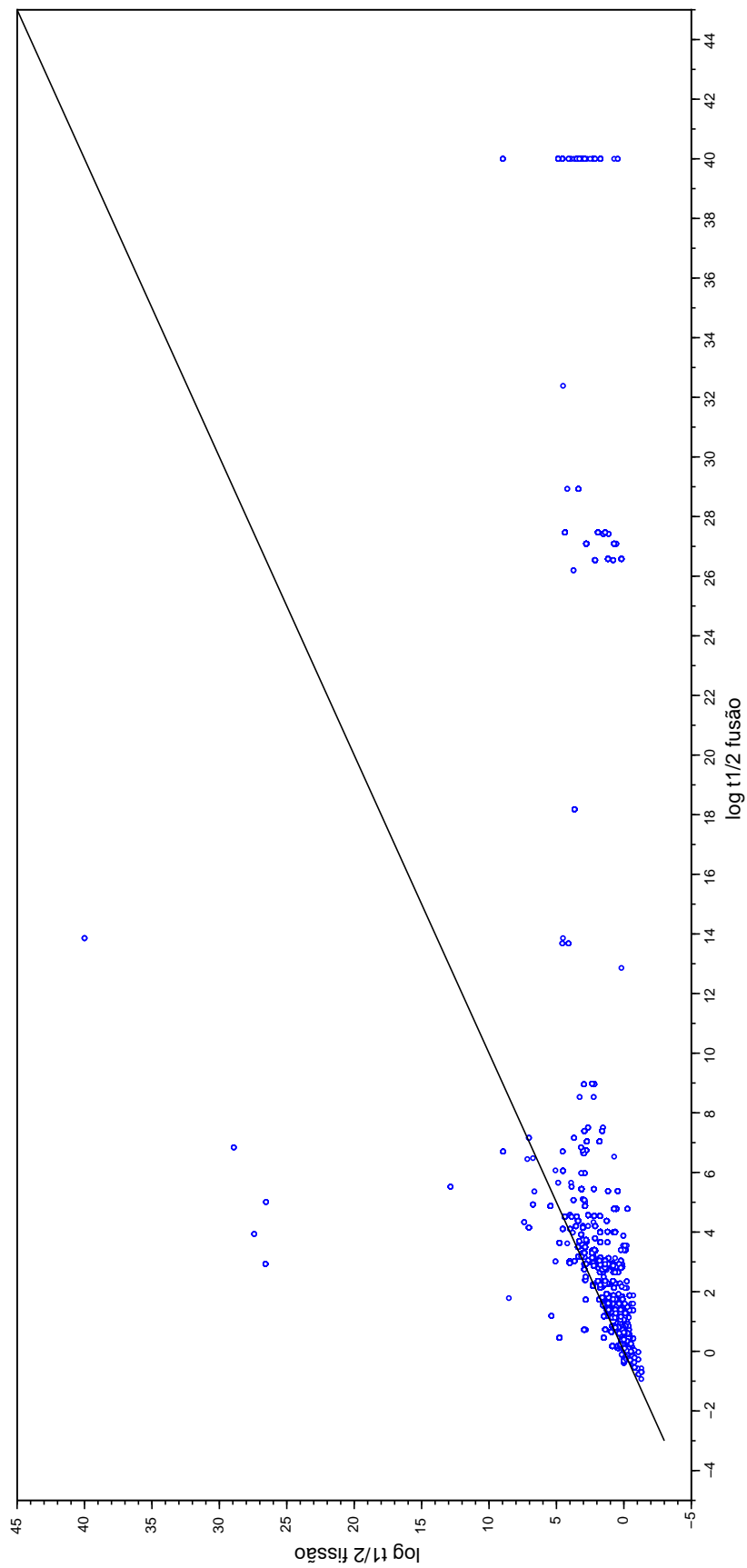


Figura 3.6: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  $^1H$  (30%).

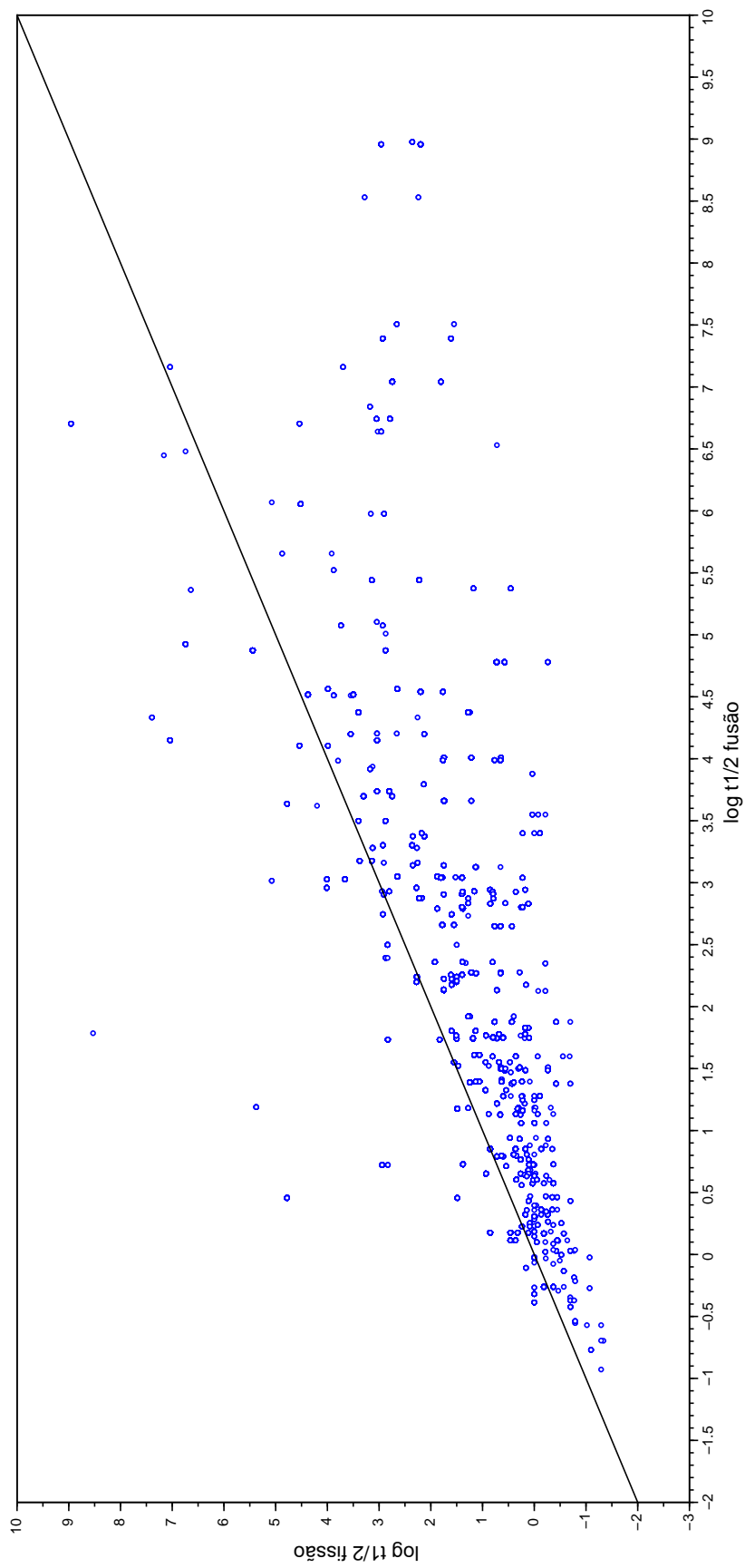


Figura 3.7: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  $^1H$  (30%).



### 3.5.2 Simulação para $^2H$

A Tabela 3.6 mostra os resultados para a simulação com alvo composto de  $^2H$ . Utilizando  $^2H$  a energia média e o número médio de nêutrons liberados por fusão é de  $10,90MeV$  e  $0,145$ , respectivamente. O tempo de meia vida, maior que um ano, do conjunto de partículas aumentou por um fator de  $3,80$ .

Tabela 3.6: Resultado para alvo composto por  $^2H$  (30%).

Simulação	$n^\circ$ fusões	$\overline{\Delta B}(MeV)$	<b>N</b>	% $P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$	% $P_t t_{1/2} > 1ano$
1	27869	11,02	0,144	64,51	0,981
2	27818	10,57	0,149	64,71	1,071
3	27598	11,10	0,143	64,69	0,961

A Figura 3.8 apresenta a alteração da meia-vida dos produtos de fissão que reagiram, através de fusão nuclear com o alvo de  $^2H$  na primeira simulação. Os pontos abaixo da reta  $\log(t_{1/2}^{fissão}) = \log(t_{1/2}^{fusão})$  representam os produtos que aumentaram o tempo de meia-vida, como evidenciado na Tabela 3.6 o valor médio dessa grandeza é  $64,64\%$ . A Figura 3.9 é um detalhe ampliado da Figura 3.8 para um tempo de meia vida na faixa de  $10^{-2}$  até  $10^{10}$  segundos.

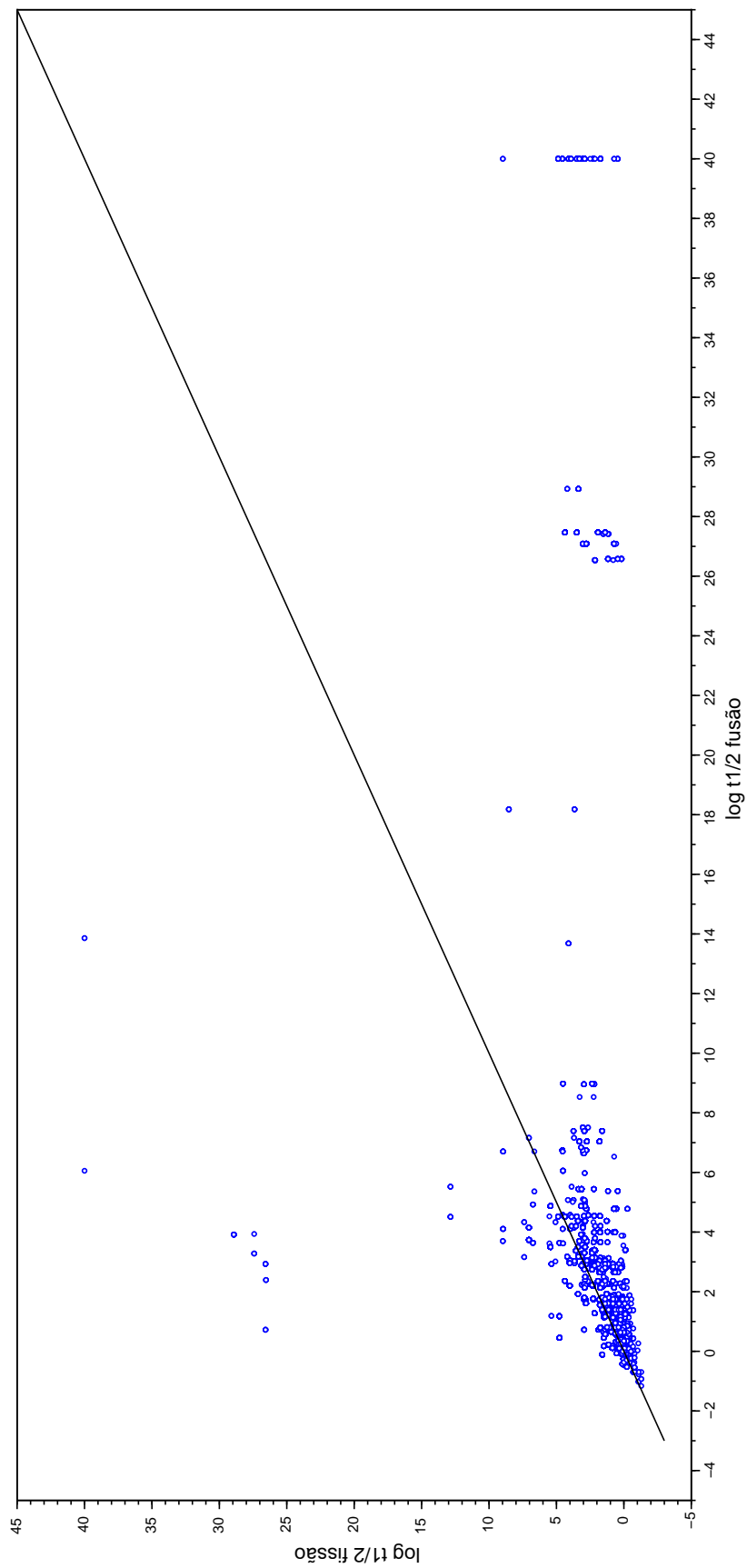


Figura 3.8: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  $^2H$  (30%).

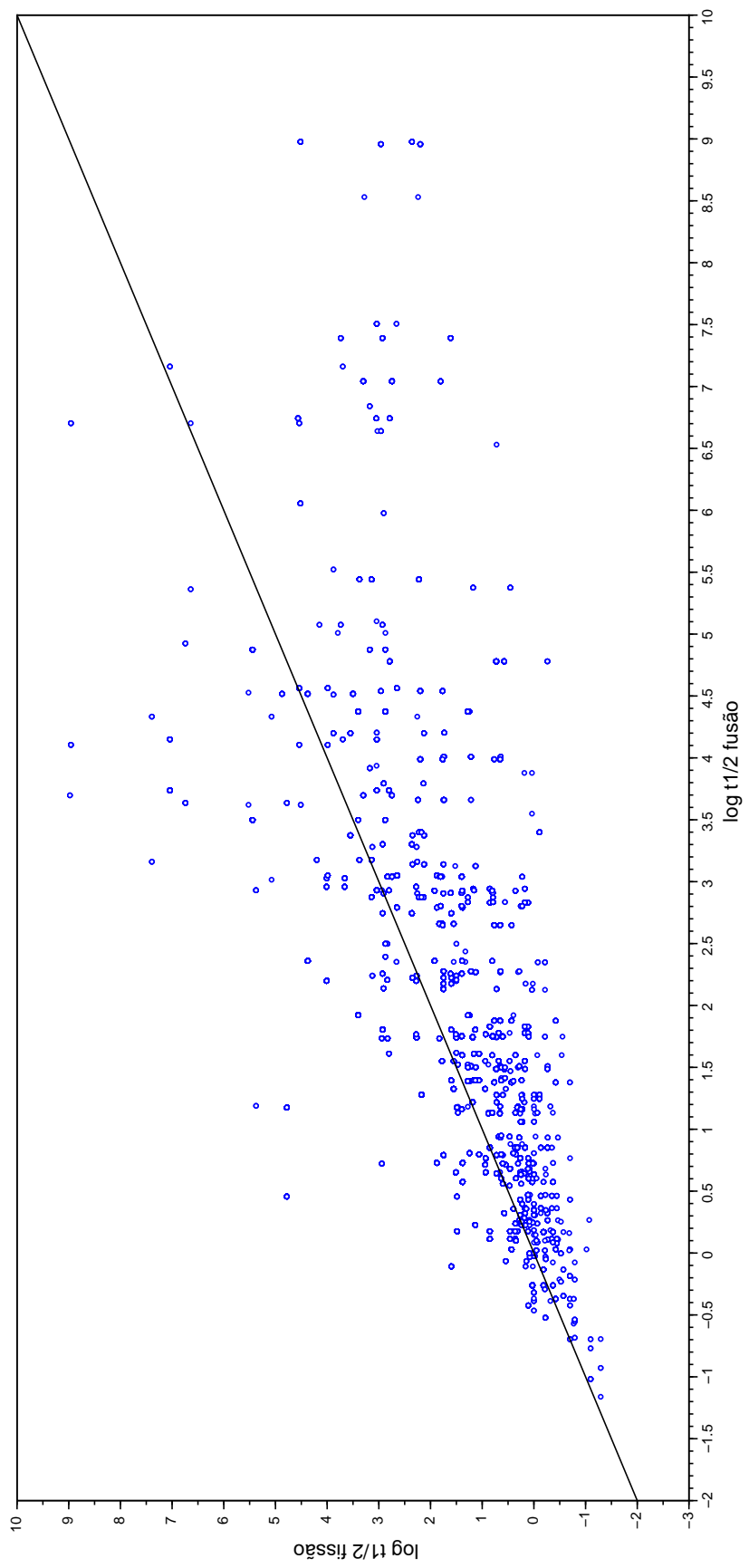


Figura 3.9: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  $^2H$  (30%).

### 3.5.3 Simulação para ${}^6\text{Li}$

A Tabela 3.7 mostra os resultados para a simulação com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$ . Utilizando esse alvo, a energia média e o número médio de nêutrons liberados por fusão é de  $12,95\text{MeV}$  e  $0,549$ , respectivamente. O tempo de meia vida, maior que um ano, do conjunto de partículas aumentou por um fator de  $9,41$ .

Tabela 3.7: Resultado para alvo composto por  ${}^6\text{Li}$  (30%).

Simulação	$n^\circ$ fusões	$\overline{\Delta B}(\text{MeV})$	<b>N</b>	$\% P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$	$\% P_t t_{1/2} > 1\text{ano}$
1	33933	13,03	0,547	69,08	2,002
2	33566	13,01	0,555	68,08	1,964
3	33850	12,80	0,544	68,48	1,936

A Figura 3.10 apresenta a alteração da meia-vida dos produtos de fissão que reagiram, através de fusão nuclear, com o alvo de  ${}^6\text{Li}$  na primeira simulação. Os pontos abaixo da reta  $\log(t_{1/2}^{\text{fissão}}) = \log(t_{1/2}^{\text{fusão}})$  representam os produtos que aumentaram o tempo de meia-vida. A Figura 3.11 é um detalhe ampliado da Figura 3.10.

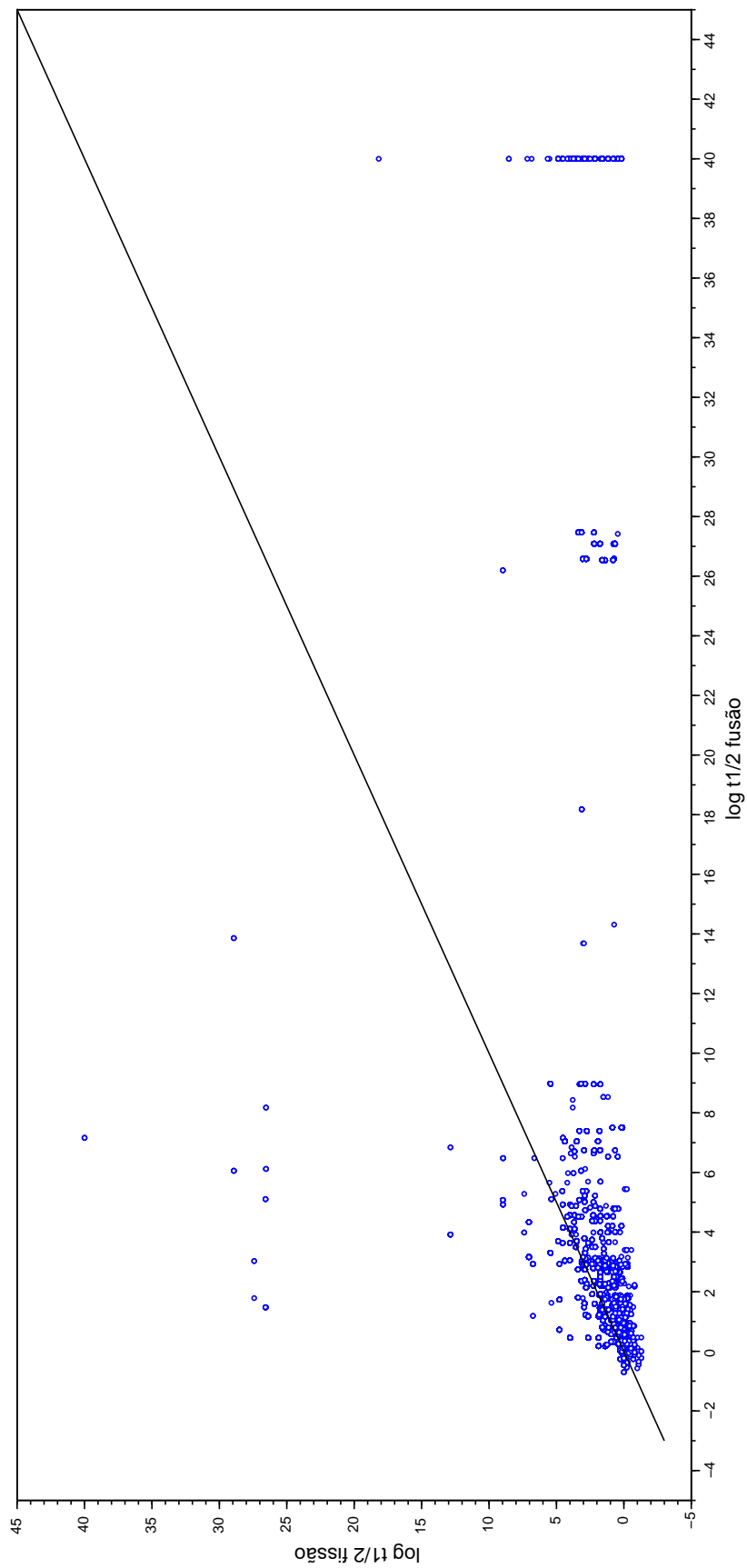


Figura 3.10: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

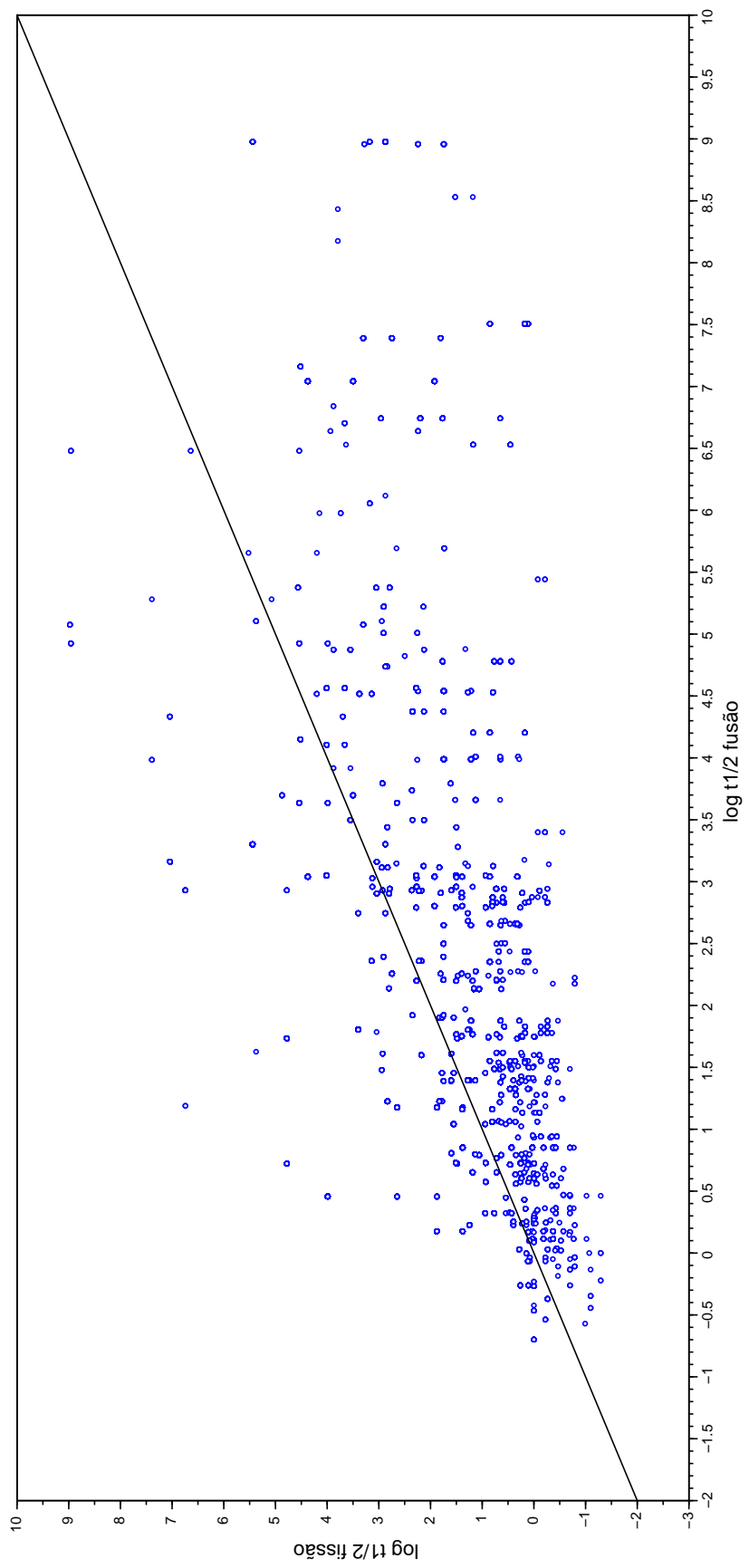


Figura 3.11: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

### 3.5.4 Simulação para ${}^9\text{Be}$

A Tabela 3.8 mostra os resultados para a simulação com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$ . Utilizando esse alvo, a energia média e o número médio de nêutrons liberados por fusão é de 10,10MeV e 0,317, respectivamente. O tempo de meia vida, maior que um ano, do conjunto de partículas aumentou por um fator de 9,70.

Tabela 3.8: Resultado para alvo composto por  ${}^9\text{Be}$  (30%).

Simulação	$n^\circ$ fusões	$\overline{\Delta B}(\text{MeV})$	<b>N</b>	% $P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$	% $P_t t_{1/2} > 1\text{ano}$
1	52159	10,06	0,317	60,17	1,990
2	52169	10,07	0,317	60,19	2,049
3	52325	10,23	0,318	60,12	2,041

A Figura 3.12 apresenta a alteração da meia-vida dos produtos de fissão que reagiram, através de fusão nuclear, com o alvo de  ${}^9\text{Be}$  na primeira simulação. Os pontos abaixo da reta  $\log(t_{1/2}^{\text{fusão}}) = \log(t_{1/2}^{\text{fusão}})$  representam os produtos que aumentaram o tempo de meia-vida. A Figura 3.13 é um detalhe ampliado da Figura 3.12.

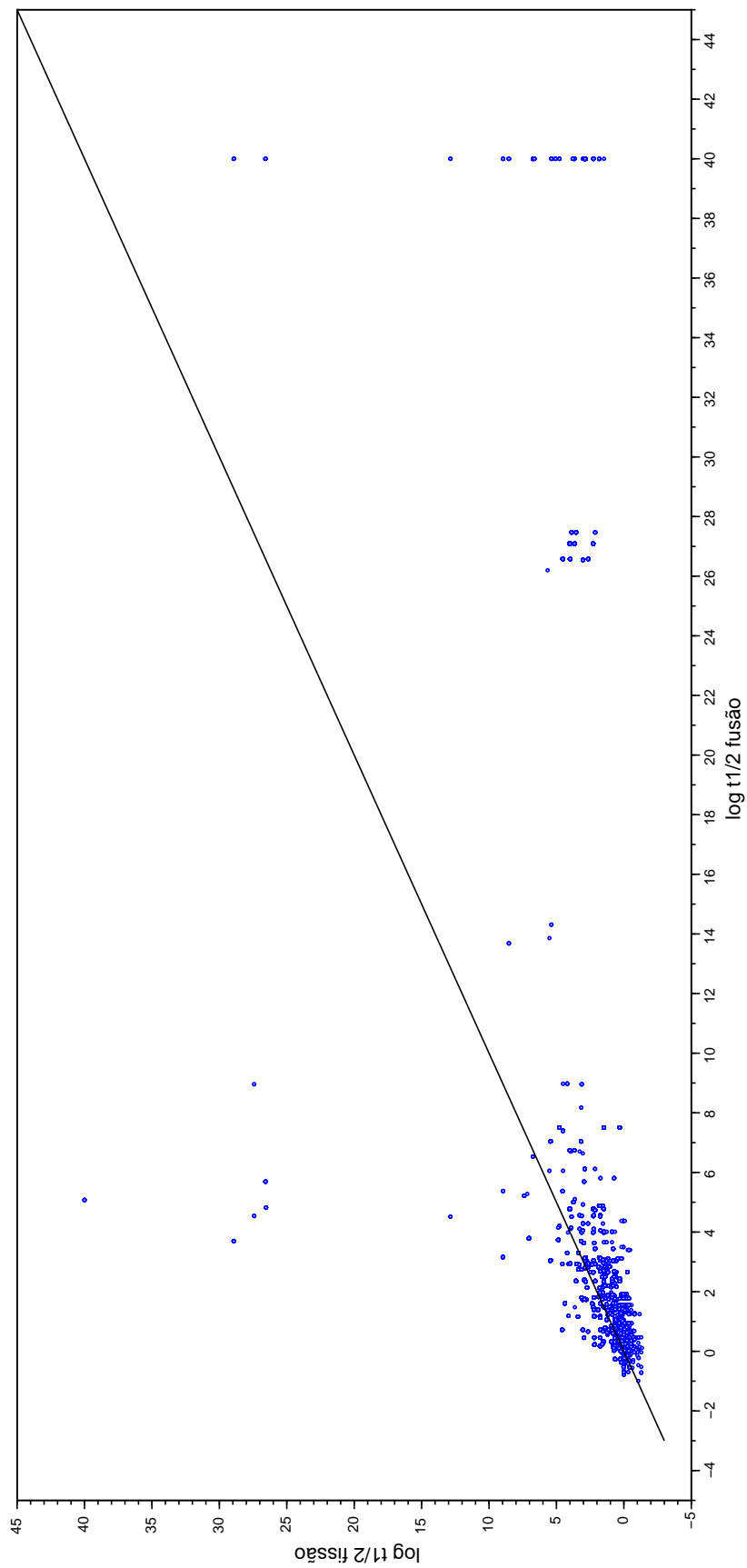


Figura 3.12: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).



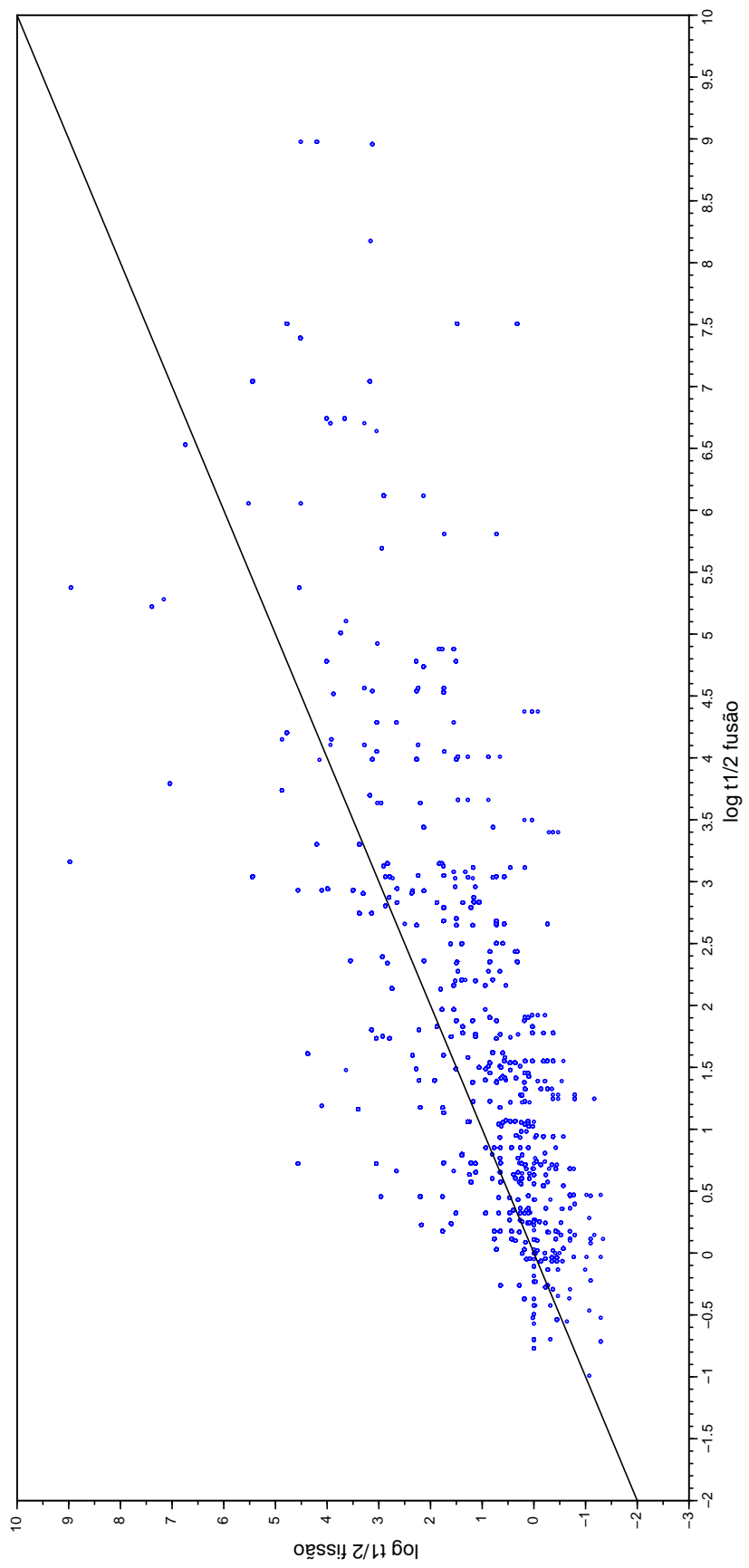


Figura 3.13: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 1 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).

### 3.5.5 Análise

A Tabela 3.9 mostra uma comparação entre os quatro alvos simulados. Para definir o melhor alvo em relação ao aumento do tempo de meia vida os resultados foram normalizados pelo número de colisões do alvo  $^1H$ , resultados entre paranteses. Para cada alvo a contribuição foi separada em duas faixas de tempo de meia vida: entre um e cinco anos e acima de cinco anos.

O alvo de  $^9Be$  apresentou os melhores resultados, entretando foi necessário um grande número de fusões, quando normalizados em função do número total de fusões o alvo de hidrogênio e de lítio apresentaram os melhores resultados. Esse resultado está de acordo com o esperado, já que estes alvos, pela quantidade de núcleons, em especial a quantidade de nêutrons, contribui no sentido de aumentar a relação  $Z/N$  em um processo de fusão onde adicionalmente há possibilidade de perda de nêutrons. Para os alvos de  $^1H$  e  $^6Li$  o fator de aumento (normalizado) no percentual no  $t_{1/2} \geq 5$  anos foi de 10,46 e 9,31, respectivamente.

Tabela 3.9: Resultados obtidos para os tempos de meia-vida em função dos diferentes alvos e resultados normalizados pelo alvo de  $H$ .

$P_t$	%	$^1H$	$^2H$	$^6Li$	$^9Be$
$t_{1/2} \geq 1$ ano	0,209	1,585(1,585)	1,005(1,005)	1,967(1,617)	2,027(1,087)
$1 \text{ ano} < t_{1/2} < 5$ anos	0,084	0,277(0,277)	0,192(0,192)	0,551(0,453)	0,629(0,344)
$t_{1/2} \geq 5$ anos	0,125	1,308(1,308)	0,813(0,813)	1,416(1,164)	1,398(0,743)
$n^\circ$ médio de fusões	-	27762	27762	33783	52218

A energia liberada,  $\overline{\Delta B}$ , para todos os alvos está entre 9,6 e 12,9 MeV; esses valores promovem um incremento de no máximo 8% na energia total liberada em um processo de fissão nuclear. Essa energia, liberada na fusão, pode compensar uma possível energia oriunda do decaimento dos produtos de fissão que reagiram, e em primeira análise não há influência significativa desse processo no ganho energético. A análise das distribuições de meia vida, porém apresenta um efeito significativo.

A Tabela 3.10 mostra um comparativo entre o valor médio ( $\bar{x}$ ) e o desvio padrão ( $\sigma$ ), inicial e final sobre as meias vidas logarítmicas para partículas que reagiram e para o conjunto de partículas. Os dados da média aritmética comprovam que os alvos de  $^1H$

e  ${}^6\text{Li}$  mostraram-se mais eficientes aumentando em quase duas ordens de grandeza esse valor para as partículas que reagiram contra uma ordem de grandeza dos outros dois alvos.

Tabela 3.10: Comparação entre as distribuições dos estados inicial e final das partículas que reagiram e do total de partículas.

		$P_r$		$P_t$	
Alvo	Parâmetro	Inicial	Final	Inicial	Final
${}^1\text{H}$	$\bar{x}$	1,594	3,564	1,594	2,143
	$\sigma$	1,557	5,920	1,557	3,506
${}^2\text{H}$	$\bar{x}$	1,585	2,600	1,594	1,875
	$\sigma$	1,516	4,601	1,557	2,808
${}^6\text{Li}$	$\bar{x}$	1,592	3,273	1,594	2,164
	$\sigma$	1,535	5,747	1,557	3,669
${}^9\text{Be}$	$\bar{x}$	1,592	2,473	1,594	2,053
	$\sigma$	1,564	4,595	1,557	3,515

Outras simulações foram realizadas, mas seus resultados não contribuem de forma significativa para os parâmetros analisados nesse trabalho. Essas simulações envolveram a mistura dos elementos alvo e seus resultados são apresentados no Apêndice B. Cada simulação gerou um conjunto de dados que podem ser acessados a fim de testar outras variáveis futuramente.

## 4 CONCLUSÃO

A dissertação presente apresentou um estudo inicial sobre a possibilidade de explorar um acoplamento entre fissão e fusão nuclear. Esse acoplamento poderia substituir a fonte de energia principal, utilizada em reatores nucleares, a fissão. Na concepção desse trabalho, a reação de fissão pode dar início a uma reação de fusão, quando núcleos leves são misturados junto ao material fissil. A discussão apresentada mostrou que uma consequência significativa se manifesta na alteração da distribuição das meia vidas dos produtos para maiores valores, enquanto o acréscimo de energia liberada pela fusão deve compensar a energia liberada por decaimentos sucessivos dos produtos de fissão que reagiram, assim o balanço de energia permanece semelhante ao caso em que somente a fissão existe.

Com base nos resultados obtidos, ainda que preliminares, a proposta de um sistema híbrido fissão-fusão indica que os produtos de fissão podem ter a distribuição dos tempos de meia vida alterados pela reação com alvos específicos, e essa mudança é na direção de maiores tempos de meia vida. Os alvos de  $^1H$  e  $^6Li$ , quando considerada todas as partículas, obtiveram os melhores resultados. Do total de partículas iniciais, apenas 0,209% apresentavam tempos de meia vida maiores que um ano, após a reação de fusão esse valor passou para 1,585% e 1,617% para  $^1H$  e  $^6Li$ , respectivamente, considerando a normalização pelo alvo de  $^1H$ . Os alvos de  $^2H$  e  $^9Be$ , obtiveram valores de 1,005% e 1,087%, respectivamente. O alvo de  $^1H$  foi o mais eficiente em deslocar o tempo de meia vida para valores maiores, aumentando essa grandeza em 81,9% das reações, enquanto o alvo de  $^6Li$  mostrou-se mais eficiente em aumentar o tempo de meia vida total do conjunto de partículas. A contribuição energética é pequena independente do alvo utilizado, representando entre 5,8% e 7,8% da energia liberada na fissão nuclear, fato esperado devido ao baixo número atômico dos alvos. O valor de energia liberada é da mesma ordem que a liberado em decaimentos  $\beta^-$  e  $\gamma$ .

Evidentemente, as alterações na composição dos materiais no núcleo de um reator nuclear têm diversas consequências que não foram mencionados nessa discussão, como por exemplo a questão da criticalidade. Fatores que vão desde a relação volume de combustível

e moderador até o arranjo geométrico devem ser analisadas para verificar a sua influência em uma nova concepção de reatores nucleares. A cinética, também, terá o comportamento temporal significativamente alterado, devido à redução da quantidade de nêutrons atrasados pela redução de precursores, porém a fusão nuclear acrescentaria nêutrons ao processo. O número médio de nêutrons que podem ser fornecidos é fortemente relacionado ao tipo de alvo em questão, para o caso de mil reações de fusão seriam acrescentados, em média, para os alvos de  $^1H$ ,  $^2H$ ,  $^6Li$  e  $^9Be$ , respectivamente, 297, 145, 549 e 317 nêutrons.

As propriedades no transporte de nêutrons, também, sofreriam modificações devido à alteração nas seções de choque das demais reações. Estes aspectos poderiam ser analisados em futuros estudos, adaptando a cinética pontual a um dos casos apresentados como primeiro estudo na questão da criticalidade. Efeitos de geometrias diferentes poderiam ser investigados pela equação da difusão em meios heterogêneos com os seus parâmetros típicos.

A alteração na distribuição dos tempos de meia vida tem impacto na segurança, na dinâmica do reator e nas atividades que envolvam a manipulação do combustível nuclear usado. Os produtos de fissão fornecem cerca de 8% da energia térmica de um reator nuclear, durante a operação essa energia é utilizada para geração de energia elétrica, mas em um condição de desligamento, essa parcela de energia continua a ser gerada é necessário manter os sistemas de refrigeração ativos. O aumento do tempo de meia vida desses produtos não dispensa a utilização do sistema de refrigeração mas a carga térmica a ser retirada é menor devido a redução da atividade dos núclídeos. Esse fator também tem relevância na manipulação do combustível nuclear usado no que tange a segurança e saúde dos operadores, pois em todo o procedimento que envolve o combustível usado há o risco associado de exposição à radiação. São esperadas mudanças também no volume final do rejeito de alto nível, quando reprocessado, e na radiotoxicidade associada ao rejeito disposto em locais definitivos. Todo o esforço no sentido de redução do passivo ambiental é válida uma vez que a questão de qual é a melhor maneira de lidar com o rejeito permanece aberta.

Para inclusão de materiais adicionais é necessário um estudo de compatibilidade entre os elementos de fissão e fusão. Isso engloba pesquisas na área de ciência dos materiais, teóricas e experimentais, a fim de viabilizar a produção de um combustível nuclear modificado e otimizar os parâmetros de interesse.

Como sugestão para trabalhos futuros, diretamente relacionados com o tema desta dissertação, está o cálculo detalhado das seções de choque de fusão, da dinâmica das reações de fusão nuclear e os aspectos já mencionados referentes á cinética e transporte de nêutrons no contexto da fissão-fusão acoplada. Este trabalho é um primeiro passo na retomada dos conceitos de reatores com energia produzida pela combinação fissão-fusão.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ahlen, S., 1980. "Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionizing particles", **Reviews of Modern Physics**, vol. 52, pp. 121–173.

Audi, G. and Wapstra, A. H., 1993. "The 1993 atomic mass evaluation: (I) Atomic mass table", **Nuclear Physics A**, vol. 565(1), pp. 1–65.

Beckerman, M., 1988. "Sub-barrier fusion of two nuclei", **Reports on Progress in Physics**, vol. 51, pp. 1047–1103.

Bethe, H. A., 1979. "The Fusion Hybrid", **Physics Today**, vol. 5, pp. 44–51.

Bethe, H. A. and Ashkin, J., 1953. "**Experimental Nuclear Physics**", volume 1. Wiley.

Bohr, N. and Selsk, K. D. V., 1948. **Mat.-Phys. Medd.**, vol. 18(8).

Brustad, T., 1962. **Adv. Biol. Med. Phys.**, vol. 8, pp. 161.

Bunn, M., Fetter, S., Holdren, J. P., and Zwaan, B., 2003, THE ECONOMICS OF REPROCESSING VS. DIRECT DISPOSAL OF SPENT NUCLEAR FUEL. Technical report, BELFER CENTER FOR SCIENCE AND INTERNATIONAL AFFAIRS JOHN F. KENNEDY SCHOOL OF GOVERNMENT.

England, T. R. and Rider, B. F., 1994, Evaluation and Compilation of Fission Product Yields. Technical report, Los Alamos National Laboratory.

Hagino, H., Rowley, N., and Kruppa, A. T., 1999a. "A program for coupled-channel calculations with all order couplings for heavy-ion fusion reactions.", **Computer Physics Communications**, vol. 123, pp. 143–152.

Hagino, K., Rowley, N., and Kruppa, A. T., 1999b. "A program for coupled-channel calculations with all order couplings for heavy-ion fusion reactions", **Computer Physics Communications**, vol. 123, pp. 143.

Hogselius, P., 2009. "Spent nuclear fuel policies in historical perspective: An international comparison.", **Energy Policy**, vol. 37, pp. 254–263.

IAEA, editor, 2009. "**Nuclear Fuel Cycle Information Systems: A Directory of Nuclear Fuel Cycle Facilities**". IAEA, Austria.

IAEA, 2013, "<http://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML>".

Mukherji, S., 1975. "Calculation of the mean ionization potentials of the elements for stopping-power computations.", **Physical Review B**, vol. 12, pp. 3530–3532.

Mukherji, S. and Srivasta, B. K., 1974. "Universal range-velocity and stopping-power equations for fission fragments and partially stripped heavy ions in solid media", **Physical Review B**, vol. 9, pp. 3708–3719.

Nastasi, M., Mayer, J. M., and Hirvonen, J. K., 1996. "**Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications**". Cambridge University Press.

Navin, A. Tripathi, V., Blumenfeld, Y., Nanal, V., and Simenel, C., 2004. "Direct and compound reactions induced by unstable helium beams near the Coulomb barrier", **Physical Review C**, vol. 70.

Niello, J. F., Dasso, C. H., and S., L., 1989. "CCDEF - A simplified coupled-channel code for fusion cross sections", **Computer Physics Communications**, vol. 54, pp. 409–412.

Northcliffe, L. C., 1960. "Energy Loss and Effective Charge of Heavy Ions in Aluminum", **Physical Review**, vol. 120, pp. 1744–1757.

Oganesyan, Y. T., 1959. **Zh. Eksp. Teor. Fiz.**, vol. 36.

Orszag, P. R., 2007, Costs of Reprocessing Versus Directly Disposing of Spent Nuclear Fuel. Technical report, Committee on Energy and Natural Resources United States Senate.

Schwabl, F., 2004. "**Quantum Mechanics**".

Sinha, M., Majumdar, H., Basu, P., Roy, S., Biswas, M., and Pradhan, M. K., 2010. "Sub- and above-barrier fusion of loosely bound  ${}^6\text{Li}$  with  ${}^{28}\text{Si}$ .", **The European Physical Journal A**, vol. 44, pp. 403–410.



Srivasta, B. K. and Mukherji, S., 1976. "Range and stopping-power equations for heavy ions", **Physical Review A**, vol. 14, pp. 718–725.

Sternheimer, R. M., 1965a. "Density Effect for the Ionization Loss of Charged Particles\*", **Physical Review**, vol. 145(1), pp. 247–250.

Sternheimer, R. M., 1965b. "Range Straggling of Charged Particles in Be, C, Al, Cu, Pb, and Air", **Physical Review**, vol. 117(2), pp. 485–488.

Sternheimer, R. M., Seltzer, S. M., and Berger, M. J., 1982. "Density effect for the ionization loss of charged particles in various substances", **Physical Review B**, vol. 26, pp. 6067–6076.

Tai, H., Bichsel, H., and Badavi, F. F., 1997, Comparison of Stopping Power and Range Databases for Radiation Transport Study. Technical report, NASA.

Vinodkumar, A. M., Lovel, W., Sprunger, P. H., Prsbey, L., Trinczek, M., Dombisky, M., Machule, P., Kolata, J. J., and Roberts, A., 2009. "Fusion of  ${}^9\text{Li}$  with  ${}^{208}\text{Pb}$ ", **Physical Review C**, vol. 80.

Viola, V. E., Kwiatkowski, K., and Walker, M., 1985. "Systematics of fission fragment total kinetics energy release", **Physical Review C**, vol. 31, pp. 1550–1552.

Zagrebaev, V. I. and Samarin, V. V., 2004. "Near-Barrier Fusion of He Heavy Nuclei: Coupling of Channels", **Physics of Atomic Nuclei**, vol. 67, pp. 1462–1477.

Ziegler, J. F., Biersack, J. P., and Littmark, U., 1985. **"The Stopping and Range of ions in solids"**. Pergamon Press, Inc., New York.

## Apêndice A - Resultados para as segundas e terceiras simulações

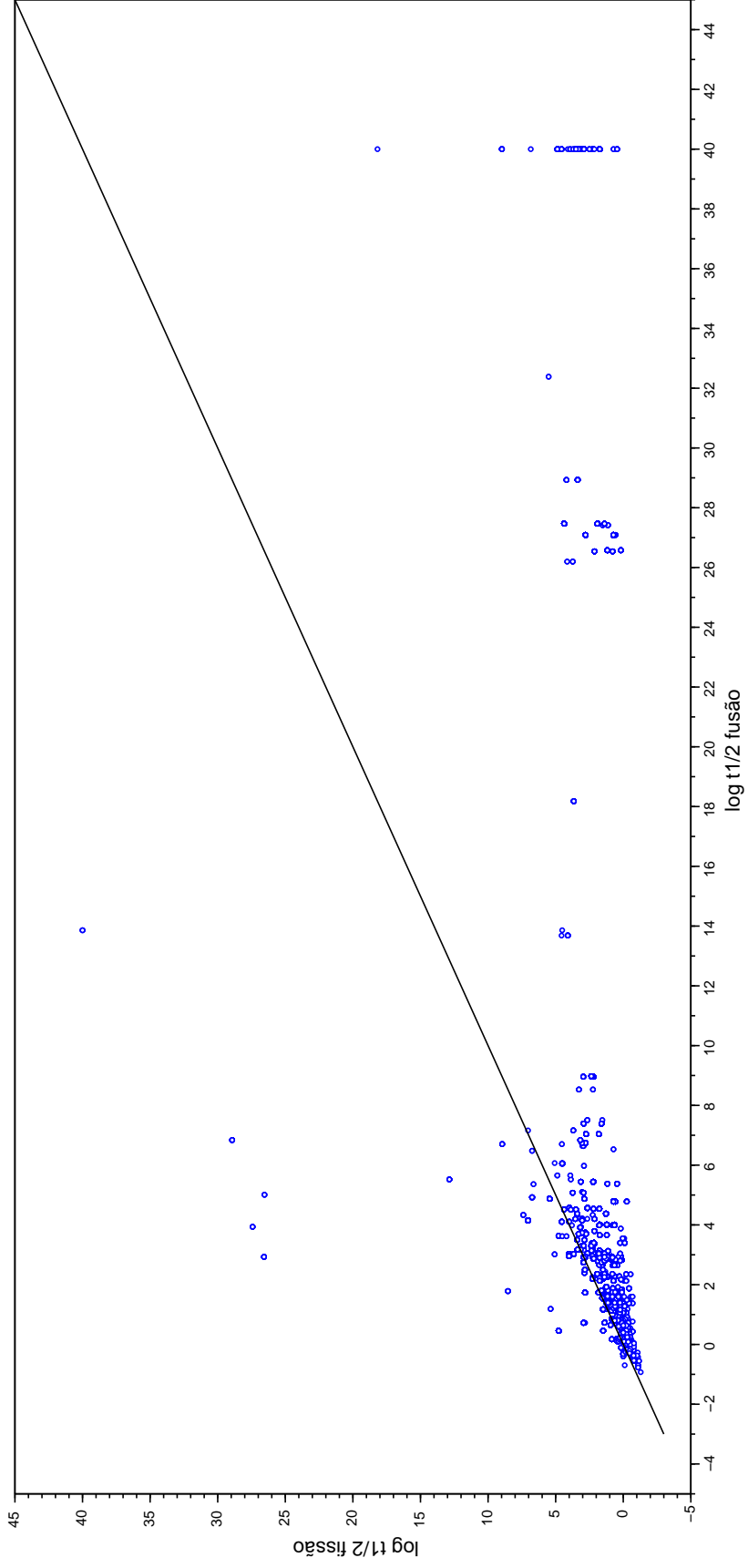


Figura A.1: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  $^1H$  (30%).

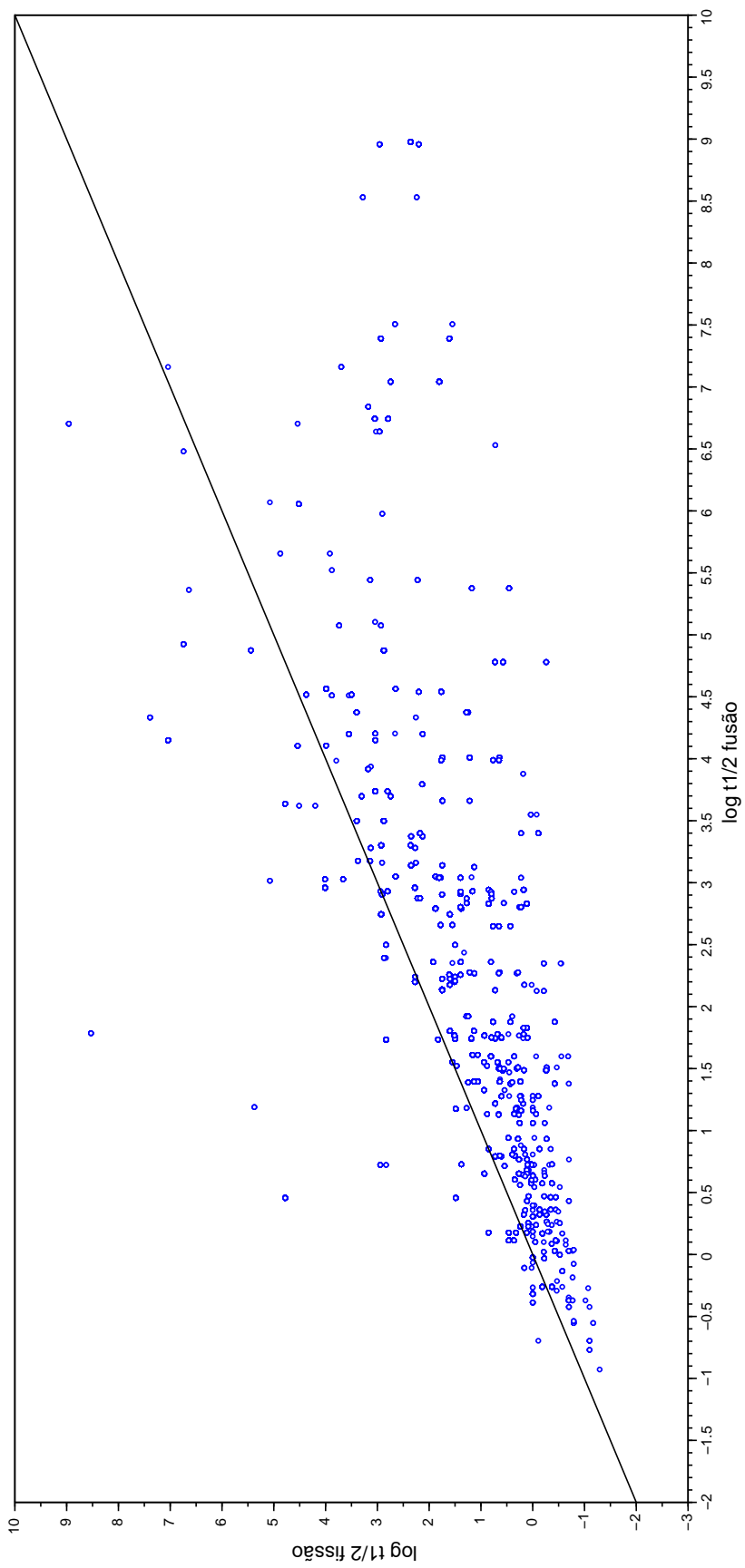


Figura A.2: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  $^1H$  (30%).

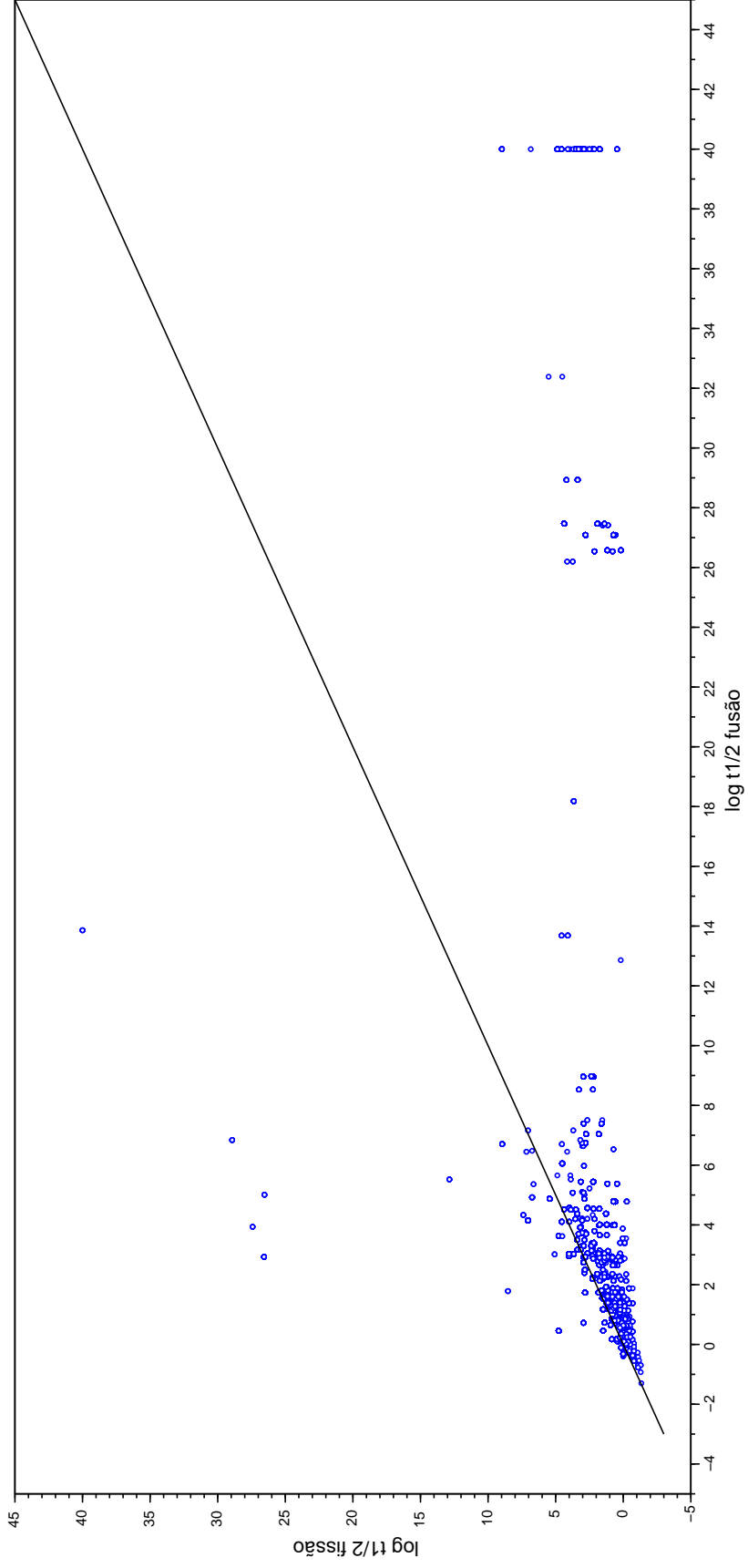


Figura A.3: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  $^1H$  (30%).

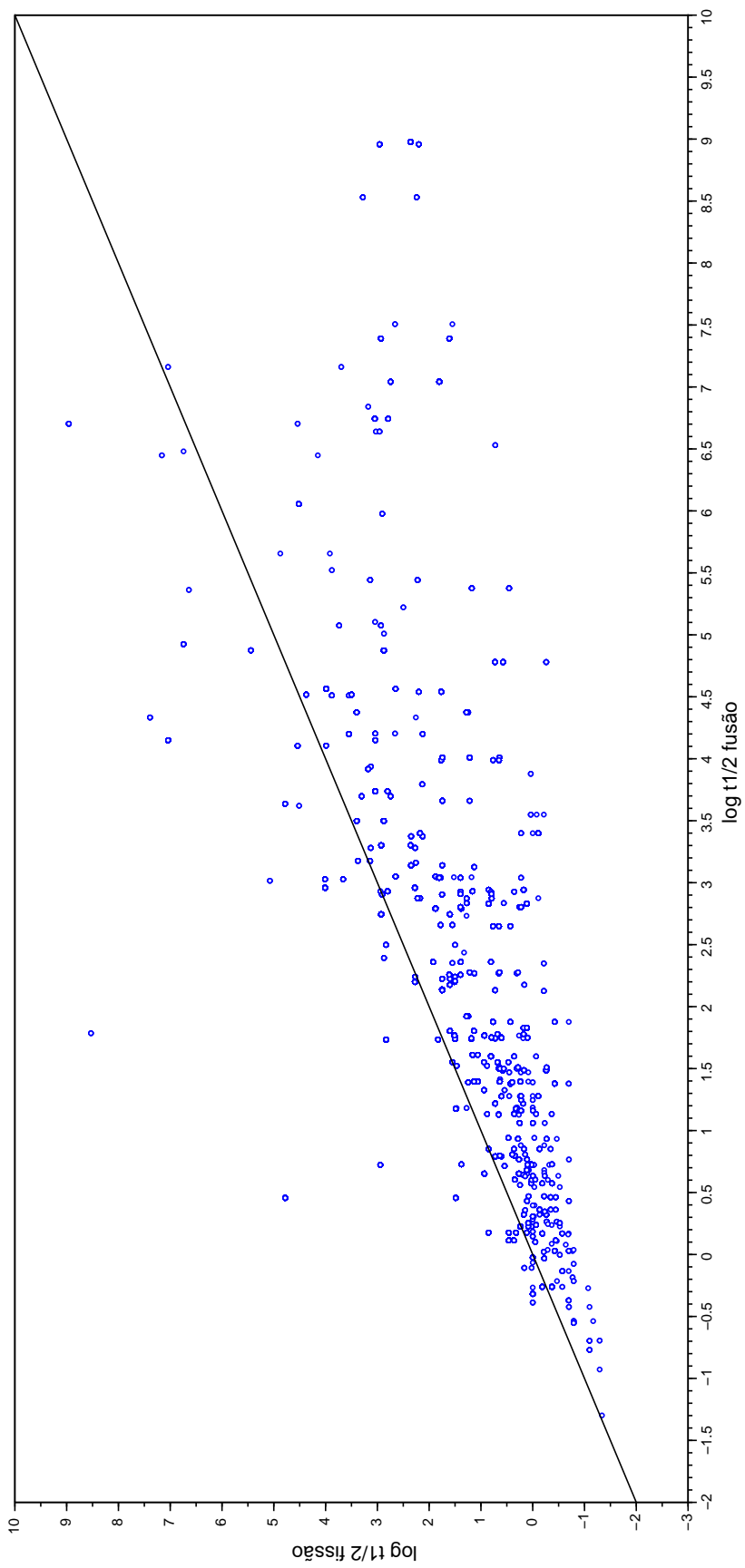


Figura A.4: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  $^1H$  (30%).

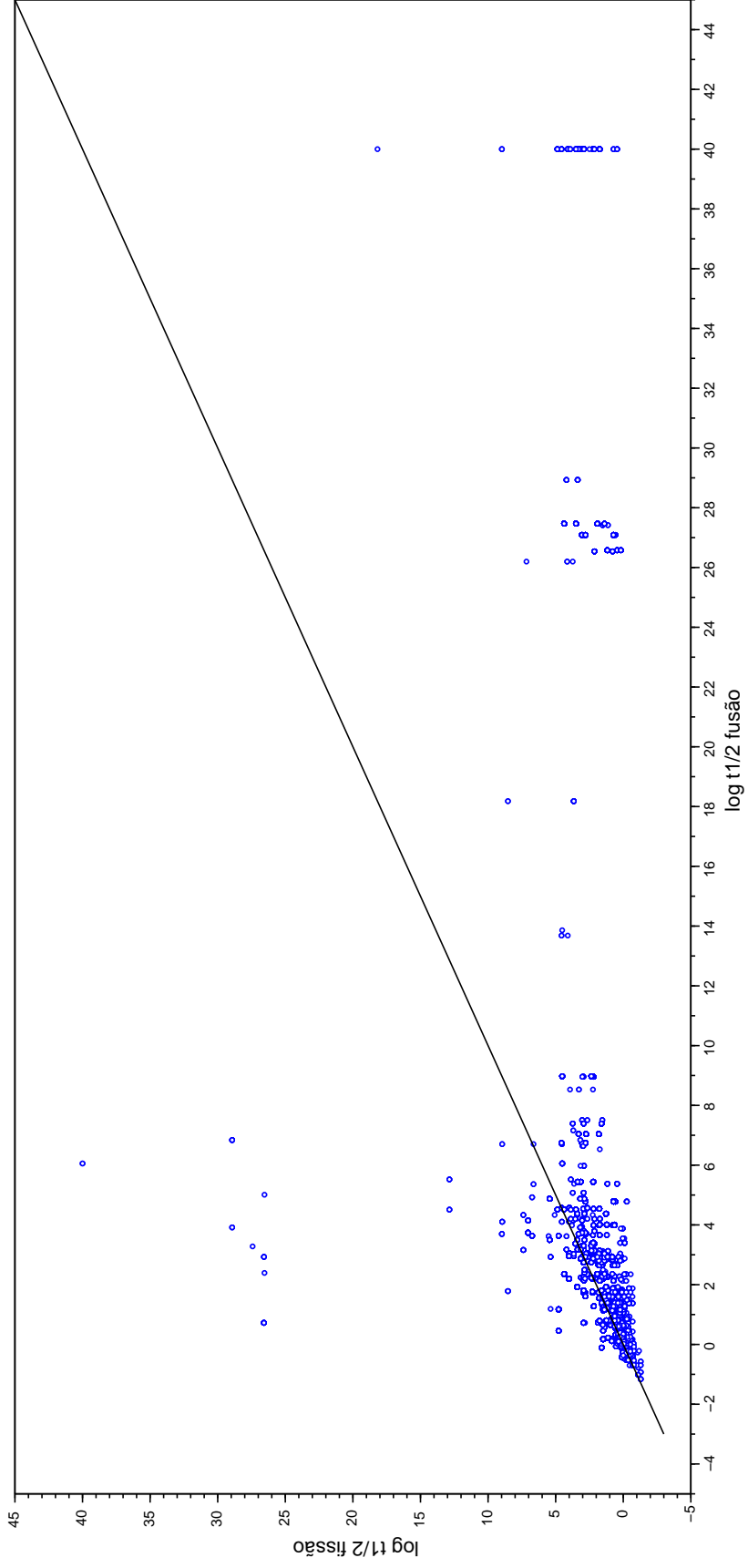


Figura A.5: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  $^2H$  (30%).

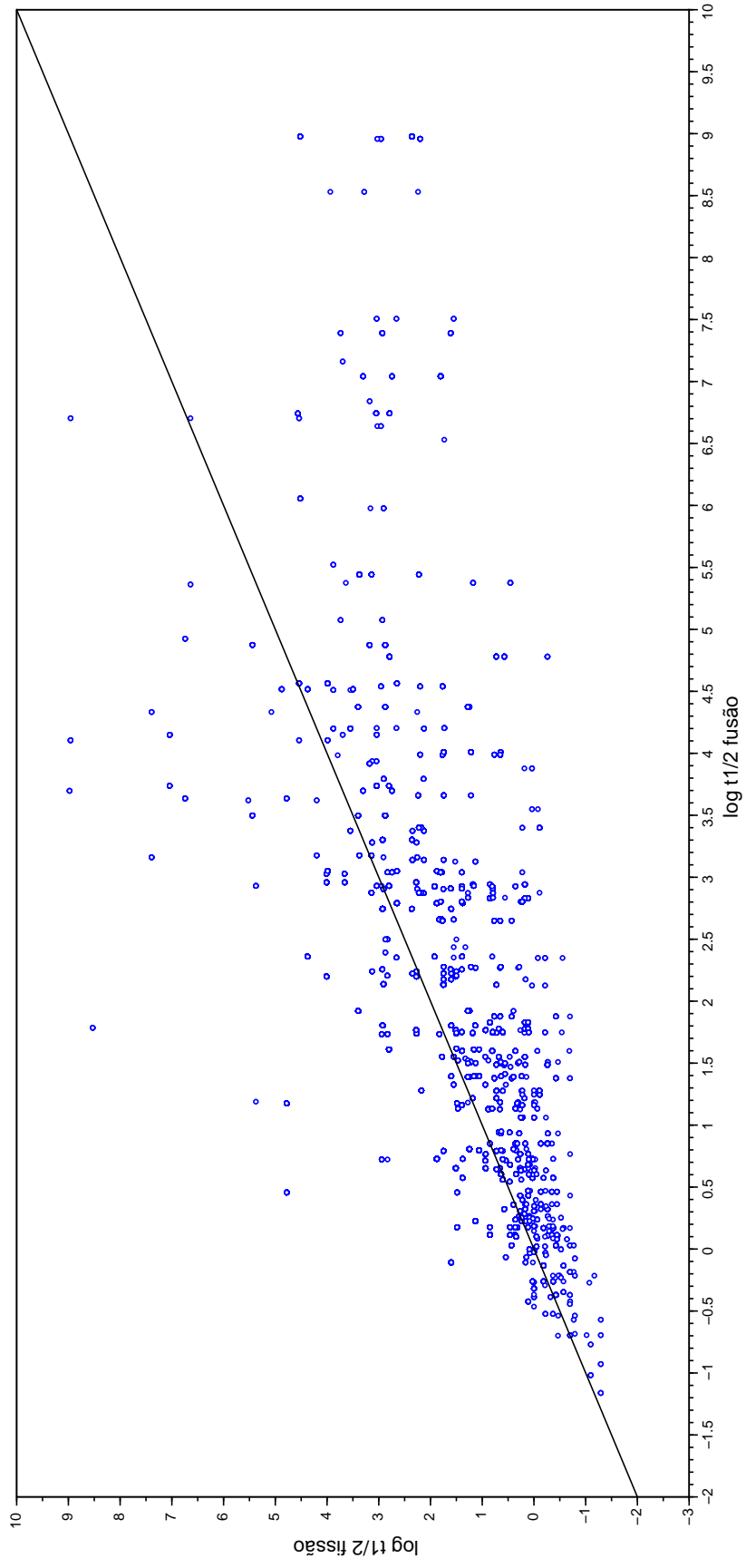


Figura A.6: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  $^2H$  (30%).



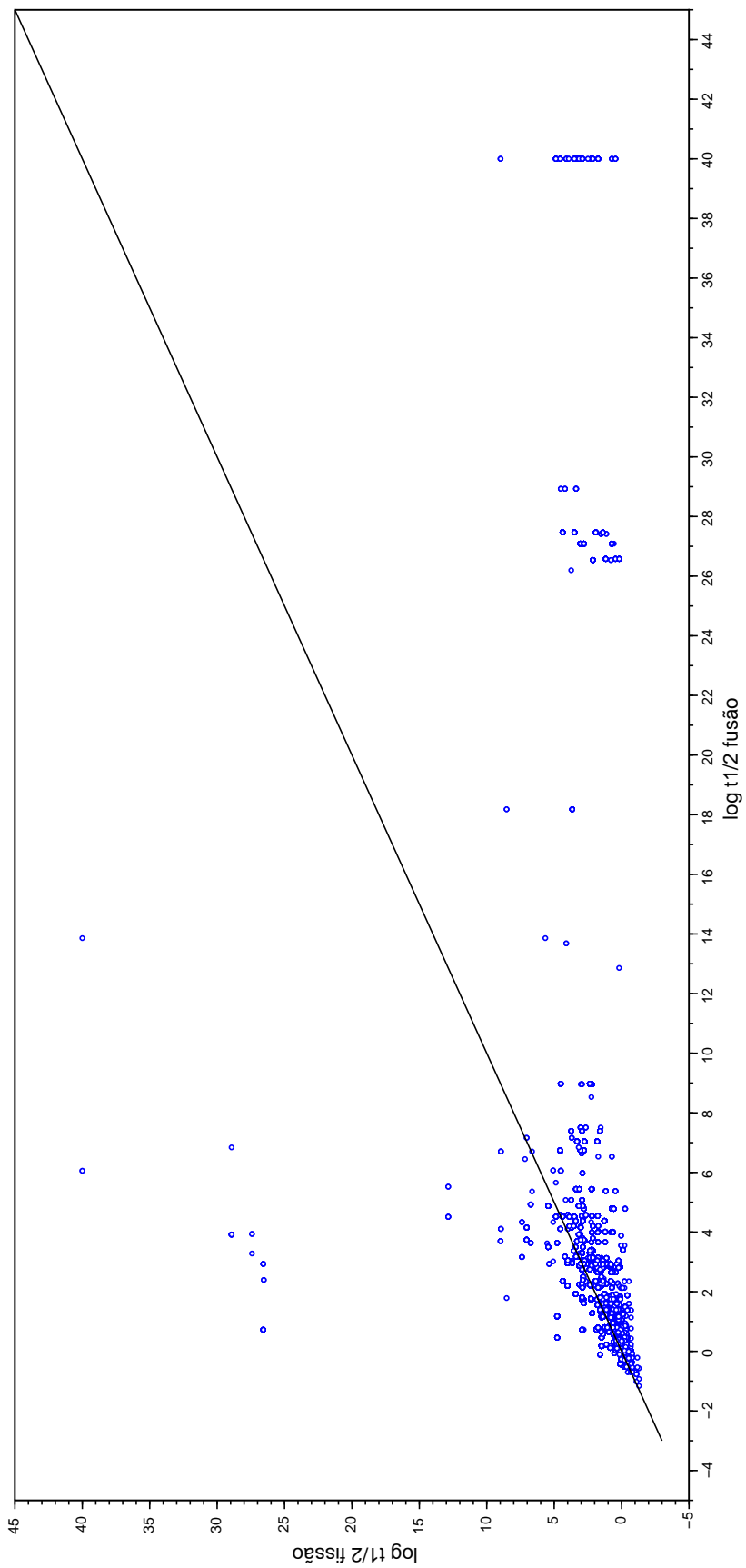


Figura A.7: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  $^2H$  (30%).

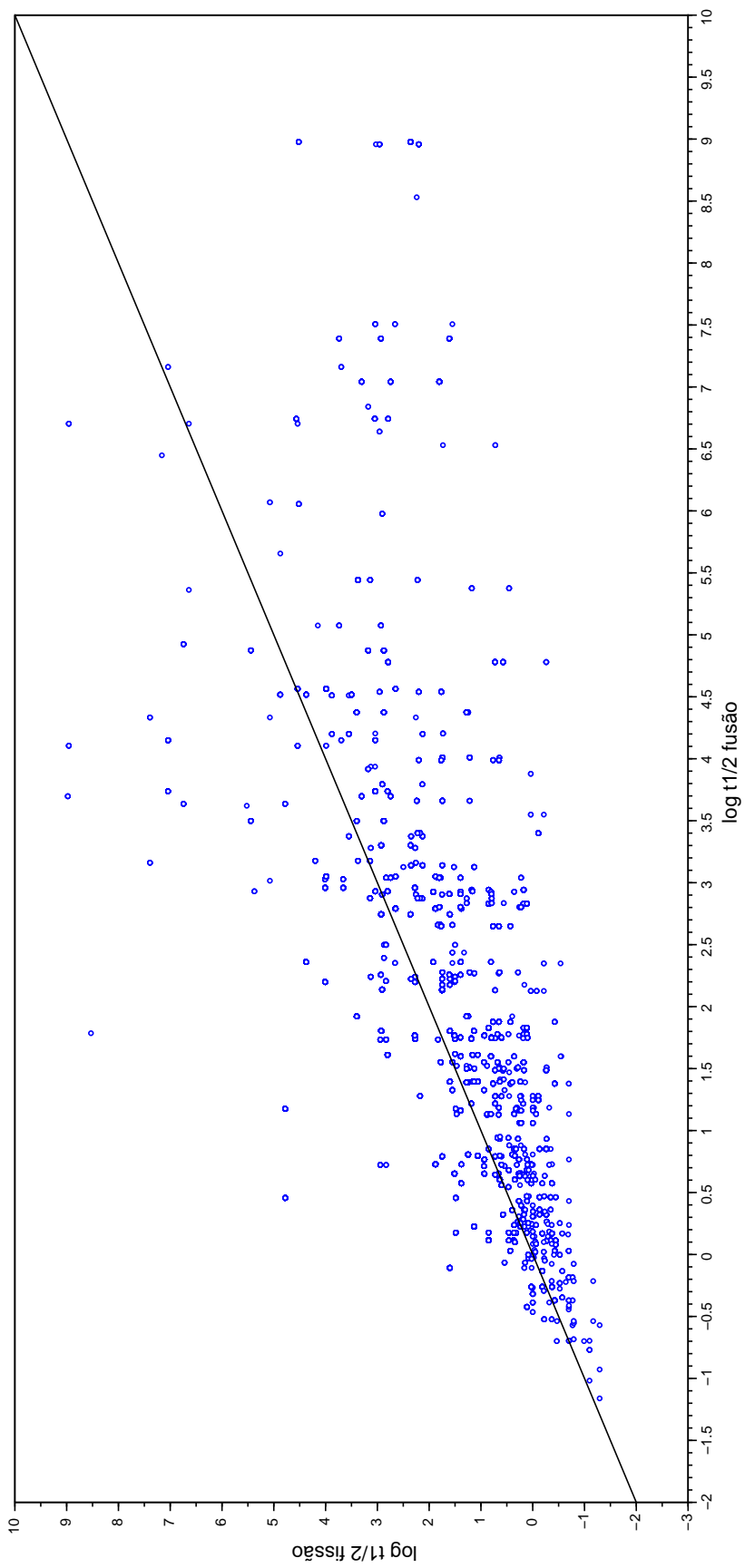


Figura A.8: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  $^2H$  (30%).

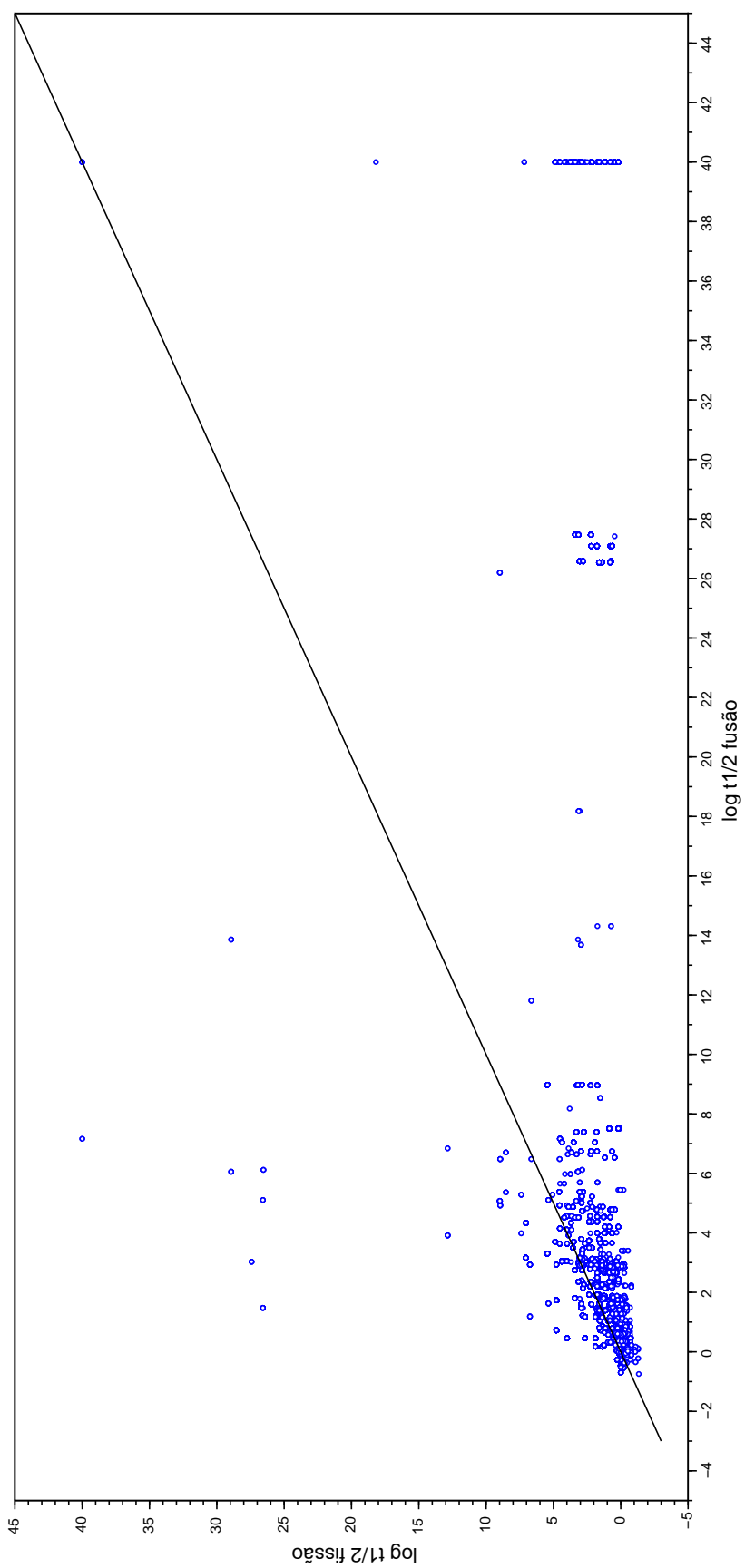


Figura A.9: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

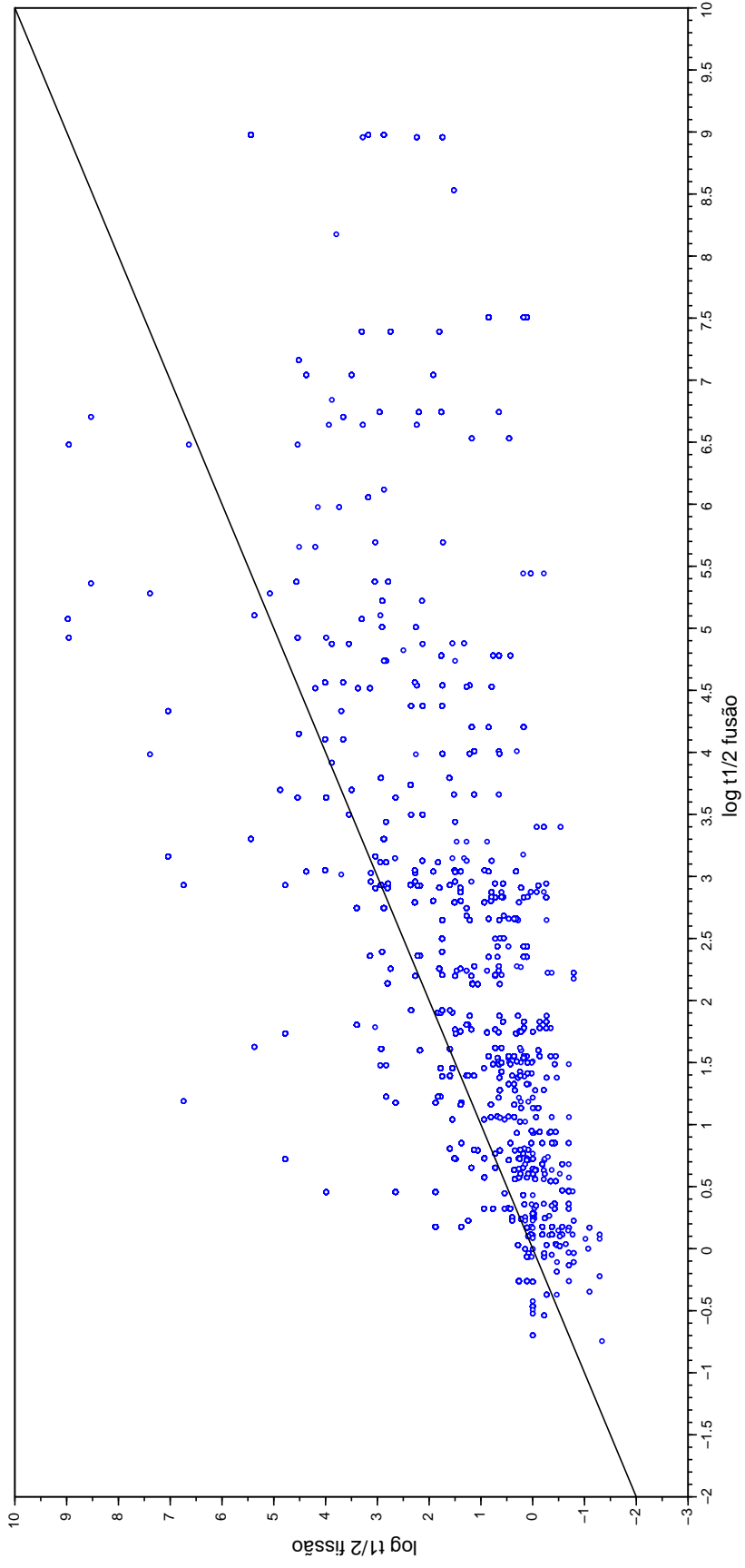


Figura A.10: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

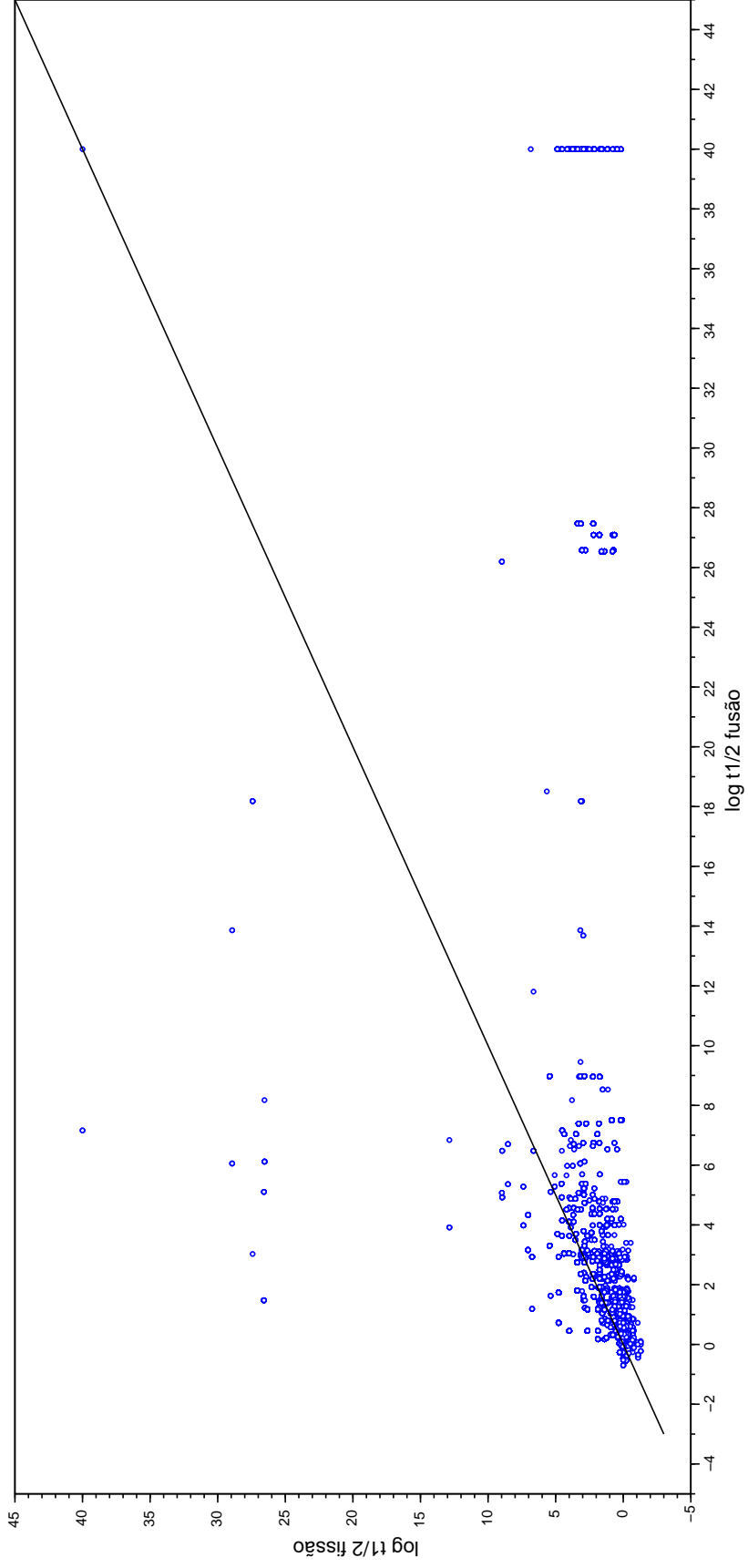


Figura A.11: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

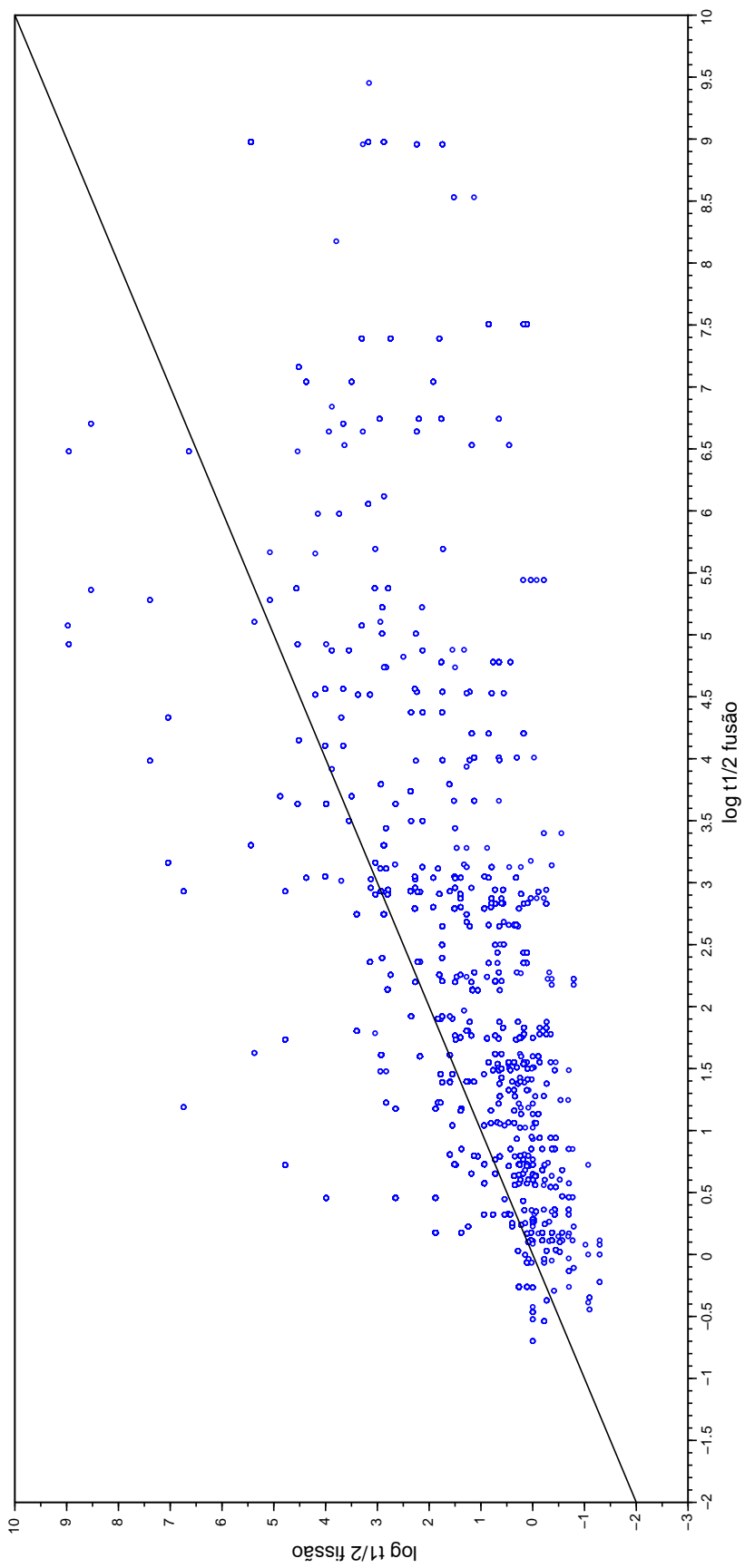


Figura A.12: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  ${}^6\text{Li}$  (30%).

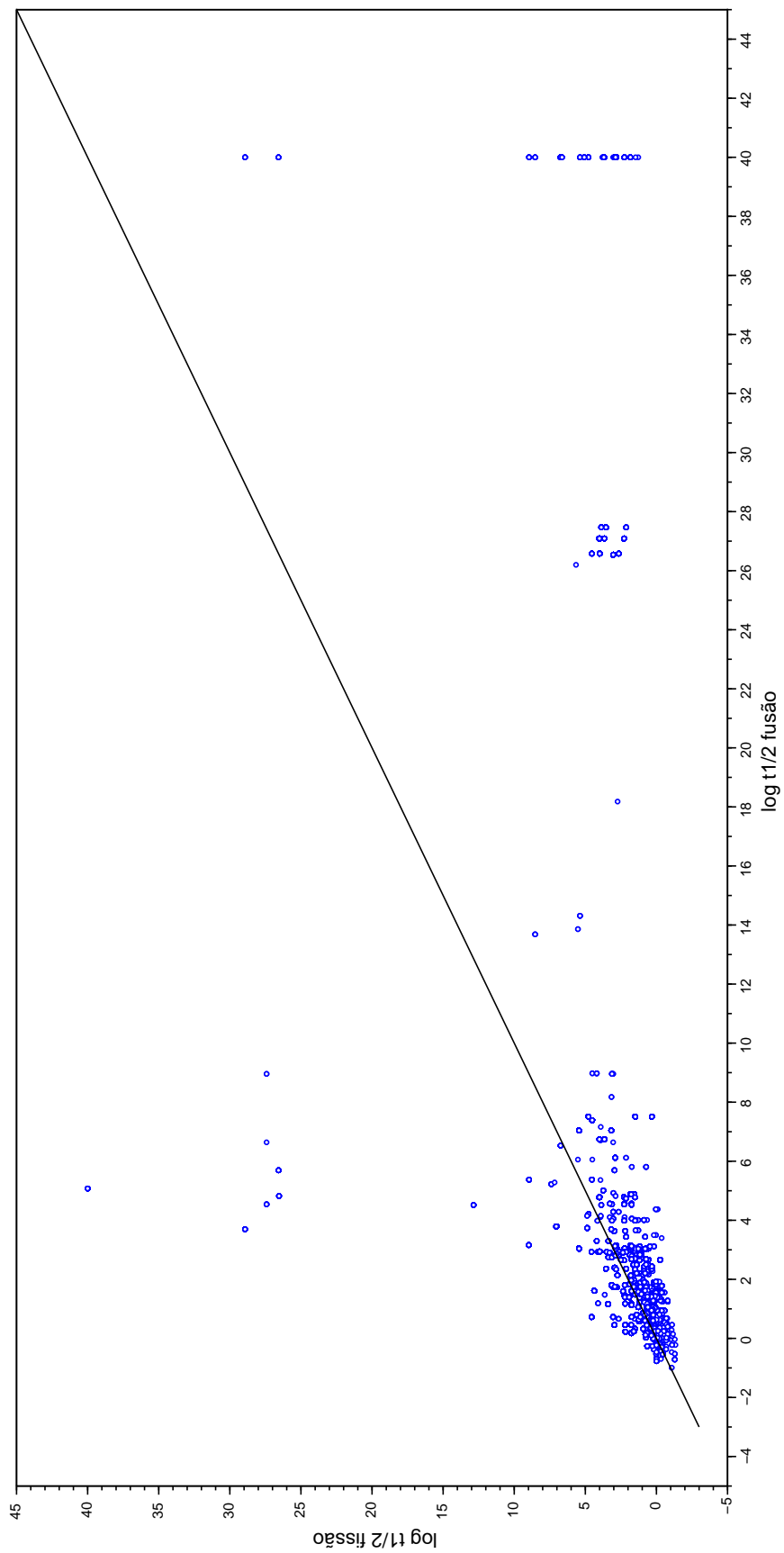


Figura A.13: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).

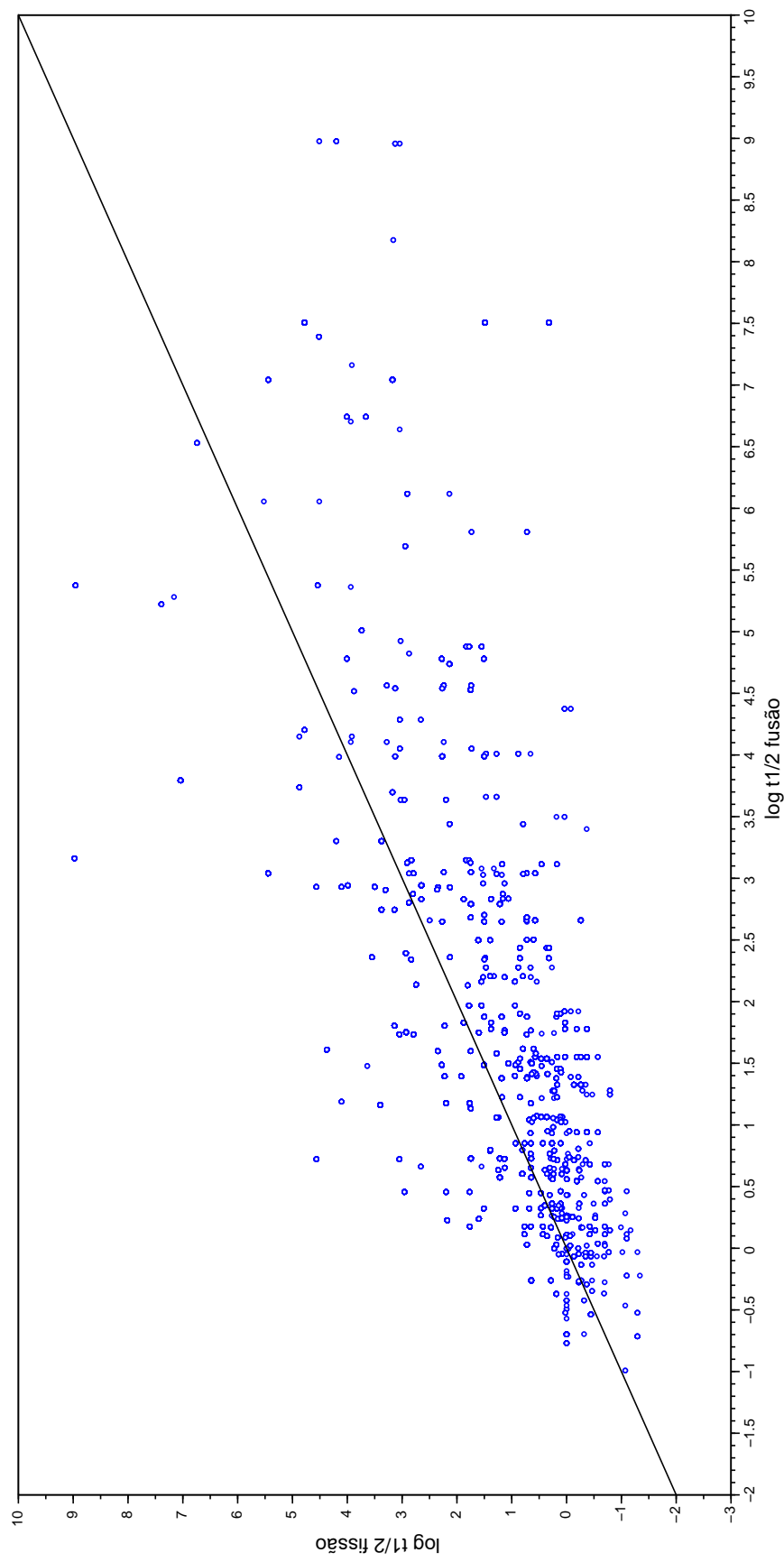


Figura A.14: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 2 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).



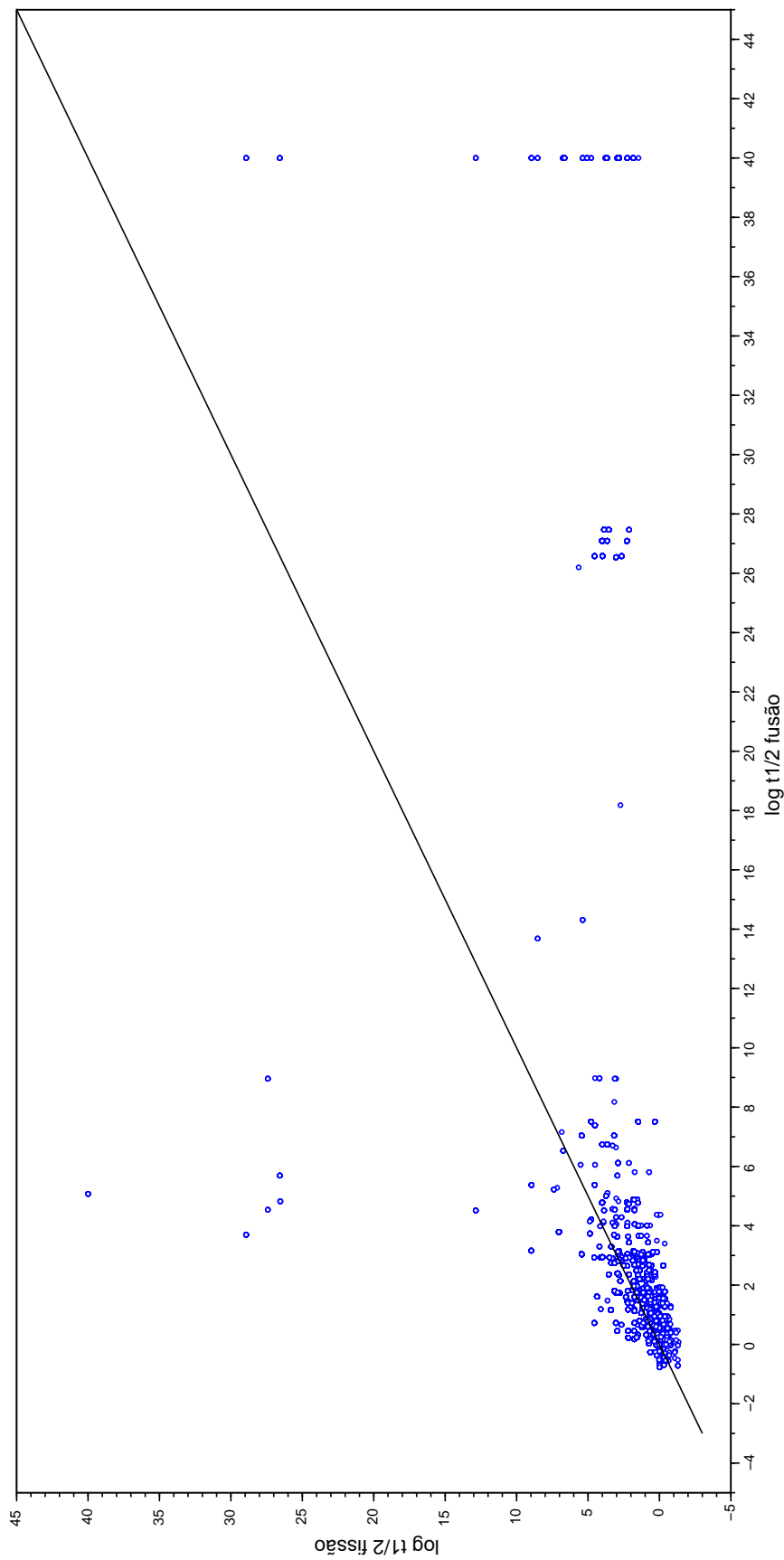


Figura A.15: Relação entre os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).

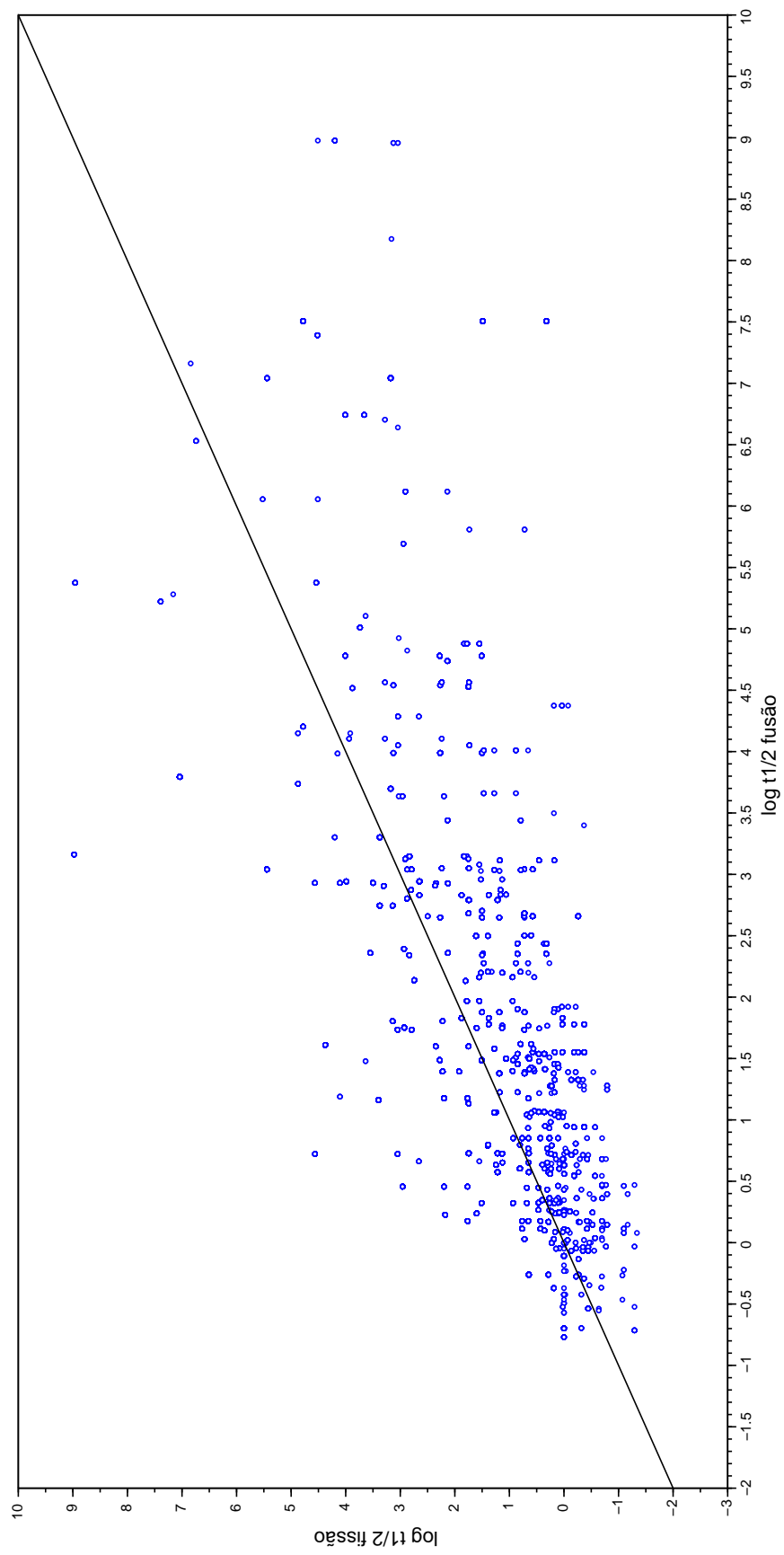


Figura A.16: Detalhe ampliado para os  $t_{1/2}$  para partículas que reagiram na simulação 3 com alvo composto de  ${}^9\text{Be}$  (30%).

## Apêndice B - Resultados para demais alvos

As Tabelas 4.1 e 4.2 apresentam os dados quando os alvos propostos foram misturados. As misturas entre lítio e hidrogênio e berílio e lítio não apresentaram nenhum dado novo. É importante ressaltar que com cálculos mais refinados sobre a fusão nuclear essas misturas podem ser interessantes do ponto de vista da cinética ou de outros parâmetros.

Tabela 4.1: Resultados para misturas.

Alvo	Proporção (%)	$\overline{\Delta B}(MeV)$	N	% $P_r t_{1/2}^{fus} > t_{1/2}^{fis}$	% $P_t t_{1/2} > 1ano$
${}^6Li + {}^9Be$	15-15	9,83	0,387	62,99	1,929
${}^6Li + {}^1H$	15-15	9,38	0,880	74,53	1,777

Tabela 4.2: Resultados obtidos para os tempos de meia-vida dos demais alvos.

$P_t$	%	${}^6Li + {}^9Be$	${}^1H + {}^6Li$
$t_{1/2} \geq 1$ ano	0,209	1,929	1,967
$1 \text{ ano} < t_{1/2} < 5$ anos	0,084	0,574	0,394
$t_{1/2} \geq 5$ anos	0,125	1,355	1,383
$n^\circ$ médio de fusões	-	44191	30097

## Apêndice C - Rotina de cálculo

A Figura C.1 apresenta um diagrama simplificado das etapas envolvidas nos cálculos desse trabalho. Os dados de entrada, tais como, probabilidades dos produtos de fissão, tempos de meia vida, energia de ligação, também são mostrados. As rotinas foram construídas com o *software* Scilab 5.4.1, a rotina para os freemantos nuclear e eletrônico foram reconstruídos e modificados a partir dos dados encontrados na literatura, as demais rotinas foram desenvolvidas com base nas ideias propostas.

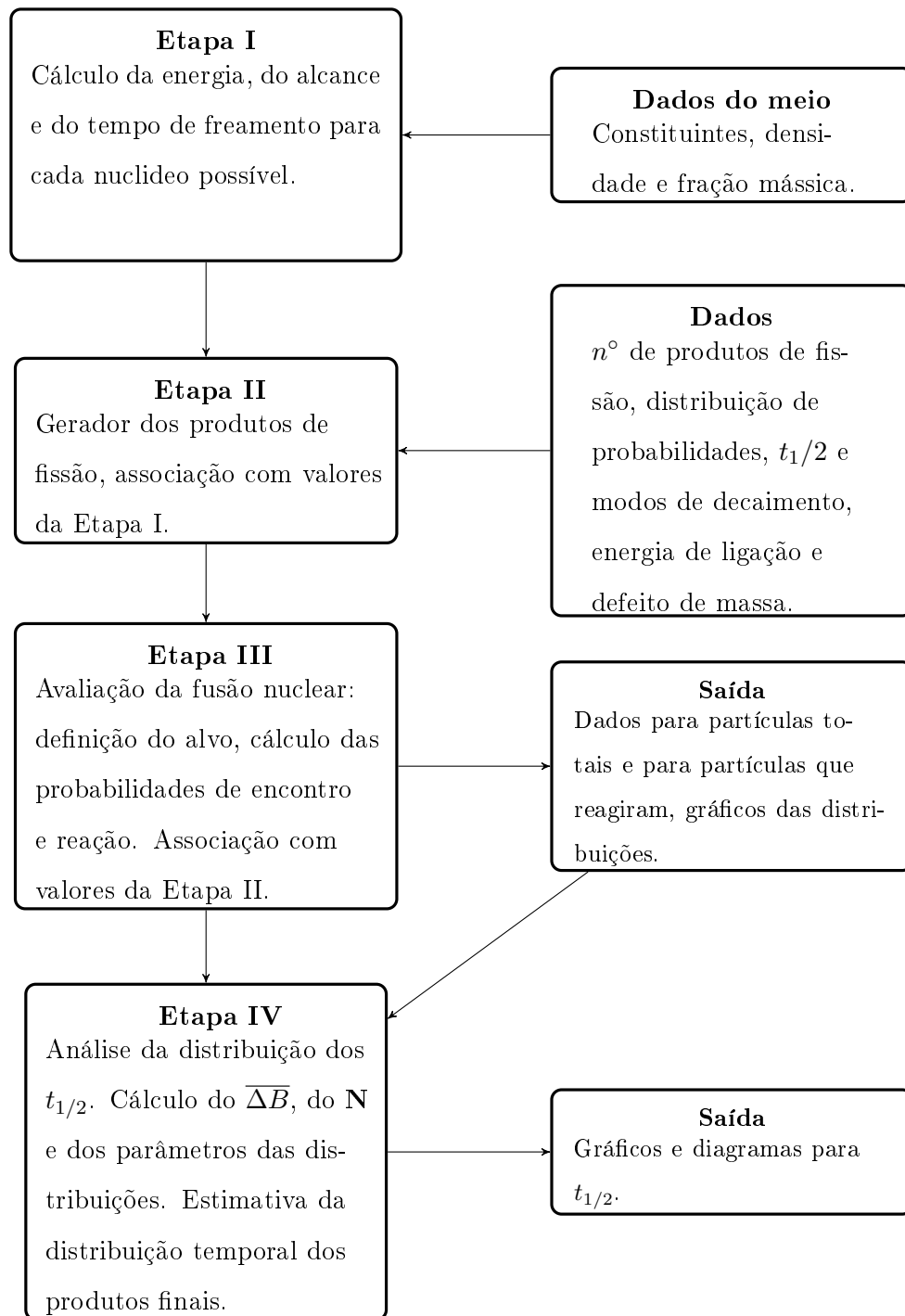


Figura C.1: Esquema simplificado da estrutura da rotina utilizada para avaliação da reação de fusão nuclear.