UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

Gabriela Vitti Stenico

Produção de partículas secundárias em reações de spallation *induzidas por prótons*

Botucatu – SP

2012

Gabriela Vitti Stenico

Produção de partículas secundárias em reações de spallation *induzidas por prótons*

Monografia apresentada ao Instituto de Biociências da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Campus de Botucatu, para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador:
Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza

Coorientador:
Prof. Dr. Brett Vern Carlson

Bacharelado em Física Médica
Departamento de Física e Biofísica
Instituto de Biociências
Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"
Campus de Botucatu

Botucatu – SP

2012

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA SEÇÃO DE AQUIS. E TRAT. DA INFORMAÇÃO
DIVISÃO TÉCNICA DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - CAMPUS DE BOTUCATU - UNESP
BIBLIOTECÁRIA RESPONSÁVEL: ***ROSANGELA APARECIDA LOBO***

Stenico, Gabriela Vitti.
Produção de partículas secundárias em reações de "spallation" induzidas por prótons / Gabriela Vitti Stenico. – Botucatu : [s.n.], 2012

Trabalho de conclusão de curso (bacharelado – Física Médica) – Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências de Botucatu
Orientador: Joel Mesa Hormaza
Coorientador: Brett Vern Carlson
Capes: 10504001

1. Fragmentação (Física nuclear). 2. Método de Monte Carlo. 3. Blindagem (Radiação).

Palavras-chave: Blindagem; MCNPX; Método de Monte Carlo; Processo de "Spallation"; Seção de choque diferencial.

Aos meus pais, José Edimilson e Cláudia,
pelo amor e extrema dedicação.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida, pela proteção e consolo, que sempre me apaziguaram durante as dificuldades, através de pessoas maravilhosas colocadas em meu caminho.

Aos meus pais e eternos professores, Cláudia e José Edimilson, sou grata pelos sábios conselhos e merecidos castigos, mas principalmente por terem me ensinado o amor incondicional, a compaixão pelos pequenos e o trabalho duro, qualidades indispensáveis a qualquer ser humano.

Gostaria de deixar meus sinceros agradecimentos ao meu namorado, Pedro Rafael Costa, pela assistência, companheirismo e amizade, em meio aos desafios da Graduação.

Ao meu orientador, Professor Doutor Joel Mesa Hormaza, e a todos do Laboratório de Bioinformática e Biofísica Computacional da UNESP agradeço imensamente a sabedoria e o bom humor que tornaram esses três anos de trabalho muito frutíferos e proveitosos.

Agradecimentos especiais ao meu coorientador, Professor Doutor Brett Vern Carlson, que apesar do curto período, contribuiu grandiosamente com este trabalho, através das discussões e cálculos em lousa, demonstrando sempre muita paciência e disposição ao ensinar. Aproveito para agradecer a todo o pessoal do Laboratório de Física Teórica do ITA, pelo acolhimento e confiança.

Aos meus colegas, Maurício Pazianotto e Danilo Anacleto, pela troca de experiências e bibliografias essenciais ao desenvolvimento deste trabalho, deixo o meu muito obrigada.

Por fim, gostaria de agredecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelo apoio financeiro durante todo o período da Iniciação Científica.

"Um cientista em seu laboratório não é um mero técnico:
é também uma criança que confronta os fenômenos naturais que
o impressionam como faziam os contos de fada"
Marie S. Curie

Resumo

A radiação cósmica tem sido identificada como um dos principais riscos a tripulações, aeronaves e equipamentos eletrônicos sensíveis envolvidos em missões espaciais de longa duração e até mesmo, em vôos comerciais em altas altitudes. Geralmente, a exposição excessiva é evitada com a utilização de escudos, os quais visam reter a radiação incidente. Infelizmente, a blindagem no espaço é problemática, especialmente quando partículas cósmicas de alta energia são consideradas, devido à extensa produção de partículas secundárias, principalmente nêutrons, prótons e partículas alfa, causada por reações de "spallation" e processos quase-elásticos da radiação corpuscular com o escudo. Bons parâmetros para avaliar a produção e emissão de partículas no material-alvo são a seção de choque diferencial e a energia depositada no escudo. Além de métodos experimentais utilizados para determinar estes parâmetros, alguns códigos computacionais baseados no método de Monte Carlo mostraram-se uma ferramenta adequada para calculá-los, devido ao fato de possuirem bibliotecas de dados nucleares avaliadas e uma extensão de modelos nucleares implementados em seu algoritmo. Em vista disso, o objetivo deste trabalho é determinar os parâmetros avaliados em materiais comumente utilizados na blindagem de aeronaves, utilizando o código *MCPNX*, que apresenta alto grau de concordância com dados experimentais preexistentes na literatura. Dentre os materiais, o Alumínio apresentou menor energia depositada e menor emissão de partículas secundárias.

Palavras-chave: Processo de "Spallation", Método de Monte Carlo, MCNPX, Seção de Choque Diferencial, Blindagem.

Abstract

Cosmic radiation has been identified as one of the main hazard to crew, aircraft and sensitive equipments involved in long-term missions and even high-altitude commercial flights. Generally, shields are used in spatial units to avoid excessive exposure, by holding the incident radiation. Unfortunatelly, shielding in space is problematic, especially when high-energy cosmic particles are considered, due to the production of large number of secondary particles, mainly neutrons, protons and alpha particles, caused by spallation reactions and quasi-elastic processes of the corpuscular radiation with the shield. Good parameters for checking the secondary particle production at target material are diferential cross section and energy deposited in the shield. Addition experiments, some computer codes based on Monte Carlo method show themselves a suitable tool to calculate shield parameters, due to have evaluated nuclear data libraries implemented on the algorithm. In view of this, the aim of this work is determining the parameters evaluated in shielding materials, by using *MCNPX* code, who shows good agreement with experimental data from literature. Among the materials, Aluminium had lower emission and production of secondary particles.

Keywords: Spallation Process, Monte Carlo Method, MCNPX, Double Differential Cross Section, Shielding Material.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1 Introdução p. 13

1.1 O Processo de *Spallation* . . . . . p. 13

1.1.1 Reação de *Spallation* . . . . . p. 14

1.2 Raios Cósmicos . . . . . p. 16

1.3 O Método de Monte Carlo . . . . . p. 18

1.4 O Código MCNPX . . . . . p. 20

1.4.1 Estrutura do Código . . . . . p. 22

1.4.2 Especificação da geometria e fonte . . . . . p. 24

1.4.3 Transporte e Interação . . . . . p. 24

1.4.3.1 Transporte de Partículas Carregadas . . . . . p. 25

1.4.3.2 Bibliotecas de Dados Avaliadas . . . . . p. 25

1.4.3.3 Modelos Físicos . . . . . p. 26

1.4.4 *"Tallies"* e Convergência da Resposta . . . . . p. 26

1.5 Modelos Nucleares . . . . . p. 28

1.5.1 Modelos de Cascata Intranuclear . . . . . p. 28

1.5.1.1 BERTINI . . . . . p. 28

1.5.1.2 ISABEL . . . . . p. 30

1.5.1.3 CEM (Modelo Cascata-éxiton) . . . . . p. 31

2 Objetivos p. 32

2.1 Validação do Código . . . . . p. 32

2.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem . . . . . p. 32

3 Métodos p. 34

3.1 Validação do Código *MCNPX* . . . . . p. 34

3.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem . . . . . p. 36

4 Resultados e Discussão p. 39

4.1 Validação do Código . . . . . p. 39

4.1.1 Níquel . . . . . p. 39

4.1.2 Ferro . . . . . p. 43

4.1.3 Chumbo . . . . . p. 47

4.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem . . . . . p. 51

5 Conclusão p. 62

Referências p. 64

Anexos p. 67

Arquivos de entrada do *MCNPX* . . . . . p. 67

Arquivo de Entrada para Validação do Código . . . . . p. 67

Arquivo de Entrada para Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem . . . . . p. 68

Lista de Figuras

1 Esquema geral dos estágios da reação de *spallation* . . . . . p. 15

2 Taxa de fluência espectral de importantes componentes dos raios cósmicos p. 17

3 Formato padrão do arquivo de entrada do *MCNPX* . . . . . p. 23

4 Entrada de uma partícula incidente em um núcleo por seleção uniforme em uma área projetada . . . . . p. 30

5 Modelagem do experimento construída no *MCNPX*, para a determinação da Seção de Choque Diferencial . . . . . p. 35

6 Comportamento da divergência dos pontos em relação ao número de eventos considerados pelo *MCNPX* . . . . . p. 40

7 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 20° . . . . . p. 41

8 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 40° . . . . . p. 42

9 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 60° . . . . . p. 42

10 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 90° . . . . . p. 43

11 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 120° . . . . . p. 43

12 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 por prótons de 800 MeV, a 10° . . . . . p. 44

13 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 por prótons de 800 MeV, a 30° . . . . . p. 45

14 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 por prótons de 800 MeV, a 60° . . . . . p. 45

15 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 por prótons de 800 MeV, a 150° . . . . . p. 46

16 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 por prótons de 800 MeV, a 100° . . . . . p. 46

17 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 10° . . . . . p. 48

18 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 30° . . . . . p. 48

19 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 60° . . . . . p. 49

20 Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 150° . . . . . p. 49

21 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 10° . . . . . p. 50

22 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 30° . . . . . p. 50

23 Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 20° . . . . . p. 51

24 Análise da interferência radial do alvo para prótons resultantes da reação com Al-27 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV. . . p. 52

25 Análise da interferência radial do alvo para nêutrons resultantes da reação com Al-27 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV. . . p. 53

26 Análise da interferência radial do alvo para partículas alfa resultantes da reação com Al-27 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV. p. 55

27 Análise das seções de choque diferenciais de prótons emitidos das reações em Fe-56 e Pb-208 . . . . . p. 56

28 Análise das seções de choque diferenciais de nêutrons emitidos das reações em Fe-56 e Pb-208 . . . . . p. 58

29 Análise das seções de choque diferenciais de partículas alfa emitidas das reações em Fe-56 e Pb-208 . . . . . p. 60

Lista de Tabelas

1 Características gerais do código *MCNPX* . . . . . p. 22

2 Modelos físicos, processos e bibliotecas de dados nucleares para reações de *spallation* implementados no *MCNPX* . . . . . p. 26

3 Espessura dos alvos . . . . . p. 34

4 Valores de Camada Semi Redutora . . . . . p. 37

5 Produção e emissão total de prótons decorrentes da interação com Al . p. 53

6 Produção e emissão total de nêutrons decorrentes da interação com Al . p. 54

7 Produção e emissão total de partículas alfa decorrentes da interação com Al . . . . . p. 56

8 Produção e emissão total de prótons decorrentes da interação com Fe . p. 57

9 Produção e emissão total de prótons decorrentes da interação com Pb . p. 57

10 Energia total depositada por prótons nos alvos . . . . . p. 57

11 Produção e emissão total de nêutrons decorrentes da interação de prótons com Fe . . . . . p. 58

12 Produção e emissão total de nêutrons decorrentes da interação de prótons com Pb . . . . . p. 59

13 Energia total depositada por nêutrons nos alvos . . . . . p. 59

14 Produção e emissão total de partículas alfa decorrentes da interação de prótons com Fe . . . . . p. 60

15 Produção e emissão total de partículas alfa decorrentes da interação de prótons com Pb . . . . . p. 61

16 Energia total depositada por partículas alfa nos alvos . . . . . p. 61

1 *Introdução*

1.1 O Processo de *Spallation*

De modo geral, o termo *Spallation* refere-se a reações nucleares não elásticas que ocorrem quando partículas energéticas como prótons, nêutrons, ou píons interagem com um núcleo atômico. Desta forma, um dos elementos da colisão será um núcleo complexo, no qual a energia disponível excede a energia de interação entre os nucleons do núcleo. Então, as reações nucleon-núcleo, píon-núcleo, ou núcleo-núcleo, nas quais a energia incidente excede algumas centenas de MeV por unidade de massa atômica, é chamada de *spallation* ou *reação de spallation*. O termo vem do verbo *"to spall"*, que significa bater com um martelo (SHEN; MERKER, 1976).

A terminologia seguinte será utilizada para descrever com clareza os processos nucleares de altas energias. Os termos *"inelástico"*, *"quase-elástico"*, *"absorção"* e *"não-elástico"* descrevem usualmente reações com o núcleo que não são puramente elásticas como um todo. Absorção geralmente descreve todos os eventos não-elásticos quando uma análise óptica é feita. O termo inelástico é usado para descrever fenômenos de baixa energia, onde as partículas espalhadas conservam sua identidade, mas deixam o núcleo em estado excitado. O termo não-elástico é usado para descrever todos os eventos nos quais não há espalhamento elástico com o núcleo como um todo (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Historicamente, a ideia básica do mecanismo de reação - a cascata intranuclear - foi primeiramente proposta por (SERBER, 1947). Ele sugeriu que em energias próximas de 100 MeV, o comprimento de onda de DeBroglie da partícula incidente torna-se comparável, ou menor que, a média da distância entre nucleons de 10^{-13} centímetros dentro do núcleo. Dessa forma, o tempo de colisão entre a partícula incidente e o nucleon torna-se menor comparado ao tempo de colisão entre os nucleons dentro do núcleo. (GOLDBERGER, 1948) foi o primeiro a realizar cálculos utilizando aproximações do modelo de Serber. (METROPOLIS et al., 1958a, 1958b) foram os primeiros a relatar cálculos extensos utilizando computadores e gerando grandes quantidades de dados para partículas incidentes < 400

MeV, abaixo do limiar de píons. Também (DOSTROVSKY; RABINOWITZ; BIVINS, 1958) e (DOSTROVSKY; FRAENKEL; FRIEDLANDER, 1959) estudaram por simulação de Monte Carlo(descrito na Seção 1.3), a sistemática conhecida como evaporação nuclear (WEISSKOPF, 1937; LECOUTEUR, 1950), programada primeiramente para o computador MANIAC do Laboratório Nacional de Los Alamos na década de 1950 (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

A maioria das pesquisas em *spallation* consistia em experimentos para medir seções de choques. Os primeiros experimentos utilizavam raios cósmicos como partículas incidentes, mas atualmente muitos experimentos são feitos em aceleradores de alta energia, conjuntamente com fontes de nêutrons de alta intensidade desenvolvidas nos últimos vinte anos. Muitas vezes, o alvo em questão não era constituído de uma camada fina de material, devido à baixa ocorrência de reações secundárias. À medida que se aumenta a espessura do alvo, maior a ocorrência de reações secundárias, e as então chamadas cascatas nucleares serão produzidas. Alvos espessos podem ser encontrados na natureza em meteoros, na superfície da Lua e de Marte, na atmosfera e na superfície terrestre, ou mesmo no corpo humano. O transporte de raios cósmicos na atmosfera terreste é um bom exemplo de cascata nuclear. O processo de *spallation* sempre ocorrerá quando um fluxo de partículas de alta energia colidir com a matéria (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Há dois tipos principais de partículas de alta energia no Universo: raios cósmicos e partículas de aceleradores. O bombardeamento da matéria com partículas de alta energia não produz apenas *spallation*, mas também uma sequência complexa de interações atômicas e nucleares, que serão descritas a seguir (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

1.1.1 Reação de *Spallation*

O esquema completo da reação de *spallation* é mostrado na Figura 1.

Na reação de *spallation*, uma certa fração da energia incidente é transferida ao núcleo por colisões entre nucleons, aumentando a energia cinética dos mesmos, ou, mais precisamente, aquecendo o núcleo. Três estágios podem ser distinguidos em uma reação de *spallation* de acordo com o tempo transcorrido da mesma: a fase de *cascata intranuclear*, a fase de *pré-equilíbrio* e a fase de *evaporação* e *fissão* a altas energias (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Na *cascata intranuclear*, a qual leva cerca de 10^{-22} segundos, a energia da partícula incidente é transferida aos nucleons do núcleo alvo. Durante este processo, partí-

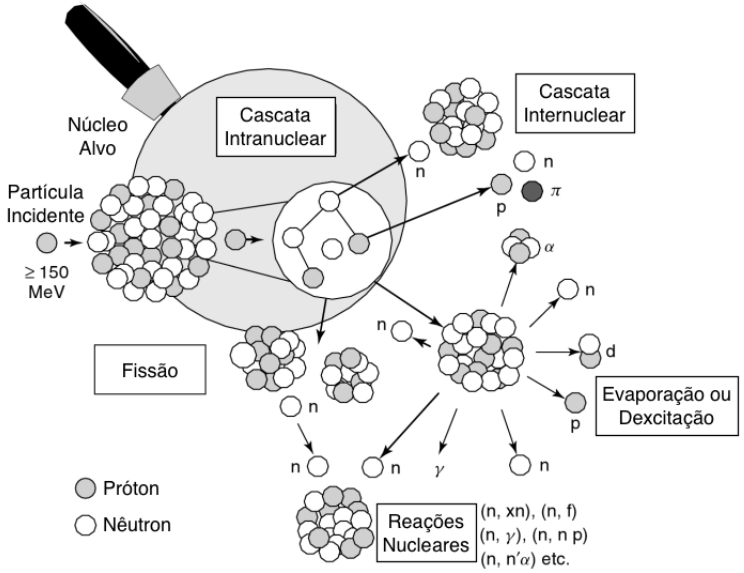


Figura 1: Esquema geral dos estágios da reação de *spallation* (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

culas energéticas podem deixar o núcleo e podem induzir outras reações de *spallation* em um núcleo diferente - *cascata internuclear*. Os processos de *cascatas internucleares* são gerados em alvos espessos. Estes processos são chamados de *"chuveiros de partículas"* que se referem às cascatas de partículas secundárias produzidas em interações de alta energia em materiais densos. A *cascata intranuclear* também é chamada de *cascata hadrônica*, pois durante esta fase, píons carregados, nêutrons e prótons são produzidos (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Depois que a *cascata intranuclear* se encerra, a energia cinética possuída pelos nucleons que permaneceram dentro do núcleo equilibra-se entre todos os outros nucleons. Esta energia de excitação residual, bem como a massa e a carga do núcleo residual, podem ter uma gama de valores, devido à variedade dos diferentes resultados, ou seja, nêutrons, prótons, píons, etc., possíveis para reações de alta energia.

A desexcitação subsequente é determinada pela chamada *evaporação*, a qual ocorre em aproximados 10^{-18} segundos ou menos. Então, o segundo estágio de uma reação de *spallation* é a fase de *evaporação*, a qual pode competir com a chamada *fissão*, quando se usa um núcleo pesado como alvo. As partículas emitidas durante a fase de *evaporação* são de baixas energias (1 - 10 MeV) e tem distribuição angular isotrópica. A emissão de nucleon, especialmente de nêutrons, em partícular para alvos com grande massa atômica, é mais provável que a emissão de agregados carregados positivamente, como deutérios, trítios, He^{+3}, α, ou ainda partículas mais pesadas. Depois que a emissão de partículas não ser mais energéticamente possível, os núcleos podem ser deixados ainda com uma pequena

quantidade de energia de excitação, a qual será liberada por emissão de fótons (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Como já mencionado, o processo de *spallation* pode ser considerado a partir de algumas centenas de MeV e torna-se mais frequente com o aumento da energia das partículas incidentes. Devido a alguns dos nucleons ejetados terem energia suficiente para induzir novas reações com a vizinhança, principalmente em alvos espessos, é possível produzir intensos fluxos de partículas secundárias que podem servir para várias aplicações (LERAY, 2001). Neste trabalho, o enfoque principal será dado a reações de *spallation* ocasionadas pela incidência de raios cósmicos em materiais metálicos comumente utilizados na blindagem de equipamentos eletrônicos de aeronaves e tripulação, observando o incremento da dose devido aos fluxos secundários, gerados pelas sucessivas colisões ao longo dos alvos.

A Seção seguinte abordará considerações importantes acerca do espectro de raios cósmicos, sua interação com os escudos das aeronaves e os principais parâmetros considerados para avaliar a produção de partículas por *spallation* e deposição de energia pelas reações.

1.2 Raios Cósmicos

Em 1912, (HESS, 1912) descobriu uma componente da radiação natural para qual a intensidade aumentava com a altitude. Esta radiação surgia na atmosfera devido a partículas de origem cósmica e com altas energias, que continuamente atingiam a Terra. A vida no planeta, entretanto, é protegida contra esta radiação por aproximadamente 1000 g/cm^2 de ar, o que corresponde a uma camada de dez metros de água. Como resultado, a radiação cósmica contribue menos que 10% na taxa de dose total da radiação ambiente a nível do mar, a qual o ser humano sempre esteve exposto (HEINRICH; ROESLER; SCHRAUBE, 1999).

Entretanto, a altas altitudes, onde a blindagem natural é menos efetiva, o fluxo de raios cósmicos é dominante e começa a apresentar riscos a tripulantes e equipamentos eletrônicos sensíveis de aeronaves e aviões supersônicos que viajam na atmosfera superior. Com o advento da tecnologia aeroespacial, a quantidade de vôos e missões espaciais tornou-se muito maior, e a necessidade da implantação de blindagens artificiais para minimizar a exposição excessiva aos raios cósmicos, foi cada vez mais requerida (HEINRICH; ROESLER; SCHRAUBE, 1999).

Noventa e oito por cento da radiação corpuscular que constitui a radiação cósmica é composta por núcleos e apenas dois por cento são pósitrons ou elétrons. A componente

nuclear consiste de 87% de hidrogênio (prótons), 12% de hélio e 1% de íons pesados (BALLARINI et al., 2008). O espectro de energia para estes núcleos é mostrado na Figura 2. A maior fluência de prótons encontra-se entre algumas centenas de MeV, até algumas unidades de GeV, sendo portanto, mais considerada neste trabalho.

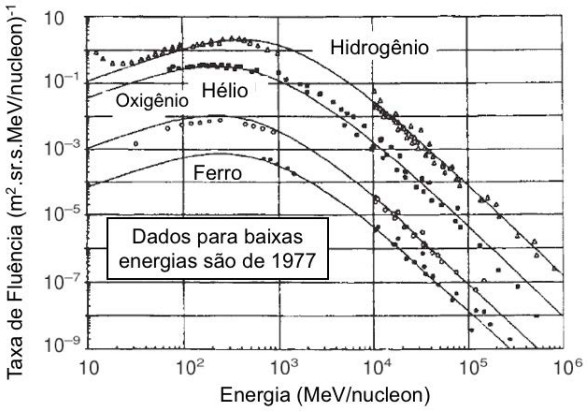


Figura 2: Taxa de fluência espectral de importantes componentes dos raios cósmicos (BADHWAR, 1997).

A utilização de blindagem para raios cósmicos requer alguns cuidados. Por sua maioria se tratar de prótons com altas energias, a reação de *spallation* será predominante nos núcleos do escudo (ver Seção 1.1). Se o material for muito espesso, haverá maior produção de partículas secundárias, devido aos sucessivos fenômenos de cascata intra e internucleares, e consequentemente maior aumento no fluxo e maior deposição de energia no decorrer do trajeto. Então, neste caso, a blindagem estaria mais prejudicando que protegendo os tripulantes e a eletrônica da aeronave (HEINRICH; ROESLER; SCHRAUBE, 1999).

Para estabelecer uma proteção adequada, algumas considerações devem ser feitas. Primeiramente, mede-se ou calcula-se a seção de choque diferencial da reação, que nada mais é que a probabilidade de produção de certa partícula secundária - geralmente um hádron - pela incidência de partículas em determinado material, em relação a seu ângulo e energia de escape. Também faz-se necessário conhecer a quantidade de partículas, primárias ou secundárias, que escapam do alvo. Quanto menor for, melhor a blindagem. Por último, avalia-se a energia absorvida por unidade de massa do escudo, ou seja, a dose. Quanto mais energia cinética o escudo absorve, menor a energia transferida para as partículas secundárias e menor o seu percurso, resultando em sua frenagem no escudo, ou alguns centímetros após ele.

Apesar dos parâmetros mencionados acima serem suficientes para avaliar a eficiência de uma blindagem, alguns são muito difíceis de se obter experimentalmente, sem men-

cionar o alto custo do aparato experimental. Contudo, com o desenvolvimento de processadores de dados mais potentes, foi possível tratar as interações nucleares com uma abordagem computacional, calculando cada evento de forma separada, através de códigos bastante minuciosos baseados em um método muito conhecido, que será detalhado na próxima Seção.

1.3 O Método de Monte Carlo

O *método de Monte Carlo* trata-se da modelagem numérica que calcula o comportamento médio ou mais provável de um sistema, através da observação dos resultados de um grande número de ensaios que simulam os eventos físicos responsáveis por tal comportamento. Cada ensaio é reproduzido em um computador de acordo com os valores de uma sequência de números aleatórios que, quando somados, mostrarão o comportamento mais provável desse sistema (HENDRICKS, 1994).

O princípio do *método de Monte Carlo* - amostragem estatística - data o final do Século XVIII. Apesar de conhecido, era pouco utilizado devido ao grande trabalho e tempo requerido para implementação. Apenas com o advento do computador eletrônico, em meados do Século XX, foi possível proceder com a amostragem estatística computacional, concedendo aplicabilidade ao método, incialmente, na área da Física Nuclear (armas e materiais físseis) no Laboratório de Los Alamos (Novo México, Estados Unidos) (HENDRICKS, 1994).

Desde então, a aplicação do *método de Monte Carlo* consolidou-se em várias áreas do conhecimento onde processos estocásticos são considerados. Uma delas é o transporte da radiação em meio material, principalmente em ambientes onde a geometria do sistema adquire alto grau de complexidade. Como a distribuição da probabilidade para cada tipo de interação muda de acordo com a natureza e energia da radiação, além da constituição do alvo, o tratamento numérico dado a este problema assume uma série de etapas e considerações (HENDRICKS, 1994).

Para esclarecer o caso, tomemos como exemplo a passagem de um feixe de prótons em certo material. No cálculo analítico, a trajetória de cada próton vai consistir em uma sucessão de caminhos em linha reta, os quais terão comprimento e direção aleatórios, resultado das interações do próton com os nucleons-alvo que constituem o meio. Os tipos possíveis de interação de um próton com um nucleon incluem o espalhamento elástico, espalhamento ineslástico, absorção e fissão. A ocorrência de cada reação pode ser pre-

vista apenas probabilisticamente, ou seja, a absorção ou espalhamento de um próton, por exemplo, terão determinados valores de probabilidade, experimentalmente medidos, que serão incluídos no cálculo (HENDRICKS, 1994).

Tais probabilidades, ou seções de choque, são dependentes da energia do próton e de propriedades atômicas e nucleares do alvo. Além disso, o problema requer a função da densidade de probabilidade do comprimento da trajetória em linha reta de cada próton no material, também conhecida como *"livre caminho médio"*, dada particularmente por $\sigma\rho \exp^{-\sigma\rho x} dx$, onde ρ é a densidade do núcleo e σ é a seção de choque total, ou seja, a soma da seção de choque de espalhamento integrada sobre todos os ângulos, da seção de choque de absorção e da seção de choque de fissão. Esta função representa a probabilidade do próton percorrer uma distância x antes que ocorra uma interação (HENDRICKS, 1994).

A aplicação do *método de Monte Carlo* no problema acima envolve o uso de uma sequência de números uniformemente distribuídos no intervalo (0,1) para construir uma hipotética (mas realística) história de cada um dos prótons que atravessam o material. A razão dos prótons que escapam do alvo pelo número de histórias construídas é uma estimativa da resposta do problema e sua precisão cresce à medida que aumentam o número de histórias de prótons. Detalhes do processo podem ser ilustrados seguindo a construção de uma delas (HENDRICKS, 1994).

O primeiro passo da construção de uma história de próton é determinar o primeiro comprimento do livre caminho médio x_1. Como já mencionado, a sequência de números pesudorandômicos (limitados entre um intervalo) gerados pelo computador é uniformemente distribuída em $(0, 1)$, onde os livres caminhos médios são distribuídos de acordo com $\exp^{-\sigma\rho x}$ em $(0, \infty)$. Então, o primeiro livre caminho médio será dado por $x_1 = \frac{-1}{\sigma\rho} \ln(1 - \xi_1)$, onde ξ_1 representa a sequência gerada. O segundo passo na história do próton envolve o tipo de interação do mesmo com o núcleo. Supondo que apenas ocorra as reações de espalhamento e absorção e que a seção de choque de espalhamento seja nove vezes maior que a de absorção, o intervalo $(0, 1)$ será então dividido em dois intervalos, $(0; 0, 1)$ e $(0, 1; 1)$. Assumindo que x_2, o segundo número psudorandômico gerado pelo computador, resulte em 0,2, ou seja, pertença ao maior intervalo, temos então o espalhamento do próton ao invés da absorção. Dessa forma, o terceiro passo será determinar o ângulo de espalhamento do próton. Para isso, o terceiro número pseudorandômico deve ser transformado de modo que a sequência ξ_1, reflita a distribuição dos ângulos de espalhamento (seções de choque de espalhamento em função do ângulo de espalhamento). Mais passos na história do próton serão considerados até que ocorra a absorção do mesmo,

ou sua saída do alvo (HENDRICKS, 1994).

Assumindo que N histórias de prótons são geradas e que n histórias terminaram com a saída do próton do alvo, a probabilidade do próton deixar o alvo será $\frac{1}{N}\sum s_i = \frac{n}{N}$, onde s_i é o *score* atribuído para cada próton, sendo $s_i = 0$, quando ocorre absorção do próton pelo alvo e $s_i = 1$ quando ocorre a saída do próton do alvo. Quando o número de histórias N é grande, o erro relativo pode ser atribuído como $\sqrt{\frac{\mathrm{Var}(s_i)/N}{\bar{s}}}$, onde $\mathrm{Var}(s_i)$ e $\bar{s}$ são, respectivamenete, a variância e a média do *score* s_i (HENDRICKS, 1994).

Pode-se perceber através do exemplo, que o *método de Monte Carlo* fornece soluções aproximadas para modelos mais exatos, diferentemente dos métodos determinísticos, que geralmente oferecem soluções exatas para modelos aproximados. Além disso, ao considerar situações mais complexas como o feixe de radiação ser constituido de várias partículas, com várias energias e formato irregular, bem como seu alvo, o *método de Monte Carlo* torna-se muito mais vantajoso na resolução do problema, por calcular cada interação isolada e construir o comportamento total do sistema ao final da simulação (HENDRICKS, 1994).

Em vista da grande flexibilidade e abrangência do método, sua aplicação dentro do transporte de radiação é muito extensa, englobando desde a proteção radiológica no campo da medicina e da engenharia aeroespacial, até em pesquisas nucleares para recolhimento de dados e geração de energia (HENDRICKS, 1994). Os códigos computacionais desenvolvidos por diversos laboratórios do planeta tem contribuído muito nessas áreas devido a grande quantidade de dados e modelos numéricos que podem ser processados nos cálculos para a resolução de problemas pertinentes à pesquisa.

A próxima seção abordará aspectos do código computacional baseado no *método de Monte Carlo* para o transporte da radiação utilizado neste trabalho, assim como suas principais características no processamento e geração de dados.

1.4 O Código MCNPX

O MCNPX (Monte Carlo N-Particle eXtended) é um código computacional baseado no método de Monte Carlo que envolve o transporte contínuo de trinta e quatro tipos partículas e íons em geometria tridimensional. Possui cartões de entrada com opções flexíveis, gráficos interativos e contém suporte para plataformas sequenciais e de multi-processamento. O *MCNPX* também dispõe de um série de bibliotecas contendo dados nucleares para o cálculo das probabilidades de interação a baixa energia, além de modelos

nucleares para demais interações, onde as bibliotecas não estão disponíveis (WATERS et al., 2007).

O projeto do *MCNPX* foi iniciado em 1994, com o objetivo de estender o pacote LAHET (Los Alamos High Energy Transport) já existente como ferramenta de cálculo para o transporte de nêutrons no estudo dos processos envolvidos no Acelerador para Produção de Trítio (APT) no Laboratório Nacional de Los Alamos (LANL). O código LAHET possibilitava o transporte de dezoito tipos de partículas e incluía uma série de pacotes para altas energias que usava os modelos Bertini, ISABEL e FLUKA para o cálculo das interações primárias e os modelos de evaporação de Dresner, fragmentação de Fermi e fissão de ORNL e Rutherford-Appleton para o cálculo dos processos de desexcitação residual. As interações nucleares consistiam de um modelo de pré-equilíbrio de multiestágio intermediário às fases de Cascata Intranuclear (INC) e evaporação (WATERS et al., 2007).

Alguns dados de neutrôns do LAHET já tinham sido implementados em um código anterior ao *MCNPX*, o MCNP (Monte Carlo N-Particle). A extensão do pacote consistiu na adição de um número maior de partículas e modelos nucleares como o CEM, LAQGSM e INCL4 INC e o código ABLA para evaporação e fissão. Como sua criação estava voltada à aplicações envolvendo energias intermediárias, a precisão nos modelos de INC, evaporação e fissão foram muito focados. Portanto, sua utilização abrangeu projetos como alvos de *spallation*, blingagem de aceleradores, cosmoquímica e física médica (WATERS et al., 2007).

Entretanto, com a adição de mais elementos da física dos códigos FLUKA e LAQGSM, foi possível melhorar a capacidade do *MCNPX* para cálculos envolvendo altíssimas energias. Atualmente, o código abrange energias na ordem de TeV, ampliando os campos de aplicação que incluem (PELOWITZ, 2005):

- Investigação da produção de isótopos por aceleradores;
- Decaimento do lixo nuclear;
- Terapia com nêutrons e prótons;
- Investigação da radiação cósmica de fundo e blindagem para aviões e espaçonaves a grandes altitudes;
- Formação de imagem radiográfica;

- Investigação do transporte de nêutrons e partículas carregadas para aplicações a baixas energias;
- Dosimetria a altas energias e detecção de nêutrons;
- Experimentos envolvendo neutrinos;
- Trajetória de partículas carregadas em plasmas;
- Danos causados em semicondutores por raios cósmicos;
- Segurança nuclear;
- Busca por petróleo.

A estrutura básica do *MCNPX*, bem como os cartões de entrada, modos de interação e dados de saída são descritos nas próximas Subseções.

1.4.1 Estrutura do Código

O *MCNPX* é escrito em Fortran 90, com poucas rotinas em C envolvidas principalmente nos recursos gráficos. O código possui interface para as plataformas PC, Linux, MAC, Sun Solaris e IBM AIX e suporta multiprocessamento para todos os tipos de partículas disponíveis (WATERS et al., 2007). A síntese das principais características do código utilizado neste trabalho é apresentada na Tabela 1.

Tabela 1: Características gerais do código *MCNPX* (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

	MCNPX
Versão	2.5
Instituição	LANL
Licença	Livre
Páginas do Manual	470
Linguagem	Fortran 90/C
Processamento Paralelo	Sim
Website ou contato	http://mcnpx.lanl.gov/

A entrada do *MCNPX* consiste em uma série de arquivos que são fornecidos como parte do pacote, gerados pelo próprio usuário. O arquivo de entrada contém uma série de informações sobre o problema, incluindo a especificação da geometria, descrição dos materiais e seleção das seções de choques, a localização e características da fonte, o tipo de resposta ou contagem desejado e alguma técnica de redução da variância usada para

melhorar a eficiência. Cada linha do arquivo de entrada pode conter até 80 caracteres (PELOWITZ, 2005).

As unidades de medida padrão do *MCNPX* são (PELOWITZ, 2005):

- Comprimento em centímetros;
- Energia em MeV;
- Tempo em *"shakes"* (10^{-8} segundos);
- Temperatura em MeV (kT);
- Densidade atômica em átomos/barn-cm;
- Densidade de massa em g/cm^3;
- Seções de choque em barns (10^{-24} cm^2);
- Números de aquecimento em MeV/colisão;
- Razão do peso atômico baseado na massa de um nêutron de 1,008664967.

O formato padrão do arquivo de entrada (contendo a descrição da geometria, materiais, fonte, etc.) para executá-lo a partir de qualquer mensagem de bloqueio, ou linha de execução é mostrado na Figura 3.

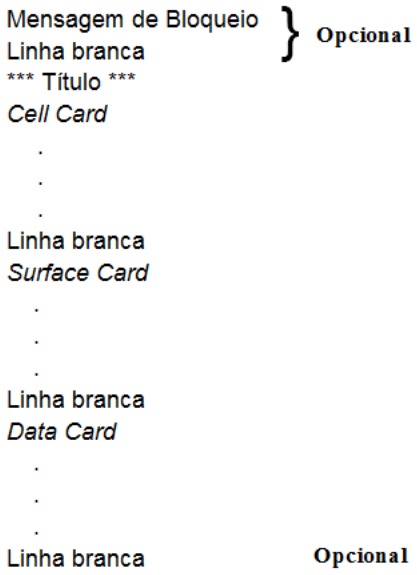


Figura 3: Formato padrão do arquivo de entrada do *MCNPX* (PELOWITZ, 2005).

1.4.2 Especificação da geometria e fonte

A geometria do *MCNPX* é baseada em superfícies, na qual são combinadas em células geométricas. Um visualizador interativo é incluso no código para fins de depuração das mesmas. As superfícies disponíveis incluem planos, esferas, cilíndros, cones, elipsóides, hiperbolóides, parabolóides e tórus elípticos ou circulares. As células são definidas por combinações de superfícies através de operadores Booleanos: interseção, união e complemento. Então, seriam necessários seis planos para descrever uma caixa, por exemplo (WATERS et al., 2007).

Recentemente, este processo tem sido simplificado pela adição de novas superfícies denominadas *"macrocorpos"*, que são combinações convenientes das superfícies simplificadas em uma única descrição. Estão disponíveis dez objetos, incluindo caixa, paralelepípedo retangular, esfera, cílindro circular reto, prisma hexagonal reto, cilíndro elíptico reto, elipsóide, ponte e poliedro arbitrário. Devido ao dimensionamento de variáveis no código F90, não existe, em princípio, qualquer limite para o número de superfícies ou de células que pode ser definido num problema (WATERS et al., 2007).

Cada célula deve ser preenchida por um material com densidade fixa. Os materiais são designados como combinação de elementos, cada um com seu peso ou fração atômica. A capacidade de *misturar e combinar* do código permite ao usuário especificar se as interações devem ser feitas através das referências de dados nucleares, diretamente calculadas por um modelo nuclear, ou combinando ambos. Todos os materiais definidos estarão no estado sólido, a menos que a fase gasosa seja especialmente especificada (WATERS et al., 2007).

A definição da fonte no *MCNPX* é feita pela identificação do tipo de partícula, energia, tempo, direção e posição. Fontes podem preencher uma célula, começar de uma superfície, ou formar uma geometria independente daquelas já definidas. Mais de um tipo de partícula pode ser especificada em uma única fonte. É possível também especificar uma variável em função de outra variável, por exemplo, a energia em função do tipo de partícula. O espectro de energia pode ser especificado como funções predefinidas, histogramas, ou mesmo obtido de um arquivo externo (WATERS et al., 2007).

1.4.3 Transporte e Interação

O *MCNPX* controla trinta partículas diferentes e quatro íons. A trajetória será determinada pela energia cinética de corte configurada pelo usuário, e as partículas decairão

de acordo com suas meias-vidas padrão. A física necessária para a realização de uma simulação será discutida em três partes: transporte de partículas carregadas, tabelas de dados baseadas em opções físicas e modelos físicos.

1.4.3.1 Transporte de Partículas Carregadas

Para partículas carregadas pesadas, o formalismo fundamental de Bethe-Bloch foi aprimorado para incluir os valores e procedimentos de interpolação recomendados no Relatório 37 da ICRU (Comissão Internacional de Unidades e Medidas da Radiação). A correção do efeito densidade usa a parametrização de Sternheimer e Peierls. Para prótons de alta energia e outros projéteis carregados é implementada a transferência de energia cinética máxima e para energias intermediárias, as correções para o poder de frenamento (*stopping power*) foram adaptados de Janni (WATERS et al., 2007).

O espalhamento Coulomb a baixos ângulos usa o algoritmo de Rossi-Griesen, não acomodando deslocamentos transversos em subconjuntos de partículas carregadas, utilizando apenas a teoria que trata dos desvios angulares. Entretanto, os resultados sofrem pouco desvio do esperado. Finalmente, a dispersão de energia utiliza a lógica de Vavilov, recentemente melhorada (WATERS et al., 2007).

1.4.3.2 Bibliotecas de Dados Avaliadas

Nove classes de bibliotecas de dados avaliadas estão disponíveis. As mais comuns são as bibliotecas de dados térmicos fotonucleares, para prótons e para nêutrons; dados de energia contínua para nêutrons; e dados de interação fotoatômicos (acima de 100 GeV) e para elétrons (acima de 1 GeV). Os dados de interação para elétrons e fotoatômicos dependem apenas do número atômico Z. Todos os outros possuem dados isotópicos. Os dados térmicos levam em conta o espalhamento em estruturas moleculares específicas, e substituem seções de choque para energias muito baixas. Estes dados são avaliados apenas para materiais, e não para isótopos (WATERS et al., 2007).

As bibliotecas com interações para fótons incluem as seções de choque Thompson, Compton, fotoelétricas e de produção de pares. As bibliotecas para elétrons contém dados de ionização e *bremsstrahlung* (frenamento). As bibliotecas de nêutron e fotonucleares contém as seções de choque total, de espalhamento elástico, de fissão, (n,xn) e (n,γ), além de alguns números de aquecimento. Todos os dados de bibliotecas podem ser plotados diretamente no *MCNPX*, para isótopos individuais ou para modelos (WATERS et al., 2007).

1.4.3.3 Modelos Físicos

Como já mencionado no início dessa Seção, os modelos físicos são inseridos nos cálculos para suprir a falta de bibliotecas de dados. Cada modelo físico tem uma constituição específica para cada etapa da reação. A descrição resumida dos principais parâmetros físicos do *MCNPX*, principalmente em reações nucleares que envolvem o processo de *spallation* é mostrada na Tabela 2.

Tabela 2: Modelos físicos, processos e bibliotecas de dados nucleares para reações de *spallation* implementados no *MCNPX* (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

	MCNPX
Partículas	34
Perda de energia	Bethe-Bloch
Espalhamento	Rossi
Dispersão	Vavilov
Cherenkov	Não
Nêutrons de baixa energia	Biblioteca ENDF
Prótons de baixa energia	Biblioteca ENDF e Modelos
Modelos utilizados	BERTINI, ISABEL, INCL/CEM, LAQGSM e FLUKA
Aquecimento	Sim
Campos Elétrico e Magnético	Sim

De modo geral, a sequência de um cálculo não tem início com um modelo de Cascata Intranuclear. Depois de um certo tempo ou energia de corte (dependendo do modelo), uma fase de pré-equilíbrio é inserida. Após a reação de cascata, ocorre a decisão para a ocorrência de fissão ou desexcitação. O processo de desexcitação pode seguir um modelo de evaporação ou um modelo de ruptura de Fermi. Abaixo do limite de emissão de nêutrons, a evaporação procede por emissão de fótons (WATERS et al., 2007).

A descrição dos principais modelos físicos incluídos no *MCNPX* para reações nucleares utilizadas neste trabalho será detalhada na Seção 1.5.

1.4.4 *"Tallies"* e Convergência da Resposta

Nas séries de códigos do *MCNPX*, as respostas são conhecidas como *"tallies"*. O usuário especifica qual *tally* é desejado, para quais partículas e para quais regiões da geometria ele deve ser usado, tudo com entradas simples construídas no arquivo de execução. O *MCNPX* possui opções de *tally* predefinidas para corrente, fluência e deposição de energia, eliminando a necessidade do usuário definir estas quantidades. Ao invés de depender

exclusivamente da variância, o *MCNPX* possui dez testes estatísticos utilizados para avaliar a convergência da resposta. Uma grande variedade de técnicas de redução da variância estão disponíveis no código e o usuário especializado pode reduzir substancialmente o tempo para convergência da resposta, mesmo em problemas complicados (WATERS et al., 2007).

O *MCNPX* tem quatro tipos de respostas: Comprimento da Trajetória, Superfície, Colisão e Próximo Evento. A maioria delas podem ser calculadas como funções da energia, ângulo e tempo. O comprimento da trajetória refere-se aos *tallies* de fluxo ou fluência em um volume. O fluxo é a fluência por segundo e cabe ao usuário normalizar a resposta por unidade de tempo, se desejado. O fluxo pode ser facilmente ponderado por quantidades, tais como densidade, seções de choque, fatores de conversão de fluência para dose, e fatores de aquecimento, a fim de calcular observáveis físicos. Muitos desses fatores estão contidos nas bibliotecas de dados. O *MCNPX* estima o fluxo em uma célula como a soma de todas as partículas que atravessam a célula, dividido pelo volume da célula (WATERS et al., 2007).

No caso de uma superfície, o fluxo total é dado pela soma das partículas que a atravessam dividido por sua área e pelo valor absoluto do cosseno da direção da partícula em relação a normal da superfície. Outro exemplo de *tally* de superfície é a corrente; a simples soma das partículas que atravessam a superfície, a qual pode ser dividida em intervalos angulares.

As respostas de colisão são usadas para calcular a deposição de energia e procedem de duas formas diferentes. Se uma biblioteca estiver disponível, os fatores de aquecimento serão adicionados ao fluxo. Se um modelo for utilizado, os componentes de deposição de energia separados (ionização, recolhimento residual, deposição de energia local, energias das partículas abaixo da trajetória de corte) serão juntados no fluxo (WATERS et al., 2007).

As respostas para próximo evento, as quais são representadas no *MCNPX* como *anéis* e *pontos* detectores, permitem ao usuário estimar fluxo em pontos específicos, ou em um anel, se o problema possuir geometria cilíndrica. Nas bibliotecas de dados, as distribuições angulares de partículas espalhadas são tabeladas. Então, a probabilidade de que tal partícula incida na direcção de interesse é conhecida; para um cálculo de fluxo, a partícula é multiplicada por esta probabilidade, dividida pelo quadrado da distância até o ponto e multiplicada por um fator de atenuação exponencial, que representa a atenuação da partícula ao longo do material. As contribuições de direção e espalhamento são calculadas (WATERS et al., 2007).

Todos os *tallies* podem ser vistos através de uma rotina de gráficos, implementada diretamente no código, após a conclusão dos cálculos, ou mesmo durante sua execução (WATERS et al., 2007).

1.5 Modelos Nucleares

Os modelos nucleares são comumente utilizados em códigos computacionais que envolvem o transporte de partículas, principalmente quando não há disposição de bibliotecas de dados. Nos últimos anos, os modelos tem se tornado cada vez mais refinados devido à evolução dos processadores que permitem o detalhamento dos processos físicos das reações nucleares. A próxima Seção descreverá os principais modelos utilizados neste trabalho, com enfoque nas etapas do processo de *spallation*.

1.5.1 Modelos de Cascata Intranuclear

Modelos teóricos de cascata intranuclear foram desenvolvidos ao longo dos últimos trinta anos, com considerável sucesso. O pressuposto básico da maioria dos métodos empregados nos modelos é que as interações de partículas de alta energia com o núcleo podem ser representadas por colisões entre partículas livres no interior do mesmo, como já mencionado na Seção 1.1. Esse processo físico é chamado de *cascata* e precede os eventos de evaporação, pré-equilíbrio, fissão ou desexcitação por emissão de fótons, na reação de *spallation* (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Para avaliar os observáveis físicos da reação de cascata, os modelos são adequados para uma abordagem estatística usando técnicas de *Monte Carlo* (Seção 1.3) e cinemática de partículas de alta energia. Os principais modelos de cascata disponíveis no *MCNPX* (Seção 1.4) são BERTINI (BERTINI, 1969, 1963), ISABEL (YARIV; FRAENKEL, 1981, 1979) e CEM (GUDIMA; MASHNIK; TONEEV, 1983) e serão descritos nas próximas Subseções.

1.5.1.1 BERTINI

O modelo de BERTINI tem sido utilizado com sucesso em simulações de Monte Carlo para energias intermediárias, até 3 GeV. O núcleo alvo é modelado como uma esfera constituída de três regiões com mudança contínua na distribuição da densidade da matéria em seu interior. O modelo de gás de Fermi, o qual descreve o comportamento de nucleons dentro do núcleo é utilizado. Um gás de Fermi-Dirac obedece à estatística de Fermi-Dirac,

e, portanto, obedece ao princípio da exclusão de Pauli (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

O processo de cascata começa quando uma partícula incidente - próton, nêutron, píon, etc. - colide com um nucleon e produz partículas secundárias. A história de cada partícula é registrada até ela sair do alvo, ou sua energia fica abaixo de um limiar de corte arbitrário, o qual, no geral, é considerado como sendo a metade da barreira Coulombiana da superfície do núcleo. Esta energia é diferente para cada tipo de partícula e neste ponto, observa-se a conversão de energia do processo de cascata é verificada. A cinemática relativística também é aplicada em todo o modelo de BERTINI (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

O método computacional usado no modelo de BERTINI é o de de Monte Carlo que simula essencialmente as interação não elásticas de hádrons com núcleos. Como já mencionado, as partículas incidentes interagem com um nucleon no interior do núcleo, como se vários nucleons estivessem em um espaço livre. Entretanto, a colisão não é análoga, devido ao Princípio de Pauli excluir esses encontros com uma certa transferência de momento. Também, para altas energias a partícula incidente pode atravessar o núcleo sem que ocorra uma interação, resultando em uma *transparência nuclear*. Os locais das colisões, o momento do nucleon atingido, ângulos de espalhamento, etc. podem ser determinados por uma técnica de amostragem estatística junto com as seções de choque da partícula livre (pp, pn, π,p, etc.) (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

Os passos da simulação de Monte Carlo são simples e mostrados abaixo:

1. O ponto do espaço - o parâmetro de impacto - onde a partícula incidente entra no núcleo é determinado através da seleção uniforme de uma área circular, representando a área projetada do núcleo. Este ponto é mostrado na Figura 4;

2. O comprimento do caminho é selecionado pela distância que a partícula incidente percorre antes da ocorrência de uma colisão (ver Seção 1.3) usando a seção de choque total partícula-partícula e as densidades das zonas radiais dependentes do nucleon;

3. Se a partícula escapa do núcleo sem haver colisão, esta partícula contribui para a *"transparência nuclear"*. Caso contrário, o momento do núcleo atingido, o tipo de reação, e a energia e direção do produto da reação são determinados;

4. Se a colisão é permitida de acordo com o princípio de exclusão, e se a energia cinética estiver abaixo de uma energia de corte predefinida, então a simulação escolhe novamente o ponto (2) e as partículas resultantes também serão transportadas;

5. Depois de completo o estágio da *Cascata Intranuclear*, a massa e carga do núcleo

residual são determinadas por um equilíbrio de partículas e a energia excitação residual é determinada por um equilíbrio de energia.

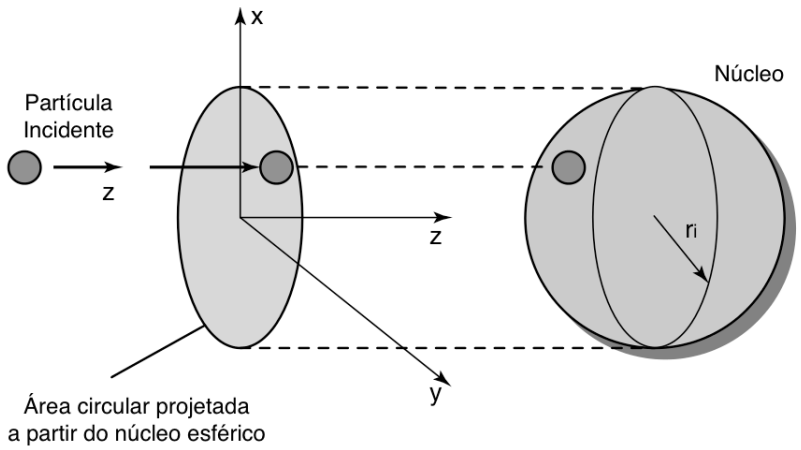


Figura 4: Entrada de uma partícula incidente em um núcleo por seleção uniforme em uma área projetada (FILGES; GOLDENBAUM, 2010).

1.5.1.2 ISABEL

O modelo de ISABEL foi desenvolvido por Yariv e Fraenkel (YARIV; FRAENKEL, 1981, 1979), durante os anos 1978-1981 e é implementado com um gerador de eventos nos códigos LAHET e *MCNPX* (ver Seção 1.4). O modelo de ISABEL é baseado no *método de Monte Carlo* para interações hádron-núcleo e núcleo-núcleo em um intervalo de energia entre 0.1 a 1.5 GeV/partícula e realiza o transporte de hádrons, píons, káons e antinucleons. ISABEL é baseado no modelo VEGAS de (CHEN et al., 1968) e no modelo ISOBAR de (HARP, 1974), sendo desenvolvido e estendido para levar em conta reações de íons pesados (FRAENKEL, 1984).

As seções de choque utilizadas em ISABEL consideram nucleons livres via parametrização utilizada no modelo VEGAS (CHEN et al., 1968). As seções de choque diferenciais para colisões intranucleares de nucleon-nucleon são obtidas por interpolação de valores tabelados, os quais geram seções de choque normalizadas para espalhamento elástico, juntamente com as seções de choques totais para colisões de nêutrons-prótons, próton-próton e nêutron-nêutron (SHEN; MERKER, 1976). A produção e absorção de píon são incluídas no modelo via formação de ressonância, como um isóbaro píon-nucleon no espalhamento nucleon-nucleon descrito por Harp (HARP, 1974). Um modelo físico para interações antipróton-núcleo que descreve a aniquilação de antinucleons também é empregado em ISABEL (CLOVER et al., 1982).

1.5.1.3 CEM (Modelo Cascata-éxiton)

O modelo CEM foi originalmente desenvolvido no JINR (Joint Institute for Nuclear Research), Dubna, por Gudima, Mashnik e Toneev (GUDIMA; MASHNIK; TONEEV, 1983), durante a década de 1980, e mais tarde melhorado por Mashnik e colaboradores (MASHNIK et al., 1998) durante os últimos anos. O modelo considera a reação de *spallation* em três estágios (GUDIMA; MASHNIK; TONEEV, 1983): (i)cascata, (ii)pré-equilíbrio e (iii)equilíbrio. O último estágio considera a evaporação e fissão do núcleo. Os três estágios contribuem para uma reação de partículas de alta energia interagindo com a matéria, a qual já foi discutida na Seção 1.1.

O modelo CEM é diferente dos modelos de cascata pura como BERTINI e ISABEL. O estágio de cascata é baseado na versão padrão do modelo DUBNA (BARASHENKOV; TONEEV, 1999), com melhorias relativas na conservação momento, melhor aproximação das seções de choque total de reação e utilização de energias reais de ligação de nucleons durante a fase de cascata. Versões melhoradas do modelo descrevem reações induzidas de partículas e núcleos acima de 1 TeV/nucleon. Os núcleos residuais excitados depois da emissão de partículas na cascata determinam o ponto de partida para o segundo estágio da reação, o pré-equilíbrio. A relaxação subsequente da excitação nuclear é tratada como um modelo de *éxiton modificado* estendido (GUDIMA; OSOKOV; TONEEV, 1975) do decaimento no pré-equilíbrio, o qual também inclui a descrição do terceiro estágio da reação, o equilíbrio. Finalmente, os processos de evaporação e fissão são tratados pelo modelo de evaporação GEM (FURIHATA, 2000).

2 Objetivos

2.1 Validação do Código

1. Construção de um modelo a partir do código *MCNPX* que permita o cálculo do fluxo de partículas primárias e secundárias, resultante de reações de *spallation* induzidas por prótons em alvos constituídos de diferentes materiais;

2. Determinação do fluxo através da passagem de partículas por detector esférico, modelado computacionalmente, discriminando-as por ângulo e por energia de saída do alvo;

3. Conversão dos valores integrais de fluxo obtidos em unidades de *seção de choque diferencial* a fim de comparar os resultados do modelo com dados experimentais preexistentes na literatura e, dessa forma, validar o funcionamento do código.

2.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem

1. Modelagem de alvos cilíndricos, constituídos de materiais comumente utilizados em blindagem de componentes aeroespaciais, e cálculo do fluxo integral de partículas primárias e secundárias que escapam dos cilindros. Separação da contagem por energia de escape;

2. Construção do espectro de partículas primárias e secundárias em função da energia de saída. Análise da quantidade de partículas que possuem potencial para induzir novas reações com a vizinhança;

3. Aquisição de parâmetros importantes para a avaliação da qualidade da blindagem: produção total de partículas no escudo, fuga de partículas do escudo e energia total depositada;

4. Comparação dos parâmetros adquiridos entre dois valores diferentes para o raio do alvo, a fim de observar interferência na qualidade da blindagem. Avaliação do melhor material a ser utilizado na proteção contra partículas de maior abundância no espectro de raios cósmicos.

3 *Métodos*

3.1 Validação do Código *MCNPX*

A modelagem computacional do alvo, detector e fonte foi baseada no experimento de (HERBACH et al., 2006). Para a construção do alvo, foram definidas três superfícies: um cilindro de comprimento infinito e raio igual a 1 cm, e dois planos perpendiculares ao eixo cartesiano z, localizados, respectivamente, em $z_1 = +\boldsymbol{a}$ e $z_2 = -\boldsymbol{a}$. A união dessas três superfícies delimitou uma célula de formato cilíndrico e espessura $\mathbf{2}\boldsymbol{a}$. Em cada simulação, o alvo era constituído de um material diferente e, para cada material, a espessura do cilindro adquiria um valor, que consta na Tabela 3.

Tabela 3: Valores de espessura dos alvos de acordo com o material utilizado pra constituí-lo em cada simulação (retirados de (HERBACH et al., 2006))

Material	**Espessura (cm)**
Níquel	$1,975 \times 10^{-4}$
Ferro	$2,223 \times 10^{-4}$
Chumbo	$5,530 \times 10^{-4}$

O detector foi definido por uma esfera com origem em (0,0,0) e raio igual a 10 cm. Pelo fato da espessura do cilindro-alvo ser muito pequena em relação ao raio da esfera detectora, ou seja, $\mathbf{a} < 10$ cm, esta o envolve inteiramente, de modo que todas as partículas que escapem do alvo sejam detectadas pela esfera. A fonte foi modelada para simular um feixe de prótons colimado e monoenergético, consistindo em um disco plano de raio igual a 0,1 cm, localizado em $z = -10$ cm, com direção do feixe paralela a z e sentido positivo. Todo o arranjo computacional do experimento está ilustrado na Figura 5.

Para o cálculo do fluxo integral de partículas que deixam o alvo, foi utilizado o *"Tally"* **F1**. Este cartão contabiliza todas as partículas que atravessam a superfície esférica, distinguindo-as apenas por seu tipo (p, n, α, etc.). Os intervalos de energia e ângulo são determinados pelos cartões **E1** e ***C1**, respectivamente, de modo que se possa distinguir

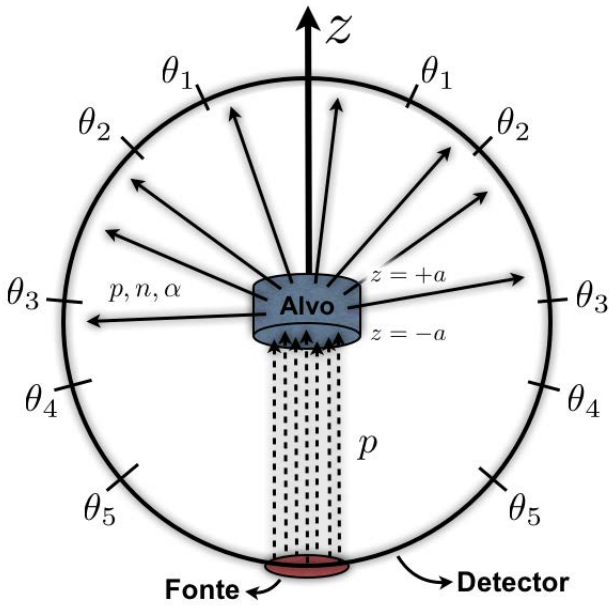


Figura 5: Esquema do experimento modelado no *MCNPX*, mostrando a fonte de prótons induzindo reações de *spallation* no alvo e liberando partículas resultantes das cascatas intranucleares e do pré-equilíbrio e equilíbrio. Estas atravessam a esfera detectora que realiza a contagem por tipo, ângulo e energia de escape.

as partículas também por seu ângulo e energia de escape. Neste modelo, foram definidos cinco ângulos, θ_1, θ_2, θ_3, θ_4 e θ_5, os quais assumem diferentes valores para cada material-alvo, de acordo com os dados experimentais disponíveis na literatura. Para estes ângulos, há um intervalo de aceitação de $\pm 10°$, estabelecido por (HERBACH et al., 2006). A energia foi definida em intervalos de 1 MeV, e o número de intervalos também variou de acordo com os dados da literatura.

Com a finalidade de avaliar as bibliotecas de dados e os modelos físicos disponíveis no *MCNPX*, cada material foi simulado duas vezes, sendo a primeira vez utilizando o modelo padrão e a segunda utilizando o CEM2k, um modelo estendido do CEM. Em ambas as simulações, as bibliotecas utilizadas foram a *ENDF*, para dados nucleares de baixa energia, e a *XDIR*, para dados do material. O modelo padrão do *MCNPX* engloba os modelos de Cascata Intranuclear de Bertini e ISABEL, um modelo de pré-equilíbrio e o modelo de evaporação e fissão de Dresner (PELOWITZ, 2005). Os demais processos (espalhamento elástico, barreira Coulombiana, etc.) ocorrem normalmente.

A versão utilizada do *MCNPX* possuía suporte para inteiros de 32-bit, sendo dois bilhões a máxima quantidade de eventos de prótons que a fonte poderia ter por simulação. Entretanto, devido aos intervalos de energia atribuídos para diferenciação das partículas serem muito pequenos, a variância dos dados ficou muito alta. Por isso, foram realizadas

cinco simulações diferentes, para o mesmo material e o mesmo modelo, com dois bilhões de partículas em cada simulação. A média aritmética dos dados e dos erros foi calculada, além da divisão dos últimos pela raiz quadrada de cinco. Uma vez que havia três materiais e dois modelos a serem simulados, foram realizadas no total trinta simulações, e cada uma durou aproximadamente cinco horas.

A conversão dos dados resultantes em seção de choque diferencial foi feita através da expressão 3.1:

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial E\partial\Omega} = \frac{n(\theta)}{(n_T)2\pi(Cos(\theta-10^\circ)-Cos(\theta+10^\circ))(E_2-E_1)(6,02\times10^{23})(\rho.x)/A}\times10^{27} \tag{3.1}$$

Onde $\frac{\partial^2\sigma}{\partial E\partial\Omega}$ é a seção de choque diferencial em milibarn/megaeletron volt/estereorradiano (mb/MeV/sr), $\frac{n(\theta)}{n_T}$ é o valor médio de saída do *MCNPX*, sendo que $n(\theta)$ é número de partículas ejetadas do alvo a um ângulo θ e n_T é o número de partículas incidentes no alvo, $2\pi(Cos(\theta-10^\circ)-Cos(\theta+10^\circ))$ é o ângulo sólido (em sr) formado devido ao intervalo angular de $\pm10^\circ$ em relação a θ, (E_2-E_1) é o intervalo de energia (em Mev) que a partícula ejetada se encontra, ρ é a densidade do material-alvo em g/cm^3 e x é a espessura do alvo em cm. A é a massa atômica do material-alvo em u.m.a.

Todo o processamento de dados foi realizado através do software Origin 8. Após convertidos em seções de choque, foi feita uma análise gráfica dos valores calculados pelo *MCNPX*, e daqueles obtidos experimentalmente a fim de, finalmente, verificar a validade do modelo computacional.

3.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem

A configuração geométrica da fonte, alvo e detector foi mantida para as simulações, conforme a Figura 5, salvo algumas alterações. O alvo de Níquel foi substituído pelo alvo de Alumínio (A=27), de modo que tivéssemos um núcleo leve, um núcleo intermediário (Fe-56) e um núcleo pesado (Pb-208) para análise de fluxo, energia depositada, e partículas que deixam o alvo em relação a massa do material. A princípio, a espessura dos alvos foi estabelecida pela Camada Semi Redutora (CSR), ou seja, a espessura de material necessária para reduzir a intensidade incial do feixe de prótons pela metade. Assumindo que houvesse dependência apenas das propriedades do material, a CSR foi dada por:

$$CSR = \frac{ln2}{\rho\sigma} \tag{3.2}$$

Onde CRS é a Camada Semi Redutora em cm, ρ é a densidade do material em átomos/cm^3, σ é a seção de choque geométrica em cm^2, dada por: $\sigma = \pi((1,16 \times 10^{-13})A^{\frac{1}{3}})^2$, sendo A a massa atômica do material em u.m.a.

Os valores encontrados para a CSR nos núcleos-alvos constam na Tabela 4. Foi observado que, mesmo para atenuação parcial do feixe, a espessura de blindagem encontrada não estava adequada aos requisitos de peso e custo na estruturação de uma aeronave. De acordo com (SPILLANTINI et al., 2007), somente alguns centímetros de material são utilizados contra a radiação cósmica e, em virtude desse fato, a espessura do cilindro-alvo no *MCNPX* foi considerada 2 cm.

Tabela 4: Valores das Camada Semi Redutora de acordo com a constituição do alvo.

Material	**CSR (cm)**
Alumínio	30,29
Ferro	13,23
Chumbo	14,29

Com o intuito de verificar a alteração do comportamento do fluxo em relação a adição radial de blindagem, foram realizadas apenas para o Alumínio duas simulações diferentes, uma com o raio do cilindro valendo 10 cm, e outra com o raio do cilindro valendo 15 cm e, devido a este aumento considerável em relação ao experimento anterior, a esfera detectora passou a ter 20 cm de raio, com finalidade de abranger o alvo. Nos demais casos, onde os alvos eram de Ferro ou Chumbo, foi considerado apenas o cilindro com 10 cm de raio.

O cálculo de fluxo foi realizado pelos os mesmos cartões definidos no experimento anterior (**F1**, ***C1** e **E1**). Entretando, as partículas que saíram do alvo foram distinguidas apenas por tipo e energia, pois o cartão ***C1** foi modificado para realizar a contagem sobre todos os ângulos de espalhamento. Para o cálculo da energoa total depositada, foi utilizado o *"tally"* **F6**, que determinou a quantidade de energia absorvida pelo alvo (MeV) em relação a sua massa (g), devido às reações. Por fim, o número total de partículas secundárias produzidas e o número total de partículas que escapam do alvo são gerados automaticamente pelo *MCNPX*, e não foi necessário declará-los em nenhum cartão.

As bibliotecas de dados ENDF e XDIR foram mantidas nas simulações, bem como os modelos padrão do *MCNPX* para as reações de cascata, pré-equilíbrio, evaporação e fissão. Para fins de precisão, a simulação com os cilíndros de Alumínio considerou uma fonte com dois bilhões de prótons. Para o Ferro e o Chumbo, apenas vinte milhões de prótons foram o suficiente para gerar resultados adequados.

Uma vez que o espectro de raios cósmicos (Figura 2) possui mais prótons com energias de algumas centenas de MeV até algumas unidades de GeV, foram escolhidas três energias para os prótons da fonte dentro deste intervalo. Logo, em cada simulação a fonte incindia no alvo com 400 MeV, 800 MeV, ou 1200 MeV. Considerando três alvos, dois raios diferentes para o cilindro de Alumínio, e três energias inciais, foram realizadas ao todo doze simulações, três para o Ferro e três para o Chumbo, de uma hora e quarenta minutos cada uma, e seis para o Alumínio, de quarenta e cinco horas cada uma.

Os dados obtidos também foram processados através do software Origin 8 e dispostos em gráficos e tabelas. Com os dados de fluxo, foi calculada a seção de choque diferencial, apenas em relação a energia, através da expressão 3.3:

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial E\partial\Omega} = \frac{n(\theta)}{(n_T)(E_2 - E_1)(6,02 \times 10^{23})(\rho.x)/A} \times 10^{27} \tag{3.3}$$

Onde as variáveis possuem as mesmas definições daquelas presentes na equação 3.1, exceto a unidade da seção de choque, que passou a ser mb/MeV. As curvas construídas relacionavam os valores das seções de choque com a energia de escape das partículas. A energia depositada, número de partículas produzidas e ejetadas foram relacionadas ao material e energia incial do feixe, através de tabelas. Com todos os dados organizados, foi possível fazer uma análise geral da qualidade da blindagem.

4 Resultados e Discussão

4.1 Validação do Código

Os gráficos obtidos relacionam as seções de choque diferenciais com as energias de saída das partículas do alvo, em um ângulo fixo. Observa-se na maioria das curvas que os dados experimentais não possuem valores para todas as energias calculadas, uma vez que foram retirados de trabalhos diferentes, tendo cada um seu objetivo e suas limitações. Em vista de tais particularidades, cada conjunto de resultados, correspondente a cada material simulado, será discutido separadamente na próximas Subseções.

Um detalhe bem observado em relação aos modelos nucleares foi que os mesmos continham uma certa divergência entre seus pontos, conforme o aumento da energia, para todos os ângulos considerados. Esta se deu pelo baixo fluxo de partículas com energias maiores nos cálculos e, em vista da estocasticidade do *MCNPX*, a incerteza da contagem aumentou, mesmo considerando ao todo dez bilhões de eventos. A Figura 6 fornece o comportamento da divergência dos pontos em relação ao número de eventos considerados. Logo, para convergência ideal, seriam necessários infinitos eventos.

Apesar do rastro de divergência aparecer nos resultados, estes pouco interferem na visualização e análise dos mesmos, que serão feitas a seguir.

4.1.1 Níquel

Os dados disponíveis para o níquel estão contidos nos trabahos de (FÖRTSCH et al., 1991) e Goldenbaum (BUDZANOWSKI et al., 2009), onde são determinadas as seções de choque diferenciais de prótons em reações de *spallation* induzidas por prótons de 175 MeV em níquel. Os ângulos considerados foram de 20°, 40°, 60°, 90° e 120°, tendo o trabalho de Goldenbaum (BUDZANOWSKI et al., 2009) dados disponíveis apenas para 20°, os quais estão apresentados na Figura 7.

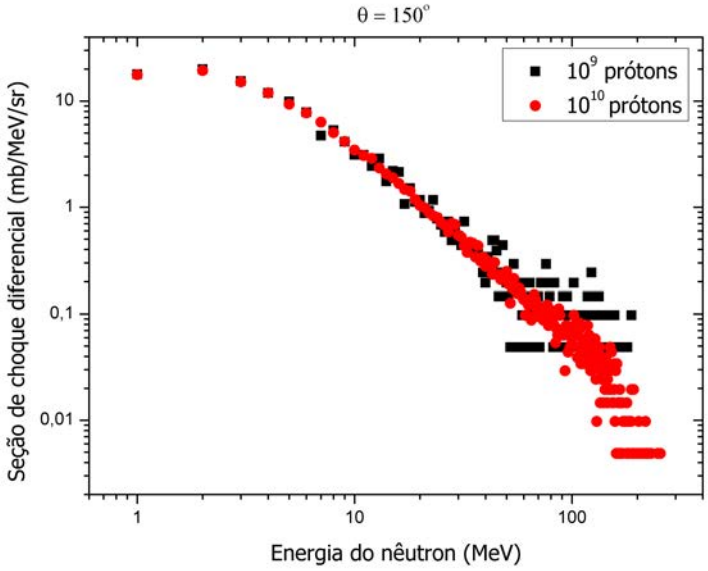


Figura 6: Comportamento da divergência dos pontos em dois cálculos da seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV a 150°, uma considerando 10^9 eventos e outra considerando 10^{10} eventos. Observa-se que quanto maior o número de eventos, maior a convergência dos dados. Para convergência ideal seriam necessárias infinitos eventos.

No processo de *spallation*, as partículas podem ser ejetadas do núcleo por diversas formas, cada uma com uma probabilidade de ocorrência. Nas reações de cascata, há sucessivas colisões no interior do núcleo, onde as partículas escapam com energias geralmente altas. No pré-equilíbrio, a energia cinética dos projéteis já está mais distribuída entre os nucleons, sendo que ainda ocorrem as colisões, entretanto já houve a perda de energia durante a cascata, e no equilíbrio, ou evaporação, há um balanço de energia, e as partículas escapam do núcleo geralmente com energias baixas.

Dessa forma, no caso do Níquel, o intervalo de energia que engloba de algumas unidades até uma dezena de MeV contém partículas emitidas predominantemente por evaporação. Entre 10 MeV e 40 MeV, predomina a ejeção de partículas por pré-equilíbro e acima de 40 MeV, predomina a cascata intranuclear. Deve-se ressaltar que as etapas do processo de *spallation* não estão divididas em intervalos de energia, apenas são mais prováveis de ocorrer nos mesmos.

A coincidência dos dados experimentais e o modelo calculado no *MCNPX* se dá até algumas dezenas de MeV, onde o código faz usos das bibliotecas de dados nucleares. Acima de aproximadamente 20 MeV, os modelos nucleares passam a ser utilizados (PELOWITZ, 2005). Enquanto os dados experimentais permanecem constante em torno de 1,8 mb/MeV/sr na faixa de energia entre 30 MeV e 167 MeV, os valores calculados vão

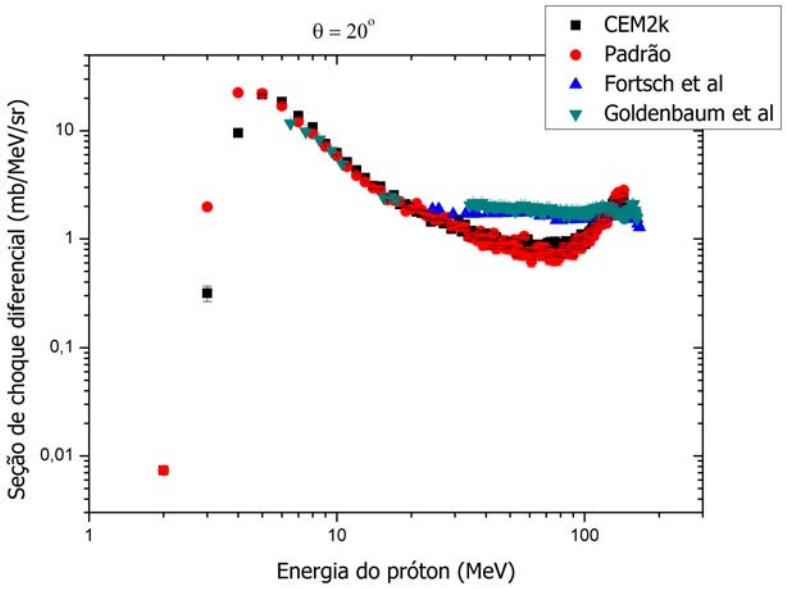


Figura 7: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 20°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (FÖRTSCH et al., 1991) e Goldenbaum (BUDZANOWSKI et al., 2009)

decrescendo até 0,5 mb/MeV/sr, em 70 MeV. Neste ponto, ocorre a maior divergência com os dados experimentais, chegando o erro relativo a 72%. Os valores voltam a crescer, convergindo com os dados experimentais em, aproximadamente, 110 MeV.

No trabalho de (BROEDERS; KONOBEYEV; VILLAGRASA, 2005), onde foi avaliada a seção de choque diferencial de prótons emitidos em Ta-181 induzidos por prótons de 600 MeV a 30°, também considerando os modelos CEM2k e Padrão do *MCNPX*, ocorreu divergência de 70% com os valores experimentais, próximo a 100 MeV e de até 77% próximo a 500 MeV, mostrando que os dois modelos, tanto para esse caso, quanto para nosso, não forneceram uma descrição detalhada dos dados experimentais.

Nos demais ângulos, apenas os dados de (FÖRTSCH et al., 1991) estavam disponíveis para comparação. As seções de choque diferenciais para $\theta = 40°$ são apresentadas na Figura 8. Apenas acima de 22 MeV que os valores experimentais encontravam-se a disposição, o que indica que somente os modelos nucleares foram utilizados, e que estão bem consistentes. Há indícios, com a análise da Figura 7, que para energias abaixo de 20 MeV, os valores calculados pelo *MCNPX* também estão de acordo com os dados experimentais. O mesmo ocorre para $\theta = 60°$, apresentado na Figura 9.

No caso de $\theta = 90°$ e $\theta = 120°$ mostrados, respectivamente, na Figura 10 e na Figura 11, os modelos nucleares apresentaram uma queda em seus valores, principalmente

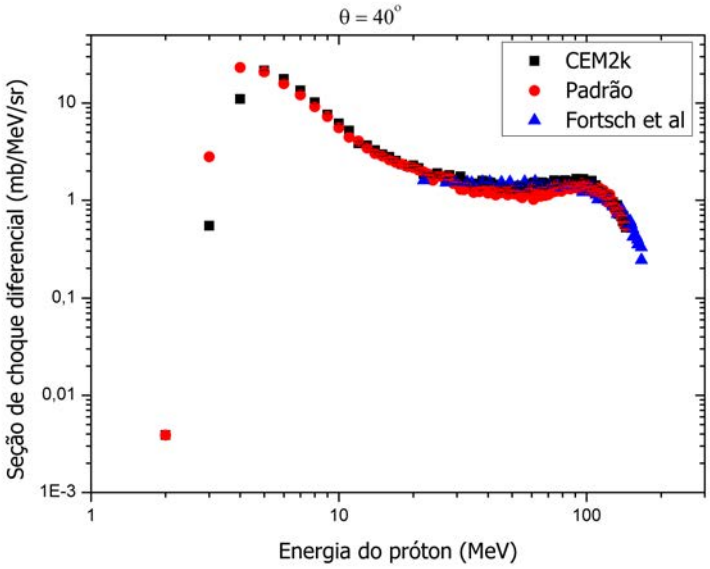


Figura 8: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 40°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (FÖRTSCH et al., 1991)

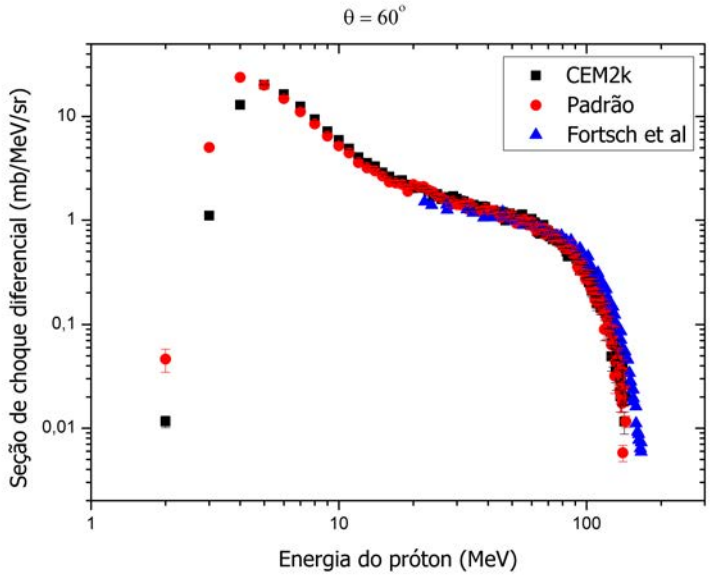


Figura 9: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 60°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (FÖRTSCH et al., 1991)

o CEM2k, em reação aos dados experimentais, chegando a 80% próximo de 40 MeV. De forma uma geral, no entanto, todos os valores calculados pelo *MCNPX* em relação ao Níquel, estavam de acordo com os dados experimentais.

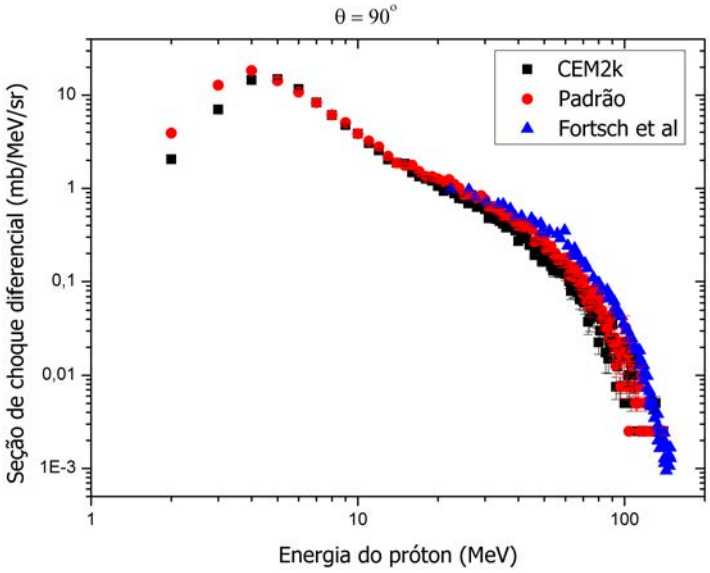


Figura 10: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, a 90°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (FÖRTSCH et al., 1991)

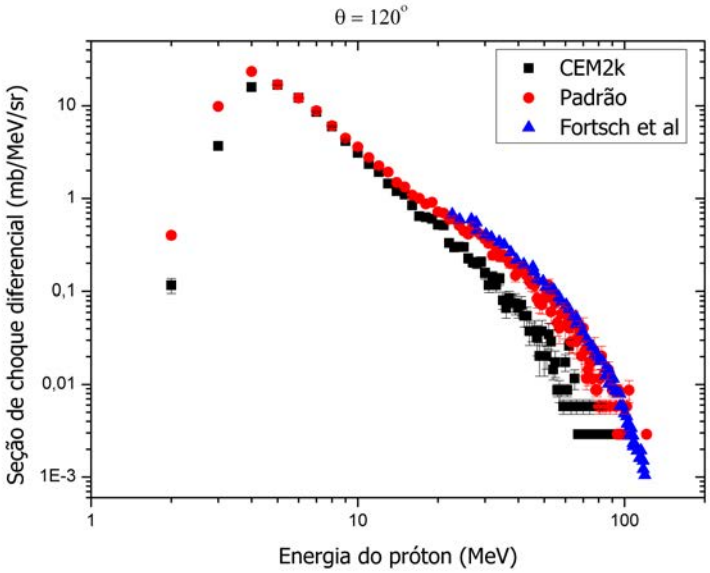


Figura 11: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 120°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (FÖRTSCH et al., 1991)

4.1.2 Ferro

Os dados experimentais para o Ferro constam nos trabalhos de (LERAY et al., 2002) e (AMIAN et al., 1992), onde foram calculadas as seções de choque diferenciais de nêutrons

emitidos da reação em Fe-56, induzida por prótons de 800 MeV. Os ângulos definidos para os cálculos foram $\theta = 10°$ e $\theta = 100°$, obtidos de (LERAY et al., 2002), e $\theta = 30°$, $\theta = 60°$ e $\theta = 150°$, obtidos de (AMIAN et al., 1992).

Assim como o Níquel, as etapas do processo de *spallation*, também estão distribuídas para o Ferro, mas em intervalos de energia normalizados em relação à energia inicial do feixe de prótons. Dessa maneira, aproximadamente entre 40 MeV e 100 MeV, predomina o pré-equilíbrio e acima de 100 MeV, predomina a cascata. Entre 300 MeV e 500 MeV, observa-se a diminuição do fluxo, que pode indicar a baixa probabilidade de ocorrência dos nêutrons pelas reações de cascata neste intervalo de energia.

As características de divergência a altas energias ainda são observadas. Entretanto, o formato da curva dos valores calculados pelos modelos CEM2k e Padrão do *MCNPX* acompanha o formato da curva dos dados experimentais, garantindo consistência ao modelo. A 10°, a diferença entre os valores de seção de choque é de apenas 1 mb/MeV/sr, como mostra a Figura 12.

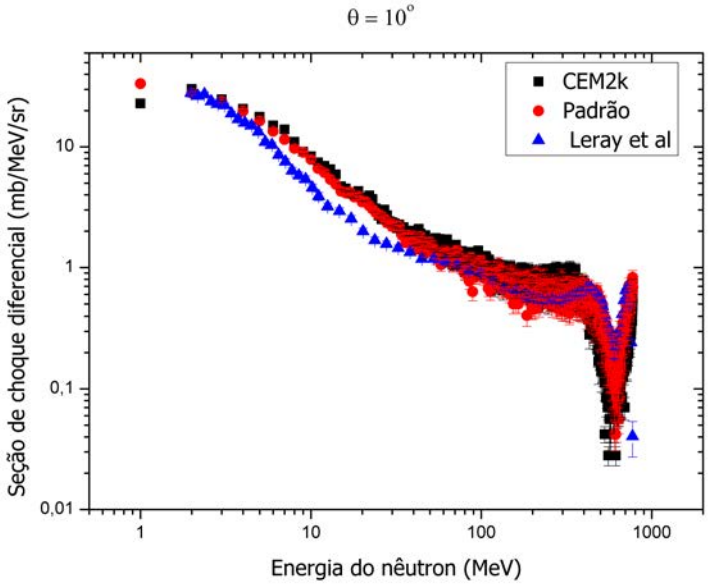


Figura 12: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 induzida por prótons de 800 MeV, a 10°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (LERAY et al., 2002).

Na faixa de energia de alguns décimos de MeV, as curvas experimentais de (AMIAN et al., 1992). possui valores de seção de choque estabelecidos, em contrapartida aos valores calculados. Isto não se deve a ausência de bibliotecas de dados nucleares no *MCNPX*, mas sim ao intervalo de energia estabalecido ser de 1 MeV, ou seja, a contagem englobou todas as partículas com energia de 0 MeV a 1 MeV, não discriminando os valores dessa faixa.

As maiores variações entre os dados não ultrapassaram alguns décimos de mb/MeV/sr, como mostram as Figuras 13, 14 e 15.

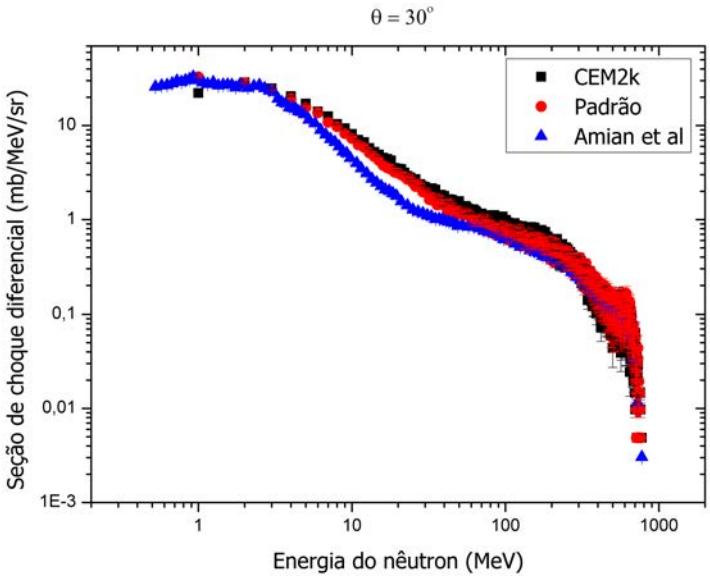


Figura 13: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 induzida por prótons de 800 MeV, a 30°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

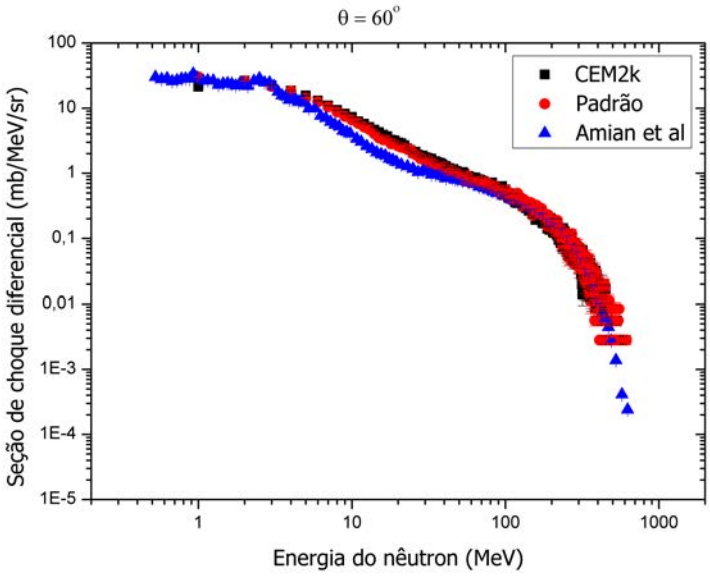


Figura 14: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 induzida por prótons de 800 MeV, a 60°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

No caso de $\theta = 100°$ ocorre o oposto: há ausência de dados experimentais para todas as faixas de energia consideradas. Onde é possível realizar comparação, observa-se um

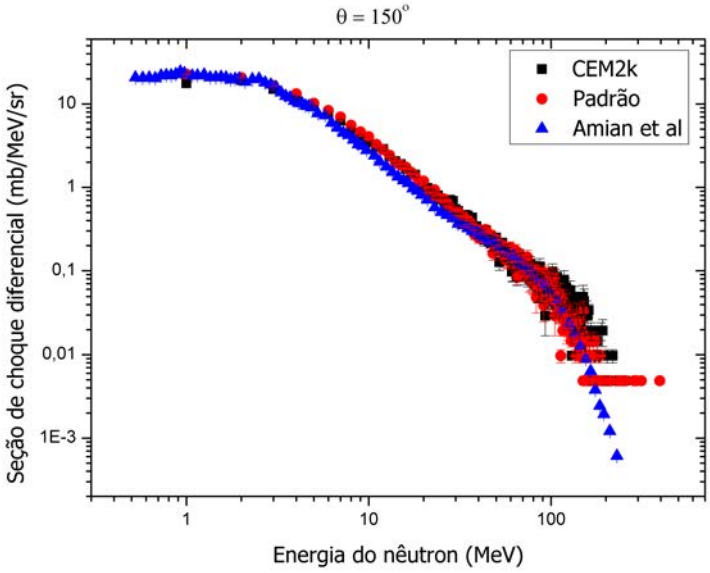


Figura 15: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 induzida por prótons de 800 MeV, a 150°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

comportamento adequado entre os valores calculados e os experimentais e, devido a isto, pode-se considerar o restante dos dados uma extrapolação do comportamento das seções de choque para 100°, como é apresentado na Figura 16.

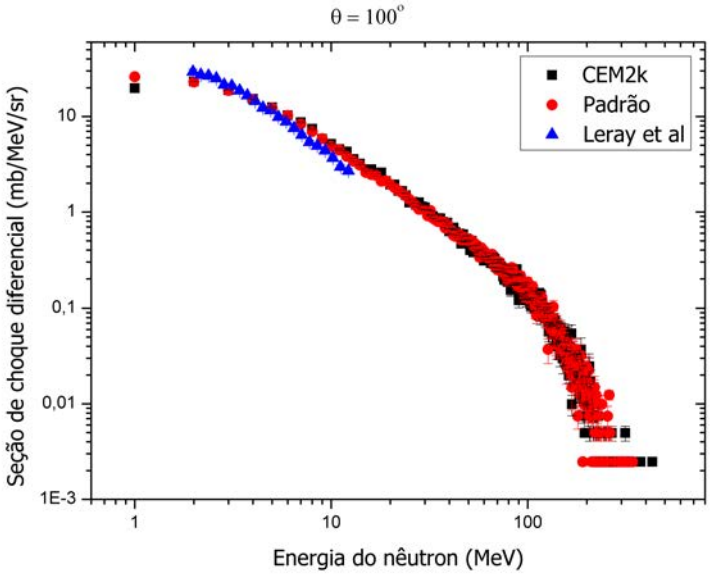


Figura 16: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Fe-56 induzida por prótons de 800 MeV, a 100°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (LERAY et al., 2002).

4.1.3 Chumbo

Com o chumbo acontecem duas particularidades: a primeira é a disponibilidade de dados de seções de choque diferenciais para nêutrons e prótons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV. A segunda é a menor quantidade de ângulos avaliada para ambas as partículas. No caso de nêutrons, há apenas quatro ângulos disponíveis: $\theta = 10°$, obtido por (LERAY et al., 2002) e $\theta = 30°$, $\theta = 60°$ e $\theta = 150°$, obtidos por (AMIAN et al., 1992). Os dados estão apresentados, respectivamente, nas Figuras 17, 18, 19 e 20.

As etapas do processo de *spallation* se distribuem nas curvas do Chumbo de forma semelhante a do Ferro, observando uma queda em seu fluxo entre 300 MeV e 500 MeV para prótons a 10°. Acima deste valor, forma-se o pico de pico de espalhamento "quase-elástico", que se trata apenas o desvio do feixe por interações Coulombianas no núcleo, ou do processo de recuo, onde os prótons perdem uma pequena quantidade de energia. Para nêutrons a este ângulo, este pico não ocorre, apenas a queda em seu fluxo.

Em todas as quatro curvas, três considerações foram feitas. A primeira, que também ocorreu com o ferro, foi a presença de dados experimentais para décimos de MeV, que também pode ser explicada pelo intervalo de energia estabelecido ser muito grande para discriminá-los. A segunda foi a variação mais saliente dos valores de seções de choque, principalmente do CEM2k, na faixa de energia entre 10 MeV e 60 MeV, que no entanto, não ultrapassaram algumas unidades de mb/MeV/sr. A terceira esteve relacionada aos pontos divergentes a altas energias, mas que não interferiu no formato da curva, que se manteve igual a experimental. Logo, o modelo criado no *MCNPX* ainda se mostrou muito consistente.

No caso de prótons, apenas dois ângulos estavam disponíveis, $\theta = 10°$ e $\theta = 30°$, ambos obtidos dos trabalhos de (CHRIEN et al., 1980) e (MCGILL et al., 1984), e apresentados nas Figuras 21 e 22, respectivamente. Em ambos os casos, havia apenas dados experimentais a partir de 60 MeV em diante, e que apresentaram muita consistência com os dados calculados. Entretanto, não havia parâmetros para avaliar a divergência entre os modelos CEM2k e Padrão do *MCNPX* para baixas energias.

Todas as seções de choques calculadas só foram avaliadas para prótons, ou para nêutrons emitidos das reações induzidas em cada alvo. Inicialmente, o cálculo para partículas alfa também foi incluído nas simulações mas, ao ser comparado com os dados experimentais, notou-se que os modelos não calcularam as seções de choque para energias mais altas, além de estarem muito diferentes entre eles. A Figura 23 representa

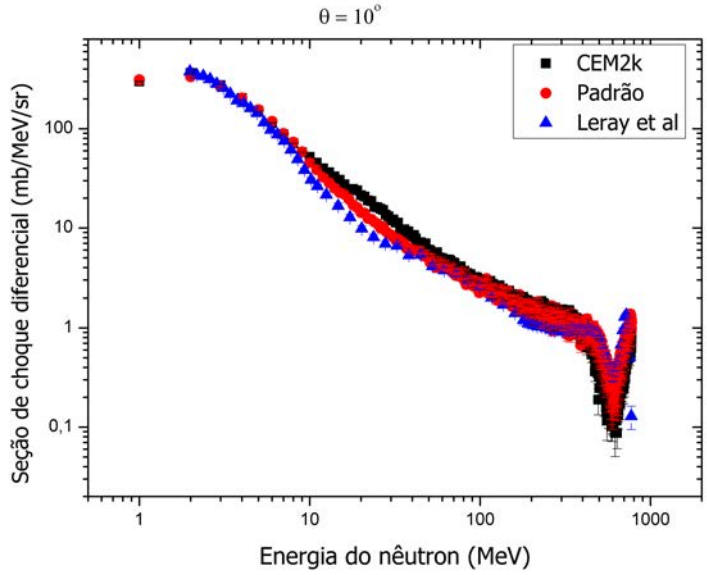


Figura 17: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 por prótons de 800 MeV, a 10°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (LERAY et al., 2002).

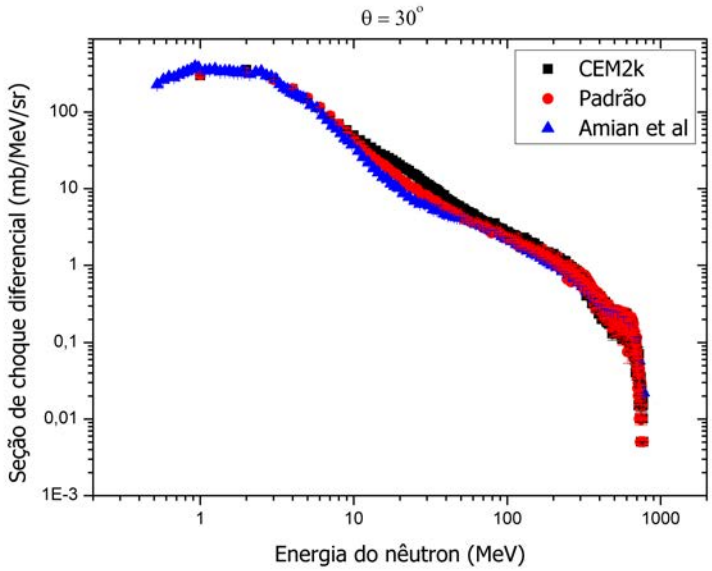


Figura 18: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 30°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

os cálculos utilizando os modelos CEM2k e Padrão do *MCNPX* para partículas alfa emitidas da reação em Ni-58 por prótons de 175 MeV, bem como os dados experimentais obtidos por Goldenbaum (BUDZANOWSKI et al., 2009).

Ao buscar esclarecimentos na literatura, foi observado que a física designada para

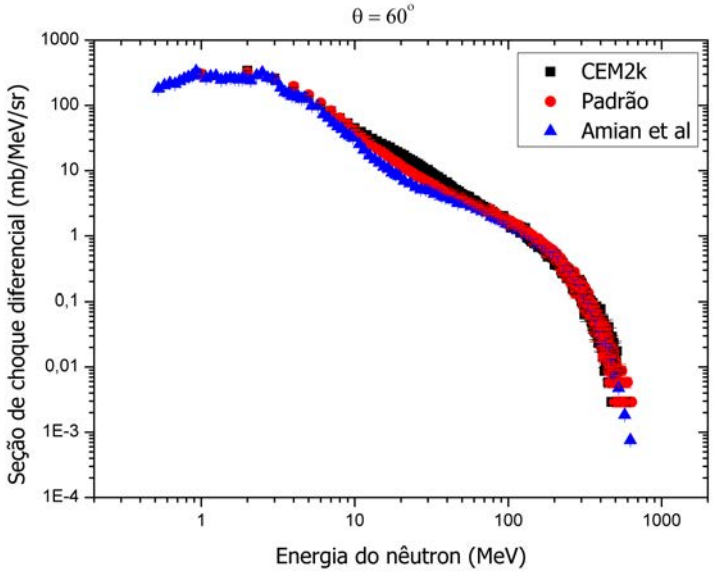


Figura 19: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 60°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

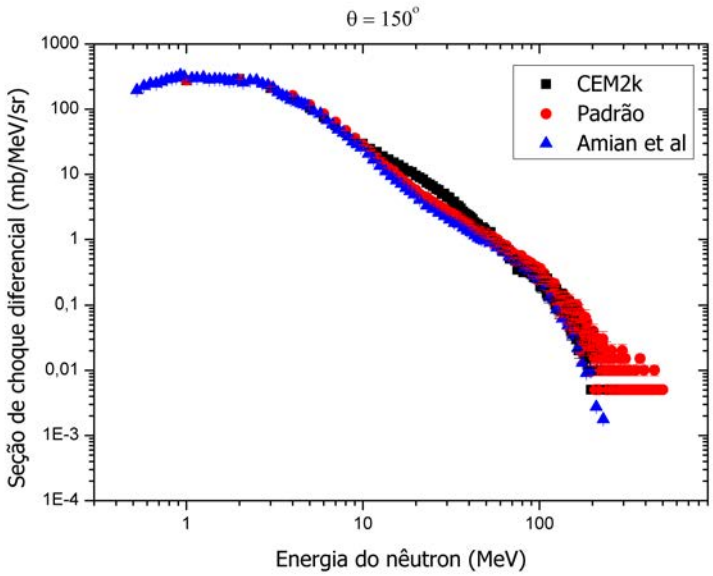


Figura 20: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 150°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (AMIAN et al., 1992).

partículas alfa é muito generalizada, contendo apenas modelos de decaimento estatístico e funcionando devidamente somente para energias abaixo de 100 MeV (PELOWITZ, 2005). Na natureza, quando a partícula incidente interage no interior do núcleo, pode ejetar uma partícula alfa transferindo quase toda sua energia para ela. Logo, o fluxo vai refletir

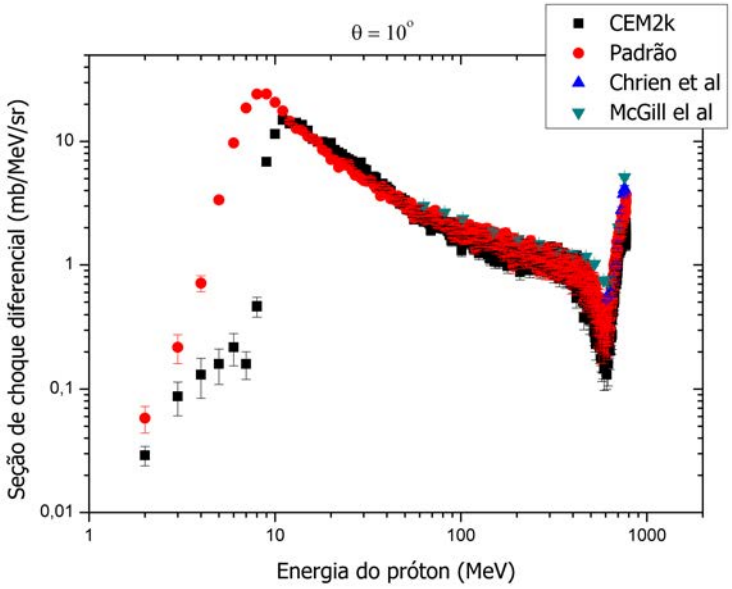


Figura 21: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 10°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (CHRIEN et al., 1980) e (MCGILL et al., 1984).

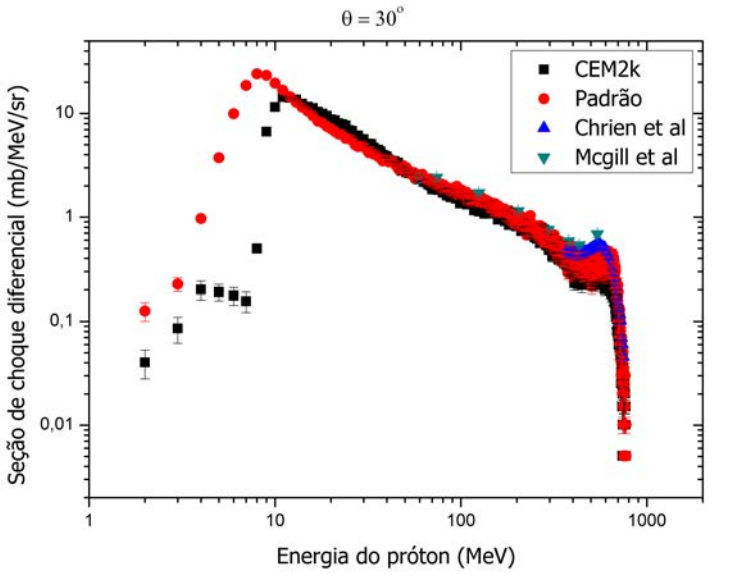


Figura 22: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Pb-208 induzida por prótons de 800 MeV, a 30°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por (CHRIEN et al., 1980) e (MCGILL et al., 1984).

partículas alfa com energias mais próximas da energia do feixe incidente, que não acontece com os dados calculados. Estes, portanto, foram descartados das simulações.

Do ponto de vista geral, o modelo construído a partir do *MCNPX* está adequado em todas as comparações com dados experimentais de diferentes autores, mostrando-se uma

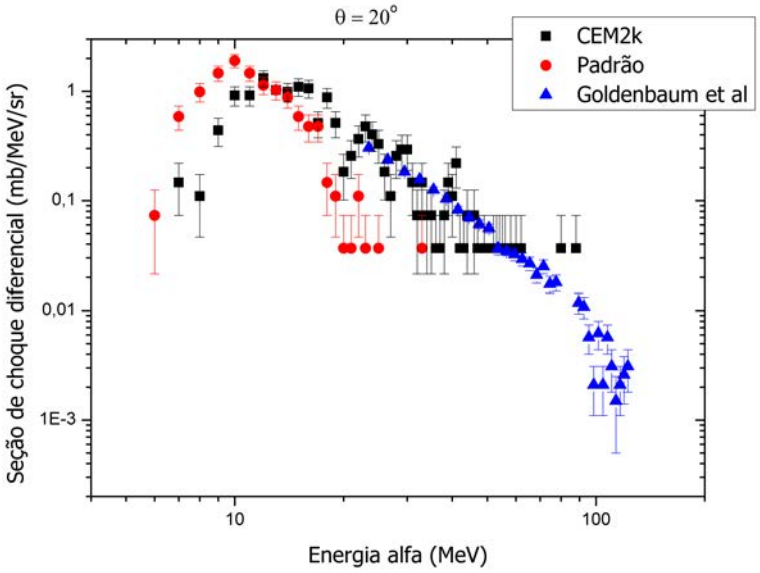


Figura 23: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Ni-58 induzida por prótons de 175 MeV, a 20°, utilizando os modelos nucleares CEM2k e Padrão do *MCNPX* em comparação aos dados experimentais obtidos por Goldenbaum (BUDZANOWSKI et al., 2009).

ferramenta válida e extremamente útil no transporte de partículas.

4.2 Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem

Com a finalidade de avaliar o comportamento radial da blindagem, foram calculadas as seções de choque diferenciais de prótons (Figura 24), nêutrons (figura 25) e partículas alfa (Figura 26) emitidos da reação em Al-27 por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV, com os raios do alvo valendo 10 cm e 15 cm em cada simulação. Foram observadas as possíveis variações dos pontos nos gráficos, bem como o comportamento das seções de choque de cada partícula.

Em todos os casos é muito difícil visualizar a diferença entre os pontos das curvas, para os dois valores de raio. A variação mais evidente encontrou-se nas partículas alfa de 400 MeV, que entretanto, se dá mais por motivos de divergência do que de coincidência dos dados. Logo, a contribuição radial para a radiação secundária é quase inexistente, o que indica que poucas partículas são espalhadas a grandes ângulos, quando ocorre interação com a blindagem.

As seções de choque diferenciais para prótons distribuem-se de duas maneiras: a

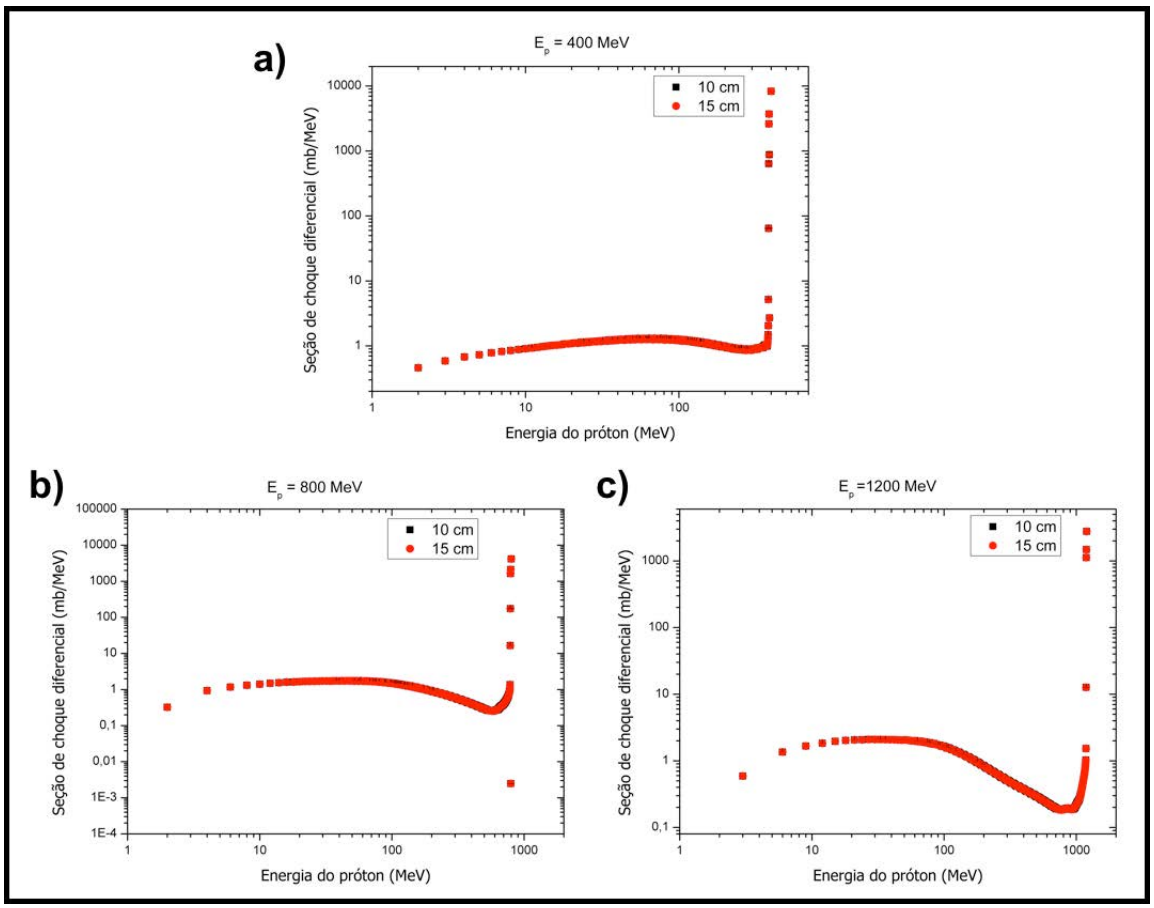


Figura 24: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em Al-27 induzida por prótons de **a)** 400 MeV, **b)** 800 MeV e **c)** 1200 MeV para alvos com 10 cm de raio, e 15 cm de raio.

primeira consiste em um comportamento suave da curva, que abrange a maioria das energias, e a segunda trata-se da formação de um pico acentuado, ao final da mesma. A parte suave corresponde às partículas formadas por interação nuclear, e a parte acentuada está relacionada, ou ao espalhamento elástico, por não haver perda de energia do próton incidente, ou a não interação do feixe com o material.

Em 400 MeV, a suavidade estende-se de, aproximadamente, 2 MeV até 385 MeV, onde as seções de choque concentram-se em 1 mb/MeV. Em 800 MeV, temos este comportamento de 2 MeV a 784 MeV, onde as seções de choque variam em torno de 0,70 mb/MeV e, em 1200 MeV, os valores começam a ter variação maior, mas ainda encontram-se próximos, em 0,5 mb/MeV, no intervalo de energia de 3 MeV a 1185 MeV. Há uma queda de fluxo de prótons próxima às energias altas, principalmente para 800 MeV e 1200 MeV, devido a menor probabilidade da ocorrência das partículas nas interações de cascata. A partir dos intervalos correspondentes a cada energia inicial, forma-se o pico, onde as seções de choque alcançam dezenas, centenas e milhares de mb/MeV.

O comportamento das curvas, mostra que a maioria dos prótons incidentes escapam do alvo quase sem interagir e a produção de partículas secundárias é pequena. A Tabela 5 complementa as informações dos gráficos fornecendo a quantidade total de prótons produzidos e ejetados do alvo, considerando os pertencentes ao feixe e os secundários.

Tabela 5: Valores de prótons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Al-27, bem como a porcentagem de escape total. Observa-se que quanto maior a energia incidente, maior a produção de partículas secundárias.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Prótons produzidos por interações nucleares	2557034	3501723	4055794
Prótons totais	22603817	23580828	24159326
Prótons ejetados	19975990	20248517	20422142
Porcentagem de escape	88,37%	85,86%	84,53%

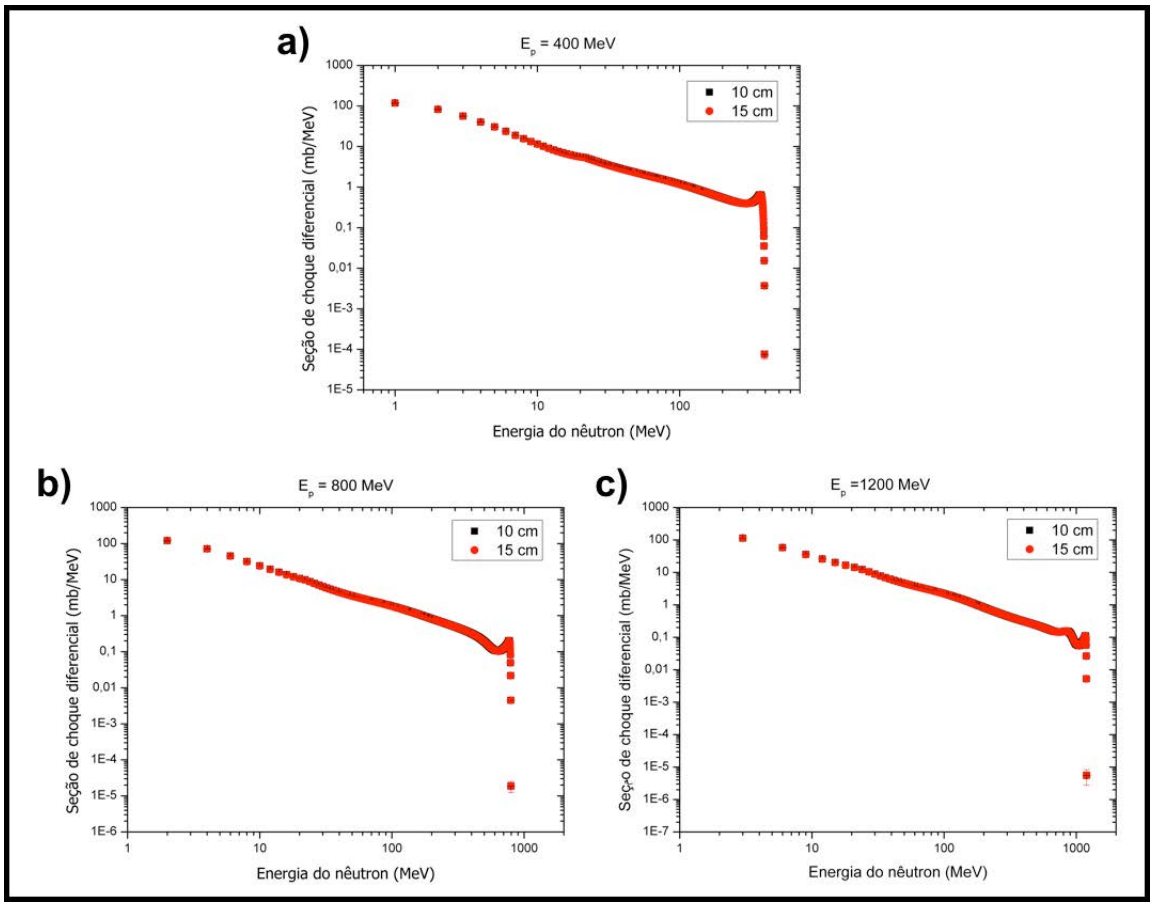


Figura 25: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em Al-27 induzida por prótons de **a)** 400 MeV, **b)** 800 MeV e **c)** 1200 MeV para alvos com 10 cm de raio, e 15 cm de raio.

No caso de nêutrons, a produção só pode ser feita por meio de reações nucleares. Observa-se que a seção de choque diferencial é maior para nêutrons com energia de algumas unidades de MeV, chegando a centenas de mb/MeV. Com o aumento da energia, os

valores de seção de choque começam diminuir, o que significa menor produção de nêutrons mais energéticos. Aqueles que deixam o alvo com energia semelhante ao do feixe incidente estão localizados na parte acentuada da curva tendo menor probabilidade de ocorrência.

Em 400 MeV, as seções de choque chegam 100 mb/MeV para baixas energias. Conforme a energia aumenta em dez vezes, a seção de choque diminui também em dez vezes, ou seja, para algumas dezenas de MeV, as seções de choque caem para dezenas de mb/MeV, e para algumas centenas de MeV, as seções de choque vão para unidades de mb/MeV. Esse comportamento estende-se até aproximadamente 300 MeV, quando a curva volta a crescer um pouco até chegar próxima a 400 MeV, onde há a queda brusca dos valores, que chegam a 10^{-4} mb/MeV.

Nas curvas de 800 MeV e 1200 MeV, o mesmo comportamento de declínio dos valores de seção de choque pode ser observado. Entretanto, o valor mínimo para 800 MeV é cerca de 10^{-5} mb/MeV e para 1200 MeV, é cerca de 5×10^{-6}. A Tabela 6 descreve o comportamento das curvas para nêutrons através da quantidade de neûtrons produzidas e emitidas no alvo. Observa-se que quase todos os nêutrons produzidos são ejetados do alvo, o que indica que além de não ocorrer a retenção das partículas, o material contribui para a produção de nêutrons com energia suficientemente alta para induzir novas reações com a vizinhança.

Tabela 6: Valores de nêutrons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Al-27, bem como a porcentagem de escape total. Como não há presença de nêutrons na fonte, o número de nêutrons produzidos foi quase igual ao número de nêutrons ejetados, que fez a porcentagem de escape aumentar.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Nêutrons produzidos por interações nucleares	1987295	3152511	3773220
Nêutrons totais	2033448	3227497	3869904
Nêutrons ejetados	2001511	3172337	3798630
Porcentagem de escape	98,43%	98,29%	98,16%

As curvas de partículas alfa só constaram em decaimentos estatísticos, onde as seções de choque decresciam com o aumento da energia. Como já mencionado na seção 4.1, deveria existir a parte acentuada da curva, pois existe a probabilidade de transferência da energia total do próton incidente a uma partícula alfa no interior do núcleo. Entretanto, como o *MCNPX* não considera modelos definidos para partículas alfa, as curvas só evidenciaram o decaimento.

Nas três energias, os valores de seção de choque para partículas alfa possuíam centésimos de mb/MeV para energias com unidades de MeV. Conforme o suave decaimento, os valores

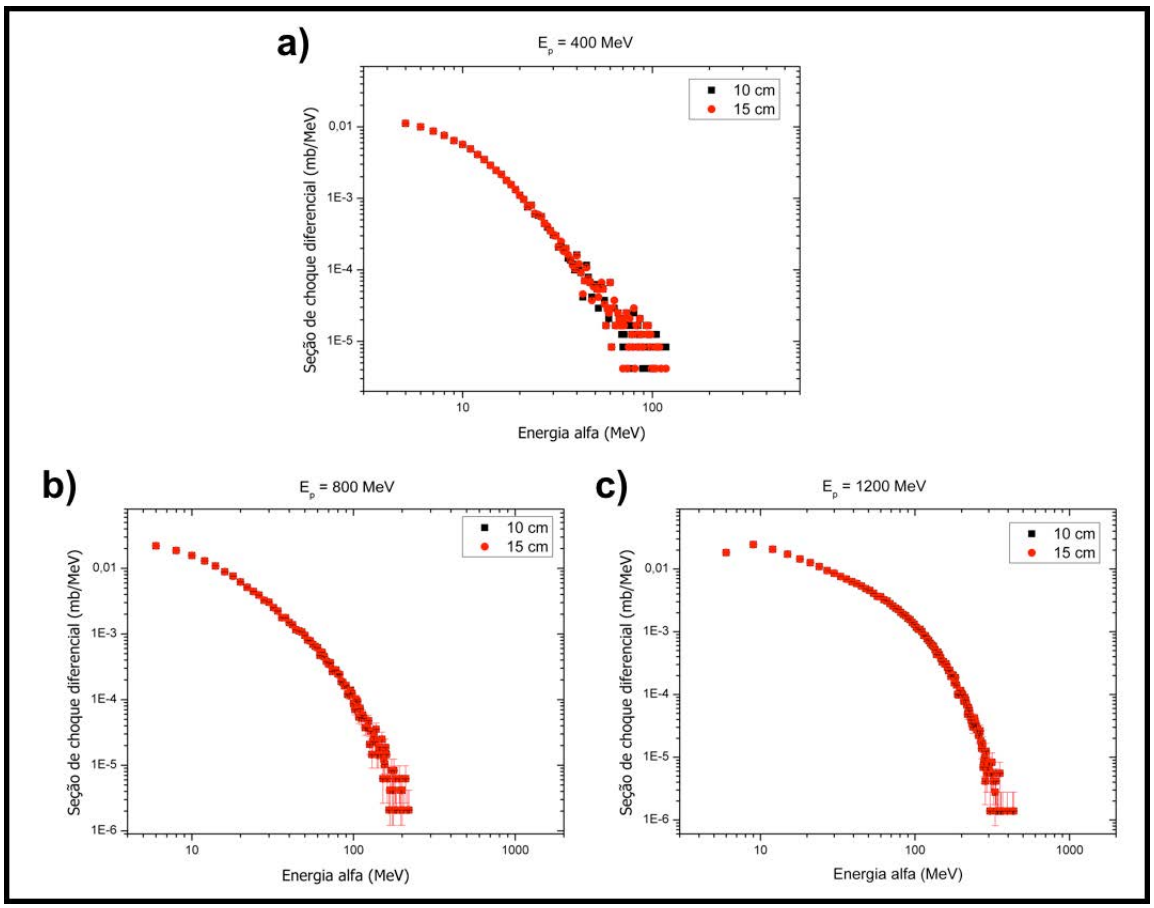


Figura 26: Seção de choque diferencial de partículas alfa emitidas da reação em Al-27 induzida por prótons de **a)** 400 MeV, **b)** 800 MeV e **c)** 1200 MeV para alvos com 10 cm de raio, e 15 cm de raio.

diminuiram com o aumento da energia, culminando em aproximadamente 10^{-6} mb/MeV. Em 400 MeV, o valor de energia que correspondia ao menor valor de seção de choque foi de aproximadamente 100 MeV. Em 800 MeV, este valor chegou a 110 MeV e, em 1200 MeV, a 130 MeV.

A descrição numérica do número de partículas alfa produzidas e ejetadas constam na Tabela 7. Nela, fica evidente a baixa produção das mesmas e a pequena quantidade que escapa do núcleo. Logo, as partículas alfa não são partículas secundárias preocupantes, pois a maioria produzida no interior do material é retida por ele.

Uma vez que não houve dependência da produção secundária com o raio do cilíndro, a comparação restante foi feita entre os materiais utilizados como alvo. Como a descrição dos processos físicos para prótons, nêutrons e partículas alfa em relação ao comportamento de suas curvas já foi feita para o alvo de Alumínio, alguns detalhes serão omitidos para o Ferro e o Chumbo. O comportamento dos prótons ao interagir com ambos os materiais é apresentado na Figura 27. Nela, notam-se as regiões suaves correspondente à produção

Tabela 7: Valores de partículas alfa produzidas e emitidas, devido à interação de prótons com Al-27, bem como a porcentagem de escape total. Assim como a Figura 26, os dados mostram a baixa produção da partícula e o baixo predomínio daquelas com alta energia, capazes de sair do material.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Partículas alfa produzidas por interações nucleares	181173	360589	446167
Partículas alfa totais	198694	390853	485658
Partículas alfa ejetadas	213	686	1717
Partículas alfa de escape	0,11%	0,17%	0,35%

nuclear e as regiões acentuadas, que indicam os espalhamentos elásticos.

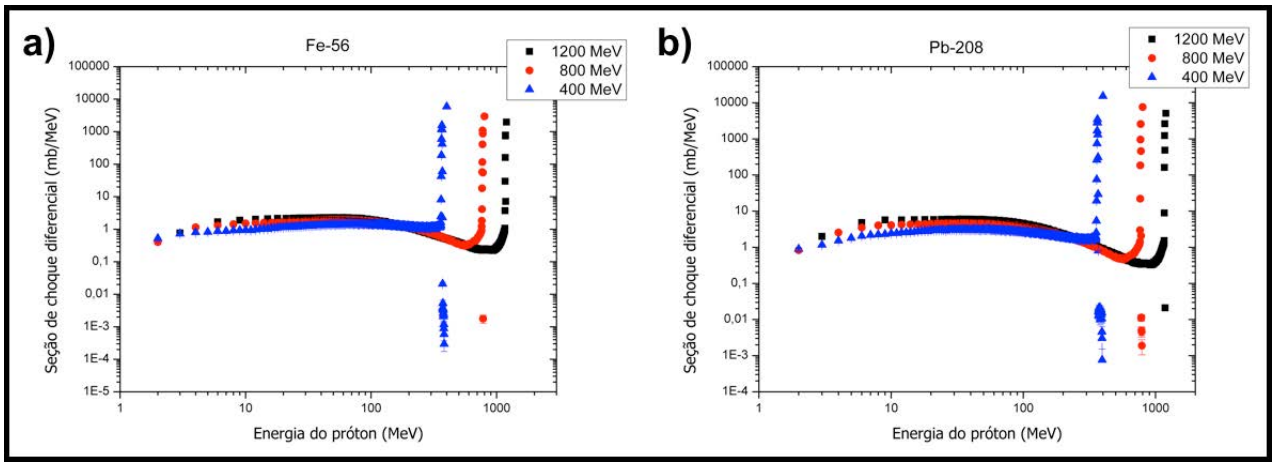


Figura 27: Seção de choque diferencial de prótons emitidos da reação em **a)** Fe-56 e **b)** Pb-208 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV, em alvos com 10 cm de raio. Observa-se que o mesmo comportamento de interação com o Alumínio se mantém para o Ferro e o Chumbo.

Assim como o Alumínio, as regiões suaves para o Ferro e Chumbo apresentam aproximadamente os mesmos valores médios. Para 400 MeV, 1 mb/MeV; 800 MeV, 0,7 mb/MeV; e 1200 MeV, 0,5 mb/MeV. Como já mencionado, há maior variação das seções de choque para 800 MeV e 1200 MeV, e os picos de espalhamento concentram-se próximos às energias iniciais do feixe de prótons.

O parâmetro para avaliação entre blindagens, além da porcentagem de escape, derivada da relação entre partículas produzidas e partículas ejetadas, foi a energia depositada ao longo do material. Esta energia é retirada multiplicando a dose calculada pela massa do alvo. Como já foi observada a independência radial, todas as energias depositadas serão em relação aos cilíndros de raio 10 cm. Primeiramente, os valores numéricos gerados em virtude das interações dos prótons com Ferro e Chumbo são apresentados, respectivamente, na Tabela 8 e na Tabela 9.

Tabela 8: Valores de prótons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Fe-56, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Prótons produzidos por interações nucleares	6922009	10245721	12768852
Prótons totais	27189792	30690359	33367927
Prótons ejetados	19295550	19850067	20229936
Porcentagem de escape	70,96%	64,67%	60,62%

Tabela 9: Valores de prótons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Pb-208, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Prótons produzidos por interações nucleares	3806694	6933003	9926031
Prótons totais	23871818	27043960	30077058
Prótons ejetados	18879517	19387902	19771192
Porcentagem de escape	79,08%	71,69%	65,73%

Como esperado, a produção de prótons secundários aumentou com a energia do feixe incidente. Houve muito mais produção secundária no Ferro, seguida pelo Chumbo e por último o Alumínio, entretanto, a quantidade de prótons ejetados para todos os materiais e todas as energias ficou muito próxima. Isto se refletiu na porcentagem de escape, de modo que, ficou maior para o Alumínio, seguida pelo Chumbo, e por último o Ferro. Finalmente, a energia total depositada nos alvos é apresentada na Tabela 10.

Tabela 10: Valores da energia total depositada (em MeV) por prótons incidentes e produzidos no interior dos alvos, de massa m.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Alumínio (m = 1,69 kg)	14,86	13,27	13,10
Ferro (m = 4,94 kg)	41,35	38,26	39,42
Chumbo (m = 7,12 kg)	42,01	39,10	41,79

É evidente que quanto maior a energia depositada no material, melhor a blindagem. Visto o átomo de Chumbo ser maior que o Ferro e o Alumínio, maior será a probabilidade de interação dos prótons primários com o mesmo (seção de choque geométrica) e maior a energia depositada ao longo deste. Entretanto, ao relacionar esta energia com a massa do alvo (dose), esta será aproximadamente 8,13 MeV/kg para o Alumínio; 7,86 MeV/kg para o Ferro; e 5,75 MeV/kg para o Chumbo. Logo, o Alumínio está absorvendo muito mais energia por unidade de massa que os outros materiais.

Uma vez que a quantidade de prótons emitidos em cada material é semelhante e que

o Alumínio é mais leve e mais barato, por ser o metal mais abundante na crosta terrestre, e que ainda absorve mais energia por unidade de massa, é o mais indicado entre os três na blindagem de veículos aeroespaciais, quando se considera apenas prótons. Entretanto, não se descarta o Chumbo e o Ferro em situações específicas, onde se deseja uma blindagem mais fina em determinado setor da aeronave, por exemplo.

O comportamento dos nêutrons no Ferro e Chumbo também são semelhantes ao comportamento dos nêutrons no Alumínio, como mostra a Figura 28. As seções de choque diferenciais localizam-se em algumas centenas de mb/MeV e decrescem conforme o aumento da energia. As regiões acentuadas concentram-se de acordo com a energia incidente do próton, onde ocorre a transferência de toda a energia do mesmo para o nêutron.

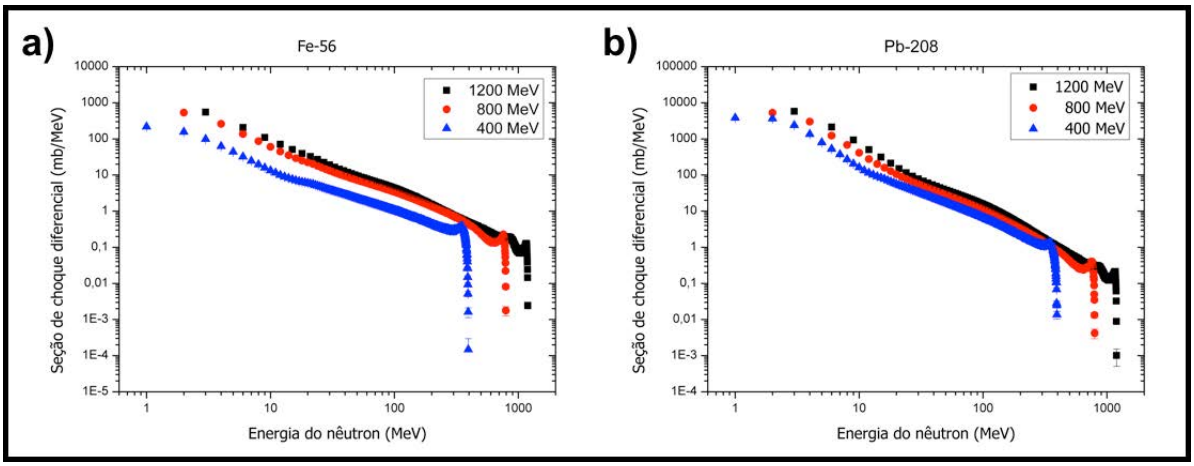


Figura 28: Seção de choque diferencial de nêutrons emitidos da reação em **a)** Fe-56 e **b)** Pb-208 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV, em alvos com 10 cm de raio. Assim como ocorre com prótons, o comportamento das seções de choque diferenciais para Ferro e Chumbo assemelham-se com o Alumínio.

A quantidade de nêutrons produzidos e emitidos, bem como a porcentagem de escape, para o Ferro e para o Chumbo, é apresentada respectivamente na Tabela 11 e na Tabela 12.

Tabela 11: Valores de nêutrons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Fe-56, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Nêutrons produzidos por interações nucleares	6939720	11354361	14583831
Nêutrons totais	7662503	12552557	16219594
Nêutrons ejetados	7300497	11934876	15374111
Porcentagem de escape	95,27%	95,07%	94,78%

A quantidade de nêutrons produzidos aumentou consideravelmente com o aumento da energia para os três materiais. Em todas as energias e em todos os materiais, a quantidade

Tabela 12: Valores de nêutrons produzidos e emitidos, devido à interação de prótons com Pb-208, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Nêutrons produzidos por interações nucleares	20071346	32121720	41884885
Nêutrons totais	22340077	36122343	47582037
Nêutrons ejetados	21566863	34716903	45537036
Nêutrons de escape	96,53%	96,10%	95,70%

de nêutrons produzida foi quase igual à quantidade de nêutrons ejetada, o que indica que os nêutrons secundários são mais problemáticos do ponto de vista de sua blindagem.

Observa-se também neste caso que a produção de nêutrons secundários foi bastante acrescida com o aumento do número atômico do material, bem como a quantidade de nêutrons emitidos. Em vista disso, a blindagem para nêutrons deve consistir de um material com o menor número atômico possível. A Tabela 13 fornece a energia depositada nos alvos devido à produção de nêutrons.

Tabela 13: Valores da energia total depositada (em MeV) por nêutrons produzidos no interior dos alvos, de massa m.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Alumínio (m = 1,69 kg)	0,023	0,039	0,052
Ferro (m = 4,94 kg)	0,061	0,121	0,167
Chumbo (m = 7,12 kg)	0,028	0,053	0,078

Os dados da Tabela 13 confirmam a emissão da maioria dos nêutrons dos alvos, visto que a energia depositada por eles é muito inferior se comparada aos prótons. Observa-se que estes valores aumentam com a energia dos prótons incidentes e, quando relacionados a sua massa, o Alumínio continua absorvendo mais energia por unidade de massa (0,033 MeV/kg), seguido pelo Ferro (0,023 mb/MeV) e por último o Chumbo (0,022 MeV/kg).

Para nêutrons secundários, quanto menor o número atômico, menor a produção dos mesmos, devido ao tamanho do átomo aumentar a probabilidade de interação nuclear, e assim ocorrer a emissão de um nêutron. O Alumínio se mostrou consideravelmente a melhor blindagem para nêutrons em relação ao Ferro e ao Chumbo. No entanto, utilizar blindagem para este caso só incrementa na produção secundária de nêutrons, e mais prejudica do que auxilia na proteção radiológica.

Finalmente, no caso de partículas alfa, as seções de choque diferenciais para o Ferro e Chumbo também apresentam o mesmo decaimento estatístico que o apresentado para o

Alumínio, como mostra a Figura 29. Em vista da probabilidade de produção da partícula alfa ser pequena se comparada à produção de prótons e nêutrons, os valores vem acompanhados de variações muito grandes, mas que ainda assumem o comportamento esperado.

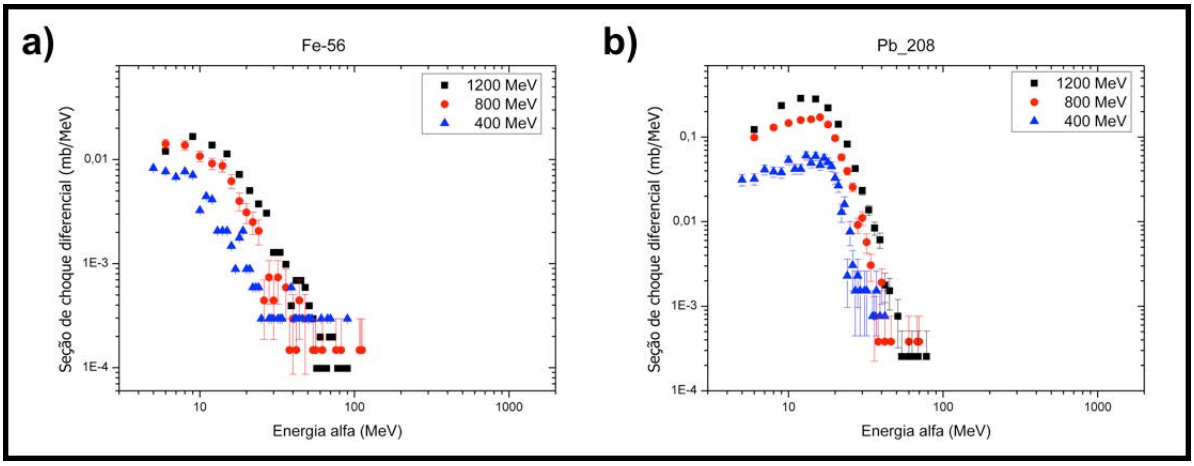


Figura 29: Seção de choque diferencial de partículas alfa emitidas da reação em **a)** Fe-56 e **b)** Pb-208 induzida por prótons de 400 MeV, 800 MeV e 1200 MeV, em alvos com 10 cm de raio. Apesar das grandes variações, o decaimento característico calculado pelo *MCNPX* demonstra a consistência dos dados.

Os máximos valores das seções de choque diferenciais para partículas alfa estão em torno de alguns décimos de mb/MeV para prótons de 800 MeV e 1200 MeV, e de alguns centésimos de mb/MeV para prótons de 400 MeV. Há o decréscimo dos valores com o aumento da energia, chegando até aproximadamente 10^{-4} mb/MeV, próximo de 100 MeV. Após esta energia, não há mais dados, devido a limitação dos modelos utilizados pelo *MCNPX*. A quantidade de partículas alfa produzidas e ejetadas do núcleo para Ferro e Chumbo é apresentada, respectivamente, na Tabela 14 e na Tabela 15.

Tabela 14: Valores de partículas alfa produzidas e emitidas, devido à interação de prótons com Fe-56, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Partículas alfa produzidas por interações nucleares	338584	634359	831608
Partículas alfa totais	379631	704523	927997
Partículas alfa ejetados	241	541	818
Porcentagem de escape	0,06%	0,07%	0,08%

De maneira similar ao nêutron, a produção de partículas alfa secundárias cresce com o energia incidente do prótons e com o número atômico do material. As partículas alfa ejetadas pelo Alumínio crescem consideravelmente com o aumento da energia, chegando a ser maior que o Ferro para 800 MeV e 1200 MeV. A quantidade de partículas secundárias

Tabela 15: Valores de partículas alfa produzidas e emitidas, devido à interação de prótons com Pb-208, bem como a porcentagem de escape total.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Partículas alfa produzidas por interações nucleares	430017	1450583	2632481
Partículas alfa totais	431405	1453006	2635758
Partículas alfa ejetadas	1050	3313	5794
Partículas alfa de escape	0,24%	0,22%	0,21%

produzidas pelo Chumbo chega a ser até 7 vezes maior que o Ferro e 5 vezes maior que o Alumínio, possuindo porcentagem de escape cerca de 10 vezes a mais que os outros alvos.

Contudo, mesmo existindo diferenças consideráveis entre os alvos, o número de partículas alfa que saem do alvo é muito baixo, devido a maior predominância daquelas que possuem baixas energias (1 MeV a 10 MeV). A energia depositada pelas partículas alfa no alvo é apresentada na Tabela 16.

Tabela 16: Valores da energia total depositada (em MeV) por partículas alfa produzidas no interior dos alvos, de massa m.

	400 MeV	**800 MeV**	**1200 MeV**
Alumínio (m = 1,69 kg)	0,081	0,190	0,302
Ferro (m = 4,94 kg)	0,199	0,391	0,535
Chumbo (m = 7,12 kg)	0,428	1,38	2,39

A energia depositada pelas partículas alfa cresce com o aumento da energia e com o número atômico do material. A energia absorvida, em média, por unidade de massa neste caso é maior para o Chumbo (0,196 MeV/kg), seguido do Alumínio (0,113 MeV/kg) e, por último o Ferro (0,076 MeV/kg). Entretanto, devido à maior produção de partículas alfa ser de energia baixa, elas pouco penetram no material, ficando retidas no mesmo, diferentemente do que ocorre com o nêutron, que deposita menos energia no material pela alta produção de partículas suficientemente energéticas para atravessá-lo. A blindagem para partículas alfa foi considerada eficiente em todos os materiais.

5 Conclusão

A utilização de códigos computacionais baseados no *Método de Monte Carlo* tem sido cada vez mais frequentes em diversas áreas do conhecimento, principalmente nas que lidam com problemas de alta complexidade. Devido ao desenvolvimento de melhores processadores de dados, a implementação de algoritmos mais detalhados tem tornado a simulação de um problema cada vez mais consistente com a realidade, minimizando custos e devidos cuidados com aparatos experimentais.

Em se tratando do transporte de radiação, muito códigos fazem uso de bibliotecas de dados e modelos físicos cada vez mais precisos para simular todos os tipos de interação que ocorrem em um material-alvo, e prever o comportamento mais provável desse sistema. Dessa maneira, este trabalho consistiu em avaliar o comportamento de materiais comumente utilizados como blindagem de aeronaves quando são bombardeados por partículas energéticas de natureza e energia semelhante aos raios cósmicos, utilizando o código *MCNPX* (Monte Carlo N-Particle Extended).

Antes, porém, fez-se necessária a validação indireta da física implementada nesse código através do cálculo das seções de choque diferenciais, através do fluxo de partículas produzidas por processos de *spallation* e quase-elásticos em alguns materiais, com dados experimentais disponíveis na literatura. As variações encontradas entre os valores calculados e os experimentais foram devido à estocasticidade do método computacional e imprecisão dos modelos físicos utilizados que, considerando o erro relativo, chegaram a 80%. Contudo, em termos de valores, nâo ultrapassaram algumas unidades de MeV.

Os parâmetros escolhidos na avaliação da blindagem foram a seção de choque diferencial, que avaliou a probabilidade de ocorrência das partículas a uma dada energia, e a energia total depositada, que está relacionada à absorção e atenuação das partículas no material. Para prótons e partículas alfa, o Alumínio se mostrou mais eficiente devido à menor produção e ejeção de partículas secundárias, além do melhor custo benefício para implantação na aeronave. Para o caso de nêutrons, entretanto, todos os materiais sele-

cionados foram ineficazes em sua retenção, pelo fato de serem produzidos com energias muito altas e em grande proporção.

O *MCNPX* mostrou-se muito prático e eficaz na modelagem dos experimentos e na aquisição dos resultados, por conseguir valores muito próximo dos encontrados na literatura, fazendo o uso de um aparato simples. As limitações do código neste trabalho estiveram relacionadas à dependência da convergência dos dados com o número de eventos considerados, e à falta de modelos físicos bem definidos para as partículas alfa acima de 100 MeV.

Referências

AMIAN, W. et al. DIFFERENTIAL NEUTRON-PRODUCTION CROSS-SECTIONS FOR 800-MEV PROTONS. *NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING*, 112, n. 1, p. 78–86, SEP 1992. ISSN 0029-5639.

BADHWAR, G. The radiation environment in low-earth orbit. *RADIATION RESEARCH*, 148, n. 5, S, p. S3–S10, NOV 1997. ISSN 0033-7587. Workshop on Space Radiation Damage and Biodosimetry, CTR ADV SPACE STUDIES, HOUSTON, TEXAS, SEP 09-10, 1996.

BALLARINI, F. et al. Modelling the radiation action for the estimation of biological effects in humans. In: Bersillon, O and Gunsing, F and Bauge, E and Jacqmin, R and Leray, S (Ed.). *INTERNATIONAL CONFERENCE ON NUCLEAR DATA FOR SCIENCE AND TECHNOLOGY, VOL 2, PROCEEDINGS*. [S.l.], 2008. p. 1337–1341. ISBN 978-2-7598-0091-9. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Nice, FRANCE, APR 22-27, 2007.

BARASHENKOV, V. S.; TONEEV, V. D. Interactions of high energy particles and atomic nuclei with nuclei,. 1999.

BERTINI, H. W. Low-energy intranuclear cascade calculation. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 131, p. 1801–1821, Aug 1963.

BERTINI, H. W. Intranuclear-cascade calculation of the secondary nucleon spectra from nucleon-nucleus interactions in the energy range 340 to 2900 mev and comparisons with experiment. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 188, p. 1711–1730, Dec 1969.

BROEDERS, C.; KONOBEYEV, A.; VILLAGRASA, C. Neutron displacement cross-sections for tantalum and tungsten at energies up to 1 GeV. *JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS*, 342, n. 1-3, p. 68–76, JUN 30 2005. ISSN 0022-3115.

BUDZANOWSKI, A. et al. Variation of nonequilibrium processes in the p+ ni system with beam energy. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 80, p. 054604, Nov 2009.

CHEN, K. et al. Vegas: A monte carlo simulation of intranuclear cascades. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 166, p. 949–967, Feb 1968.

CHRIEN, R. E. et al. Proton spectra from 800 mev protons on selected nuclides. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 21, p. 1014–1029, Mar 1980.

CLOVER, M. et al. LOW-ENERGY ANTIPROTON-NUCLEUS INTERACTIONS. *PHYSICAL REVIEW C*, 26, n. 5, p. 2138–2151, 1982. ISSN 0556-2813.

DOSTROVSKY, I.; FRAENKEL, Z.; FRIEDLANDER, G. Monte carlo calculations of nuclear evaporation processes. iii. applications to low-energy reactions. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 116, p. 683–702, Nov 1959.

DOSTROVSKY, I.; RABINOWITZ, P.; BIVINS, R. Monte carlo calculations of high-energy nuclear interactions. i. systematics of nuclear evaporation. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 111, p. 1659–1676, Sep 1958.

FILGES, D.; GOLDENBAUM, F. *Handbook of Spallation Research: Theory, Experiments and Applications*. 1. ed. [S.l.]: Wiley-VCH, 2010. Hardcover. ISBN 3527407146.

FÖRTSCH, S. V. et al. Continuum protons from ni-58(p, p') at incident energies between 100 and 200 mev. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 43, p. 691–700, Feb 1991.

FRAENKEL, Z. REVIEW OF THE INTRANUCLEAR CASCADE MODEL FOR HEAVY-ION REACTIONS. *NUCLEAR PHYSICS A*, 428, n. OCT, p. C373–C387, 1984. ISSN 0375-9474.

FURIHATA, S. Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions. *NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS*, 171, n. 3, p. 251–258, NOV 2000. ISSN 0168-583X.

GOLDBERGER, M. L. The interaction of high energy neutrons and heavy nuclei. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 74, p. 1269–1277, Nov 1948.

GUDIMA, K.; MASHNIK, S.; TONEEV, V. CASCADE-EXCITON MODEL OF NUCLEAR-REACTIONS. *NUCLEAR PHYSICS A*, 401, n. 2, p. 329–361, 1983. ISSN 0375-9474.

GUDIMA, K.; OSOKOV, G.; TONEEV, V. MODEL FOR PRE-EQUILIBRIUM DECAY OF EXCITED NUCLEI. *SOVIET JOURNAL OF NUCLEAR PHYSICS-USSR*, 21, n. 2, p. 138–143, 1975. ISSN 0038-5506.

HARP, G. D. Extension of the isobar model for intranuclear cascades to 1 gev. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 10, p. 2387–2396, Dec 1974.

HEINRICH, W.; ROESLER, S.; SCHRAUBE, H. Physics of cosmic radiation fields. *Radiation Protection Dosimetry*, v. 86, n. 4, p. 253–258, 1999.

HENDRICKS, J. A Monte Carlo Code for Particle Transport. *Los Alamos Science*, n. 22, 1994.

HERBACH, C. et al. Charged-particle evaporation and pre-equilibrium emission in 1.2 GeV proton-induced spallation reactions. *NUCLEAR PHYSICS A*, 765, n. 3-4, p. 426–463, FEB 6 2006.

HESS, V. F. Über Beobachtungen der durchdringenden Strahlung bei sieben Freiballonfahrten. *Phys. Z.*, v. 13, p. 1084–1091, 1912.

LECOUTEUR, K. THE EVAPORATION THEORY OF NUCLEAR DISINTEGRATIONS. *PROCEEDINGS OF THE PHYSICAL SOCIETY OF LONDON SECTION A*, 63, n. 363, p. 259–282, 1950.

LERAY, S. Nuclear data at high energy: Experiment, theory and applications. In: Paver, N and Herman, M and Gandini, A (Ed.). *NUCLEAR REACTION DATA AND NUCLEAR REACTORS: PHYSICS, DESIGN AND SAFETY, NOS 1 AND 2*. [S.l.: s.n.], 2001. (ICTP LECTURE NOTES SERIES, 5), p. 287–310. ISBN 92-95003-08-X. Workshop on Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors, INT CTR THEORET PHYS, TRIESTE, ITALY, MAR 13-APR 14, 2000.

LERAY, S. et al. Spallation neutron production by 0.8, 1.2, and 1.6 gev protons on various targets. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 65, p. 044621, Apr 2002.

MASHNIK, S. et al. Cascade-exciton model analysis of proton induced reactions from 10 MeV to 5 GeV. *NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT*, 414, n. 1, p. 68–72, SEP 1 1998. ISSN 0168-9002.

MCGILL, J. A. et al. Proton + nucleus inclusive scattering at 800 mev. *Phys. Rev. C*, American Physical Society, v. 29, p. 204–208, Jan 1984.

METROPOLIS, N. et al. Monte carlo calculations on intranuclear cascades. i. low-energy studies. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 110, p. 185–203, Apr 1958.

METROPOLIS, N. et al. Monte carlo calculations on intranuclear cascades. ii. high-energy studies and pion processes. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 110, p. 204–219, Apr 1958.

PELOWITZ, D. B. *MCNPX User's Manual, Version 2.5.0*. [S.l.], 2005.

SERBER, R. Nuclear reactions at high energies. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 72, p. 1114–1115, Dec 1947.

SHEN, B.; MERKER, M. *Spallation nuclear reactions and their applications*. Dordrecht: Reidel, 1976: [s.n.], 1976. (Astrophysics and space science library (ASSL)).

SPILLANTINI, P. et al. Shielding from cosmic radiation for interplanetary missions: Active and passive methods. *RADIATION MEASUREMENTS*, 42, n. 1, p. 14–23, JAN 2007. ISSN 1350-4487.

WATERS, L. S. et al. The MCNPX Monte Carlo radiation transport code. In: Albrow, M and Raja, R (Ed.). *Hadronic Shower Simulation Workshop*. [S.l.], 2007. (AIP CONFERENCE PROCEEDINGS, 896), p. 81–90. ISBN 978-0-7354-0401-4. ISSN 0094-243X. Hadronic Shower Simulation Workshop, Batavia, IL, SEP 06-08, 2006.

WEISSKOPF, V. Phys. Rev. 52 (1937): V. Weisskopf - Statistics and Nuclear Reactions. *Physical Review*, v. 52, p. 295–303, aug 1937.

YARIV, Y.; FRAENKEL, Z. INTRANUCLEAR CASCADE CALCULATION OF HIGH-ENERGY HEAVY-ION INTERACTIONS. *PHYSICAL REVIEW C*, 20, n. 6, p. 2227–2243, 1979.

YARIV, Y.; FRAENKEL, Z. INTRANUCLEAR CASCADE CALCULATION OF HIGH-ENERGY HEAVY-ION COLLISIONS - EFFECT OF INTERACTIONS BETWEEN CASCADE PARTICLES. *PHYSICAL REVIEW C*, 24, n. 2, p. 488–494, 1981.

Anexos

Arquivos de entrada do *MCNPX*

Arquivo de Entrada para Validação do Código

```
message: datapath=/usr/local/src/mcnpx/v250/Data/

c Cell Card
  1  0             1                $Universo externo
  2  0            -1 2
  3  0            -2 (3:4:-5)
  4  1  -7.87     -3 -4 5          $Alvo fino

c Surface card
  1  so 100                         $Efera exterior
  2  so 10                          $Esfera interior
  3  cz 1                           $Cilindro eixo z
  4  pz 0.0001111                   $Face anterior
  5  pz -0.0001111                  $Face posterior

c Material
 mode h n                           $Prótons e Nêutrons
 imp:h 0 1 1 1                      $Importância de prótons nas células
 imp:n 0 1 1 1                      $Importância de nêutrons nas células
 sdef pos=0 0 -10 axs=0 0 1 ext=0 rad=d1 par=h erg=800 dir=1 vec=0 0 1 $Fonte
 si1 0 0.1                          $Geometria da fonte
 sp1 -21 1                          $Ponderação de prótons
 m1 26056 1                         $Ferro
 phys:h 900 j 0                     $Física do próton
 phys:n 900 0 0 -1 -1 0 0           $Física do nêutron
 nps 2000000000                     $Número de eventos
```

```
fc1 *** Fluxo de nêutrons ***
f1:n 2                              $Fluxo de nêutrons na superfície 2
ft1 frv 0 0 1                       $Cosseno de referência
fq1 e c                             $Energia x Cosseno
*c1 160 140 110 90 70 50 40 20 0 T  $Ângulos
e1 0 774i 775 T                     $Energias
lca 2 1 1 23 1 1 0 1 0              $Modelo físico
dbcn 21J                            $Variável randômica inicial
```

Arquivo de Entrada para Aquisição e Avaliação dos Parâmetros da Blindagem

```
message: datapath=/usr/local/src/mcnpx/v250/Data/

c Cell Card
  1  0           1                 $Universo externo
  2  0          -1 2
  3  0          -2 (3:4:-5)
  4  1  -2.7    -3 -4 5             $Alvo

c Surface card
  1  so 100                         $Efera exterior
  2  so 20                          $Esfera detectora
  3  cz 10                          $Cilindro
  4  pz 1                           $Face posterior
  5  pz -1                          $Face anterior

c Material
 mode h n a                         $Prótons, nêutrons e partículas alfa
 imp:h 0 1 1 1                      $Importância de prótons
 imp:n 0 1 1 1                      $Importância de nêutrons
 imp:a 0 1 1 1                      $Importância de partículas alfa
 sdef pos=0 0 -20 axs=0 0 1 ext=0 rad=d1 par=h erg=400 dir=1 vec=0 0 1 $Fonte
 si1 0 0.1                          $Geometria da fonte
 sp1 -21 1                          $Ponderação de prótons
 m1 13027  1                        $Alumínio
```

```
phys:h 500 j 0                      $Física do próton
phys:n 500 0 0 -1 -1 0 0            $Física do nêutron
phys:a 500 3J 0                     $Física da patícula alfa
nps 20000000                        $Número de eventos
fc11 *** Fluxo de prótons ***
f11:h 2                             $Fluxo de prótons na superfície 2
ft11 frv 0 0 1                      $Cosseno de referência
fq11 e c                            $Energia x Cosseno
*c11 T                              $Ângulos
e11 0 399i 400 T                    $Energias
fc16 *** Dose por prótons ***
f16:h 4                             $Dose por prótons na célula 4
fc21 *** Fluxo de nêutrons ***
f21:n 2                             $Fluxo de nêutrons na superfície 2
ft21 frv 0 0 1
fq21 e c
*c21 T
e21 0 399i 400 T
fc26 *** Dose por nêutrons ***
f26:n 4                             $Dose por nêutrons na célula 4
fc31 *** Fluxo de partículas alfas ***
f31:a 2                             $Fluxo de partículas alfa célula 2
ft31 frv 0 0 1
fq31 e c
*c31 T
e31 0 399i 400 T
fc36 *** Dose por partículas alfa ***
f36:a 4                             $Dose por partículas alfa
lca 7J 1                            $Modelo físico
```