

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

JEFFERSON NEVES PEREIRA

**CRIAÇÃO DE UMA BIBLIOTECA UNIVERSAL DE SEÇÕES DE CHOQUE
A PARTIR DO BANCO DE DADOS NUCLEARES DA AGÊNCIA
INTERNACIONAL DE ENERGIA ATÔMICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientador: Prof. Sergio de Oliveira Vellozo – D.Sc.

Rio de Janeiro

2013

c2013

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha

Rio de Janeiro – RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmear ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que não tenha finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do autor e do orientador.

621.483

P4366 Pereira, Jefferson Neves

Criação de uma biblioteca universal de seções de choque a partir do banco de dados nucleares da Agência Internacional de Energia Atômica / Jefferson Neves Pereira. – Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2013.

59 p.: il

Dissertação (mestrado) – Instituto Militar de Engenharia – Rio de Janeiro, 2013.

1. Sistemas Homogêneos Rápidos. 2. Dados Nucleares. I. Vellozo, S. de O.. II. III. Instituto Militar de Engenharia.

CDD621.483

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

JEFFERSON NEVES PEREIRA

**CRIAÇÃO DE UMA BIBLIOTECA UNIVERSAL DE SEÇÕES DE CHOQUE
A PARTIR DO BANCO DE DADOS NUCLEARES DA AGÊNCIA
INTERNACIONAL DE ENERGIA ATÔMICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientador: Prof. Sergio de Oliveira Vellozo – D.Sc.

Aprovada em 07 de Fevereiro de 2013, pela seguinte Banca Examinadora:

Prof. Sergio de Oliveira Vellozo – D.Sc. do IME – Presidente.

Prof. T.C. Wilson Freitas Rebello da Silva Junior – D.Sc. do IME.

Prof. Hélio de Carvalho Vital – D.Sc. do CTEEx.

Prof. Ronaldo Glicério Cabral – Ph.D. do IME.

Prof. Dalton Ellery Girão Barroso – D.Sc. do IME.

Prof. Leonardo de Paulo G. de Assis – D.Sc. do CBPF.Rio de Janeiro

Rio de Janeiro

2013

SUMÁRIO

| | |
|--|-----------|
| LISTA DE ILUSTRAÇÕES..... | 6 |
| LISTA DE TABELAS..... | 7 |
| 1 INTRODUÇÃO..... | 10 |
| 2 IMPORTÂNCIA DOS DADOS NUCLEARES..... | 11 |
| 2.1 Evolução Dos Dados Experimentais..... | 12 |
| 2.2 As Seções De Choque | 15 |
| 2.2.1 O Espalhamento Elástico..... | 16 |
| 2.2.2 O Espalhamento Inelástico..... | 18 |
| 2.3 O Espectro De Fissão..... | 20 |
| 2.4 Os Nêutrons Emitidos Por Fissão..... | 23 |
| 3 A GERAÇÃO DO ESPECTRO DO FLUXO DE NÊUTRONS ULTRAFINO..... | 25 |
| 3.1 A Formulação Do Problema..... | 26 |
| 3.1.1 Obtenção Dos Dados..... | 28 |
| 3.1.2 Interpolação Dos Dados | 30 |
| 3.1.3 Integração Dos Dados..... | 32 |
| 3.2 O Sistema De Equações E O Esquema De Resolução..... | 33 |
| 3.3 Limitações Do Modelo..... | 35 |
| 4 A ESFERA DE URÂNIO..... | 35 |
| 4.1 A Geração Das Constantes De Grupos Largos..... | 37 |
| 4.1.1 Seções De Choque Colapsadas Para Um Grupo De Energia..... | 38 |
| 4.1.2 Seções De Choque Colapsadas Para Dois Grupos De Energia..... | 40 |
| 4.2 O Raio E A Massa Críticos..... | 42 |
| 4.2.1 Cálculo Do Raio E Da Massa Críticos A Um Grupo..... | 42 |
| 4.2.2 Cálculo Do Raio E Da Massa Críticos A Dois Grupos..... | 45 |
| 5 RESULTADOS..... | 45 |
| 5.1 Fator De Multiplicação..... | 46 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 5.2 | Espectro De Nêutrons..... | 48 |
| 5.3 | Geração Das Constantes A Grupos Largos..... | 53 |
| 5.4 | Raio E Massa Críticos..... | 53 |
| 6. | ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS..... | 54 |
| 6.1 | Análise Do Fator De Multiplicação..... | 54 |
| 6.2 | Análise Do Espectro De Nêutrons..... | 54 |
| 6.3. | Análise Das Constantes A Grupos Largos E Dos Raio E Massa Críticos..... | 55 |
| 7 | COMENTÁRIOS FINAIS..... | 58 |
| 8 | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... | 59 |

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | | |
|--------|--|----|
| FIG.1 | Esquema de método experimental para determinação de nêutrons espalhados..... | 17 |
| FIG.2 | Esquema de transferência de energia no caso de espalhamento inelástico..... | 19 |
| FIG.3 | Formato de um espectro de fissão típico..... | 22 |
| FIG.4 | Disposição dos dados nucleares fornecidos pela IAEA..... | 29 |
| FIG.5 | Esquema de interpolação de seções de choque..... | 32 |
| FIG.6 | Regra do Trapézio para integração da seções de choque. | 33 |
| FIG.7 | Dipositivo Nuclear Lady Godiva..... | 36 |
| FIG.8 | Comportamento do fluxo de nêutrons por eV no sistema estudado..... | 49 |
| FIG.9 | Comparação entre o fluxo de nêutrons por eV e a seção de choque de fissão..... | 50 |
| FIG.10 | Comparação entre o fluxo de nêutrons e a seção de choque de fissão nas ressonâncias..... | 51 |
| FIG.11 | Comparação do fluxo de nêutrons com o espectro de fissão..... | 52 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-------|--|----|
| TAB.1 | Número médio de nêutrons emitidos por fissão para vários isótopos a várias energias..... | 24 |
| TAB.2 | Expressões para o espectro de fissão utilizadas pelo programa..... | 47 |
| TAB.3 | Expressões do kernel de espalhamento utilizadas no programa..... | 47 |
| TAB.4 | Expressões do kernel de espalhamento utilizadas no programa..... | 53 |
| TAB.5 | Seções de choque colapsadas a dois grupos..... | 53 |
| TAB.6 | Resultados da literatura a um grupo, pela Difusão..... | 56 |
| TAB.7 | Seções de choque colapsadas a um grupo fornecidas pelo programa..... | 56 |
| TAB.8 | Constantes a dois grupos provenientes da ANL-5800..... | 57 |
| TAB.9 | Seções de choque colapsadas a dois grupos fornecidas pelo programa..... | 57 |

RESUMO

O processamento de dados nucleares é muito importante ao estudo de reatores nucleares. Este projeto tem como objetivo criar uma biblioteca universal de seções de choque utilizando os dados básicos da biblioteca “Evaluated Nuclear Data File” (ENDF), versão VII.00, disponível no domínio virtual da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA). Primeiramente, milhares de valores de seções de choque (espalhamntos elástico e inelástico, captura radiativa e fissão) do núcleo de urânio-235 foram coletadas. Após isso, um programa computacional numérico em linguagem *Fortran* foi criado a fim de se processarem a interpolação e a integração corretas para cada tipo de seção de choque em dados 28.325 valores de energia. A seguir, resolveu-se um sistema de equações homogêneo com 28.324 variáveis desconhecidas (fluxos de nêutrons), o que forneceu o espectro e um fator de multiplicação para um sistema infinito completamente preenchido por urânio-235. Posteriormente, o programa colapsou aquelas milhares de seções de choque em um e dois grupos largos de energia e encontrou o raio e a massa críticos, utilizando-se das seções de choque colapsadas, para um meio finito de mesma composição (esfera crítica), para cada caso. Para se testar a eficácia do programa, o fator de multiplicação foi comparada com um obtido pelo programa *Scale*, o espectro foi analisado e as seções de choque para um e dois grupos foram comparadas com *benchmarks* conhecidos. Estas comparações mostraram uma boa consistência nos resultados a um grupo, mas também explicitaram algum erro no tratamento da seção de choque de transporte a dois grupos.

ABSTRACT

The processing of nuclear data is very important to the studies of Nuclear Reactors. This project aims at creating a universal cross section library using the basic data from the library "Evaluated Nuclear Data File" (ENDF), version VII.00, available on the International Atomic Energy Agency (IAEA) website. Firstly, thousands of values of cross sections (inelastic and elastic scattering, radioactive capture and fission) from the nucleus of Uranium-235 were collected. After that, a Fortran computational numerical program was created in order to process the correct interpolation and integration for each kind of cross section at given 28,325 values of energy. After that, one solved a 28,324 unknown-variable homogeneous system of equation (neutron fluxes), which provided the spectrum and a multiplication factor for an infinite system fully filled by uranium-235. Posteriorly, the program collapsed those thousands of cross sections into one and two large groups of energy and found the critical radius and mass for a finite medium having the same composition, for each case. In order to test the efficacy of the program, the multiplication factor was compared with one obtained from the program Scale, the spectrum was analyzed and the cross sections for one and two groups were compared with well-known benchmarks. These comparisons showed a good consistency in the results for one group, but also explicated some kind of error while treating the transport cross section for two groups.

1 INTRODUÇÃO

Escrever sobre os dados nucleares é uma tarefa nada fácil. Alguns exemplos são capazes de mostrar o que representa ter à mão os arquivos que vão traduzir os modelos e ideias em números reais. Um primeiro exemplo típico da aplicação da física nuclear moderna está da análise mineral de amostras geológicas utilizando a ativação por nêutrons. A amostra a ser investigada é exposta a um feixe de nêutrons e o espectro gama é analisado para determinar a composição da amostra. Este método, utilizado nos países industrializados e nos países em desenvolvimento, requer uma série de dados nucleares tais como, seções de choque de ativação por nêutrons dos elementos constituintes da amostra, meia-vida dos núcleos e dados sobre o decaimento radioativo dos nuclídeos ativados. Outro exemplo ilustrativo de aplicação dos dados nucleares é a radioterapia. Sob determinadas condições o câncer pode ser tratado com vários tipos de radiações tais como elétrons, fótons, partículas carregadas e nêutrons. Para selecionar a radiação mais adequada a ser usada no tratamento e estimar o impacto sobre o tumor e sobre o tecido saudável vizinho, é preciso ter acesso a um banco de dados de ionizações e de seções de choque de espalhamento, absorção e outras. Tal banco de dado está disponível aos pesquisadores de todos os países membros da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA) através do Nuclear Data Services (NDS). Enquanto cresceu a demanda pelos dados nucleares para um largo espectro de tecnologias, a necessidade primária partiu da pesquisa e desenvolvimento em energia nuclear. O sucesso do desenvolvimento dos reatores nucleares mais avançados depende exclusivamente da capacidade de acesso à uma base de dados confiáveis bem como o tratamento desses dados. Dados nucleares são os ingredientes primários para entender o ciclo do combustível, produção de energia, danos provocados pela radiação sobre materiais, interações entre partículas, no caso nêutrons e núcleos, previsão da evolução temporal de sistemas e suas características e etc. Atualmente, não apenas os dados, mas também as incertezas são alvos de atenção. Dados nucleares sem precisão podem comprometer os projetos causando perda de credibilidade. Imprecisão acarreta conservadorismo que por sua vez afeta o custo. O aprimoramento dos dados nucleares tem tornado possível a simulação dos sistemas sem a necessidade de construção e operação de protótipos, acelerando o desenvolvimento da comercialização dos reatores nucleares. Em resumo, o principal papel dos dados nucleares tem sido melhorar o aspecto econômico dos futuros reatores avançados enquanto aumenta a sua segurança. Este trabalho representa um passo pequeno, porém importante, no processo de se entender como tratar e usar essas bases de dados disponíveis. Esta é a principal motivação de realizar este estudo. Trilhar os mesmos caminhos das nações que hoje são potências nucleares não é desmérito. As

vantagens são visíveis. Décadas atrás não estavam disponíveis computadores velozes ou bases de dados abrangentes. É uma questão de investimento de tempo e esforço humano para tornar possível construir as ferramentas que irão gerar os dados na forma apropriada para cada problema particular. Para entender todo o mecanismo desse processo só tem um caminho, fazer de forma independente, não importando o esforço intelectual que isso represente.

Dessa forma, o presente trabalho propõe-se a realizar um projeto básico, que traga o conhecimento necessário para se alcançarem objetivos maiores. A partir de seções de choque a milhares de grupos aplicadas a um sistema homogêneo infinito composto por Urânio-235, visa-se encontrarem-se o fator de multiplicação e o espectro de nêutrons desse sistema. A partir do espectro, então, objetiva-se colapsarem-se as seções de choque a grupos ultrafinos em grupos largos (um e dois grupos) e compará-las com resultados da literatura. Também se tem por fim utilizar as seções de choque a grupos largos para se calcular o raio e a massa críticos de uma esfera composta somente por Urânio-235 para que também se teste sua validade.

2 IMPORTÂNCIA DOS DADOS NUCLEARES

Ao longo dessas últimas décadas, as principais potências nucleares investiram pesadamente na construção de bases de dados nucleares próprias. Paralelamente, o mesmo esforço foi feito na elaboração dos programas processadores desses dados. O conhecimento adquirido nesse esforço se revela, hoje, na precisão com que os dados reproduzem os experimentos.

Não é possível pensar em desenvolvimento de reatores, ciclo do combustível, segurança nuclear, salvaguarda, tratamento de rejeitos e outras aplicações, sem uma base consistente e confiável de dados nucleares. Hoje estão disponíveis diversos desses conjuntos que são meticulosamente atualizados e validados por experimentos. Mas apenas ter os dados não é suficiente. É necessário saber processá-los adequadamente para cada caso em estudo. Cada projeto é único e exige a combinação certa dos elementos da base de dados eleita, bem como seu tratamento. Os computadores permitiram economia, precisão e rapidez na elaboração desses projetos. Porém, não podemos esquecer que grande parte da precisão está diretamente ligada aos dados nucleares e ao seu processamento. Atualmente existem diversas bases disponíveis. Podem citar-se, a título de ilustração, algumas delas.

ENDF/B – Estados Unidos

JNDL – Japão

CENDL – China

ROSFOND – Rússia

JEFF – Europa

Entretanto, para que esses dados se tornem úteis é necessário processá-los adequadamente utilizando programas específicos complexos, aperfeiçoados constantemente por décadas. NJOY e MC2 são alguns desses programas.

2.1 EVOLUÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS

Dada a importância dos dados nucleares, segue uma breve descrição da evolução histórica desses dados.

Os dados disponíveis na década de 1950 consistiam em alguns grupos de seções de choque produzidos nos Estados Unidos, e o “Barn Book”, uma importante compilação de dados de seções de choque.

Em 1964, Henry Honeck desenvolveu a *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF), em português “Arquivo de Dados Nucleares Avaliados”, enquanto ele estava no *Brookhaven National Laboratory*, em Nova York. Ele procurava estabelecer um sistema para armazenamento e possível reobtenção de avaliações a serem usadas para cálculos de reatores nucleares. Conjuntos de dados de várias fontes distintas seriam convertidos em um formato comum.

O Grupo de Trabalho de Avaliação de Seções de Choque, em inglês *Cross Section Evaluation Working Group*, CSEWG, desde 1966 desenvolve o formato ENDF e produz a biblioteca ENDF/B.

Na Europa, os formatos das primeiras bibliotecas de dados nucleares baseados em computação foram especificados por volta de 1960. A *UK Nuclear Data Library* (UKNDL) – em português, “Biblioteca de Dados Nucleares do Reino Unido”, foi publicada por Ken Parker em

Aldermaston, no sul da Inglaterra, e por Joe Schmidt, que estava desenvolvendo a *Karlsruhe Evaluated Nuclear Data Library* – em português, “Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados de Karlsruhe” –, de sigla KEDAK.

A seguir, alguns pontos importantes no desenvolvimento dos dados nucleares num panorama global:

- 1951: Compilação de dados de nêutrons por D.J. Hugues;
- 1957: Estabelecimento da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA), com a posterior criação de sua Seção de Dados Nucleares em 1964;
- 1958: Estabelecimento da Agência de Energia Nuclear (*Nuclear Energy Agency, NEA*), dentro da Organização para a Coperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE);
- 1963: Estabelecimento do Centro Jadernykh Dannykh (CJD), em Obninsk, na Rússia;
- 1964: Criação de um centro de compilação de dados neutrônicos e de uma biblioteca de programas computacionais, em Saclay, França, resultando no Banco de Dados da NEA;
- 1964: Publicação da primeira biblioteca da ENDF, a ENDF/B-I, por Henry Honeck, contendo 80 (oitenta) núcleos e posterior estabelecimento do Centro Nacional de Seções de Choque para Nêutrons (*National Neutron Cross Section Center, NNCSC*) em 1967;
- 1977: Lançamento da JENDL-1, *Japanese Evaluated Nuclear Data Library*, em português, Biblioteca Japonesa de Dados Nucleares Avaliados;
- 1982: Lançamento da JEFF-1 β (*Joint Evaluated Fission Files*) com 70 (setenta) materiais;
- 1985: Lançamento da JEFF-1, com 300 materiais.

Com o decorrer do tempo, as bibliotecas de seções de choque foram se atualizando e disponibilizando cada vez mais um número maior de dados. A seguir, segue uma lista com uma pequena descrição das bibliotecas de dados nucleares recentes:

- JENDL-4: foi lançada em 2011. Seus dados referem-se principalmente a cálculos de neutrônica de fusão, reatores térmicos e reatores de espectro rápido japoneses, sendo que 337 (trezentos e trinta e sete) isótopos estão inclusos.
- JEFF-3.1.2: foi lançada em 2012. Estão inclusos 381 (trezentos e oitenta e um) isótopos na biblioteca (neutrônica) de propósitos gerais. Também estão inclusos arquivos de prótons, ativação, decaimento radioativo, rendimentos de fissão, espalhamento térmicos etc.
- ENDF/B-VII.1: foi lançada em dezembro de 2011. Estão inclusos 393 (trezentos e noventa e três) isótopos e 14 (quatorze) sub-bibliotecas. Podem-se encontrar dados de seções de choque de fissão, espalhamento, captura radioativa, decaimento radioativo etc.

Todos os dados experimentais provêm de centros de pesquisa especializados na obtenção de dados nucleares. Alguns desses centros de dados nucleares são listados logo abaixo:

- O banco de Dados da NEA. A Agência Europeia de Energia Nuclear, em inglês *European Nuclear Energy Agency* (ENEA), foi criada em 1958, com 17 (dezesete) países-membros na Europa e com sede em Paris. Em 1964, a ENEA criou o Centro de Compilação de Dados Neutrônicos, *Neutron Data Compilation Centre* (CCDN), em Saclay para reunir dados neutrônicos medidos em países da ENEA. A *Computer Programa Library* em Ispra, Itália, também foi incluída e ajudou a formar o Banco de Dados da NEA em 1978. A ENEA mudou seu nome para NEA (*Nuclear Energy Agency*) quando da entrada do Japão no grupo, em 1972. Trata-se de um centro de referência internacional para ferramentas nucleares básicas, ou seja, códigos computacionais e dados nucleares para análises e previsões. A agência fornece um serviço direto a seus usuários desenvolvendo, melhorando e validando essas ferramentas e disponibilizando-as conforme requisitada.
- A Seção de Dados Nucleares da AIEA. Em 1964, a Unidade de Dados Nucleares (*Nuclear Data Unit, NDU*) da AIEA foi criada em Viena, Áustria. Já em 1969, a NDU foi renomeada para Seção de Dados Nucleares (*Nuclear Data Section, NDS*). Seu objetivo era iniciar e promover a troca internacional sistemática de dados e estabelecer um centro de compilação para aquelas áreas do mundo que ainda não estava colaborando com atividades de

compilação de dados nucleares neutrônicos.

- O Centro de Dados Nucleares Russo (CJD). Em 1963, o Comitê de Estado sobre a Utilização de Energia Atômica da extinta União das Repúblicas Soviéticas (URSS) estabeleceu o Centro de Informações de Dados Nucleres (*Nuclear Data Information Center, NDIC*). Posteriormente, ele foi renomeado para Centro de Dados Nucleares Russo (Centro Jadernykh Dannykh – CJD) no Instituto de Física e Engenharia Eletrotécnica em Obninsk. A tarefa desse centro era reunir dados neutrônicos de todos os laboratórios da União Soviética e preparar a Biblioteca de Dados Avaliados BROND (Biblioteca Rekomendovannykh Ocenennykh Neytronnykh Dannykh – Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados e Recomendados).
- NNDC, BNL. Em 1967, o Laboratório Nacional de Brookhaven (*Brookhaven National Laboratory - BNL*) uniu o Centro Sigma (compilação de dados) e o Grupos de Avaliação de Seções de Choque para formar o Centro Nacional de Seções de Choque para Nêutrons (*National Neutron Cross Section Center – NNCSC*). Todavia, seu nome mudou para Centro Nacional de Dados Nucleares (*National Nuclear Data Center – NNDC*) em 1977.
- NRDC. Os quatro centros supracitados, em conjunto com vários centros especializados de dados, vêm colaborando desde 1969 com a rede de Centros de Dados de Reações Nucleares (*Nuclear Reaction Data Centres – NRDC*).

2.2 AS SEÇÕES DE CHOQUE

A interação de um nêutron com um núcleo alvo é medida em termos da quantidade chamada seção de choque. Para cada interação, uma seção de choque específica. Assim, a seção de choque total denota todos os tipos de interações possíveis, ou seja, nela estão inclusas a absorção e o espalhamento pelo núcleo. Dessa forma, escreve-se:

$$\sigma_t = \sigma_a + \sigma_s$$

em que σ_a é a seção de choque de absorção e σ_f é a seção de choque de espalhamento.

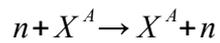
Na seção de choque de absorção estão inclusas as seções de choque e captura radiativa, σ_γ , e de fissão, σ_f e outras. No entanto, elas não serão abordadas com profundidade nessa seção.

Na seção de choque de espalhamento, estão inclusas a seção de choque de espalhamento elástico, σ_{el} e a seção de choque de espalhamento inelástico, σ_{inel} . Nas próximas subseções serão abordados mais detalhes sobre cada uma delas, entretanto, antes de iniciá-las, algumas características fundamentais dos nêutrons serão evidenciadas:

- Os nêutrons possuem carga elétrica nula e dipolo elétrico negligenciável e, portanto, interagem com a matéria via forças nucleares;
- As forças nucleares são de alcance muito pequeno (cerca de alguns fermi, sendo que 1 fermi = 10^{-15} m) e os tamanhos dos núcleos são tipicamente 100.000 menores que as distâncias entre eles;
- Assim, os nêutrons podem viajar longas distâncias num meio material sem serem espalhados ou absorvidos, isto é, eles são altamente penetrantes: por exemplo, a atenuação de nêutrons de baixa energia pelo alumínio é de aproximadamente 1%/mm, comparada a mais de 99%/mm para raios-x.
- Os nêutrons são partículas que tem propriedades de ondas, eles possuem amplitude e fase.

2.2.1 O ESPALHAMENTO ELÁSTICO

A característica mais importante do espalhamento elástico é que, nesse tipo de interação, o nêutron tem sua trajetória alterada, mas não perde energia para o núcleo espalhador. Em termos ondulatórios, diz-se que não há diferença na magnitude do vetor de onda. O espalhamento elástico é uma reação do tipo



A transferência de energia por espalhamento elástico ocorre principalmente nos seguintes tipos de situação:

- Nêutron de energia baixa ou intermediária interagindo com núcleos intermediários;
- Nêutron de energia baixa interagindo com núcleos pesados (mais comum);
- O método experimental para se detectar os nêutrons espalhados é mostrado na figura abaixo:

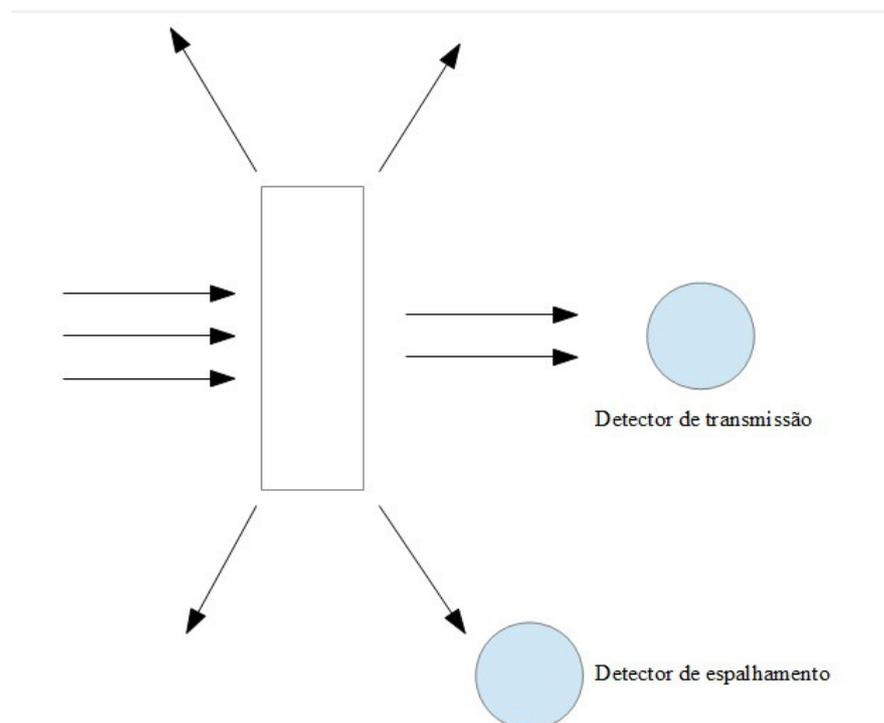
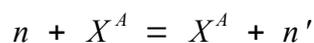


FIG. 1: Esquema simplificado de método experimental para a determinação de nêutrons espalhados

Nessa figura, o conjunto de três flechas representa os nêutrons incidentes, as duas flechas paralelas a esse conjunto, os nêutrons transmitidos sem espalhamento, e as demais flechas, os nêutrons que foram espalhados. O detector de espalhamento pode fazer a contagem do número de nêutrons espalhados com a mesma energia dos nêutrons incidentes. Como se considera que o espalhamento seja isotrópico, isso é, igual em todas as direções, o resultado pode ser estendido para o ângulo sólido total.

2.2.2 O ESPALHAMENTO INELÁSTICO

Diferentemente do que acontece no espalhamento elástico, quando um nêutron espalha-se inelasticamente devido a sua interação com um núcleo, existe tanto mudança na direção de sua trajetória inicial bem como perda de energia. O espalhamento inelástico acontece principalmente quando o nêutron possui energia muito alta, acima de 1 MeV , e o núcleo alvo é de um elemento pesado. É uma reação do tipo:



Em energias entre $0,2\text{ keV}$ e 10 MeV para núcleos como U^{235} , U^{238} e Pu^{239} , o espalhamento inelástico é o processo mais provável. Reações nucleares com emissão de prótons ou partículas alfa são muito raras para esses elementos.

A utilização da teoria estatística de reações nucleares permite o cálculo da seção de choque de espalhamento inelástico e a predição da função de distribuição de energia do nêutron espalhado. Neste trabalho, considerar-se-á que o espalhamento inelástico dá-se em quatro etapas:

1. O nêutron colide com o núcleo;
2. O núcleo captura o nêutron;
3. O nêutron transfere energia ao núcleo;
4. O nêutron é emitido isotropicamente.

Esse modelo é conhecido como o modelo da Evaporação do Núcleo e não se sabe se o nêutron emitido é o mesmo nêutron incidente, sabe-se apenas que determinado nêutron, com certa quantidade de energia, chocou-se com um núcleo e que determinado nêutron – não necessariamente o mesmo – deixou o núcleo com energia menor que nêutron incidente.

A energia com que o nêutron é espalhado dependerá da energia com que ele inicialmente atingiu o núcleo alvo. Nesse trabalho, interessam apenas os processos de espalhamento inelástico para núcleos pesados. Para esses núcleos, existe uma função que pesa a própria probabilidade de interação do nêutron, em relação à energia incidente e à energia com que o nêutron sai do processo. Essa função será doravante denominada *kernel de espalhamento*. A figura abaixo ilustra esse processo de probabilidades de transferência de energia para um caso de três grupos de energia.

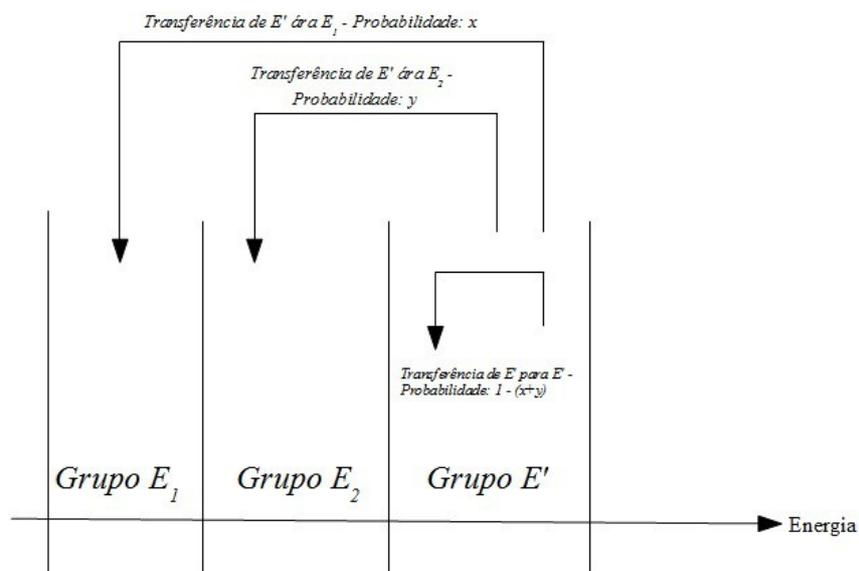


FIG. 2: Esquema de transferência de energia no caso de espalhamento inelástico

São exatamente as probabilidades de que as transferências ocorram entre determinados grupos de energia que o *kernel* de espalhamento fornece.

Neste trabalho, duas funções diferentes para o *kernel* de espalhamento $f(E' \rightarrow E)$ serão utilizadas.

No modelo de Weisskopf (1937):

$$f(E' \rightarrow E) = a \frac{E'}{E} \frac{e^{-\sqrt{\frac{a}{E'}} E}}{1 - (1 + \sqrt{aE'}) e^{-\sqrt{aE'}}} \quad (1)$$

em que E' é a energia incidente, E é a energia do nêutron espalhado, a é um parâmetro numérico obtido experimentalmente. Ele foi medido experimentalmente para vários núcleos e entre os elementos pesados, somente o Tório foi determinado. Os outros valores de a foram extrapolados e mostraram que para o U-235 e o Pu-239 a diferença era muito pequena. O seu valor é de aproximadamente $13,4 \text{ MeV}^{-1}$. Infelizmente, a referência original não foi publicada e as informações chegaram de forma indireta.

Posteriormente, quase duas décadas após a publicação do modelo de evaporação de Weisskopf, outro modelo foi estabelecido. Neste modelo, de Okrent (1955), a função densidade de probabilidade de transferência de energia se escreve como:

$$f(E' \rightarrow E) = \frac{EC(E) e^{-e/T}}{E' \int_0^{E'} xC(x) e^{-x/T} dx} \quad (2)$$

em que $T = 1 \text{ MeV}$

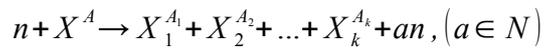
$$C(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x > 0,5 \text{ MeV} \\ \sqrt{\frac{15}{E}}, & \text{se } x \leq 0,5 \text{ MeV} \end{cases}$$

Na prática, pouca coisa mudou em termos de resultados quando o modelo de evaporação de evaporação foi substituído por este mais recente.

2.3 O ESPECTRO DE FISSÃO

Já foi dito anteriormente que a interação de um nêutron com um núcleo pode acarretar um processo de fissão, no qual o núcleo absorve o nêutron e se divide em dois ou mais núcleos mais

leves, havendo liberação de energia e também de nêutrons. Esquemáticamente, pode-se escrever



em que a é o número de nêutrons emitidos e A é o número de massa.

de forma que

$$A_1 + A_2 + \dots + A_k + (a-1)n = A$$

e

$$Z_1 + Z_2 + \dots + Z_k = Z$$

em que Z é o número atômico.

Os nêutrons produzidos na reação de fissão emergem com uma certa distribuição de energia, cuja energia média é de aproximadamente 2 MeV . Essa distribuição dependerá do isótopo nuclear envolvido e, em menor grau, da energia do nêutron incidente. Para caracterizar essa variação na energia dos nêutrons de fissão, é conveniente que se defina um espectro de energia de nêutrons de fissão, ou mais simplesmente, o *espectro de fissão*, $\chi(E)$, definido como:

$$\chi(E)dE \equiv \frac{\text{Número médio de nêutrons de fissão emitidos com energia } E \text{ entre } E \text{ e } E+dE}{\text{total de nêutrons de fissão emitidos em todas as energias}}$$

Um espectro de fissão de nêutrons prontos típico é mostrado na figura abaixo:

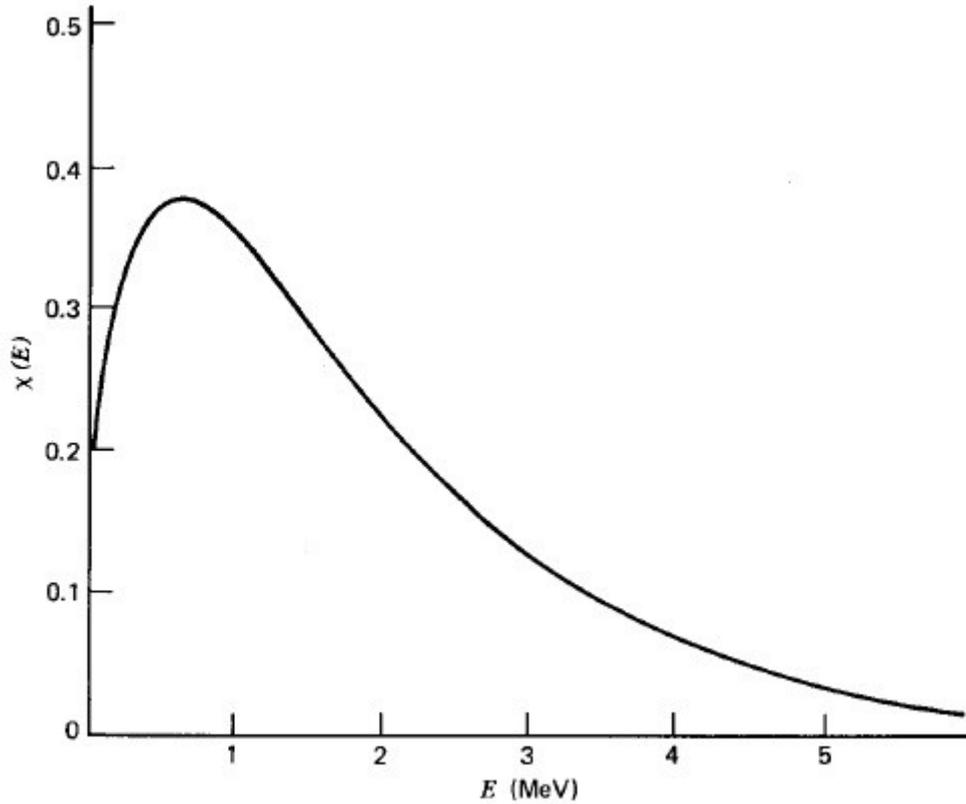


FIG. 3: Formato de um espectro de fissão típico

A literatura apresenta o espectro de fissão ajustado por expressões empíricas. Tal fato mostrar-se-á muito útil, pois será mais vantajoso utilizar-se de uma equação já pronta que procurar por valores do espectro de fissão num gráfico. Neste trabalho, adotam-se duas expressões diferentes para o espectro de fissão, a saber:

$$\chi(E) = 0,453 e^{-1,036 E} \sinh \sqrt{2,29 E} \quad (3)$$

E é a energia onde nasce o nêutron oriundo da fissão.

Conforme o *Japanese Atomic Energy Research Institute* (JAERI, 1990):

$$\chi(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi a^3 b}} e^{\frac{-ab-E}{4a}} \sinh(\sqrt{bE}) \quad (4)$$

em que

$$a = 0.988 \text{ MeV}$$

$$b = 2.249 \text{ MeV}^{-1}$$

É mister notar-se que estas funções são normalizadas por representarem uma densidade de probabilidade. Em outras palavras, quando integrada em todo o espectro de energia, o resultado é a unidade:

$$\int_0^{\infty} \chi(E) = 1$$

2.4 OS NÊUTRONS EMITIDOS POR FISSÃO

A comprovação de que nêutrons são emitidos no processo de fissão foi mostrado por meio de uma simples experiência, pouco tempo após a descoberta da fissão. Uma fonte de nêutrons foi posta no centro de um recipiente grande, dispendo-se também detectores a várias distâncias dela, de modo a determinar a densidade de nêutrons no recipiente. Após isso, acrescentou-se primeiramente solução de sulfato de uranila e posteriormente, sulfato de amônia, para fins de comparação. Descobriu-se que havia uma maior densidade de nêutrons quando o urânio estava presente no recipiente, mostrando grosseiramente que mais nêutrons eram produzidos do que usados durante o processo de fissão. O número médio de nêutrons liberados por fissão, ν , depende do elemento alvo e alguns resultados experimentais são mostrados na tabela a seguir.

| Energia dos nêutrons (Mev) | U ²³³ + n | U ²³⁵ + n | U ²³⁸ + n | Pu ²³⁹ + n |
|----------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|
| Térmicos | 2,51 ± 0,02 | 2,44 ± 0,02 | - | 2,89 ± 0,03 |
| 0,08 | 2,58 ± 0,06 | 2,47 ± 0,03 | - | 3,05 ± 0,08 |
| 1,3 | 2,69 ± 0,05 | 2,61 ± 0,09 | - | 3,08 ± 0,05 |
| 1,5 | - | 2,57 ± 0,12 | 2,65 ± 0,09 | - |
| 1,8 | 2,75 ± 0,06 | 2,72 ± 0,06 | - | 3,28 ± 0,06 |
| 2,0 | - | 2,80 ± 0,15 | - | - |
| 4,0 | 3,06 ± 0,12 | 3,01 ± 0,12 | 3,11 ± 0,10 | 3,43 ± 0,11 |
| 14,1 | 3,86 ± 0,28 | 4,52 ± 0,32 | 4,13 ± 0,25 | 4,85 ± 0,50 |

TAB. 1: Número médio de nêutrons emitidos por fissão para vários isótopos a várias energias

É importante lembrar-se também que nem todos os nêutrons absorvidos por um núcleo provocam fissão; algumas absorções resultam na emissão de raios gama, ou seja, a captura radioativa é um processo que compete com a fissão. A razão entre a seção de choque para captura radioativa e a seção de choque de fissão é usualmente indicada por α ,

$$\alpha = \frac{\sigma_r}{\sigma_f}$$

Esse número, muito importante e conhecido, pode ser relacionado também com o número de nêutrons de fissão liberados por nêutron absorvido num nuclídeo fissionável, denominado η

$$\eta = \frac{\nu}{1+\alpha}$$

Os nêutrons emitidos, como resultado do processo de fissão, se dividem em duas categorias: *nêutrons atrasados e nêutrons prontos*. Os nêutrons prontos constituem aproximadamente 99% do

total de nêutrons de fissão e são emitidos dentro de um intervalo de tempo muitíssimo curto após o processo de fissão, quase que instantaneamente, possivelmente num intervalo da ordem de 10^{-14} s. Além disso, os nêutrons prontos são emitidos preferencialmente na mesma direção em que os fragmentos de fissão.

Já os nêutrons atrasados, que constituem apenas uma pequena parcela do total de nêutrons emitidos na fissão, são emitidos com intensidade gradualmente decrescente durante vários minutos após o processo de fissão real. É comum agrupá-los em até seis grupos bem definidos de nêutrons atrasados, sendo que a taxa de decaimento de cada grupo é exponencial, exatamente como para as outras formas de mudanças radioativas, de sorte que é possível atribuir a cada grupo uma vida média e uma constante de decaimento. A partir da intensidade, é possível se determinar a fração que cada grupo constitui em relação ao total dos nêutrons de fissão (tanto prontos quanto atrasados).

3 A GERAÇÃO DO ESPECTRO DO FLUXO DE NÊUTRONS ULTRAFINO

A Equação de Transporte para nêutrons é fundamental para a física dos reatores. A sua solução vai permitir o cálculo das taxas de reações, uma vez conhecidas as seções de choque para todas as energias e todos os materiais envolvidos no problema. Raros são os casos onde é possível uma solução analítica. Portanto, só restam as opções:

- Realizar aproximações para que se reduza o número de variáveis e torne a equação tratável analiticamente;
- Tratá-la numericamente, discretizando as suas variáveis, transformando o problema integral-diferencial em problemas algébricos. Um exemplo é a variável energia onde se divide o intervalo em grupos ultrafinos (milhares de grupos), ou seja, intervalos de energia muito próximos um do outro, de sorte que o menor número de aproximações seja realizado e a equação seja resolvida por um programa computacional.

Durante muito tempo, apenas a primeira alternativa parecia ser viável, pois o tempo que se despendia para a resolução de problemas computacionais envolvendo muitas variáveis era enorme devido às restrições computacionais. Todavia, o setor de computação assistiu a uma grande evolução e os computadores, outrora grandes máquinas ocupantes de salas inteiras e presentes

somente em alguns laboratórios do mundo, passaram a integrar a vida cotidiana de grande parcela da população mundial, tornando-se, inclusive, portáteis. Toda essa evolução permitiu uma poupança enorme do tempo de execução de programas computacionais, de maneira que problemas antes pensados como de resoluções computacionais impossíveis hoje podem ser resolvidos em poucos segundos ou minutos.

Tendo o exposto acima em vista, este trabalho pretende utilizar-se da segunda opção. Algumas simplificações serão aplicadas para permitir uma redução da complexidade do problema. Considera-se o meio infinito e homogêneo e eliminam-se as dependências espacial e angular.

3.1 A FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Para este trabalho, o sistema escolhido foi um meio homogêneo infinito preenchido apenas por Urânio-235. Dessa forma, a equação de balanço para os nêutrons apresenta-se como:

$$\sigma_t(E)\varphi(E) = \frac{\chi(E)}{k_\infty} \int_0^\infty \nu(E')\sigma_f(E')\varphi(E')dE' + \int_0^\infty \sigma_s(E')f(E' \rightarrow E)\varphi(E')dE' \quad (5)$$

em que:

$\sigma_t(E)$ é a seção de choque microscópica total em unidades de *barn* (b) – 10^{-24} cm^2 ;

$\chi(E)$ é o espectro de fissão, já descrito anteriormente, em unidades de MeV^{-1} ou eV^{-1} ;

$\nu(E)$ é o número de nêutrons emitidos por fissão na energia E ;

$f(E' \rightarrow E)$ é a função de transferência de energia e interpretada como a probabilidade de um nêutron com energia E' ser transferido, por espalhamento, para a energia E .

k_∞ é o fator de multiplicação infinito e

$\varphi(E)$ é o fluxo de nêutrons em unidades $\text{s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ ou $\text{s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ MeV}^{-1}$.

Mesmo sendo função apenas da energia, obter uma solução analítica é impossível dada a complexidade do comportamento das seções de choque. O recurso é a solução numérica, onde o intervalo de energia é dividido em uma malha fina. Atualmente, com os recursos computacionais

disponíveis, é possível uma divisão em milhares de grupos de energia, grupos ultrafinos, beirando ao contínuo. Considera-se que o maior e o menor valor de energia serão, respectivamente, $E_0=20\text{ MeV}$ e $E_G = 10^{-5}\text{ eV}$, limites dos dados da AIEA. Fixado esses limites, calcula-se o

intervalo de letargia total 28. $\Delta U = \ln\left(\frac{2 \times 10^7}{10^{-5}}\right) = \dot{c}$. Este valor servirá de base para o nível de resolução que se deseja aplicar ao problema. Por exemplo, dividindo-se este intervalo de letargia numa malha de $G = 28324$ grupos de energia, cada pedaço terá um comprimento de letargia de $\Delta u = 0,001$ e cada valor de energia será designado por:

$$E_j = E_G e^{-(j-1)\Delta u} \quad j=1,2, \dots, (G-1), G \quad (6)$$

Integrando-se a equação (5) no intervalo de energia $\Delta E_j = E_G e^{-j\Delta u} - E_G e^{-(j-1)\Delta u}$, chega-se à equação de balanço na formulação multigrupo:

$$\sigma_{tg} \varphi_g = \frac{\chi_g}{k_\infty} \sum_{g=1}^G \nu_{g'} \sigma_{fg'} \varphi_{g'} + \sum_{g=1}^G \sigma_{sg' \rightarrow g} \varphi_{g'} \quad (7)$$

em que:

$$\sigma_{tg} = \frac{\int_{\Delta E_g} \sigma_t(E) \varphi(E) dE}{\varphi_g}$$

$$\nu_g \sigma_{fg} = \frac{\int_{\Delta E_g} \nu(E) \sigma_f(E) \varphi(E) dE}{\varphi_g}$$

$$\sigma_{sg' \rightarrow g} = \frac{\int_{\Delta E_g} dE \int_{\Delta E_{g'}} \sigma_s(E') f(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE}{\varphi_{g'}}$$

$$\chi_g = \int_{\Delta E_g} \chi(E) dE$$

$$\varphi_g = \int_{\Delta E_g} \varphi(E) dE$$

Essa será a equação a ser resolvida nesse trabalho, a milhares de grupos, $G = 28.324$ (28.325 pontos). Aqui, chega-se a um ponto importante: omitir-se-á a seção de choque diferencial de espalhamento elástico, $\sigma_{elg' \rightarrow g}$ uma vez que para núcleos pesados, como o Urânio, a perda de energia por choque elástico é desprezível. Todo o processo de perda de energia dar-se-á por espalhamento inelástico.

Sendo o número de grupos de energia muito grande, se $\varphi(E)$ rá considerado constante dentro do intervalo da malha levando à simplificação do cálculo de cada constante de grupo:

$$\sigma_{ig} = \frac{\int \sigma_i(E) dE}{\Delta E_g}$$

$$v_g \sigma_{fg} = \frac{\int_{\Delta E_g}^{\square} v(E) \sigma_f(E) dE}{\Delta E_g} \quad \sigma_{sg' \rightarrow g} = \frac{\int_{\Delta E_g} dE \int_{\Delta E_{g'}} \sigma_s(E') f(E' \rightarrow E) dE}{\Delta E_{g'}}$$

3.1.1 OBTENÇÃO DOS DADOS

Os valores de seções de choque de espalhamento elástico e inelástico, captura radioativa e fissão, da biblioteca ENDF-VII para o Urânio-235 estão disponíveis no site da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA). Este é um fragmento mostrando a disposição dos dados nucleares.

```

#LIBRARY      ENDF/B-VII.0
#REACTION    U-235(N,F'),SIG
#NUCLEUS     U-235
#MF          3
#MT          19
#EN-MIN      1e-05
#EN-MAX      2e+07
#E, eV       Sig,b      Interpolation
1E-05        31389      Lin-Lin
1.1024E-05  29895.5      Lin-Lin
1.21504E-05 28475.9      Lin-Lin
1.33946E-05 27121        Lin-Lin
1.47633E-05 25833.1      Lin-Lin
1.6275E-05  24603.9      Lin-Lin
1.79381E-05 23435.5      Lin-Lin
1.97749E-05 22320.3      Lin-Lin
2.17956E-05 21260.3      Lin-Lin
2.40274E-05 20248.6      Lin-Lin
2.64826E-05 19287        Lin-Lin
2.91943E-05 18369.2      Lin-Lin
3.21775E-05 17496.7      Lin-Lin
3.54723E-05 16664.1      Lin-Lin
3.9097E-05  15872.6      Lin-Lin
4.31005E-05 15117.2      Lin-Lin
4.75046E-05 14399.1      Lin-Lin
5.2369E-05  13713.7      Lin-Lin
5.77202E-05 13062.3      Lin-Lin

```

FIG. 4: Disposição dos dados nucleares fornecidos pela IAEA. Este arquivo mostra a seção de choque de fissão para o Urânio-235.

Como se pode observar, existe um preâmbulo com dados específicos sobre o tipo de seção de choque e o núcleo alvo. Além disso, existem três colunas: a primeira coluna traz os pontos de energia, em elétron-volts, e a segunda coluna, seu valor de seção de choque correspondente, em *barns*; a terceira coluna, nomeada “Interpolation” mostra que entre dois valores sucessivos de energia, pode-se efetuar uma interpolação linear a fim de se obter um valor de seção choque intermediário. Isso significa, por exemplo, que para se achar o valor da seção de choque na energia, é $1,15 \times 10^{-5} eV$ necessário interpolarem-se os valores correspondentes às energias $1,1024 \times 10^{-5} eV$ e, $1,2150 \times 10^{-5} eV$ que são fornecidos pelo arquivo.

O passo seguinte foi prepará-la para ser lida e preparada para armazenamento nas energias definidas pela malha usada.

Conseguidas as seções de choque, integrou-se o espectro de fissã χ o para cada grupo ultrafino. Ambas as expressões foram utilizadas e devidamente comparadas. Fecharam-se a obtenção e tratamento dos dados com a função linear para o número de nêutrons emitidos por de fissão em cada energia.

$$v = \begin{cases} 2,432 + 0,066 E_i & \text{se } E_i \leq 1 \text{ MeV} \\ 2,349 + 0,15 E_i & \text{se } E_i > 1 \text{ MeV} \end{cases} \quad (8)$$

3.1.2 INTERPOLAÇÃO DOS DADOS

A equação de balanço para nêutrons foi transformada em um conjunto de 28324 equações algébricas acopladas, cuja solução é o espectro procurado. A seção de choque total é dada como a soma das seções de choque de absorção (fissão e captura radioativa) e de espalhamento e nem sempre há coincidência de valores de seção de choque na mesma energia. Cada arquivo de seções de choque fornecido pela IAEA possuía seu número específico de pontos de energia, variando de 44.901 a 107.560. Para resolver este problema, escolheram-se valores de energia específicos, de acordo com a seguinte equação:

$$E_j = E_G e^{-(j-1)0,001} \quad j = 1, 2, 3, \dots, 28.325 \quad (9)$$

de maneira que quando $i = 1$, a energia máxima é igual a $E_0 = 2 \times 10^7 \text{ eV}$. Quando $i = 28.325$, a mínima energia é aproximadamente igual, a $E_G = 1 \times 10^{-5} \text{ eV}$.

A Figura 5 ilustra um exemplo genérico de interpolação das seções de choque. Nela, σ_k e σ_{k+1} representam seções de choque fornecidas pela ENDF e σ_i , a seção de choque a ser interpolada, referente à energia E_i . A reta “r” é a reta interpolante.

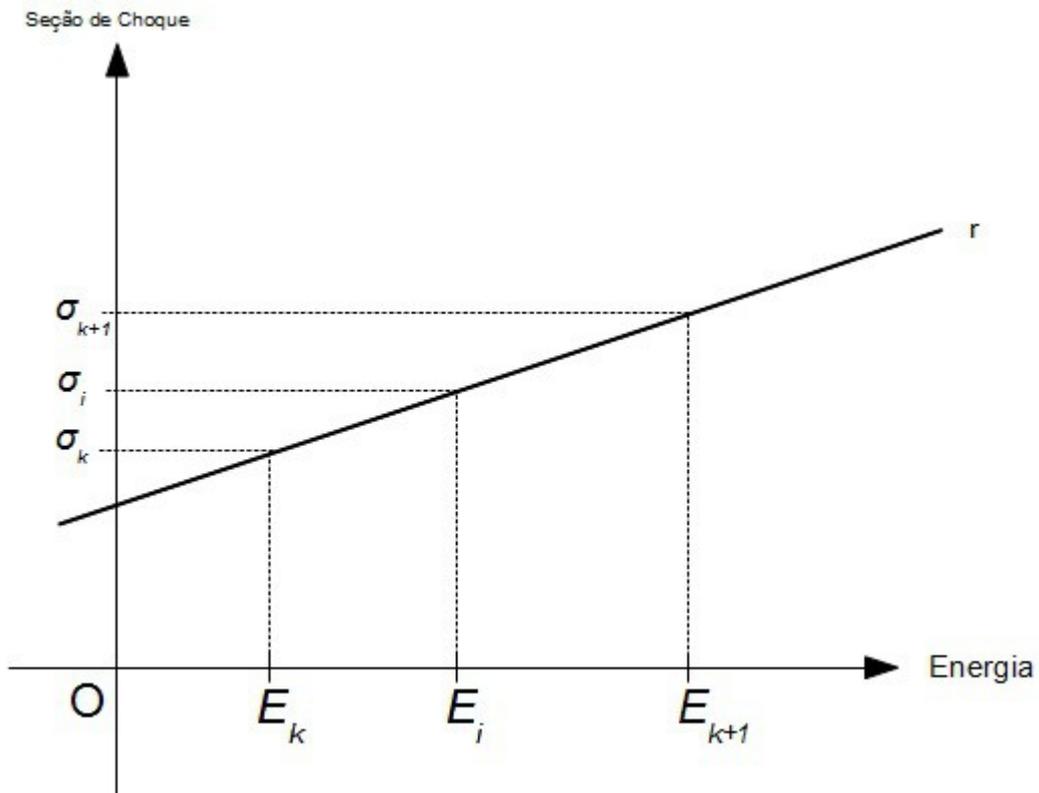


FIG. 5: Esquema de interpolação de seções de choque

Desta forma, a primeira parte do programa teve a função de interpolar as seções de choque disponíveis para que se encontrassem os valores de seção de choque referentes às energias E_i da equação (9).

3.1.3 INTEGRAÇÃO DOS DADOS

A Equação de Balanço requer grupos de energia, e não valores isolados. Assim, não é possível simplesmente resolvê-la usando-se somente valores de seção de choque para cada ponto de energia E_i , mas sim, usando-se seções de choque e o espectro de fissão integrados para um intervalo de energia. Neste caso específico: $\Delta E_i = E_{i+1} - E_i$

Tendo isto em vista, a segunda parte do programa teve a função de integrar cada tipo de

seção de choque. Levando-se em consideração que os grupos de energia eram muito pequenos, o método escolhido para a integração numérica foi a “Regra do Trapézio”.

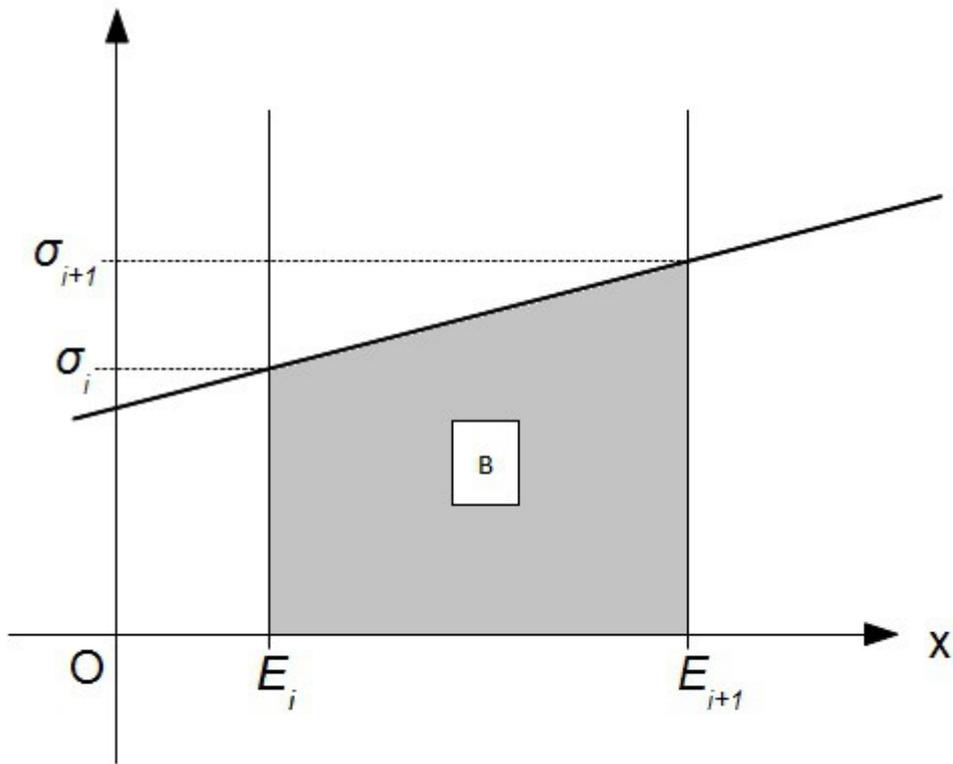


FIG. 6: Regra do Trapézio para integração da seções de choque. A área B é considerada a integral procurada.

O espectro de fissão e todas as seções de choque seguiram o mesmo modelo de integração, havendo apenas uma pequena diferença na função $f(E' \rightarrow E)$ a ser integrada na seção de choque de espalhamento, a seção de choque de espalhamento inelástico, explicitamente uma integral dupla.

3.2 O SISTEMA DE EQUAÇÕES E O ESQUEMA DE RESOLUÇÃO

Integradas todas as seções de choque e o espectro de fissão, obtiveram-se 28.324 equações algébricas acopladas. Considerando-se que os índices aumentam conforme a energia diminui, que

não há espalhamento para energias superiores, as equações ficaram dispostas como se segue:

$$\Delta E_i = E_{i+1} - E_i$$

$$\sigma_{t2} \varphi_2 = \frac{\chi_2}{k_\infty} S_0 + \sigma_{s1 \rightarrow 2} \varphi_1 + \sigma_{s2 \rightarrow 2} \varphi_2$$

$$\sigma_{t3} \varphi_3 = \frac{\chi_3}{k_\infty} S_0 + \sigma_{s1 \rightarrow 3} \varphi_1 + \sigma_{s2 \rightarrow 3} \varphi_2 + \sigma_{s3 \rightarrow 3} \varphi_3$$

⋮

$$\sigma_{tG} \varphi_G = \frac{\chi_G}{k_\infty} S_0 + \sigma_{s1 \rightarrow G} \varphi_1 + \sigma_{s2 \rightarrow G} \varphi_2 + \dots + \sigma_{sG \rightarrow G} \varphi_G$$

S_0 é a fonte de nêutrons de fissão:

$$S_0 = \sum_{g=1}^G \nu \sigma_{fg} \varphi_g$$

A solução deste conjunto de equações fornece o espectro do fluxo de nêutrons que serão utilizados, mais adiante, como função ponderadora para gerar as constantes de grupos largos. Além disso, o fator de multiplicação infinito também é determinado. Duas alternativas para a resolução desse sistema foram pensadas:

1. Resolução do sistema matricial;
2. Resolução por método de recorrência.

A primeira tentativa foi resolver o sistema matricial. No entanto, tal método não se mostrou factível, pois isso implicaria na criação de uma matriz quadrada de ordem 28.324, totalizando 802.248.976 elementos, número que excedia os limites impostos pelo compilador utilizado.

Dessa forma, passou-se para a segunda alternativa: a de se tentar um método de recorrência, o qual se mostrou bastante eficiente. As etapas da resolução são:

1. Atribuir um valor inicial para S_0 e para k_∞ ;
2. Resolver a primeira equação para φ_1 ;

3. Resolver a segunda equação para φ_2 com o termo de fonte de espalhamento $\sigma_{s1 \rightarrow 2} \varphi_1$;
4. Repetir os passos anteriores até a equação de número $G = 28.324$;
5. Nesse passo todos os $28324 \varphi_g$ foram calculados;
6. Calcula-se a nova fonte S_1 utilizando-se esse espectro;
7. Calcula-se o novo fator de multiplicação k_1 pela relação $\frac{S_1}{k_1} = \frac{S_0}{k_0}$;
8. Testa-se a convergência. Finaliza-se o processo caso tenha sido atingida.

3.3 LIMITAÇÕES DO MODELO

A discretização da variável energia é ultrafina e o cálculo está limitado a um único isótopo. A razão é simples, procurou-se apenas mostrar a viabilidade do método de emprego dos dados nucleares fundamentais na construção de uma biblioteca básica.

O espalhamento inelástico ainda está pobremente descrito. O modelo de evaporação de Weisskopf é mais apropriado para energias onde a densidade de níveis é grande e quase contínua. Duas funções foram testadas. Ambas tratam o núcleo como um meio contínuo. Para energias aproximadamente acima de 0,1 MeV, este modelo pode ser aplicado. Para energias abaixo fica difícil representar esses processos nucleares.

4 A ESFERA DE URÂNIO

Assim como já mencionado anteriormente, o presente trabalho consiste em um meio infinito composto inteiramente por U^{235} . Para termos de simplificação de cálculo, o sistema deste trabalho será considerado uma esfera de urânio; além disso, alguns experimentos já foram feitos com um sistema nessas condições, como, por exemplo, o dispositivo nuclear *Lady Godiva*.

Lady Godiva foi um reator nuclear de pulsos, não refletido, originalmente situado no

Laboratório Nacional de Los Álamos (*Los Alamos National Laboratory – LANL*), no estado do Novo México, nos Estados Unidos. Era um de um numeroso grupo de dispositivos para cálculos de criticalidade dentro da Área Técnica 18 (*Technical Area 18 – TA-18*). Especificamente, era usado para produzir pulsos de nêutrons e raios gama para irradiação de amostras-teste. Esse dispositivo inspirou o desenvolvimento de reatores do tipo Godiva.

O reator Godiva era composto de uma massa metálica de urânio físsil, altamente enriquecido (93,71% de U^{235} ; 5,24% de U^{238} e 1,05% de U^{234}), dividida em três camadas, localizada no topo de uma torre metálica de dois metros de diâmetro.

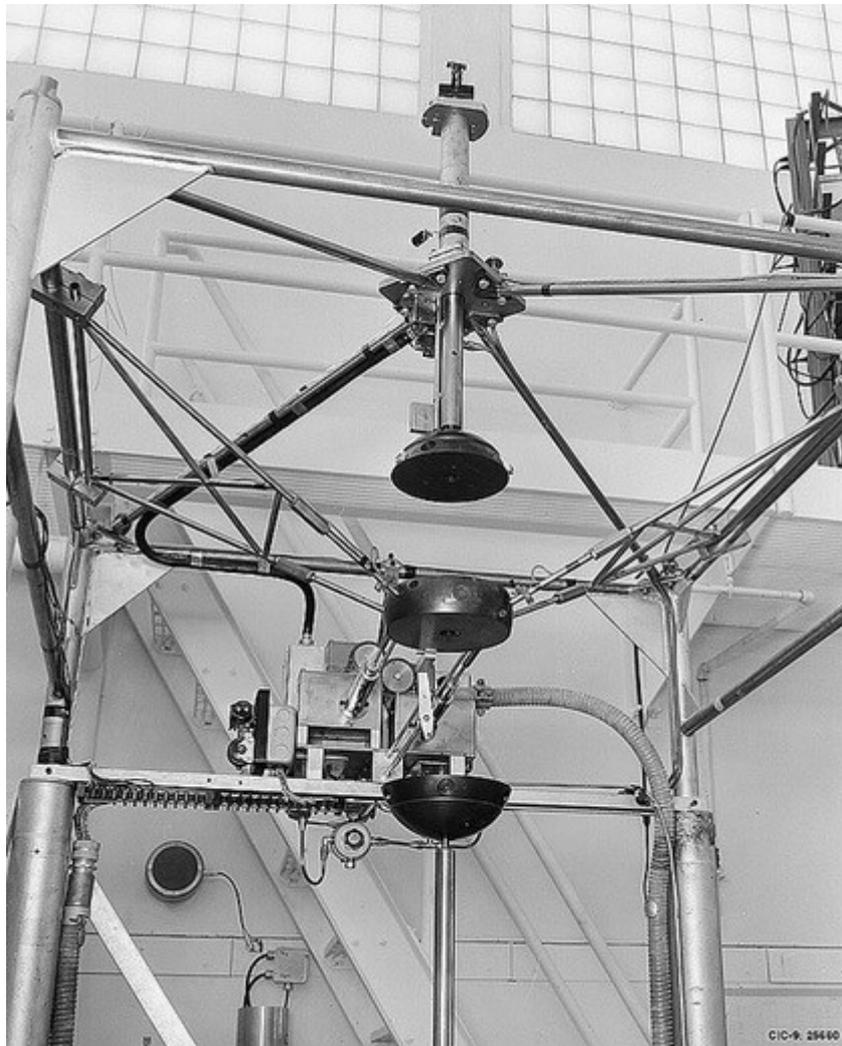


FIG. 7: Dipositivo Nuclear Lady Godiva

Um pulso de nêutrons era produzido quando um pistão de material radioativo era rapidamente inserido e extraído de uma cavidade dentro da maior massa físsil. Durante o tempo em

que essas duas massa eram combinadas elas formavam uma massa crítica e uma reação nuclear em cadeia era brevemente mantida.

Em 3 de fevereiro de 1954 e 12 de fevereiro de 1957, excursões de criticalidade acidentais aconteceram, causando danos ao dispositivo, mas felizmente apenas exposições insignificantes ao pessoal. Esse dispositivo Godiva original, conhecido como Lady Godiva, ficou irreparável após o segundo acidente e foi substituído pelo *Godiva II*.

4.1 A GERAÇÃO DAS CONSTANTES DE GRUPOS LARGOS

De posse do espectro de fluxos de nêutrons, conforme foi calculado na seção 3, calculam-se as seções de choque para qualquer estrutura multigrupo desejada.

$$\sigma_{an} = \frac{\sum_{i \in \Delta E_n} \sigma_{ai} \varphi_i}{\sum_{i \in \Delta E_n} \varphi_i} \quad (i=1,2,3, \dots, I) \quad (10)$$

para as seções de choque de absorção, e a relação

$$\sigma_{i' \rightarrow i} = \frac{\sum \sum \sigma_{i' \rightarrow i} \varphi_{i'}}{\sum \varphi_{i'}}, \quad (i, i' = 1, 2, \dots, I) \quad (11)$$

para as seções de choque de transferência entre grupos.

em que o símbolo $\sum_{i \in \Delta E_n}$ indica uma soma sobre todos os grupos ultrafinos n tendo intervalos de energia ΔE_g contidos dentro do intervalo de energia largo ΔE_n , ou seja, indica uma soma de todos os grupos ultrafinos contido no grupo largo de energia a que se deseja encontrar

a seção de choque. Mais simplesmente, pode-se dizer que se pondera a seção de choque em relação ao fluxo do intervalo de energia.

Nas décadas anteriores, devido às limitações computacionais, realizar tal procedimento seria muito difícil, conforme Henry (1975) escreve em seu livro:

“A única desvantagem para esse procedimento é o custo. Para um reator rápido, cerca de milhares de grupos podem ser suficientes para fornecer uma representação precisa. Mas em um reator térmico, devido à grande importância das ressonâncias muito altas e estreitas na faixa de energia de 1 eV a 1 keV, pode ser necessário utilizarem-se cerca de 100.000 grupos. Realizar tais cálculos, para cada material distinto na composição do reator, aumenta o custo substancialmente.”

Porém, com o grande avanço dos computadores, o “custo” não é mais um problema e, assim, foi possível encontrar seções de choque colapsadas a grupos largos. As próximas duas subseções demonstram os cálculos realizados pelo programa para se encontrar as seções de choque a um e dois grupos de energia.

4.1.1 SEÇÕES DE CHOQUE COLAPSADAS PARA UM GRUPO DE ENERGIA

Colapsar as seções de choque a um grupo de energia significa encontrar as seções de choque válidas quando se trabalha no grupo de energia largo que vai de $1,0 \times 10^{-5} eV$ até $2,0 \times 10^7 eV$. Considerando-se que $i = 1$ representa o grupo mais alto de energia e que $I = 28324$ representa o grupo de mais baixa energia, realizaram-se os seguintes cálculos.

- Seção de choque de fissão σ_f :

$$\sigma_f = \frac{\sum_{i=1}^I \sigma_{fi} \varphi_i}{\sum_{i=1}^I \varphi_i} \quad (12)$$

- Seção de choque de fissão com número de nêutrons emitidos por fissão $\nu \sigma_f$:

$$\nu \sigma_f = \frac{\sum_{i=1}^I \nu \sigma_{fi} \varphi_i}{\sum_{i=1}^I \varphi_i} \quad (13)$$

- Seção de choque de captura radioativa σ_c

$$\sigma_c = \frac{\sum_{i=1}^I \sigma_{ci} \varphi_i}{\sum_{i=1}^I \varphi_i} \quad (14)$$

- Seção de choque de espalhamento elástico σ_{sel} e inelástico σ_{sin} :

$$\sigma_{sel} = \frac{\sum_{i=1}^I \sigma_{sel} \varphi_i}{\sum_{i=1}^I \varphi_i} \quad (15)$$

$$\sigma_{\text{sin}} = \frac{\sum_{i=1}^I \sigma_{\text{sin}} \varphi_i}{\sum_{i=1}^I \varphi_i} \quad (16)$$

Note que nesse caso não é necessário calcular a seção de choque de transferência por haver um só grupo. Todos os nêutrons permanecem no mesmo grupo de energia.

Tendo sido calculadas a seção de choque de fissão e a seção de choque de fissão com número de nêutrons – equações (25) e (26), respectivamente –, é possível encontrar-se o número de nêutrons emitidos por fissão para todo o grupo, por meio da relação

$$\nu = \frac{\nu \sigma_f}{\sigma_f} \quad (17)$$

Perceba-se que não se cancela nenhum termo, pois cada um é, na verdade, uma soma de vários valores. Os resultados numéricos serão analisados mais à frente.

4.1.2 SEÇÕES DE CHOQUE COLAPSADAS PARA DOIS GRUPOS DE ENERGIA

O cálculo das seções de choque colapsadas a dois grupos seguiu o padrão do ANL-5800, onde os limites dos grupos de energia são:

Grupo 1 → 1,35 MeV a 20 MeV

Grupo 2 → 10^{-5} eV a 1,35 MeV

Esses valores foram escolhidos para fins de comparação de resultados, conforme se verá nas

seções 5 e 6.

- Seção de choque de fissão σ_f :

| Grupo 1 | Grupo 2 |
|---|---|
| $\sigma_{f1} = \frac{\sum_{i=1}^j \sigma_{fi} \phi_i}{\sum_{i=1}^j \phi_i}$ | $\sigma_{f2} = \frac{\sum_{i=j+1}^I \sigma_{fi} \phi_i}{\sum_{i=j+1}^I \phi_i}$ |

- Seção de choque de fissão com número de nêutrons emitidos por fissão : $\nu \sigma_f$

| Grupo 1 | Grupo 2 |
|---|---|
| $\nu \sigma_{f1} = \frac{\sum_{i=1}^j \nu \sigma_{fi} \phi_i}{\sum_{i=1}^j \phi_i}$ | $\nu \sigma_{f2} = \frac{\sum_{i=j+1}^I \nu \sigma_{fi} \phi_i}{\sum_{i=j+1}^I \phi_i}$ |

- Seção de choque de captura radioativa σ_c

| Grupo 1 | Grupo 2 |
|---|---|
| $\sigma_{c1} = \frac{\sum_{i=1}^j \sigma_{ci} \phi_i}{\sum_{i=1}^j \phi_i}$ | $\sigma_{c2} = \frac{\sum_{i=j+1}^I \sigma_{ci} \phi_i}{\sum_{i=j+1}^I \phi_i}$ |

- Seção de choque de espalhamento inelástico σ_{sin}

| Grupo 1 | Grupo 2 |
|--|--|
| $\sigma_{sin2} = \frac{\sum_{i=1}^j \sigma_{sin} \varphi}{\sum_{i=1}^j \varphi_i}$ | $\sigma_{sin2} = \frac{\sum_{i=j+1}^I \sigma_{sin} \varphi_i}{\sum_{i=j+1}^I \varphi_i}$ |

- Seção de choque de transferência do grupo 1 para o grupo 2:

$$\sigma_{1 \rightarrow 2} = \frac{\sum_{i'=1}^j \sum_{i=j+1}^I \sigma_{i' \rightarrow i} \varphi_{i'}}{\sum_{i'=1}^j \varphi_{i'}}$$

4.2 O RAI0 E A MASSA CRÍTICOS

O cálculo do raio e da massa crítica foi feito pela teoria da difusão. Apesar dela não se aplicar num sistema como a Godiva, é sempre um bom exercício fazê-lo. Seu resultado é bem conhecido na literatura e serve como a primeira aproximação, apesar de grosseira. O cálculo exato exige que se utilize a teoria de transporte.

4.2.1 CÁLCULO DO RAI0 E DA MASSA CRÍTICOS A UM GRUPO

A Equação da Difusão para Nêutrons a um grupo de energia pode ser escrita da seguinte forma:

$$-D \nabla^2 \phi + \Sigma_a \phi = \nu \Sigma_f \phi \quad (18)$$

em que:

$D = \frac{1}{3N\sigma_{tr}}$ é o coeficiente de difusão;

$\Sigma_a = N\sigma_a$ é a seção de choque macroscópica de absorção;

$\Sigma_f = N\sigma_f$ é a seção de choque macroscópica de fissão;

ν é o número médio de nêutrons emitidos na fissão;

$N = \rho \frac{A_{vg}}{A}$ é a densidade atômica em ; $(bcm)^{-1}$

ρ é a densidade do material em $\frac{g}{cm^3}$;

A_{vg} é o número de Avogrado em barn

A é a massa molar do material do meio.

O termo de fuga $-B_g^2\phi$ substitui o Laplaciano e B_g^2 é o *Buckling* geométrico e se escreve como:

$$B_g^2 = \left(\frac{\pi}{R+2D} \right)^2$$

R é o raio crítico do sistema e $2D$ é a distância extrapolada.

Dessa forma, a Equação de Difusão pode ser reescrita, em termos de B_g , como

$$D B_g^2 \phi + \Sigma_a \phi = \nu \Sigma_f \phi \quad (19)$$

Simplificado-se ϕ e isolando-se B_g , obtém-se

$$B_g^2 = \frac{\nu \Sigma_f - \Sigma_a}{D} \quad (20)$$

Substituindo-se o valor de B_g da equação (20) e isolando-se R , chega-se à seguinte relação:

$$R = \pi \sqrt{\frac{D}{v \Sigma_f - \Sigma_a}} - 2D \quad (21)$$

Lembrando-se de que

$$D = \frac{1}{3 N \sigma_{tr}} \quad (22)$$

com

$$\sigma_{tr} = \sigma_t - \frac{2}{3A} \sigma_{sel} \quad (23)$$

em que A é número de massa (235) do urânio e σ_{sel} é a seção de choque de espalhamento elástico.

Observe que a equação (21) para o raio crítico utiliza as seções de choque macroscópicas.

chega-se, finalmente, à relação procurada para o raio crítico, em função das seções de choque microscópicas encontradas pelo programa:

$$R = \frac{A}{\rho A v g} \left[\pi \sqrt{\frac{1}{3 \sigma_{tr} (v \sigma_f - \sigma_a)}} - \frac{2}{3 \sigma_{tr}} \right] \quad (24)$$

já que

$$N = \rho \frac{A v g}{A}$$

Calcula-se a massa crítica, utilizando-se a relação

$$m = \rho V = \frac{4}{3} \rho \pi R^3$$

4.2.2 CÁLCULO DO RAIOS E DA MASSA CRÍTICOS A DOIS GRUPOS

O cálculo do raio crítico a dois grupos é análogo ao cálculo anterior. Entretanto, ele envolve a transferência por espalhamento de um grupo a outro.

As equações para o grupo 1 e 2 são escritas como:

$$-D_1 \nabla^2 \phi_1 + \Sigma_{R1} \phi_1 = \chi_1 [v \Sigma_{f1} \phi_1 + v \Sigma_{f2} \phi_2] \quad (25)$$

$$-D_2 \nabla^2 \phi_2 + \Sigma_{R2} \phi_2 = \chi_2 [v \Sigma_{f1} \phi_1 + v \Sigma_{f2} \phi_2] + \Sigma_{1 \rightarrow 2} \phi_1 \quad (26)$$

em que Σ_R é a seção de choque de remoção, que consiste na seção de choque total diminuída da seção de choque de transferência do grupo para o próprio grupo.

Fazendo-se a mesma substituição para o Laplaciano (equação 20), podem-se escrever as equações na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} D_1 \left(\frac{\pi}{R+2D_1} \right)^2 + \Sigma_{R1} - \chi_1 v \Sigma_{f1} & -\chi_1 v \Sigma_{f2} \\ -(\chi_2 v \Sigma_{f1} + \Sigma_{1 \rightarrow 2}) & D_2 \left(\frac{\pi}{R+2D_2} \right)^2 + \Sigma_{R2} - \chi_2 v \Sigma_{f2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por se tratar de um sistema homogêneo, formalmente escrito como $A \vec{\phi} = \vec{0}$, ele somente

terá solução não trivial quando $\det(\mathbf{A}) = 0$. Todos os elementos da matriz quadrada estão \mathbf{A} definidos faltando apenas o raio crítico R . Para o cálculo da massa crítica, o processo é o mesmo que aquele da equação 24.

5 RESULTADOS

Visando-se uma melhor exposição dos resultados, esta seção será dividida em quatro partes: a primeira abordando o fator de multiplicação, a segunda abordando o fluxo de nêutrons, a terceira abordando a geração das constantes de grupos largos e a última, abordando os resultados do raio e da massa críticos.

5.1 FATOR DE MULTIPLICAÇÃO

Conforme dito anteriormente, utilizaram-se duas expressões diferentes para o espectro de fissão, bem como duas expressões distintas para o *kernel* de espalhamento inelástico, a relembrem-se:

| Espectro de Fissão | |
|--------------------|---|
| Fonte | Expressão |
| Duderstadt (1975) | $\chi = 0.453 e^{-1.036 E} \sinh(\sqrt{2.29 E})$ |
| JAERI (1991) | $\chi = \frac{2}{\sqrt{\pi a^3 b}} e^{\frac{-ab - E_i}{4} - \frac{E_i}{a}} \sinh \sqrt{bE}$ |

TAB.2: Expressões para o espectro de fissão utilizadas pelo programa

| Kernel de Espalhamento | |
|------------------------|--|
| Fonte | Expressão |
| Weisskopf (1937) | $f(E' \rightarrow E) = a \frac{E}{E'} \frac{e^{-\sqrt{\frac{a}{E}} E}}{1 - (1 + \sqrt{aE'}) e^{-\sqrt{aE'}}$ |
| Okrent (1955) | $f(E' \rightarrow E) = \frac{EC(E) e^{-e/T}}{\int EC(E) e^{-E/T} dE}$ |

TAB. 3: Expressões do kernel de espalhamento utilizadas no programa

Os resultados das combinações possíveis entre essas expressões são dados logo abaixo:

1. Espectro de fissão – Duderstadt / Kernel de Espalhamento – Nasjleti

$$k = 2,0912589$$

2. Espectro de fissão – Duderstadt / Kernel de Espalhamento – Okrent

$$k = 2,0936687$$

3. Espectro de fissão – JAERI / Kernel de Espalhamento – Nasjleti

$$k = 2,1196176$$

4. Espectro de fissão – JAERI / Kernel de Espalhamento – Okrent

$$k = 2,1098776$$

5.2 ESPECTRO DE NÊUTRONS

Para cada combinação de valores, o programa calculou 28.324 fluxos de nêutrons, ou seja, o fluxo para cada grupo. No entanto, não seria viável apresentar aqui esses valores. Para a melhor visualização dos resultados, utilizou-se o programa *Origin 6.0* para a confecção de um gráfico que mostrasse o comportamento do fluxo de nêutrons em relação à energia. Realizou-se essa operação com os fluxos obtidos em cada uma das quatro combinações de expressões da subseção anterior e se percebeu que não houve nenhuma modificação que fosse visível quando da plotagem do gráfico. Dessa forma, seguem quatro gráficos: o primeiro mostra o comportamento do fluxo em todo o intervalo de energia; o segundo mostra uma comparação entre o comportamento do fluxo e o comportamento da seção de choque de fissão, terceiro mostra um *zoom* dado ao segundo gráfico na

faixa de energia de ressonâncias e quarto gráfico mostra uma comparação entre o espectro de fissão e o fluxo de nêutrons. Todos os dados foram normalizados para melhor comparação.

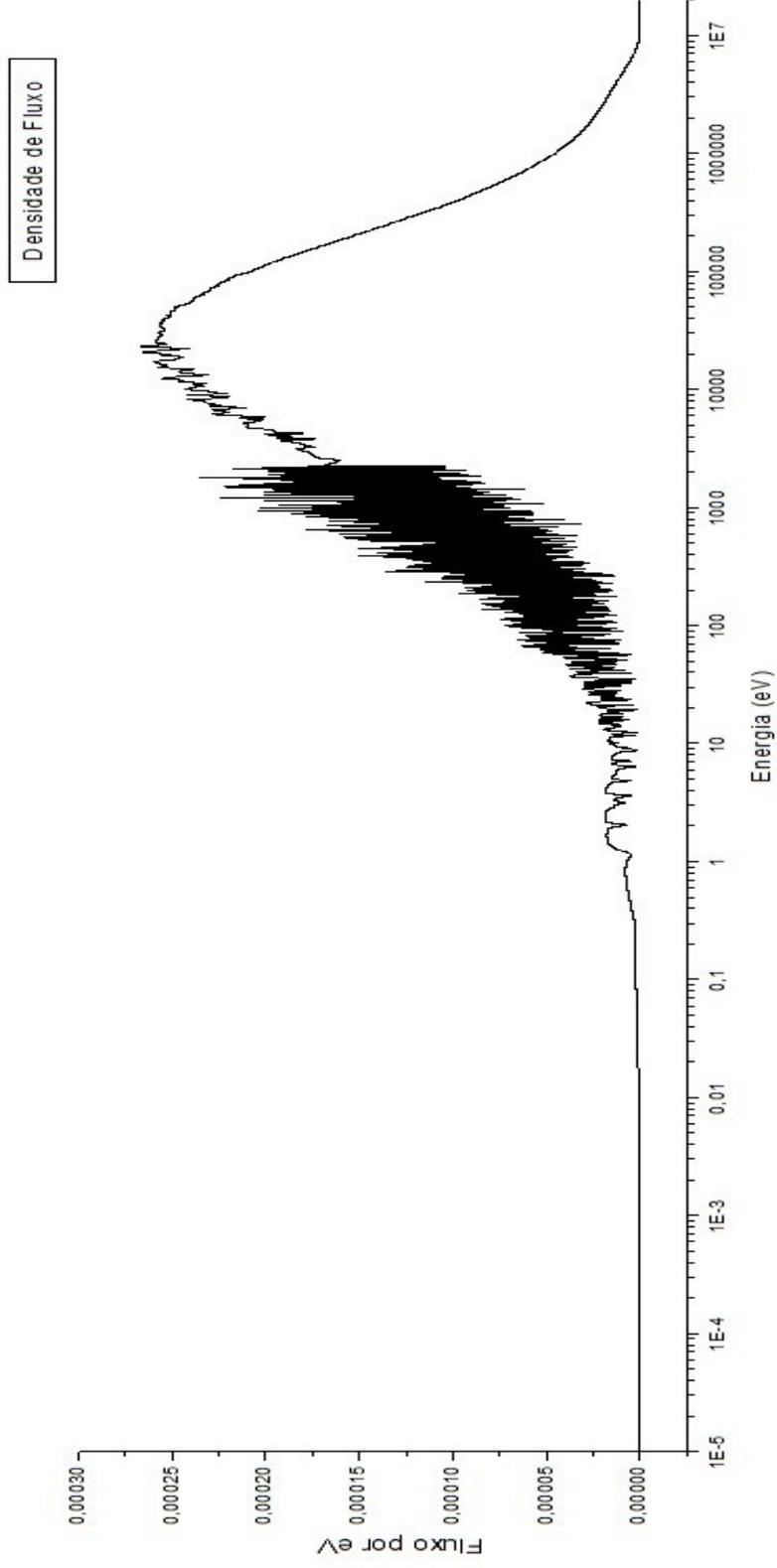


FIG. 8: Comportamento do fluxo de nêutrons por eV no sistema estudado

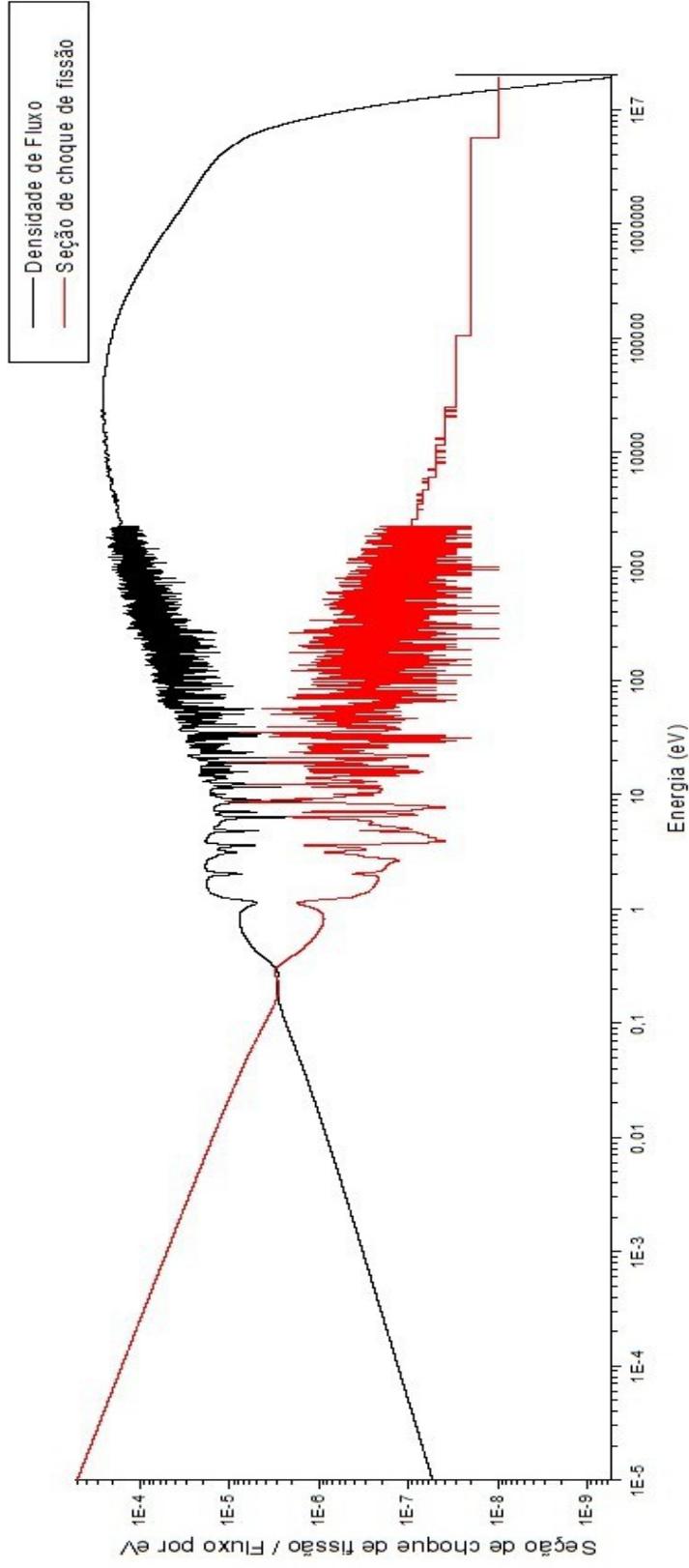


FIG. 9: Comparação entre o fluxo de nêutrons por eV e a seção de choque de fissão

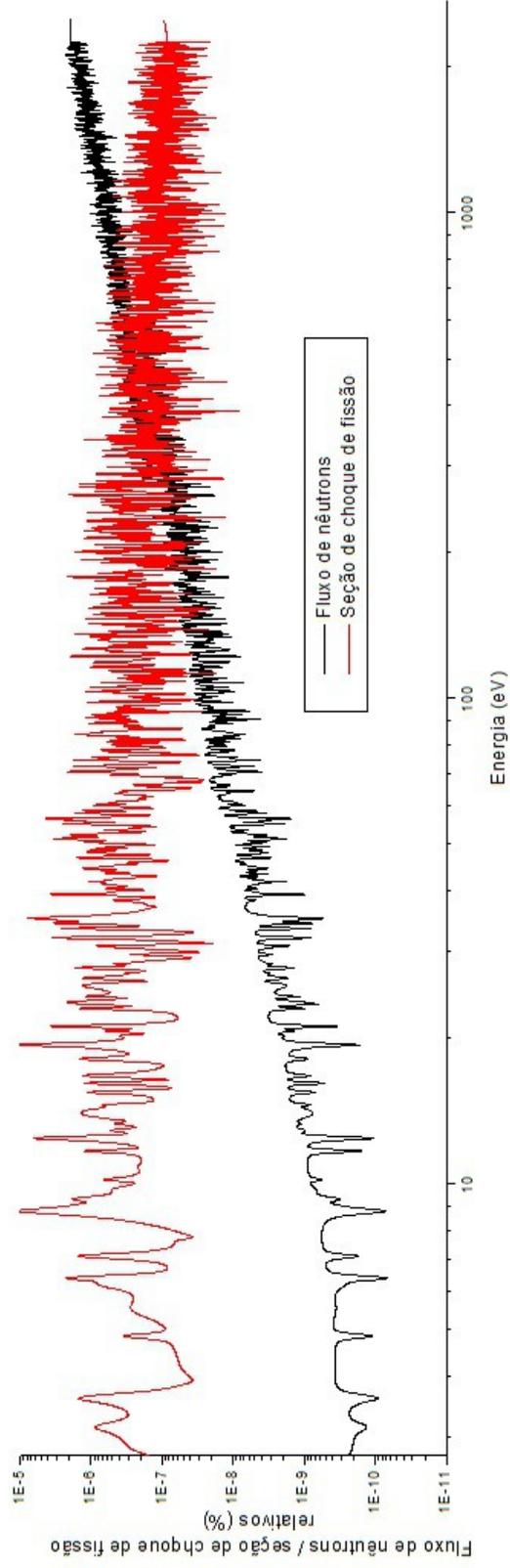


FIG. 10: Comparação entre o fluxo de nêutrons e a seção de choque de fissão na extensão das ressonâncias.

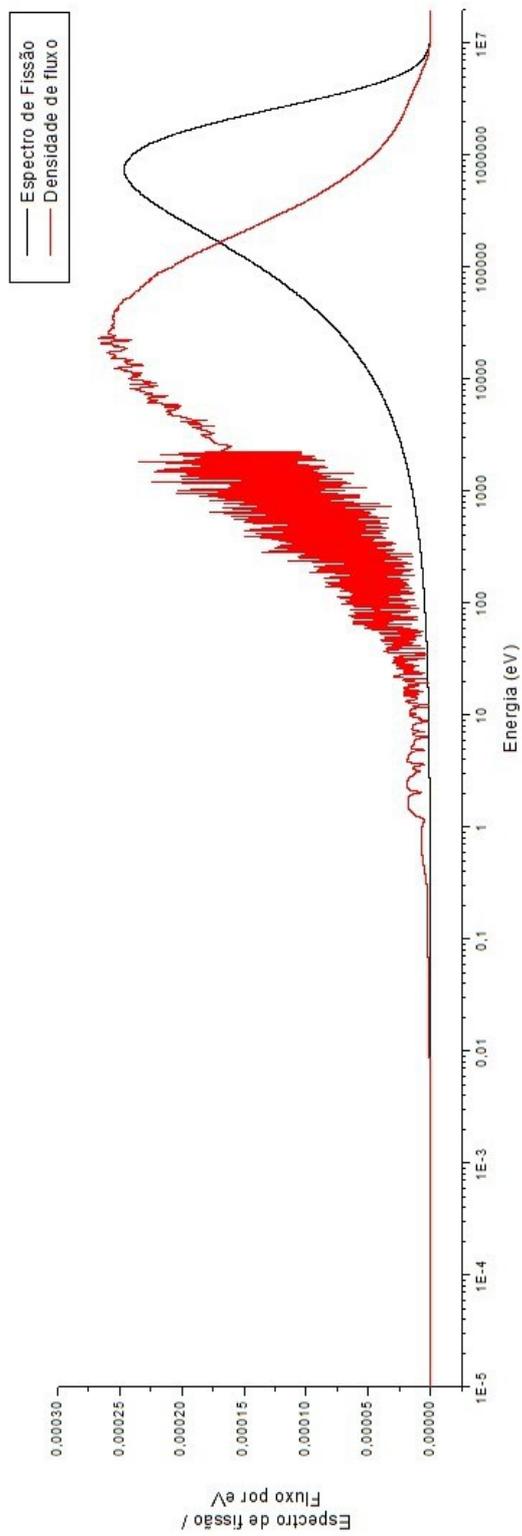


FIG.

11: Comparação do fluxo de nêutrons com o espectro de fissão

5.3 GERAÇÃO DAS CONSTANTES A GRUPOS LARGOS

A seguir, são mostradas as seções de choque colapsadas a 1 e 2 grupos.

- Seções de Choque colapsadas a 1 grupo:

| Fissão* | Fissão com número de nêutrons* | Espalhamento Inelástico* | Captura Radioativa* | Número de nêutrons emitidos por fissão ν |
|------------|--------------------------------|--------------------------|---------------------|--|
| σ_f | $\nu\sigma_f$ | σ_{in} | σ_c | |
| 1,3003 | 3,3785 | 3,0932 | 0,18788 | 2,5982 |

TAB. 4: Expressões do kernel de espalhamento utilizadas no programa

- Seções de choque colapsadas a 2 grupos:

| | Energia (MeV) | σ_c | σ_f | σ_{tr} * | ν | $\sigma_{1 \rightarrow 2}$ ** |
|---|---------------|------------|------------|-----------------|--------|-------------------------------|
| 1 | 1,35 - 20 | 0,0336 | 1,1502 | 8,483 | 2,8468 | 1,8902 |
| 2 | 0 - 1,35 | 0,2933 | 1,4030 | 10,613 | 2,4588 | |

TAB. 5: Seções de choque colapsadas a dois grupos.

* Seção de choque de transporte. **Seção de choque de transferência.

5.4 RAIOS E MASSA CRÍTICOS

Seguem abaixo os resultados para o raio crítico (R) e massa crítica (m) a 1 e 2 grupos.

- Raio e massa críticos a 1 grupo.

$$R = 8,39 \text{ cm}$$

$$m = 46,26 \text{ kg}$$

- Raio e massa críticos a 2 grupos.

$$R = 9,30 \text{ cm}$$

$$m = 63,0\text{kg}$$

6. ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Terminada a exposição dos resultados obtidos, resta analisarem-se os dados e verificar-se a validade do programa criado.

6.1 ANÁLISE DO FATOR DE MULTIPLICAÇÃO

É possível verificar-se na seção 5.1 que os quatro valores obtidos para o fator de multiplicação estão bem próximos, de modo que se obtém um valor médio de 2,1036057.

Ao se realizar um teste com o mesmo sistema no programa *Scale V*, encontra-se um fator de multiplicação de 2,29. Um teste realizado pelo método de Monte Carlo forneceu um fator de multiplicação de 2,26 para o sistema.

No entanto, quando se realiza a divisão $\frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a} = k_\infty$ o resultado obtido é de 2,27.

Assim, pode-se observar que quando se colapsam as seções de choque, os erros acabam compensando-se e o resultado para o fator de multiplicação é melhor que aquele encontrado pelo programa após os processos iterativos. Apesar da diferença entre o fator de multiplicação encontrado pelo programa, considera-se que este seja um resultado razoável para uma primeira tentativa.

6.2 ANÁLISE DO ESPECTRO DE NÊUTRONS

Pela análise do primeiro gráfico, que mostra apenas o fluxo de nêutrons, é possível observar-se grande compatibilidade do formato do espectro obtido com o sistema estudado. Como se trata de um sistema infinito com apenas urânio, não existe moderador e, portanto, os nêutros permanecem, em sua maioria, na região de altas energias, pois o principal processo de perda de energia seria o espalhamento inelástico. É exatamente isso o que mostra o gráfico: a região de baixas energias possui um fluxo bastante baixo e, conforme a energia aumenta, o fluxo também aumenta, mostrando que os nêutrons permanecem a altas energias. Além disso, é possível também se verificar perturbações na região que vai de cerca de 1 eV a 1 keV , exatamente a região de ressonâncias do urânio-235.

Os segundo e terceiro gráficos trazem uma comparação entre os comportamentos do fluxo de nêutrons e da seção de choque de fissão. O segundo gráfico mostra explicitamente que conforme a seção de choque de fissão diminui, o fluxo de nêutrons aumenta, ou seja, quando há fissão, os núcleos de urânio-235 absorvem mais nêutrons; portanto quanto maior a seção de choque de fissão, menor o fluxo de nêutrons. Isto é verificado de forma muito clara no terceiro gráfico, no qual há uma ampliação da região de ressonâncias: verifica-se que sempre que existe um pico na seção de choque de fissão, existe uma depressão no fluxo de nêutrons (fenômeno conhecido como autoblindagem energética), pela razão anteriormente explicada: mais nêutrons absorvidos, menos nêutrons para participar do fluxo.

O quarto gráfico mostra a comparação entre os comportamentos do espectro de fissão e a densidade de fluxo, ou seja, o fluxo por unidade de energia. O gráfico foi plotado com escalas logarítmicas nos dois eixos para melhor visualização e por isso o espectro de fissão não apresenta forma parecida com a da figura 3. No entanto, é possível verificar-se que o fluxo apresenta-se deslocado à esquerda do espectro de fissão, como esperado, já que não existe *upscattering* nessa faixa de energia e, portanto, a densidade de nêutrons com energias acima de 1 MeV não é alta, pois os nêutrons transferem-se somente para grupos de energias mais baixas.

Por fim, pode-se considerar que a geração de espectros pelo programa é realizada de forma satisfatória, pois os dados fornecidos para a geração do espectro acordam muito bem com as características do sistema, demonstrando, inclusive a existências da região de ressonâncias.

6.3. ANÁLISE DAS CONSTANTES A GRUPOS LARGOS E DOS RAIOS E MASSA CRÍTICOS

- Análise a 1 grupo de energia:

Para essa análise, utilizar-se-á a seguinte tabela, retirada do documento *The Physics of the Manhattan Project* (2011), em que se encontram constantes a um grupo, bem como o raio e a massa críticos, por meio da Equação da Difusão.

| Quantity | Unit | ²³⁵ U | ²³⁹ Pu | ²³³ U | ²³⁷ Np | ²⁴¹ Am |
|---------------------|-----------------------------------|------------------|-------------------|------------------|-------------------|-------------------|
| A | g/mol | 235.04 | 239.05 | 233.04 | 237.05 | 241.06 |
| ρ | g/cm ³ | 18.71 | 15.6 | 18.55 | 20.25 | 13.67 |
| σ_f | bn | 1.235 | 1.800 | 1.946 | 1.335 | 1.378 |
| σ_{el} | bn | 4.566 | 4.394 | 4.447 | 4.965 | 4.833 |
| ν | – | 2.637 | 3.172 | 2.755 | 2.81 | 2.5 |
| n | 10 ²² cm ⁻³ | 4.794 | 3.930 | 4.794 | 5.144 | 3.415 |
| $\lambda_{fission}$ | cm | 16.89 | 14.14 | 10.72 | 14.56 | 21.25 |
| $\lambda_{elastic}$ | cm | 4.57 | 5.79 | 4.69 | 3.92 | 6.06 |
| λ_{total} | cm | 3.60 | 4.11 | 3.26 | 3.09 | 4.71 |
| R_O | cm | 8.37 | 6.346 | 5.676 | 6.736 | 11.307 |
| M_O | kg | 45.9 | 16.7 | 14.2 | 25.92 | 82.8 |

TAB. 6: Resultados da literatura a um grupo, pela Difusão

Comparando-se com os resultados obtidos

| σ_f^* | $\nu\sigma_f^*$ | σ_{in}^* | σ_c^* | ν | R (cm) | m (kg) |
|--------------|-----------------|-----------------|--------------|--------|----------|----------|
| 1,3003 | 3,3785 | 3,0932 | 0,18788 | 2,5982 | 8,39 | 46,26 |

TAB. 7: Seções de choque colapsadas a um grupo fornecidas pelo programa

*valores em barn

percebe-se uma grande concordância dos resultados.

- Análise a 2 grupos de energia:

Para a análise a dois grupos, será utilizada a tabela proveniente da ANL-5800. Deveram-se à divisão dos grupos feita nessa tabela os valores de divisão dos grupos que foram escolhidos neste trabalho.

| | Energia (MeV) | σ_c | σ_f | σ_{tr} | ν | $\sigma_{2 \rightarrow 1}$ |
|---|---------------|------------|------------|---------------|-------|----------------------------|
| 1 | 0 - 1,35 | 0,28 | 1,44 | 7,2 | 2,5 | |
| 2 | 1,35 - 20 | 0,08 | 1,29 | 4,5 | 2,7 | 1,5 |

TAB. 8: Constantes a dois grupos provenientes da ANL-5800

Quando se compara tal tabela com os resultados obtidos

| | Energia (MeV) | σ_c | σ_f | σ_{tr} | ν | $\sigma_{1 \rightarrow 2}$ |
|---------------|---------------|------------|------------|---------------|--------|----------------------------|
| 1 | 0 - 1,35 | 0,2933 | 1,4030 | 10,613 | 2,4588 | |
| 2 | 1,35 - 20 | 0,0336 | 1,1502 | 8,483 | 2,8468 | 1,8902 |
| R (cm) | M (kg) | | | | | |
| 9,3 | 60 | | | | | |

TAB. 9: Seções de choque colapsadas a dois grupos fornecidas pelo programa

Percebe-se que os valores estão próximos, porém não tanto quanto os resultados a um grupo, sendo que as maiores diferenças estão na seção de choque de transporte (σ_{tr}) e na seção de choque de transferência ($\sigma_{1 \rightarrow 2}$).

Além disso, com essas constantes a grupos, largos, o valor do raio crítico está bastante diferente daquele encontrado com as constantes a 1 grupo e, conseqüentemente, a massa também se desvia muito, já que é proporcional ao cubo do raio.

Dessa forma, é possível inferir-se que a seção de choque de transporte, representada por

$$\sigma_{tr} = \sigma_t - \frac{2}{3A} \sigma_{el}$$

não representou bem tal seção de choque para todas as energias. Isto deve-se ao fato de que para energias mais altas, o espalhamento passa a não ser isotrópico e essa expressão passa a não representar de maneira satisfatória a seção de choque de transporte.

Além do mais, também pode-se perceber que a fuga não tem efeitos significativos para a geração das constantes, pois no cálculo a um grupo, os resultados estão bastante próximos.

7 COMENTÁRIOS FINAIS

Por fim, é possível perceber-se que o programa construído consegue realizar de maneira satisfatória os objetivos a que se propôs a um grupo, pois consegue calcular com determinada precisão o coeficiente de criticalidade, o raio e a massa críticos e consegue fornecer formatos de espectros muito bons quando comparados à literatura existentes. Já a dois grupos, o programa apresenta dificuldades em representar bem a seção de choque de transporte e melhorias nesse aspecto deverão ser realizadas para a continuação do projeto.

Os problemas encontrados podem também estar inerentes aos próprios dados utilizados, como por exemplo, não serem encontrados facilmente e com precisão os números de nêutrons emitidos por fissão em função da energia; imprecisões nos próprios dados nucleares básicos advindos da ENDF/B, ou seja, nas seções de choque básicas utilizadas

Por se tratar de um passo inicial, no entanto, considera-se que houve bastante êxito na elaboração deste projeto e que ele poderá ser utilizado como base para programas futuros que sejam capazes de fornecer os mesmos dados e outros mais que possam ser úteis em sistemas tanto homogêneos quanto heterogêneos. Dessa forma, será possível a criação de programas que gerem seções de choque a grupos largos para vários tipos de meio, dependendo do tipo de sistema utilizado, trazendo mais independências aos estudos na área nuclear no Brasil.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

EVALUATED NUCLEAR DATA FILE. Disponível em <<<http://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>>>. Acesso em 25 de março de 2012.

FELD, B.T., FESHBACH, H., GOLDBERGER, M.L. **NYO-636 Final Report of the Fast Neutron Data Project. (NDA) AERE-T/R-1500 Mrs. M. E. Mandl: Multigroup Theory with an Application to the Inelastic Scattering in Uranium.** Oak Ridge, United States Atomic Energy Commission, 1951. Disponível em <<<http://www.worldcat.org/title/final-report-of-the-fast-neutron-data-project/oclc/6758993?refer=d&ht=edition>>> . Acesso em 08 de janeiro de 2013.

HENRY, A.F. **Nuclear Reactor Analysis**, The MIT Press, 1975.

LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY. Disponível em << http://www.lanl.gov/history/gallery.php?story_id=32&page_num=1&row_num=0&photo_id=268>> . Acesso em 15 de outubro de 2012.

L.P.G. DE ASSIS, B. M. SANTOS, DUARTE, S. B. **Simultaneous multiparticle emission from compound nuclei in evaporation process**, In: XXXIV EDITION OF THE BRAZILIAN WORKSHOP ON NUCLEAR PHYSICS, 5-10 JUNE 2011. Disponível em <<http://pos.sissa.it/archive/conference/142/144/XXXIV%20BWNP_144.pdf>>, Acesso em 17 de junho de 2012.

GARCIA, M.. **Godiva Test Plan for Godiva Move from LANL TA-18 to Nevada Test Site Device Assembly Facility.** Disponível em <<<https://e-reports-ext.llnl.gov/pdf/323286.pdf>>> Acesso em 04 de fevereiro de 2013.

NASJLETI, E., **Difusion of Neutrons in a Heavy Elements Medium and Application to the Multigroup Diffusion Theory, Project 2505.** The Chrysler Corp. Detroit, Michigan, 1957.

OKRENT, D., R. AVERY, HUMMEL H.H., **Proc. Int. Conf. Geneva on Peaceful Application of Atomic Energy**, Vol 5, pg. 357, 1955.

WEISSKOPF, V.F. **Statistics and Nuclear Reaction.** Physical Review, vol. 52, p. 295-303, 1937.