



Estimación de cantidades físicas involucradas en reacciones nucleares de fusión y transferencia de nucleones

Daniel David Castiblanco Castañeda

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá D.C., Colombia
2022

Estimación de cantidades físicas involucradas en reacciones nucleares de fusión y transferencia de nucleones

Daniel David Castiblanco Castañeda

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Físico

Director:
Diego Torres Ph.D.

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá D.C., Colombia
2022

Agradecimientos

En primera instancia, he de agradecer a mi madre y padre, quienes confiaron en mí y me dieron su apoyo incondicional a lo largo de esta etapa. A mi hermana y abuela, quienes estuvieron siempre ahí cuando lo necesité.

Además, a mis amigos y compañeros, en especial a mi amigo Iván, su compañía en los momentos difíciles fue tan importante para mí que es imprescindible un agradecimiento para él.

Y por último pero no menos importante, mis más sinceros agradecimientos al profesor Diego Torres por darme las bases, las herramientas y las sugerencias para finalizar con éxito este trabajo. Agradezco mucho el tiempo que se tomó para asesorarme en este proyecto.

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio de las reacciones nucleares de fusión-evaporación. Para ello, se recopiló un marco teórico semi-clásico para describir esta reacción nuclear. Se estimaron cantidades como la sección eficaz de formación del núcleo compuesto y diferentes residuos de la evaporación después de su formación, así como sus secciones eficaces (proporcionales al número de eventos), por medio de un código de Python. El código divide el proceso de formación del núcleo compuesto y su posterior decaimiento en varios núcleos residuales, lo que ocurre como una emisión secuencial de partículas. Para priorizar una descripción de primera aproximación, se abordaron en detalle diferentes modelos nucleares, de origen semi-clásico y estadístico, relacionados a los procesos de fusión proyectil-blanco, evaporación de partículas ligeras (n , p , α) y fisión.

Los valores obtenidos con la rutina computacional desarrollada se compararon con valores experimentales y resultados provenientes del código PACE. Se calcularon las secciones eficaces para alrededor de 90 reacciones propuestas que producen residuos con exceso de protones. Los resultados obtenidos, en general, muestran notables discrepancias, sobre todo en reacciones de núcleos pesados, aunque se encuentran diversas coincidencias incluso teniendo en cuenta las limitaciones del código. La razón principal para esta discrepancia puede estar asociada a la falta o sobreestimación de ciertos canales que puedan alterar la proporción de los eventos. Esto motiva un análisis más sofisticado en el futuro que pueda permitir una mayor variedad de canales.

Palabras clave: Reacción nuclear, fusión-evaporación, cascada de decaimientos, PACE.

Abstract

This work presents a study of fusion-evaporation nuclear reactions. For this, a semi-classical theoretical framework was collected to describe this nuclear reaction. Quantities such as the cross section of compound nucleus formation and various evaporation residues after its formation, as well as their cross sections (proportional to the events number), were estimated by means of a Python code. The code splits the compound nucleus formation process and its subsequent decay into several residual nuclei, which occurs as a sequential particle emission. In order to prioritize a first approximation theory, different nuclear models, with semi-classical and statistical origin, related to projectile-target fusion, light particle evaporation (n , p , α) and fission, were described in detail.

The values obtained with the computational routine developed were compared with experimental values and results from the PACE code. Cross sections were calculated for about 90 proposed reactions that produce residues with excess protons. In general, the results obtained show significant discrepancies, especially in heavy nuclei reactions, although some agreements are found even taking into account the limitations of the code. The main reason for this discrepancy may be associated with the lack or overestimation of some channels which may affect the proportion of events. This motivates a more sophisticated analysis in the future that could allow a wider range of channels.

Keywords: Nuclear reaction, fusion-evaporation, decay cascade, PACE.

Índice general

Índice general	i
Índice de figuras	ii
Índice de tablas	iv
Índice de notación y constantes	v
1 Introducción	1
2 Teoría semiclásica de la reacción de fusión evaporación	4
2.1 Conceptos preliminares	5
2.1.1 Barrera de Coulomb	5
2.1.2 Cinemática de la colisión, el marco de centro de masas	6
2.1.3 Energía de excitación, el valor Q	8
2.1.4 La sección eficaz de una reacción	9
2.1.5 Formalismo de ondas parciales para la sección eficaz	10
2.1.6 Caso inelástico: el potencial óptico	14
2.2 La sección eficaz de formación del núcleo compuesto	15
2.2.1 Sección eficaz de fusión sobre la barrera	16
2.2.2 Sección eficaz de fusión por debajo de la barrera	18
2.3 Principio de independencia de Bohr	20
2.4 Modelo estadístico para el decaimiento del núcleo compuesto	22
2.4.1 Fórmula de Weisskopf-Ewing	22
2.4.2 Densidad de estados nucleares	26
2.4.3 Ancho de decaimiento de fisión: el modelo de Bohr-Wheeler	29
3 Esquema del código de fusión-evaporación y resultados	33
3.1 Preliminares	34
3.2 Sección eficaz de fusión	34
3.3 Monte Carlo para el decaimiento del compuesto	36
3.4 Cascada de decaimientos secuenciales	38
3.5 Resultados	39
4 Conclusiones	48
Bibliografía	50

Índice de figuras

2.1	Energía potencial de interacción entre dos núcleos de número atómico Z_1 y Z_2 (no está a escala). A distancias grandes predomina la repulsión coulombiana mutua entre los núcleos $V_C = k_C e^2 Z_1 Z_2 / r$. La barrera de Coulomb V_{CB} es el punto de contacto de los núcleos: $r = r_{\text{contacto}} = R_1 + R_2$, donde R_1 y R_2 son los radios nucleares. Si el núcleo incidente tiene energía cinética $E_{\text{inc}} \geq V_{CB}$, la fuerza nuclear fuerte actuará en este rango para producir fusión (representada en este caso por un pozo de potencial atractivo $-V_0$).	5
2.2	Colisión rasante de dos núcleos, proyectil de radio R_p (rojo) y blanco de radio R_t (azul). El núcleo blanco está estacionario en el origen inicialmente y el núcleo proyectil incide en dirección x con velocidad v_p y parámetro de impacto b	6
2.3	Representación de una interacción de una onda plana incidente con un centro dispersor (blanco). A grandes distancias del rango del potencial, la onda dispersada es una onda esférica (mediada por una distribución angular). El ángulo sólido $d\Omega$ podría representar el rango de observación de un detector. Los proyectiles rojos se muestran sólo por propósitos ilustrativos.	11
2.4	Ejemplo de dispersión para aplicar en la deducción de la sección eficaz clásica: un haz de partículas incide sobre un blanco que las dispersa por acción de un potencial. Analizando un anillo de posibles trayectorias de ancho db , se observa que el número de partículas que cruza el anillo se debe conservar después de la dispersión, contenido en otro anillo de tamaño diferente, acotado por las trayectorias mostradas.	17
2.5	A la izquierda: en azul, potencial nuclear (Bass, (2.50)) + Coulomb en función de r , para la fusión de $^{28}\text{Si} + ^{24}\text{Mg}$; en línea punteada, aproximación parabólica en la barrera. A la derecha: en azul, el coeficiente de transmisión de Hill-Wheeler (a $l = 0$) para esta reacción en función de $E^{(\text{CM})}$, comparado al coeficiente de <i>sharp-cut-off</i> clásico, en rojo. Aumentar l sólo traslada la barrera hacia la derecha.	19
2.6	Ilustración del proceso de fisión del núcleo compuesto de energía de excitación E^* : a medida que aumenta la deformación del estado base (sin deformación) q_{gs} , y si la energía es la suficiente para superar la barrera de fisión B_f en el punto de silla q_{sd} , el compuesto puede fisionarse en el punto de escisión q_{sc} , quedando con una energía de excitación en el punto de silla E_f^* (tras invertir una energía ϵ_f asociada al parámetro de deformación).	30

3.1	Secciones eficaces de fusión en función de la energía de los reactantes en el marco del centro de masas para las reacciones: $^{28}\text{Si}+^{24}\text{Mg}$ (izq.) y $^{20}\text{Ne}+^{27}\text{Al}$ (der.). Se comparan el resultado clásico (2.46), la fórmula de Wong (2.55) y resultados experimentales extraídos de [16, 23]. Nótese el cambio abrupto en la barrera del potencial V_B y, en la segunda reacción, el cambio debido a l_{crit} .	35
3.2	Distribución de probabilidad para la energía del eyectil x (sin normalizar) en función de ϵ_x (ecuación (2.68)), para neutrones (azul), protones (naranja) y ^4He (verde). Se muestran para los núcleos compuestos ^{64}Zn (izq.) y ^{32}S (der.). Nótese que para valores menores a las respectivas barreras de Coulomb, la probabilidad de emisión es nula. El área bajo la curva es el ancho de decaimiento Γ_x .	37

Índice de tablas

3.1	Primer ejemplo de los resultados obtenibles del código realizado en este trabajo.	41
3.2	Segundo ejemplo de los resultados obtenibles del código realizado en este trabajo.	42
3.3	Secciones eficaces de la reacción de fusión evaporación, (1) calculadas con el código desarrollado en este documento, (2) consultadas en el código PACE, y (3) experimentales consultadas en [2]. Para cada una de las reacciones seleccionadas se muestran, los números de masa y atómico del residuo, proyectil, blanco y la energía del proyectil incidente ($E = E^{(\text{lab})}$). Se incluyen las incertidumbres de los valores experimentales (sólo de los valores que sí se están presentes en la referencia).	44

Índice de notación y constantes

p, P	Símbolo de núcleo proyectil (<i>projectile</i>)
t, T	Símbolo de núcleo blanco (<i>target</i>)
cn, C	Símbolo de núcleo compuesto (<i>compound nucleus</i>)
R	Símbolo de núcleo residual (<i>residue</i>)
x	Símbolo de núcleo eyectil (<i>ejectile</i>)
\mathbf{a}	Vector de magnitud a
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$	Vectores unitarios del sistema de coordenadas cartesiano (x, y, z)
$a \rightarrow b$	Transición de un sistema (de núcleos) del estado a al b
E^*	El asterisco denota <i>excitación</i> (energía o de un núcleo)
CM	Asociado al centro de masas (<i>center of mass</i>)
CB	Asociado a la barrera de Coulomb (<i>Coulomb barrier</i>)
Δ, ME	Exceso de masa (<i>mass excess</i>)
SQ	Símbolo químico
A, Z, N	Número de masa, número atómico y número de neutrones de un núcleo
n, p, α, f	Neutrón, protón, partícula alfa o ^4He , fisión
MeV	Mega-electronvoltio, unidad de energía, $10^6 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-13} \text{ J}$
fm	Femtómetro o <i>fermi</i> , unidad de longitud, 10^{-15} m
b	Barn, unidad de área, $10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$
h	Constante de Planck, $4.136 \times 10^{-21} \text{ MeV s}^{-1}$
$\hbar = h/2\pi$	Constante de Planck reducida, $6.582 \times 10^{-22} \text{ MeV s}^{-1}$
c	Velocidad de la luz en el vacío, $2.998 \times 10^{23} \text{ fm s}^{-1}$
e	Magnitud de la carga del electrón, $1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
k_C	Constante de Coulomb, $8.988 \times 10^9 \text{ J m C}^{-2}$
m_u	Unidad de masa atómica, $1.661 \times 10^{-27} \text{ kg}$
$\hbar c$	197.3 MeV fm
$m_u c^2$	931.5 MeV
$k_C e^2$	1.44 MeV fm

Capítulo 1

Introducción

Poco después del descubrimiento del núcleo atómico a principios del s. XX debido a los trabajos de E. Rutherford, se observó la primera reacción nuclear inducida en 1919, y desde entonces, la dinámica detrás de las reacciones nucleares rápidamente acaparó la atención de los científicos hasta ser una de las áreas de investigación más llamativas en física desde hace décadas, no sólo en física nuclear, sino también en física médica, astrofísica, energía nuclear y otros campos.

Las reacciones nucleares se basan en permitir el impacto de núcleos atómicos (p. ej., de un acelerador o una fuente radiactiva) en un cierto material, de modo que puede haber la posibilidad de un cierto cambio o transmutación observable de los núcleos en el material [13]. Este proceso es clave para la creación de nuevos núcleos atómicos tanto estables como radioactivos, pero también ayuda a revelar pistas sobre la estructura e interacción nuclear.

Predecir y calcular cantidades de interés para el área de física nuclear es una tarea tan importante como compleja. La teoría de primeros principios no ofrece un tratamiento accesible de la estructura del núcleo. Analizar el núcleo desde sus constituyentes y la interacción fuerte (o más precisamente, por medio de la interacción residual entre nucleones), en los rangos de energía de la física nuclear, es uno de los problemas vigentes más importantes (y difíciles) en física. Así, debido a la complejidad de la teoría de la interacción fuerte, es muy difícilmente aplicable en la física nuclear.

Por esta razón, múltiples formalismos basados en modelos fenomenológicos y simplificaciones de la estructura del núcleo son lo estándar en física nuclear; es decir, aún no existe un modelo completo, accesible y de primeros principios del núcleo, sino que se debe recurrir a diferentes descripciones para tener una idea de la imagen completa.

Dependiendo de lo que se quiera estudiar del núcleo atómico (forma, distribución de estados, estabilidad, decaimiento, energías de excitación, espín de los estados, tiempos de vida, deformaciones cuadrupolares, momentos magnéticos, etc.), la mecánica cuántica (no-relativista), la mecánica estadística o incluso la mecánica clásica, ofrecen una amplia variedad de modelos para describir las cantidades de interés.

No obstante, aún considerando al núcleo como formado de un sistema de nucleones (despreciando su estructura) y ligados por un potencial nuclear según la mecánica cuántica, hacer cálculos de reacciones nucleares en núcleos pesados resulta en expresiones sumamente complicadas al constituir un problema de muchos cuerpos [24]. De este modo, se prefieren dos formas más simples y útiles de ver el núcleo: (1) que el núcleo se considere una partícula (sin estructura) sometida a un potencial efectivo dentro del núcleo (para utilizar la mecánica cuántica, p. ej.), o (2) un sistema de nucleones independientes

confinados en el núcleo (para utilizar métodos estadísticos, p. ej.).

Y ahora, pasando de hablar de un sólo núcleo, a la interacción entre varios núcleos, surge la idea de las reacciones nucleares. Dos núcleos pueden interactuar por la repulsión coulombiana por sus cargas positivas y por la interacción nuclear de corto alcance (una vez están lo suficientemente cerca). Si la energía no es lo suficiente para no romper la barrera de Coulomb, podrán “colisionar” (colisión elástica) como partículas clásicas o bien intercambiar energía en el proceso alterando sus estados de energía (colisión inelástica). Pero si la energía es lo suficiente para romper la repulsión de Coulomb, pueden acercarse tanto que la interacción fuerte podrá re-organizar la estructura de nucleones de ambos, transfiriendo nucleones o incluso fusionándolos.

Esta transferencia altera por completo la estructura de los núcleos, y no siempre resultará en nuevos núcleos estables: dependiendo de la distribución de protones o neutrones, el núcleo será más o menos ligado y podrá ser susceptible de fragmentarse.

Lo que pase después de esta primera interacción abre la puerta a una interesante gama de reacciones: p. ej., espalación (se expulsan varios fragmentos del núcleo debido directamente a la fusión), emisión gamma inducida (des-excitación del núcleo por la emisión de fotones debido a la excitación por el choque), fisión inducida (división binaria de un núcleo pesado en aprox. dos mitades debido al choque), reacciones directas (transferencia de energía o nucleones *casi* inmediata), o las que son de interés en este trabajo, reacciones de núcleo compuesto o *fusión-evaporación*.

En las reacciones de fusión-evaporación, en contraste a las reacciones directas, tras la fusión se logra formar un compuesto, que aunque de *larga* vida, es inestable al adquirir excitación por el intercambio de nucleones y energía. Después de la fusión, hay una redistribución equitativa de la energía entre los nucleones, una especie de equilibrio termodinámico, para después pasar a un proceso de emisión de partículas, de modo que puede decaer de varias formas para librarse de esa excitación y quedar estable de nuevo. Esta “liberación” no sólo se puede lograr quitándose un exceso de nucleones, por medio de la emisión o *evaporación* de partículas, sobre todo ligeras, como neutrones, protones, partículas alfa, deuterones, etc., sino también por fisión espontánea si el compuesto es lo suficientemente pesado, o bien por emisión gamma espontánea quitándose un exceso de energía.

Tras la des-excitación en esta reacción, muchos tipos de núcleos residuales pueden resultar, debido los diferentes caminos en los que se puede dar el decaimiento. Este método ha sido clave en el descubrimiento de muchos isótopos, que han sido descubiertos en reacciones de fusión-evaporación para iones pesados [14], sobre todo en núcleos deficientes de neutrones [12], y es una ruta cada vez más prometedora para la síntesis de elementos súper-pesados [13]. Esta reacción también es utilizada para poblar estados de alto espín de varios núcleos [12].

Además, la rata de decaimiento (número de decaimientos por unidad de tiempo) para diferentes modos, el mecanismo de fusión y la frecuencia de aparición de unos núcleos sobre otros son medios útiles para estudiar las propiedades e interacción entre núcleos complejos.

En la literatura es escaso encontrar, de forma detallada y completa, el desarrollo de la teoría de una reacción de fusión-evaporación desde cero. Esto dificulta la difusión de la información para nuevos estudiantes interesados en aprender del tema, teniendo en cuenta que la teoría detrás de una reacción así puede hacerse tan compleja como se quiera. Acá se toma esto como motivación para recopilar información de este tema en un marco teórico completo, pero accesible, lo que puede lograrse desde una perspectiva

semi-clásica. En este, el objetivo central es describir métodos para determinar la *sección eficaz* de la reacción (de fusión y de evaporación en cada posible residuo), que cuantifica su *probabilidad* de ocurrencia.

En este trabajo se presentará un compendio de la teoría necesaria para comprender cómo funciona la reacción de fusión-evaporación desde cero, priorizando un marco teórico semi-clásico, de primera aproximación y que contenga las ideas físicas principales detrás de la reacción; este es el contenido del capítulo 2. El marco teórico a investigar no tiene como objetivo conseguir resultados de gran precisión (lo que requeriría una complejidad más allá del alcance de este trabajo), sino que pueda dar una primera idea de cómo simular esta reacción en la práctica.

Además, se busca aplicar esta teoría en la construcción de un código que pueda calcular las cantidades físicas involucradas en la reacción, sobre todo la estimación de los residuos finales del decaimiento del compuesto y las respectivas secciones eficaces. Para esto, el lenguaje de programación Python muestra una opción que no ha sido extensivamente explorada en este tipo de códigos, además de ser un lenguaje con una sintaxis accesible y flexible. En adición, se busca comparar con resultados de referencia (otro código o experimentales) para evaluar el desempeño de la teoría escogida y motivar a posibles modificaciones o mejoras en el futuro. Esto se estudia en el capítulo 3.

Capítulo 2

Teoría semiclásica de la reacción de fusión evaporación

Antes de discutir la física detrás de las colisiones nucleares, es importante tener en cuenta de qué forma se lleva a cabo una reacción nuclear y qué elementos entran en juego. Una reacción nuclear general involucra la colisión de dos núcleos para producir dos o más núcleos resultantes.

Existen diferentes mecanismos en los cuales una reacción puede ocurrir; p. ej., dos núcleos pueden interactuar sin cambiar (dejándolos en su estado base), por una colisión elástica, o bien podrían ascender a estados excitados, en una colisión inelástica, o podrían transferirse nucleones en una reacción directa (sin un compuesto intermediario). El mecanismo de interés es una reacción de *fusión-evaporación*, donde los núcleos iniciales se fusionan en un núcleo compuesto, y que termina en fisión o decayendo en un núcleo residuo por la evaporación de partículas o núcleos más pequeños [14].

Una reacción nuclear de este estilo puede escribirse como:

$$P + T \rightarrow C^* \rightarrow x + R, \quad (2.1)$$

donde un núcleo *proyectil* P (de número de masa A_p y atómico Z_p) incide sobre un núcleo *blanco* T (de número de masa A_t y atómico Z_t), que se fusionarán en un *núcleo compuesto* intermedio C^* (de número de masa $A_p + A_t$ y atómico $Z_p + Z_t$), el cual, por lo general, se encuentra en un estado altamente excitado por la alta energía del proyectil, de ahí el asterisco. La energía de excitación permite la emisión de partículas, que es independiente del modo de formación (es decir, el núcleo pierde "memoria" de cómo fue formado), como se verá más adelante. Este decae en el núcleo *residual* R y el *eyectil* x (una partícula más ligera eyectada o *evaporada*, p. ej., un protón, neutrón o partícula alfa) [11]. De forma más compacta, esta reacción suele denotarse $T(P, x)R$.

Esta reacción produce un re-arreglo de los nucleones constituyentes del par de núcleos iniciales. Este re-arreglo, en principio puede darse de múltiples posibilidades, denominadas *canales de decaimiento* (de salida), con diferentes probabilidades de ser producidos. Para cada canal, esta probabilidad depende de la energía del proyectil y es cuantificada por la *sección eficaz*, cantidad crucial en la descripción de una reacción nuclear.

El objetivo de este estudio es: (1) modelar la formación del núcleo compuesto y, (2) estimar las diferentes probabilidades de decaimiento en los canales de salida, con un soporte teórico a primera aproximación. En lo que sigue se tratan los modelos y cantidades involucradas detrás de la reacción anterior haciendo uso de aproximaciones semiclásicas.

2.1 Conceptos preliminares

2.1.1 Barrera de Coulomb

Previo a la posibilidad de fusión entre dos núcleos dados, el primer obstáculo que deben superar para producirla es la repulsión electrostática entre ellos, puesto que ambos tienen cargas positivas.

A medida que la distancia r entre ellos es menor, la repulsión electrostática crece, como dicta la ley de Coulomb. Puesto que los núcleos tienen una extensión apreciable, la interacción coulombiana se hará máxima hasta que estén en contacto, es decir, si se asumen los núcleos como esferas de densidad uniforme y radios R_1 y R_2 , la distancia de contacto es la suma de sus centros. Más allá del contacto, la interacción nuclear fuerte, de carácter atractiva, predomina, haciendo posible la fusión. Esta situación se muestra en la figura (2.1).

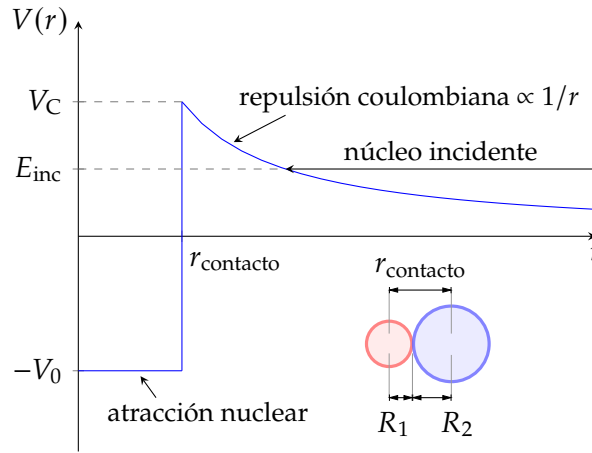


Figura 2.1: Energía potencial de interacción entre dos núcleos de número atómico Z_1 y Z_2 (no está a escala). A distancias grandes predomina la repulsión coulombiana mutua entre los núcleos $V_C = k_C e^2 Z_1 Z_2 / r$. La barrera de Coulomb V_{CB} es el punto de contacto de los núcleos: $r = r_{\text{contacto}} = R_1 + R_2$, donde R_1 y R_2 son los radios nucleares. Si el núcleo incidente tiene energía cinética $E_{\text{inc}} \geq V_{CB}$, la fuerza nuclear fuerte actuará en este rango para producir fusión (representada en este caso por un pozo de potencial atractivo $-V_0$).

Explícitamente, la barrera de Coulomb toma la forma:

$$V_{CB} = k_C e^2 \frac{Z_1 Z_2}{R_1 + R_2} = 1.44 \frac{Z_1 Z_2}{R_1 + R_2} [\text{MeV}], \quad (2.2)$$

donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos de los núcleos, R_1 y R_2 sus respectivos radios (en fm = 10^{-15} m) y $k_C = 5.62 \times 10^{37} \text{ MeV fm C}^{-2}$ es la constante de Coulomb.

Este resultado puede trabajarse un poco más con la ayuda de la expresión aproximada del radio R de un núcleo de número de masa A . Asumiendo un núcleo esférico, el número de nucleones por unidad de volumen es aproximadamente constante. De esto se puede concluir que el número de masa A es proporcional al volumen del núcleo, o más específicamente, $R \propto A^{1/3}$.

Experimentalmente se ha determinado que:

$$R = r_0 A^{1/3} [\text{fm}], \quad (2.3)$$

donde $r_0 = 1.2$ fm, aproximadamente [13].

Con esto en cuenta, la ecuación (2.2) se puede escribir alternativamente como:

$$V_{CB} = 1.2 \frac{Z_1 Z_2}{A_1^{1/3} + A_2^{1/3}} [\text{MeV}], \quad (2.4)$$

donde A_1 y A_2 son los números de masa de los núcleos involucrados.

Más precisamente, no sólo la interacción coulombiana no interviene en la barrera de fusión, sino que el potencial nuclear y el potencial centrífugo intervienen significativamente en la barrera, haciendo que su altura sea diferente y su posición no sea exactamente $R_1 + R_2$ como se verá adelante. Sin embargo, esta cantidad es una buena primera idea para ver la posibilidad de fusión [5].

2.1.2 Cinemática de la colisión, el marco de centro de masas

La barrera de Coulomb a superar por el núcleo proyectil para producir fusión es requerida en el marco de referencia del centro de masas (CM) [5, 14]. Por esta razón, las cantidades cinemáticas del sistema (como energía o momentum angular) deben analizarse en el marco del centro de masas para estudiar la posibilidad de la fusión. También es conveniente expresar las cantidades de la reacción en este marco dado que son más familiares en ciertas situaciones (p. ej., donde el blanco es mucho más masivo que el proyectil).

Aquí se analizan estas cantidades en la colisión inelástica de dos núcleos, en la que el proyectil incide sobre el blanco y se fusionan en el núcleo compuesto. De acá en adelante se usan los subíndices “p” y “t” para denotar al proyectil y al blanco. Se asume una colisión rasante (*grazing*) de dos esferas, una el blanco de radio R_t y otra el proyectil de radio R_p (esta situación es de utilidad puesto que el momentum angular es máximo). Un esquema de esta situación se muestra en la figura (2.2).

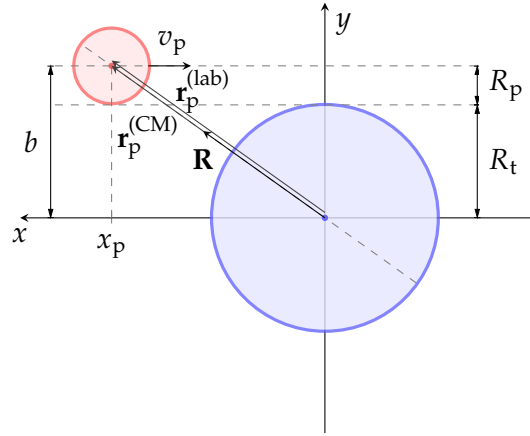


Figura 2.2: Colisión rasante de dos núcleos, proyectil de radio R_p (rojo) y blanco de radio R_t (azul). El núcleo blanco está estacionario en el origen inicialmente y el núcleo proyectil incide en dirección x con velocidad v_p y parámetro de impacto b .

Según la figura (2.2), en el marco de referencia del laboratorio, inicialmente, el blanco se encuentra en reposo en el origen (las fluctuaciones térmicas son despreciables a la escala de MeV de las reacciones nucleares) y el proyectil tiene posición y velocidad

(específicamente de su centro) dadas por $\mathbf{r}_p^{(\text{lab})} = x_p \hat{\mathbf{x}} + b \hat{\mathbf{y}}$ y $\mathbf{v}_p^{(\text{lab})} = -v_p \hat{\mathbf{x}}$. En este caso, el centro de masas está dado por $\mathbf{R} = m_p \mathbf{r}_p / M$, donde $M = m_p + m_t$.

La energía cinética total en el marco del laboratorio está dada por (en unidades de MeV):

$$E^{(\text{lab})} = \frac{1}{2} m_p v_p^2. \quad (2.5)$$

Es más frecuente conocer la energía (usualmente por nucleón) del haz incidente que la velocidad, por lo que esta ecuación permite expresar la velocidad en términos de $E^{(\text{lab})}$.

El momentum angular total (asumiendo que las esferas no rotan) en el marco del laboratorio está dado por:

$$\mathbf{L}^{(\text{lab})} = \mathbf{r}_p^{(\text{lab})} \times m_p \mathbf{v}_p^{(\text{lab})} = m_p v_p b \hat{\mathbf{z}} = m_p v_p (R_p + R_t) \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.6)$$

donde en la última igualdad se tuvo en cuenta la condición de colisión rasante $b = R_p + R_t$ dada por la figura (2.2). Estos radios nucleares pueden estimarse con la ecuación (2.3).

Para transformar estas cantidades al marco del centro de masas, se define la transformación como $\mathbf{r}^{(\text{lab})} = \mathbf{r}^{(\text{CM})} + \mathbf{R}$, como ejemplifica la figura (2.2) con \mathbf{r}_p . Utilizando el centro de masas enunciado antes, se obtiene que:

$$\mathbf{r}_p^{(\text{CM})} = \left(1 - \frac{m_p}{M}\right) \mathbf{r}_p^{(\text{lab})} = \frac{m_t}{M} \mathbf{r}_p^{(\text{lab})}, \quad \mathbf{r}_t^{(\text{CM})} = -\frac{m_p}{M} \mathbf{r}_p^{(\text{lab})}, \quad (2.7)$$

En virtud de (2.7), la energía cinética total en el marco del centro de masas está dado por:

$$E^{(\text{CM})} = \frac{1}{2} m_p v_p^{(\text{CM})2} + \frac{1}{2} m_t v_t^{(\text{CM})2} = \frac{m_t^2}{M^2} E^{(\text{lab})} + \frac{m_p m_t}{M^2} E^{(\text{lab})} = \frac{m_t}{M} E^{(\text{lab})} = \frac{1}{2} \mu v_p^2, \quad (2.8)$$

donde en la última igualdad, $\mu = m_p m_t / (m_p + m_t)$ es la masa reducida de los núcleos reactivos. Nótese que la energía cinética vista desde el marco del laboratorio es mayor que aquella vista desde el centro de masas. Si esta energía en el marco del centro de masas $E^{(\text{CM})}$ resulta ser la requerida por la barrera de Coulomb V_{CB} , podrá alcanzarse la fusión; si es menor, el proyectil no podrá superar la barrera y producir fusión [14]. La ecuación (2.8) permite determinar la energía cinética mínima en el marco del laboratorio necesaria para la fusión:

$$E^{(\text{lab})} \geq E_{\text{mín}}^{(\text{lab})} = \frac{m_p + m_t}{m_t} V_{\text{CB}}. \quad (2.9)$$

En el caso del momentum angular, en el marco del centro de masas se tiene que:

$$\mathbf{L}^{(\text{CM})} = \mathbf{r}_p^{(\text{CM})} \times m_p \mathbf{v}_p^{(\text{CM})} + \mathbf{r}_t^{(\text{CM})} \times m_t \mathbf{v}_t^{(\text{CM})} = \frac{m_t^2}{M^2} \mathbf{L}^{(\text{lab})} + \frac{m_p m_t}{M^2} \mathbf{L}^{(\text{lab})} = \frac{m_t}{M} \mathbf{L}^{(\text{lab})}. \quad (2.10)$$

Con ayuda de (2.6), este momentum angular (en magnitud) puede expresarse como sigue:

$$L^{(\text{CM})} = \mu v_p b = p b = \mu v_p (R_p + R_t) = p (R_p + R_t), \quad (2.11)$$

donde se define p tal que $E^{(\text{CM})} = p^2 / 2\mu$ (no confundir con proyectil o protón), según la ecuación (2.8). Esta expresión de momentum angular estará relacionada con el momentum angular máximo (en unidades de \hbar) que contribuye a las ondas parciales de la sección eficaz.

Ahora, tras formarse el núcleo compuesto, la velocidad (en el marco del laboratorio) de este puede calcularse en virtud de la conservación de momentum lineal:

$$m_p \mathbf{v}_p^{(\text{lab})} = m_{\text{cn}} \mathbf{v}_{\text{cn}}^{(\text{lab})}, \quad (2.12)$$

donde se utilizó que el blanco está estacionario y se denota “cn” como el núcleo compuesto. Como debe conservarse el número de masa y carga total, la masa del núcleo compuesto es la del núcleo $A_p + A_t$, $Z_p + Z_t$. Esta difiere de $m_p + m_t$: mantener a los nucleones unidos en un sólo núcleo afecta a su masa efectiva. Este *defecto de masa* está relacionado con la *energía de ligadura*, que es la energía necesaria para separar el núcleo en sus nucleones constituyentes; esta siempre es positiva: la masa del núcleo siempre es menor que sus constituyentes puesto que se convierte masa de estos en energía para mantener unido el núcleo. Así, se obtiene que en magnitud:

$$v_{\text{cn}}^{(\text{lab})} = \frac{m_p}{m_{\text{cn}}} v_p. \quad (2.13)$$

Es claro que en el marco del centro de masas esta velocidad es nula, puesto que el núcleo compuesto es co-móvil al centro de masas.

Por último, respecto a las masas nucleares, vale la pena introducir el *exceso de masa*: la diferencia entre la masa del núcleo y el número de masa en unidades de masa atómica, o más específicamente:

$$\Delta = (m_{\text{núcleo}}(A, Z) - Am_u)c^2 \text{ [MeV]}, \quad (2.14)$$

donde m_u es la unidad de masa atómica, y $m_{\text{núcleo}}c^2$ y m_uc^2 están en MeV. Esta es una expresión de la *energía de ligadura* en referencia a la del ^{12}C (que define la unidad de masa atómica): si para un núcleo es positivo, entonces ese núcleo tiene una menor energía de ligadura que el ^{12}C , y si es negativo está más “ligado”. El valor de Δ depende de cada núcleo específico y está listado ampliamente en la literatura por lo que permite calcular masas nucleares con más accesibilidad y precisión (al medirse con referencia a la unidad de masa atómica) [13].

2.1.3 Energía de excitación, el valor Q

En virtud de otra conservación fundamental en reacciones nucleares, la conservación de la energía, si la fusión ocurre, la energía en el sistema del centro de masas se convierte en energía de excitación del núcleo compuesto que se mueve a la energía cinética del centro de masas; para convertir los reactantes en el compuesto, se necesita invertir energía en la formación del núcleo, es decir, convertir energía cinética en masa, esto se cuantifica por medio del *valor* Q [5]. Teniendo esto en cuenta, la energía de excitación del núcleo compuesto está dada por:

$$E^* = Q + E^{(\text{CM})}, \quad (2.15)$$

donde se define:

$$Q = (m_p + m_t - m_{\text{cn}})c^2 = (m_{\text{antes}} - m_{\text{después}})c^2 \text{ [MeV]}, \quad (2.16)$$

si las masas están en MeV/c^2 . Más específicamente, la *energía de excitación* E^* es la energía extra disponible para la evaporación, tras la formación del núcleo compuesto, es decir, la energía cinética y el momentum angular del proyectil son convertidas en la energía de excitación y el momentum angular del compuesto. Esta le permite acceder a un estado de

energía superior al estado base [14]. Esta da cuenta de dos contribuciones: la energía cinética de los reactantes y el *valor* Q (en el estado base de los reactantes, más específicamente), que da cuenta del cambio de masa tras la fusión.

Véase que como $A_{\text{cn}} = A_p + A_t$, entonces, por la ecuación (2.16):

$$Q = \Delta_p + \Delta_t - \Delta_{\text{cn}}. \quad (2.17)$$

Dependiendo de si el núcleo compuesto tiene mayor o menor masa que la suma de los reactantes, se libera o se absorbe energía en la reacción: si $Q > 0$, la reacción libera energía al transmutar energía en reposo en energía cinética, mientras que si $Q < 0$, la reacción debe absorber energía cinética para transmutarla en energía en reposo (masa nuclear), haciendo que el núcleo compuesto tenga menor energía cinética disponible. Si $Q = 0$, la reacción es elástica y la energía cinética se conserva [13].

La energía de excitación pone un límite sobre la energía de las partículas evaporadas, que removerán la excitación del compuesto. En esta evaporación, el canal de emisión neutrones se ve favorecido dado que partículas cargadas como protones o partículas alfa tienen mayor dificultad de eyectarse por la barrera de Coulomb [11].

2.1.4 La sección eficaz de una reacción

Teniendo en mente el estudio de la posibilidad de fusión y de canales de decaimiento, una cantidad física primordial en reacciones nucleares es la sección eficaz, que en esencia, cuantifica la probabilidad de interacción o reacción entre los reactantes.

Para definir apropiadamente la sección eficaz, supóngase que un haz de partículas (proyectiles) incide sobre cierto número de partículas blanco, con las que pueden interactuar. Esta interacción resulta en una dispersión de partículas en múltiples direcciones (sean las mismas partículas o nuevas).

Inicialmente, es útil pensar a la sección eficaz σ (medida en barns, $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$) como un área transversal efectiva de impacto de cada blanco, aunque su interpretación cambiará más adelante. Con esto en mente, en un tiempo Δt , la probabilidad de interacción proyectil-blanco puede escribirse como la razón entre partículas dispersadas en ese intervalo entre partículas incidentes, o bien, entre la razón del área transversal de impacto y el área transversal del haz incidente A (esta es la motivación para que σ tenga unidades de área):

$$\Delta P = \frac{\Delta N_{\text{disp}}}{N_{\text{inc}}} = \frac{\Delta N_{\text{blanco}} \sigma}{A}. \quad (2.18)$$

Observando que el flujo incidente de partículas está dado por $F_{\text{inc}} = N_{\text{inc}}/A\Delta t$ (número de partículas incidente por unidad de área y de tiempo), entonces la sección eficaz puede verse como [20]:

$$\sigma \equiv \frac{\text{número de interacciones por unidad de tiempo por blanco}}{\text{flujo incidente}} [\text{b}]. \quad (2.19)$$

Es importante notar que la ecuación (2.19) es la definición de sección eficaz, y que la interpretación de área efectiva sólo es una motivación. Como *la sección eficaz es proporcional a la probabilidad de interacción o de ocurrencia de una reacción*, esta interpretación es más adecuada para σ . Esta cantidad puede aplicarse a un proceso de interacción determinado (como a un canal, p. ej.) o a todos los posibles procesos. Además, la medida de partículas

dispersadas puede extenderse a la distribución de partículas dependiendo de la dirección, p. ej., donde es puesto un detector. Esto motiva la definición de la sección eficaz diferencial:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{número de interacciones por unidad de tiempo por } d\Omega \text{ por blanco}}{\text{flujo incidente}} [b], \quad (2.20)$$

definiendo el ángulo sólido $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ según la figura (2.3). Esta una distribución de las direcciones de dispersión (θ, ϕ) (usualmente no depende de ϕ) tal que:

$$\sigma_{\text{tot}} = \oint_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.21)$$

Para finalizar esta sección, es importante discutir cómo está relacionada la sección eficaz con el número de eventos detectados, p. ej., en el laboratorio.

La rata de eventos \dot{N}_{events} (totales o de un proceso específico) o el número de eventos N_{events} (número de interacciones haz-blanco) en un tiempo Δt pueden relacionarse con la sección eficaz según la definición (2.19):

$$\dot{N}_{\text{event}} = F_{\text{inc}} N_{\text{blanco}} \sigma, \quad \text{o,} \quad N_{\text{event}} = F_{\text{inc}} N_{\text{blanco}} \Delta t \sigma.$$

El flujo incidente puede calcularse como: $F_{\text{inc}} = \frac{N_{\text{inc}}}{A\Delta t} = \frac{N_{\text{inc}}}{A\Delta x} \frac{\Delta x}{\Delta t} = n_{\text{inc}} v_{\text{inc}}$, donde se consideró un recorrido de los proyectiles Δx , n_{inc} es el número de partículas incidentes por unidad de volumen y v_{inc} es su velocidad. En la práctica, no siempre el número de interacciones es el número de eventos detectados porque depende de la eficiencia del detector. Se observa que la sección eficaz es proporcional al número de eventos detectados, totales o de un proceso/canal específico.

2.1.5 Formalismo de ondas parciales para la sección eficaz

El paso siguiente es dar una forma de la sección eficaz de fusión como punto de partida. Para ello, la teoría de dispersión desde la mecánica cuántica (no relativista) es el marco teórico que permite encontrarla: la ecuación de Schrödinger permite describir el estado cuántico del sistema. De acá en adelante, se analizará el efecto de un sólo blanco sobre el proyectil; se asume que la interacción con el blanco está dada por un potencial central (dependiente de la distancia relativa r), y no se tiene en cuenta el espín de los núcleos.

Siguiendo a [7], considérese inicialmente una dispersión elástica. Como una ventaja de utilizar el marco del centro de masas, la ecuación de Schrödinger para un potencial central puede separarse en la descripción de la función de onda del sistema concentrado en el centro de masas y la función de onda ψ del sistema de masa reducida μ ; para esta última:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r) \psi(\mathbf{r}) = E^{(\text{CM})} \psi(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

donde \mathbf{r} es la coordenada que apunta de blanco al proyectil.

En ausencia de potencial, donde los proyectiles son enviados, la función de onda se toma como una onda plana definida por un vector de onda \mathbf{k} , donde $\hbar^2 k^2 / 2\mu = E^{(\text{CM})}$. Puede probarse que, inspeccionando la ecuación de Lippmann-Schwinger y más allá de la influencia de cualquier potencial de interacción, la onda incidente es modificada en la onda dispersada como una onda esférica, pero con una distribución angular mediada por una amplitud de dispersión $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, donde \mathbf{k}' es la dirección de dispersión en (θ, ϕ) , y

que para dispersión elástica (mediada por un potencial real), su magnitud es la misma que el vector incidente [19]. En resumen:

$$\psi_{\text{inc}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \xrightarrow{r \text{ grande}} \psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{disp}} = \psi_{\text{inc}} + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (2.23)$$

Esta situación se describe en la figura (2.3).

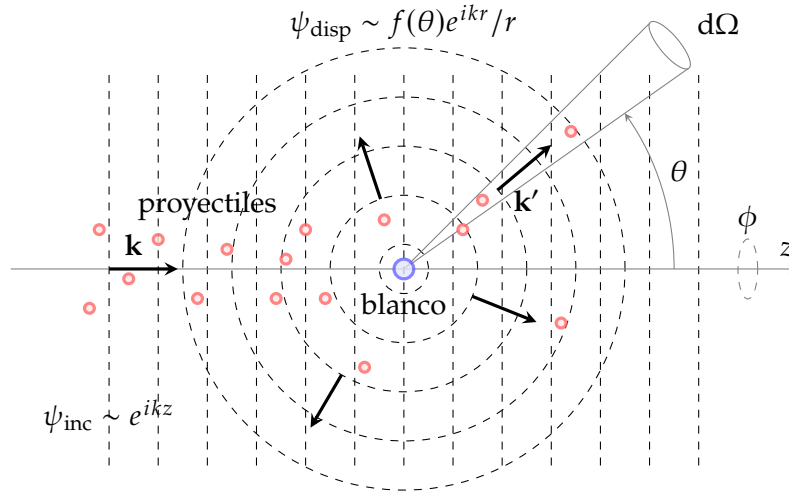


Figura 2.3: Representación de una interacción de una onda plana incidente con un centro dispersor (blanco). A grandes distancias del rango del potencial, la onda dispersada es una onda esférica (mediada por una distribución angular). El ángulo sólido $d\Omega$ podría representar el rango de observación de un detector. Los proyectiles rojos se muestran sólo por propósitos ilustrativos.

En general, la amplitud de dispersión depende de θ y ϕ , sin embargo, para potenciales centrales, esta no depende de ϕ .

Esta es una situación plausible en la práctica, donde un detector abarca cierto rango angular, caracterizado por el ángulo sólido $d\Omega$ y que está a distancias grandes lejos de la influencia de los potenciales de corto alcance (centrífugo o nuclear, p. ej.).

Para calcular la sección eficaz de esta situación, puede observarse la densidad de corriente de probabilidad: $\mathbf{j} = \hbar \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) / \mu$ está relacionada con el flujo de partículas; este es proporcional al flujo de probabilidad en la dirección de propagación (radial) [4]. Según la definición (2.20), teniendo en cuenta dispersión elástica y que $dA = r^2 d\Omega$, entonces para r grande [25]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\dot{N}_{\text{disp}}/d\Omega}{F_{\text{inc}}} = \frac{F_{\text{disp}} r^2}{F_{\text{inc}}} = \frac{j_{\text{disp}}^r r^2}{j_{\text{inc}}} = \frac{(\hbar k / \mu r^2) |f(\theta, \phi)|^2 r^2}{\hbar k / \mu} = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2.24)$$

Integrando sobre todo el ángulo sólido, se obtiene la sección eficaz total. Dependiendo de la interacción, la amplitud de dispersión será diferente y así, la sección eficaz. El factor de normalización de las funciones de onda, $1/(2\pi)^{3/2}$, no contribuye a la sección eficaz y por ello puede ignorarse [25].

Para dar una forma más interesante para la sección eficaz, la expansión en ondas parciales puede dar una forma útil para la amplitud de dispersión. Primero, se asume

que $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$ como indica la figura (2.3). La expansión en ondas esféricas (o en autoestados de momentum angular, $m = 0$ por simetría alrededor de z por el potencial central) es la motivación del problema [25]:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (2.25)$$

donde j_l es la l -ésima función de Bessel esférica y P_l es el l -ésimo polinomio de Legendre. A r grande: $j_l(kr) \rightarrow \sin(kr - l\frac{\pi}{2})/kr = (e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})})/2ikr$, de donde de esto último se puede observar que la expansión se divide en ondas esféricas expandiéndose y contrayéndose.

La función de onda tras la dispersión según la ecuación (2.22) (teniendo en cuenta simetría en ϕ) puede escribirse como:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta), \quad (2.26)$$

donde R_{kl} satisface la ecuación radial:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) r R_{kl} = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) r R_{kl}, \quad (2.27)$$

donde $k^2 = 2\mu E^{(\text{CM})}/\hbar^2$.

Como V es de corto alcance, para r grande, el potencial de dispersión se anula, luego R_{kl} y su tendencia asintótica están dadas por [25]:

$$R_{kl} = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}, \quad (2.28)$$

donde n_l es la l -ésima función de Neumann esférica. Véase que en ausencia de potencial, B_l debe anularse para que R_{kl} no diverja en $r = 0$. De este modo, la solución en el límite asintótico se escoge tendiendo al mismo límite que $j_l(kr)$ (asociada a la solución libre de $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$) pero quizá con diferente fase δ_l como sigue:

$$R_{kl} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr}. \quad (2.29)$$

Se observa que $A_l = \cos \delta_l$ y $B_l = -\sin \delta_l$. En efecto, cuando no hay potencial, los corrimientos de fase se anulan y se retorna a la solución libre, es decir, el efecto del potencial es de correr la solución en el límite asintótico. Se verá luego cómo estas fases caracterizan la sección eficaz de dispersión para un potencial dado.

De (2.26), se tiene que:

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{e^{i(kr-l\frac{\pi}{2}+\delta_l)} - e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2}+\delta_l)}}{2ikr} P_l(\cos \theta). \quad (2.30)$$

Por otro lado, de (2.23) (ignorando el factor de $1/(2\pi)^{3/2}$) y (2.25):

$$\psi = \psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{disp}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}}{2ikr} P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta). \quad (2.31)$$

Desarrollando, separando los coeficientes de e^{ikr}/r y e^{-ikr}/r y comparando (2.30) y (2.31), se obtiene que $a_l = (2l + 1)i^l e^{i\delta_l}$, y además:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) (S_l - 1) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta), \quad (2.32)$$

donde se definió $S_l = e^{2i\delta_l}$, que es la función de dispersión y es la forma más simple de la matriz de dispersión general [21]. Esta forma de la amplitud de dispersión ayudará a encontrar la sección eficaz elástica. Utilizando la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Legendre, $\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = 2\delta_{ll'}/(2l + 1)$, la sección eficaz total (elástica o de forma) puede calcularse de la diferencial (2.24):

$$\sigma_{\text{el}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \int_{4\pi} |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) |S_l - 1|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \delta_l, \quad (2.33)$$

donde se definen σ_l como las secciones eficaces parciales de la dispersión para cada estado de momentum angular.

Para potenciales de corto alcance, la contribución de valores de l está limitada por los efectos de la barrera centrífuga hasta un $l_{\text{máx}}$ [21]. Semi-clásicamente, para un rango b : $l\hbar \leq pb$ o $l \leq kb$ (ecuación (2.11)). Esto puede entenderse como sigue: fuera del rango de potencial, sólo la barrera centrífuga $l(l + 1)\hbar^2/2\mu r^2 \approx l^2\hbar^2/2\mu r^2$ entra en acción; en $r = b$, esta barrera es más grande que $E^{(\text{CM})} = \hbar^2 k^2/2\mu$ para todo $l > kb$, entrando a la región clásicamente prohibida y prácticamente suprimiendo estas ondas parciales [7].

Una primera aproximación de este límite clásico está dada por el resultado geométrico (2.11): l_{grazing} . Tener en cuenta efectos de otras interacciones disminuirá este $l_{\text{máx}}$ como se verá más adelante.

La ecuación (2.33) permite calcular la sección eficaz de una interacción mediada por un potencial, si los corrimientos de fase son determinados solucionando, numéricamente p. ej., las correspondientes funciones de onda desde $r = 0$ y uniéndolas (suavemente) con las soluciones asintóticas [7]: si b es el rango del potencial (no tiene por qué ser estrictamente el límite, puede ser mayor) y $y_l = rR_{kl}$ (función de onda radial calculada en $0 < r < b$), entonces:

$$\delta_l = -\arctan\left(\frac{bj'_l(kb) - \rho_l b j_l(kb)}{bn'_l(kb) - \rho_l b n_l(kb)}\right), \quad (2.34)$$

donde $\rho_l = y'_l(b)/y_l(b)$ es la derivada logarítmica de y_l en $r = b$.

Para un potencial real, se tendrá dispersión elástica. No obstante, en una reacción nuclear, la componente inelástica es fundamental en su descripción: en la siguiente sección se verá su tratamiento.

Por último, el tratamiento anterior es sólo apropiado para partículas sin carga. La interacción coulombiana no cuenta como potencial de corto alcance por su dependencia con $1/r$ que distorsiona la onda incluso a grandes distancias [20]. Un tratamiento análogo al anterior ahora teniendo un potencial nuclear y de Coulomb $V_C + V_N$ asume que en el límite asintótico sólo V_N se anula, las soluciones de la ecuación de Schrödinger ya no son las de Bessel sino las de Coulomb (regular e irregular) $F_l(\eta, kr)$ y $G_l(\eta, kr)$ ($\eta = Z_1 Z_2 \alpha c \mu / \hbar k$ es el parámetro de Sommerfeld, α es la constante de estructura fina), y se puede probar que [7]:

$$f(\theta) = f_C(\theta) + f_N(\theta) = f_C(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) e^{2i\sigma_l} (S_l - 1), \quad (2.35)$$

donde $\sigma_l = \arg \Gamma(1 + l + i\eta)$ son los corrimientos de fase de Coulomb, Γ es la función gamma y f_C es la amplitud de dispersión de Coulomb:

$$f_C(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\sigma_l} - 1). \quad (2.36)$$

De nuevo, para un potencial de corto alcance, la suma de f_N se trunca a un $l_{\text{máx}}$, que siguiendo a un análisis como el de antes da $l_{\text{máx}} = kb\sqrt{1 - 2\eta/kb}$. Los corrimientos de fase nucleares se siguen hallando como antes en (2.34) pero cambiando las funciones de Bessel (multiplicadas por b) por Coulomb.

2.1.6 Caso inelástico: el potencial óptico

En una colisión nuclear, la presencia de otros procesos diferentes a los elásticos dan cuenta de la “absorción” de corriente de probabilidad en el proceso. A continuación se verá el cómo incorporar un potencial complejo puede ayudar a describir fenómenos de absorción y dispersión inelástica.

En analogía con la dispersión de luz por una esfera refractora y absorbente, el *modelo óptico* se basa en dar una forma de potencial complejo, de corto alcance y esféricamente simétrico [5]: $V_{\text{opt}}(r) = V(r) + iW(r)$. La parte compleja se da en analogía con la parte imaginaria de absorción del índice de refracción complejo en óptica ondulatoria [7].

Es bien conocido que al tener un potencial real en la ecuación de Schrödinger, la probabilidad se conserva (según la ecuación de continuidad asociada). No obstante, si ese potencial cuenta con una parte imaginaria no nula, puede probarse que esta es responsable de una pérdida de flujo elástico como sigue: si \mathbf{j} es la densidad de corriente de probabilidad entonces:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = \nabla \cdot \frac{\hbar}{\mu} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar}{2\mu i} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*). \quad (2.37)$$

De la ecuación (2.22), se obtiene que $\nabla^2 \psi = 2\mu(V_{\text{opt}} - E^{(\text{CM})})\psi/\hbar^2$, luego:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = \frac{1}{i\hbar} (V_{\text{opt}} - E^{(\text{CM})} - V_{\text{opt}}^* + E^{(\text{CM})}) |\psi|^2 = \frac{2}{\hbar} \text{Im}(V_{\text{opt}}) |\psi|^2 = \frac{2}{\hbar} W(r) |\psi|^2. \quad (2.38)$$

Nótese que en efecto, si el potencial fuera real, $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ y la probabilidad se conserva (recuérdese que ψ es independiente del tiempo). Se observa que W provee un sumidero de probabilidad, concepto útil para modelar absorción o decaimiento. Este concepto puede llevarse más allá definiendo la sección eficaz para absorción en el canal elástico, y siguiendo la misma idea de la ecuación (2.24) pero con el flujo *total* y no sólo el dispersado [5, 11]:

$$d\sigma_{\text{abs}} = \frac{-\mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}}{j_{\text{inc}}}, \quad \text{luego,} \quad \sigma_{\text{abs}} = \frac{-1}{\hbar k/\mu} \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = -\frac{1}{v} \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} dV, \quad (2.39)$$

donde $v = \hbar k/\mu$. El signo menos fue introducido para dar cuenta que se considera el flujo *hacia dentro* del volumen V (un sumidero), teniendo en cuenta que $d\mathbf{S}$ se define apuntando hacia afuera. Reemplazando (2.38) en (2.39) se tiene:

$$\sigma_{\text{abs}} = -\frac{2}{\hbar v} \int_V W(r) |\psi|^2 dV. \quad (2.40)$$

Esta ecuación ofrece a un método para hallar la sección eficaz si ψ es calculada numéricamente. Además, se observa que σ_{abs} es positiva para un W negativo.

Ahora véase que, (2.39) podría reescribirse bajo el análisis de ondas parciales, sin hacer referencia a un potencial específico.

Usando la ecuación (2.30), puede calcularse con la densidad de corriente (radial) *hacia adentro*:

$$j^r = -\frac{\hbar}{\mu} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi \right), \quad (2.41)$$

y así, la sección eficaz se calcula el flujo neto en virtud de la ecuación (2.39), integrando la expresión anterior [5]:

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)T_l. \quad (2.42)$$

donde se definió en coeficiente de transmisión como $T_l = 1 - |S_l|^2$, ingrediente esencial para el modelo estadístico de la sección eficaz de fusión-evaporación. Semi-clásicamente, el l -ésimo coeficiente de transmisión puede interpretarse con la probabilidad que una onda parcial dada sea absorbida ($0 \leq T_l \leq 1$) [5].

Si la dispersión elástica fuera el único proceso que pudiera ocurrir, entonces $|S_l| = 1$, como en la ecuación (2.33). Sin embargo, la presencia de otros procesos en adición a este, como dispersión inelástica, absorción, fusión, etc., hacen que $|S_l| < 1$ (de otro modo σ_{abs} se anularía) [13], lo que implica que los corrimientos de fase tengan una parte imaginaria no nula. Esto, de hecho, es consecuencia del potencial óptico, puesto que la parte imaginaria del potencial termina afectando a las ondas planas, agregando atenuación en su amplitud por un número de onda complejo [21]. Más explícitamente, de la ecuación (2.34) se observa que si el potencial es complejo, y_l es compleja y los corrimientos de fase también.

El tratamiento directo con el potencial óptico ofrece una alternativa general y precisa, donde se soluciona la ecuación de Schrödinger desde $r = 0$ y como se denotó en la anterior sección, conectándola con la solución asintótica en el rango del potencial, obteniendo las funciones de dispersión S_l . Los parámetros de los potenciales son ajustados minimizando χ^2 comparando las secciones eficaces con datos experimentales [13].

La forma estándar del potencial óptico se basa en escoger su parte real el potencial coulombiano y uno de la forma de Woods-Saxon, mientras que la parte imaginaria, se toma una forma *superficial* como la derivada del de Woods-Saxon [5].

2.2 La sección eficaz de formación del núcleo compuesto

La sección eficaz total de un proceso se puede escribir entonces como $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{abs}}$, con ayuda de (2.33) y (2.42). No obstante, como se verá más adelante, la sección eficaz de interés para obtener la sección eficaz de la reacción de fusión-evaporación será la de fusión o formación del compuesto, es decir, (2.42).

Más rigurosamente, la absorción es sólo una parte de la *sección eficaz de reacción*, que por definición, engloba todos los procesos que no hacen parte del canal elástico [13]. Pero puede argumentarse que en el proceso de fusión, si la energía de excitación es lo suficientemente alta (sobre 10 MeV), esta sección eficaz es en esencia la de absorción (si la energía es muy alta, la dispersión profundamente inelástica juega un papel clave). En caso contrario, es usual añadir una probabilidad parcial de fusión F_l en la suma de ondas

parciales, que dé cuenta de la probabilidad de que la absorción en el canal elástico lleve a la fusión [5]. Pero por simplicidad, se asumirá que una vez los núcleos han pasado la barrera de fusión, siempre formarán un núcleo compuesto.

La expresión (2.42) es un buen punto de partida para parametrizar la sección eficaz de fusión, incluso partiendo de modelos que no usan el potencial óptico como tal. En lo que sigue, se hará uso de modelos simples y fenomenológicos acerca de los coeficientes de transmisión y un potencial nuclear real.

2.2.1 Sección eficaz de fusión sobre la barrera

Una primera aproximación de la sección eficaz de fusión puede darse considerando un caso clásico, donde proyectil y blanco interactúan dependiendo de su *parámetro de impacto* (véase figura (2.2), p. ej.): si $b < b_{\text{máx}}$, el proyectil puede sentir la interacción nuclear y fusionarse, en otro caso, ocurrirá dispersión elástica.

Siguiendo a [7], y suponiendo que el potencial de interacción está compuesto por un potencial de dispersión coulombiano + nuclear V y un potencial centrífugo:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{L^{(\text{CM})^2}}{2\mu r^2} = V(r) + \frac{p^2 b^2}{2\mu r^2} = V(r) + E^{(\text{CM})} \frac{b^2}{r^2}. \quad (2.43)$$

donde se usó p definido en la ecuación (2.11). Este potencial incluye nuevos términos que contribuyen a la barrera de Coulomb.

El potencial coulombiano y el nuclear forman una barrera en $r = R_B$ y de altura $V_B = V(R_B)$ (como la de la figura (2.1)). Al juntarla con el potencial centrífugo, se forma un "pozo" de potencial (si b no es muy grande), de modo que el potencial es repulsivo fuera de la barrera y atractivo en el pozo (véase la ref. [7]).

Para una $E^{(\text{CM})}$ fija, b hace aumentar la altura de la barrera. A un b pequeño, $V_{\text{eff}}(R_B) < E^{(\text{CM})}$, es decir, hay fusión. Si b es grande, $V_{\text{eff}}(R_B) > E^{(\text{CM})}$, luego, no hay fusión. Esto implica que hay un $b_{\text{máx}}$, que cumple $V_{\text{eff}}(R_B) = E^{(\text{CM})}$, luego (asumiendo que la barrera del potencial efectivo no se desplaza significativamente de R_B):

$$V_B + E^{(\text{CM})} \frac{b_{\text{máx}}^2}{R_B^2} = E^{(\text{CM})}, \quad \text{por tanto,} \quad b_{\text{máx}} = R_B \sqrt{1 - \frac{V_B}{E^{(\text{CM})}}}. \quad (2.44)$$

Ahora, se analiza un anillo de parámetro de impacto, es decir, parámetros de impacto entre b y $b + db$, como muestra la figura (2.4). Así, el número de núcleos incidente que cruza este anillo debe mantenerse después de la dispersión, por tanto, en virtud de (2.19):

$$dN_{\text{disp}} = dN_{\text{inc}} = 2\pi b db F_{\text{inc}}, \quad \text{luego,} \quad d\sigma_{\text{fus}} = 2\pi b db. \quad (2.45)$$

Integrando esto, se obtiene la sección eficaz de fusión:

$$\sigma_{\text{fus}} = \int_0^{b_{\text{máx}}} 2\pi b db = 2\pi \frac{b_{\text{máx}}^2}{2} = \pi b_{\text{máx}}^2 = \pi R_B^2 \left(1 - \frac{V_B}{E^{(\text{CM})}}\right). \quad (2.46)$$

Esta sección eficaz es sólo válida para $E^{(\text{CM})} > V_B$, puesto que clásicamente si la energía es más baja que la barrera, no puede haber fusión al no entrar los núcleos en contacto: así, para $E^{(\text{CM})} < V_B$, $\sigma_{\text{fus}} = 0$. A altas energías, esta sección eficaz tiende a la *sección eficaz geométrica* πR_B^2 . El valor de R_B , en general, no es el de cuando los núcleos están en contacto, como en la figura (2.1), sino que depende del potencial nuclear particular.

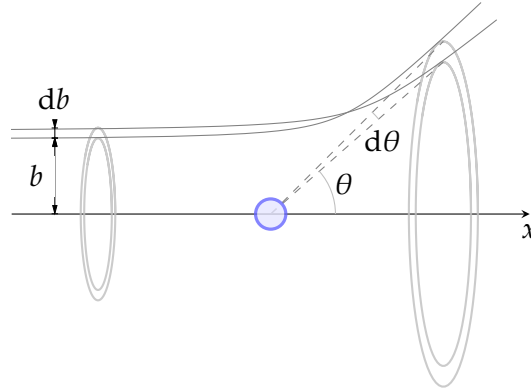


Figura 2.4: Ejemplo de dispersión para aplicar en la deducción de la sección eficaz clásica: un haz de partículas incide sobre un blanco que las dispersa por acción de un potencial. Analizando un anillo de posibles trayectorias de ancho db , se observa que el número de partículas que cruza el anillo se debe conservar después de la dispersión, contenido en otro anillo de tamaño diferente, acotado por las trayectorias mostradas.

Este resultado también puede obtenerse analizando los coeficientes de transmisión en la expansión en ondas parciales. Esto se logra con la aproximación de *sharp-cut-off*, donde, aludiendo a la interpretación de los coeficientes de transmisión como probabilidades de absorción de cada onda parcial, se asume que sólo las ondas hasta un $l_{\text{máx}}$ son totalmente absorbidas [7]:

$$T_l = \begin{cases} 1, & \text{si } l \leq l_{\text{máx}}, \\ 0, & \text{si } l > l_{\text{máx}}, \end{cases} \quad (2.47)$$

es decir, o son transmitidas o no, no admite transmisión parcial.

Por tanto, de la ecuación (2.42):

$$\sigma_{\text{fus}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{máx}}} (2l+1) = \frac{\pi}{k^2} \left(2 \frac{l_{\text{máx}}(l_{\text{máx}}+1)}{2} + l_{\text{máx}} + 1 \right) = \frac{\pi}{k^2} (l_{\text{máx}} + 1)^2. \quad (2.48)$$

En la aproximación clásica, $l_{\text{máx}} \gg 1$ [7], por ende, $(l_{\text{máx}} + 1)^2 \approx l_{\text{máx}}^2$. Como $l_{\text{máx}} = kb_{\text{máx}}$, entonces:

$$\sigma_{\text{fus}} = \frac{\pi}{k^2} l_{\text{máx}}^2 = \pi b_{\text{máx}}^2,$$

que está de acuerdo con la ecuación (2.46).

Esta primera aproximación puede dar buenos resultados, pero tiene varias limitaciones. La primera que salta a la vista es que no permite fusión por debajo de la barrera (que es una posibilidad por efectos cuánticos); esto se tratará en la siguiente sección.

Por otro lado, un núcleo con un momentum angular no nulo está sujeto a fuerzas centrífugas, lo que aumenta su energía, lo deforma y lo hace menos estable. Puede argumentarse que sobre un valor crítico l_{crit} , el núcleo no podría mantenerse unido, y así el núcleo compuesto tras la fusión no podría formarse porque se fisionaría inmediatamente [7]. Así, sólo las trayectorias con $b < b_{\text{crit}} = l_{\text{crit}}/k$ son las que llevarán a la fusión, luego $\sigma_{\text{fus}} = \pi b_{\text{crit}}^2$, si $b_{\text{crit}} < b_{\text{máx}}$.

Como $k^2 = 2\mu E^{(\text{CM})}/\hbar^2$, entonces, $\sigma_{\text{fus}} = \pi l_{\text{crit}}^2/k^2 = \pi \hbar^2 l_{\text{crit}}^2 / 2\mu E^{(\text{CM})}$, para $E^{(\text{CM})} > E_{\text{crit}}$ donde E_{crit} es la energía donde $b_{\text{crit}} = b_{\text{máx}}$ [7], es decir, $E_{\text{crit}} = V_B + \hbar^2 l_{\text{crit}}^2 / 2\mu R_B^2$. En

resumen:

$$\sigma_{\text{fus}} = \begin{cases} \pi R_B^2 (1 - V_B/E^{(\text{CM})}), & \text{si } E < E_{\text{crit}}, \\ \pi \hbar^2 l_{\text{crit}}^2 / 2\mu E^{(\text{CM})}, & \text{si } E > E_{\text{crit}}. \end{cases} \quad (2.49)$$

Esto implica que a altas energías, la sección eficaz no crece a un valor límite sino que decae debido a que la formación de un compuesto estable se ve limitada por un momentum angular crítico.

Valores de l_{crit} pueden obtenerse estudiando los efectos de la energía de deformación y momentum angular (rotación) en el modelo de gota líquida. Variando la deformación del núcleo (específicamente, parámetro de deformación cuadrupolar) puede observarse un aumento de la energía de deformación (cambio de energía superficial y de Coulomb) hasta un máximo: *barrera de fisión*, la cual limita su ocurrencia. Un aumento del momentum angular hace que la barrera decrezca, hasta que en el momentum angular crítico donde se anula y la fisión ocurre inmediatamente [7]. A. Sierk (1986) diseñó, con ciertas modificaciones, una rutina utilizando este formalismo para hallar barreras de fisión y l_{crit} para un amplio rango de núcleos, y que será de utilidad más adelante [10].

Por último, todo lo tratado antes depende del potencial nuclear escogido, y aunque como es usual, un potencial óptico sería adecuado, para fusión, basta con trabajar con un potencial fenomenológico real para reproducir buenos resultados, como los potenciales de proximidad. Un buen potencial simple y que ajusta decentemente resultados experimentales, es el dado por R. Bass (1977).

Asumiendo un núcleo esférico de densidad constante, el modelo de gota líquida y argumentos geométricos, Bass da una forma genérica del potencial en términos de una función $g(s)$ con $s = r - R_1 - R_2$ (R_1, R_2 , radios nucleares) [1]. Datos experimentales son ajustados a la función empírica g de modo que la interacción nuclear entre dos núcleos está dada por:

$$V_{\text{nuc}}(s) = -\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} g(s) = -\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \frac{1}{A \exp(s/d_1) + B \exp(s/d_2)} \text{ [MeV]}, \quad (2.50)$$

donde los radios nucleares son una modificación de (2.4): $R = 1.16A^{1/3} - 1.39A^{-1/3}$ (en fm); y por ajustes con datos experimentales, $A = 0.03 \text{ MeV}^{-1} \text{ fm}$, $B = 0.0061 \text{ MeV}^{-1} \text{ fm}$, $d_1 = 3.3 \text{ fm}$ y $d_2 = 0.65 \text{ fm}$ [1].

2.2.2 Sección eficaz de fusión por debajo de la barrera

Como se vio antes, clásicamente, en términos de los coeficientes de transmisión, sólo se tiene transmisión completa ($T_l = 1$) o nula ($T_l = 0$). Sin embargo, a bajas energías, efectos cuánticos son considerables y afectan a la sección eficaz: el tunelamiento cuántico permite transmisión *parcial* [7]. El siguiente tratamiento permitirá fusión por debajo de la barrera, prohibida desde un tratamiento clásico.

Supóngase que se tiene un potencial $V(x)$ que forma una barrera (un máximo del potencial) en $x = x_B$. Una forma de los coeficientes de transmisión bajo este potencial puede hacerse por medio de una aproximación parabólica de la barrera formada por el potencial efectivo: $V(x) \approx V_B - \frac{1}{2}\mu\omega_B^2(x - x_B)^2$ (recuérdese que $V'(x_B) = 0$), donde,

$$V_B = V(x_B), \quad \omega_B^2 = -\frac{1}{\mu} V''(x_B) > 0. \quad (2.51)$$

Solucionando la ecuación de Schrödinger, y analizando las soluciones asintóticas de la función de onda a izquierda y derecha de la barrera, para este potencial se puede hallar el *coeficiente de transmisión de Hill-Wheeler* [7]:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \exp(2\pi(V_B - E^{(\text{CM})})/\hbar\omega_B)}. \quad (2.52)$$

Lo anterior aplica para una dimensión pero para el caso del potencial de interés, el potencial efectivo $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2$, lo anterior puede extenderse a los diferentes coeficientes de transmisión T_l :

$$T_l = \frac{1}{1 + \exp\left(2\pi(V_{B,l} + \hbar^2 l(l+1)/2\mu R_{B,l}^2 - E^{(\text{CM})})/\hbar\omega_{B,l}\right)}, \quad (2.53)$$

donde $R_{B,l}$ es la posición de la barrera, $V_{B,l} = V(R_{B,l})$ y $\omega_{B,l}$ es (proporcional a) su curvatura, para cada l , en analogía con (2.51).

La ecuación (2.53) ahora puede usarse en (2.42) para hallar la sección eficaz de fusión. C. Wong (1973) propuso ir más allá y dio una forma explícita de la sección eficaz, suponiendo que los parámetros de la barrera no dependen fuertemente con l y la dependencia de los coeficientes de transmisión sólo estaba explícitamente con el potencial centrífugo [7]: $R_{B,l} \approx R_B$, $V_{B,l} \approx V_B$ y $\omega_{B,l} \approx \omega_B$, que aplican ahora sólo para el potencial nuclear + Coulomb. La figura (2.5) muestra cómo los parámetros de la barrera parabólica se relacionan al potencial V , escogiendo el potencial de Bass de la sección anterior.

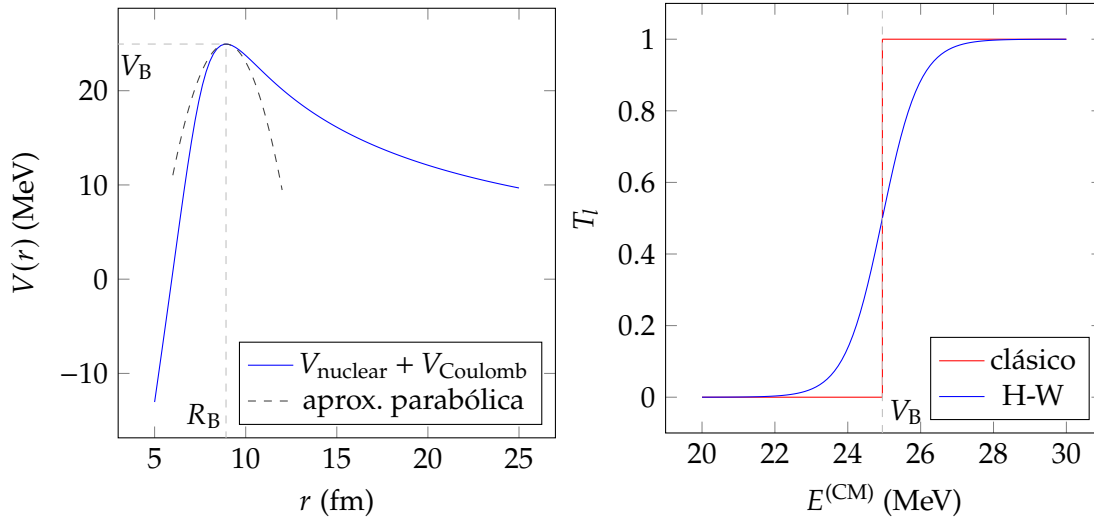


Figura 2.5: A la izquierda: en azul, potencial nuclear (Bass, (2.50)) + Coulomb en función de r , para la fusión de $^{28}\text{Si} + ^{24}\text{Mg}$; en línea punteada, aproximación parabólica en la barrera. A la derecha: en azul, el coeficiente de transmisión de Hill-Wheeler (a $l = 0$) para esta reacción en función de $E^{(\text{CM})}$, comparado al coeficiente de *sharp-cut-off* clásico, en rojo. Aumentar l sólo traslada la barrera hacia la derecha.

Además, suponiendo que la suma puede aproximarse por una integral (para l grande; $l(l+1) \approx l^2$, $2l+1 \approx 2l$), entonces:

$$\sigma_{\text{fus}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) T_l \approx \frac{\pi}{k^2} \int_0^{\infty} \frac{2l dl}{1 + \exp(2\pi(V_B + \hbar^2 l^2/2\mu R_B^2 - E^{(\text{CM})})/\hbar\omega_B)}. \quad (2.54)$$

Haciendo sustituciones, puede resolverse la integral, y usando $k^2 = 2\mu E^{(\text{CM})}/\hbar^2$ se halla la *fórmula de Wong*:

$$\sigma_{\text{fus}} = \frac{\hbar\omega_B R_B^2}{2E^{(\text{CM})}} \ln\left(1 + \exp\left(2\pi(E^{(\text{CM})} - V_B)/\hbar\omega_B\right)\right). \quad (2.55)$$

Hay algunas cosas que denotar hasta este punto. La primera es que esta sección eficaz sí admite fusión por debajo de la barrera; el coeficiente de transmisión usado admite transmisión parcial incluso a energías por debajo de la barrera. Este es un efecto directo de dotar una curvatura a la barrera y del tratamiento cuántico; si se prueba a hacer $\omega_B \rightarrow 0$, T_l tiende al coeficiente clásico de *sharp-cut-off* ($l \gg 1$):

$$T_l = \begin{cases} 0, & \text{si } E^{(\text{CM})} < V_B + \hbar^2 l^2 / 2\mu R_B^2, \\ 1, & \text{si } E^{(\text{CM})} \geq V_B + \hbar^2 l^2 / 2\mu R_B^2, \end{cases} \quad (2.56)$$

que es equivalente a (2.47) (esto se puede probar teniendo en cuenta que $l \leq l_{\text{máx}}$ implica que $V_B + \hbar^2 l^2 / 2\mu R_B^2 \leq V_B + \hbar^2 l_{\text{máx}}^2 / 2\mu R_B^2 = E^{(\text{CM})}$). Esto se observa mejor en la figura (2.5).

Este límite al caso clásico también se observa con la sección eficaz: para altas energías sobre la barrera, o sea, $E^{(\text{CM})} \gg V_B$, luego, la exponencial es mucho mayor que 1, y así:

$$\sigma_{\text{fus}}(E^{(\text{CM})} \gg V_B) = \frac{\hbar\omega_B R_B^2}{2E^{(\text{CM})}} 2\pi \frac{E^{(\text{CM})} - V_B}{\hbar\omega_B} = \pi R_B^2 \left(1 - \frac{V_B}{E^{(\text{CM})}}\right),$$

que es, en efecto, la sección eficaz clásica (2.46). Así, sobre la barrera, la sección eficaz de Wong reproduce el resultado clásico y bajo ella, da valores mucho más pequeños, pero no nulos, permitiendo fusión bajo la barrera. La ecuación (2.55) puede reemplazar a la clásica en (2.49) para admitir este caso.

2.3 Principio de independencia de Bohr

En este punto, es importante dar un panorama de cómo se describe apropiadamente la reacción de fusión-evaporación.

Las dos etapas clave de la reacción son: (1) la fusión de los reactantes (canal de entrada) y formación del estado intermedio: el núcleo compuesto, que vive un tiempo relativamente largo ($\sim 10^{-16}$ s), lo suficiente para alcanzar el equilibrio, y (2) la ruptura del compuesto por su excitación en los productos observados (canal de salida), que es independiente del modo de formación [11].

Aclarar esto último es el objetivo de esta sección. En 1936, N. Bohr presentó la idea conceptual del núcleo compuesto, que es la base detrás de la teoría estadística de reacciones nucleares. La idea central es que se consideran a la formación y la ruptura como eventos *independientes* (o que el compuesto pierde “memoria” de todas las características del canal de entrada (o reacción inicial) tras formarse, excepto cantidades conservadas como la energía), y que la ruptura permite la competición libre de emisión de partículas (evaporación), radiación y fisión.

Esta hipótesis no es arbitraria, puesto que tiene detrás robusta evidencia experimental. Específicamente, analizando diferentes canales de entrada que llevan a un mismo núcleo compuesto, se esperaría que las secciones eficaces medidas de cada uno de los canales de salida fueran independientes del canal de entrada, es decir, para un canal de salida

dato, las secciones eficaces correspondientes a todos los canales de entrada (que llevan a la misma energía de excitación del compuesto) deberían ser (aprox.) iguales. Mediciones de, p. ej., $^{63}\text{Cu}(p,n)$ y $^{60}\text{Ni}(\alpha,n)$, que dan el compuesto $^{64}\text{Zn}^*$, o, $^{206}\text{Pb}(\alpha,2n)$ y $^{209}\text{Bi}(p,2n)$, que dan el compuesto $^{210}\text{Po}^*$, muestran una buena coincidencia de las secciones eficaces, verificando la hipótesis de Bohr [13, 5]. Este modelo funciona óptimamente para energías del proyectil bajas (10-20 MeV) y núcleos medianos-pesados (que pueden absorber mejor la energía incidente por su tamaño) [13].

Teniendo en cuenta (2.1), denótese el canal de entrada como $a = P + T$, el compuesto como C y el canal de salida como $b = x + R$. Luego, la hipótesis de independencia implica que la sección eficaz asociada a la reacción $T(P, x)R$ puede escribirse como [5]:

$$\sigma_{a \rightarrow b} = \sigma_{a \rightarrow C} P_{C \rightarrow b} = \sigma_{a \rightarrow C} \frac{\Gamma_{C \rightarrow b}}{\Gamma}, \quad (2.57)$$

donde $\sigma_{a \rightarrow C}$ es la sección eficaz de formación del compuesto y $P_{C \rightarrow b}$ es la probabilidad de decaimiento en el canal de salida b (*branching ratio*), que se escribió en términos de los anchos de decaimiento de cada canal y $\Gamma = \sum_i \Gamma_i$ [5]. $\Gamma/\hbar = 1/\tau$ se puede interpretar como probabilidad de decaimiento por unidad de tiempo, y de hecho, también puede interpretarse literalmente como un *ancho*: véase que la función de onda de un estado (de energía $E_R = \hbar\omega_R$) que decae es $\Psi_D(t) = \Psi_D(0)e^{-i\omega_R t}e^{-t/2\tau}$, de modo que por la ley de decaimiento exponencial $|\Psi_D(t)|^2 = e^{-t/\tau}$; sin embargo, en realidad, el estado debe verse como una superposición de estados a diferentes frecuencias (transformada de Fourier) [5]. Aplicando esta superposición y tomando el cuadrado de la amplitud de probabilidad $A(\omega)$, se puede hallar que la probabilidad de encontrar la energía E en este paquete de ondas es de la forma:

$$P(E) \sim \frac{1}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (2.58)$$

Esta ecuación (de Breit-Wigner), muestra que el perfil de energías del decaimiento (y por ende en la sección eficaz [13]) es un pico o resonancia centrada en los diversos niveles discretos E_R , con un ancho (FWHM más específicamente) dado por Γ .

La sección eficaz de formación puede identificarse como la sección eficaz de fusión tratada por métodos semi-clásicos en la sección 2.2. De hecho, nótese que como la suma de las probabilidades de decaimiento debe ser 1, entonces la suma de las secciones eficaces de todos los canales de salida debe ser la sección eficaz *total* o de fusión:

$$\sigma_{\text{fus}} = \sigma_{a \rightarrow C} = \sum_b \sigma_{a \rightarrow b}. \quad (2.59)$$

Mientras tanto, los anchos de decaimiento (y por ende, las probabilidades) dependerán de los eyectiles expulsados en la des-excitación del compuesto: habrá un ancho de decaimiento para neutrones, protones, alfas (^2He), gammas, fisión y otras partículas dependiendo de qué tan detallada se quiere que sea la evaporación.

Dar una forma de estos anchos puede ser un problema tan complejo como se quiera, puesto que hay muchos factores que intervienen en la reacción y la búsqueda de un formalismo completo, accesible y que reproduzca datos experimentales no es tarea fácil. En la siguiente sección se tratará un formalismo relativamente simple que permitirá alcanzar resultados asequibles.

Por último, esta expulsión de eyectiles, en general, no ocurre una sola vez, sino que debido a la alta excitación del compuesto, una vez esta evaporación comienza (tras equilibrarse en su formación), esto ocurre en *cascada*: eyectiles son emitidos secuencialmente,

formando nuevos residuos cada vez, hasta un punto donde la energía del residuo no es suficiente para emitir alguno de los eyectiles posibles (o sea, la probabilidad de decaer en todos los posibles canales de decaimiento es nula) [5].

Esta cascada puede ocurrir de múltiples formas (p. ej., $3n$, $2n1p$, $2\alpha p$, etc.), que se traducen en los diferentes *canales de salida*. Así, las probabilidades que entran en cada una de las secciones eficaces de estos canales pueden estimarse de la ocurrencia relativa de cada canal en muchos decaimientos del núcleo compuesto. Esta estrategia será clave más adelante. En realidad, este es un proceso complejo, donde a altas energías de excitación, pueden emitirse núcleos más complejos que α con frecuencia (emisión secuencial binaria; la distinción entre residuo y eyectil es difusa) o podrían emitirse varios núcleos a la vez en cada decaimiento (multi-fragmentación) [5]. Sin embargo, esto no es tratado acá por simplicidad.

2.4 Modelo estadístico para el decaimiento del núcleo compuesto

El principal objetivo que alcanzar con este modelo es la obtención de las probabilidades de emisión de partículas del núcleo compuesto y cómo usar esto para simular los canales de salida. En esta sección, el formalismo de Weisskopf, será aquel escogido que dará los anchos de decaimiento (para evaporación) requeridos. Para núcleos pesados, la fisión compite con los modos de decaimiento de evaporación y afecta sustancialmente los canales de salida, por esta razón, se aborda un modelo simplificado del ancho de decaimiento de fisión: el modelo de Bohr-Wheeler. Finalmente, aunque la emisión de rayos gamma suele tener efecto en la des-excitación del compuesto, por simplicidad, esto no se trata en este documento.

Ahora bien, las reacciones que forman un compuesto muestran resonancias aisladas en la sección eficaz de reacción (como función de la energía incidente), dadas por la fórmula de Breit-Wigner, como se mostró la sección anterior. Entre más pesados y energéticos son los proyectiles, el número de estados incrementa, su estructura es más complicada y las resonancias se traslapan: un continuo de estados (caracterizados por una densidad de estados $\rho(E)$ de modo que $\rho(E)dE$ es el número de estados entre E y $E + dE$; tiene unidades de inverso de energía). En este punto, la complejidad del compuesto es tal que debe ser tratada por métodos estadísticos [7]. Esta es la motivación detrás del formalismo de Weisskopf, que considera que la fracción de decaimientos procedentes de estados discretos es despreciable. Además, por simplicidad, la conservación del momentum angular y de paridad pueden despreciarse, y por ende, no se hace uso explícito de coeficientes de transmisión [6].

2.4.1 Fórmula de Weisskopf-Ewing

El uso de analogías termodinámicas ha sido conveniente para describir esta clase de reacciones nucleares. Una idea intuitiva de lo que sucede detrás de la evaporación (y una de las primeras que surgieron del tema) fue comparar la emisión de partículas de un núcleo compuesto excitado con la evaporación de moléculas de un fluido, de ahí el nombre *evaporación* [5] (esto podrá verse en detalle más adelante).

Siguiendo a [7] y [5], se considera el decaimiento del compuesto C con energía de excitación $E^* = Q_{P+T \rightarrow C} + E^{(CM)}$ (ecuación (2.15)), que emite un eyectil x con energía ϵ_x , dejando un residuo R . Además, supóngase que los decaimientos pueblan un volumen V , que se asume una esfera centrada en R , en un tiempo Δt .

En virtud de la regla de oro de Fermi, la probabilidad de decaimiento por unidad de tiempo del compuesto al canal $x + R$ (o emisión del eyectil x) entre ϵ_x y $\epsilon_x + d\epsilon_x$ está dada por:

$$dW_{C \rightarrow x+R} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{C \rightarrow x+R}|^2 \rho_x(\epsilon_x) \rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x) d\epsilon_x, \quad (2.60)$$

donde $T_{x+R \rightarrow C}$ es el elemento de matriz de transición, ϵ_x y $E_R^* = E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x$ son las energías del eyectil y residuo, que están restringidas entre sí por la conservación de la energía (análogamente a la ecuación (2.15)), y $\rho_x(\epsilon_x) d\epsilon_x \rho_R(E_R^*) dE_R^*$ es el número de estados del par $x + R$ entre ϵ_x y $\epsilon_x + d\epsilon_x$.

Por otro lado, el proceso inverso de $C \rightarrow x + R$ es la fusión de x y R formando el compuesto, y que por la regla de oro de Fermi, la probabilidad de captura por unidad de tiempo está dada por:

$$W_{x+R \rightarrow C} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{x+R \rightarrow C}|^2 \rho_C(E^*), \quad (2.61)$$

donde $\rho_C(E^*)$ es la densidad de micro-estados del núcleo compuesto a una energía de excitación E^* .

La clave del formalismo es observar que, la dinámica de la reacción al *revertir la flecha del tiempo* es la misma para el proceso reverso ($x + R \rightarrow C$), como si se “rebobinaran” las trayectorias de los núcleos. Más formalmente, puede probarse que los elementos de matriz de transición del decaimiento y el proceso inverso son idénticos: $T_{C \rightarrow x+R} = T_{x+R \rightarrow C}$ [7].

Ahora se verá que la probabilidad de captura del eyectil por el residuo $W_{x+R \rightarrow C}$, se puede escribir por medio de la sección eficaz de captura de la reacción $x + R \rightarrow C$, $\sigma_{x+R \rightarrow C}$. Desde una perspectiva clásica, sólo aquellas trayectorias contenidas en el ángulo subtendido por la sección eficaz representan estados resultantes del decaimiento del núcleo compuesto [5]. Si la distancia entre x y R es r_{xR} , este ángulo sólido es $\sigma_{x+R \rightarrow C} / r_{xR}^2$, entonces la probabilidad de captura se puede estimar como la fracción de ángulo sólido que subtiende la sección eficaz del ángulo sólido total, es decir:

$$p(r_{xR}) = \frac{\sigma_{x+R \rightarrow C} / r_{xR}^2}{4\pi}. \quad (2.62)$$

El promedio de este valor sobre el volumen V es la probabilidad de interés. Considerando que r_{xR} puede ir de 0 (se desprecian las dimensiones de R) a $v_x \Delta t$, y que más allá la probabilidad se anula, entonces la probabilidad promedio de captura por unidad de tiempo en el volumen V , es decir, $W_{x+R \rightarrow C}$, es:

$$W_{x+R \rightarrow C} = \frac{1}{\Delta t V} \int_V p(r_{xR}) dV = \frac{4\pi}{\Delta t V} \int_0^{v_x \Delta t} \frac{\sigma_{x+R \rightarrow C}}{4\pi r_{xR}^2} r_{xR}^2 dr_{xR} = \frac{\sigma_{x+R \rightarrow C} v_x}{V}. \quad (2.63)$$

Por último, $\rho_x(\epsilon_x)$ puede reescribirse asumiendo que, por simplicidad, el residuo es mucho más masivo que el eyectil, tal que se puede considerar en reposo en el sistema de centro de masas. De este modo, (1) ϵ_x se puede considerar como la energía del eyectil respecto al residuo, y (2) la densidad de micro-estados de x se puede considerar como la del espacio de fase de una sola partícula confinada al volumen V [5].

Para esto, siguiendo el *ensamble micro-canónico*, se “suma” sobre todos los estados del espacio de fase de energía ϵ_x (por medio de una delta de Dirac), contando una multiplicidad de $g_x = 2s_x + 1$ por los diferentes estados de espín s_x del eyectil (se añade

un factor de h^3 para cuantizar el espacio de fase y dar dimensiones correctas a ρ_x). Luego:

$$\begin{aligned}\rho_x(\epsilon_x) &= g_x \int \delta\left(\frac{p_x^2}{2m_x} - \epsilon_x\right) \frac{d^3\mathbf{p}_x d^3\mathbf{r}_x}{h^3} = \frac{V g_x}{h^3} \int \delta\left(\frac{p_x^2}{2m_x} - \epsilon_x\right) d^3\mathbf{p}_x \\ &= \frac{V g_x}{h^3} 4\pi \int \delta\left(\frac{p_x^2}{2m_x} - \epsilon_x\right) p_x^2 dp_x = \frac{V g_x}{h^3} 4\pi \int \delta(\epsilon - \epsilon_x) (2m_x \epsilon)^{1/2} m_x d\epsilon \\ &= \frac{V g_x m_x}{h^3} 4\pi (2m_x \epsilon_x)^{1/2} = \frac{V g_x m_x}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_x \epsilon_x)^{1/2},\end{aligned}\quad (2.64)$$

donde se hizo el cambio de variable $\epsilon = p_x^2/2m_x$, $p_x dp_x = m_x d\epsilon$. Ahora, usando (2.61), (2.63) y (2.64) en (2.60) se obtiene:

$$\begin{aligned}dW_{C \rightarrow x+R} &= \frac{W_{x+R \rightarrow C}}{\rho_C(E^*)} \rho_x(\epsilon_x) \rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x) d\epsilon_x \\ &= \frac{1}{\rho_C(E^*)} \frac{\sigma_{x+R \rightarrow C} v_x}{V} \frac{V g_x m_x}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_x \epsilon_x)^{1/2} \rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x) d\epsilon_x \\ &= \frac{g_x m_x v_x}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_x \epsilon_x)^{1/2} \sigma_{x+R \rightarrow C} \frac{\rho_R(E_{xR} - \epsilon_x)}{\rho_C(E^*)} d\epsilon_x.\end{aligned}$$

Haciendo $m_x v_x = (2m_x \epsilon_x)^{1/2}$, se obtiene la *fórmula de Weisskopf-Ewing* que da la probabilidad de emisión del eyectil x por unidad de tiempo entre ϵ_x y $\epsilon_x + d\epsilon_x$:

$$\frac{dW_x}{d\epsilon_x} d\epsilon_x \equiv \frac{dW_{C \rightarrow x+R}}{d\epsilon_x} d\epsilon_x = \frac{g_x m_x}{\pi^2 \hbar^3} \sigma_{x+R \rightarrow C}(\epsilon_x) \frac{\rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x)}{\rho_C(E^*)} \epsilon_x d\epsilon_x. \quad (2.65)$$

Aunque esta fórmula provee una mejor descripción cualitativa que cuantitativa de reacciones nucleares, sigue siendo un buen punto de partida para estimar cantidades de interés. Este espectro de emisión de partículas es el usado en este trabajo para calcular los respectivos anchos de decaimiento como se verá luego. En este punto, la forma específica de la sección eficaz de la reacción inversa y de las densidades de micro-estados están abiertas a la elección de las más adecuadas.

Para la sección eficaz de la reacción inversa, puede darse una forma con facilidad, puesto que al considerar la reacción inversa como la captura (o fusión) de x con R , la sección eficaz clásica de la ecuación (2.46) puede ser suficiente para estimarla. Así:

$$\sigma_{x+R \rightarrow C}(\epsilon_x) = \pi R_{CB}^2 \left(1 - \frac{V_{CB}}{\epsilon_x}\right), \quad (2.66)$$

donde se consideró que ϵ_x es la energía relativa a R y que R es estacionario en el marco de centro de masas; además, por simplicidad y rapidez de los cálculos, no se utiliza un potencial nuclear sofisticado y se utiliza el potencial visto en la figura (2.1), luego, V_{CB} es la barrera de Coulomb de la ecuación (2.2) en el punto de contacto $R_{CB} = r_0(A_x^{3/2} + A_R^{3/2})$.

Nótese que para neutrones, $V_{CB} = 0$, luego la sección eficaz es la sección eficaz geométrica πR_{CB}^2 , independiente de la energía del eyectil. Además, nótese el corte en V_{CB} donde por debajo de esta, la sección eficaz se anula. El efecto que tiene esto en la fórmula de Weisskopf-Ewing es que la emisión de partículas cargadas sólo será posible sobre este umbral; los neutrones no tienen un umbral, mientras que los protones sí, y las partículas alfa tienen un umbral aún mayor.

Por otro lado, la densidad de micro-estados del compuesto y el residuo requiere más detalle, que se dejará para la siguiente sección.

Ya con esto en mente, aludiendo a la interpretación de Γ_x/\hbar de probabilidad de decaimiento por unidad de tiempo, entonces el ancho de decaimiento se puede escribir como:

$$\Gamma_x = \hbar \int_{V_{CB}}^{E^*+Q_{C \rightarrow x+R}} \frac{dW_x}{d\epsilon_x} d\epsilon_x, \quad (2.67)$$

donde V_{CB} es la barrera de Coulomb entre x y R , que es el valor mínimo de energía que clásicamente se admite para una sección eficaz de captura no nula de la reacción inversa, y $E^* + Q_{C \rightarrow x+R}$ es el máximo valor que puede tener puesto que $E_R^* = 0$ es la mínima energía de excitación que puede tener el residuo. Acá se asume que $V_{CB} < E^* + Q_{C \rightarrow x+R}$, puesto que de otro modo, el decaimiento no sería posible: por ende, si no se cumple, $\Gamma_x = 0$ y no es posible acceder al modo de decaimiento x .

De las ecuaciones (2.65), (2.66) y (2.67), y definiendo $\sigma_{geo} = \pi R_{CB}^2$, puede definirse una distribución de probabilidad para la energía del eyectil:

$$P(\epsilon_x)d\epsilon_x = \frac{1}{\Gamma_x} \frac{g_x m_x \sigma_{geo}}{\pi^2 \hbar^2} (\epsilon_x - V_{CB}) \frac{\rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x)}{\rho_C(E^*)} d\epsilon_x, \quad (2.68)$$

donde Γ_x actúa como factor de normalización y se reescribe como:

$$\Gamma_x = \frac{g_x m_x \sigma_{geo}}{\pi^2 \hbar^2 \rho_C(E^*)} \int_{V_{CB}}^{E^*+Q_{C \rightarrow x+R}} (\epsilon_x - V_{CB}) \rho_R(E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x) d\epsilon_x. \quad (2.69)$$

Las ecuaciones (2.68) y (2.69) son las que se utilizarán en la práctica para: (1) calcular valores aleatorios de la energía del eyectil tras el decaimiento, y (2) calcular las probabilidades de cada canal de decaimiento según la distribución de probabilidad (2.57):

$$P_x = \frac{\Gamma_x}{\Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f}, \quad (2.70)$$

donde se admite la *competición* por la emisión de neutrones, protones y ^4He , y además, la posibilidad de fisión en núcleos pesados, de la que se discutirá en la sección 2.4.3.

Por último, vale la pena verificar que la fórmula de Weisskopf-Ewing resulta en un espectro esperado de evaporación de partículas. Para ello, se define la entropía micro-canónica como $S(E) = \ln[\rho(E)]$, donde se escribió el número de estados como $\rho(E)\Delta E$, y se hace $\ln(\Delta E)$ escogiendo la escala de energía tal que $\Delta E = 1$ MeV, lo que es válido si hay un gran número de estados en 1 MeV.

La relación entre temperatura y entropía de la termodinámica puede adaptarse acá para definir una *temperatura nuclear* (en unidades de energía; comúnmente, esta es del orden de unos pocos MeV, como se verá más adelante):

$$\frac{dS(E)}{dE} = \frac{1}{T(E)} \equiv \beta(E). \quad (2.71)$$

Haciendo $\rho(E) = e^{S(E)}$ en (2.65) se tiene:

$$\frac{dW_x}{d\epsilon_x} d\epsilon_x \propto \sigma_{x+R \rightarrow C}(\epsilon_x) \epsilon_x e^{S_R(E^*+Q_{C \rightarrow x+R}-\epsilon_x)-S_C(E^*)} d\epsilon_x. \quad (2.72)$$

Supóngase que $S_R(E) = S_C(E) = S(E)$, y además se hace la aproximación $S(E + \Delta E) = S(E) + \beta \Delta E$, donde $\Delta E \ll E$. Asumiendo que $E^* \gg Q_{C \rightarrow x+R}$ y $E^* \gg \epsilon_x$, y haciendo $\Delta E = Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x$, entonces [24]:

$$\begin{aligned} \frac{dW_x}{d\epsilon_x} d\epsilon_x &\propto \sigma_{x+R \rightarrow C}(\epsilon_x) \epsilon_x e^{S(E^*) + \beta(Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x) - S(E^*)} d\epsilon_x \\ &\propto \sigma_{x+R \rightarrow C}(\epsilon_x) e^{\beta Q_{C \rightarrow x+R}} \epsilon_x e^{-\beta \epsilon_x} d\epsilon_x. \end{aligned} \quad (2.73)$$

La dependencia con ϵ_x de esta expresión muestra un parecido a la distribución de Maxwell-Boltzmann para la energía de los neutrones emitidos, donde la sección eficaz es independiente de ϵ_x . El propósito del resultado anterior es meramente cualitativo dado que tiene fuertes aproximaciones detrás, pero aún así deja ver ligeramente el por qué puede llamarse *espectro de evaporación*. Una prueba más rigurosa de por qué se puede identificar con el espectro de partículas emitidas de un pequeño agujero en un contenedor de gas en equilibrio térmico, se encuentra en [5].

2.4.2 Densidad de estados nucleares

A diferencia de otras cantidades de reacciones nucleares, la especificación de la densidad de micro-estados se hace, en general, de forma especulativa, principalmente porque, p. ej., en núcleos altamente excitados, no es directamente medible en el experimento [5]. Así que múltiples modelos y consideraciones se han hecho libremente dependiendo de diferentes criterios físicos o ajustes experimentales. Acá, se expondrá una forma inicial basada en el modelo del gas de Fermi, que podrá obtenerse bajo argumentos de la mecánica estadística y termodinámica.

Siguiendo a [7], se asume que un gas ideal de A fermiones independientes está confinado a una esfera de radio $R = r_0 A^{1/3}$, que se representa por un potencial de pozo infinito esférico, una aproximación aún más fuerte que el pozo de la figura (2.1).

Fijar el número de partículas, el volumen, la energía y/o la temperatura es lo usual en este tipo de sistemas termodinámicos, sin embargo, para describir la termodinámica de un sistema de fermiones independientes es conveniente utilizar el *ensamble gran-canónico*. Este representa un sistema en equilibrio termodinámico que puede intercambiar energía y partículas con un reservorio, y está determinado por un volumen V , temperatura T y potencial químico μ (energía absorbida o liberada por el sistema debido a una variación del número de partículas) fijos.

Utilizar el ensamble gran-canónico en vez del micro-canónico, que es el caso apropiado (número de partículas N y energía E fijas), está justificado si las fluctuaciones sobre los valores medios de N y E son pequeñas, lo que es una buena aproximación para núcleos pesados a energías de excitación no muy bajas [7].

Por argumentos termodinámicos puede probarse que la probabilidad de encontrar al sistema en un micro-estado x (E_x , N_x de todo el sistema) es:

$$p_{\mu,\beta}(x) = \frac{e^{-\beta(E_x - \mu N_x)}}{\Xi_{\mu,\beta}}, \quad \text{con,} \quad \Xi_{\mu,\beta} = \sum_x e^{-\beta(E_x - \mu N_x)}, \quad (2.74)$$

donde $\Xi_{\mu,\beta}$ es la función de partición gran-canónica, y $\beta = 1/T$. Como el número promedio de partículas debe ser A y la energía promedio debe ser E , entonces:

$$A = \langle N_x \rangle = \sum_x N_x p_{\mu,\beta}(x), \quad E = \langle E_x \rangle = \sum_x E_x p_{\mu,\beta}(x). \quad (2.75)$$

Por otro lado, utilizando (2.74) y (2.75), véase que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_{\mu, \beta} &= \frac{1}{\Xi_{\mu, \beta}} \frac{\partial \Xi_{\mu, \beta}}{\partial \mu} = \frac{1}{\Xi_{\mu, \beta}} \sum_x \beta N_x e^{-\beta(E_x - \mu N_x)} = \beta \langle N_x \rangle, \\ \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi_{\mu, \beta} &= \frac{1}{\Xi_{\mu, \beta}} \frac{\partial \Xi_{\mu, \beta}}{\partial \beta} = \frac{1}{\Xi_{\mu, \beta}} \sum_x (\mu N_x - E_x) e^{-\beta(E_x - \mu N_x)} = \mu \langle N_x \rangle - \langle E_x \rangle.\end{aligned}$$

De los anteriores desarrollos se observa entonces que:

$$A = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_{\mu, \beta}, \quad E = \mu A - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi_{\mu, \beta}. \quad (2.76)$$

Ahora, por otro lado, considerando a los fermiones independientes, denótese a los estados individuales de un fermión por ν con energías de cada estado como $\epsilon(\nu)$. Luego, si cada uno de los fermiones puede ocupar alguno de los estados individuales, denótese por $n_x(\nu)$ al número de ocupación del estado individual ν para un estado del sistema completo x dado. Así, la energía y número de partículas del sistema en el estado x se puede expresar en términos de las partículas en cada estado individual:

$$N_x = \sum_{\nu} n_x(\nu), \quad E_x = \sum_{\nu} n_x(\nu) \epsilon(\nu). \quad (2.77)$$

Utilizando (2.77) en (2.74) se tiene:

$$\Xi_{\mu, \beta} = \sum_x e^{-\beta \sum_{\nu} n_x(\nu) (\epsilon(\nu) - \mu)} = \sum_x \prod_{\nu} e^{-\beta n_x(\nu) (\epsilon(\nu) - \mu)}. \quad (2.78)$$

Véase que todos los posibles estados del sistema x se pueden ver como todas las posibles combinaciones de $n(v_1), n(v_2), \dots$, es decir, de números de ocupación de los estados individuales. En este punto se puede ver que no tener el número total de partículas fijo es la ventaja de este ensamble: se suma sobre todas las posibles combinaciones sin preocupación de esta restricción. Además, como las partículas son fermiones, por el principio de exclusión, $n(\nu) = 0$ o 1 para todo ν . Así:

$$\Xi_{\mu, \beta} = \sum_{n(v_1), n(v_2), \dots} \prod_{\nu} e^{-\beta n(\nu) (\epsilon(\nu) - \mu)} = \sum_{n(v_1)=0}^1 \sum_{n(v_2)=0}^1 \dots \prod_{\nu} \left(e^{-\beta (\epsilon(\nu) - \mu)} \right)^{n(\nu)}. \quad (2.79)$$

Puede probarse que esto último equivale a la siguiente expresión simplemente desarrollando el siguiente producto de la suma:

$$\Xi_{\mu, \beta} = \prod_{\nu} \sum_{n(\nu)=0}^1 \left(e^{-\beta (\epsilon(\nu) - \mu)} \right)^{n(\nu)} = \prod_{\nu} \left(1 + e^{-\beta (\epsilon(\nu) - \mu)} \right). \quad (2.80)$$

Si los estados individuales de partícula se pueden describir aproximadamente por medio de un continuo con una densidad de estados $g(\epsilon)$, entonces usando (2.80):

$$\begin{aligned}\ln \Xi_{\mu, \beta} &= \sum_{\nu} \ln \left(1 + e^{-\beta (\epsilon(\nu) - \mu)} \right) \approx \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta (\epsilon - \mu)} \right) g(\epsilon) d\epsilon \\ &= \int_0^{\mu} \ln(1 + e^{\beta x}) g(\mu - x) d\epsilon + \int_0^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta x}) g(\mu + x) d\epsilon,\end{aligned}$$

donde se separó la integral entre 0 y μ , y entre μ y ∞ . Además, se hizo el cambio de variable $x = \mu - \epsilon$, $dx = -d\epsilon$ para la primera, y $x = \epsilon - \mu$, $dx = d\epsilon$ para la segunda. Haciendo $1 + e^{\beta x} = e^{\beta x}(1 + e^{-\beta x})$:

$$\ln \Xi_{\mu,\beta} = \int_0^\mu \beta x g(\mu - x) d\epsilon + \int_0^\mu \ln(1 + e^{-\beta x}) g(\mu - x) d\epsilon + \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta x}) g(\mu + x) d\epsilon.$$

A bajas temperaturas, $\mu \gg 1/\beta$ [7], y además, si $x \gg 1/\beta$, $\ln(1 + e^{-\beta x})$ se anula, luego el límite superior se puede aproximar por ∞ :

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\mu,\beta} &\approx \int_0^\mu \beta x g(\mu - x) d\epsilon + \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta x}) (g(\mu - x) + g(\mu + x)) d\epsilon \\ &\approx \int_0^\mu \beta x g(\mu - x) d\epsilon + \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta x}) 2g(\mu) d\epsilon, \end{aligned}$$

donde se tomó el primer término de la expansión de $g(\mu - x) + g(\mu + x)$ en potencias de x . Utilizando que $\int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta x}) dx = \pi^2/12\beta$ [7], y haciendo el cambio de variable $x = \mu - \epsilon$, $dx = -d\epsilon$ se llega a:

$$\ln \Xi_{\mu,\beta} \approx \int_0^\mu \beta(\mu - \epsilon) g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6\beta} g(\mu). \quad (2.81)$$

Utilizando (2.76) en (2.81) se obtiene:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{\beta} \left(\beta \int_0^\mu g(\epsilon) d\epsilon + \beta \mu g(\mu) - \beta \mu g(\mu) + \frac{\pi^2}{6\beta} g'(\mu) \right) = \int_0^\mu g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g'(\mu), \\ E &= \mu A - \int_0^\mu (\mu - \epsilon) g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g(\mu) = \int_0^\mu \epsilon g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6\beta^2} \mu g'(\mu) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g(\mu). \end{aligned}$$

A bajas temperaturas, μ tiene un valor muy cercano al de la energía de Fermi ϵ_F (energía del último de estado de ocupación del sistema de fermiones a $T = 0$) [7]. Por tanto, las integrales se pueden reescribir para una función f : $\int_0^\mu f(\epsilon) d\epsilon = \left(\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^\mu \right) f(\epsilon) d\epsilon \approx \int_0^{\epsilon_F} f(\epsilon) d\epsilon + f(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F)$. Esta nueva integral se puede calcular fácilmente puesto que simboliza una “suma” sobre el estado base, de modo que: $\int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = A$ y $\int_0^{\epsilon_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon = E_0$, que es la energía del estado base. Reemplazando todo esto en las anteriores expresiones:

$$\begin{aligned} A &= A + g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g'(\mu), \\ E &= E_0 + \epsilon_F g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} \mu g'(\mu) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g(\mu). \end{aligned}$$

Reemplazando la primera ecuación en la segunda y definiendo la energía de excitación sobre el estado base como $E^* = E - E_0$ se tiene:

$$E^* = \epsilon_F g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) - \mu g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g(\mu) = g(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F)^2 + \frac{\pi^2}{6\beta^2} g(\mu). \quad (2.82)$$

Aproximando aún más $\mu \approx \epsilon_F$, entonces: $E^* = a/\beta^2 = aT^2$, donde se definió el *parámetro de densidad de niveles* $a = \pi^2 g(\epsilon_F)/6$ (tiene unidades de inverso de energía, usualmente MeV^{-1}). Usando esto en la relación termodinámica entre temperatura y entropía, y

sumando sobre todos los posibles estados de energía, se obtiene:

$$S(E) = \int_{E_0}^E \frac{dE'}{T(E')} = \int_0^{E^*} dE' \sqrt{\frac{a}{E'}} = 2\sqrt{aE^*}. \quad (2.83)$$

donde se hizo el cambio de variable $E^* = E' - E_0$, $dE^* = dE'$. Finalmente reemplazando esto en $\rho(E) = e^{S(E)}$ se encuentra la densidad de estados en el modelo del gas de Fermi, o la *fórmula de Bethe*:

$$\rho(E^*) \sim e^{2\sqrt{aE^*}}. \quad (2.84)$$

Esta dependencia exponencial es recurrente al describir densidades de estados nucleares. El parámetro de densidad de niveles depende principalmente de A , donde por ajustes con datos empíricos muestran una tendencia de $a \approx A/8 \text{ MeV}^{-1}$ [7] (un resultado teórico puede hallarse con la densidad de estados individuales del pozo esférico infinito pero resulta ser la mitad del valor empírico). Con esto, se puede estimar la magnitud de la temperatura: para muchos de los núcleos que se estudiarán más adelante, $A \sim 100 - 200$ y $E^* \sim 50 - 100 \text{ MeV}$, luego $T = \sqrt{8E^*/A} \approx 1.5 - 3 \text{ MeV}$.

Un tratamiento más sofisticado, como el de la fórmula de densidad de niveles de Gilbert-Cameron, que considera un desarrollo similar al del modelo de gas de Fermi, contando con la distinción entre protones y neutrones, entre otros detalles; de este modo, puede probarse que la ecuación (2.84) se puede modificar como sigue [9]:

$$\rho(E^*) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aE^*}}}{a^{1/4} E^{5/4}}. \quad (2.85)$$

Esta es la densidad de estados que se utilizará de ahora en adelante. Por simplicidad, se sigue utilizando el mismo parámetro de densidad de niveles $a = A/8 \text{ MeV}^{-1}$. Este modelo puede incluir además una dependencia con el momentum angular, correcciones por el modelo de capas y efectos de *pairing*, que por simplicidad no se incluyen acá.

2.4.3 Ancho de decaimiento de fisión: el modelo de Bohr-Wheeler

En núcleos pesados y altamente excitados, la fisión (espontánea) constituye un modo de decaimiento que compite considerablemente con los demás modos (sobre todo con el de neutrones), por esta razón, para describir apropiadamente los canales de salida de reacciones con núcleos pesados es imprescindible la inclusión de su tratamiento.

La teoría estadística más importante sobre la fisión nuclear fue expuesta poco después de su descubrimiento, por N. Bohr y J. Wheeler en 1939, que no sólo aplica a la fisión sino a cualquier división binaria de un núcleo excitado [5]. Sin embargo, tratamiento del proceso de fisión ha probado ser tan complejo, que incluso desde entonces, no existe aún una teoría bien definida y universalmente aceptada (aunque recientes desarrollos son prometedores [3]), y las predicciones detrás de sus cantidades se hacen con gran ayuda de medios empíricos.

Siguiendo a [7], y recuperando la discusión sobre el efecto de deformación en el núcleo y la barrera de fisión de la sección 2.2.1, la fisión ocurre por medio de deformaciones lejos de la forma inicial en el estado base del estado compuesto para finalmente separarse en el *punto de escisión*.

La energía de excitación inicial se reparte entre los grados de libertad asociados a la deformación, y que tras la escisión reaparece como energía de excitación de los fragmentos

de fisión. Así, es conveniente definir una “coordenada de fisión” q asociada a una selección particular de parámetros geométricos que describen deformaciones continuas del núcleo, y que determina un potencial de fisión: energía de deformación estática.

Este potencial forma un máximo, que respecto a la energía de deformación del estado base q_{gs} (se puede asumir nula), está dada por B_f : la barrera de fisión, que ocurre en el punto de silla q_{sd} . Lo discutido hasta ahora se ilustra en la figura (2.6).

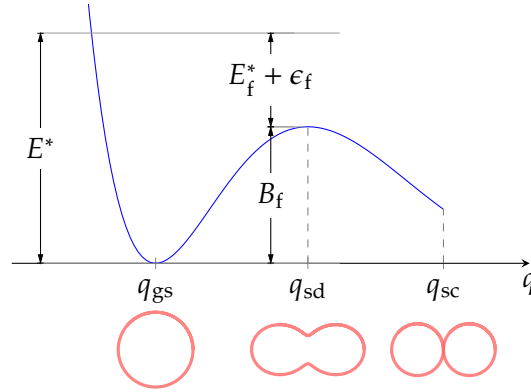


Figura 2.6: Ilustración del proceso de fisión del núcleo compuesto de energía de excitación E^* : a medida que aumenta la deformación del estado base (sin deformación) q_{gs} , y si la energía es la suficiente para superar la barrera de fisión B_f en el punto de silla q_{sd} , el compuesto puede fisionarse en el punto de escisión q_{sc} , quedando con una energía de excitación en el punto de silla E_f^* (tras invertir una energía ϵ_f asociada al parámetro de deformación).

Con el fin de calcular probabilidades, se definen los estados “f” como estados de transición del compuesto en el punto de silla, tal que $q = q_{sd}$ para estos estados. Dichos estados difieren de los iniciales del compuesto porque: (1) se invirtió energía en los grados de libertad de deformación, de modo que la energía disponible para los estados de transición disminuye con la barrera de fisión, y (2) el cambio de forma del núcleo hace que los niveles se distribuyan diferente [7].

La coordenada de fisión q podría entenderse como la distancia entre los centros de los futuros fragmentos de fisión. Y definiendo \dot{q} como la “velocidad de fisión”, se podría considerar momentum y energía, como si fuera la de una variable dinámica (con posición q , velocidad \dot{q} , etc.). De este modo, se define $p = m(q)\dot{q}$ y $\epsilon = p^2/2m(q)$ como momentum y energía cinética asociada a la deformación, donde $m(q)$ representa la inercia ante cambios en la deformación [7].

Para poder hallar la probabilidad de fisión por unidad de tiempo, se puede hacer un análisis similar al de la sección 2.4.1: usar la regla de oro de Fermi, identificar la rata (o probabilidad por unidad de tiempo) de formación del compuesto desde la reacción inversa y aplicar la invariancia por inversión temporal.

Teniendo en cuenta la reacción inversa (dos fragmentos de fisión separados una distancia q a punto de fusionarse), y asumiendo que a medida que disminuye q , los fragmentos se siempre se fusionarán formando un compuesto en el estado sin deformación, la rata de formación del compuesto es equivalente al flujo de la “partícula” representada por q que recorre un “volumen” uni-dimensional s de referencia. Así, el flujo está dado por número de partículas (una) en el volumen por unidad de tiempo, o bien, $(1/s)(s/\Delta t) = \dot{q} \times 1/s$.

Como los estados de transición determinan la configuración final de fisión, \dot{q} puede

evaluarse en el punto de silla y así:

$$W_{f \rightarrow C} = \frac{\dot{q}_{sd}}{s}. \quad (2.86)$$

Invocando la regla de oro de Fermi para el proceso reverso (desde estados de transición a los estados del compuesto en el estado base, determinados por la densidad de estados $\rho_C(E^*)$), se tiene que:

$$W_{f \rightarrow C} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{f \rightarrow C}|^2 \rho_C(E^*). \quad (2.87)$$

Ahora, para calcular la rata de fisión (proceso $C \rightarrow f$), se debe definir una densidad de estados finales (en el punto de silla), de modo que se puede escribir como la rata de transición de un estado inicial del compuesto a todos los posibles estados de transición. Esta está compuesta de dos partes: una parte asociada a los estados de deformación (q) y otra asociada a la estadística del compuesto en el punto de silla.

A la primera, recordando la interpretación de q como asociada a una partícula, esta densidad de estados se puede escribir como un volumen del espacio de fase ($q_{sd}, p_f = m_{sd}\dot{q}_{sd}$): $s dp_f/h$, donde se toma a s como el elemento del espacio de "posición" y se adimensionaliza con h . La segunda estaría dada por la densidad de estados nucleares en el punto de silla a una energía de excitación E_f^* (que tiene en cuenta la inversión en deformación y la barrera de fisión): $\rho_{sd}(E_f^*)$.

De este modo, por la conservación de la energía, $E_f^* = E^* - B_f - \epsilon_f$, donde $\epsilon_f = p_f^2/2m_{sd}$ es la energía asociada al parámetro de fisión en el punto de silla, y así, la rata de fisión se escribe:

$$dW_{C \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{C \rightarrow f}|^2 \rho_{sd}(E^* - B_f - \epsilon_f) \frac{s dp_f}{h}. \quad (2.88)$$

Aludiendo a la invariancia por inversión temporal ($T_{C \rightarrow f} = T_{f \rightarrow C}$) en las ecuaciones (2.87) y (2.88), y además, haciendo $d\epsilon_f = (p_f/m_{sd})dp_f = \dot{q}_{sd}dp_f$, se tiene:

$$dW_{C \rightarrow f} = \frac{W_{f \rightarrow C}}{\rho_C(E^*)} \rho_{sd}(E^* - B_f - \epsilon_f) \frac{s}{2\pi\hbar} \frac{d\epsilon_f}{\dot{q}_{sd}}.$$

Reemplazando (2.86) se obtiene la rata de fisión por unidad de energía como:

$$\frac{dW_f}{d\epsilon_f} d\epsilon_f \equiv \frac{dW_{C \rightarrow f}}{d\epsilon_f} d\epsilon_f = \frac{\rho_{sd}(E^* - B_f - \epsilon_f)}{2\pi\hbar\rho_C(E^*)} d\epsilon_f, \quad (2.89)$$

Este resultado es similar al de Weisskopf para evaporación de partículas, e involucra densidades de estados nucleares que pueden tomarse, por simplicidad, como la de (2.85). Igual que antes, recordando la interpretación de Γ_f/\hbar de probabilidad de decaimiento por unidad de tiempo, el ancho de decaimiento de fisión se expresa como:

$$\Gamma_f = \hbar \int_0^{E^* - B_f} \frac{dW_f}{d\epsilon_f} d\epsilon_f, \quad (2.90)$$

donde se suma sobre todos los posibles estados de energía de q , hasta un máximo de $E^* - B_f$, límite dado por la conservación de la energía. Se asume que $0 < E^* - B_f$, de otra forma, no se superaría la barrera de fisión; si no se cumple, $\Gamma_f = 0$ y el modo de decaimiento de fisión no está disponible.

De las ecuaciones (2.89) y (2.65), puede definirse una distribución de probabilidad para ϵ_f :

$$P(\epsilon_f)d\epsilon_f = \frac{1}{\Gamma_f} \frac{\rho_{sd}(E^* - B_f - \epsilon_f)}{2\pi\rho_C(E^*)} d\epsilon_f, \quad (2.91)$$

donde Γ_f es el factor de normalización, que reescribiéndolo, se halla la *fórmula de Bohr-Wheeler*:

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_C(E^*)} \int_0^{E^* - B_f} \rho_{sd}(E^* - B_f - \epsilon_f) d\epsilon_f. \quad (2.92)$$

La ecuación (2.92) es la que se utilizará para calcular la probabilidad del canal de decaimiento de fisión según la distribución de probabilidad (2.57).

La barrera de fisión, depende de cada núcleo: para núcleos muy ligeros la barrera de fisión es muy grande, tanto que no vale la pena ni siquiera hablar de la posibilidad de fisión, mientras que para núcleos pesados es mucho más pequeña y allí es más probable la fisión; además depende del momentum angular. En la práctica, como para el l_{crit} de la sección 2.2.1, la rutina creada por A. Sierk (1986) [10] se escoge para estimar las barreras de fisión de los núcleos que la tengan (a $l = 0$, dado que no se trata momentum angular aquí). Si no se encuentra barrera de fisión, el modo de decaimiento de fisión no es posible.

Lo que se ha calculado acá es la probabilidad de que ocurra fisión a una energía de excitación E^* , pero una vez ocurrida la fisión, el formalismo no da más detalles de qué ocurre con los fragmentos de fisión: p. ej, su energía, momentum angular o distribución de nucleones.

Esto no es de interés en este trabajo: el tratamiento directo de los productos de fisión es difícil, puesto que, a diferencia de los otros modos de decaimiento que siempre resultan en los mismos productos, los fragmentos de fisión no sólo pueden ser simétricos (que son predominantes), sino que también asimétricos y pueden distribuirse aleatoriamente en un amplio rango de núcleos; su predicción se hace casi exclusivamente con ayuda de datos empíricos. Por tanto, en este trabajo, sólo es de interés saber si ocurre o no la fisión, una vez ocurre, la cascada de decaimiento se detiene, informando que hubo fisión, sin detalles adicionales.

Finalmente, este cálculo es un buen punto de partida para comprender esta probabilidad de fisión, pero este proceso es tan complejo e involucra tantos factores como transmisión por debajo de la barrera (por el coeficiente de Hill-Wheeler, p. ej.), potenciales de fisión con barrera doble, fricción, correcciones por modelo de capas y *pairing*, emisión de partículas pre-escisión, etc., que rápidamente requiere un análisis más refinado y detallado que el de Bohr y Wheeler.

En el siguiente capítulo, el objetivo será aplicar lo visto en este capítulo en un código, que pueda calcular todas aquellas cantidades relacionadas a una reacción de fusión-evaporación, como la sección eficaz de formación del compuesto, los residuos finales formados por la evaporación secuencial del compuesto y sus respectivas secciones eficaces. Además, para evaluar el desempeño de la teoría seleccionada en este capítulo, se compararán con múltiples reacciones de interés, con las que encontrar coincidencias y analizar las limitaciones de la teoría.

Capítulo 3

Esquema del código de fusión-evaporación y resultados

Con toda la teoría vista detrás de la reacción de fusión-evaporación (siendo sólo una primera aproximación) en el capítulo 2, esta puede aplicarse en la práctica para simular los resultados de los canales de salida de esta reacción, dados los núcleos proyectil, blanco y energía incidente del proyectil.

El objetivo de este capítulo es: (1) recopilar cómo se aplica lo visto en el capítulo anterior en un código, y (2) exponer ejemplos donde se aplica esto, obteniendo y analizando resultados, y si es posible, comparándolo a datos experimentales y/o otros datos de referencia (p. ej., códigos estándar de reacciones nucleares como PACE).

Es importante comenzar organizando ideas de cómo ocurre la reacción de núcleo compuesto.

Primero, dados A_p, Z_p, A_t, Z_t y $E^{(\text{lab})}$, se da la formación del compuesto $A_{\text{cn}}, Z_{\text{cn}}$, como la fusión proyectil-blanco, resultando en una energía de excitación E^* .

Luego, ocurre el decaimiento del compuesto debido a su alta energía de excitación escogiendo aleatoriamente alguno de los diferentes canales de decaimiento (neutrones, protones, alfas y fisión), que compiten entre sí dependiendo de su ancho de decaimiento Γ_x . El cómo muestrear las distribuciones de probabilidad asociadas a este proceso se presenta en este capítulo.

Pero además, como se mencionó en la sección 2.3, en general, no ocurre un sólo decaimiento, sino que la energía de excitación del residuo aún puede permitir decaimientos sucesivos en *cascada*, renovando su energía de excitación. Esta cascada de decaimientos secuenciales se discutirá en detalle más adelante.

Esto ocurre hasta que: (1) el residuo llega a una energía de excitación más baja que el umbral de emisión de cualquiera de los canales de decaimiento, o (2) se fisiona. En cualquier caso, ninguno de los canales de decaimiento están disponibles y se forma el residuo final. Debido al carácter probabilístico del decaimiento, esto puede ocurrir por múltiples caminos, formando los *canales de salida*. Estos serán el resultado principal que debe retornar el código a realizar (con las secciones eficaces asociadas), y que sean comparados con datos de referencia.

El código que se construirá teniendo en cuenta todo esto se basa en el lenguaje de programación Python, que es relativamente nuevo comparado a FORTRAN o C, estándares en física nuclear, y que resulta tener una sintaxis más accesible, flexible y concisa que otros lenguajes.

3.1 Preliminares

En primera instancia, el código a construir debe recibir como entradas A_p , Z_p , A_t , Z_t y $E^{(\text{lab})}$, desde este punto se pueden calcular el resto de cantidades físicas.

Antes de discutir las propiedades decisivas de la reacción, se implementa la rutina `kinematic_quantities` para calcular cantidades cinemáticas útiles de la reacción de formación del compuesto como: la energía de los reactantes en el marco del centro de masas (2.8), la barrera de Coulomb proyectil-blanco (2.2), el valor Q de la reacción (2.16), la energía de excitación del compuesto (2.15) y las velocidades (clásicas) que tomaría el proyectil y el compuesto en el marco del laboratorio, (2.5) y (2.13). Estos son valores retornados por el código al final.

Las masas nucleares se calculan, en virtud de la ecuación (2.14), utilizando los valores de los excesos de masa Δ (o ME) para cada núcleo de interés, los cuales son consultados con la herramienta *Nuclear Wallet Cards Search* de la base de datos *NuDat* del *National Nuclear Data Center* (Laboratorio Nacional de Brookhaven, Estados Unidos), para los más de 3300 isótopos disponibles desde ^1n hasta ^{294}Ts [17] (a fecha del 21 de enero de 2022). Todas las masas nucleares de acá en adelante se calculan de esta forma.

La energía inicial en el marco CM, $E^{(\text{CM})}$, y la energía de excitación del compuesto E^* se usarán para calcular, la sección eficaz de fusión y el decaimiento del compuesto, respectivamente.

3.2 Sección eficaz de fusión

Ahora, los resultados semi-clásicos encontrados para la sección eficaz de fusión por sí solos pueden analizarse para extraer conclusiones sobre la dinámica de la reacción.

En la sección 2.2, se obtuvieron fórmulas concernientes a la sección eficaz válidas (1) exclusivamente sobre la barrera del potencial coulombiano + nuclear (resultado clásico (2.46)), y (2) sobre y debajo de la barrera (fórmula de Wong (2.55)).

La ventaja que tiene el resultado clásico es que tiene una forma más simple, lo que es conveniente para hacer cálculos más rápidos, y además no necesita calcular la segunda derivada del potencial en la barrera para $\omega_B^2 \sim V''(x_B)$, que sí requiere la fórmula de Wong.

Además, en cualquier caso, para limitar el crecimiento de σ_{fus} a altas energías, se modifica la sección eficaz con l_{crit} para $E^{(\text{CM})} > E_{\text{crit}}$, el cual se calcula con una rutina externa concerniente a la fisión del compuesto. En este caso, estos valores no se calculan con la rutina original BARFIT de A. Sierk en FORTRAN, sino con una re-implementación como una librería de Python, `fisbar`, disponible en [10].

Así, se forman dos rutinas separadas, `classical_cs` y `Wong_cs`, que calculan la sección eficaz por el resultado clásico y por la fórmula de Wong; ambas tienen la misma estructura: (1) se calcula la posición de la barrera del potencial $V(r)$, R_B , hallando el mínimo local de $-V(r)$ con la herramienta `minimize` de la librería `scipy.optimize`, de ahí se calcula la altura de la barrera V_B , (2) se calcula l_{crit} con `fisbar` (si existe), y luego E_{crit} , (3) si existe l_{crit} y $E^{(\text{CM})} > E_{\text{crit}}$, se hace $\sigma_{\text{fus}} = \pi \hbar^2 l_{\text{crit}}^2 / 2\mu E^{(\text{CM})}$, en otro caso, se aplica la sección eficaz correspondiente (para la sección eficaz clásica, se hace $\sigma_{\text{fus}} = 0$ para $E^{(\text{CM})} < V_B$). Para calcular $\hbar\omega_B$ para la fórmula de Wong, se calculan derivadas de V por medio de la herramienta `derivative` de la librería `scipy.misc`. Como detalle adicional, las secciones eficaces se calculan en mb teniendo en cuenta la conversión $1 \text{ fm}^2 = 10 \text{ mb}$.

El código permite intercambiar fácilmente entre ambos casos; por defecto, los cálculos del resto del programa se hacen con la rutina `Wong_cs`. R_B , V_B y σ_{fus} son retornadas por aparte por el código como valores de utilidad de la reacción.

Ahora, vale la pena hacer cálculos con estas rutinas y ver explícitamente como se relacionan o diferencian. Ya se había hablado que el resultado clásico es el límite de altas energías sobre la barrera para la fórmula de Wong. También, se sabe que la fórmula de Wong, aunque tiene algunos argumentos de origen cuántico, tiene varias aproximaciones detrás (la aproximación parabólica de la barrera, descartar la dependencia de los parámetros de la barrera con el momentum angular, etc.), por lo que también vale la pena observar qué tan bueno es el comportamiento de la fórmula a energías por debajo de la barrera.

De este modo, utilizando estas rutinas, la figura (3.1) muestra las secciones eficaces de dos ejemplos de reacciones de fusión, $^{28}\text{Si} + ^{24}\text{Mg}$ y $^{20}\text{Ne} + ^{27}\text{Al}$. En esta se compara la sección eficaz clásica con la de la fórmula de Wong, y además se incluye una comparación con datos experimentales consultados de [16, 23].

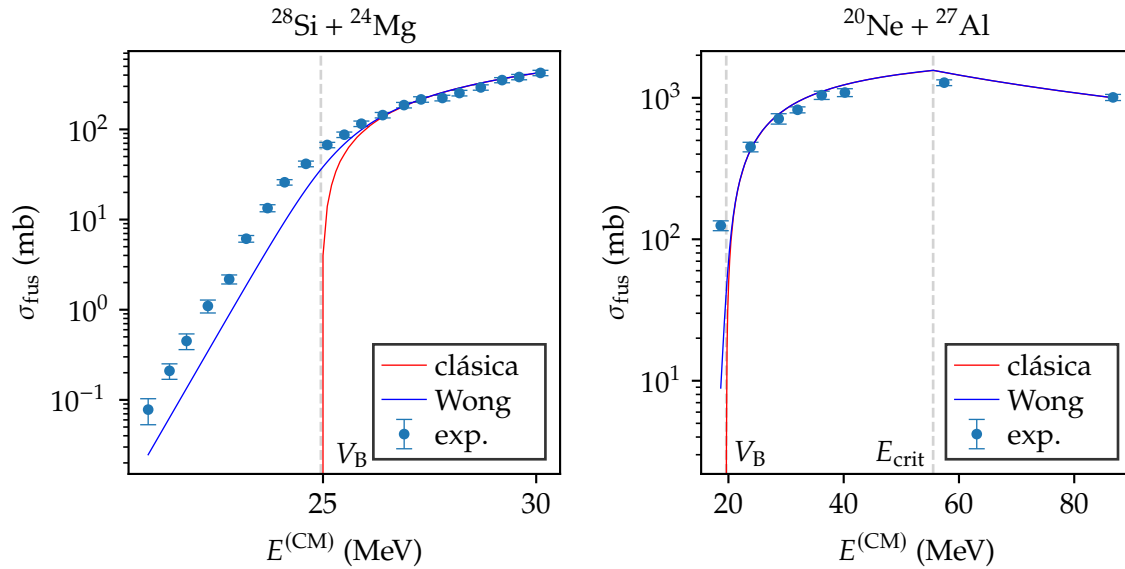


Figura 3.1: Secciones eficaces de fusión en función de la energía de los reactantes en el marco del centro de masas para las reacciones: $^{28}\text{Si} + ^{24}\text{Mg}$ (izq.) y $^{20}\text{Ne} + ^{27}\text{Al}$ (der.). Se comparan el resultado clásico (2.46), la fórmula de Wong (2.55) y resultados experimentales extraídos de [16, 23]. Nótese el cambio abrupto en la barrera del potencial V_B y, en la segunda reacción, el cambio debido a l_{crit} .

La figura anterior muestra que para valores de energía (CM) sobre la barrera, en efecto, coinciden, y no sólo a altas energías sino que rápidamente coinciden a unos pocos MeV sobre la barrera. Los datos experimentales indican claramente que sí hay transmisión (o tunelamiento) bajo la barrera, de menos de ~ 1 mb, pero no nula. De aquí la importancia de considerar la fórmula de Wong: aunque muchas reacciones nucleares se realizan para energías considerablemente encima de la barrera, dependiendo de la situación, considerar fusión bajo de la barrera puede ser importante o no.

Bajo la barrera, la fórmula de Wong da una buena tendencia de los datos, que aunque con una notable diferencia, es aceptable para ser una fórmula relativamente simple y

con varias aproximaciones detrás. En el caso donde sí aparece E_{crit} , sí se aprecia una disminución de la sección eficaz a mayores energías, lo que muestra la necesidad del mecanismo de disminución como el que se tomó acá (I_{crit}).

En general, los casos teóricos son aceptables comparados a los datos experimentales, y para efectos prácticos son suficientes para describir este tipo de reacciones en un rango “medio” de energía. A bajas energías, los efectos cuánticos comienzan a ser cada vez más notables requiriendo un tratamiento cuántico más detallado, y a altas energías, efectos sobre los canales de entrada que compiten con la formación del compuesto en fusión completa, como reacciones directas, *deep inelastic scattering* o fusión incompleta, no se pueden ignorar fácilmente.

Finalmente, vale la pena destacar que, en tratamientos más sofisticados, la costumbre es hacer un análisis cuántico completo con la ecuación de Schrödinger y un potencial óptico con parámetros adecuados para determinar los coeficientes de transmisión; en contraste, el enfoque de este trabajo se enfocó en modelos fenomenológicos relativamente simples para dar una idea a primera aproximación.

3.3 Monte Carlo para el decaimiento del compuesto

Habiendo visto más explícitamente qué tan buenos resultados da la sección eficaz de fusión, es hora de organizar las ideas concernientes al decaimiento del compuesto una vez formado (con $A_{\text{cn}} = A = A_p + A_t$ y $Z_{\text{cn}} = Z = Z_p + Z_t$), y cómo se aplican para calcular los canales de salida en la práctica.

En primera instancia, vale la pena observar más explícitamente el comportamiento de la distribución de probabilidad para la energía del eyectil ϵ_x (2.68) (con la densidad de estados (2.85) y $a = A/8 \text{ MeV}^{-1}$), con la cual se calculan los anchos de decaimiento Γ_x que deciden cuál modo de decaimiento escoger, y también se calcula aleatoriamente la energía que se lleva el eyectil al ser emitido. En el caso de la fisión, se utiliza la distribución (2.91), pero sólo es de interés calcular el ancho Γ_f . Como con I_{crit} , la barrera de fisión se calcula con la re-implementación en Python de la rutina de A. Sierk, *fisbar* [10].

Con el fin de comparar los diferentes Γ_x de los canales disponibles, la figura (3.2) muestra los diferentes $P(\epsilon_x)$ para emisión de neutrones, protones y alfas para los núcleos compuestos ^{64}Zn y ^{32}S , pero sin normalizar, de modo que el área bajo la curva de cada una es Γ_x y así se pueden comparar visualmente. El modo de decaimiento de fisión no se incluye para estos núcleos puesto que despreciable comparado a los otros modos, pero la idea es la misma. Para esto, se construyeron las rutinas *Weisskopf* y *BohrWheeler*.

Respecto la figura (3.2), el caso del ^{64}Zn es el más común, donde la emisión de neutrones predomina (su área bajo la curva es mayor que el resto), debido a que, como se había dicho antes, la ausencia de una barrera de Coulomb para neutrones facilita su emisión. Nótese que en este núcleo hay un exceso de neutrones sobre protones, sin embargo, en otros núcleos como ^{32}S , la competición entre modos es más notable, y p. ej., en núcleos donde hay un exceso de protones sobre neutrones, la emisión de protones puede llegar a ser predominante. También esto depende de la energía de excitación, si llega a ser alta, la competición entre modos puede ser más favorable.

Puede verse claramente la presencia de los umbrales de emisión para partículas cargadas, debidos a las barreras de Coulomb respectivas, de modo que estas distribuciones se ven desplazadas por esta barrera (energías por debajo NO son posibles). La energía de emisión más probable ocurre poco después del umbral; altas energías de emisión de los

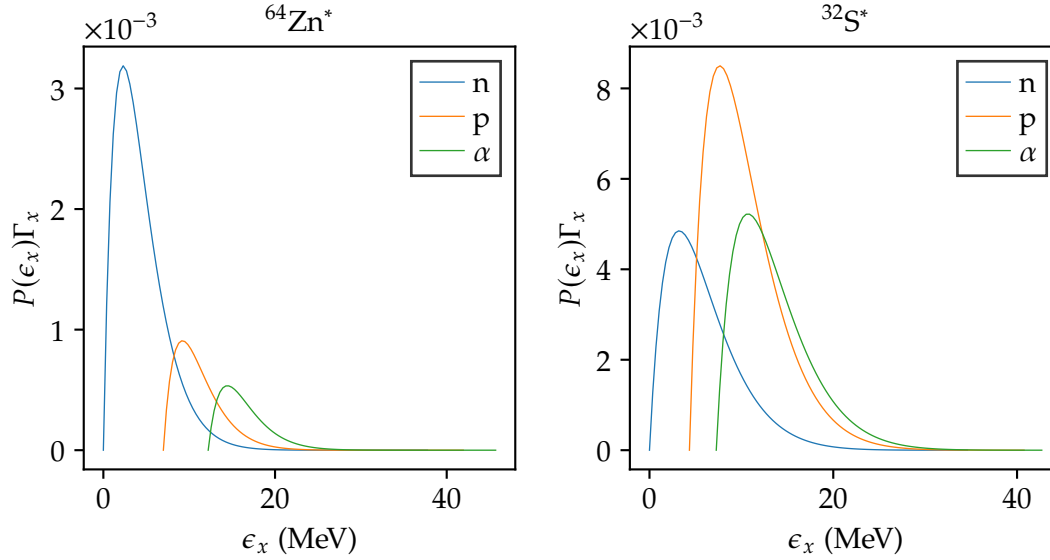


Figura 3.2: Distribución de probabilidad para la energía del eyectil x (sin normalizar) en función de ϵ_x (ecuación (2.68)), para neutrones (azul), protones (naranja) y ^4He (verde). Se muestran para los núcleos compuestos ^{64}Zn (izq.) y ^{32}S (der.). Nótese que para valores menores a las respectivas barreras de Coulomb, la probabilidad de emisión es nula. El área bajo la curva es el ancho de decaimiento Γ_x .

eyectiles son cada vez menos probables.

En las secciones 2.4.1 y 2.4.3, se habló de unas condiciones necesarias para poder calcular los anchos de decaimiento: $E^* > V_{\text{CB}} - Q_{\text{C} \rightarrow x+R}$ para evaporación y $E^* > B_f$. Estas condiciones son vitales para la ocurrencia de cada modo de decaimiento: si la condición de un modo no ocurre, ese modo NO está disponible para decaimiento; en ese caso, se hace $\Gamma_x = 0$. Esto se aplica en el código para verificar la posibilidad de emisión por cada modo de decaimiento.

Una vez calculados los anchos de decaimiento (siempre y cuando no sean todos nulos), se elige un modo de decaimiento aleatoriamente según la distribución $P_x = \Gamma_x / \Gamma$, donde $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f$, de modo que entre más grande sea el ancho de un modo, más probable será de ser escogido. Para esto, el método de Monte Carlo (o más precisamente, de la transformada inversa) ofrece un procedimiento sencillo descrito en el pseudo-código (1) [5]:

Algoritmo 1: Método de Monte Carlo para una distribución discreta $P(x_n)$

Entrada: $P(x_n)$ para todo $n = 0, 1, \dots$

se genera una valor u de una variable aleatoria uniforme entre 0 y 1

$F_n \leftarrow \sum_{i=0}^n P(x_i)$

para $i = 1, 2, \dots$ **hacer**

si $F_{i-1} \leq u < F_i$ **entonces**

$x \leftarrow x_i$

parar ciclo

fin

fin

Salida: x

De este modo, en la rutina `decay`, se escoge el modo de decaimiento x aleatoriamente (calculando u con la librería `random`).

Aunque en la siguiente sección se describirá en detalle, el compuesto se des-excita emitiendo partículas en *cascada*. De este modo, tras escoger el modo de decaimiento, se actualizan el número de masa y atómico del núcleo debido a la emisión del eyectil: $A \rightarrow A - A_x$ y $Z \rightarrow Z - Z_x$. También se debe actualizar la energía de excitación del residuo como $E^* \rightarrow E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x$, pero ϵ_x no es fija y más bien, está dictada por la distribución de probabilidad (2.68). Así, en la rutina `energy_ejectile`, se escoge un valor aleatorio para esta distribución por Monte Carlo, previamente discretizando la distribución como $P_n = P(\epsilon_{x,n})\Delta\epsilon_x$ con $\Delta\epsilon_x$ lo suficientemente pequeño (en el código se toma como la centésima parte del rango de energía correspondiente).

Por último, no se especificó antes, pero las integrales para calcular los anchos de decaimiento (ecuaciones (2.69) y (2.92)), por rapidez de cálculo, se hacen discretizando de la misma forma: $\int f(\epsilon_x)d\epsilon_x \approx \sum_i f(\epsilon_{x,i})\Delta\epsilon_x$, en la rutina `branching_ratio`.

3.4 Cascada de decaimientos secuenciales

Ya se sabe cómo manejar los decaimientos en los diferentes modos de evaporación o fisión a primera aproximación. Ahora, como ya se ha comentado repetidas veces, si la energía de excitación del compuesto es alta, una gran cantidad de energía residual queda tras la emisión del eyectil, de modo que el núcleo residual sigue tan excitado que es inestable y vuelve a decaer, jugando el rol de un nuevo núcleo compuesto para la emisión de otro eyectil, y así secuencialmente, hasta que se alcanza un residuo estable que no puede acceder a ningún modo de decaimiento: esta es la llamada *cascada* de decaimientos [7].

El objetivo de un cálculo de cascada de decaimientos es, dado un cierto número de núcleos compuesto iniciales, o número de cascadas, determinar el número de núcleos residuales en las diferentes canales finales (o de salida), caracterizados por diferentes A y Z , y que cuya energía de excitación es insuficiente para posterior emisión de partículas o fisión [7].

Este cálculo se suele hacer de dos formas [7]: (1) por generaciones: se calculan los anchos de decaimiento de cada modo para el compuesto inicial, se dejan decaer *todos* los núcleos formando la *primera generación*, se repite el proceso calculando los anchos con la primera (combinados con los anteriores) y dejando decaer todos los núcleos a la *segunda generación*, y así sucesivamente; o (2) verticalmente: tomando *un sólo* compuesto inicial, se aplica toda su cadena de decaimiento, pasando por *un sólo* núcleo de cada generación, de modo que al llegar al residuo final de esta cadena, se pasa a otro núcleo compuesto inicial repitiendo la cadena, y así sucesivamente, recolectando al final los datos de los A y Z de los núcleos finales de todas las cadenas, obteniendo la distribución de los residuos de evaporación.

De estos dos esquemas, el segundo es el que se usa en el código de este trabajo, y de la misma forma, lo usa el código PACE, que será el código de referencia con el que se compararán resultados más adelante.

Aunque el primer esquema tenga la ventaja de que se calculen menos veces los anchos de decaimiento, al reutilizar los de generaciones anteriores o núcleos repetidos, el segundo esquema permite la *paralelización* del código (calcular de forma simultánea los pasos del ciclo que recorre todas las cadenas, lo que permite reducir el tiempo de cómputo, pero requiere que los pasos sean todos independientes entre sí; esta se aplicará con la librería

joblib) y el tratamiento de fisión (que requiere añadir residuos a la cantidad fija inicial creando nuevas cadenas, o eliminarlos en el caso que no se tengan en cuenta los fragmentos de fisión).

Aún falta hablar de cómo se detendrán específicamente cada una de estas cadenas: los decaimientos llegarán a un punto donde ningún modo de decaimiento está disponible y $\Gamma = 0$, de modo que NO será posible seguir la evaporación y se detendrá dejando un residuo A, Z . Otra situación puede ocurrir, y es que si el modo de fisión llega a ser seleccionado, como ya se dijo antes, no se trata acá lo que pase después con los fragmentos de fisión, por tanto, en este caso, la cadena de decaimientos también se detendrá, sólo informando que hubo un evento de fisión. Cada cadena o cascada individual se calcula con la rutina `cascade`.

Así, este esquema vertical se aplica como un ciclo de N_{casc} repeticiones o eventos (que pueden variarse, y de hecho son una entrada del código), que resultan en una lista de núcleos o eventos de fisión, determinados por la aleatoriedad del proceso.

El paso a seguir es encontrar la proporción de un núcleos de un cierto canal al número total. El objetivo de esto es aludir al principio de independencia de Bohr (2.57): la sección eficaz asociada a un cierto canal de salida será el producto de la sección eficaz de formación del compuesto y la probabilidad de decaer en ese canal, la cual se estima como $P_{C \rightarrow \text{canal}} = \text{número de eventos de ese canal} / \text{número total de eventos}$, si el número total de eventos es lo suficientemente grande. Luego:

$$\sigma_{\text{canal}} \equiv \sigma_{P+T \rightarrow C} P_{C \rightarrow \text{canal}} = \sigma_{\text{fus}} \frac{n}{N_{\text{casc}}} [\text{mb}], \quad (3.1)$$

donde n es el número de eventos asociados a ese canal. El número de eventos encontrados de cada canal se puede encontrar contando el número de veces que se repite un cierto núcleo o evento de fisión en la lista de eventos retornados. Esto se logra fácilmente con la herramienta `Counter` de la librería `collections`. Este conteo, junto al ciclo de cadenas de decaimiento se aplica en la rutina `cascade_counts`.

Haciendo esto para cada canal, el código retorna la lista con el número de eventos de cada uno, su proporción y la sección eficaz (3.1).

El pseudo-código (2) reúne la estructura general del código discutido, haciendo énfasis en el ciclo de todas las cadenas de decaimiento del núcleo compuesto.

3.5 Resultados

Hasta este punto, se ha hablado de cómo es la estructura del código, cómo se organiza, qué utiliza y qué retorna. Ahora es el momento de utilizarlo para mostrar resultados concretos aplicados a diferentes reacciones.

En primera instancia, vale la pena observar explícitamente la información retornada por el código, la cual se resume como sigue:

- (1) información sobre los núcleos proyectil, blanco y compuesto, como su número de masa, número atómico, número de neutrones, símbolo químico y exceso de masa,
- (2) cantidades físicas varias relacionadas a la reacción de formación del compuesto: energía del proyectil en el laboratorio y CM, valor Q de la reacción, barrera de Coulomb entre proyectil y blanco, energía de excitación del compuesto, velocidades (clásicas) del proyectil y el compuesto en el marco del laboratorio, la altura y posición de la barrera nuclear + coulombiana, y la sección eficaz de fusión,

Algoritmo 2: Esquema de formación y decaimiento del núcleo compuesto

Entrada: $A_p, Z_p, A_t, Z_t, E^{(\text{lab})}, N_{\text{casc}}$

se calcula de $E^{(\text{CM})}$ y E^*

con $E^{(\text{CM})}$, se calcula σ_{fus}

$A \leftarrow A_p + A_t$

$Z \leftarrow Z_p + Z_t$

para cada una de las N_{casc} cascadas **hacer**

repetir

para $x = n, p, \alpha, f$ **hacer**

 si es posible, se calcula Γ_x , si no, se hace $\Gamma_x = 0$

fin

$\Gamma \leftarrow \Gamma_n + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_f$

si $\Gamma = 0$ **entonces**

 residuo $\leftarrow A, Z$

parar ciclo

fin

 se calcula un valor aleatorio x que sigue la distribución $P_x = \Gamma_x / \Gamma$

si $x = f$ **entonces**

 residuo \leftarrow fisión

en otro caso

 se calcula un valor aleatorio ϵ_x que sigue la distribución $P(\epsilon_x)$ (2.68)

$A \leftarrow A - A_x$

$Z \leftarrow Z - Z_x$

$E^* \leftarrow E^* + Q_{C \rightarrow x+R} - \epsilon_x$

 residuo $\leftarrow A, Z$

fin

hasta que residuo = fisión

devolver residuo

fin

se almacenan todos los residuos y se cuenta la cantidad n que hay del mismo núcleo o evento de fisión (canales de salida)

para cada canal de salida **hacer**

$\sigma_{\text{canal}} \leftarrow \sigma_{\text{fus}} n / N_{\text{casc}}$

fin

Salida: todos los canales de salida y sus correspondientes secciones eficaces σ_{canal}

- (3) una lista de todos los diferentes canales de salida (isótopos o fisión) encontrados de la evaporación secuencial del compuesto, junto al número de eventos que resultaron de cada uno, su proporción y la sección eficaz respectiva de cada canal.

De este modo, la tabla (3.1) muestra los resultados obtenibles del código para una reacción que involucra un haz de ^{58}Ni en ^{50}Cr a una energía de 250 MeV y 10000 cascadas.

En esta tabla se listan 25 residuos finales, todos obtenidos por la evaporación de partículas, entre los cuales se reparten los 10000 eventos, aparentemente, alrededor de ciertos núcleos predominantes. Lejos de estos núcleos (evaporación de muy pocas o muchas partículas), los eventos son más improbables.

Tabla 3.1: Primer ejemplo de los resultados obtenibles del código realizado en este trabajo.

<i>Núcleos involucrados de la reacción de fusión</i>						
	A	SQ	Z	N	ME (MeV)	
Proyectil	58	Ni	28	30	−60.2	
Blanco	50	Cr	24	26	−50.3	
Compuesto	108	Te	52	56	−65.8	
<i>Cantidades relacionadas a la formación del compuesto</i>						
Energía del proyectil en el lab. (MeV)	250					
Energía inicial en el marco del CM (MeV)	115.7					
Barrera de Coulomb proyectil-blanco (MeV)	106.7					
Valor Q de la formación del compuesto (MeV)	−44.7					
Energía de excitación del compuesto (MeV)	71.0					
Velocidad del proyectil en el lab./c (%)	9.6					
Velocidad del compuesto en el lab./c (%)	5.2					
Barrera de Bass (nuclear+Coulomb) (MeV)	86.3					
Posición de la barrera de Bass (fm)	10.4					
Sección eficaz de formación del compuesto (mb)	859.0					
<i>Residuos encontrados de la evaporación del compuesto</i>						
A	SQ	Z	N	eventos	%	σ_{canal} (mb)
98	Ag	47	51	6	0.06	0.515
98	Cd	48	50	46	0.46	3.951
99	Ag	47	52	1	0.01	0.086
99	Cd	48	51	5	0.05	0.429
100	Cd	48	52	57	0.57	4.896
100	In	49	51	3	0.03	0.258
100	Sn	50	50	253	2.53	21.73
101	Cd	48	53	236	2.36	20.27
101	In	49	52	559	5.59	48.02
101	Sn	50	51	1104	11.0	94.83
102	Cd	48	54	7	0.07	0.601
102	In	49	53	4	0.04	0.344
102	Sn	50	52	27	0.27	2.319
103	Cd	48	55	3	0.03	0.258
103	In	49	54	144	1.44	12.37
103	Sn	50	53	3564	5.64	306.1
103	Sb	51	52	39	0.39	3.350
104	Cd	48	56	26	0.26	2.233
104	In	49	55	145	1.45	12.46
104	Sn	50	54	3367	33.7	289.2
104	Sb	51	53	379	3.79	32.56
105	In	49	56	5	0.05	0.429
105	Sn	50	55	8	0.08	0.687
105	Sb	51	54	4	0.04	0.344
105	Te	52	53	8	0.08	0.687
total				10000	100	859.0

La aleatoriedad del proceso implica que, en general, no se obtendrá la misma lista de residuos con la misma proporción cada vez que se realicen los cálculos. Además, la variedad de residuos finales aumenta a medida que la energía de excitación es más alta: la competición entre modos de decaimiento se ve favorecida, y la alta energía de excitación permite más decaimientos, aumentando las posibilidades de diferentes tipos de núcleos. También, por esta última razón, aumentar el número de cascadas aumenta la variedad.

Por último, por la forma en la que se calcularon las secciones eficaces, es claro que la suma de las secciones eficaces de todos los canales debe ser la de formación del compuesto, como lo requería la ecuación (2.59).

Un segundo ejemplo, como el de la tabla (3.2), muestra ahora una reacción similar a la anterior pero además, con eventos de fisión encontrados. Esta tabla muestra la reacción de un haz de ^{78}Kr con ^{96}Ru a una energía de 389 MeV y 10000 cascadas.

Tabla 3.2: Segundo ejemplo de los resultados obtenibles del código realizado en este trabajo.

<i>Núcleos involucrados de la reacción de fusión</i>					
	A	SQ	Z	N	ME (MeV)
Proyectil	78	Kr	36	42	-74.2
Blanco	96	Ru	44	52	-86.1
Compuesto	174	Hg	80	94	-6.6

<i>Cantidades relacionadas a la formación del compuesto</i>	
Energía del proyectil en el lab. (MeV)	389
Energía inicial en el marco del CM (MeV)	214.6
Barrera de Coulomb proyectil-blanco (MeV)	214.7
Valor Q de la formación del compuesto (MeV)	-153.6
Energía de excitación del compuesto (MeV)	61.0
Velocidad del proyectil en el lab./c (%)	10.3
Velocidad del compuesto en el lab./c (%)	4.6
Barrera de Bass (nuclear+Coulomb) (MeV)	183.3
Posición de la barrera de Bass (fm)	11.5
Sección eficaz de formación del compuesto (mb)	275.7

<i>Residuos encontrados de la evaporación del compuesto</i>						
A	SQ	Z	N	eventos	%	σ_{canal} (mb)
167	Ir	77	90	3	0.03	0.083
167	Pt	78	89	89	0.89	2.454
168	Ir	77	91	1	0.01	0.028
168	Pt	78	90	4	0.04	0.110
170	Pt	78	92	347	3.47	9.568
170	Au	79	91	4628	46.3	127.6
171	Pt	78	93	13	0.13	0.358
171	Au	79	92	9	0.09	0.248
171	Hg	80	91	3	0.03	0.083
	fisión			4903	49.0	135.2
	total			10000	100	275.7

Se observa que los eventos de fisión compiten considerablemente con los modos de evaporación, resultando en casi la mitad de todos los eventos totales. Esto resulta ser cada vez más común en núcleos así de pesados como el ^{174}Hg (considerablemente más pesado que el del ejemplo anterior), donde las barreras de fisión son muy bajas y este modo de decaimiento es mucho más probable.

Es importante destacar que la fisión podría ocurrir combinada con evaporación, es decir, el núcleo podría no inmediatamente fisionarse, sino que evapora partículas hasta que puede acceder a la fisión; estos modos no son mutuamente excluyentes.

Como es de esperarse del régimen de energías de las reacciones nucleares, las velocidades mostradas se mantienen en un régimen no-relativista ($\lesssim 0.1c$). Se puede notar también un resultado discutido antes: la barrera nuclear + coulombiana es menor que la de Coulomb sola, mostrando que el potencial nuclear contribuye sustancialmente a la posibilidad de fusión; sin embargo, la barrera de Coulomb puede dar una buena idea de este umbral si se quiere trabajar por energías considerablemente sobre la barrera.

En este caso como en el anterior, el valor Q de la formación del compuesto es negativo, esto implica que la reacción absorbe energía para formar el compuesto como se dijo en la sección 2.1.3. En la fusión de núcleos pesados, se necesita energía añadida para lograr la fusión, y en núcleos más ligeros, el valor Q suele ser positivo de forma que se libera energía.

Ahora, con la información que retorna el código, su desempeño se puede poner a prueba con una lista de reacciones, en las cuales se seleccionarán ciertos núcleos residuales de interés y se extraerá su respectiva sección eficaz. Para comparar con valores de referencia, se consultan valores de un código de reacciones nucleares y valores experimentales de referencia; estas referencias se describen en detalle a continuación.

Respecto al código de reacciones de fusión-evaporación, el utilizado acá es PACE, un código desarrollado originalmente por A. Gavron [8], que se encuentra actualmente en su versión PACE4 y que está incorporado en el paquete LISE++ [22, 15].

De forma análoga a este trabajo, este hace uso de Monte-Carlo para la des-excitación del núcleo compuesto (asumiendo sólo emisión tras el equilibrio). Sin embargo, las secciones eficaces se calculan por medio del formalismo de Hauser-Feshbach, que a diferencia de Weisskopf, tiene en cuenta coeficientes de transmisión (por medio de una rutina basada en el modelo óptico) y acoplamiento de momentum angular y espín. También hace uso del modelo de Bass para la sección eficaz de fusión, el modelo de Bohr-Wheeler para las probabilidades de fisión, la rutina BARFIT para las barreras de fisión y el formalismo de Gilbert-Cameron para las densidades de estados (incluyendo dependencia del momentum angular). El código es capaz de determinar la distribución angular de las partículas emitidas y permitir decaimiento gamma [8, 18]. La información retornada por este código se recopila de forma similar a la que se hace en este trabajo.

Por otro lado, respecto a los datos experimentales, la referencia [2] reúne una lista de casi 120 reacciones (donde se muestra un residuo específico de cada uno). Estas reacciones son seleccionadas, teniendo en común, que produzcan núcleos residuo ricos en protones. Estos datos son una recopilación de casi 45 estudios experimentales. Al ser una lista amplia y accesible, es interesante intentar reproducir estos resultados desde la simulación.

Varias de estas reacciones listadas resultan en núcleos con secciones eficaces muy pequeñas, y por tanto, muy improbables, por lo que simularlas requiere un número de cascadas demasiado grande (p. ej., para hallar una sección eficaz $\sigma_{\text{canal}} \sim 10^{-4}$ mb, si $\sigma_{\text{fus}} \sim 10^2$ mb, se necesitarían $\sim 10^6$ cascadas, que son demasiadas para ambos códigos al tener un alto impacto en el tiempo de cómputo), o simplemente, por las limitaciones del

código, no logran aparecer en la lista de residuos.

Luego, la tabla (3.3) reúne alrededor de 90 de estas reacciones de la referencia [2] con su respectiva sección eficaz de fusión-evaporación, junto a los valores calculados de la sección eficaz por el código de este trabajo y por PACE. Esta tabla es uno de los resultados principales de este trabajo. El número de cascadas utilizado para ambos, en la mayoría de reacciones, se tomó de 1000 cascadas. Para eventos muy raros, se usaron 10 mil cascadas máximo en el código o hasta 100 mil cascadas máximo para PACE.

Tabla 3.3: Secciones eficaces de la reacción de fusión evaporación, (1) calculadas con el código desarrollado en este documento, (2) consultadas en el código PACE, y (3) experimentales consultadas en [2]. Para cada una de las reacciones seleccionadas se muestran, los números de masa y atómico del residuo, proyectil, blanco y la energía del proyectil incidente ($E = E^{(\text{lab})}$). Se incluyen las incertidumbres de los valores experimentales (sólo de los valores que sí se están presentes en la referencia).

A	Z	A_p	Z_p	A_t	Z_t	E (MeV)	σ_{calc} (mb)	σ_{PACE} (mb)	σ_{exp} (mb)
<i>Núcleos ligeros ($N \approx Z$)</i>									
64	30	12	6	54	26	37	1.73E+02	5.59E+01	$(1.60 \pm 0.07)\text{E}+02$
64	31	54	26	12	6	150	5.61E+01	2.98E+00	7.90E+01
64	32	40	20	27	13	102	1.48E+02	2.55E+00	$(4.00 \pm 0.60)\text{E}-01$
64	32	54	26	12	6	150	1.86E+02	1.70E+00	$(3.40 \pm 0.90)\text{E}-01$
64	32	54	26	12	6	165	2.72E+02	1.21E+00	$(5.00 \pm 3.00)\text{E}-01$
68	34	58	28	12	6	175	2.28E+02	1.48E+00	$(3.80 \pm 1.60)\text{E}-02$
68	34	58	28	12	6	220	3.52E+02	4.36E+00	$(2.00 \pm 0.50)\text{E}-01$
72	36	16	8	58	28	55	2.75E+02	2.75E+00	$(1.00 \pm 0.30)\text{E}-01$
72	36	58	28	16	8	170	1.69E+02	3.69E-01	$(6.00 \pm 2.50)\text{E}-02$
76	38	54	26	24	12	175	4.51E+01	2.40E+01	$(1.00 \pm 0.50)\text{E}-02$
80	40	58	28	24	12	190	5.73E+01	8.14E-01	$(1.00 \pm 0.50)\text{E}-02$
80	39	58	28	24	12	190	3.09E+01	2.06E+01	$(2.00 \pm 1.00)\text{E}+00$
80	38	58	28	24	12	190	6.87E+01	3.86E+01	$(4.40 \pm 0.40)\text{E}+01$
<i>Núcleos cercanos a ^{100}Sn</i>									
98	46	58	28	50	24	250	8.59E-02	9.48E+01	$(2.20 \pm 0.20)\text{E}+01$
98	47	58	28	50	24	250	2.57E-01	5.85E+01	$(3.00 \pm 0.60)\text{E}-01$
99	47	58	28	50	24	250	8.59E-02	8.50E+01	$(3.60 \pm 0.40)\text{E}+00$
99	48	58	28	50	24	249	1.68E+00	1.59E+00	$(3.20 \pm 2.00)\text{E}-02$
99	48	50	24	58	28	225	9.01E-02	5.64E-01	$(2.50 \pm 0.80)\text{E}-02$
99	48	58	28	58	28	394	2.98E-01	1.29E+01	$(3.10 \pm 2.00)\text{E}-02$
100	47	50	24	58	28	225	9.01E-02	1.42E+02	3.90E+00
100	48	50	24	58	28	225	3.55E+01	6.07E+01	1.00E+00
100	49	50	24	58	28	225	6.49E+00	2.51E+00	1.00E-03
100	49	58	28	50	24	319	7.37E-01	1.13E+00	2.60E-03
100	49	58	28	58	28	371	5.27E-02	1.79E+00	1.70E-03
100	49	58	28	58	28	394	4.96E-01	1.29E+00	1.60E-03
100	50	50	24	58	28	225	7.01E+01	3.56E-03	4.00E-05
101	48	58	28	50	24	250	1.95E+01	6.05E+01	$(1.80 \pm 0.20)\text{E}+01$

(continúa en la siguiente página)

Tabla 3.3: (continuación)

A	Z	A_p	Z_p	A_t	Z_t	E (MeV)	σ_{calc} (mb)	σ_{PACE} (mb)	σ_{exp} (mb)
101	50	58	28	50	24	249	1.08E+02	7.93E-01	$(1.60 \pm 0.40)\text{E-05}$
101	50	58	28	50	24	250	9.51E+01	3.21E-01	1.00E-05
101	50	58	28	58	28	325	1.20E-01	5.50E-02	$(9.00 \pm 4.00)\text{E-06}$
101	50	58	28	58	28	348	1.35E+00	1.40E-01	$(1.30 \pm 0.30)\text{E-05}$
101	50	58	28	58	28	371	9.48E-01	3.69E-02	$(2.80 \pm 1.00)\text{E-05}$
101	50	58	28	58	28	394	3.97E-01	5.14E-02	$(7.00 \pm 4.00)\text{E-06}$
102	48	58	28	50	24	250	9.45E-01	5.29E+00	$(6.30 \pm 1.90)\text{E+01}$
102	49	58	28	50	24	249	8.49E-01	3.17E+00	$(9.00 \pm 5.00)\text{E-01}$
102	49	58	28	50	24	348	6.76E+00	2.42E+00	$(1.10 \pm 0.60)\text{E+00}$
102	49	58	28	58	28	325	6.01E-02	8.17E+00	$(1.20 \pm 0.60)\text{E+00}$
102	49	58	28	50	24	348	5.62E-02	4.68E+00	$(1.20 \pm 0.60)\text{E+00}$
102	49	58	28	58	28	348	5.62E-02	5.03E+00	$(7.00 \pm 3.00)\text{E-01}$
102	49	58	28	58	28	371	1.58E-01	1.26E+01	$(1.00 \pm 0.50)\text{E+00}$
102	49	58	28	58	28	394	1.84E+00	1.44E+01	$(9.00 \pm 4.00)\text{E-01}$
103	48	58	28	50	24	250	8.59E-01	6.86E+01	$(2.70 \pm 0.20)\text{E+01}$
103	49	58	28	50	24	250	1.05E+01	3.18E+01	$(6.40 \pm 0.80)\text{E+00}$
104	48	58	28	50	24	250	2.58E+00	6.50E+00	$(1.79 \pm 0.07)\text{E+02}$
104	49	58	28	50	24	250	1.19E+01	2.69E+01	$(5.80 \pm 1.60)\text{E+01}$
104	50	58	28	50	24	250	2.93E+02	6.74E+00	$(1.80 \pm 0.20)\text{E+00}$
105	49	58	28	50	24	250	3.44E-01	1.60E-01	$(1.16 \pm 0.06)\text{E+02}$
105	50	58	28	50	24	250	6.01E-01	2.41E-01	$(1.00 \pm 0.20)\text{E+01}$
<i>Núcleos pesados</i>									
171	79	78	36	96	44	361	1.16E+01	1.39E+00	1.10E-03
171	79	78	36	96	44	359	1.49E+01	2.12E+00	2.00E-03
171	79	78	36	96	44	363	2.13E+01	1.03E+00	6.00E-04
170	79	78	36	96	44	386	1.17E+02	5.52E-01	9.00E-05
173	80	78	36	102	46	384	5.32E-01	5.11E-02	4.00E-06
172	80	78	36	96	44	361	8.91E-03	2.58E-03	4.00E-06
171	80	78	36	96	44	361	2.00E+02	9.03E-03	2.00E-06
176	81	78	36	102	46	384	6.79E+01	2.04E-02	3.00E-06
173	80	80	36	96	44	400	5.68E-02	1.30E-02	1.50E-05
<i>Emisores de protones: canal pn</i>									
185	83	92	42	95	42	410	3.37E-01	3.32E-01	1.00E-04
185	83	92	42	95	42	420	7.90E-01	2.62E-02	6.00E-05
<i>Emisores de protones: canal p2n</i>									
109	53	58	28	54	26	195	9.31E-02	-	1.00E-02
109	53	58	28	54	26	195	1.40E+02	-	$(1.60 \pm 0.40)\text{E-02}$
109	53	58	28	54	26	240	2.71E+01	-	3.00E-03
109	53	58	28	54	26	229	9.99E+01	-	5.00E-02
109	53	58	28	54	26	250	5.51E+00	-	$4.00^{+4}_{-2}\text{E+01}$
109	53	58	28	58	28	250	6.43E+00	-	$3.00^{+3}_{-1.5}\text{E+01}$
113	55	58	28	58	28	250	4.43E+01	1.35E-01	3.00E+01

(continúa en la siguiente página)

Tabla 3.3: (continuación)

A	Z	A_p	Z_p	A_t	Z_t	E (MeV)	σ_{calc} (mb)	σ_{PACE} (mb)	σ_{exp} (mb)
147	69	58	28	92	42	260	3.61E+02	3.53E+00	1.80E-02
151	71	58	28	96	44	266	3.00E+02	2.54E-01	(7.00 \pm 1.00)E-02
161	75	58	28	106	48	270	3.53E+01	4.68E+00	(6.30 \pm 1.80)E-03
167	77	78	36	92	42	357	1.77E+01	7.15E+00	1.10E-01
171	79	78	36	96	44	389	2.76E-01	1.73E-01	2.00E-03
171	79	78	36	96	44	370	1.45E+01	9.02E-01	6.00E-04
171	79	78	36	96	44	361	1.28E+01	1.00E+00	1.10E-03
171	79	78	36	96	44	359	1.52E+01	1.09E+00	2.00E-03
171	79	78	36	96	44	363	2.01E+01	1.10E+00	6.00E-04
171	81	78	36	102	46	370	2.02E+01	4.20E-01	3.00E-05
<i>Emisores de protones: canal p3n</i>									
112	55	58	28	58	28	259	5.06E+01	2.28E-02	5.00E-04
146	55	58	28	92	42	287	5.21E+01	5.76E-02	1.00E-03
150	71	58	28	96	44	287	2.41E+01	7.47E-03	2.56E-03
150	71	58	28	96	44	292	2.21E+01	7.02E-03	3.05E-03
160	75	58	28	106	48	300	2.26E+02	7.60E-01	1.00E-03
166	77	78	36	92	42	384	2.99E+01	2.24E+00	6.30E-03
176	81	78	36	102	46	384	5.99E+01	3.07E-02	3.00E-06

Según [2], en general, no es muy frecuente encontrar resultados de secciones eficaces de fusión-evaporación en la literatura, y las que se muestran tienen una incertidumbre alta, o incluso, no se adjuntan incertidumbres, debido a la imprecisión asociada a ciertas técnicas experimentales. Por esta razón, varios datos experimentales no adjuntan incertidumbre.

Como se dijo antes, los residuos finales de una reacción de fusión-evaporación calculada con el código de este trabajo o con PACE dependen de la aleatoriedad del proceso, sobre todo aquellos resultados con pocos eventos detectados debido a que este número puede fluctuar considerablemente. Además, nótese que en ciertas reacciones no se encontraron datos calculados por PACE: requerían un número de cascadas demasiado alto, si es que era posible que los retornaran. Esto mismo pasa con el código en algunas reacciones de [2], sólo que tales reacciones no se muestran acá puesto que el objetivo es exponer las reacciones que sí dan resultados con el código.

Cuando se comparan las listas de canales de salida del código y de PACE, en general, PACE ofrece una mayor variedad de residuos; posiblemente el formalismo más completo detrás de este permite acceder a más canales (entre más canales estén disponibles, es posible que los eventos, y por ende las secciones eficaces, se distribuyan diferente entre los núcleos). Esto puede indicar que la emisión de partículas debe ser más detallada para poder acceder a más canales.

Analizando más de cerca los resultados de la tabla (3.3), no sólo los datos calculados por el código, sino también los de PACE, tienen diferencias sustanciales en varias reacciones, sobre todo en aquellas donde la sección eficaz es muy baja (menor a $\sim 10^{-3}$ mb). Existen varias coincidencias (al menos en orden de magnitud), más que todo en los núcleos más ligeros. En otros, como en los núcleos “ligeros”, hay una sobreestimación de la sección eficaz en varias reacciones, posiblemente atribuida a, (1) una sección eficaz de fusión más alta de la esperada, o (2) falta de canales que no fueron encontrados y que disminuirían los eventos de exceso.

Sin embargo, en los más pesados, donde la fisión es considerable, las secciones eficaces experimentales son mucho más pequeñas de lo esperado. En estos núcleos, la evaporación deja de ser un modo común para des-excitar el núcleo compuesto, y como indican las secciones eficaces experimentales, comienzan a ser eventos raros. Así, que parece que ambos códigos sobreestiman la ocurrencia de la evaporación para núcleos pesados. Mirando más en detalle la información retornada por ambos códigos, de hecho, sus resultados son parecidos, el número de eventos de fisión es similar y las diferencias entre ellos se pueden atribuir a la forma en la que se calcula la sección eficaz de fusión. Así, al parecer los métodos usados en los códigos no se ven muy favorecidos para núcleos pesados.

Antes se dijo que para hallar una sección eficaz del orden de 10^{-3} mb se necesitaban un número de cascadas mayor del que era conveniente para ambos códigos, por lo que en principio, se hubieran ignorado inicialmente todas aquellas reacciones con secciones eficaces menores que estas. Sin embargo, como los cálculos por ambos códigos dan valores considerablemente mayores, varias de estas reacciones sí son calculables con los códigos como se muestra.

En todo este análisis, se debe tener en cuenta que el fundamento teórico detrás del código está basado en argumentos a primera aproximación, que ha sido la puerta para desarrollos teóricos más precisos (como el modelo de Weisskopf y el de Bohr-Wheeler).

Se ha hablado de la importancia del momentum angular en la descripción de la reacción, el cual sólo se ha tratado implícitamente detrás de la fórmula clásica de sección eficaz de fusión, pero en realidad, este determina el estado del sistema nuclear como lo hace su energía. Un uso explícito de este es requerido en una descripción más precisa de la reacción. También se omitió un tratamiento cuántico explícito (usando el modelo óptico), que determina la verdadera dinámica de la reacción, sino que se optó por un modelo estadístico tratando al núcleo como una entidad desde una perspectiva semi-clásica. Esto añade una nuevo nivel de complejidad a la descripción, pero está más allá del alcance de esta investigación, puesto que uno de los objetivos planteados es comprender en detalle los modelos base concernientes a la reacción.

No obstante, estas limitaciones abren la puerta para una investigación detallada sobre el funcionamiento de este nuevo nivel de complejidad (ante la escasez de fuentes que describan estas reacciones desde cero, como ya se dijo antes), y posiblemente, mejorar el código ofrecido en este trabajo.

Aun así, un logro modesto del código en sí mismo y de sus resultados fue poder simular los canales de decaimiento dados un proyectil y un blanco, que sí son verificables por otros códigos, es decir, varios de ellos coinciden con el de otro código más sofisticado como lo es PACE. Además, se obtuvieron resultados aceptables de las secciones eficaces de fusión-evaporación para valores no tan pequeños y núcleos no tan pesados.

Finalmente, hay que tener en cuenta que cada reacción tiene sus particularidades, en las que intervienen diferentes fenómenos o consideraciones teóricas y/o experimentales, que motivan una explicación más detallada de las limitaciones sobre los cálculos obtenidos sobre aquellas reacciones que puedan ser de interés.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis, se introdujo la teoría necesaria para comprender la reacción de fusión-evaporación, la cual se divide en dos mecanismos *independientes*: (1) la formación de un núcleo compuesto, debido a la fusión de los núcleos proyectil y blanco, y (2) el decaimiento del núcleo compuesto debido a su excitación por evaporación de partículas (neutrones, protones, alfas) o fisión.

Un marco teórico, con todas las sutilezas que involucra una reacción nuclear así, está más allá de los propósitos de esta investigación: inicialmente, se planteó la elección de un marco teórico accesible desde cero y de primera aproximación, de modo que este trabajo sirva como un soporte introductorio de la teoría para motivar futuras investigaciones (teóricas o experimentales) detrás de esta reacción.

Así, se optó por un marco teórico *semi-clásico*, que bajo argumentos clásicos y algunas consideraciones cuánticas (como la expansión en ondas parciales, el tunelamiento con el coeficiente de transmisión de Hill-Wheeler o la estadística de fermiones en la densidad de estados nucleares), puede ofrecer buenos resultados y alcanzables, sin mucha complejidad y sin tratar directamente con una descripción muy rigurosa de la naturaleza cuántica del núcleo.

El principio de independencia de Bohr es el medio para poder calcular las secciones eficaces de los canales de salida desde la sección eficaz de formación del compuesto. La sección eficaz de fusión depende principalmente de la energía: es muy pequeña bajo la barrera, sobre ella crece gradualmente hasta una energía crítica donde desciende. La descripción estadística de los decaimientos y estados del núcleo fue clave para calcular la probabilidad de decaimiento. Los mecanismos de evaporación y fisión fueron escogidos como unos de los primeros modelos propuestos históricamente para describir cuantitativamente estos fenómenos (Weisskopf-Ewing y Bohr-Wheeler); la fisión excluye el tratamiento de los fragmentos de fisión.

El código desarrollado logra reunir diferentes cantidades características de esta reacción, pero sobre todo, reúne una lista de los posibles residuos de la reacción, que incluyen diferentes posibilidades de evaporación (y fisión para núcleos pesados). Esta lista está sujeta a la aleatoriedad del proceso, donde se seleccionan modos de decaimiento secuencialmente por Monte Carlo. La proporción de eventos de todos los residuos es característica de la reacción, se estabiliza con un mayor número de cascadas, a medida que este aumenta, pueden aparecer eventos más raros. La variedad de residuos finales aumenta con la energía de excitación.

El código se utilizó para estimar alrededor de 90 reacciones, las cuales son contrastadas con referencias de alrededor de 45 estudios experimentales (que no son frecuentes

de encontrar), que producen núcleos ricos en protones, y además se compararon con resultados de un código de fusión-evaporación más sofisticado como PACE. Ambos códigos tienen dificultad con un número muy grande de cascadas (largo tiempo de ejecución), necesario para la búsqueda de eventos muy raros. En general, los resultados tienen diferencias sustanciales en varias reacciones, sobre todo en las que tienen una sección eficaz muy baja. Alrededor de 20 reacciones tienen valores concordantes con el orden de magnitud del valor de PACE o experimental, sobre todo en núcleos más ligeros. Los núcleos más pesados resultan en secciones eficaces mucho más grandes en ambos códigos con respecto al valor experimental (lo que es una señal de la sobreestimación que se le da al rol de evaporación en núcleos pesados).

La sobreestimación de la sección eficaz en diferentes reacciones puede ser atribuida a la falta de canales que no fueron encontrados y que disminuirían los eventos de exceso; un formalismo que permita una mayor variedad de canales (como la posibilidad de emisión de eyectiles más pesados, gammas o fragmentos de fisión, p. ej.) podría cambiar la proporción de eventos. Esto motiva un análisis más detallado en el futuro de las limitaciones del código para núcleos ligeros o pesados, y bajas o altas energías, donde p. ej., la fisión o la transmisión bajo la barrera tienen un impacto diferente en los resultados finales, y cómo modificarlas adecuadamente para cada caso.

Un cálculo refinado de las secciones eficaces de los canales de salida de la reacción involucra un tratamiento puramente cuántico con un potencial óptico adecuado, se deben tener en cuenta estados de momentum angular y espín de los núcleos, y la emisión de una mayor variedad de eyectiles y de gammas. Una posible eventual mejora del código construido debería ir hacia estos objetivos.

El código se encuentra disponible para uso abierto en el siguiente repositorio: <https://github.com/ddcastiblancoc/fus-evap-code>.

Bibliografía

- [1] Bass, R.: *Nucleus-Nucleus Potential Deduced from Experimental Fusion Cross Sections*. Phys. Rev. Lett., 39:265–268, Aug 1977. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.39.265>.
- [2] Blank, B., Canchel, G., Seis, F. y Delahaye, P.: *Evaluation of fusion-evaporation cross-section calculations*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 416:41–49, 2018, ISSN 0168-583X. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X17310054>.
- [3] Bulgac, Aurel, Jin, Shi y Stetcu, Ionel: *Nuclear Fission Dynamics: Past, Present, Needs, and Future*. Frontiers in Physics, 8:63, 2020, ISSN 2296-424X. <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fphy.2020.00063>.
- [4] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. y Laloë, F.: *Quantum Mechanics*, volumen 2, página 913. John Wiley & Sons Ltd., 1ª edición, 1977.
- [5] Cole, A. J.: *Statistical Models for Nuclear Decay: From Evaporation to Vaporization*, capítulo 1, 2, 3, 4. Fundamental and Applied Nuclear Physics. IOP Publishing Ltd., 2000.
- [6] Dietrich, F.S.: *Simple Derivation of the Hauser-Feshbach and Weisskopf-Ewing Formulae, with Application to Surrogate Reactions*. Lawrence Livermore National Laboratory, United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information, 2004.
- [7] Fröbrich, P. y Lipperheide, R.: *Theory of Nuclear Reactions*, páginas 11, 13, 21–25, 278–280, 282–283, 285–286, 293, 297–299, 300–301, 331–341, 346, 349–354, 357. Oxford University Press Inc., 1996.
- [8] Gavron, A.: *Statistical model calculations in heavy ion reactions*. Phys. Rev. C, 21:230–236, Jan 1980. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.21.230>.
- [9] Gilbert, A. y Cameron, A. G. W.: *A composite nuclear-level density formula with shell corrections*. Can. J. Phys., 43:1446–1496, 1965. <https://doi.org/10.1139/p65-139>.
- [10] Henning, G.: *A python reimplementation of A. Sierk's BARFIT*. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03132426>, working paper or preprint, Febrero 2021.
- [11] Kamal, A.: *Nuclear Physics*, páginas 442–444, 449. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014.
- [12] Khaleel, E.: *Study of fusion evaporation channels in the $^{18}\text{O} + ^{18}\text{O}$ reaction at 65 MeV*. Tesis de Licenciatura, Universidad de Stellenbosch, Sudáfrica, 2011.

- [13] Krane, K.: *Introductory Nuclear Physics*, páginas 48, 65, 322, 378, 381, 411, 415–419, 428, 433. John Wiley & Sons, Inc., 1988.
- [14] Lightfoot, A.: *Analysis of the charge state distribution produced in a $^{78}\text{Kr} + ^{98}\text{Mo}$ fusion evaporation reaction utilizing the MARA separator*. Tesis de Licenciatura, Universidad de Jyväskylä, Finlandia, 2016.
- [15] LISE⁺⁺ group, NSCL/MSU: *PACE4: GUI evaporation code*. [En línea]. <http://lise.nsl.msui.edu/pace4.html>.
- [16] Morsad, A., Kolata, J. J., Tighe, R. J., Kong, X. J., Aguilera, E. F. y Vega, J. J.: *Sub-barrier fusion of $^{28,30}\text{Si}$ with $^{24,26}\text{Mg}$* . Phys. Rev. C, 41:988–994, Mar 1990. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.41.988>.
- [17] National Nuclear Data Center: *NuDat 3.0 database*. [En línea]. <https://www.nndc.bnl.gov/nudat/>.
- [18] Prasad, R. y Singh, B. P.: *Fundamentals and Applications of Heavy Ion Collisions: Below 10 MeV/Nucleon Energies*, capítulo 2, página 82. Cambridge University Press, 2018.
- [19] Sakurai, J.: *Modern Quantum Mechanics*, páginas 379–384, 405–406. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994.
- [20] Satchler, G.: *Introduction to Nuclear Reactions*, páginas 28, 114. Macmillan Education Limited, 2ª edición, 1990.
- [21] Schieck, H. Paetz gen.: *Nuclear Reactions: An Introduction*, volumen 882 de *Lecture Notes in Physics*, páginas 73, 132, 136. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014.
- [22] Tarasov, O.B. y Bazin, D.: *LISE++: Radioactive beam production with in-flight separators*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 266(19):4657–4664, 2008, ISSN 0168-583X. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X08007969>, Proceedings of the XVth International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Techniques Related to their Applications.
- [23] Van Sen, Nguyen, Darves-Blanc, R., Gondrand, J. C. y Merchez, F.: *Fusion and deeply inelastic collisions of ^{20}Ne with ^{27}Al* . Phys. Rev. C, 27:194–206, Jan 1983. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.27.194>.
- [24] Weisskopf, V.: *Statistics and Nuclear Reactions*. Phys. Rev., 52:295–303, Aug 1937. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.295>.
- [25] Zettili, N.: *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, páginas 624, 631, 632. John Wiley & Sons Ltd., 2ª edición, 2009.