



GRUPO DE ESTUDOS DA LINGUAGEM PYTHON

Centro Universitário Franciscano – Santa Maria – RS

Alexandre Zamberlan, Gilberto Orengo, Marcos Cassal, Robertson Ebling dos Santos

Início: abril de 2016 – Periodicidade: semanal, todas as quarta-feiras

OS MODELOS NUCLEARES E A PROGRAMAÇÃO EM PYTHON

1 Propriedades dos núcleos¹

1.1 Identificando os núcleos

Os núcleos de cada átomo X podem ser identificados e rotulados unicamente pela sua *carga*, ou número atômico Z (número de prótons), e pelo seu número total de *núcleons*², ou conhecido por número de massa A . Os núcleos são representados por uma das seguintes configurações

$${}^A_ZX, \quad {}^AX_Z, \quad {}^AX^Z, \quad X^A_Z,$$

sendo $A = Z + N$, em que N é o número de nêutrons. Neste texto será adotada a representação A_ZX . Cada possível combinação de Z e N (ou A) é conhecido por *nuclídeo*³ e determina cada espécie de núcleo. Como o átomo é eletricamente neutro, o núcleo deve ser circundado por uma nuvem de Z elétrons. Um grande número de núcleos, com vários valores de Z e A , tem sido encontrados na natureza ou produzidos no laboratório. Os núcleos com mesmo número de prótons mas diferentes número de nêutrons são conhecidos por *isótopos*. Todos os átomos tem propriedades químicas semelhantes; assim, A_ZX e ${}^{A'}_ZX$ são isótopos. Os núcleos que tem o mesmo número total de núcleons (ou mesmo número de massa) mas diferentes número de prótons são chamados de *isóbaros*. Assim, A_ZX e ${}^A_{Z'}Y$ são isóbaros. Assim como um átomo pode ser encontrado em um estado excitado, bem como no seu estado fundamental, então o núcleo também pode ser excitado para níveis superiores, nos quais serão referidos como *ressonâncias* ou *isômeros* do estado fundamental.

1.2 Massas dos núcleos

Como já foi mencionado, um núcleo, A_ZX , contém Z prótons e $(A - Z)$ nêutrons. Assim, ingenuamente, podemos esperar que a massa dos núcleos serão

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

em que m_p e m_n são, respectivamente, as massas do próton e do nêutron, cujos valores conhecemos experimentalmente

$$\begin{aligned} m_p &= 938,27 \text{ MeV}/c^2 \\ m_n &= 939,56 \text{ MeV}/c^2 \end{aligned} \quad (2)$$

¹Texto extraído do livro da Ref. (DAS; FERBEL, 1994).

²Núcleon é a denominação dada para cada constituinte do núcleo atômico, isto é, se refere a nêutrons e prótons.

³O termo *nuclídeo* foi proposto por Truman P. Kohman (PARRINGTON et al., 1996)

A medida real da massa do núcleo revela, entretanto, que a massa de um núcleo é menor do que a soma das massas de seus constituintes⁴. Isto é

$$M(A, Z) < Zm_p + (A - Z)m_n. \quad (3)$$

Isto explica porque um núcleo, por si só (espontaneamente), não pode se quebrar em seus constituintes, porque violaria a conservação de energia. O déficit (ou deficit) de massa, definido como

$$\Delta M(A, Z) = M(A, Z) - Zm_p - (A - Z)m_n \quad (4)$$

é negativo, e pode ser pensado como sendo proporcional a energia de ligação nuclear ($B.E.$); o valo absoluto de ΔM está relacionado com a mínima energia necessária para quebrar o núcleo em seus componentes. Assim, um $B.E.$ negativo assegura que o núcleo permanece unido, e quanto mais negativo o valor de $B.E.$, mais estável é o núcleo. O déficit de massa e a energia de ligação do núcleo $B.E.$ estão relacionados pela simples expressão

$$B.E. = \Delta M(A, Z)c^2, \quad (5)$$

em que c é a velocidade da luz. Assim, $-\Delta M(A, Z)c^2$ ou $-B.E.$ é a quantidade de energia necessária para liberar os núcleons dos seus “cativos”, no interior do núcleo. É instrutivo definir a energia de ligação por núcleon, ou a energia média necessária para liberar um núcleon do núcleo. Isto é definido como

$$\frac{B}{A} = \frac{-B.E.}{A} = \frac{\Delta M(A, Z)c^2}{A} = \frac{(Zm_p + (A - Z)m_n - M(A, Z))c^2}{A}. \quad (6)$$

Esta quantidade tem sido medida para um grande intervalo de núcleos estáveis e, exceto para algumas estruturas finas, que não serão discutidas aqui, mostra excelente concordância entre os resultados medidos e previstos.

1.3 O Raio Nuclear

A estimativa do raio nuclear é dado em função do número de massa A , e é resultado de diferentes experimentos com espalhamento de partículas. Outra forma de validar esta estimativa é pelo estudo de “núcleos espelhos”.

$$R \approx r_0 A^{1/3}, \quad \text{com} \quad r_0 = 1,25 \text{ fm} = 1,25 \times 10^{-15} \text{ m}, \quad (7)$$

em que r_0 é estimado pelos experimentos acima citados, e a unidade fm é conhecida como “férmion”, em homenagem a Enrico Fermi, um físico italiano, o qual foi o primeiro a realizar uma reação nuclear em cadeia (fissão nuclear), e $1 \text{ fm} \equiv 10^{-15} \text{ m}$.

2 Os Modelos Nucleares

Na tentativa de compreender o “mundo do núcleo atômico” são propostos modelos, especialmente com o objetivo de prever as propriedades nucleares. Dentre as diferentes propostas, destacamos três neste texto: os Modelos da Gota Líquida, do Gás de Fermi e o de Camadas. Cada um “tenta” descrever propriedades diferentes, mas com ótima aproximação.

⁴A respeito das massas, devemos salientar que as tabelas de isótopos fornecem, geralmente, massas de átomos neutros e não dos núcleos. Para obter a massa nuclear devemos subtrair a massa dos elétrons (Zm_e) dos pesos atômicos (ignorando pequenas diferenças nos elétrons ligados).

2.1 O Modelo da Gota Líquida

Este modelo fornece o valor da energia de ligação (B.E.⁵) dos núcleons, pela fórmula semi-empírica da massa nuclear, e é dada por

$$B.E. = -a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_4 \frac{(N - Z)^2}{A} - a_5 ((-1)^N + (-1)^Z) A^{-3/4}, \quad (8)$$

em que A , Z e N são, respectivamente, número de massa, número atômico e número de nêutrons, e $a_1 \cong 15,835$ MeV, $a_2 \cong 18,33$ MeV, $a_3 \cong 0,714$ MeV, $a_4 \cong 23,20$ MeV e $a_5 \cong 17,0$ MeV. A eq. (8) é chamada fórmula de Weisaecker, e está de acordo com os dados experimentais com um erro inferior a 1% para $A > 15$. É claro que esta fórmula exprime apenas o comportamento médio dos núcleos, e assim não reproduzir quaisquer efeitos da estrutura em camadas.

2.2 O Modelo de Gás de Fermi

Este modelo, proposto por Weisskopf, supõe que os núcleons se movimentam de forma independente através do núcleo atômico em seu estado fundamental. Tal explicação usa como base o modelo de gás de Fermi. O modelo utilizado é essencialmente o mesmo utilizado para tratar de elétrons livres em um metal condutor. É suposto que cada núcleon do núcleo atômico mova-se num potencial efetivo atrativo que representa um efeito médio de suas interações com os outros núcleons naquele núcleo. Há um valor constante dentro do núcleo para este potencial (no nível de Fermi) e externamente ao núcleo ele decresce até zero a uma distância igual ao alcance das forças nucleares e, é aproximadamente igual a um poço quadrado infinito e tridimensional, de raio ligeiramente superior ao raio do núcleo.

Como sabemos, o núcleo atômico contém dois tipos de partículas, os prótons e os nêutrons e ambos têm um momento angular intrínseco, e ambos são classificados como férmions de spin $1/2$, mas sendo duas partículas distinguíveis o princípio de exclusão de Pauli age independentemente sobre cada um deles. Assim podemos considerar que o núcleo é constituído por dois gases de Fermi, o dos prótons e o dos nêutrons e que corresponderão a dois estados energéticos diferentes e, cada estado só pode ser ocupado por apenas dois prótons ou dois nêutrons, com spins de sinais opostos.

A energia do nível de Fermi (E_F) é dada por

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m}, \quad (9)$$

em que o momento do nível de Fermi (p_F) é obtido de

$$n_F = \frac{4}{9\pi} A \left(\frac{r_o p_F}{\hbar} \right)^3, \quad \text{com } r_o = 1,25 \text{ fm}, \quad (10)$$

sendo n_F o número de prótons ou de nêutrons, submetidos ao poço de potencial de Fermi.

2.3 O Modelo de Camadas

O modelo de camadas também pode ser usado para calcular o momento magnético para alguns núcleos. Como as medidas evidenciam, o próton e o nêutron têm momentos de dipolo intrínsecos de $2,79 \mu_N$ e $-1,91 \mu_N$, respectivamente. Assim, podemos esperar que o momento magnético intrínseco de cada núcleon desemparelhado contribuam para o momento magnético total dos núcleos. Além disso, uma vez que os prótons são carregados eletricamente, o

⁵A abreviatura vem do inglês: *Binding Energy*, e fazemos questão de mantê-la, mesmo num texto em Português, por uma questão de padronização com a literatura da área.

movimento orbital de qualquer próton desemparelhado também contribuirá para o momento magnético do núcleo. Para o deutério, por exemplo, se assumirmos que o próton e o nêutron estão no estado de subnível $1s_{1/2}$, então, sem o momento angular orbital para o próton ($\ell = 0$), temos para o momento magnético do deutério a soma dos momentos de dipolo intrínsecos do próton e do nêutron:

$$\mu_d = 2,79\mu_N - 1,91\mu_N = 0,88\mu_N. \quad (11)$$

O valor medido para o momento magnético do deutério é $+0,857438230\mu_N$, que mostra boa concordância com a expectativa acima, com erro percentual ($\varepsilon\%$) igual a 2,63%. O núcleo de trítio (${}^3_1\text{H}$) tem dois nêutrons e um próton, todos no estado de subnível $1s_{1/2}$. Como os nêutrons são emparelhados, eles não devem contribuir para o momento magnético. O próton desemparelhado, tendo $\ell = 0$, não terá contribuição do seu movimento orbital. Consequentemente, o momento magnético total do ${}^3_1\text{H}$ será o mesmo do próton desemparelhado, isto é, $+2,79\mu_N$, o qual está em boa concordância com o valor medido de $+2,97896248\mu_N$ ($\varepsilon\% = 6,77\%$). Para ${}^3_2\text{He}$, o núcleon desemparelhado é um nêutron no estado de subnível $1s_{1/2}$. Desta forma, o momento magnético total deverá ser o mesmo do nêutron, o qual é $-1,91\mu_N$, novamente próximo do valor observado de $-2,12762485\mu_N$ ($\varepsilon\% = 11,4\%$). O ${}^4_2\text{He}$ (partícula α) tem a estrutura de camadas fechada (e ele é duplamente mágico), e portanto, o modelo de camadas prediz que o ${}^4_2\text{He}$ não tem spin e nem momento magnético, que é de fato experimentalmente correto. No ${}^{10}_5\text{B}$, os cinco prótons e os cinco nêutrons tem a mesma estrutura de nível energético, isto é,

$$(1s_{1/2})^2 (1p_{3/2})^3.$$

Assim, existe um próton desemparelhado e um nêutron desemparelhado. O próton desemparelhado estará num estado $\ell = 1$, e portanto o movimento orbital contribuirá com

$$\mu = (e\hbar/2m_N c)\ell = \mu_N$$

para o momento magnético total, que terá o valor

$$2,79\mu_N - 1,91\mu_N + \mu_N = 1,88\mu_N, \quad (12)$$

o qual se compara muito bem com o valor medido de $+1,80064478\mu_N$ ($\varepsilon\% = 4,4\%$).

Assim, vemos que o modelo de camadas, além de fornecer os conhecidos números mágicos, também descreve várias propriedades de núcleos leves. Para núcleos pesados, entretanto, há uma grande diferença entre as previsões do modelo de camadas e as quantidades medidas. A seguir veremos alguns modelos para o momento magnético nuclear.

2.3.1 Uma alternativa para o cálculo do momento magnético

Os núcleos-ímpares (Z e/ou N ímpar) tem spins intrínsecos e, em geral, também possuem momento de dipolo magnético.

A unidade de momento de dipolo magnético para o núcleo é o *magnéton nuclear* definido como

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}, \quad (13)$$

o qual é análogo ao magnéton de Bohr, mas com a massa do elétron substituída pela massa do próton (m_p), com $e = 1,602176487(40) \times 10^{-19}$ C. Ele é definido tal que o momento magnético devido ao próton com momentum angular orbital \vec{L} é $\mu_N \vec{L}$.

Experimentalmente obtém-se que o momento magnético do próton (devido ao seu spin) é

$$\mu_p = 2,79\mu_N = 5,58\mu_N S, \quad \left(S = \frac{1}{2}\right) \quad (14)$$

e para o nêutron é

$$\mu_n = -1,91 \mu_N = -3,82 \mu_N S, \quad \left(S = \frac{1}{2}\right) \quad (15)$$

Se nós aplicarmos um campo magnético na direção z , para um núcleo, então o próton desemparelhado com momento angular orbital \vec{L} , spin \vec{S} e momento angular total \vec{J} dará uma contribuição para o componente z do momento magnético, que será

$$\mu^z = (5,58 S^z + L^z) \mu_N. \quad (16)$$

O acoplamento spin-órbita pode ser observado na representação da Figura 1.

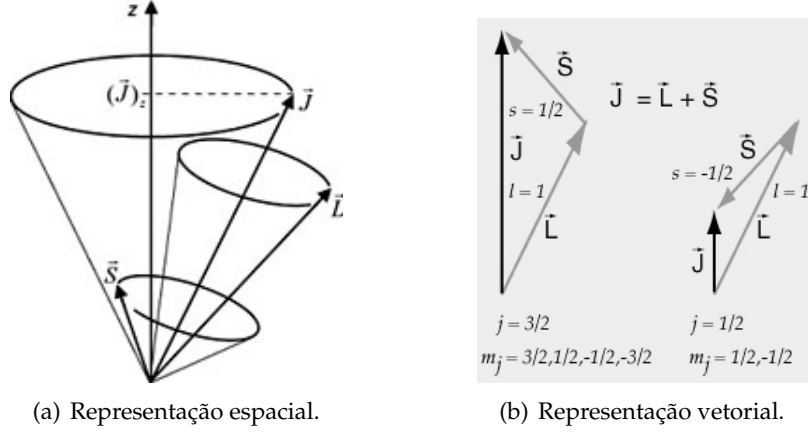


Figura 1: Representação do acoplamento spin-órbita, em que $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. (Representações sem escala.)

Como no caso do efeito Zeeman, o modelo vetorial pode ser usado para expressar o momento magnético

$$\mu^z = \frac{(5,58 \langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle + \langle \vec{L} \cdot \vec{J} \rangle)}{\langle \vec{J}^2 \rangle} j^z \mu_N, \quad (17)$$

em que

$$\begin{aligned} \langle \vec{J}^2 \rangle &= j(j+1) \hbar^2 \\ \vec{S} \cdot \vec{J} &= \frac{1}{2} (\langle \vec{J}^2 \rangle + \langle \vec{S}^2 \rangle - \langle \vec{L}^2 \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)) \\ \vec{L} \cdot \vec{J} &= \frac{1}{2} (\langle \vec{J}^2 \rangle + \langle \vec{L}^2 \rangle - \langle \vec{S}^2 \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) + \ell(\ell+1) - s(s+1)), \end{aligned}$$

e assim obtemos a expressão final para a contribuição para o momento magnético

$$\mu = \left[\frac{5,58 (j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)) + (j(j+1) + \ell(\ell+1) - s(s+1))}{2j(j+1)} \right] j \mu_N, \quad (18)$$

e para um nêutron com momento angular orbital ℓ' e momento angular total j' temos

$$\mu = - \left[\frac{3,82 (j'(j'+1) + s(s+1) - \ell'(\ell'+1))}{2j'(j'+1)} \right] j' \mu_N. \quad (19)$$

Observe que não há contribuição do momento angular orbital porque o nêutron não possui carga.

Assim, por exemplo, se considerarmos o núclídeo ${}^7_3\text{Li}$, para o qual existe um próton desemparelhado no estado $1p_{3/2}$ ($\ell = 1, j = \frac{3}{2}$), então a estimativa do momento magnético é

$$\mu = \left(\frac{5,58 \left(\left(\frac{3}{2} \times \frac{5}{2} \right) + \left(\frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \right) - (1 \times 2) \right) + \left(\left(\frac{3}{2} \times \frac{5}{2} \right) + (1 \times 2) - \left(\frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \right) \right)}{2 \times \frac{3}{2} \times \frac{5}{2}} \right) \frac{3}{2} \mu_N = 3,79 \mu_N.$$

O valor medido é $+3,2564268 \mu_N$ e a estimativa, neste caso, não se mostrou razoavelmente boa. Para núcleos mais pesados a estimativa do modelo de camadas é ainda pior.

A origem precisa do momento de dipolo magnético não é bem entendida, mas em geral ela não pode ser prevista pelo modelo de camadas. Por exemplo, para o núclídeo ${}^{17}_9\text{F}$, o valor medido para o momento magnético é $+4,7223 \mu_N$, enquanto que o valor previsto pela expressão do modelo acima é $-0,26 \mu_N$!!! Existem contribuições para o momento magnético do potencial nuclear que ainda não é bem entendido.

O Modelo de Schmidt para o momento magnético nuclear

Em 1937, T. Schmidt usou a analogia das camadas fechadas atômicas para sugerir que as forças nucleares podem causar um acoplamento spin-órbita, chegando a usar esta idéia para explicar os momentos de dipolos magnéticos dos núcleos com núcleons ímpares. Esse acoplamento impunha limites para o número quântico angular total \vec{J} , limites esses que ficaram conhecidos como limites ou linhas de Schmidt. O acoplamento spin-órbita está representado na Figura 1, na pág. 5.

Ele propôs para os momentos magnéticos, as seguintes expressões:

$$\mu = \mu_N \left[j g_L - \frac{1}{2} (g_L - g_S) \right] \quad \text{para } j = \ell + \frac{1}{2} \quad (\text{mais baixa energia no nível}), \quad (20)$$

$$\mu = \mu_N \left[j g_L + \frac{j}{2(j+1)} (g_L - g_S) \right] \quad \text{para } j = \ell - \frac{1}{2} \quad (\text{mais alta energia no nível}), \quad (21)$$

em que $g_S = 5,59$ para prótons e $g_S = -3,83$ para nêutrons, e $g_L = 1$ para prótons e $g_L = 0$ para nêutrons; e o μ_N é o magnéton nuclear. As suas predições são razoáveis para núcleos com núcleons ímpares desemparelhados. Uma possível razão para a não precisão das predições é que o momento magnético intrínseco do núcleon é menor num ambiente nuclear do que no espaço livre.

Um cuidado é necessário na escolha entre as Eq.(20) e (21), porque será realizada pelo j . Assim, atente para escolher em função de sua correspondente energia. O j mais elevado no diagrama corresponde ao de maior energia e o mais baixo ao de menor energia. Exemplo: no $3p$ temos o $3p_{1/2}$ e $3p_{3/2}$, sendo o nível do $j = 1/2$ de maior energia que o $j = 3/2$. Para o subnível s utiliza-se a equação (20), para o nível de menor energia.

2.3.2 As Predições do Modelo de Camadas

O modelo de camadas dá conta de uma grande variedade de propriedades de núcleos complexos. Por exemplo, é possível obter o spin-paridade para o estado fundamental de uma grande quantidade de núcleos com A -ímpar. Em acordo com o modelo de camadas, os níveis de energia dos prótons e nêutrons são preenchidos independentemente e, devido ao princípio de Exclusão de Pauli, somente dois nêutrons ou dois prótons podem ocupar um dado nível (com spins antiparalelos). Se assumirmos que pares de núcleons preenchem cada nível, produzindo

momento angular total nulo, então é o *último núcleon desemparelhado* que determinará o spin-paridade do estado fundamental. Uma consequência imediata é que os níveis energéticos do estado fundamental de todos os núcleos par-par terão spin nulo, o que é experimentalmente comprovado. Assim, este modelo explica a estabilidade dos 156 núcleos par-par.

2.3.3 O Spin

O modelo de camadas também prediz, com certa exatidão, o spin nuclear. Ele é obtido pelo último núcleon desemparelhado e é dado pelo j , na análise do diagrama de níveis de energia. No caso de dois núcleons desemparelhados soma-se e subtrai-se os spins, obtendo-se dessa forma um intervalo para o spin nuclear. Por exemplo, para o $^{14}_7\text{N}$, os núcleons desemparelhados estão no nível $1p_{1/2}$, cujo indicativo de spin é $J = \frac{1}{2}$. Assim teremos o spin (J) entre zero ($\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$) e 1 ($\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$). Experimentalmente temos o valor $J = 1$, e pode-se conferir em <http://www-nds.iaea.org/relnsd/vchart/>.

2.3.4 A Paridade

A paridade implica uma transformação, que troca o sinal de um sistema de coordenadas. A paridade é importante na Mecânica Quântica, já que as funções de onda que representam as partículas, podem se comportar de formas diferentes, frente uma transformação do sistema de coordenadas que as descrevem. Assim, paridade é a propriedade de simetria de uma função de onda. É a paridade que demonstra a característica do seu comportamento na troca de sinal das coordenadas espaciais que envolve, ou seja

$$\begin{aligned}\psi(x, y, z) &= \psi(-x, -y, -z) && \implies \text{paridade par ou positiva,} \\ \psi(x, y, z) &= -\psi(-x, -y, -z) && \implies \text{paridade ímpar ou negativa,}\end{aligned}$$

que podemos escrever como

$$\psi(\vec{r}) = \mathcal{P}\psi(-\vec{r}), \quad (22)$$

em que $\mathcal{P} = \pm 1$ representa a paridade. Na solução da equação relacionada a função de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ obtemos, por separação de variáveis:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = R(r)Y_{\ell,m},$$

e do termo referente aos *harmônicos esféricos* ($Y_{\ell,m}$) extraímos a paridade da autofunção nuclear, e assim temos

$$\mathcal{P} = (-1)^\ell, \quad (23)$$

em que ℓ (número quântico azimutal) é o referente ao nível energético do **núcleon desemparelhado**. Os possíveis valores de $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$, são, respectivamente, devido a $s, p, d, f, g, h, i, \dots$. Por exemplo, o $^{17}_8\text{O}$ tem um nêutron desemparelhado em $1d_{5/2}$, que fornece paridade par (ou positiva), pois $(-1)^2 = +1$, e spin $5/2$. Assim, escrevemos o spin-paridade do O-17 como $(\frac{5}{2})^+$, e está em acordo com o resultado experimental (confira em <http://www-nds.iaea.org/relnsd/vchart/>). No caso de dois núcleons desemparelhados multiplica-se as paridades obtidas individualmente. Por exemplo, para o $^{14}_7\text{N}$, os núcleons desemparelhados estão no nível $1p_{1/2}$. As paridades para cada núcleon desemparelhado é ímpar (-1) , e paridade do núcleo será $+1$, e está em acordo com o resultado experimental. No site oficial da IAEA, o spin-paridade é descrito por J^π , em que J representa o spin e π a paridade.

EM RESUMO

Núcleos par-par (A par e Z par)

Todos os núcleos par-par tem spin-paridade $J^\pi = (0)^+$, e até o momento não foram observados casos contrários.

Núcleos par-ímpar (A par e Z ímpar ou A ímpar e Z par)

O spin-paridade desses núcleos é obtido pelo dados do núcleon desemparelhado.

Núcleos ímpar-ímpar (A ímpar e Z ímpar)

Neste caso temos dois núcleons desemparelhados, então o spin é obtido pela soma e subtração dos spins dos núcleons desemparelhados. A paridade é calculada pelo produto das paridades dos núcleons desemparelhados, ou simplesmente por

$$\pi = (-1)^{\ell_p + \ell_n}, \quad (24)$$

em que ℓ_p e ℓ_n são, respectivamente, os valores do momento angular orbital para o próton e para o nêutron, desemparelhados. Esta equação pode ser usada em qualquer caso, desde que seja considerado nulo o núcleon emparelhado.

3 Um programa em linguagem Python para cálculos de propriedades nucleares

....

3.1 Definição das variáveis

....

Referências

DAS, A.; FERBEL, T. *Introduction to nuclear and particle physics*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1994.

PARRINGTON, J. R. et al. *Nuclides and Isotopes—Wall Chart Information Booklet*. San Jose—CA, 1996.