Instituto de Física
Universidade de São Paulo

Esquemas de Acoplamento Nuclear por Espectroscopia Gama

SBI-IFUSP
305M810T2697

Vito Roberto Vanin

Tese de Livre-Docência

1997

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex.1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2697
INSTITUTO DE FÍSICA

À

minha jovem filha Carmen

e aos meus pais,

dedico este trabalho

de meus tempos maduros.

RESUMO

Descrevemos como a Espectroscopia Gama utiliza detetores e dispositivos eletrônicos para observar a radiação eletromagnética proveniente das transições do núcleo atômico, com vistas a determinação da intensidade e energia das transições. Apresentamos métodos estatísticos de determinação de eficiência e calibração em energia dos sistemas detetores. São descritos os modos normais nucleares básicos, coletivos e de partícula, exemplificados com os espectros do ^{102}Ru; ^{57}Ni; ^{101}Rh e ^{164}Ho. São relatados experimentos de espectroscopia gama de alguns núcleos transicionais: ^{102}Rh; ^{189}Tl; ^{218}Ra e ^{220}Ac, discutindo-se os espectros obtidos.

ABSTRACT

We describe how detectors and electronic devices are used in gamma-ray spectroscopy to observe the electromagnetic radiation from the atomic nucleus, aiming the determination of transition intensity and energy. We present the statistical methods for the efficiency and energy calibrations of detector systems. The nuclear normal modes, related to both the collective and single-particle degrees of freedom, are described and exemplified with the spectra from ^{102}Ru; ^{57}Ni; ^{101}Rh and ^{164}Ho. Gamma-ray spectroscopy experiments on: ^{102}Rh; ^{189}Tl; ^{218}Ra and ^{220}Ac, are reported and their spectra discussed.

AGRADECIMENTOS

O primeiro muito obrigado vai àqueles que tornaram possível este trabalho, pela sua contribuição para o desenvolvimento contínuo do Laboratório do Acelerador Linear ao longo da última década, tanto docentes: Iuda D. Goldman vel Lejbman; Paulo R. Pascholati; Jiro Takahashi; Yamato Miyao; J. Max Cohenca; Philippe Gouffon; Marcos N. Martins; Otaviano A. M. Helene; Manoel T. F. Cruz; João D.T. Arruda Neto e Sílvio B. Herdade, quanto funcionários técnicos: Alfredo L. Bonini; Odair G. Martins; Juarez Arruda Neto; Carlos H. Quinarelli; Eduardo Monteiro; Renato C. Neves; David Bärg F°; Reinaldo D. Pinto; Alexandre Malafronte; Antonio dos Reis; M. Cristina Rosa; Antonio C. Tromba e Marcelo Lucena, e funcionários administrativos: M. Lourdes Morais, Vera Canteiro e Inês F. Souza.

Um agradecimento muito especial aos estudantes do Laboratório do Acelerador Linear, que animam a vida de nosso Laboratório e foram os responsáveis diretos por vários dos trabalhos citados nesta Tese, em particular aos meus ex-estudantes de mestrado e Iniciação Científica: Regina A.A.M. Oliveira, M. Célia P. Isaac, Ruy M. Castro, Rogério Tramontano, Maurício Moralles e Rodrigo Oliveira.

Preciso agradecer também a todos os colegas, docentes e funcionários, do Instituto de Física, com quem partilhei aulas, estudo, seminários, discussões, burocracia e tudo o mais que constitui a vida na Universidade. Não vou nominá-los, para evitar esquecimentos injustificáveis. Um obrigado especial àquelas que me auxiliaram na movimentada época da Comissão de Coordenação de Licenciatura, Maria Regina D. Kawamura, e da Comissao de Graduação, Nobuko Ueta.

Esquemas de Acoplamento Nuclear por Espectroscopia Gama

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO **1**

2. MÉTODO EXPERIMENTAL **3**

2.1. MEDIDAS DE ESPECTROSCOPIA SIMPLES 3
2.2. MEDIDAS DE ESPECTROSCOPIA DE COINCIDÊNCIA GAMA-GAMA 4
2.3. SISTEMAS MULTIDETETORES PARA COINCIDÊNCIA GAMAGAMA 5
2.4. UM MULTIDETETOR DE ATIVIDADE RESIDUAL 8

3. TRATAMENTO DOS DADOS EXPERIMENTAIS. **15**

3.1. O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS 15
3.1.1. Ajuste de funções lineares. *16*
3.1.2. Fórmula matricial de propagação de covariância. *21*
3.1.3. Ajuste de funções não lineares nos parâmetros. *23*
3.2. CALIBRAÇÃO DE EFICIÊNCIA 28
3.2.1. Geral *28*
3.2.2. Extensão da faixa de energia da calibração absoluta. *29*
3.2.3. Calibração de eficiência com fontes extensas ou para baixas energias *33*
3.3. DETERMINAÇÃO DAS ENERGIAS DOS RAIOS GAMA 33
3.3.1. Calibração de energia com um único espectro. *35*
3.3.2. Interpolando valores em uma calibração de energia com um único espectro. *38*
3.3.3. Calibração de energia com vários espectros. *38*
3.3.4. Interpolando valores na calibração de energia com vários espectros. *40*
3.3.5. Um teste de consistência - as relações entre gamas da cascata *42*
3.4. AJUSTE DE MATRIZES DE COINCIDÊNCIA 43

4. MODOS BÁSICOS DE ACOPLAMENTO. **48**

4.1. VIBRAÇÃO 48
4.2. EXEMPLIFICANDO A VIBRAÇÃO COLETIVA COM O ^{102}RU. 51
4.3. ACOPLAMENTO PARTÍCULA VIBRAÇÃO- COEXISTÊNCIA DE VIBRADORES 54
4.4. O EFEITO DO EMPARELHAMENTO 56
4.5. ACOPLAMENTO QUASE-PARTÍCULA — VIBRAÇÃO. 59
4.6. O MODELO ROTACIONAL 61
4.7. HAMILTONIANO DE ROTAÇÃO E FUNÇÕES DE ONDA 63
4.7.1. Forma geral *63*
4.7.2. A estrutura intrínseca *67*
4.8. MODELO DE PARTÍCULA ÚNICA DO NÚCLEO ÍMPAR-ÍMPAR DEFORMADO 68
4.9. PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO ELETROMAGNÉTICA EM NÚCLEOS DEFORMADOS 69
4.9.1. Geral. *69*
4.9.2. Probabilidade de transição de dipolo magnético, M1. ..... *71*
4.9.3. Probabilidade de transição de quadrupolo elétrico, E2. ..... *72*
4.9.4. Regras de intensidade *73*
4.10. EXEMPLO DE PROPRIEDADES ELETROMAGNETICAS EM NÚCLEOS DEFORMADOS 74

5. NÚCLEOS DE TRANSIÇÃO. 76

5.1. NEM ESFÉRICO NEM DEFORMADO. 76

5.1.1. Espectro de energia 78

5.1.2. Momentos magnéticos 79

5.1.3. Transições eletromagnéticas. 80

5.1.4. Configurações no modelo de núcleo deformado 81

5.1.5. Reunindo os resultados 81

5.2. OBLATO E PROLATO 82

5.3. OCTUPOLAR E QUADRUPOLAR 85

5.3.1. Estudo do ^{218}Ra. 85

5.3.2. O ^{220}Ac. 95

6. CONCLUSÃO 101

BIBLIOGRAFIA. 103

1. Introdução

A espectroscopia gama é um instrumento básico no estudo da estrutura nuclear. O espectro gama nuclear é discreto, refletindo diretamente a quantização da energia do núcleo, e a energia do fóton produzido na transição eletromagnética praticamente não depende do meio que o envolve. A radiação gama, atravessando a matéria, ou perde quantidades significativas de energia ou não perde nenhuma energia, de maneira que o caráter discreto do espectro é preservada na maioria das situações de medida.

A revolução dos anos 60 e 70 na espectroscopia gama ocorreu com a melhora de resolução em energia devida à introdução dos detetores de Ge(Li), aliada ao melhor desempenho dos dispositivos eletrônicos de tratamento de pulsos: amplificadores, discriminadores, conversores analógico-digitais, etc., e à possibilidade de tratamento adequado de quantidades maiores de dados por meio de computadores. A renovação das perspectivas experimentais ocorreu nos anos 90 pela utilização de sistemas multidetetores de gamas, acompanhada pela mudança menor mas significativa de detetores de Ge(Li) para detetores de HPGe e uma imensa ampliação da capacidade de computação, ainda pouco aproveitada. As novidades trazidas pelos multidetetores não se limitaram à observação das bandas superdeformadas, que levaram a mudanças importantes na teoria que descreve o núcleo em rotação rápida. Os núcleos transicionais, para os quais há cada vez mais dados, continuam a desafiar a imaginação dos que estudam a Estrutura Nuclear.

Embora localmente limitados em facilidades experimentais, os investimentos efetuados têm-nos permitido obter dados que contribuem à compreensão da estrutura nuclear e pretendemos continuar ampliando os recursos disponíveis. Estamos iniciando a implantação de um multidetetor especificamente para medidas de atividade residual no Laboratório do Acelerador Linear, que permite manter ativa a linha de experimentos de espectroscopia gama e o estudo dos esquemas de acoplamento nuclear.

Descrevo neste trabalho como utilizei a espectroscopia gama no estudo da estrutura nuclear, mais precisamente, no estudo dos esquemas básicos de acoplamento entre partículas e modos coletivos, onde surge significativamente a coexistência de formas no núcleo.

Inicialmente (capítulo 2), apresento uma descrição das linhas gerais do método experimental utilizado nos vários trabalhos que serão discutidos

aqui. As questões de controle do sistema de deteção, cada vez mais complexo, estão tratadas em alguma profundidade porque são necessárias à interpretação correta das medições. Detalhes específicos estão inseridos na discussão do experimento onde tais particularidades foram necessárias.

A seguir (capítulo 3), apresento o resultado concreto do estudo dos métodos estatísticos em física experimental quando aplicado à análise dos dados experimentais de espectroscopia. Os exemplos giram em torno da determinação da energia e intensidade de transições gama. A aplicação correta da Estatística no tratamento dos dados experimentais é trabalhosa, mas o formalismo matricial, apresentado com detalhe, permite lidar com situações complexas.

Passando às implicações teóricas da espectroscopia gama, no capítulo 4 estão apresentados os modos coletivos de vibração e rotação, o efeito da interação de emparelhamento e a interação entre as partículas e os modos coletivos, incluindo-se uma discussão das probabilidades de transição eletromagnética. Os exemplos foram obtidos dos experimentos de que participei, não sendo necessariamente os mais didáticos ou os melhores exemplos de ocorrência do modo nuclear em questão, mas são os de minha vivência. Procurei em cada caso simplificar e limitar a discussão, de maneira a acentuar a característica de estrutura nuclear que pretendi ilustrar.

O capítulo 5 encerra a apresentação dos esquemas de acoplamento com o estudo de núcleos francamente transicionais, onde a coexistência de forma ou uma quebra de simetria adicional é essencial na compreensão da sua estrutura. Sem dúvida é neste capítulo que estão os estudos experimentais mais interessantes e que correspondem, também, aos mais complexos de interpretar, de maneira que a discussão teórica limita-se aos aspectos fenomenológicos. A conclusão está no capítulo 6.

2. Método experimental

As técnicas de medição de fótons contrastam com as de partículas carregadas devido à diferença básica do mecanismo de interação. Um fóton de determinada energia, ao interagir com a matéria, pode ser removido do feixe ou ter sua energia alterada muito significativamente, mas não vai perdendo sua energia de maneira contínua, de modo que tudo o que é colocado entre fonte e detetor resulta principalmente na perda da informação da intensidade, mas não da energia. Os dados de espectroscopia gama têm, portanto, características qualitativamente distintas da espectroscopia por partículas.

As consequências dessa diferença vão muito longe. De um lado, é possível medir a energia de uma transição gama com extrema precisão, mas as intensidades são obtidas com precisão limitada a cerca de 1% da intensidade relativa. Por outro lado, os limites de atividade específica observáveis são muito baixos. Isso significa, em termos qualitativos, que mesmo uma quantidade muito pequena de material radioativo diluída numa amostra de grande massa pode ser observada por espectroscopia gama. Este fenômeno também traz uma contrapartida negativa, que é a onipresença de radiação de fundo nas medidas gama, particularmente incômoda nas medidas de fontes de baixa atividade e na procura de transições gama de pequena intensidade relativa, isto é, que representam eventos raros em um determinado decaimento.

2.1. Medidas de espectroscopia simples

O título acima identifica as medidas obtidas por sistemas que determinam simplesmente o espectro gama da fonte, consistindo normalmente em um único detetor de gama de HPGe com alta resolução em energia, amplificador e Conversor Analógico-Digital (CAD). A fonte é usualmente posicionada frente ao detetor, localizando-se o conjunto todo dentro de uma blindagem espessa. A deteção de fótons espalhados na blindagem resulta em uma contribuição, bastante intensa, à componente contínua do espectro na região de baixa energia, sendo conveniente algum tipo de colimação para reduzi-lo. A figura 1 apresenta uma seção transversal do sistema utilizado pela primeira vez na medição do espectro gama do

^{101}Rh [Va84,Va85]. Este dispositivo de colimação em grande ângulo permite redução apreciável desse fenômeno de deteção dos fótons espalhados e foi utilizado em outras medidas [Pa87, Pa88, Ga95].

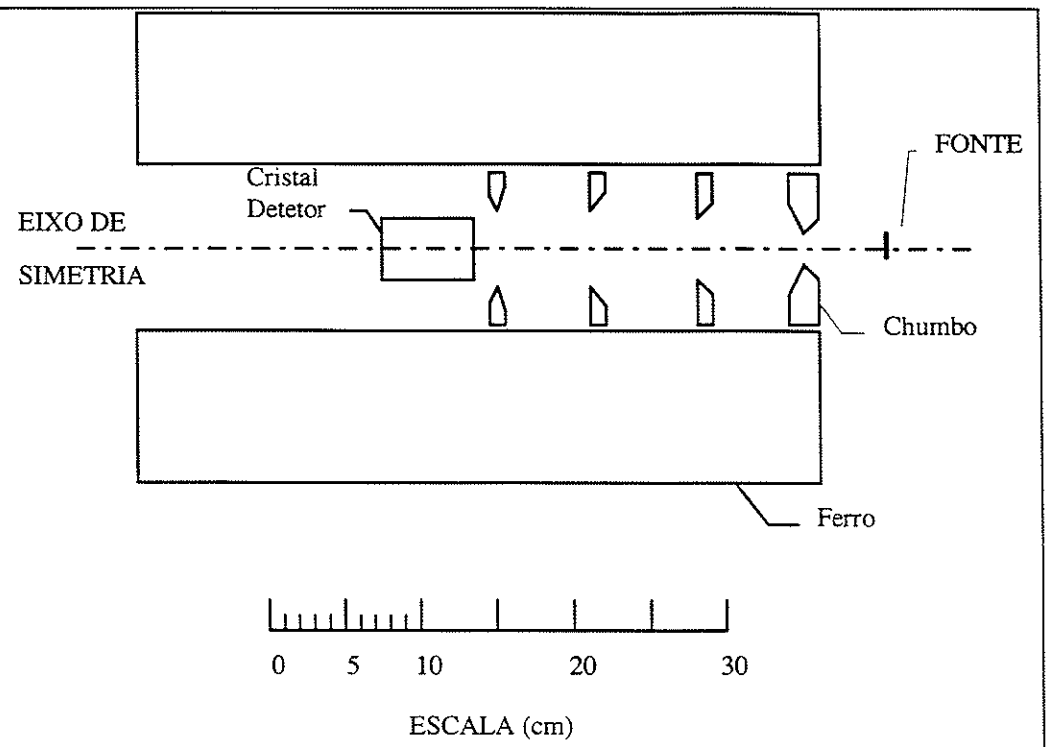


Figura 1. Seção transversal do sistema utilizado para reduzir a deteção de fótons espalhados pela blindagem.

2.2. Medidas de espectroscopia de coincidência gama-gama

A observação simultânea de duas transições gama provenientes da mesma cascata gama nuclear já exige alguma sofisticação, dada a necessidade de identificar a condição de coincidência da deteção e de propiciar a sincronia dos sinais eletrônicos obtidos. O conjunto de eventos de coincidência observados é chamado de espectro de coincidência gama-gama ou apenas espectro gama-gama.

O sistema de medição de coincidência gama-gama mais simples consiste em um par de detetores, cada um deles fornecendo sinais eletrônicos de energia e tempo. Um circuito de coincidência rápida, envolvendo um conversor de intervalo de tempo em amplitude de pulso, permite a identificação dos eventos de coincidência, obtendo-se resolução

temporal em torno de 10 ns para um par de detetores de HPGe. Os sinais de energia de ambos os detetores são digitalizados por CADs cujas portas são controladas a partir dos sinais lógicos do circuito de coincidência rápida, associados à observação do evento na região do pico de tempo (coincidência total) ou fora dele (coincidência acidental). O interfaceamento dos CADs ao sistema de aquisição de dados é realizado por um dispositivo eletrônico desenvolvido no Laboratório do Acelerador Linear, denominado SINC-BIP, que está descrito em detalhes em [Va84], tendo sido utilizado em diversos experimentos [Va85, Sc87, ASc90, Mu88, Mu89, Ga92, Me94, Mo95, Ke95, Am97, Ca87] . Em resumo, o SINC-BIP efetua o diálogo com o sistema de aquisição e controla as portas lógicas dos CADs a partir dos sinais de coincidência total ou acidental, verificando o estado de ocupado ou conversão concluída dos CADs, de maneira a garantir que sejam adquiridos pelo computador apenas os eventos em que ambos os CADs converteram os sinais recebidos.

2.3. Sistemas multidetetores para coincidência gama-gama

Espectroscopia gama em linha, modernamente, está centrada em grandes e complexos multidetetores, sendo que os maiores adquirem eventos de coincidência tripla, quádrupla ou mesmo quíntupla. O sistema que utilizamos em nossos experimentos foi o *Chatêau de Cristal*, [Be85] no *Centre de Recherches Nucleaires* em Estrasburgo, França, cuja eficiência é máxima para a observação de coincidências entre pares de transições gama. O sistema consiste em um conjunto de 12 detetores de HPGe dotados de dispositivo anti-compton e um detetor de multiplicidade gama. Quatro dos detetores de HPGe estão dispostos a 90° em relação ao feixe, outros quatro a cerca de 30° e os demais a cerca de 150°, simetricamente de maneira que metade dos detetores fica acima do plano horizontal que contém o feixe e metade abaixo. O filtro de multiplicidade é composto por 38 cintiladores de BaF_2 de formato hexagonal (5 cm de aresta e 14 cm de altura) acoplados a fotomultiplicadoras, metade acima e a outra metade abaixo do plano horizontal, dispostos em coroas a alturas diferentes, ficando com a aparência de um castelo e daí derivando seu nome. Os detetores do filtro que ficam entre o alvo e os detetores de HPGe são perfurados de modo a fornecer janelas para a observação dos gamas. A figura 2 apresenta o esquema

eletrônico do filtro de multiplicidade e a figura 3, o arranjo eletrônico dos detetores de HPGe.

No esquema da figura 2, os pulsos de dinodo relativos à componente rápida de cintilação do BaF_2 são analisados por um discriminador de fração constante e ligados a um circuito OU e a um somador analógico. O somador analógico apresenta sua saída apenas quando o número de coincidências desejado é atingido, de maneira que é um sinal inadequado para marcação temporal. Assim, para preservar a marcação temporal, a saída do circuito OU é retardada, de maneira que a porta E possa gerar a saída correlacionada temporalmente à obtenção do sinal pelo primeiro dos detetores de BaF_2 que disparou com fótons da reação nuclear. Note que o circuito E exige que o sinal de validação, representado por V, preceda o sinal D', uma vez que o atraso imposto a D' é escolhido de maneira a tornar esta sequência temporal obrigatória. O sinal analógico obtido pelo somador analógico é digitalizado, bem como os sinais de energia das fotomultiplicadoras, obtidos dos pulsos

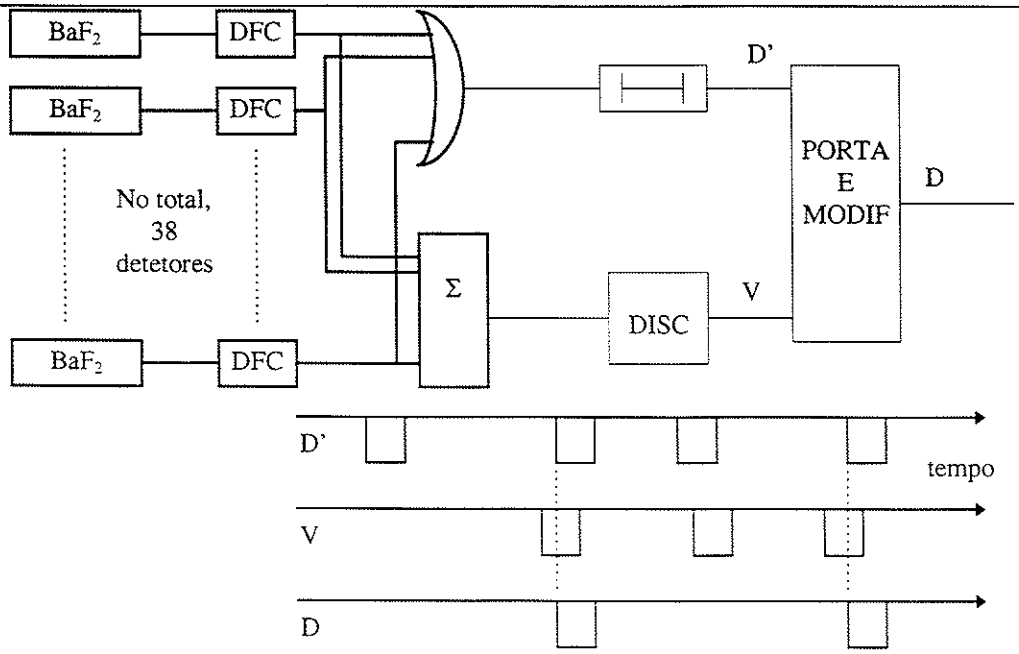


Figura 2. Esquema eletrônico do circuito lógico do detetor de multipli-cidade e diagrama temporal do circuito de disparo do Programador do Castelo de Cristal. DFC identifica o Discriminador de Fração Constante, Σ o somador analógico, DISC o discriminador e PORTA E MODIF, o circuito responsável pela implementação da operação lógica E entre os sinais D' e V dentro das características temporais apresentadas no diagrama.

de ânodo. A partir desses resultados digitalizados são construídos os dados "Multiplicidade" e "Energia Soma" que fazem parte do evento multiparamétrico fornecido pelo Castelo de Cristal.

A entrada dos fótons nos detetores de HPGe ocorre lateralmente, ou seja, os fótons penetram perpendicularmente ao eixo de simetria do cristal. Cada detetor de HPGe está envolvido por sete detetores de BaF_2, um disposto frontalmente e seis lateralmente, sendo um dos laterais perfurado para permitir a observação pelo HPGE dos fótons provenientes do alvo. No esquema da figura 3, observa-se que o conjunto dos detetores de BaF_2 gera o sinal de veto para o discriminador de fração constante. Cada detetor de HPGe gera um sinal G_i de duração ajustável, que indica a deteção de um fóton sem disparo do dispositivo anti-compton. O sinal ΣG_i é discriminado, escolhendo-se o limiar de maneira que pelo menos dois detetores precisam ter disparado para que o sinal de validação, V_G, seja gerado.

A aquisição é disparada pela ocorrência simultânea dos sinais D e V_G, que indicam que a multiplicidade gama observada pelo filtro é a desejada e que ao menos dois detetores de HPGe observaram fótons, respectivamente. O sinal D é utilizado para disparar o digitalizador de

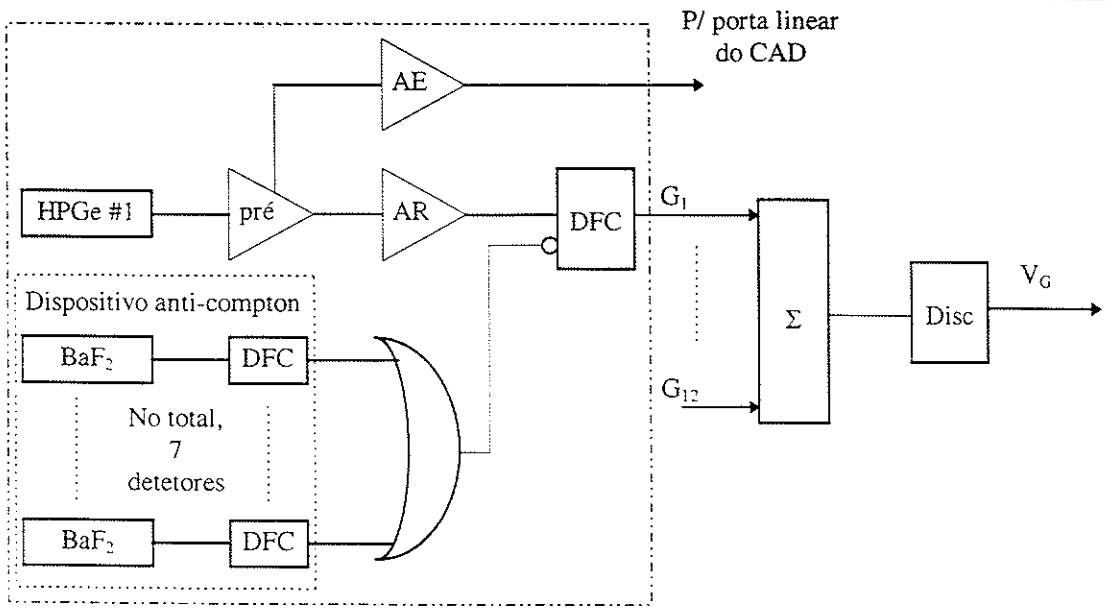


Figura 3. Esquema eletrônico do circuito lógico associado aos detetores de HPGE. O pré-amplificador está identificado como pré, os amplificadores rápido e de espectroscopia por AR e AE, respectivamente. DFC identifica o discriminador de Fração Constante, Σ o somador analógico, DISC o discriminador. O DFC que analisa o sinal rápido do HPGe dispõe de um controle de porta que é utilizado para vetar a saída quando um fóton é observado em algum dos detetores de BaF_2 que compõem o anti-compton.

diferença de tempo, sendo que os sinais G_i são utilizados para fornecer os impulsos de parada. O evento obtido é composto pelas informações:

- multiplicidade observada pelo filtro;
- soma das energias observadas pelos detetores do filtro;
- número do detetor de HPGe que observa um fóton e canal obtido no digitalizador de energia (tantos quantos forem obtidos) e
- número do detetor de HPGe que observa um fóton e canal obtido no digitalizador de tempo (tantos quantos forem obtidos).

A triagem dos eventos, o ajuste de ganho dos detetores de HPGe e a imposição de janelas de aceitação de multiplicidade, energia soma e intervalo de tempo, é efetuada fora de linha.

2.4. Um Multidetetor de atividade residual

A grande vantagem do sistema multidetetor é o aumento da eficiência de coincidência entre pares de transições gama, pelo fator $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$. Por exemplo, um sistema com 8 detetores é 28 vezes mais eficiente que um par de detetores para a observação de uma coincidência entre um par de transições em cascata, aproximando a eficiência de sistemas de coincidência da eficiência de sistemas de espectroscopia simples. Dessa maneira, é interessante transpor a idéia de multidetetor para a deteção de atividade residual. Há uma dificuldade adicional, que corresponde a gerar o gatilho a partir dos sinais fornecidos pelos próprios detetores utilizados. Nos sistemas em linha, o sinal que dispara o processo de aquisição (gatilho) origina-se externamente aos detetores de radiação gama de alta resolução. Como vimos no caso do *Chatêau de Cristal*, é o filtro de multiplicidade que dispara a medida de tempo nos detetores de HPGe por meio do sinal D (figura 2), gerado por um dos cintiladores do filtro quando a multiplicidade gama é a desejada. Um sistema para atividade residual, porém, não terá referência temporal externa e deverá disparar a partir dos mesmos sinais que comporão o evento básico, ou seja, tem que ser capaz de realizar um auto-disparo.

Para solucionar este problema de auto-disparo, que não tem contrapartida nos sistemas destinados a medidas em linha existentes, estamos desenvolvendo no Laboratório do Acelerador Linear um módulo de controle para até 8 detetores semicondutores [Va96a]. A figura 4 localiza o controlador em um sistema multidetetor de atividade residual.

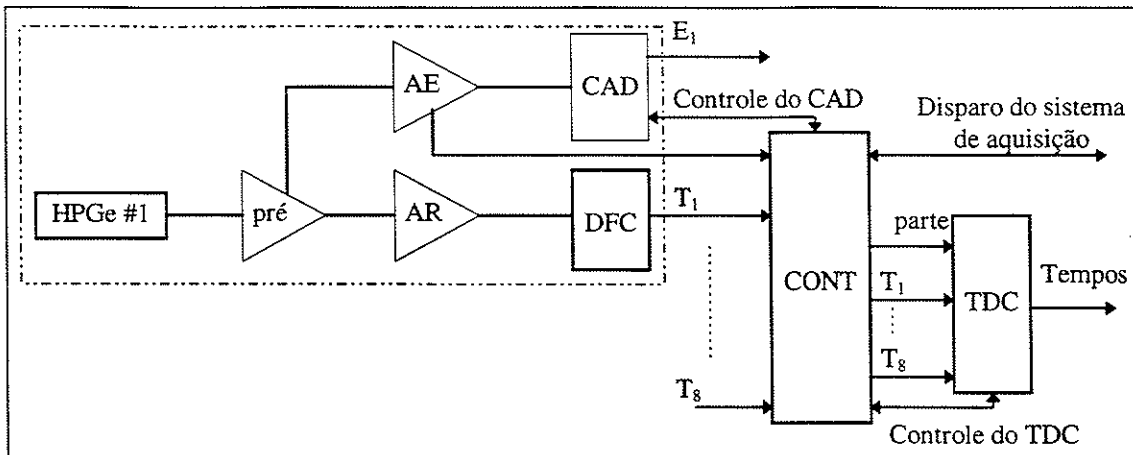


Figura 4. O controlador do multidetetor, representado pela caixa denominada CONT, controla o Conversor Analógico Digital, CAD, o digitalizador de diferença de tempo, TDC, e fornece o sinal de disparo do sistema de aquisição de dados. Os demais módulos são designados pelos mesmos nomes da figura 3.

Todo o controle efetuado depende da observação de uma coincidência gama-gama no conjunto dos detetores de HPGe. Utilizamos a técnica de geração de um gatilho de vários níveis. Caso o gatilho primário não seja validado nos níveis sucessivos, o controlador aborta o evento, retornando ao estado de espera todos os conversores. Os vários níveis correspondem a refinamentos sucessivos da condição de coincidência. Assim, o gatilho primário, G_1, é representado simplesmente pela observação de uma coincidência, conforme o circuito da figura 5. Note-se que o sinal de partida do TDC é sincronizado com o primeiro dos sinais T_i, de maneira a fornecer uma referência temporal.

O gatilho do segundo nível tem como critério a observação de dois sinais de energia, compondo adequadamente os sinais lógicos de ocupado e empilhamento provenientes dos amplificadores de espectroscopia. É neste nível do gatilho que o controlador abre as portas dos CADs. O terceiro nível envolve a verificação dos sinais de controle (ocupado e conversão concluída) dos conversores analógico-digitais. Após o tempo máximo de conversão dos digitalizadores, é verificado se pelo menos 2 CADs e 2 canais do TDC estão oferecendo seus resultados e, caso afirmativo, é gerado o gatilho de último nível, solicitando a aquisição de dados. A interface digital foi desenvolvida no padrão CAMAC, os circuitos integrados são comuns mas os circuitos lógicos ligados aos pulsos NIM rápidos foram montados a partir de transistores rápidos dada a pouca disponibilidade de *chips* ECL no mercado brasileiro. Todo o módulo (analógico e digital)

ocupa 8 *slots* CAMAC, devido ao grande número de conectores envolvidos. O sistema de aquisição foi desenvolvido na linguagem C em um microcomputador, acessando o CAMAC por meio de um controlador de bastidor com interface GPIB.

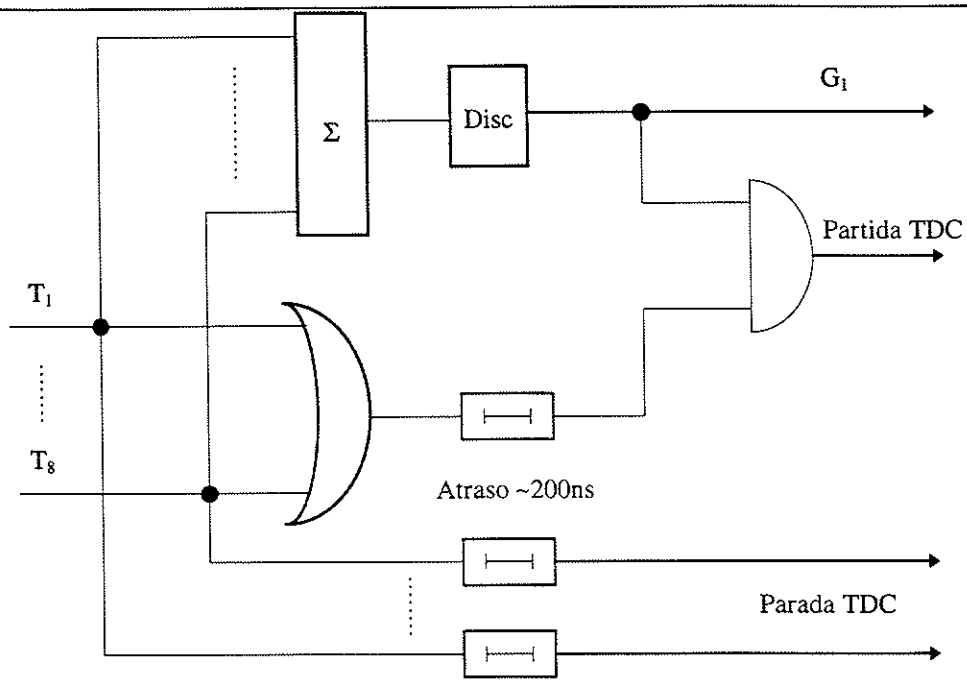


Figura 5. Geração do gatilho de primeiro nível, G_1, e dos sinais de partida e parada do Digitalizador de Diferença de Tempo. Os nomes e símbolos são os mesmos das figuras 2 a 4.

Verificamos os programas internos do controlador, os programas de aquisição e efetuamos diversas medidas de teste. Apresentamos aqui apenas os espectros de tempo obtidos em uma medida de uma fonte de ^{60}Co com um arranjo de 3 detetores, para ilustrar o mecanismo de auto-disparo e interpretar a forma dos espectros de tempo obtidos.

As figuras 6, 7 e 8 apresentam os espectros obtidos pelos 3 canais do TDC associados aos 3 detetores, que identificaremos pelos números 1, 2 e 3. Para simplificar a interpretação dos espectros, os sinais de dois dos três detetores foram atrasados, de maneira que o detetor 1 era o mais atrasado deles e o 3, o que fornecia mais rapidamente o sinal de tempo informando a deteção.

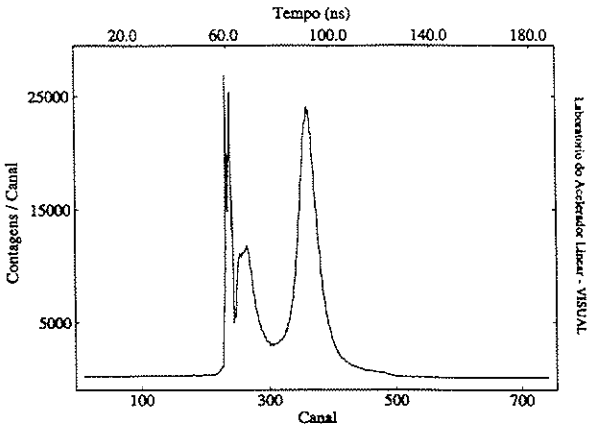


Figura 6. Espectro de tempo do canal do TDC ligado ao detetor 1, que é o mais atrasado dos três detetores, exibindo os dois picos largos de tempo característicos de coincidência Ge-Ge e o pico de auto-coincidência, que, porque este é o detetor mais atrasado, é devido principalmente a coincidências acidentais. Cada canal equivale a 250 ps.

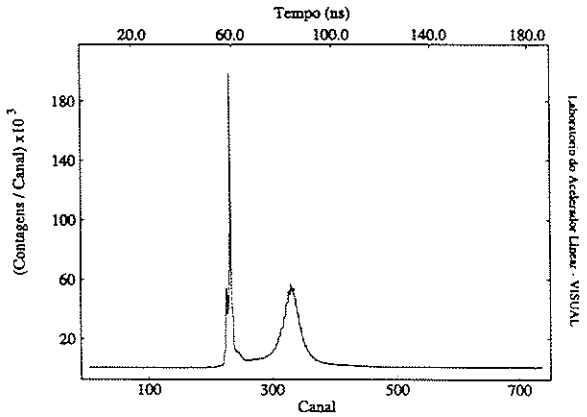


Figura 7. Espectro de tempo do canal do TDC ligado ao detetor 2, cujo sinal de tempo está atrasado numa situação intermediária, exibindo um pico largo de tempo, característico de coincidência Ge-Ge, e o pico de auto-coincidência, que é devido principalmente ao disparo das coincidências entre este detetor e o detetor número 1.

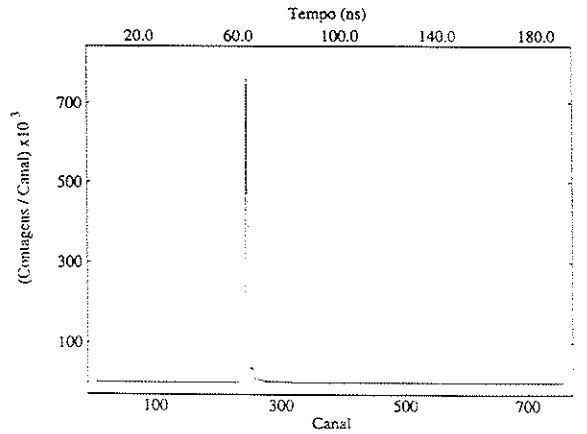


Figura 8. Espectro de tempo do canal do TDC ligado ao detetor 3, que é o mais adiantado dos três detetores, exibindo apenas o pico de auto-coincidência, correspondendo às coincidências entre este e cada um dos outros dois detetores. Como este é o detetor mais adiantado, sempre fornece o disparo.

O espectro da figura 6, correspondendo a pulsos de parada do TDC fornecidos pelo detetor 1, apresenta um pico estreito e dois picos largos. O pico mais à direita, com a aparência de um espectro de tempo usual, corresponde a eventos onde a partida do TDC foi dada pelo detetor 3. O pico do meio, também largo, corresponde a eventos onde a partida foi dada pelo detetor 2. Enfim, o pico estreito, da esquerda, é o pico de auto-coincidência, isto é, devido aos eventos onde o próprio detetor 1 forneceu a partida do TDC.

O espectro da figura 7, correspondendo a pulsos de parada fornecidos pelo detetor 2, apresenta um pico estreito e outro largo. O pico mais à direita, com a aparência de um espectro de tempo usual, corresponde a eventos onde a partida do TDC foi dada pelo detetor 3. O pico estreito, da esquerda, é o pico de auto-coincidência, isto é, eventos onde o próprio detetor 2 forneceu a partida. Neste caso, o pico de auto-coincidência é bem maior que o da figura 6, porque o sinal de tempo deste detetor precede o do detetor 1, gerando o sinal de partida quase toda vez que uma coincidência entre os detetores 1 e 2 é observada.

Finalmente, o espectro da figura 8, correspondendo a pulsos de parada do TDC fornecidos pelo detetor 3, apresenta apenas um pico estreito e alto, que é o pico de auto-coincidência. Como o detetor 3 é o que gera o sinal de tempo mais cedo, ele fornece quase sempre o sinal de partida.

A discussão acima centrou-se no fato de, para eventos simultâneos, o detetor 3 sinalizar antes do 2 que, por sua vez, sinaliza antes do 1, o que deveu-se a atrasos impostos aos pulsos de saída dos discriminadores dos detetores. É evidente que na discussão acima faltou levar em conta as coincidências acidentais, de maneira que há eventos que não seguem a relação temporal esperada. Em particular, o pico de auto-coincidência do detetor 1, o mais atrasado, é devido basicamente a acidentais. Também eventos à direita do pico de auto-coincidência na figura 8, que não são visíveis na escala da figura, mas existem, são coincidências acidentais.

As figuras 9, 10 e 11 correspondem aos espectros de tempo relativos às coincidências entre os detetores 2 e 1; 3 e 1; 3 e 2, respectivamente, todos sem qualquer seleção em energia. Tais espectros correspondem simplesmente aos espectros das diferenças dos valores das conversões nos dois canais correspondentes do TDC.

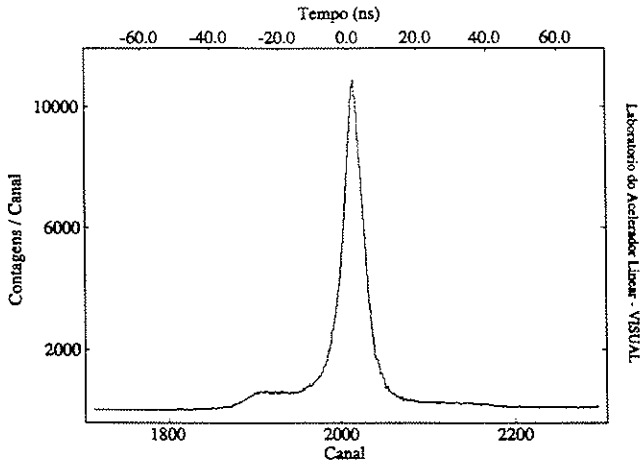


Figura 9. Espectro de diferença de tempo entre os detetores 2 e 1, exibindo o pico largo de tempo, característico de coincidência Ge-Ge onde estão presentes eventos de coincidência associados a todas as energias.

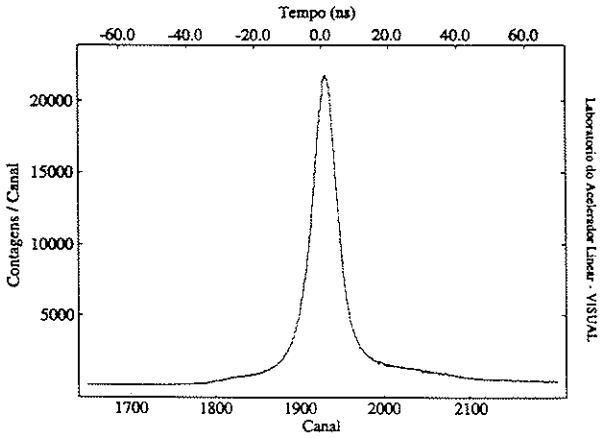


Figura 10. Espectro de diferença de tempo entre os detetores 3 e 1, exibindo o pico largo de tempo, característico de coincidência Ge-Ge onde estão presentes eventos de coincidência associados a todas as energias.

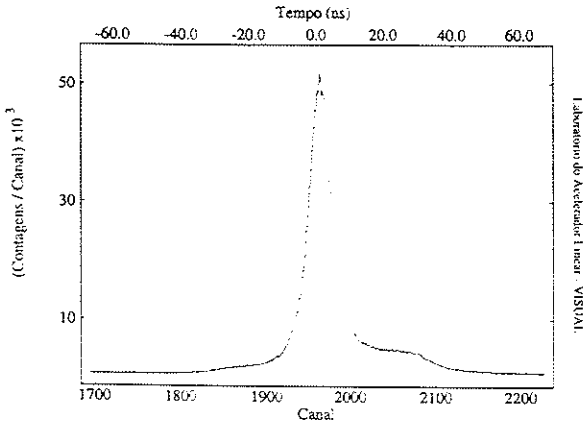


Figura 11. Espectro de diferença de tempo entre os detetores 3 e 2, exibindo o pico largo de tempo, característico de coincidência Ge-Ge onde estão presentes eventos de coincidência associados a todas as energias.

As figuras 12 e 13 apresentam o espectro de tempo das coincidências entre os detetores 3 e 2, mas com diferentes seleções nos parâmetros de energia gama. A figura 12 é um detalhe da figura 11, onde o espectro de tempo foi obtido sem qualquer seleção dos eventos em energia. A figura 13 corresponde à parcela dos eventos contidos no espectro da figura 12, mas onde as energias gama foram selecionadas de maneira a corresponderem às das transições gama do ^{60}Co. É evidente o grande ganho obtido na resolução em tempo quando reduz-se a faixa de energia analisada.

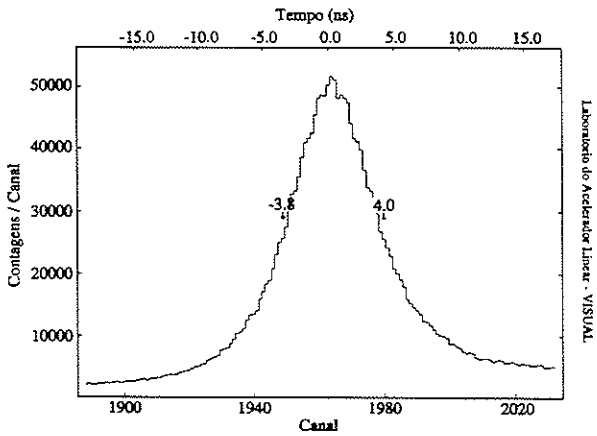


Figura 12. Detalhe do espectro de diferença de tempo entre os detetores 3 e 2, para comparação com a próxima figura.

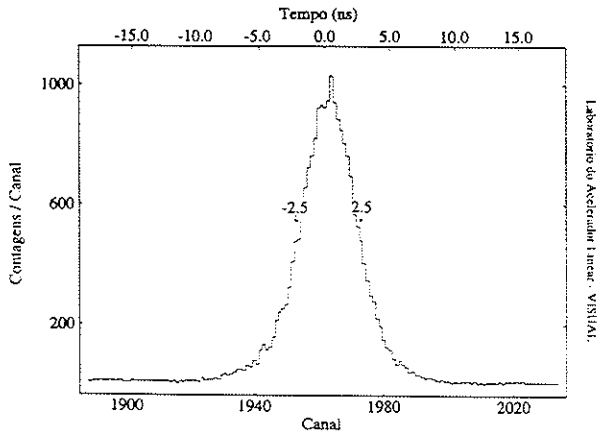


Figura 13. Detalhe do espectro de diferença de tempo entre os detetores 1 e 2, mas exigindo que as energias observadas nos detetores fossem as dos gamas de 1173 e 1332 keV do ^{60}Co. A melhora de resolução temporal é muito significativa, o que é característico da diminuição da faixa de energia analisada.

Dos testes efetuados, concluímos que o circuito desenvolvido resolve o problema do auto-disparo de um sistema multidetetor de coincidências gama-gama para atividade residual.

3. Tratamento dos dados experimentais.

Espectroscopia gama por atividade residual, onde dominam espectros com poucas linhas observadas, caracteriza-se pela precisão em energia obtida, por grande sensibilidade e pela dificuldade em obter boas determinações de intensidade. Na espectroscopia gama em linha, a complexidade dos espectros domina o panorama. Em todas estas situações, a utilização do método dos mínimos quadrados permite o melhor aproveitamento possível dos dados. Neste capítulo, primeiro apresentaremos o método dos mínimos quadrados em toda sua generalidade e no formalismo matricial, o mais adequado para sua utilização como espero que fique claro na sequência, onde várias aplicações à espectroscopia γ serão apresentadas.

3.1. O Método dos mínimos quadrados

A teoria é desenvolvida com toda a generalidade no tratado clássico de M. Kendall e A. Stuart [Ke79]. Uma discussão mais limitada aos usos típicos da Física pode ser encontrada no livro de Eadie et al. [Ea71]. Este assunto é introduzido com o formalismo mais simples na disciplina de graduação [He91] e é o assunto que tratamos em profundidade na disciplina de pós-graduação [Va96]. Um resumo, no que se refere ao ajuste de funções lineares nos parâmetros, pode ser encontrado no apêndice de uma publicação [Va97]. Nesta seção, apresentaremos os fundamentos teóricos e a realização prática do Método dos Mínimos Quadrados, que designaremos daqui para frente pela sigla MMQ, em algum detalhe, desde que recorreremos a ele com frequência neste capítulo.

Os algoritmos básicos relacionados ao MMQ são bem conhecidos, mas frequentemente comportam-se mal quando aplicados ao ajuste de certas funções. Escolhemos, então, algoritmos para a implementação que asseguram precisão numérica, por meio de decomposição de matrizes e transformações que fatoram as dimensões físicas dos elementos das matrizes envolvidas. Também é trabalhoso incluir covariâncias entre os dados experimentais, qualquer que seja a situação tratada. A fatoração da matriz de covariância em matrizes de correlação e de desvios padrões contribui para que o tempo de computação não seja ampliado quando não existirem correlações entre os dados, mantendo a generalidade sem criar complicações desnecessárias.

O programa de computação foi orientado a objetos pela necessidade de desenvolvimento gradual de uma biblioteca, desde que o aprendizado com os algoritmos e na definição da interface com os clientes sugere continuamente modificações, mais fáceis dentro desse paradigma. A biblioteca está sendo implementada em C++, que é a linguagem orientada a objetos mais utilizada atualmente em projetos de grande porte, existindo muitos compiladores de boa qualidade e baratos. A capacidade de alocação dinâmica de memória dessa linguagem viabiliza a utilização de um mesmo programa tanto para muitos dados quanto para poucos.

3.1.1. Ajuste de funções lineares.

Teoria

Suponha que uma grandeza física possa ser representada pela função $f(\vec{x},\vec{A})$, onde $\vec{x}$ representa um vetor com m variáveis independentes e f é uma função linear de μ parâmetros representados pelo vetor $\vec{A}=(a_1,a_2,\ldots,a_\mu)$. Suponhamos que a grandeza tenha sido medida para N valores da variável independente, obtendo-se

$$y_i = f(\vec{x}_i,\vec{A}_0)+\varepsilon_i, \quad i=1,\ 2,\ \ldots\ N,$$

onde $\vec{A}_0$ é o valor verdadeiro (e desconhecido!) do vetor de parâmetros, e ε_i é o erro experimental de y_i que, como $\vec{A}_0$, permanecerá desconhecido. Outra forma de escrever esta equação é

$$y_i = \sum_{\eta=1}^{\mu} a_{\eta 0}\, h_\eta(x_i) \ +\varepsilon_i \quad ,$$

deixando explícita a linearidade nos $a_{\eta 0}$. Os dados experimentais e os parâmetros seguem, portanto, a seguinte relação funcional:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1(x_1) & h_2(x_1) & \cdots & h_\mu(x_1) \\ h_1(x_2) & h_2(x_2) & & h_\mu(x_2) \\ \vdots & & & \\ \vdots & & & \\ h_1(x_N) & h_2(x_N) & & h_\mu(x_N) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{10} \\ a_{20} \\ \vdots \\ a_{\mu 0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{pmatrix}$$

ou

$$\vec{Y} = \mathbf{X}\vec{A}_0 + \vec{\varepsilon} \ , \tag{1}$$

onde $\vec{Y}$ é um vetor de dimensão $(N \times 1)$, $\vec{A}_0$ é o vetor de parâmetros verdadeiros com dimensão $(\mu \times 1)$, $\vec{\varepsilon}$ é o vetor de erros $(N \times 1)$, e $\mathbf{X}$ é a matriz de planejamento $(N \times \mu)$. Esta matriz, cujos elementos são definidos por

$$X_{i\nu} = \left.\frac{\partial f(x_i, \vec{A})}{\partial a_\nu}\right|_{\vec{A}_0} = h_\nu(x_i) \quad , \tag{2}$$

não depende do valor dos parâmetros verdadeiros, $\vec{A}_0$, nem dos dados experimentais, e contém toda a dependência em $\vec{x}$ do modelo. O erro $\vec{\varepsilon}$ na equação (1) refere-se à diferença entre o dado experimental e o valor verdadeiro de uma grandeza. Nunca é demais lembrar que apenas a esperança matemática deste erro, ou de potências dele, pode ser estimada.

As suposições necessárias para calcular a estimativa de mínimos quadrados de $\vec{A}_0$ são: os dados não são tendenciosos,

$$\langle \varepsilon_i \rangle = 0 \ , \tag{3}$$

e a matriz de covariâncias, $\mathbf{V}$, definida por

$$V_{ij} = \langle \varepsilon_i \cdot \varepsilon_j \rangle \ , \tag{4}$$

é conhecida. O símbolo $\langle \ \rangle$ representa o valor esperado da grandeza. A equação (3) implica na ausência de erros sistemáticos nas observações. A equação (4) define, para $i = j$, a variância de y_i, e para $i \neq j$, a covariância entre y_i e y_j,

$$< \varepsilon_i^{\,2} > = \mathrm{cov}(y_i, y_i) = \sigma_i^{\,2}$$
$$< \varepsilon_i \varepsilon_j > = \mathrm{cov}(y_i, y_j)$$

O conjunto das variâncias e covariâncias permite constituir a matriz de variâncias,

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \sigma_1^{\,2} & \mathrm{cov}(y_1, y_2) & \cdots & \mathrm{cov}(y_1, y_N) \\ \mathrm{cov}(y_1, y_2) & \sigma_2^{\,2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathrm{cov}(y_1, y_N) & \mathrm{cov}(y_2, y_N) & & \sigma_N^{\,2} \end{bmatrix} \ .$$

A estimativa de mínimos quadrados nesta notação matricial é

$$\hat{\vec{A}} = \left(\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\vec{Y} \ , \tag{5}$$

com o sobrescrito t indicando transposição. A matriz de variâncias dessas estimativas é

$$\mathbf{V}_{\hat{\vec{A}}} = \left(\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1} \ . \tag{6}$$

Note que $\left\langle \hat{\vec{A}} \right\rangle = \vec{A}_0$, o que pode ser verificado trivialmente substituindo a equação (1) em (5) e calculando os valores esperados levando-se em conta as hipóteses expressas em (3). Mais difícil é mostrar que (5) garante que $\mathrm{var}(a_\nu) =$ mínimo dentre as estimativas lineares nos dados y_i. No entanto, demonstra-se que (5) minimiza não só as variâncias nos parâmetros, como também a de qualquer combinação linear dos μ parâmetros, conforme pode ser visto em [Ke79], [Ea71] ou [Va96].

Do ponto de vista estatístico, as condições que garantem que o estimador representado pela equação (5) é ótimo estão satisfeitas: ele não é tendencioso e tem variância mínima, de maneira que nada mais[1] é necessário para que o prefiramos a qualquer outra estimativa. O nome do método, porém, deriva do fato dessa estimativa $\hat{\vec{A}}$ também poder ser obtida minimizando a função

$$Q = \left(\vec{Y} - \mathbf{X}\vec{A}\right)^t \mathbf{V}^{-1}\left(\vec{Y} - \mathbf{X}\vec{A}\right) \ . \tag{7}$$

Esta fórmula reduz-se a uma expressão mais familiar quando os dados y_i são estatisticamente independentes e suas covariâncias são nulas, ou seja, quando a matriz de variâncias dos dados $\mathbf{V}$ é diagonal, $V_{ii} = \sigma_i^{\,2}$ e $V_{ij} = 0$ para $i \neq j$,

$$Q = \sum_i \frac{\left(y_i - f\left(\vec{x}_i, \vec{A}\right)\right)^2}{\sigma_i^{\,2}} \ .$$

Estas são as equações mais simples que incluem as correlações nos dados e, dado que (5) é uma estimativa linear nos dados, também é

[1] Um estimador deve satisfazer outra condição, chamada consistência [Ke79], que é a da estimativa tender ao valor verdadeiro quando o número de dados tende a infinito, condição esta trivialmente satisfeita neste caso.

operacional. Para completar a discussão, devemos incluir um teste de qualidade do ajuste, realizado usando-se a grandeza

$$\chi^2 = \left(\vec{Y} - \mathbf{X}\hat{\vec{A}}\right)^t \mathbf{V}^{-1}\left(\vec{Y} - \mathbf{X}\hat{\vec{A}}\right) \quad , \tag{8}$$

que tem uma função densidade de probabilidade de qui-quadrado com $N - \mu$ graus de liberdade se a função densidade de probabilidade conjunta dos $\vec{Y}$ for uma Gaussiana N-dimensional.

Prática

A fórmula (5) têm grande importância teórica porque é um resultado em forma fechada e apresenta claramente os parâmetros como combinação linear dos dados, facilitando outras deduções. Normalmente, porém, é preferível utilizar outro algoritmo. O procedimento de determinação das estimativas consiste em resolver o sistema linear

$$(\mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\hat{\vec{A}} = \mathbf{X}^t\mathbf{V}^{-1}\vec{Y} \quad , \tag{9}$$

após algumas transformações. A primeira consiste em fatorar as variâncias na matriz **V**

$$\mathbf{V} = \mathbf{SCS} \tag{10}$$

onde a matriz **S** é uma matriz diagonal definida por

$$S_{ij} = \sigma_i \delta_{ij} \tag{11}$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker e **C** é a matriz de correlações, sendo que a expressão (10) serve, de fato, para definir a correlação entre variáveis. Em seguida, aproveitando do fato de **C** ser simétrica e definida positiva — propriedade de todas as matrizes de variância — ela é decomposta como

$$\mathbf{C} = \mathbf{R}\mathbf{R}^t \quad , \tag{12}$$

com **R** uma matriz triangular inferior, de maneira que

$$\mathbf{V} = \mathbf{S}\mathbf{R}\mathbf{R}^t\mathbf{S}$$

e, portanto,

$$\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{S}^{-1}(\mathbf{R}^{-1})^t\mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}$$

Substituindo a matriz $\mathbf{V}^{-1}$ na forma fatorada e decomposta acima em (9), obtém-se

$$\left(\mathbf{X}^t\mathbf{S}^{-1}\left(\mathbf{R}^{-1}\right)^t\mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}\right)\hat{\vec{A}} = \left(\mathbf{X}^t\mathbf{S}^{-1}\left(\mathbf{R}^{-1}\right)^t\mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\right)\vec{Y}$$

Definindo-se $\tilde{\mathbf{X}}$ e $\tilde{\vec{Y}}$ como

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X} \quad \therefore \quad \tilde{\mathbf{X}}^t = \mathbf{X}^t\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{R}^{-1})^t \tag{13}$$

$$\tilde{\vec{Y}} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{S}^{-1}\vec{Y} \tag{14}$$

obtemos a expressão mais compacta

$$\tilde{\mathbf{X}}^t\tilde{\mathbf{X}}\hat{\vec{A}} = \tilde{\mathbf{X}}^t\tilde{\vec{Y}} \quad .$$

Neste sistema linear, os elementos de $\tilde{\mathbf{X}}^t\tilde{\mathbf{X}}$ têm dimensão física e, portanto, seus valores numéricos têm ordens de grandeza que refletem as unidades escolhidas, sendo conveniente transformá-la em uma matriz adimensional antes de resolver o sistema linear. Definimos, então, uma matriz de transformação **T**, diagonal e por isso simétrica, definida por

$$T_{\eta\kappa} = \frac{1}{\sqrt{\left(\tilde{\mathbf{X}}^t\tilde{\mathbf{X}}\right)_{\kappa\kappa}}}\delta_{\eta\kappa} \tag{15}$$

de maneira que $\mathbf{T}\tilde{\mathbf{X}}^t\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{T}$ é uma matriz onde nenhum dos elementos tem dimensão física e todos os elementos da diagonal são iguais a 1. Chegamos agora às últimas definições, da matriz **P**, por meio de

$$\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{T} = \mathbf{P} \quad \therefore \quad \mathbf{T}^t\tilde{\mathbf{X}}^t = \mathbf{P}^t = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{X}}^t \quad , \tag{16}$$

e do vetor $\vec{B}$

$$\vec{B} = \mathbf{T}^{-1}\hat{\vec{A}} \quad \therefore \quad \hat{\vec{A}} = \mathbf{T}\vec{B} \quad , \tag{17}$$

com as quais obtemos a forma final do sistema de equações a resolver

$$\mathbf{P}^t\mathbf{P}\vec{B} = \mathbf{P}^t\vec{\tilde{Y}} \quad . \tag{18}$$

que substitui, na prática, a equação (5), lembrando que as matrizes que compõem a fórmula (18) envolvem todas as operações das fórmulas (10) a (17). A matriz de variâncias das estimativas, fórmula (6), escrita em termos das matrizes transformadas, é calculada por

$$\mathbf{V}_A = \mathbf{T}(\mathbf{P}^t\mathbf{P})^{-1}\mathbf{T} \quad , \tag{19}$$

encerrando o formulário.

Note que $\mathbf{P}^t\mathbf{P}$, que é a matriz de coeficientes do sistema linear que precisamos resolver, é uma matriz simétrica e definida positiva :

$$\vec{h}^t\mathbf{P}^t\mathbf{P}\vec{h} = \left(\mathbf{P}\vec{h}\right)^t\mathbf{P}\vec{h} = \vec{g}^t\vec{g} = |\vec{g}|^2 > 0$$

para todo $\vec{h} \neq \vec{0}$ desde que o posto de $\mathbf{P}$ seja igual a μ. Mostramos adiante a forma prática de resolver um sistema linear onde a matriz de coeficientes é simétrica e definida positiva.

3.1.2. Fórmula matricial de propagação de covariância.

Frequentemente, é preciso ajustar funções a dados que já foram deduzidos de um ou vários conjuntos de dados experimentais, quando torna-se necessário conhecer a matriz de covariâncias desses dados derivados.

Suponha um conjunto de dados experimentais consistindo em μ variáveis aleatórias que definem um vetor $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_\mu)^t$. Representaremos por $\mathrm{cov}(\alpha_\eta, \alpha_\kappa)$ a covariância entre α_η e α_κ e definiremos $\mathrm{cov}(\alpha_\eta, \alpha_\eta) = \mathrm{var}(\alpha_\eta)$. O valor verdadeiro de α_η será representado por $\alpha_{\eta 0}$, e o conjunto de variáveis define o vetor $\vec{\alpha}_0 = \left(\alpha_{10}, \alpha_{20}, \ldots, \alpha_{\eta 0}, \ldots, \alpha_{\mu 0}\right)^t$. Consideremos agora as variáveis aleatórias z_i e z_j, que dependem estatisticamente das variáveis aleatórias

α_η, com valores dados pelas funções $z_i(\vec{\alpha})$ e $z_j(\vec{\alpha})$, respectivamente. O valor verdadeiro de z_i, z_{i0}, é dado aproximadamente por

$$z_{i0} \cong z_i(\vec{\alpha}_0) \ , \tag{20}$$

com uma relação análoga para z_{j0}. A covariância entre z_i e z_j pode ser aproximada pela expressão

$$\mathrm{cov}(z_i, z_j) \cong \sum_{\eta=1,\kappa=1}^{\mu} \left.\frac{\partial z_i}{\partial \alpha_\eta}\right|_{\vec{\alpha}=\vec{\alpha}_0} \left.\frac{\partial z_j}{\partial \alpha_\kappa}\right|_{\vec{\alpha}=\vec{\alpha}_0} \mathrm{cov}(\alpha_\eta, \alpha_\kappa) \ , \tag{21}$$

com a qual podem também ser calculadas as variâncias, fazendo $i = j$.

A expressão (21) deve ser representada em forma matricial para determinar convenientemente todas as variâncias e covariâncias de um conjunto de M funções de variável aleatória $\vec{z} = (z_1(\vec{\alpha}), z_2(\vec{\alpha}), \cdots, z_M(\vec{\alpha}))^t$. Definimos $\mathbf{V}_\alpha$ como a matriz de covariância das variáveis aleatórias

$$(\mathbf{V}_\alpha)_{\eta\kappa} = \mathrm{cov}(\alpha_\eta, \alpha_\kappa) \ ,$$

e a matriz de covariância entre as funções por

$$(\mathbf{V}_z)_{ij} = \mathrm{cov}(z_i, z_j).$$

A relação entre as matrizes de covariância de $\vec{\alpha}$ e $\vec{z}$ é

$$\mathbf{V}_z \cong \mathbf{Z}\mathbf{V}_\alpha\mathbf{Z}^t \ , \tag{22}$$

onde

$$(\mathbf{Z})_{i\eta} = \left.\frac{\partial z_i}{\partial \alpha_\eta}\right|_{\vec{\alpha}=\vec{\alpha}_0} \ . \tag{23}$$

Se $z_i(\vec{\alpha})$ forem funções lineares em $\vec{\alpha}$, as equações (20) a (22) são exatas e $\mathbf{V}_z$ é independente do vetor $\vec{\alpha}_0$, o que torna possível conhecer a matriz de variância. Porém, como sempre usamos estimativas experimentais de $\mathbf{V}_\alpha$, só obtemos estimativas aproximadas para $\mathbf{V}_z$.

3.1.3. Ajuste de funções não lineares nos parâmetros.

Geral

O ajuste de funções não lineares nos parâmetros recai no MMQ em duas situações. Uma delas ocorre quando a função é aproximadamente linear num entorno das estimativas com largura de vários desvios padrões dos parâmetros. Neste caso, a função não linear pode ser expandida em série de potências que, truncada em primeira ordem, fica

$$f(\vec{x},\vec{A}) \cong f(\vec{x},\hat{\vec{A}}) + \sum_{\eta=1}^{v} \frac{\partial f}{\partial \hat{A}_\eta}(A_\eta - \hat{A}_\eta) \tag{24}$$

onde

$$\frac{\partial f}{\partial \hat{A}_\eta} = \left.\frac{\partial f(\vec{x},\vec{A})}{\partial A_\eta}\right|_{\hat{\vec{A}}} .$$

Uma vez que a estimativa $\hat{\vec{A}}$ seja obtida, a relação (24) mostra que recaímos na situação do ajuste de funções lineares, justificando a utilização do método a posteriori porque todas as propriedades do MMQ valem se a função é linear. O problema restringe-se, portanto, ao do cálculo numérico de $\hat{\vec{A}}$.

A outra situação que justifica a utilização do MMQ corresponde àquela onde a função densidade de probabilidade dos dados é gaussiana [Va96]. Nesta situação, minimizar Q da expressão (7) corresponde a maximizar a função verossimilhança dos parâmetros, que é um método consistente, assintoticamente não-tendencioso e eficiente, além de constituir-se em um estimador assintoticamente normal. Em termos de cálculo numérico, procede-se da mesma maneira que no caso anterior em que a aproximação (24) é satisfatória, mas aqui é preciso recordar que as propriedades ótimas são assintóticas, de maneira que o número de dados (e sua precisão) utilizado no ajuste da função tem influência na validade do resultado, o que não ocorre no ajuste de funções lineares ou na outra situação mencionada acima.

Na prática, o ajuste de funções não-lineares nos parâmetros é tarefa complexa, pelas seguintes razões:

- Os métodos são, normalmente, iterativos, não havendo garantia de convergência. Usar o método de Gauss-Marquardt (descrito abaixo) permite determinar $\hat{\vec{A}}$ na grande maioria dos casos, mas há casos que continuam sendo de convergência muito difícil.

- Os dados podem não conter informação suficiente para a extração dos parâmetros pretendidos, com frequência maior que no caso do ajuste de funções lineares, quando tudo o que é possível fazer consiste em determinar combinações dos parâmetros.
- Quando a quantidade de dados é grande, é preciso escolher os algoritmos de maneira a preservar a precisão numérica e a velocidade de cálculo. O limite prático de complexidade dos problemas tratáveis aumenta com a rapidez do método.

Algoritmo básico

O método dos mínimos quadrados para funções não-lineares consiste em estimar os parâmetros pelo vetor $\hat{\vec{A}}$ que minimiza a função

$$Q = (\vec{Y} - \vec{f})^t \mathbf{V}^{-1} (\vec{Y} - \vec{f}) = Q(\vec{A})$$

onde $f_i = f(x_i, \vec{A})$. A solução é iterativa. Parte-se de uma estimativa $\vec{A}'$, em torno da qual expande-se a função em primeira ordem, de maneira que

$$f(x_i, \hat{\vec{A}}) \cong f(x_i, \vec{A}') + \nabla_A f(x_i, \vec{A})\big|_{\vec{A}'} \cdot (\hat{\vec{A}} - \vec{A}') \quad .$$

Ocorre que $\hat{\vec{A}}$ é desconhecido, o que torna esta equação inútil. Porém, podemos reescrevê-la trocando $\hat{\vec{A}}$ por $\vec{A}''$,

$$f(x_i, \vec{A}'') \cong f(x_i, \vec{A}') + \nabla_A f\big|_{\vec{A}'} \cdot (\vec{A}'' - \vec{A}') \quad ,$$

onde $\vec{A}''$ pode ser determinado pelo ajuste da função linear representada por essa expressão com as substituições na fórmula (5) de $\vec{Y}$ por $\Delta\vec{Y}$ e de $\hat{\vec{A}}$ por $\Delta\vec{A}$, com as seguintes definições:

$$\begin{aligned} \Delta y_i &= y_i - f\left(x_i; \vec{A}'\right) \quad , \\ \overline{\Delta a_\nu} &= a_\nu'' - a_\nu' \end{aligned} \tag{25}$$

e onde a matriz de planejamento deve ser estimada como

$$X_{i\nu} = \left.\frac{\partial f(x_i, \vec{A})}{\partial a_\nu}\right|_{\vec{A}'} \quad . \tag{26}$$

O valor de $\vec{A}''$ determinado (a partir do incremento no vetor de parâmetros $\vec{A}'$ estimado inicialmente) serve de nova estimativa para $\hat{\vec{A}}$, permitindo uma melhor expansão da função e reiteração do processo. Se tudo corre bem, depois de um certo número de iterações obtém-se

$$\overline{\Delta a_\nu} << \sigma_\nu \quad , \forall \nu \tag{27}$$

quando entendemos que o processo convergiu e o valor obtido para $\vec{A}''$ é a estimativa $\hat{\vec{A}}$ desejada.

Este é o método de Gauss, que caracteriza-se por convergir lentamente e exigir estimativas próximas de $\hat{\vec{A}}$. O procedimento recomendado está descrito imediatamente a seguir.

O Método de Gauss-Marquardt, simplificado.

O método de Gauss comporta-se mal, tanto por ser pouco tolerante com as estimativas quanto por exigir muitas iterações para convergir. D.W. Marquardt [Ma63] sugere outro algoritmo, que comporta-se muito melhor.

O método de Gauss-Marquardt também é iterativo, a matriz de planejamento é constituída como em (26) e efetuam-se as substituições como em (25). Monta-se o sistema linear da equação (18) mas atenuam-se as variações dos parâmetros, aumentando alguns coeficientes do sistema linear

$$(\mathbf{P}^t\mathbf{P} + \lambda\mathbf{I})\vec{b} = \mathbf{P}^t\vec{y}$$

onde λ é um número positivo, cujo valor adequado exige algumas tentativas e testes. Note que $\mathbf{P}^t\mathbf{P}$ tem todos seus elementos diagonais iguais a 1.

Para explicar a estratégia de solução, vamos definir algumas grandezas, onde r identifica o número da iteração:

- $\mathbf{M}^{(r)} = \mathbf{P}^t\mathbf{P}$, calculado na iteração r ;
- $\vec{A}^{(r+1)} = \vec{A}^{(r)} + (\Delta\vec{A})^{(r)}$;
- $Q^{(r)} = \left(\vec{Y} - f\left(\vec{A}^{(r)}\right)\right)^t \mathbf{V}^{-1}\left(\vec{Y} - f\left(\vec{A}^{(r)}\right)\right)$ e (28)
- $\lambda^{(r-1)}$ é o coeficiente de amortecimento utilizado na iteração anterior.

Começa-se com um valor de λ pequeno e define-se uma escala de valores para λ, por exemplo, 0; 0,01; 0,1; 0,3; 1; 3; 10 . Vamos simbolizar por $++\lambda$ o valor na escada que segue o atual e por $--\lambda$ o valor que o antecede. Procede-se da seguinte forma:

i) Calcula-se $Q^{(r)}$ e $Q^{(r-1)}$;

ii) Se $Q^{(r)} < Q^{(r-1)}$, $\vec{A}^{(r+1)}$ é a estimativa para a próxima iteração e faz-se $\lambda^{(r)} = - - \lambda^{(r-1)}$;

Se $Q^{(r)} > Q^{(r-1)}$, recalcule $\vec{A}^{(r+1)}$ com $\lambda^{(r)} = + + \lambda^{(r-1)}$ e reitere até que passe no teste anterior.

Caso não seja possível obter $Q^{(r)} < Q^{(r-1)}$ para valores razoáveis de λ, (100, no máximo), é inútil prosseguir aumentando indefinidamente o valor de λ, correspondendo a uma divergência do processo. Nesses casos, tudo o que é possível fazer é tentar de novo com outras estimativas iniciais ou tentar reduzir o número de parâmetros livres do ajuste.

O teste de convergência baseia-se na diferença entre $Q^{(r)}$ e $Q^{(r-1)}$. Se os dados são gaussianos, a grandeza Q relaciona-se com a função verossimilhança $L(\{\vec{x}_i\};\vec{A})$ pela expressão

$$\ln\left[L(\{\vec{x}_i\};\vec{A})\right] \propto -\frac{Q}{2} \quad .$$

O estimador de verossimilhança é assintoticamente normal, de maneira que

$$\ln\left[L(\{\vec{x}_i\};a_v)\right] \xrightarrow[N\to\infty]{} -\frac{(a_v - a_{v0})^2}{2\sigma_v^{\,2}} \quad ,$$

resultando que uma variação de um desvio-padrão em um dos parâmetros corresponde, assintoticamente, a uma variação de uma unidade no valor de Q. Assim, o teste baseado na convergência de Q calculado como em (28) é equivalente ao expresso pelo conjunto de relações (27), apesar da aparência diferente. É usual utilizar-se limites de convergência para a diferença $Q^{(r)} - Q^{(r-1)}$ na faixa entre 10^{-3} e 10^{-7}, dependendo principalmente do número de parâmetros ajustados.

Caso os dados sejam gaussianos, o teste de qualidade do ajuste pode ser efetuado calculando $Q\left(\hat{\vec{A}}\right)$, que é uma variável com a função de probabilidade de $\chi^2_{N-\mu}$.

Sistemas lineares com matrizes simétricas e definidas positivas.

Toda a matriz de variâncias é simétrica e definida positiva. A simetria da matriz decorre da definição dada pela expressão (4). Para provar que ela é definida positiva, considere a seguinte função f das N variáveis aleatórias com matriz de covariância **V**,

$$f(\vec{A}) = \sum_{i=1}^{N} h_i A_i = \vec{h} \cdot \vec{A} \quad .$$

A variância de f pode ser calculada como

$$\mathrm{var}(f) = \left\langle \left(f(\vec{A}) - f(\vec{A}_0) \right)^2 \right\rangle = \vec{h}^t \mathbf{V} \vec{h} \quad ,$$

com a segunda forma correspondendo à aplicação da fórmula (22), exata neste caso, porque f é uma função linear em $\vec{A}$ (também a identidade $\langle f(\vec{A}) \rangle = f(\vec{A}_0)$ é exata). É evidente da primeira forma de calcular que $\mathrm{var}(f) > 0$ para qualquer f não trivial, ou seja, que não tenha todos os coeficientes da expansão em $\vec{A}$ nulos; a segunda forma é equivalente à primeira e facilmente deduzida substituindo a forma explícita de $f(\vec{A})$. Como a identidade independe do $\vec{h}$ escolhido em particular, decorre

$$\vec{h}^t \mathbf{V} \vec{h} > 0 \ , \quad \forall \vec{h} \neq \vec{0} \quad ,$$

demonstrando que **V** é definida positiva.

Matrizes deste tipo podem ser decompostas num produto de matrizes triangulares, uma transposta da outra, numa especialização da decomposição LU possível para qualquer matriz, ou seja

$$\mathbf{V} = \mathbf{L}\mathbf{L}^t$$

onde escolhemos **L** como uma matriz triangular inferior. Note que

$$\det(\mathbf{L}\mathbf{L}^t) = \det(\mathbf{L})^2 \geq 0$$

mostrando que, além de simétrica, a matriz precisa ser definida positiva para ser decomposta dessa maneira.

O algoritmo de decomposição é particularmente simples neste caso, veja por exemplo o livro de Press et al. [Pr92], sob o título decomposição de Choleski. O algoritmo de solução de sistemas lineares é o mesmo utilizado quando decompõe-se uma matriz quadrada qualquer em matrizes LU, com a vantagem que L e U são no fundo a mesma matriz e muito mais fáceis de determinar. Assim, para resolver o sistema linear

$$\mathbf{L}\mathbf{L}^t \vec{x} = \vec{y}$$

resolve-se primeiro, por substituição progressiva desde que **L** é triangular inferior, a equação

$$\mathbf{L}\vec{z} = \vec{y}$$

e depois, por substituição regressiva desde que $\mathbf{L}^t$ é triangular superior,

$$\mathbf{L}^t\vec{x} = \vec{z} \quad .$$

Inverter a matriz também fica mais fácil, desde que basta inverter uma única matriz triangular e efetuar o produto dela por sua transposta.

3.2. Calibração de eficiência

3.2.1. Geral

A medição de fótons por detetores de HPGe envolve diversos processos, alguns ainda mal compreendidos como a formação do pedestal que se estende desde a origem do espectro até o pico de absorção total de energia, com um número de eventos de mesma ordem de grandeza que o do pico [Is89,Is90], genericamente atribuído a armadilhas eletrônicas no cristal de Ge [Le87]. A fração de fótons que geram um evento no pico de absorção total de energia é pequena, em torno de 10 a 20% nas energias típicas. Na determinação de intensidade de transição gama, porém, utiliza-se apenas o número de contagens no pico de absorção total de energia, sendo o processo de calibração o melhor para determinar a eficiência, devido à dificuldade em modelar os fenômenos de deteção.

Calibra-se a eficiência para deteção no pico de absorção total de energia por

$$\varepsilon = \frac{A_\gamma}{f_\gamma \cdot Ativ \cdot \Delta t} \tag{29}$$

onde A_γ é a área do pico corrigida para eventuais efeitos de soma, empilhamento e absorção, f_γ e $Ativ$ a fração de gamas por decaimento e a atividade da fonte padrão, respectivamente, e Δt o intervalo de tempo de medida. As correções de soma, empilhamento e absorção podem ser bastante complexas [Ca97] mas aqui não pretendemos detalhá-las.

Os dados de eficiência obtidos pela fórmula acima podem ser ajustados por uma função analítica da energia E do fóton, sendo a forma escolhida

$$\ln(\varepsilon(E)) = a_0 + a_1 \ln\left(\frac{E}{E_0}\right) + a_2\left(\ln\left(\frac{E}{E_0}\right)\right)^2 \tag{30}$$

onde E_0 é um valor de referência constante mas arbitrário para as energias, que deve ser escolhido de preferência próximo ao baricentro das energias dos gamas de calibração. Esta forma é de fácil linearização (de fato, já está escrita na forma linearizada) e sistematicamente ajusta bem os dados.

3.2.2. Extensão da faixa de energia da calibração absoluta.

Utilizando uma única fonte padrão, não se consegue ajustar uma curva de eficiência cobrindo uma grande faixa de energia, sendo habitual usar várias fontes de calibração com atividades conhecidas. Esta seção mostra a maneira de determinar a eficiência absoluta numa grande faixa de energia utilizando várias fontes, onde apenas uma delas é calibrada.

A primeira parte corresponde a determinar a matriz de planejamento. Para simplificar a notação, fazermos

$$y = \ln(\varepsilon)$$
$$x = \ln(E/E_0)$$

e escrevemos a eficiência para um dado gama i da fonte S como

$$^{S}y_i = a_0 + a_1 . {}^{S}x_i + a_2 . ({}^{S}x_i)^2 \quad , \tag{31}$$

utilizando a fórmula (30). Estamos identificando as grandezas relativas às diferentes fontes por um sobrescrito antecedendo a variável, de maneira a garantir espaço no subscrito para identificação do raio gama ou parâmetro específico, sem misturar com o índice de potência.

As curvas de eficiência relativa e eficiência absoluta diferem somente pelos coeficientes a_0, sendo os coeficientes a_1 e a_2 comuns, independentes da fonte padrão, para um determinado detetor. Tomando duas fontes de calibração: F de atividade conhecida e G, desconhecida, a relação entre os dados experimentais e os parâmetros é, utilizando a equação (31),

$$\begin{bmatrix} {}^{F}y_1 \\ {}^{F}y_2 \\ \vdots \\ {}^{G}y_1 \\ {}^{G}y_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 & {}^{F}x_1 & ({}^{F}x_1)^2 \\ 0 & 1 & {}^{F}x_2 & ({}^{F}x_2)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & {}^{G}x_1 & ({}^{G}x_1)^2 \\ 1 & 0 & {}^{G}x_2 & ({}^{G}x_2)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} {}^{G}a_0 \\ {}^{F}a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad . \tag{32}$$

Note que utilizamos parâmetros ${}^{S}a_0$ diferentes para as fonte $S = F$ e $S = G$. A equação (32) está na forma da equação (1), definindo, portanto, a matriz de planejamento. Para estimar $\vec{a}$ pelo método dos mínimos quadrados, é preciso determinar a matriz de covariância. Os termos diagonais são dados por

$$V_{ii} = \left(\frac{\sigma_{\varepsilon_i}^{S}}{{}^{S}\varepsilon_i} \right)^2 \quad .$$

As covariâncias não são nulas quando usamos mais de uma transição gama da mesma fonte, sendo dependentes da incerteza na atividade da fonte e das correlações entre as intensidades de transição gama. Como as correlações entre os valores f_γ não são encontradas na literatura, apenas a dependência com a variância na atividade da fonte será considerada e, portanto, os únicos termos não diagonais são aqueles ligados aos raios gama da fonte calibrada. A matriz **V** é dada por

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\sigma_{\varepsilon_1}^{F}}{{}^{F}\varepsilon_1} \right)^2 & \left(\frac{\sigma_{Ativ}}{Ativ} \right)^2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots \\ \left(\frac{\sigma_{Ativ}}{Ativ} \right)^2 & \left(\frac{\sigma_{\varepsilon_2}^{F}}{{}^{F}\varepsilon_2} \right)^2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & \left(\frac{\sigma_{\varepsilon_1}^{G}}{{}^{G}\varepsilon_1} \right)^2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \left(\frac{\sigma_{\varepsilon_2}^{G}}{{}^{G}\varepsilon_2} \right)^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} . \qquad (33)$$

Os desvios-padrões dos dados relacionados à fonte G, $(\sigma_{\varepsilon_i}^{S} / {}^{S}\varepsilon_i)^2$, dependem dos desvios padrões de A_γ e f_γ devido à dependência dada pela fórmula (29). O cálculo dos desvios-padrões dos dados relativos à fonte F precisam considerar também o desvio padrão da atividade $Ativ$.

Utilizando a matriz de planejamento da relação (32) e a matriz de variância descrita em (33), a expressão (5) fornece a estimativa dos parâmetros e a fórmula (8) o valor de χ^2 para teste de qualidade do ajuste.

Completando a ilustração, apresentamos a determinação da curva de eficiência absoluta utilizada no estudo do decaimento do ^{48}V [Tr97]. O sistema detetor consistia em um detetor HPGe Ortec com 162 cm^3 de volume e absorvedor de alumínio de 1,3 mm de espessura, um amplificador com rejeição de empilhamento (constante de tempo igual a 2 μ s) e um CAD de aproximações sucessivas. A distância da fonte de gamas ao detetor foi de 25 cm de maneira que a contribuição de efeitos de soma era desprezível. A fonte produzia uma taxa de contagem suficientemente baixa de maneira que o *pile-up* pode ser desprezado. Então podemos considerar a área obtida do espectro, sem qualquer correção adicional, como o valor a ser utilizado no lugar de A_γ na fórmula (29).

A faixa de energia desejada para a curva de eficiência ia de aproximadamente 500 a 3500 keV. Assim, usamos fontes radioativas de ^{207}Bi e ^{56}Co, que correspondem às fontes F e G, respectivamente, consideradas em (32). A fonte de ^{207}Bi é uma fonte comercial Amersham e sua atividade era, na data da calibração, igual a 316(6) kBq. Os valores de energia e intensidade das transições de ambas as fontes, bem como a meia vida da fonte de ^{207}Bi, foram obtidas da tabela de Lorenz [Lo83].

As determinações experimentais da eficiência absoluta correspondentes às diferentes transições do ^{207}Bi foram efetuadas com espectros de tempos de contagem diferentes, de maneira que o número de contagens em cada pico tivesse precisão suficiente mas não saísse da faixa ideal para ajuste da forma funcional escolhida, pelo método dos mínimos quadrados. Na mesma geometria, isto é, mesma distância fonte-detetor, foi obtido um único espectro de ^{56}Co, com várias horas de contagem. As áreas dos picos foram determinadas com o programa IDEFIX [Go81], que utiliza uma função que é a soma de uma gaussiana com cauda exponencial a esquerda e uma função degrau, sendo a região de fundo em torno e sob o pico ajustada por um polinômio.

Os parâmetros estimados estão relacionados na tabela 1 e sua matriz de covariância e correlação na tabela 2. Obteve-se χ^2=7,55 para 12 graus de liberdade. Desta forma cada uma das curvas de eficiência relativa e absoluta, ambas representadas na figura 1, estão bem determinadas substituindo-se a_0 da equação (31) por ${}^{G}a_0$ e ${}^{F}a_0$, respectivamente.

Tabela 1: Estimativas dos parâmetros das curvas de eficiência relativa e absoluta, fórmula (31), e respectivos desvios padrões, calculados pelo MMQ.

Parâmetro	valor
${}^{G}a_0$	0,8859(22)
${}^{F}a_0$	-7,702(21)
a_1	-0,8360(58)
a_2	-0,0802(72)

Tabela 2: Matriz de covariância (diagonal e triângulo superior) e correlação (triângulo inferior) das estimativas dos parâmetros relacionados na tabela 1.

	${}^{G}a_0$	${}^{F}a_0$	a_1	a_2
${}^{G}a_0$	0,000049	0,00000840	0,00000505	-0,00000052
${}^{F}a_0$	0,18759966	0,00042737	0,00000419	-0,003195
a_1	0,399	0,035	0,00003408	0,00003086
a_2	-0,033	-0,216	0,738	0,00005138

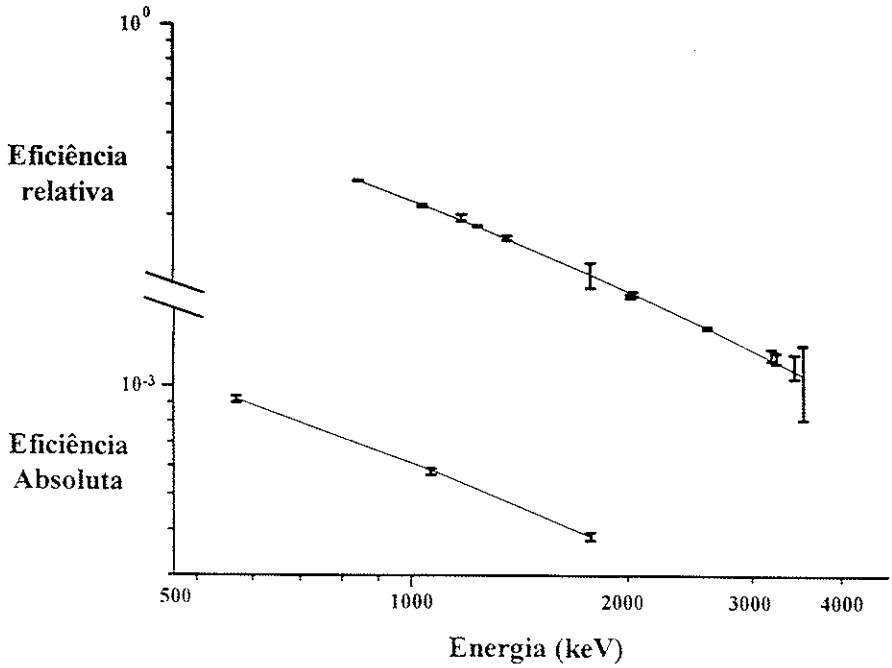


Figura 1: Curvas de eficiência relativa (acima) e absoluta (abaixo) obtidas através da função (31) com os parâmetros da tabela 1 e os dados experimentais obtidos com as fontes de ^{56}Co e ^{207}Bi. As escalas são logarítmicas. Note que as inclinações e concavidades das duas curvas são idênticas, diferindo somente pelo coeficiente linear, isto é, pelo valor do parâmetro a_0.

3.2.3. Calibração de eficiência com fontes extensas ou para baixas energias

A relação (30) é inadequada para modelar a eficiência para valores abaixo de 100 keV ou quando a fonte é muito extensa e grande, como no caso de um Beker-Marinelli, quando a variação

$$\ln(\varepsilon(E)) = A_0 + A_1 \ln\left(\frac{E}{E_0}\right) + \begin{cases} A_2\left(\ln\left(\frac{E}{E_0}\right)\right)^2, E < E_0 \\ A_3\left(\ln\left(\frac{E}{E_0}\right)\right)^2, E > E_0 \end{cases} \tag{34}$$

pode ser usada [Ve93]. Esta é uma expressão não linear no parâmetro E_0, neste caso um ponto de junção das duas parábolas, diferentemente de E_0 da expressão (30), onde é um valor arbitrário que deve ser escolhido de maneira a ficar no baricentro das energias observadas simplesmente para evitar que a correlação entre a_0 e a_1 fique desnecessariamente grande.

Devido à não-linearidade da função, o ajuste é efetuado pelo método de Gauss-Marquardt, conforme seção 3.1.3, sem maiores dificuldades, embora pontos de junção frequentemente constituam parâmetros mal comportados, particularmente com o método de Gauss. Esta função permite bons ajustes tanto no sentido de que obtém-se normalmente valores de qui-quadrado na faixa de aceitação quanto no sentido dos resultados de simulação mostrarem que não é tendencioso no valor interpolado da eficiência [Ve93]. Note-se que é preciso verificar numericamente que o MMQ é não-tendencioso neste caso de ajuste de funções não-lineares.

3.3. Determinação das energias dos raios gama.

Detetores de HPGe têm resolução em energia, medida como a largura a meia altura do pico (abreviada FWHM do inglês) da ordem de keV. A precisão na posição do pico, porque tem forma aproximadamente gaussiana, é da ordem de $\sigma_{\bar{x}} \approx \frac{\text{FWHM}}{2{,}35\sqrt{N}}$, onde N é o número de contagens no pico — pior que isso devido às contagens da componente contínua do espectro, mas

sem modificar a ordem de grandeza. Facilmente alcança-se 1.000.000 de contagens no pico, o que leva a uma precisão na energia da ordem de 1 eV.

Verifica-se, porém, que o ganho e o zero dos dispositivos eletrônicos flutua mais que isso no tempo típico de uma medição de espectroscopia gama [Mu87]. O procedimento adequado para a determinação da energia dos gamas consiste, então, em observar a fonte desconhecida junto com a fonte de calibração, de maneira que flutuações de ganho e zero reflitam-se igualmente na calibração com a fonte padrão e na determinação das posições dos picos na fonte incógnita [Kn89, De88]

Obter uma precisão em energia da ordem de 1 eV, embora dentro das possibilidades estatísticas, exige que seja possível determinar a posição do pico devido ao raio gama sem tendenciosidade. Quando a posição do pico é determinada por ajuste de uma certa função ao espectro pelo MMQ, a estimativa é não-tendenciosa desde que a relação funcional entre contagens por canal e canal seja aceitável, o que pode e deve ser testado pelo teste de qui-quadrado. Verifica-se que há dificuldade de ajustar picos de 1.000.000 de contagens, de maneira que acaba sendo necessário repartir a informação em vários espectros da mesma fonte.

A fonte padrão observada simultaneamente à fonte desconhecida distorce o espectro desta última, introduzindo diversas irregularidades no espectro, em particular bordas Compton, que podem deformar os picos de interesse, sendo que, eventualmente, produzirá multipletos. Estas distorções podem adicionar erros difíceis de dimensionar. A maneira mais simples de contornar esta dificuldade é utilizar muitas fontes padrão diferentes, tentando transformar o inevitável erro em flutuação estatística.

Normalmente, uma fonte apresenta espectro tanto com transições fracas quanto intensas, sendo que temos sensibilidade para variações de até 5 ordens de grandeza na intensidade. Não é possível determinar as energias de todos esses gamas simultaneamente, além de que os picos no espectro relativos às transições mais fracas provavelmente serão bastante afetados por efeitos de deteção dos demais gamas. O que propomos é determinar as energias dos picos mais proeminentes e depois, utilizando os espectros de alta estatística da fonte desconhecida apenas, estimar a energia dos gamas de menor intensidade utilizando como padrão aqueles cujas energias já foram determinadas.

O planejamento experimental completo consiste, então, na medição de uma série de espectros da amostra com fontes padrão, com os quais determinam-se as energias das transições mais intensas da amostra. Em seguida, utilizando um espectro só da amostra, determinam-se as energias

dos gamas mais fracos utilizando as energias determinadas para os gamas mais intensos como padrões secundários. Este método foi utilizado com sucesso nas medidas de espectroscopia gama do ^{159}Gd [Mo95], ^{100}Rh [Ke95], ^{102}Rh [Ca97] e ^{48}V [Tr97] e está descrito em detalhes em [Va97]. Abaixo, apresentamos detalhadamente o método, que consiste numa aplicação complexa da teoria da seção 3.1.

3.3.1. Calibração de energia com um único espectro.

Para explicar o procedimento todo, iniciamos descrevendo a calibração em energia de um único espectro. Representaremos os dados de calibração por

$$\{(C_i, E_i),\ i = 1, N\},$$

onde E_i é uma energia gama da fonte padrão e C_i a posição no espectro do pico correspondente. Utiliza-se como função de calibração um polinômio,

$$E(C) = a_1 + a_2 C + \cdots + a_\nu C^{\nu-1}. \tag{35}$$

A relação entre os dados experimentais E_i e os parâmetros é

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ . \\ . \\ E_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & C_1 & \cdots & C_1^{\nu-1} \\ 1 & C_2 & \cdots & C_2^{\nu-1} \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ 1 & C_N & \cdots & C_N^{\nu-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_\nu \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ . \\ . \\ e_N \end{pmatrix}, \tag{36}$$

onde e_i é o erro em E_i. Na forma matricial,

$$\vec{E} = \mathbf{C}\vec{A}_0 + \vec{e} \quad . \tag{36a}$$

definindo a matriz de planejamento **C** conforme equação (1).

A estimativa dos parâmetros exige a matriz de covariância dos dados, que neste caso é composta por dois termos,

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_E + \mathbf{V}_\varepsilon \quad . \tag{37}$$

onde $\mathbf{V}_E$ é a matriz de covariâncias das energias gama da fonte padrão e $\mathbf{V}_\varepsilon$ representa as covariâncias em energia resultantes das flutuações estatísticas nas posições dos picos. A matriz $\mathbf{V}_E$ não é diagonal mas, geralmente, os termos diagonais são desconhecidos, de maneira que utilizaremos apenas os termos diagonais [He94]. A matriz $\mathbf{V}_\varepsilon$ é calculada pela equação (22) como

$$\mathbf{V}_\varepsilon \cong \mathbf{P}\mathbf{V}_C\mathbf{P}' \ , \tag{38}$$

onde $\mathbf{V}_C$ é a matriz de covariância das posições dos picos e $\mathbf{P}$ é uma matriz diagonal com elementos

$$\mathbf{P}_{ii} = \sum_{\eta=2}^{\nu}(\eta - 1)a_\eta C_i^{\eta-2} \tag{39}$$

conforme a equação (23).

O cálculo de $\mathbf{P}$ e, portanto, de $\mathbf{V}$, envolve os parâmetros $\vec{A}$, levando a um procedimento iterativo, o problema não sendo realmente linear. Porém, só o termo de primeiro grau do polinômio de calibração contribui significativamente para $\mathbf{V}_\varepsilon$ e este pode ser facilmente determinado com grande precisão, bastando efetuar um cálculo preliminar para estimar $\tilde{a}_2$.

Os termos diagonais de $\mathbf{V}_C$, por sua vez, têm duas componentes. O primeiro é a variância da posição do pico, $\sigma_i'^2$, determinada do ajuste do pico. A segunda componente leva em conta efeitos de não-linearidade diferencial do CAD que, naqueles tipo Wilkinson que utilizamos em calibração de energia, é < 1%. Supomos que o efeito global na posição do pico corresponda a um aumento da variância e estimamos empiricamente esses termos diagonais, $(\mathbf{V}_C)_{ii}$, como [Va97]

$$(\mathbf{V}_C)_{ii} = \sigma_{ci}^{\ 2} \cong \sigma_i'^{\ 2} + 0{,}0033^2 \quad . \tag{40}$$

Este fenômeno afeta apenas picos com grande número de contagens, tais que σ_i' é da ordem de grandeza do desvio-padrão devido à não-linearidade, 0,0033 canais. Os espectros devem ser medidos por períodos suficientemente curtos para garantir que todos os ajustes de pico forneçam valores de qui-quadrado na faixa de aceitação (χ^2 / grau de liberdade ≈ 1), para que se possa utilizar as variâncias das posições dos picos, $\sigma_i'^2$,

determinadas pelo MMQ. Também só se utilizam picos completamente resolvidos, de maneira que as posições C_i são estatisticamente independentes,

$$(\mathbf{V}_C)_{ij} = 0 \quad \text{for} \quad i \neq j \ .$$

Na maioria dos casos práticos, a matriz de covariâncias da expressão (38) é

$$(\mathbf{V}_\varepsilon)_{ij} \cong \tilde{a}_2^2 \cdot \sigma_{ci}^2 \cdot \delta_{ij} \ ,$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker e $\tilde{a}_2$ é o valor ajustado para o termo linear da função de calibração de energia, $E(C)$.

Os parâmetros podem, então, ser calculados pela fórmula (5) que, com as substituições adequadas: **C** da fórmula (36) para a matriz de planejamento, **V** da fórmula (37) para a matriz de variâncias (envolvendo os cálculos das fórmulas 38 a 40) e $\vec{E}$ como vetor de dados experimentais, fica

$$\tilde{\vec{A}} = (\mathbf{C}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^t\mathbf{V}^{-1}\vec{E} \qquad , \tag{41}$$

sendo a matriz de covariância dos parâmetros de calibração $\tilde{\vec{A}}$ dada pela equação (6),

$$\mathbf{V}_{\tilde{\vec{A}}} = (\mathbf{C}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \ . \tag{42}$$

Como havíamos mencionado, **V** depende dos parâmetros ajustados, de maneira que o cálculo é iterativo, mas a convergência é rápida porque $\tilde{a}_2$ é facilmente determinado com precisão suficiente. Conforme a fórmula (8), calculamos qui-quadrado por meio de

$$\chi^2 = (\vec{E} - \mathbf{C}\tilde{\vec{A}})^t\,\mathbf{V}^{-1}(\vec{E} - \mathbf{C}\tilde{\vec{A}}) \tag{43}$$

no caso com $N - \nu$ graus de liberdade para testar a qualidade do ajuste.

3.3.2. Interpolando valores em uma calibração de energia com um único espectro.

Chamando de $\vec{B}=\left(B_1,B_2,\ldots,B_i,\ldots,B_n\right)^t$ as posições dos picos para os quais procuramos interpolar os valores de energia com a calibração efetuada e de $\vec{D}=\left(D_1,D_2,\ldots,D_i,\ldots,D_n\right)^t$ as energias correspondentes, a relação entre esses dois vetores pode ser escrita em forma matricial como

$$\vec{D}=\mathbf{B}\,\tilde{\vec{A}}\ , \tag{44}$$

onde **B** é uma matriz como a matriz **C** da (36), trocando C_i por B_i.

A matriz de covariância de $\vec{D}$ é

$$\mathbf{V}_{\vec{D}}=\mathbf{B}\mathbf{V}_{\tilde{\vec{A}}}\mathbf{B}^t+\tilde{a}_2^2\mathbf{V}_B\ , \tag{45}$$

onde $\mathbf{V}_B$ é a matriz de covariância das posições dos picos $\vec{B}$. O primeiro termo corresponde à propagação das variâncias de $\tilde{\vec{A}}$ para $\vec{D}$, representando as flutuações estatísticas nas energias devidas às incertezas nos parâmetros de calibração. O segundo termo vem da propagação das variâncias das posições dos picos, analogamente às equações (37) e (40).

A matriz de covariância $\mathbf{V}_{\vec{D}}$ não é diagonal, porque todas as energias dependem do mesmo conjunto de parâmetros, mostrando que as covariâncias entre energias gama determinadas simultaneamente não são nulas. Estas covariâncias precisam ser levadas em conta nas calibrações, nos testes estatísticos e na propagação de variâncias.

3.3.3. Calibração de energia com vários espectros.

Este processo consiste na calibração de vários espectros, cada um deles da amostra com uma ou algumas fontes padrão, sendo que as energias são determinadas pelas médias dos valores interpolados em cada uma das calibrações individuais, de acordo com a idéia apresentada no início da seção.

Generalizando os resultados dos itens acima, definimos para cada um dos l espectros de calibração, identificados por i=1, 2, ... l : o vetor de energias gama das fontes padrão $\vec{E}^{(i)} = \left(E_1^{(i)}, E_2^{(i)}, \ldots, E_{N_i}^{(i)}\right)^t$ usadas para calibrar a i-ésima medição em particular; as posições dos picos correspondentes, $\left(C_1^{(i)}, C_2^{(i)}, \ldots, C_{N_i}^{(i)}\right)^t$ e os parâmetros de calibração nesse espectro $\vec{A}^{(i)} = \left(a_1^{(i)}, a_2^{(i)}, \ldots, a_{v_i}^{(i)}\right)^t$. A relação entre os dados experimentais e os parâmetros é

$$\begin{pmatrix} \vec{E}^{(1)} \\ \vec{E}^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{E}^{(l)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^{(1)} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}^{(2)} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{C}^{(l)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{A}^{(1)} \\ \vec{A}^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{A}^{(l)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \vec{e}^{(1)} \\ \vec{e}^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{e}^{(l)} \end{pmatrix}, \tag{46a}$$

ou

$$\vec{E}^{(L)} = \mathbf{C}^{(L)} \vec{A}^{(L)} + \vec{e}^{(L)}, \tag{46b}$$

conforme equação (1).

Na equação acima, os vetores e matrizes estão representados em forma particionada: o vetor $\vec{E}^{(L)}$ é constituído pela justaposição dos vetores $\vec{E}^{(i)}$; $\mathbf{C}^{(L)}$ é formada pelas matrizes $\mathbf{C}^{(i)}$ retangulares, que têm a mesma estrutura da matriz $\mathbf{C}$ da equação (36); $\vec{A}^{(L)}$ é constituído pela justaposição dos vetores $\vec{A}^{(i)}$.

A matriz $\mathbf{V}^{(L)}$ de covariâncias das energias $\vec{E}^{(L)}$, é uma generalização da equação (37):

$$\mathbf{V}^{(L)} = \mathbf{V}_E^{(L)} + \begin{pmatrix} \mathbf{V}_\varepsilon^{(1)} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{V}_\varepsilon^{(l)} \end{pmatrix}, \tag{47}$$

onde $\mathbf{V}_\varepsilon^{(i)}$ é dado pela equação (38) e os elementos de $\mathbf{V}_E^{(L)}$ são

$$(\mathbf{V}_E^{(L)})_{jk} = \mathrm{cov}\left(E_j, E_k\right). \tag{48}$$

A utilização da mesma fonte em diversas medições faz com que esta matriz não seja diagonal, desde que $\mathrm{cov}\left(E_j, E_k\right) = \sigma_E^2$, onde σ_E é o desvio padrão

da energia de calibração E, quando E_j e E_k correspondem à mesma energia de calibração E da fonte padrão utilizada em mais de um dos espectros.

As equações (5) e (6) podem ser usadas agora para determinar simultaneamente os parâmetros $\vec{A}^{(L)}$ de todas as calibrações, bem como sua matriz de covariâncias, $\mathbf{V}_{\vec{\tilde{A}}^{(L)}}$, simplesmente substituindo $\mathbf{X}$ por $\mathbf{C}^{(L)}$, $\vec{Y}$ por $\vec{E}^{(L)}$ e $\mathbf{V}$ por $\mathbf{V}^{(L)}$. Esta substituição também permite efetuar o teste de χ^2 utilizando a equação (8), sendo que o número de graus de liberdade corresponde à diferença entre o número de dados em $\vec{E}^{(L)}$ e o número de parâmetros ajustados em $\vec{A}^{(L)}$.

3.3.4. Interpolando valores na calibração de energia com vários espectros.

As energias interpoladas também correspondem a uma generalização da equação (44),

$$\begin{pmatrix} \vec{D}^{(1)} \\ \vdots \\ \vec{D}^{(l)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(1)} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{B}^{(l)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\tilde{\tilde{A}}}^{(1)} \\ \vdots \\ \vec{\tilde{\tilde{A}}}^{(l)} \end{pmatrix}, \tag{50a}$$

ou

$$\vec{D}^{(L)} = \mathbf{B}^{(L)} \cdot \vec{\tilde{\tilde{A}}}^{(L)}. \tag{50b}$$

$\vec{D}^{(L)}$ é o vetor cujos elementos são as energias determinadas em todas as medições e $\mathbf{B}^{(L)}$ é a matriz que contém as potências apropriadas das posições dos picos, representadas em forma particionada acima. Generalizando a equação (45), a matriz de covariâncias das energias ajustadas é

$$\mathbf{V}_{\vec{D}^{(L)}} = \mathbf{B}^{(L)} \mathbf{V}_{\vec{\tilde{A}}^{(L)}} \left(\mathbf{B}^{(L)}\right)^t + \begin{pmatrix} \left(\tilde{a}_2^{\,1}\right)^2 \mathbf{V}_{B^{(1)}} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \left(\tilde{a}_2^{\,l}\right)^2 \mathbf{V}_{B^{(l)}} \end{pmatrix}. \tag{51}$$

Como em $\vec{D}^{(L)}$ há estimativas diferentes da energia gama de uma mesma transição, é preciso determinar a média para cada uma das transições. Chamando $\vec{D}$ o vetor que contém essas médias, a etapa final consiste em utilizar mais uma vez o MMQ com a matriz de planejamento apropriada, que é

$$(\mathbf{X})_{m} = \frac{\partial(\vec{D}^{(L)})_i}{\partial(\vec{D})_{\eta}} , \tag{52}$$

onde a derivada parcial acima vale 1 se $\left(\vec{D}^{(L)}\right)_i$ e $\left(\vec{D}\right)_{\eta}$ referem-se à mesma transição e 0 no caso contrário. As estimativas das energias, dadas pela equação (5), são obtidas de

$$\vec{D} = \left(\mathbf{X}^t\left(\mathbf{V}_{\vec{D}^{(L)}}\right)^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^t\left(\mathbf{V}_{\vec{D}^{(L)}}\right)^{-1}\vec{D}^{(L)}, \tag{53}$$

com matriz de covariâncias $\mathbf{V}_{\vec{D}}$, calculada pela equação (6)

$$\mathbf{V}_{\vec{D}} = \left(\mathbf{X}^t\left(\mathbf{V}_{\vec{D}^{(L)}}\right)^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1} . \tag{54}$$

Qui-quadrado é calculado como

$$\chi^2 = \left(\vec{D} - \mathbf{X}\cdot\vec{D}^{(L)}\right)^t\left(\mathbf{V}_{\vec{D}^{(L)}}\right)^{-1}\left(\vec{D} - \mathbf{X}\cdot\vec{D}^{(L)}\right) \tag{55}$$

onde o número de graus de liberdade é a diferença do número de energias interpoladas em $\vec{D}^{(L)}$ e de transições gama em $\vec{D}$.

Nas aplicações efetuadas, a precisão final obtida dependeu da complexidade do espectro e da faixa de energia das transições gama. No caso do ^{159}Gd [Mo95], onde as transições gama têm energia na faixa de 50 a 900 keV, a precisão ficou na faixa 1,5 — 20 eV; no ^{100}Rh [Ke95], com energias que vão de 140 keV a 2 MeV, a precisão esteve em 4 e 50 eV; em relação ao ^{102}Rh [Ca97], com gamas de 300 a 1300 keV, os resultados tiveram precisão entre 4 e 25 eV e no ^{48}V [Tr97], com transições entre 800 e 2400 keV, 5 a 55 eV.

3.3.5. Um teste de consistência - as relações entre gamas da cascata

Nos esquemas de decaimento é comum acontecerem transições de *cross-over*, isto é, transições entre níveis de energia não consecutivos. Isso permite testar a consistência das energias gama pela regra da soma - a energia do *cross-over* é igual à soma das energias das transições entre os níveis consecutivos, todas corrigidas pela energia de recuo. A maneira mais simples de verificar simultaneamente todas as relações entre energias gama presentes no decaimento, consiste em determinar as energias dos níveis a partir das energias gama pelo MMQ, sendo que a aceitação do ajuste pelo teste de qui-quadrado é uma indicação forte da correção do esquema de decaimento e da validade da calibração.

Primeiro, determinamos um vetor de diferenças de energias entre níveis, $\vec{D}'$, que corresponde às energias das transições gama $\vec{D}$ às quais adicionam-se as energias de recuo do núcleo. A matriz de covariância dos elementos do vetor $\vec{D}'$ são muito bem aproximadas pela matriz de covariâncias do vetor $\vec{D}$, porque as variâncias das energias de recuo são desprezíveis. Agora precisamos definir a matriz de planejamento, relacionando as energias dos níveis com as energias dos gamas. Chamando G_η a energia do η-ésimo nível, a energia de cada transição gama (corrigida do recuo) é

$$(\vec{D}')_i = G_\eta - G_\kappa \quad . \tag{56}$$

A matriz de planejamento é, então, calculada por

$$(\mathbf{X}')_{i\eta} = \frac{\partial (\vec{D}')_i}{\partial (\vec{G})_\eta} \quad . \tag{57}$$

que é uma matriz onde todos os elementos têm valor 1, -1 ou 0, e precisa ser construída "a mão" para cada esquema de decaimento em particular.

Substituindo nas equações (5), (6) e (8) as matrizes $\mathbf{X}, \vec{Y}, \mathbf{V}$ e $\vec{A}$ por $\mathbf{X}', \vec{D}', \mathbf{V}_{\vec{D}}$ e $\vec{G}$, respectivamente, determinam-se as energias dos níveis, a matriz de covariâncias dessas energias e o valor de χ^2. O número de graus de liberdade neste ajuste é a diferença entre o número de energias de transições gama medidas (dimensão de $\vec{D}'$) e o número de níveis de energia em $\vec{G}$.

No estudo do decaimento do ^{159}Gd [Mo95, Va97], este teste permitiu verificar que uma transição observada não poderia corresponder à transição entre um par de níveis conhecidos, numa situação em que uma análise mais superficial daria margem à dúvida.

3.4. Ajuste de matrizes de coincidência.

Em medidas de coincidência gama-gama, é habitual constituir-se matrizes de coincidência, que são histogramas bidimensionais, do número de eventos em função das energias dos dois gamas observados. Ao problema específico de ajuste dos picos observados, efetuado pelo MMQ, ajunta-se o de obtenção e preparação dos espectros. É esta última questão que discutiremos aqui e que não envolve muito diretamente o que foi apresentado na primeira seção deste capítulo.

Estas matrizes são analisadas por meio de janelas nas energias gama adequadas. Em um espectro complexo, como o obtido em espectroscopia gama em linha, os picos dos gamas das energias de interesse formam, frequentemente, multipletos com outras linhas. Elaboramos um método para constituir janelas em que as contribuições das diversas componentes estão separadas e em que a informação estatística sobre os espectros obtidos é preservada [Va89]. Estes algoritmos foram implantados no programa de computador *Panoramix*, cujos algoritmos são descritos a seguir.

Para cada gama i de interesse, um espectro de coincidência líquido N' é calculado por meio de uma janela P escolhida adequadamente na região do pico, sendo que as coincidências relativas ao fundo e a eventuais contaminações na janela serão descontadas por meio de janelas chamadas B e C, respectivamente. Na figura 2, relativa a um exemplo que detalharemos adiante, essas regiões estão demarcadas por símbolos diferentes. Calcula-se o espectro de coincidência líquida com o i-ésimo gama de interesse por

$$N'_i = P_i - \alpha_i C_i - \beta_i B_i \tag{58}$$

sendo que o conteúdo de cada canal do espectro tem variância

$$\sigma^{2\prime}_i = P_i + \alpha_i^2 C_i + \beta_i^2 B_i \tag{59}$$

onde N', P, C, B e $\sigma^{2'}$ são vetores com tantos elementos quantos canais forem considerados em uma dimensão da matriz de coincidência e α_i e β_i são fatores de normalização, específicos da janela de coincidências com o i-ésimo gama. É a escolha das regiões de energia de gama para constituição dessas janelas e dos fatores que permitem isolar o espectro de interesse, mas ainda vamos precisar de alguns fatos antes de definir a regra de escolha.

A obtenção de informação quantitativa requer a normalização do espectro, pela fração f_i dos eventos da transição em questão que estão contidas na janela líquida, ou seja

$$N_i = \frac{N_i'}{f_i}$$

com o vetor de variâncias associados

$$\sigma^2{}_i = \frac{\sigma^{2'}{}_i}{f_i^2}$$

De novo, ambas as expressões representam operações que devem ser realizadas com cada um dos canais do espectro e do vetor de variâncias. As variâncias em f_i^2 são pequenas comparadas às de $\sigma^{2'}$ e são normalmente desprezadas.

A construção de janelas limpas em multipletos começa pelo ajuste do multipleto na projeção total. Um exemplo utilizando espectros obtidos em linha está na referência [Va89]. Aqui, apresentaremos um exemplo na espectroscopia de atividade residual do ^{100}Rh [Ke95]. A figura 2 corresponde a uma parte da projeção total da matriz de coincidências sobre um dos eixos de energia gama, onde observa-se o dubleto devido às transições 588,3 -590,8 keV. Nosso objetivo neste exemplo é obter janelas limpas para ambas as transições, sem perder demasiada estatística de contagem. A figura 2 apresenta também o dubleto ajustado pelo programa Panoramix [Va89] utilizando o MMQ com o algoritmo de Gauss-Marquardt, sendo que neste caso a cada pico é ajustada uma gaussiana com cauda exponencial à esquerda e ao fundo ajusta-se uma reta. Vê-se que é a transição de 588,3 keV que predomina na região do pico de 590,8 keV, de maneira que uma janela simples teria que ser constituída apenas dos canais 576 e 577 para resultar em um nível de contaminação pelo gama de 588,3 keV que fosse tolerável. O procedimento que adotamos é utilizar uma região um pouco maior e descontar a contribuição do contaminante pela subtração de uma janela apropriada.

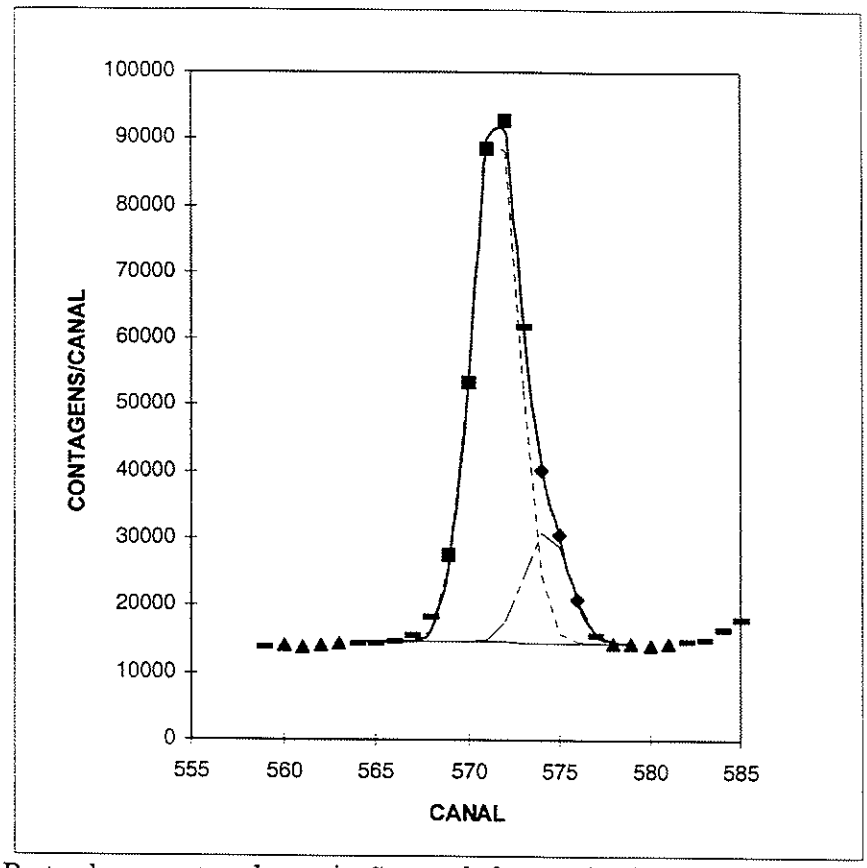


Figura 2. Parte do espectro de projeção total da matriz de coincidências mostrando a decomposição do dubleto formado pelos gamas de 588,3 e 590,8 keV no ^{100}Rh. Os pontos marcados com losangos definem a janela *P*, com quadrados a janela *C* e com triângulos, a janela *B*.

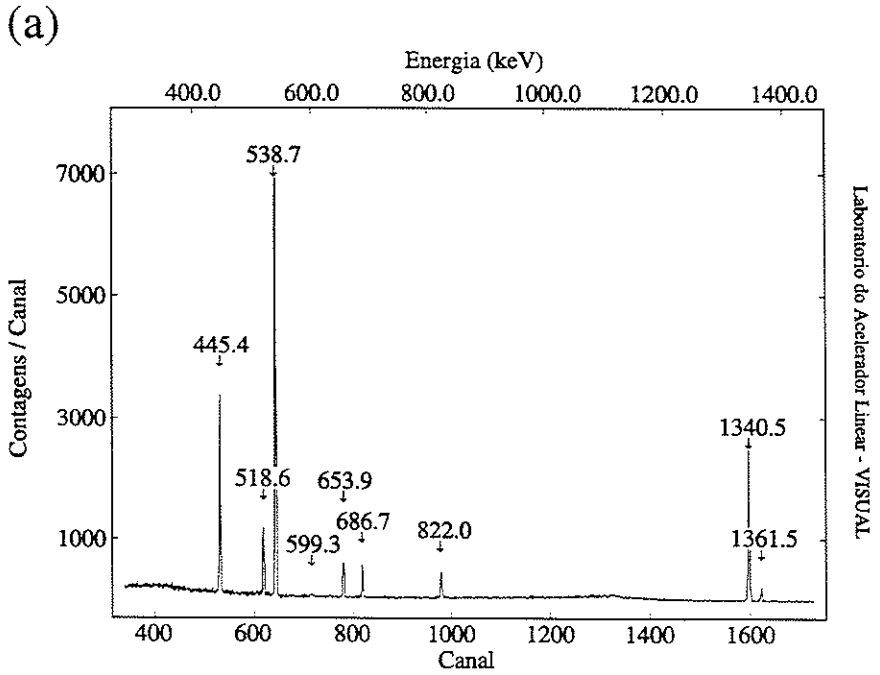
Para simplificar a discussão, sem perda de generalidade, vamos apresentar o cálculo necessário a obter a janela limpa para o gama de 590,8 keV. A tabela 3 apresenta o número de contagens atribuído a cada transição na janela *P*, tomada entre os canais 574 e 576. Estes valores são determinados pela integral, entre os canais extremos da janela, da função analítica ajustada. Para eliminar as interferências, é preciso utilizar outras janelas vizinhas, onde elas (interferências) predominem. A janela *C* foi escolhida bem na região do pico de 588,3 keV, entre os canais 569 e 572. Para corrigir a interferência devida à componente contínua do espectro, tomaram-se duas janelas, entre os canais 578 e 581 e entre 560 e 563, constituindo conjuntamente o espectro *B*. A tabela 3 também apresenta as áreas dos vários picos e da componente contínua em todas essas janelas. É fácil verificar que existe uma combinação linear entre *P*, *C* e *F* que resulta em um espectro de coincidência com os gamas de 590,8 keV, corrigido das

contaminações do gama de 588,3 e da componente contínua produzida na maior parte por outras transições de maior energia. O espectro obtido é multiplicado pelo inverso da fração das contagens devidas ao gama de interesse que restaram na janela limpa (mostrada entre parênteses na última coluna da tabela 3), de maneira que possa-se determinar as intensidades absolutas de coincidência entre os gamas e comparar valores obtidos por meio de janelas distintas. A figura 3a mostra a janela de coincidências com gamas de 590,8 keV resultante e a figura 3b, a de coincidências com o gama de 588,3 obtida de maneira semelhante, exibindo o sucesso deste método de descontaminação.

Tabela 3. Números de contagens nos diversos espectros envolvidos na obtenção de uma janela de coincidências com gamas de 590,8 keV. A janela final é N, obtida da janela de pico P, janela de contaminante C e janela de fundo B como $N = 1{,}45(P - 0{,}068C - 0{,}341B)$.

E(keV)	P	C	B	N
588,3	13464	198469		0
590,8	36627	4737		36305(70%)
contínuo	42560	56778	113357	0

O objetivo particular do programa *Panoramix* é o de automatizar este procedimento de descontaminação de janelas, bem como a análise sistemática dessas janelas [Va89]. Foi utilizado na espectroscopia gama do ^{218}Ra[Sc89], ^{178}Re[Kr89], ^{220}Ac[Sc90, Sc91], ^{138}Pr[Ri92], ^{218}Ac[De94], ^{100}Rh[Ke95] e ^{102}Rh[Ca97]. Em resumo, todas as janelas obtidas são somadas, ajustando-se multipletos a trechos do espectro-soma de maneira a cobrir toda a região de energia de interesse, normalmente dividindo-se o espectro em 20 a 30 regiões. Utilizando como grandezas fixas os valores de posição e largura ajustados para o espectro-soma, ajustam-se apenas as amplitudes e os parâmetros do espectro contínuo para cada uma das janelas. O teste de χ^2 é aplicado ao conjunto dos espectros, determinando-se o nível de rejeição a partir de um valor prefixado para o erro Tipo I (isto é, rejeição incorreta de ajuste válido, por flutuação estatística da grandeza testada). Examina-se visualmente apenas os ajustes rejeitados pelo teste de χ^2, agilizando o procedimento, ao mesmo tempo que permite o exame estatístico de todos os ajustes efetuados.



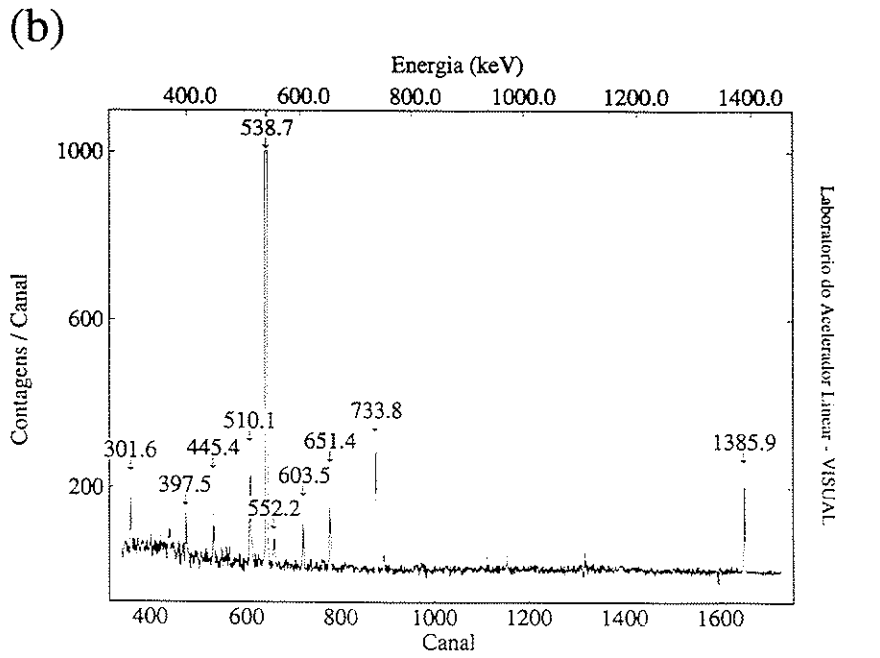


Figura 3. Janelas de coincidência constituídas por meio do programa Panoramix, de acordo com a descrição do texto, correspondentes aos gamas de 588.3 keV (a) e 590.8 keV (b).

4. Modos básicos de acoplamento.

O núcleo é bem descrito como um sistema onde a correlação entre os nucleons resulta num modo coletivo, sem que características identificadas como modos de partícula desapareçam. Os modos coletivos básicos de rotação e vibração e sua interação com os graus de liberdade de partícula, constituem o tema deste capítulo.

4.1. Vibração

O primeiro nível excitado de quase todos os núcleos par-pares tem spin e paridade 2^+. A natureza desse primeiro estado excitado varia conforme os números de prótons e nêutrons. Para uma grande família de núcleos, ele pode ser muito bem descrito como uma vibração quadrupolar da superfície. Aqui apresentaremos as características que permitem identificar esse modo coletivo.

Suponhamos que as partículas movem-se num potencial médio, *V(r)*, que é uma função do raio nuclear R_0, por exemplo o potencial de Woods-Saxon

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right)} \quad , \quad \text{com } V_0 < 0 \ ,$$

onde a é o parâmetro de espessura da superfície nuclear deste potencial. A oscilação produz variações de densidade que podem ser adequadamente descritas por variações no raio nuclear, dependentes dos ângulos θ e ϕ num certo sistema de referência,

$$R(\theta,\varphi) = R_0\left[1 + \sum_{\mu} \alpha_\mu Y_{2\mu}(\theta,\varphi)\right] \quad . \tag{1}$$

As variáveis dinâmicas α_μ representam a amplitude de oscilação e verifica-se, impondo a condição de que $R(\theta,\varphi)$ seja real e invariante por rotação e reflexão, que o conjunto delas pode ser descrito por cinco parâmetros independentes e reais.

Estamos supondo o núcleo vibrando em torno da forma esférica, a suposição mais simples, e restringimo-nos aqui ao modo de oscilação mais comum, o quadrupolar, que é o responsável por uma parte dessa sistemática de spins 2^+ mencionada no início da seção.

Para amplitudes de vibração suficientemente pequenas, a oscilação introduzirá um acoplamento entre a vibração e o movimento das partículas no potencial médio, cujas consequências podem ser bem determinadas por teoria da perturbação.

Nesta seção, nos limitaremos a completar a descrição do modo normal de vibração. Como em toda oscilação harmônica, serão necessários dois parâmetros: a frequência de vibração, ω, e um parâmetro de massa, B. O Hamiltoniano, após quantização das variáveis dinâmicas e sua transformação para operadores de criação a_μ^+ e aniquilação a_μ,

$$\alpha_\mu = \sqrt{\frac{\hbar}{2B\omega}}\left(a_\mu + (-1)^\mu a_{-\mu}^+\right)$$

e (2)

$$\dot{\alpha}_\mu{}^* = i\sqrt{\frac{\hbar}{2B\omega}}\left(a_\mu^+ - (-1)^\mu a_{-\mu}\right) \quad ,$$

onde os operadores de criação e aniquilação seguem relações de comutação de bósons, fica

$$H_{vib} = \hbar\omega \sum_{\mu=-2}^{2}\left(a_\mu^+ a_\mu + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{3}$$

Designamos as autofunções de H_{vib} pelos números quânticos: quantidade de fonons, N; multipolaridade da deformação, R (no caso, R=2) e projeção de R, $M_R = \mu$, e as representamos por $|NRM_R\rangle$. O estado de zero-fonon é representado por $|02\mu\rangle$ neste caso de fonons quadrupolares e deles podem deduzir-se as cinco componentes do estado de 1 fonon, $|12\mu\rangle$, por meio dos operadores de criação,

$$|12\mu\rangle = a_\mu^+|02\mu\rangle \ ,$$

com energia $\hbar\omega + E_0$, onde E_0 representa a energia de ponto zero,

$$E_0 = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad . \tag{4}$$

O momento angular associado ao estado de um fonon é $J=R=2$, de maneira que estes cinco estados correspondem às cinco projeções possíveis.

Os estados de dois fonons podem ser obtidos por

$$a_{\mu}^{+}a_{\mu'}^{+}|02\mu\rangle|02\mu'\rangle$$

e os estados com bom momento angular, são

$$|IM;N=2,R_1=2,R_2=2\rangle=\sum\langle 2\mu 2\mu'|IM\rangle a_{\mu}^{+}(1)a_{\mu'}^{+}(2)|02\mu\rangle_1|02\mu'\rangle_2 .$$

Devido às regras de comutação de bósons, apenas os momentos angulares $I=0^+$; 2^+ e 4^+ são possíveis, em um total de 15 projeções. Para três fonons, a construção dos estados fica mais complicada, sendo possíveis os momentos angulares: $I=0^+$; 2^+ ; 3^+ ; 4^+ e 6^+ , nenhum deles sendo repetido.

A primeira característica qualitativa da vibração quadrupolar do núcleo é a de apresentar o espectro de energia do oscilador harmônico, com espaçamento entre níveis igual a $\hbar\omega$ e uniforme, sendo bem definidos os spins que podem ser obtidos para cada uma das energias. A energia de ponto zero afeta igualmente todos os níveis do mesmo sistema, de maneira que não afeta o espaçamento entre níveis. No entanto, produz efeitos observáveis no espectro de energia, o que será o tema da próxima seção.

A outra característica refere-se à probabilidade de transição entre níveis. Começamos de um ponto de partida um pouco mais genérico, que nos será útil adiante. A probabilidade reduzida de transição eletromagnética de multipolaridade λ entre o estados $|\beta I\rangle$ de momento angular I e $|\gamma I'\rangle$ de momento angular I' é

$$B(\lambda;\beta I\rightarrow\gamma I')=\frac{1}{2I+1}\left|\langle\gamma I'\|M_c^{\lambda}+M_p^{\lambda}\|\beta I\rangle\right|^2 \qquad (5)$$

onde os operadores M_c^{λ} e M_p^{λ} representam os operadores de transição eletromagnética coletivo e de partícula, respectivamente.

Estamos nesta seção descrevendo só o modo puramente coletivo, de maneira que ignoraremos o efeito de M_p^{λ} . Desde que todos os níveis correspondentes ao modo quadrupolar têm mesma paridade, todas as transições que exigem mudança de paridade são proibidas. Além disso, o operador de transição de dipolo magnético, com $\lambda=1$, não consegue alterar o número de fonons, o que demanda um tensor de ordem mais elevada. Assim, a transição de menor multipolaridade permitida pelas regras de seleção é a de quadrupolo elétrico, cujo operador é

$$M_{vib}^{E2}(\mu)=\frac{3}{4\pi}ZeR^2\alpha_\mu$$

onde R^2 é um valor efetivo para o quadrado do raio [Bo75]. Com a substituição de α_μ pelos operadores de criação e aniquilação, obtemos

$$B(\lambda;\beta I\rightarrow\gamma I')=\frac{1}{2I+1}\left(\frac{3}{4\pi}ZeR^2\right)^2\cdot \left|\langle nRI\|a\|n'R'I'\rangle+(-1)^{R-R'}\langle n'R'I'\|a\|nRI\rangle\right|^2 \quad . \quad (6)$$

O fator Z^2 mostra o grande favorecimento das probabilidades de transição de quadrupolo em comparação com o valor de partícula única. A coerência da radiação provém do vínculo na movimentação das cargas imposto pela oscilação de raio expressa pela fórmula (1). Além disso, a dependência nos operadores de criação e aniquilação mostra que só estados diferindo por um fonon são ligados por transições E2. O último detalhe que nos permitirá interpretar os resultados experimentais é

$$B(\mathrm{E2};n=2\rightarrow n=1)=2B(\mathrm{E2};n=1\rightarrow n=0) \quad (7)$$

porque a transição de um estado de dois fonons para o de um fonon pode acontecer tanto pela destruição de um dos fonons quanto do outro, o dobro da única possibilidade na transição do estado de um fonon para o de zero fonon.

Assim, as probabilidades de transição eletromagnéticas têm as seguintes características: grandes B(E2) entre estados diferindo de um fonon, com magnitudes semelhantes, e proibidas entre estados do multipleto de um dado número de fonons e entre estados diferindo por 2 ou mais fonons; transições M1 proibidas.

4.2. Exemplificando a vibração coletiva com o ^{102}Ru.

Os decaimentos de ambos os estados isoméricos do ^{102}Rh para os níveis excitados do ^{102}Ru foram estudados no Laboratório do Acelerador Linear [Ca97,Pa88]. Como a energia disponível para a captura eletrônica é elevada (~2,3 MeV) e os spins dos estados isoméricos do núcleo pai são 2^- e

6^+, pode-se observar amplamente a estrutura de níveis do ^{102}Ru a baixa energia de excitação.

A figura 1 apresenta um esquema de níveis de energia do ^{102}Ru, com os níveis conhecidos até 2,3 MeV de energia de excitação [Fr91, Fa93, Ca97, Pa88], na grande maioria observados em ao menos um dos decaimentos dos estados isoméricos do ^{102}Rh. Nesta figura, identificamos os níveis com características vibracionais. O espaçamento em energia não é muito regular, mesmo o tripleto de 2 fonons está disperso em energia, mas segue a sistemática geral. O intervalo sem níveis entre 1,1 e 1,5 MeV de energia de excitação sugere que não haja outro mecanismo de excitação competindo com a vibração até uma energia próxima a 1,5 MeV.

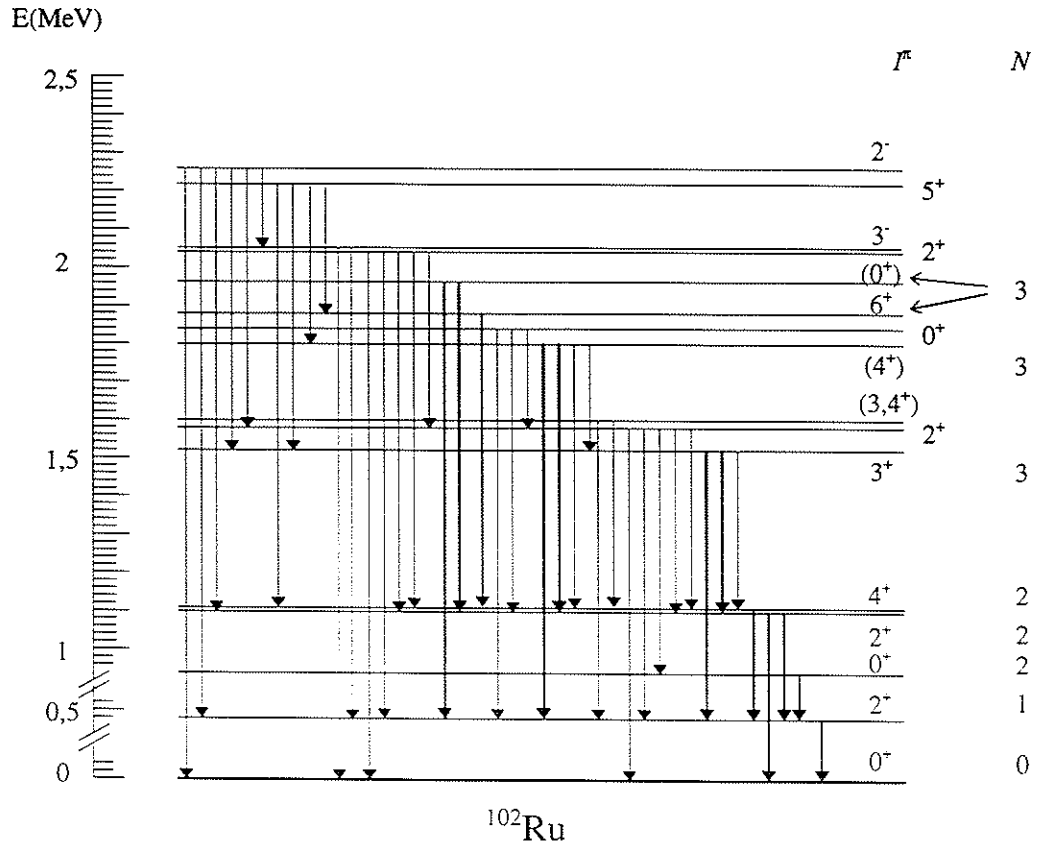


Figura 1. Esquema de níveis do ^{102}Ru, contendo todos os níveis conhecidos até 2,3 MeV de energia de excitação [Fr91], com as informações de transição eletromagnética conforme observadas por espectroscopia gama do decaimento do ^{102}Rh[Ca97, Fa93, Pa88] e de outras origens, inclusive do decaimento do ^{102}Tc [Fr91] . Os valores de B(E2) das transições representadas por linhas mais espessas estão na tabela 1 e constituem uma das características básicas de identificação da estrutura vibracional.

A tabela 1 apresenta os números quânticos atribuídos a esses níveis e, sempre que possível, valores experimentais de probabilidade de transição determinados a partir das meias-vidas, misturas multipolares e razões de ramificação obtidos das referências: [Fr91], [Ca87] e [Pa88]. Para todos os níveis identificados como de 3 fonons, a meia vida não é conhecida, mas foi possível determinar a probabilidade relativa de transição E2, seja porque as transições são E2 puras (decaimento dos níveis 0^+, 1837 keV e 4^+, 1798 keV) ou as misturas multipolares são conhecidas (decaimento do nível 3^+, 1521 keV. Estão representadas por linhas mais grossas no diagrama da figura 1 as transições para os quais foi possível obter algum resultado. Em todos os casos, é grande o retardamento da transição de *cross-over* com ΔN=2, em particular no caso em que as probabilidades de transição são conhecidas, a transição de *cross-over* do nível $2^+_2 \rightarrow 0$ é cerca de $\frac{1}{30}$ da transição $2^+_2 \rightarrow 2^+_1$, quando devidamente medidas em termos de probabilidade reduzida. O multipleto de 2 fonons apresenta valores absolutos de B(E2) para o estado de 1 fonon muito favorecidos, embora o único nível que siga a regra esperada pela relação (7) é o de spin 4^+.

Tabela 1. Probabilidades reduzidas de transição E2 entre os níveis identificados como vibracionais no ^{102}Ru. Quando apenas as razões puderam ser determinadas, escolheu-se uma das transições como referência.

Nível inicial			Nível final			B(E2), e^2fm^4
I^π	E(keV)	N	I^π	E(keV)	N	
2^+	475	1	0^+	0	0	1285(13)
0^+	944	2	2^+	475	1	1000(160)
2^+	1103	2	2^+	475	1	920(110)
			0^+	0	0	32(4)
4^+	1106	2	2^+	475	1	1900(300)
3^+	1521	3	2^+	1103	2	B_1
			2^+	475	1	0,04 B_1
(4^+)	1798	3	2^+	1103	2	B_2
			2^+	475	1	0,006 B_2
6^+	1873	3	4^+	1106	2	
(0^+)	1969	3	2^+	475	1	B_3
			2^+	1103	2	0,002 B_3

É claro que há muitos pontos de desacordo com o modelo vibracional puro, a começar pelo espectro de energia, com o conjunto de níveis identificados como de 3 fonons estando ainda mais disperso em energia que o de 2 fonons, além de não haver nenhum nível 2^+ com características claras de 3 fonons. Também o momento quadrupolar do nível 2^+, 475 keV, é conhecido e vale -0,68 b, o que não está em acordo com a idéia de vibração em torno da forma esférica. De toda a maneira, é surpreendente a manutenção de características vibracionais a uma energia de excitação bem acima da necessária para quebrar um par de nucleons. O caráter transicional deste núcleo é bem conhecido e os diferentes cálculos efetuados não formam um quadro claro [Tr91, Fa93, Gi95, Si96]. Aqui só pretendemos apresentar uma componente da fenomenologia que transparece dos dados experimentais.

4.3. Acoplamento partícula vibração - coexistência de vibradores.

O espectro de baixa energia de excitação do ^{57}Co constitui-se em um exemplo de acoplamento partícula-vibração particularmente interessante por revelar a coexistência de vibradores. Este espectro foi observado pelo decaimento beta do ^{57}Ni [ASc90]. A figura 2 apresenta o esquema de níveis de energia do ^{57}Co com paridade negativa conhecidos até 2,5 MeV de energia de excitação [Bu86], sendo todos observados no estudo do decaimento do ^{57}Ni à exceção do nível de spin $11/2^-$.

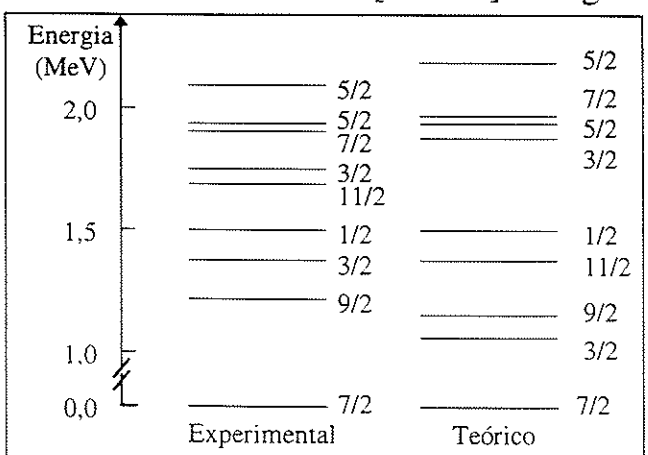


Figura 2. Níveis de paridade negativa do ^{57}Co conhecidos [Bu86,ASc90] comparados com os calculados pelo modelo partícula-fonon [Ab75].

Alguns dos níveis resultam do acoplamento de um buraco de prótons em $f_{7/2}$ a um caroço de ^{58}Ni e os outros de uma partícula a um caroço de ^{56}Fe . A tabela 2 apresenta as configurações atribuídas a cada um dos níveis do ^{57}Co representados na figura ao lado. O centróide de energia do multipleto de um fonon acoplado ao caroço de ^{58}Ni situa-se em 1,7 MeV, em acordo com a energia de excitação do primeiro nível excitado

do ^{58}Ni, 1,45 MeV [Le78]. À primeira vista, espera-se que os estados de zero-fonon correspondentes a uma partícula em $p_{3/2}$, $f_{5/2}$ e $p_{1/2}$ estejam afastados do estado fundamental, correspondente a um buraco em $f_{7/2}$, em torno de 3 ou 4 MeV, que é a separação em energia dessas órbitas. Observa-se, porém, que os estados |partícula ⊗ ^{56}Fe > estão separados de apenas 1,5 a 2 MeV do estado fundamental, com estrutura | buraco ⊗ ^{58}Ni > . Mostraremos nesta seção que o rebaixamento em energia desses estados pode ser atribuído à diferença de energia de ponto zero dos caroços, ^{58}Ni e ^{56}Fe.

Tabela 2. Configurações atribuídas aos níveis do ^{57}Ni, com base na observação das energias de excitação e probabilidades de transição eletromagnéticas observadas.

Nível		configuração		
J^{π}	E(keV)	j	N	caroço
$7/2^-$	0	7/2	0	^{58}Ni
$9/2^-$	1224	7/2	1	^{58}Ni
$3/2^-$	1378	3/2	0	^{56}Fe
$1/2^-$	1505	1/2	0	^{56}Fe
$11/2^-$	1689	7/2	1	^{58}Ni
$3/2^-$	1758	7/2	1	^{58}Ni
$7/2^-$	1897	7/2	1	^{58}Ni
$5/2^-$	1919	7/2	1	^{58}Ni
$5/2^-$	2133	5/2	0	^{56}Fe

O Hamiltoniano de um núcleo de A ímpar em que se considere o modo vibracional conforme descrito na seção precedente, é

$$H = H_{part} + H_{vib} + H_{acop} \tag{8}$$

onde H_{part} e H_{acop} são os Hamiltonianos de partícula única e de interação, respectivamente. Desprezando-se a parte da interação, a energia de um nível de uma partícula acoplado a um caroço vibracional no estado fundamental é

$$E(|p \otimes 0\text{fonon}\rangle) = E(p) + E_0 = E(p) + \frac{5}{2}\hbar\omega$$

onde $E(p)$ representa a energia do nível de partícula, $\hbar\omega$ é a energia do fonon e usamos a relação (4) para a energia de ponto zero do vibrador. Assim, a diferença em energia de um estado de zero fonon de uma partícula em $f_{7/2}$ acoplada ao ^{56}Fe para um buraco em um orbital com momento angular j, designado j^{-1}, acoplado ao ^{58}Ni é

$$E(f_{7/2})+\frac{5}{2}\hbar\omega_{Fe}-\left(E(j^{-1})+\frac{5}{2}\hbar\omega_{Ni}\right)=\Delta E_{part}+\frac{5}{2}\hbar\omega_{Fe}-\frac{5}{2}\hbar\omega_{Ni} \quad .$$

Verificamos, então, que a diferença final de energia de excitação entre esses estados acoplados a vibradores distintos no estado fundamental é reduzida pela diferença das energias de ponto zero dos vibradores diferentes,

$$\frac{5}{2}(\hbar\omega_{Fe}-\hbar\omega_{Ni})=-1{,}5\text{MeV} \quad ,$$

onde utilizaram-se as energias dos primeiros estados excitados dos núcleos de ^{58}Ni e ^{56}Fe [Le78] como estimativas das energias dos fonons. Esta diferença de energia de ponto zero corresponde muito bem à redução da distância entre o grupo de orbitais $p_{3/2}$, $f_{5/2}$ e $p_{1/2}$ e o orbital $f_{7/2}$ no núcleo de ^{57}Co, ao mesmo tempo mostrando a coexistência de vibradores nesses núcleo e permitindo a observação da energia de ponto zero da vibração da superfície nuclear.

Um cálculo teórico, que acreditamos ter o mesmo conteúdo desta discussão qualitativa, mostra um acordo quantitativo razoável com os dados experimentais [Ab75], estando o espectro de energia calculado representado na figura 2.

O estudo experimental permitiu determinar certas probabilidades de transição gama desconhecidas até então [ASc90]. Em particular, uma das novas transições fracas observadas conecta o estado $5/2^-$, 1919 keV ao estado $3/2^-$, 1378 keV. Verificou-se que essa transição é fortemente retardada, conforme esperado no modelo, porque os dois estado envolvidos correspondem a caroços diferentes nesta interpretação (veja tabela 2).

4.4. O efeito do emparelhamento.

Com o aumento do número de massa, a interação de emparelhamento cresce de importância na determinação das propriedades relacionadas ao movimento de partícula independente, desde que a razão dessa energia para

o espaçamento dos níveis de partícula única cresce com o número de massa. Na descrição da estrutura nuclear de núcleos mais pesados, portanto, essa questão é importante e por isso faremos aqui uma breve descrição da maneira de incorporar essa interação aos cálculos, que consiste na transformação da partícula ou do buraco em um objeto que apresenta simultaneamente as propriedades de um buraco e uma partícula, a chamada quase-partícula.

A seguir, descrevemos brevemente esse modelo. No que tange às aplicações necessárias em nosso caso, ele está muito bem descrito por Kisslinger e Sorensen [Ki63]. Uma apresentação didática encontra-se no livro de Mecânica Quântica de E. Merzbacher [Me70]. Todas as grandezas podem ser calculadas a partir da intensidade da interação de emparelhamento, G, e das energias de partícula única, ε'_j, que é a energia associada à órbita de partícula dada por $|jm\rangle$. Após a inclusão da interação de emparelhamento no Hamiltoniano de partícula independente, o Hamiltoniano pode ser bem aproximado por

$$H_{qp} = \sum_{j,m} E_j \alpha^+_{jm} \alpha_{jm} \tag{9}$$

com

$$\alpha^+_{jm} = u_j a^+_{jm} + (-1)^{j-m} v_j a^+_{jm} \tag{10}$$

onde a^+_{jm} é o operador de criação de uma partícula no estado $|jm\rangle$, com j o momento angular total e m sua projeção. As amplitudes de ocupação e não-ocupação por pares de um certo estado j de partícula são dadas por v_j e u_j, respectivamente, calculados por

$$v_j = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_j - \lambda}{E_j}\right)} \tag{11}$$

$$u_j = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_j - \lambda}{E_j}\right)} \tag{12}$$

com

$$E = \sqrt{(\varepsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2} \tag{13}$$

onde os parâmetros λ (energia de Fermi) e Δ (energia de emparelhamento) são obtidos das expressões

$$2\sum_j v_j^2 = \text{número de partículas (ocupando os orbitais considerados)} \quad (14)$$

e

$$G\sum_j \frac{1}{2E_j} = 1 \,, \quad (15)$$

onde G é a intensidade da interação de emparelhamento. Nestas fórmulas, a energia ε_j é a energia associada à órbita de partícula descontada a parcela correspondente à amplitude de buraco, ou seja, $\varepsilon_j = \varepsilon'_j - Gv_j^2$, com ε'_j a energia associada à órbita de partícula dada por $|jm\rangle$.

As figuras 3 e 4 apresentam dois efeitos imediatos da interação de emparelhamento: a aproximação dos orbitais e a difusão da superfície de Fermi. Os cálculos foram efetuados para o ^{101}Ru, núcleo para o qual determinamos o espectro de energia no modelo quase-partícula fonon [Va84, Va85].

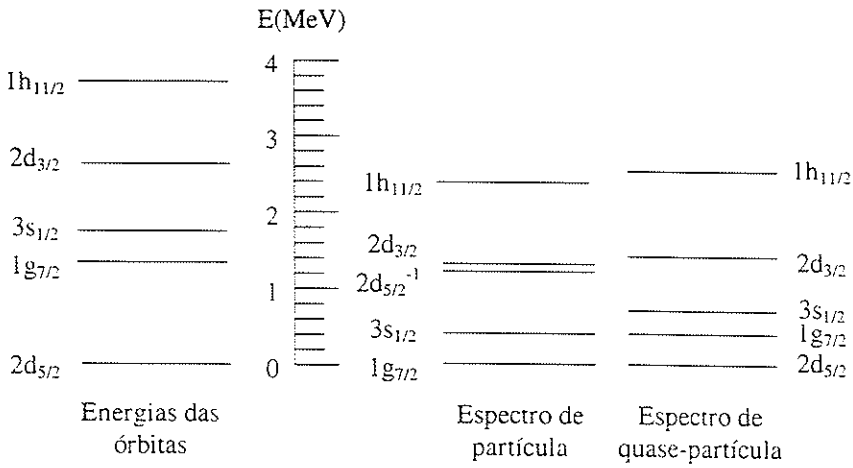


Figura 3. Espectro de energia de quase-partícula (esquema de níveis mais à direita) quando há 7 nucleons distribuídos nas órbitas da camada N=4 (sdg), comparado com o espectro de energia de partícula única, esquema do meio. As energias das órbitas estão no espectro mais à esquerda e foram escolhidas conforme a sistemática, sendo diferentes das que fornecem o melhor ajuste para o ^{101}Ru. O parâmetro G foi escolhido igual a 0,21 MeV.

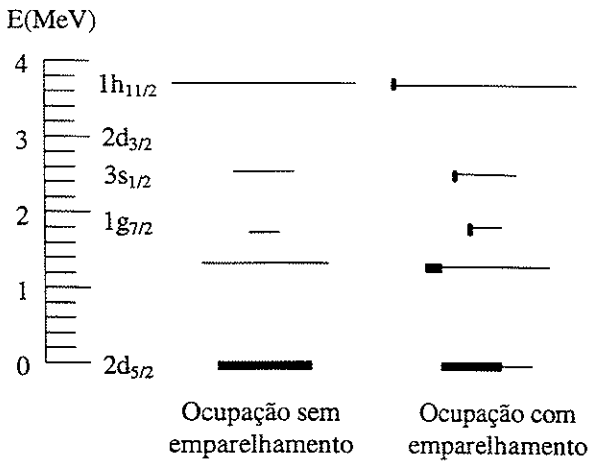


Figura 4. Diagrama procurando mostrar a difusão da superfície de Fermi no modelo de BCS. O comprimento da linha que representa um nível é proporcional ao número de partículas que ele pode conter, a parcela ocupada estando representada pela linha cheia. Foram consideradas 6 partículas nos orbitais incluídos na figura. A parcela ocupada de cada nível está representada por um traço grosso. Todos os parâmetros são os mesmos utilizados para a figura 3.

4.5. Acoplamento quase-partícula — vibração.

Na seção 3, apresentamos o Hamiltoniano completo de um sistema constituído de partículas e fonons de vibração em interação. O potencial de interação partícula-fonon predominante, supondo como descrito na seção 1 que a vibração ocorre em torno da forma esférica, corresponde a

$$H_{acop} = -k(r)\sum Y^*_{2m}(\theta,\varphi)\alpha_m \ , \tag{16}$$

onde $k(r) = R_0 \dfrac{\partial V}{\partial r}$, com V o potencial médio a que a partícula está submetida.

A aplicação detalhada do cálculo aos níveis de mais baixa energia do ^{101}Ru está em [Va84, Va85]. Aqui, apenas explicitamos o elemento de matriz do Hamiltoniano de interação, a fim de esclarecer os pontos que caracterizam o espectro do ^{101}Rh:

$$\langle (j,NR)IM|H_{acop}|(j',N'R')IM\rangle = -(-i)^{\ell-\ell'}(-1)^{R+I+j'}\frac{\sqrt{5}}{2}\eta\begin{pmatrix} j' & R' & I \\ j & R & 2 \end{pmatrix} \tag{17}$$
$$\langle j\tfrac{1}{2}20|j'\tfrac{1}{2}\rangle\left[(-1)^{R-R'}\langle n'R'\|b\|nR\rangle + \langle nR\|b\|n'R'\rangle\right](uu' - vv')$$

onde η é o parâmetro de intensidade, envolvendo os valores médios de $k(r)$ e α^2 . O *quenching* resultante da estrutura de quase-partículas, representada pelo fator $(uu' - vv')$, é bastante evidente. Menos aparente na fórmula, é a fraca interação entre níveis onde as partículas têm spins intrínsecos opostos, consequência do valor pequeno dos coeficientes de Clebsch-Gordan quando $j + j'$ é par para j e j' maiores ou iguais a 2, refletindo a independência de spin da interação residual.

Neste modelo, é possível descrever os níveis do ^{101}Ru observados pelo decaimento do ^{101}Rh e identificar níveis que podem corresponder ao multipleto de um fonon. Tanto o cálculo perturbativo quando a diagonalização foram efetuadas [Va84] e um resumo dos resultados pode ser encontrado também em [Va85] . Aqui, nos limitamos a apresentar na tabela 3 as atribuições resultantes, que interpretaremos qualitativamente.

Tabela 3. Níveis conhecidos de paridade positiva do ^{101}Ru com energia de excitação até 720 keV [Ha79, Ka83, Du94, Va84], identificados pela energia de excitação E e spin I^{π}. Na coluna marcada S estão os fatores espectroscópicos medidos na reação ^{100}Ru(d,p)^{101}Ru [Du94] e nas três últimas colunas estão o momento angular j do nível de quase-partícula, o número de fonons n e o momento angular do caroço, R.

E(keV)	I^{π}	S	j	n	R
0	$5/2^+$	2,1	5/2	0	0
127	$3/2^+$	0,067	5/2	1	2
307	$7/2^+$	5,3	7/2	0	0
311	$5/2^+$	<0,03	5/2	1	2
325	$1/2^+$	0,96	1/2	0	0
422	$3/2^+$	0,15			
531	$5/2^-$; $3/2^+$	0,72; 0,75			
545	$7/2^+$	não obs.	5/2	1	2
616	$(5/2^+)$	não obs.			
623	$1/2^+$	0,063	5/2	1	2
685	$5/2^-$; $3/2^+$	0,17; 0,18			
720	$9/2^+$	não obs.	5/2	1	2

Consegue-se atribuir uma configuração à maioria dos níveis conhecidos até 720 keV de energia de excitação. Os níveis interpretados como níveis de 0 fonon (E=0; 307; 325keV) são caracterizados pelos fatores espectroscópicos elevados. Os níveis $5/2^+$ e $7/2^+$ de 0 fonon (E=0 e E=307 keV, respectivamente), embora muito próximos em energia, não misturam-se apreciavelmente devido à regra de seleção contida no elemento de matriz da interação residual que, por independer de spin, dificulta transições de *spin-flip* entre orbitais de momento angular maior ou igual a 2, que é uma das características marcantes deste potencial de interação, com esta consequência plenamente observada no espectro do ^{101}Ru. Caso estas configurações interagissem fortemente, também não seria possível identificar um grupo de níveis como o multipleto de um fonon de qualquer uma dessas configurações.

O grupo de níveis com energias de excitação E=127; 311; 545; 623 e 720 keV, atribuído ao multipleto de um fonon da configuração $d_{5/2}$, embora muito disperso em energia, tem um centróide de energia igual a 506 keV, que compara-se bem com as energias dos primeiros estados 2^+ dos isótopos vizinho, 540 e 475 keV para o ^{100}Ru e ^{102}Ru, respectivamente [Le78]. Estes estados são caracterizados por terem fatores espectroscópicos muito baixos e probabilidades de transição E2 para o estado fundamental — j=5/2 $\otimes$ 0 fonon — muito elevadas comparadas com a unidade Weisskopf, na faixa 200 a 1000 e^2fm^4 . A única transição E2 intramultipleto conhecida (e que foi observada em nosso estudo de espectroscopia gama), entre os níveis de 545 e 127 keV, tem probabilidade reduzida de transição igual a 26(10) e^2fm^4, compatível com o valor da unidade Weisskopf, 28 e^2fm^4.

Resta discutir o rebaixamento pronunciado do nível $3/2^+$ do multipleto de 1 fonon acoplado a uma quase-partícula com j=5/2. O nível de spin j-1 do multipleto de 1 fonon acoplado a uma quase-partícula de spin j é sempre favorecido em energia em comparação aos demais membros do multipleto de 1 fonon quando a sub-camada de spin j está semi-preenchida. Este favorecimento é atribuído à contribuição da configuração j^3 , de maneira que cálculos usuais com o modelo de 1 quase-partícula fonon são incapazes de explicar este fenômeno. É possível, porém, realizar cálculos perturbativos, que mostram que o nível j-1 é sempre o mais favorecido no multipleto de 1 fonon [Bo75]. Neste caso dos isótopos do Ru, este rebaixamento é observado desde o ^{97}Ru até o ^{103}Ru mas não para o ^{95}Ru, quando não há possibilidade de haver 3 quase-partículas na sub-camada j=5/2, o que é consistente com a justificativa da regra j-1.

4.6. O Modelo Rotacional

Não é todo sistema que apresenta espectros rotacionais, o átomo servindo de exemplo notável de um sistema incapaz de rodar. Já em muitos núcleos há evidências de rotação, embora esta não pareça ser uma propriedade geral de todos eles. As características rotacionais observadas conduziram ao modelo que considera o núcleo deformado em um referencial girante.

Chamaremos de x, y e z os eixos tri-ortogonais do sistema de coordenadas de laboratório e de x', y' e z' os eixos do sistema de coordenadas intrínseco. O conjunto dos três ângulos de Euler que define a posição do sistema intrínseco em relação ao sistema de Laboratório será simbolizado por $\hat{\theta}$. Descreve-se o sistema todo por uma função

$$\psi_K(IM) \propto D^I_{MK}(\hat{\theta})\chi_K \quad , \tag{18}$$

em que χ_K representa a função de onda no sistema intrínseco onde o núcleo é deformado, portanto não invariante por rotação, e as funções $D^I_{MK}(\hat{\theta})$ correspondem aos elementos de matriz do operador de rotação para uma rotação $\hat{\theta}$. Combinando χ_K e $D^I_{MK}(\hat{\theta})$ adequadamente, restaura-se a simetria quebrada no sistema intrínseco.

Veremos no capítulo 5 uma hipótese ainda mais forte, de que sequer a paridade é uma simetria do Hamiltoniano no sistema intrínseco, hipótese esta necessária para interpretar as bandas de paridade alternada observadas nos actinídeos leves.

O modelo rotacional e o cálculo de probabilidades de transição eletromagnética serão apresentados nas seções subsequentes. Na seção 4.10 apresentaremos um exemplo concreto com o núcleo $^{164}Ho_{67}$, encerrando nossa discussão dos esquemas de acoplamento nucleares básicos. Mesmo em sua versão mais simples, o modelo rotacional tem imenso sucesso na explicação dos espectros observados, principalmente nas regiões de números de massa $150<A<190$ e $A>220$.

4.7. Hamiltoniano de rotação e funções de onda.

4.7.1. Forma geral

Em sua versão mais simples, o modelo rotacional supõe o núcleo axialmente simétrico no sistema intrínseco, de maneira que uma rotação em torno do eixo de simetria nuclear z' não altera a função de onda. É esta simetria, remanescente da simetria de rotação em geral que não vale mais por hipótese, que permite separar claramente a parte intrínseca da parte rotacional da função de onda como está na expressão (18) acima. O Hamiltoniano tem exatamente a mesma estrutura daquele utilizado na descrição de núcleos vibracionais, equação (8):

$$H = H_{\text{intrinseco}}(\vec{r}_i') + H_{\text{rot}}(\hat{\theta}) + H_{\text{acop}}(\hat{\theta}, \vec{r}_i') \tag{19}$$

onde $\vec{r}_i'$ representa a posição da partícula i no sistema intrínseco e juntamos em $H_{\text{intrinseco}}$ o Hamiltoniano de partícula e os demais termos que só dependem da coordenada intrínseca. A parte coletiva agora gera o espectro rotacional,

$$H_{\text{rot}}(\theta_i) = \frac{\hbar^2}{2\Im}\vec{I}^2 \tag{20}$$

onde $\vec{I}$ é o vetor momento angular total do núcleo e $\Im$ o momento de inércia. O Hamiltoniano intrínseco contém as grandezas que podem ser completamente determinadas no sistema intrínseco

$$H_{\text{intrinseco}}(\vec{r}_i') = H_{part} + \frac{\hbar^2}{2\Im}\vec{J}^2 - \frac{\hbar^2}{\Im} I_{z'} J_{z'} \quad , \tag{21}$$

onde $\vec{J}$ é o vetor momento angular total de partícula no sistema intrínseco. O Hamiltoniano de interação é a parte da interação partícula-rotação que não é diagonal, que pode ser interpretada como uma interação de Coriolis,

$$H_{\text{acop}}(\hat{\theta}, \vec{r}_i') = -\frac{\hbar^2}{\Im}\left(I_{x'} J_{x'} + I_{y'} J_{y'}\right) \quad . \tag{22}$$

Nas expressões acima, o momento angular de rotação coletivo, $\vec{R}$, foi substituído por

$$\vec{R} = \vec{I} - \vec{J} \quad . \tag{23}$$

A função de onda intrínseca é definida por

$$H_{\text{intrinseco}}\, \chi_K = E_K \chi_K \tag{24}$$

onde E_K é a parte intrínseca da energia e a função de onda é uma superposição de funções de onda de diferentes momentos angulares,

$$\chi_K = \sum_J C_J \left| JM = K \right\rangle \quad , \tag{25}$$

todas com projeção de momento angular no eixo Oz' iguais a K. Na aproximação mais simples χ_K é a mesma para toda a família de estados baseados numa certa estrutura intrínseca. Em princípio, devíamos ter colocado um número quântico adicional a K para identificar estruturas intrínsecas diferentes com mesmo valor de projeção do momento angular, mas isto não é usualmente necessário na descrição de núcleos a baixa energia de excitação.

A rotação de 180° em torno de qualquer um dos eixos x', y' não altera a função de onda, de maneira que

$$e^{-i\pi R_{y'}} \psi_K = \psi_K \quad .$$

Este operador atua tanto sobre a função de onda intrínseca quanto nos elementos de matriz de rotação,

$$e^{-i\pi R_{y'}} \chi_K = \sum_J (-1)^{J+K} C_J \left| J, -K \right\rangle$$

e

$$e^{-i\pi R_{y'}} D^J_{MK}\left(\hat{\theta}\right) = (-1)^{J+K} D^J_{M,-K}\left(\hat{\theta}\right)$$

A fim de obtermos uma expressão compacta para a função de onda, definimos o operador $\overline{(-1)}^J$ por

$$\overline{(-1)}^J \chi_K = \sum_J (-1)^J C_J \left| JK \right\rangle \tag{26}$$

A função de onda, para $K \neq 0$ e nas situações onde H_{acop} possa ser desprezado, respeitando a simetria adicional de rotação em torno de y', é

$$\psi_K(IM) = \sqrt{\frac{2I+1}{16\pi^2}} \left\{ \chi_K D^I_{MK}(\hat{\theta}) + \overline{(-1)}^{I-J} \chi_{-K} D^I_{M-K}(\hat{\theta}) \right\} \qquad (27)$$

onde K é a projeção do momento angular total no eixo de simetria do sistema intrínseco, constituindo-se no número quântico que caracteriza a banda rotacional. O espectro de energia fica

$$E_{IK} = \frac{\hbar^2}{2\Im} I(I+1) + E_K \quad . \qquad (28)$$

O Hamiltoniano de interação, H_{acop} da fórmula (22), pode ser reescrito em termos dos operadores elevador e abaixador de momento angular, resultando que ele tem elementos de matriz não nulos apenas entre estados intrínsecos K e K' tais que $|K - K'| = 1$. Portanto, nos núcleos em que não ocorram dois estados intrínsecos em energias próximas com números quânticos K consecutivos, a interação pode ser desprezada.

A figura 5 apresenta o esquema de níveis do ^{164}Ho a energias de excitação abaixo de 600 keV, com os níveis arranjados em bandas, com as respectivas atribuições de números quânticos K [Sh92]. Note-se que a banda do estado fundamental tem $K^\pi = 1^+$ e a banda mais próxima em energia que pode perturbar esta banda via interação de Coriolis é a banda $K^\pi = 2^+$ com 486 keV de energia de excitação, diferença de energia suficiente para garantir o isolamento das duas bandas, ao menos para os níveis de spins elevados. Como a interação de Coriolis depende do spin I (fórmula 22), a mistura entre bandas é menor entre os estados de menor momento angular da banda[2], tais como os de spin 1^+, 2^+ e 3^+ da banda do estado fundamental, o que viabiliza cálculos de probabilidade de transição entre esses níveis, como mostraremos na seção seguinte. Como prova mais simples do caráter rotacional dessa banda do estado fundamental, apresentamos na tabela 4 o espectro rotacional calculado pela fórmula (28) ajustando-se os dois parâmetros pelos dois primeiros níveis de energia, comparado com o experimental.

---

[2] Calculando o elemento de matriz de H_{acop} entre estados com números quânticos K e $K+1$, o operador I_- fornece um fator $\sqrt{I(I+1) - K(K+1)}$ que cresce à medida que o momento angular I afasta-se do número quântico K. Não é, portanto, o valor absoluto do momento angular total que importa na intensidade da interação de Coriolis.

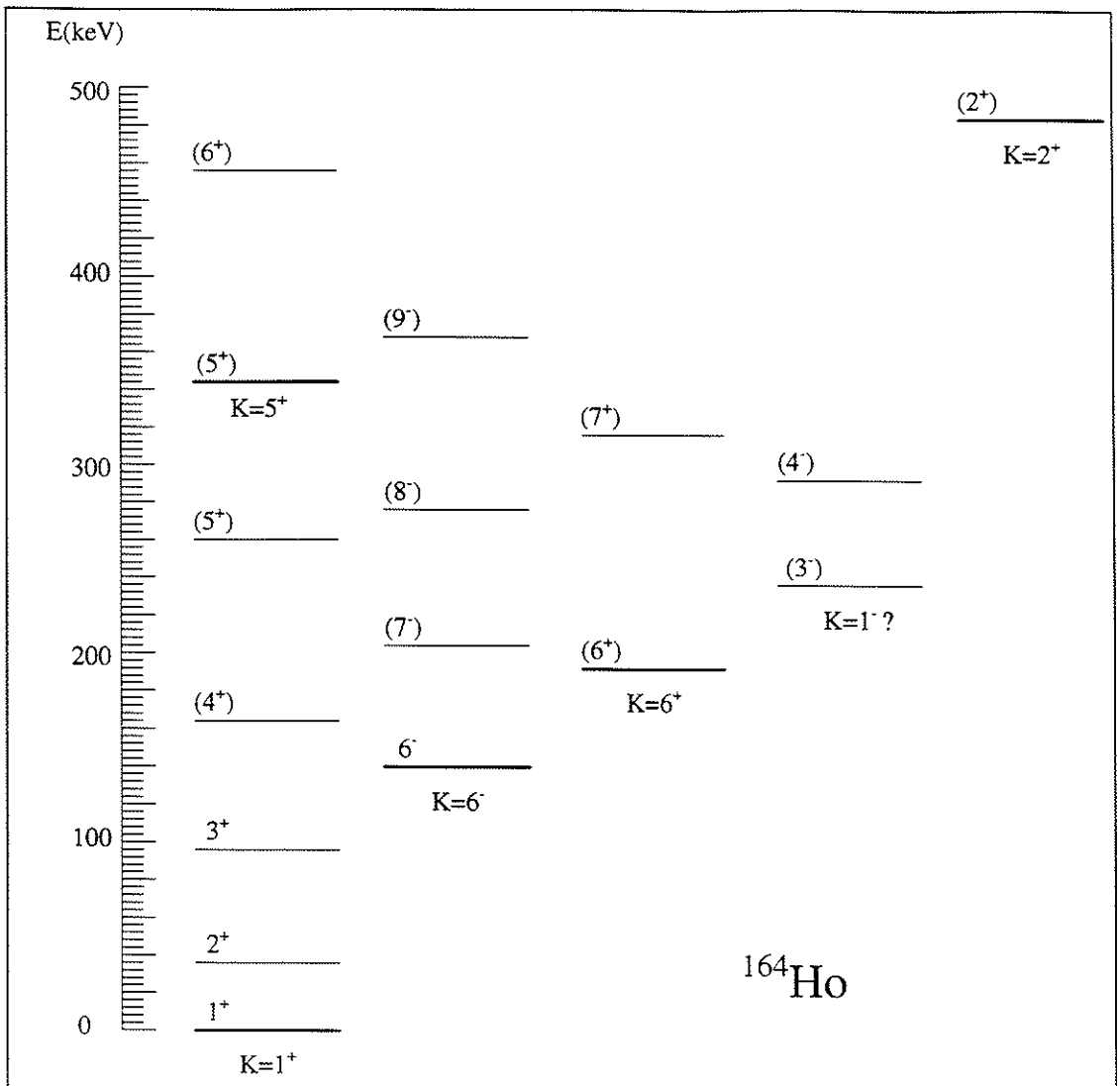


Figura 5. Níveis nucleares conhecidos do ^{164}Ho com energia de excitação menor que 500 keV e números quânticos de projeção do momento angular no eixo de simetria e paridade, K^{π}, atribuídos [Sh92].

I	Energia de excitação(keV)	
	experimental	teórico
1	0	0
2	37.34	37.34
3	94.0	93.3
4	166	168
5	262	261

Tabela 4. Comparação entre o espectro de energia experimental dos níveis da banda do estado fundamental do ^{164}Ho [Sh92] com o calculado pela fórmula (28) utilizando os parâmetros determinados a partir dos níveis de spins 1 e 2.

4.7.2. A estrutura intrínseca

Apresentaremos aqui muito resumidamente o clássico modelo de Nilsson para a estrutura intrínseca de núcleos axialmente simétricos [Ni55, Gu67]. Considerando apenas a deformação quadrupolar, a intensidade da deformação axial pode ser expressa por um único parâmetro δ, que relaciona-se com os semi-eixos do elipsóide de revolução por

$$\delta = \frac{R_{paralelo} - R_{\perp}}{R_0} \tag{29}$$

onde paralelo e perpendicular são relativos ao eixo de simetria nuclear, resultando, portanto, em um valor positivo para núcleos prolatos e negativo, para núcleos oblatos.

O Hamiltoniano de partícula é

$$H_{part} = H_0 + C\vec{\ell}\cdot\vec{s} + D\left(\vec{\ell}^2 - \left\langle \vec{\ell}^2 \right\rangle_N\right) \tag{30}$$

onde H_0 é o Hamiltoniano de um oscilador harmônico axialmente deformado,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + \frac{M}{2}\left(\omega_{x'}^2 x'^2 + \omega_{y'}^2 y'^2 + \omega_{z'}^2 z'^2\right) \tag{31}$$

com as frequências relacionadas com a deformação nuclear por

$$\omega_{x'}^2 = \omega_{y'}^2 = \omega_0^2\left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) \quad \text{e} \quad \omega_{z'}^2 = \omega_0^2\left(1 - \frac{4}{3}\delta\right) \tag{32}$$

O Hamiltoniano da equação (31) pode ser separado em um termo esfericamente simétrico e outro diretamente proporcional à deformação,

$$H_0 = \hat{H}_0 + H_\delta \tag{33}$$

onde o oscilador esfericamente simétrico

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(-\nabla^2 + r^2\right) \tag{34}$$

foi escrito em coordenadas adimensionais

$$\vec{r} = \left(\sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} x', \sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} y', \sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} z' \right)$$

e a frequência de vibração ω_0 é dependente da deformação, de maneira a garantir o mesmo volume nuclear para qualquer deformação,

$$\omega_0(\delta) = \widehat{\omega}_0 \left(1 - \frac{4}{3}\delta^2 - \frac{16}{27}\delta^3 \right)^{-\frac{1}{6}} .$$

O termo proporcional à deformação é

$$H_\delta = -\frac{4}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \delta \hbar \omega_0 r^2 Y_{20} \tag{35}$$

onde Y_{20} é o harmônico esférico de 2ª ordem.

O Hamiltoniano da expressão (30) pode ser diagonalizado na base $|N\ell\Lambda\Sigma\rangle$, onde N é o número da camada do oscilador, ℓ o momento angular orbital com Λ a sua projeção e Σ a projeção do spin, todos referidos ao sistema intrínseco e as projeções realizadas sobre o eixo de simetria.

Na função de onda deixamos clara a existência de outro número quântico adicional, α, que distingue os diversos auto-vetores que resultam da diagonalização do Hamiltoniano (30) para um certo K,

$$\chi_{\Omega\alpha} = \sum_{N\ell\Lambda\Sigma} a^{\alpha}_{N\ell\Lambda\Sigma} |N\ell\Lambda\Sigma\rangle \tag{36}$$

onde simbolizamos por Ω a projeção do momento angular da partícula no eixo de simetria sistema.

4.8. Modelo de partícula única do núcleo ímpar-ímpar deformado

Descreveremos a estrutura intrínseca do núcleo ímpar-ímpar por

$$\chi_K = \phi_{caroço} \xi_{\Omega_n} \xi_{\Omega_p}$$

Supondo válida a aproximação de acoplamento forte, ainda assim dois valores do número quântico K são possíveis

$$K_+ = |\Omega_p| + |\Omega_n| \rightarrow \chi_+ = \phi_{caroco}\xi_{|\Omega_p|}\xi_{|\Omega_n|} \tag{37}$$

e

$$K_- = |\Omega_p| - |\Omega_n| \rightarrow \chi_- = \phi_{caroco}\xi_{|\Omega_p|}\xi_{-|\Omega_n|} \tag{38}$$

As outras possibilidades: ambos os sinais negativos e troca dos sinais das projeções dos momentos angulares do próton e do nêutron no sistema intrínseco, recaem nas mesmas funções devido à simetria de reflexão da função de onda total do núcleo e ao fato de $\xi_{|\Omega|}$ e $\xi_{-|\Omega|}$ serem degeneradas. Embora muito simples, este modelo ainda constitui a base dos modelos utilizados em núcleos deformados ímpar-ímpares, veja por exemplo [Kv92,Re97].

Em ordem zero, também χ_+ e χ_- deveriam ser degeneradas. Mas o potencial de interação residual remove essa degenerescência. Um modelo para a interação entre o próton e o nêutron, do tipo spin-spin favorecendo o estado tripleto de spin, explica a ordenação em energias dessas duas estruturas, de maneira semi-quantitativa [El74]. Neste capítulo, não detalharemos esta interação residual mas o faremos na seção 5.1, quando estudarmos o problema análogo em núcleos esféricos. Aqui, só utilizaremos essa interação residual próton-nêutron para definir a estrutura intrínseca.

No caso do ^{164}Ho, a estrutura intrínseca adequada para o nível 1^+ é $\{\pi[523]7/2^+ - \nu[523]5/2^+\}_{K=1}$, onde o sinal - entre as representações dos orbitais chama a atenção para o fato das projeções dos momentos angulares do próton e do nêutron no eixo de simetria terem sentidos opostos, ou seja, usaremos a função de onda da expressão (38) acima.

4.9. Probabilidades de transição eletromagnética em núcleos deformados.

4.9.1. Geral.

A relação entre probabilidade reduzida de transição e os operadores de transição está na expressão (5) no início do capítulo mas, para a utilizarmos nos núcleos deformados, precisamos antes estabelecer a relação

entre os operadores tensoriais no sistema de Laboratório e intrínseco. O resultado obtido, bem apresentado em [Ro70] e [Sh74], para uma transição de multipolaridade λ é

$$B(\lambda; K_i I_i \rightarrow K_f I_f) = \frac{1}{(1+\delta_{K_i,0})(1+\delta_{K_f,0})} \cdot$$
$$\left\{ \langle I_i \lambda K_i (K_f - K_i) | I_f K_f \rangle \langle K_f | M^{\lambda}_{K_f - K_i} | K_i \rangle \right. \tag{39}$$
$$\left. (-1)^{I_i + K_i} \langle I_i \lambda - K_i (K_f + K_i) | I_f K_f \rangle \langle K_f | M^{\lambda}_{K_f + K_i} | \overline{K_i} \rangle \right\}^2$$

onde os subscritos i e f identificam os estados inicial e final, respectivamente e $|\overline{K}\rangle$ é definido por

$$|\overline{K}\rangle = \overline{(-1)}^{J+K} |-K\rangle \quad .$$

A relação (39) implica numa regra de seleção de transição entre níveis de bandas diferentes, proibindo aquelas onde a multipolaridade da transição seja insuficiente para cobrir a diferença entre os números quânticos K das duas bandas, independentemente dos spins nucleares. Define-se grau de proibição de uma transição eletromagnética ao número n dado por

$$n = |K_f - K_i| - \lambda \quad . \tag{40}$$

É um fenômeno bem conhecido que a cada grau de proibição a transição é retardada de um fator da ordem de 100 [Bo75], o que dá uma dimensão do quanto K é um bom número quântico. Por exemplo, a transição E3 entre os níveis $I^{\pi} = K^{\pi} = 6^-$ e $I^{\pi} = 3^+$, $K^{\pi} = 1^+$ do ^{164}Ho que estamos usando como exemplo, tem velocidade de transição igual a $1{,}6 \cdot 10^{-4}$ unidades Weisskopf, mostrando o retardamento típico de uma transição cujo grau de proibição é 2. Seguir essa regra é uma indicação de pureza das configurações dos estados intrínsecos envolvidos, desde que misturas de bandas tendem a reduzir o grau de proibição.

4.9.2. Probabilidade de transição de dipolo magnético, M1.

O operador de transição de dipolo magnético é

$$\hat{\vec{M}}^{M1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{e\hbar}{2Mc}\left(\vec{\mu}_p + g_R\vec{R}\right) \tag{41}$$

onde $\vec{\mu}_p$ é o momento de dipolo magnético das partículas no sistema intrínseco e $g_R\vec{R}$ o momento de dipolo coletivo, com g_R o fator giromagnético coletivo, que pode ser bem aproximado por

$$g_R \approx \frac{Z}{A} \tag{42}$$

Para transições intrabanda, a contribuição coletiva restringe-se à parte que depende do momento angular intrínseco,

$$\langle IK|g_R\vec{R}|I+1\ K\rangle = \langle IK|-g_R\vec{J}|I+1\ K\rangle$$

porque os níveis têm spins diferentes. Utilizando a fórmula (39) e evitando o caso K=1/2 ,

$$B\left(M1; KI_i \to KI_f\right) = \frac{3}{4\pi}\left(\frac{e\hbar}{2Mc}\right)^2 \left\{\langle I_i 1K0|I_f K\rangle\langle K|\left(\vec{\mu}' - g_R\vec{J}\right)|K\rangle\right\}^2$$

$$= \frac{3}{4\pi}\left(\frac{e\hbar}{2Mc}\right)^2 \langle I_i 1K0|I_f K\rangle^2 (g_K - g_R)^2 K^2 \qquad K\neq 1/2 \tag{43}$$

exibindo a dependência nos fatores giromagnéticos coletivo, g_R, e intrínseco, g_K, definido por

$$g_K K = \langle K|\mu'_{z'}|K\rangle \tag{44}$$

Em um núcleo ímpar-ímpar, utilizando a função de onda produto da fórmula (37) ou (38), o fator giromagnético reduz-se simplesmente à soma dos fatores giromagnéticos do próton e do nêutron,

$$g_K K = g_n\Omega_n + g_p\Omega_p \tag{45}$$

onde Ω_p e Ω_n são as projeções dos momentos angulares intrínsecos do próton e do nêutron ímpares no eixo de simetria nuclear e g_p e g_n os respectivas fatores giromagnéticos, definidos por

$$g_p\Omega_p = \langle p | g_p^{\ell} \ell'_{z'p} + g_p^{s} s'_{z'p} | p \rangle \tag{46}$$

onde g_p^{ℓ}, g_p^{s} são as constantes giromagnéticas orbital e de spin e $\ell'_{z'p}, s'_{z'p}$ são os operadores de momento angular orbital e de spin no sistema intrínseco. O fator giromagnético do nêutron é calculado analogamente.

4.9.3. Probabilidade de transição de quadrupolo elétrico, E2.

A probabilidade reduzida de transição, calculada conforme (39) para transições intrabanda, é

$$B(E2; KI_i \rightarrow KI_f) = \langle I_i 2K0 | I_f K \rangle^2 \langle K | M_0^{E2} | K \rangle^2 \quad , \quad K \neq \tfrac{1}{2}, 1 \tag{47}$$

A restrição $K \neq 1$, decorrente do termo $\langle K | M_2^{E2} | \overline{K} \rangle$ da fórmula (39) que não é geralmente nulo para K=1, pode ser levantada em núcleos ímpar-ímpar utilizando o modelo das fórmulas (37) e (38), porque a função de onda intrínseca com projeção $-K$ é obtida invertendo simultaneamente as projeções do próton e do nêutron, conduzindo sempre a um termo ortogonal nesse elemento de matriz, de maneira que utilizaremos (47) no exemplo de núcleo ímpar-ímpar que estamos apresentando apesar de corresponder a uma configuração com $K=1$.

Transições de quadrupolo elétrico intrabanda são dominadas pela componente coletiva do operador de transição, de maneira que neste caso aproximaremos

$$M_0^{E2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} e \hat{Q}_0$$

onde $\hat{Q}_0$ é o operador de momento de quadrupolo, obtendo-se finalmente

$$B(E2; KI_i \rightarrow KI_f) = \frac{5}{16\pi} \langle I_i 2K0 | I_f K \rangle^2 e^2 Q_0^2 \tag{47}$$

4.9.4. Regras de intensidade

As fórmulas (43) e (47) mostram que as probabilidades das diferentes transições M1 e E2 dentro de uma mesma banda dependem de dois fatores. Um é o intrínseco, específico da estrutura intrínseca, sendo o mesmo para todos os níveis da banda. O outro é um coeficiente de acoplamento de momentos angulares que, afora o número quântico K, depende apenas dos momentos angulares dos estados envolvidos. É possível, então, relacionar probabilidades de transição de maneira independente da estrutura intrínseca, por exemplo

$$\frac{B(E2;KI_i \to KI_f)}{B(E2;KI'_i \to KI'_f)} = \frac{\langle I_i 2K0 | I_f K\rangle^2}{\langle I'_i 2K0 | I'_f K\rangle^2} \quad . \tag{48}$$

Especializando-se os valores dos spins, podem ser determinadas regras de intensidade, genericamente conhecidas como regras de Alaga [Bo75]. Como ilustração, escolheremos $I_f = I_i - 2$ e $I'_f = I'_i - 2$ com o estado intermediário comum, isto é, $I_f = I'_i$, quando obtemos

$$\frac{B(E2;KI \to K(I-2))}{B(E2;K(I-2) \to K(I-4))} =$$

$$\frac{(I-K)(I-K-1)(I+K)(I+K-1)}{(I-K-2)(I-K-3)(I+K-2)(I+K-3)} \cdot \frac{(I-3)(2I-5)(I-2)(2I-3)}{(I-1)(2I-1)I(2I+1)}$$

A fórmula acima mostra que, para $I >> K$ a probabilidade reduzida de transição é constante, o que é uma das características que leva à atribuição de K=0 às bandas rotacionais de muito alto spin encontradas nos núcleos superdeformados. Aqui, a utilizaremos para verificar se a sequência de níveis com $I^\pi = 0^+, 2^+, 4^+$, do ^{102}Ru apresentado na seção 4.2 como níveis vibracionais com 0,1 e 2 fonons, poderia, do ponto de vista de intensidades relativas de transição E2, ser associada a uma banda com K=0. O resultado obtido

$$\frac{B(E2;K=0,I=4 \to K=0,I=2)}{B(E2;K=0,I=2 \to K=0,I=0)} = \frac{10}{7} \quad .$$

é mais apropriado ao exemplo da tabela 1 do que a previsão do modelo vibracional, onde espera-se um fator 2 (fórmula 7), embora não seja muito significativo considerando-se as incertezas experimentais (tabela 1).

4.10. Exemplo de propriedades eletromagnéticas em núcleos deformados

No estudo do decaimento do estado isomérico do ^{164}Ho [Va77], observa-se a transição de cross-over entre os níveis $I^{\pi}=3^{+}$ e $I^{\pi}=1^{+}$, sugerindo o favorecimento da transição E2 de maneira a permitir a competição com a transição, predominantemente M1, entre os níveis $I^{\pi}=3^{+}$ e $I^{\pi}=2^{+}$, conforme a figura 6. A tabela 5 apresenta os demais dados necessários aos cálculos efetuados nesta seção.

Como as meias-vidas dos níveis são desconhecidas, não é possível comparar-se as probabilidades de transição absolutas. Para testar o modelo, portanto, escolhemos a razão entre a probabilidade de transição E2 entre os níveis $I=3^{+}$ e $I=1^{+}$ e a probabilidade de transição M1 entre os níveis $I=3^{+}$ e $I=2^{+}$. Efetuando-se os cálculos como descrito acima e detalhados em [Va77], obtém-se

$$\frac{T\left(E2;3^{+}\rightarrow 1^{+}\right)}{T\left(M1;3^{+}\rightarrow 2^{+}\right)}=0{,}018$$

a comparar com o valor experimental,

$$\frac{T\left(E2;3^{+}\rightarrow 1^{+}\right)}{T\left(M1;3^{+}\rightarrow 2^{+}\right)}=0{,}022(2)$$

onde a contribuição E2 para a transição entre os níveis níveis $I^{\pi}=3^{+}$ e $I^{\pi}=2^{+}$ foi descontada utilizando-se a regra de intensidade da fórmula (48).

Tabela 5. Energias, razões de ramificação, multipolaridades e coeficientes de conversão interna dos gamas que seguem o decaimento do ^{164m}Ho [Sh92].

$E_{nível}$ (keV)	E_{γ} (keV)	I_{γ}	Mult.	CCI
37,34	37,34(5)	100	M1	7,69
94,0	56,65(5)	100(6)	M1	13,9
	94,0(1)	2,3(3)	(E2)	3,61
140	46	100	E3	4540

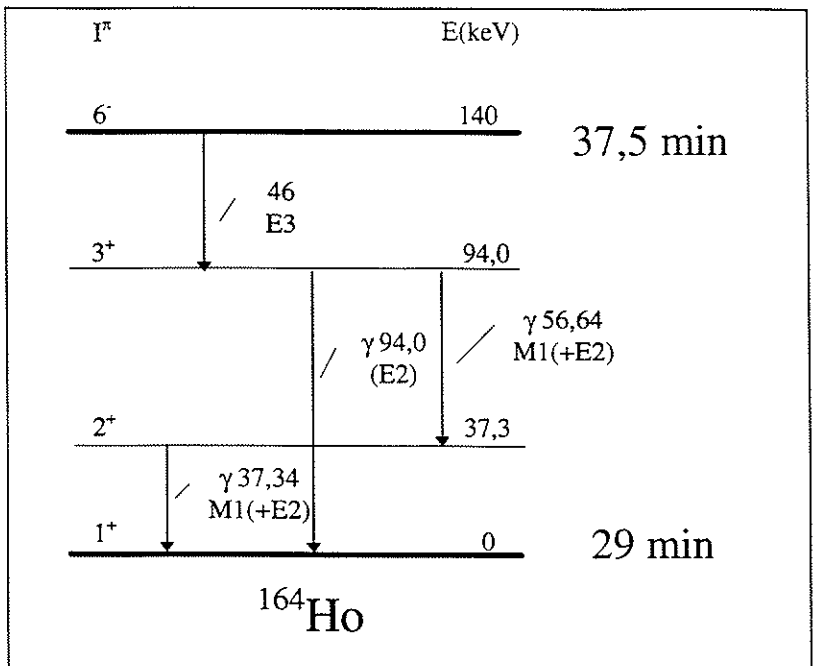


Figura 6. Esquema de decaimento do estado isomérico do ^{164}Ho [Sh92].

5. Núcleos de transição.

No estudo da estrutura nuclear dos núcleos apresentados a seguir, ficou evidente que os modelos disponíveis não fornecem solução completa. Estes são núcleos chamados de transicionais e explicaremos em que sentido cada um deles é incluído nessa categoria.

5.1. Nem esférico nem deformado.

Um estudo recente de espectroscopia gama permitiu definir a ordenação em energia dos níveis isoméricos do ^{102}Rh [Bi91], posteriormente confirmado no estudo do decaimento de uma fonte de Rh produzida no LAL [Ca97]. Essa determinação, em princípio, auxilia na atribuição de configurações a esses níveis. Veremos, porém, que não é possível atribuir configurações aos níveis no modelo de partícula única supondo o núcleo esférico nem tampouco supondo-o deformado.

A figura 1 apresenta as principais propriedades dos níveis isoméricos do ^{102}Rh [Fr91, Bi91, Ca97]. Os spins são bem conhecidos [Fr91], [Hi89] e orientam a escolha das configurações.

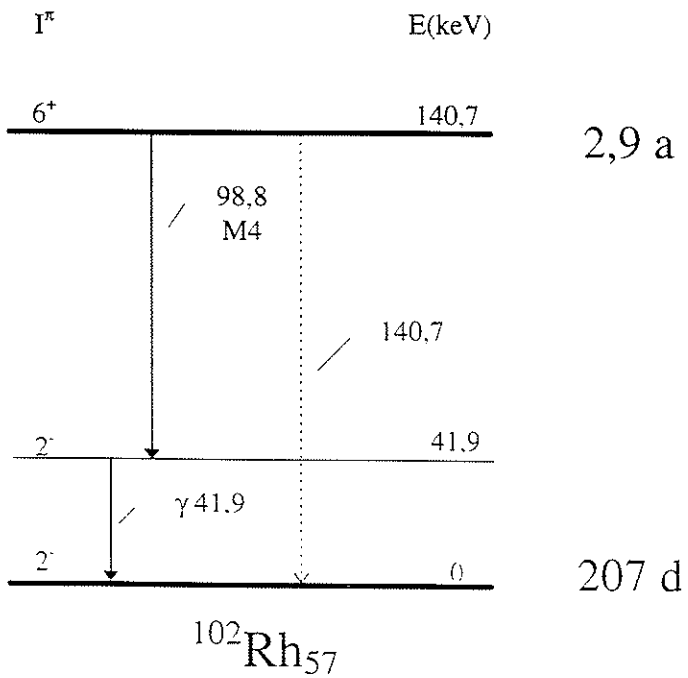
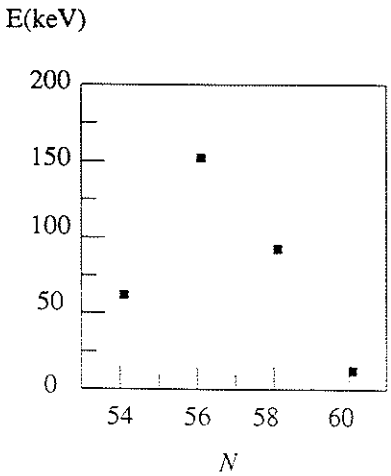


Figura 1. Esquema de decaimento dos níveis isoméricos do ^{102}Rh [Bi91].

Os estados fundamentais dos isótopos de Rh, com números de massa em torno de A=102, têm spins $9/2^+$ e $1/2^-$ e podem ser identificados com os níveis de quase-partícula $1g_{9/2}$ e $2p_{1/2}$. Os isótonos ímpares do ^{102}Rh apresentam como estado fundamental ou de baixa energia de excitação níveis que correspondem bem aos orbitais $1g_{7/2}$ e $2d_{5/2}$. As figuras 2 e 3 apresentam as energias de excitação do primeiro nível

$9/2^+$ em relação ao nível $1/2^-$ dos isótopos do Rh em função do número de nêutrons e do primeiro nível $7/2^+$ em relação ao nível $5/2^+$ nos isótonos ímpares do ^{102}Rh em função do número de prótons, respectivamente. Se a interação próton-nêutron não for muito significativa, vê-se que é natural esperar que o estado fundamental do ^{102}Rh corresponda à configuração $[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]_2^-$ e o estado excitado à configuração $[\pi g_{9/2} \otimes \nu g_{7/2}]_6^+$ ou $[\pi g_{9/2} \otimes \nu d_{5/2}]_6^+$. No entanto, o spin resultante das configurações não está de acordo com a regra de Nordheim[3] exceto para o nível de spin 2^-, de maneira que procuraremos investigar quantitativamente a possibilidade dessas configurações fornecerem um estado 6^+ a baixa energia. Também detalharemos as consequências destas atribuições no que se refere às propriedades eletromagnéticas.

Figura 2. Energia do primeiro nível $9/2^+$ relativa ao nível $1/2^-$ nos isótopos do Rh, em função do número de nêutrons.



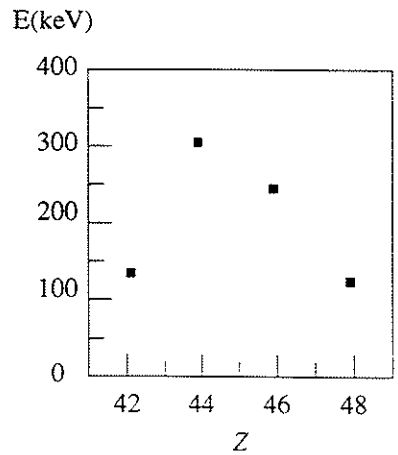


Figura 3. Energia do primeiro nível $7/2^+$ relativa ao nível $5/2^+$ nos isótonos do ^{102}Rh com A ímpar, em função do número de prótons.

[3] De acordo com a regra de Nordheim, o estado de menor energia com uma determinada configuração é aquele onde os momentos angulares totais do próton menos ligado, j_π, e do nêutron menos ligado, j_ν, são paralelos ou anti-paralelos, portanto $J = |j_\pi \pm j_\nu|$. Dessas duas possibilidades, a mais favorecida em energia é aquela que resulta em orientar os spins intrínsecos paralelamente. Essa regra, baseada qualitativamente nas propriedades de curto alcance da interação nuclear e favorecimento ao estado tripleto de spin, pode ser tornada quantitativa pelo cálculo apresentado aqui.

5.1.1. Espectro de energia

Vamos utilizar como interação residual uma interação p-n do tipo spin-spin, com a forma mais simples possível

$$v_{12} = \left(\frac{3+\sigma_1 \cdot \sigma_2}{4} V_t + \frac{1-\sigma_1 \cdot \sigma_2}{4} V_s \right) \delta\left(\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|\right) \tag{1}$$

onde

$\frac{3+\sigma_1 \cdot \sigma_2}{4}$ é o operador de projeção do estado tripleto de spin, $\frac{1-\sigma_1 \cdot \sigma_2}{4}$ é o operador de projeção do estado singleto de spin e V_t e V_s são as intensidades do potencial de tripleto e de singleto, respectivamente.

As diferenças de energias entre os estados de diferentes momentos angulares pode ser calculada em primeira ordem de perturbação como

$$\Delta E\left(j_p j_n J\right) = \left(2j_p + 1\right)\left(2j_n + 1\right) \frac{1}{8\pi} \int_0^\infty \frac{1}{r^2} R^2_{n_p l_p}(r) R^2_{n_n l_n}(r) dr \; F(J) \tag{2}$$

onde $R_{n_p l_p}(r)$ e $R_{n_n l_n}(r)$ são as funções de onda radiais do próton e nêutron, respectivamente, e

$$F(J) = \frac{1}{2J+1} \left\langle j_p \tfrac{1}{2} j_n - \tfrac{1}{2} \middle| J0 \right\rangle^2 \cdot \left(u_p u_n - v_p v_n\right)$$
$$\left[V_s \frac{1+(-1)^{l_p+l_n+J}}{2} + V_t \frac{1-(-1)^{l_p+l_n+J}}{2} \left(\frac{2j_p + 1 + (-1)^{j_p+j_n+J}\left(2j_n+1\right)^2}{4J(J+1)} \right) \right]$$

A tabela 1 apresenta as energias devidas a interação residual para os diferentes membros de cada um dos multipletos originados pelas configurações que podem originar cada um dos estados isoméricos do ^{102}Rh. As energias estão fornecidas em unidades de

$$\xi_{j_p j_n} = -V_t \int_0^\infty \frac{1}{r^2} R^2_{n_p l_p}(r) R^2_{n_n l_n}(r) dr \left(u_p u_n - v_p v_n\right) \tag{3}$$

onde V_t é definido negativo, sendo que utilizamos a razão $V_s / V_t = 0{,}6$.

Tabela 1. Valor da interação residual próton-nêutron para os membros dos vários momentos angulares possíveis J com as configurações prováveis dos estados isoméricos do ^{102}Rh, em primeira ordem de perturbação com a interação da fórmula (1).

configuração	$[\pi g_{9/2} \otimes \nu g_{7/2}]_J$	$[\pi g_{9/2} \otimes \nu d_{5/2}]_J$	$[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]_J$
J	energia($10^{-3}\xi_{9/2\,7/2}$)	energia($10^{-3}\xi_{9/2\,5/2}$)	energia($10^{-3}\xi_{1/2\,5/2}$)
1	-88		
2	-4	-68	-32
3	-5	-55	-20
4	-9	-25	
5	-1	-47	
6	-16	-12	
7	-0,3	-67	
8	-4		

A atribuição da configuração $[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]$ ao estado fundamental 2^- do ^{102}Rh é consistente com o resultado calculado mas nenhuma das configurações propostas para o nível isomérico têm chance de fornecer um nível 6^+ a baixa energia de excitação.

5.1.2. Momentos magnéticos

No modelo de partícula independente que estamos utilizando, o momento magnético do núcleo, μ, é determinado pela soma dos momentos magnéticos das duas partículas ímpares,

$$\mu = \mu_p + \mu_n \tag{4}$$

onde μ_p e μ_n são os momentos magnéticos do próton e do nêutron, respectivamente, e podem ser calculados pela fórmula de Landé

$$\mu_p = \frac{J(J+1) + j_p(j_p+1) - j_n(j_n+1)}{2(I+1)} g_p \tag{5}$$

$$\mu_n = \frac{J(J+1) - j_p(j_p+1) + j_n(j_n+1)}{2(I+1)} g_n \tag{6}$$

onde g_p e g_n são os fatores giromagnéticos do próton e do nêutron. Por sua vez, os fatores giromagnéticos podem ser estimados dos valores

experimentais dos momentos magnéticos dos núcleos ímpares vizinhos, $\mu_p = g_p j_p$ e $\mu_n = g_n j_n$, ou então pela fórmula de Schmidt com valores efetivos das constantes giromagnéticas de spin iguais a 70% dos valores de partícula livre. A tabela 2 apresenta os momentos magnéticos para as configurações selecionadas.

Tabela 2. Momentos magnéticos experimentais [Fr91] e calculados conforme as fórmulas (4) a (6) acima, para as configurações possíveis dos estados isoméricos do ^{102}Rh. Utilizou-se fatores giromagnéticos experimentais para os orbitais: $\pi g_{9/2}$ (g_p = 1,21, ^{101}Rh); $\pi p_{1/2}$ (g_p = -0,177, ^{103}Rh); $\nu d_{5/2}$ (g_n = -0,288, ^{101}Ru), com dados experimentais da ref. [Ra89] .

configuração	μ_p	μ_n	$\mu\left(\frac{e\hbar}{2Mc}\right)$	
			calculado	exp. [Fr91]
$[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]_2^-$	0,06	-0,67	-0,61	0,45(35)
$[\pi g_{9/2} \otimes \nu g_{7/2}]_6^+$	4,43	0,47	4,90	4,044(12)
$[\pi g_{9/2} \otimes \nu d_{5/2}]_6^+$	5,04	-0,53	4,51	4,044(12)

Das configurações sugeridas para o nível 6^+, $[\pi g_{9/2} \otimes \nu d_{5/2}]_6^+$ é a que tem melhor possibilidade de explicar o valor experimental do momento magnético, desde que é necessário orientar o nêutron paralelamente ao próton para cancelar parcialmente o grande momento magnético associado à configuração $\pi g_{9/2}$. Em relação ao momento magnético do nível 2^- , entre a simplicidade do cálculo e a grande barra de erro do valor experimental, não é possível extrair grandes conclusões.

5.1.3. Transições eletromagnéticas.

A intensidade da transição isomérica é bem determinada e, de acordo com [Bi91], ocorre predominantemente para um estado excitado, sendo de 10^{-4} unidades Weisskopf o limite máximo de intensidade da transição M4 para o estado fundamental. Considerando que a configuração do estado fundamental seja $[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]_2^-$ e a do estado excitado $[\pi g_{9/2} \otimes \nu d_{5/2}]_6^+$, não há qualquer razão para o retardamento dessa transição, sugerindo mais uma

vez que não é possível atribuir consistentemente configurações de partícula única no modelo esférico a ambos os estados isoméricos do ^{101}Rh.

5.1.4. Configurações no modelo de núcleo deformado

Nessa região de massa, há evidências de deformação para A>104, o que sugere que possamos encontrar configurações adequadas no modelo de núcleo deformado. Nessa região em torno de Z=45 e N=57, para deformações positivas, os orbitais próximos do nível de Fermi são:
prótons $7/2^+[413]$; $1/2^+[431]$; $1/2^-[301]$; $5/2^+[422]$ e $5/2^-[303]$
nêutrons $5/2^+[413]$; $3/2^+[411]$; $9/2^+[404]$; $3/2^+[422]$; $1/2^+[420]$
em ordem decrescente de energia, para δ~0,25 .

Verifica-se que não é possível encontrar uma configuração com $K^\pi = 6^+$ respeitando a regra de Gallagher-Moskowski [Ga58] (equivalente à regra de Nordheim para núcleos deformados), o que no caso de núcleos deformados é mais grave, porque são poucas as exceções a essa regra, das quais a mais conhecida corresponde à do estado fundamental do núcleo de ^{166}Ho (veja, por exemplo, [Kv92]). Assim, é necessário buscar um esquema de acoplamento mais complexo que o do acoplamento forte com funções de onda do tipo apresentadas na seção 4.8. Uma possibilidade corresponderia a uma deformação intermediária, onde a interação de Coriolis seria muito importante [St73, St75]. A configuração intrínseca corresponderia a uma mistura de estados intrínsecos com números quânticos K^π diferentes mas formados pelos mesmos orbitais de partícula,

$$\{\pi\, 9/2^+[404] \otimes \nu\, 1/2^+[431]\}_{K=4,5} \quad ,$$

onde o efeito de Coriolis rebaixaria o nível 6^+.

5.1.5. Reunindo os resultados

A atribuição da configuração $[\pi p_{1/2} \otimes \nu d_{5/2}]_2^-$ para o estado fundamental do ^{102}Rh é razoavelmente convincente mas não há nenhuma configuração simples que explique as propriedades do estado isomérico 6^+. A origem da dificuldade parece residir no fato de que este núcleo está com um número de prótons próximo a fechar a camada Z=50, o que introduz uma tendência à deformação oblata, ao mesmo tempo em que possui um razoável

número de nêutrons na camada 50-82 que o fazem tender a ser prolato. Sujeito a tendências à deformação opostas, este é um núcleo claramente transicional, sendo provável que nele coexistam diversas formas e que precisemos de modelos distintos para diferentes famílias de níveis.

5.2. Oblato e prolato

O núcleo de ^{189}Tl é um bom exemplo de coexistência de forma em um núcleo deformado. O esquema de níveis, como obtido por espectroscopia gama com o *Chatêau de Cristal* no CRN de Estrasburgo [Po91] está apresentado na figura 4. Recentemente, numa conferência, foram apresentados resultados preliminares diferentes dos nossos em alguns detalhes [Re95]. As diferenças apontadas, caso confirmadas, levariam apenas a mudanças nos detalhes da discussão a seguir, sem alterar a característica básica deste núcleo que ressaltamos aqui, qual seja, a de apresentar tanto bandas com deformação prolata quanto oblata.

A banda marcada com o número 4 na figura 4 é interpretada como uma partícula em $i_{13/2}$ acoplada a uma banda prolata, formando a chamada banda desacoplada [St73]. A identificação decorre dos spins observados e das separações em energia dos níveis da banda, muito similares às da banda prolata do ^{188}Hg [Ha88]. Esta identificação é auto-consistente, isto é, para deformações prolatas espera-se que o nível de fermi esteja abaixo do primeiro nível de Nilsson de forte parentesco $i_{13/2}$, que é [660]1/2$^+$, de maneira que há pouca interação entre partícula e caroço, permitindo o surgimento da banda desacoplada. A atribuição dos spins aos níveis dessa banda, em particular a determinação da paridade positiva efetuada neste experimento, deu suporte a essa interpretação.

Considerando o núcleo de ^{188}Hg, cuja banda do estado fundamental é oblata [Ha88], é natural esperar que a banda identificada pelo número 1 também corresponda a uma banda oblata. Ela não pode corresponder a uma banda regular com K=9/2 porque as intensidades das transições de quadrupolo elétrico não exibem as características de bandas de valores altos de K (veja seção 4.9.4), quando a intensidade reduzida de transição cresce com o spin. Assim, ela é interpretada como uma partícula em $h_{9/2}$ acoplada a um caroço oblato.

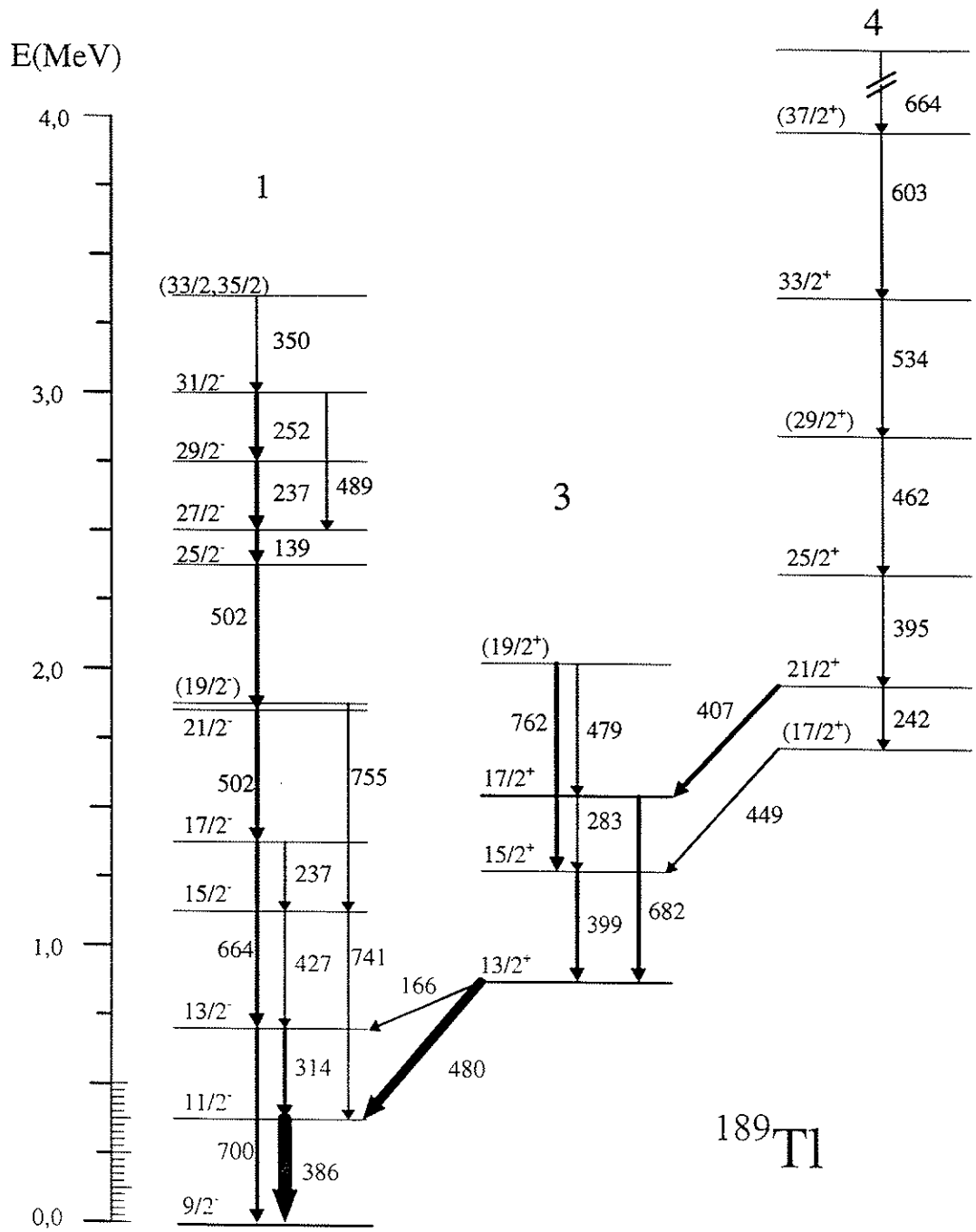


Figura 4. Fragmento do esquema de níveis do ^{189}Tl, conforme [Po91], contendo apenas as bandas discutidas no texto. As setas são grosseiramente proporcionais à intensidade da transição. A escala de energia toma como referência o nível 9/2⁻, cuja energia de excitação em relação ao fundamental é 281(7) keV [Fi90].

Cálculos completos sobre o núcleo de ^{188}Hg com o modelo de Strutinski, incluindo interação de emparelhamento, mostram a existência de dois mínimos nas curvas de potencial, que se refletem na sua estrutura de bandas [Ha88] e dão suporte à interpretação básica do ^{189}Tl acima. Procuramos mostrar a seguir que os detalhes do espectro observado são compatíveis com essa descrição das estruturas mais pronunciadas, reforçando essa interpretação.

Em primeiro lugar, a banda 3 pode ser atribuída ao acoplamento de uma partícula em $i_{13/2}$ acoplada ao caroço oblato, baseado nos seguintes fatos:

- a diferença de energia entre o nível $17/2^+$ da banda 4 e o nível $13/2^+$ da banda 3 no ^{189}Tl é 848 keV, a comparar com os 881 keV do nível 2^+ da banda prolata com o nível 0^+ da banda (oblata) do estado fundamental do ^{188}Hg ;
- a banda tem níveis de spins consecutivos (ΔJ=1), sem grande separação das duas assinaturas, o que ocorre para bandas com deformação oblata.

Em relação à banda 1, observa-se uma compressão dos níveis $25/2^-$, $27/2^-$ e $29/2^-$, diretamente relacionados ao agrupamento dos níveis 8^+, 10^+ e 12^+ do caroço de ^{188}Hg, que é exatamente o esperado para a configuração $h_{9/2}\otimes(^{188}\mathrm{Hg})_{\mathrm{gsb}}$. Além disso, embora não se observe nenhuma banda correspondente a $h_{9/2}$ acoplada ao caroço prolato, acreditamos que seus efeitos são observados na banda. Supondo que tal banda exista mas situe-se em energias maiores, ela teria spins $9/2^-$, $13/2^-$, $17/2^-$, etc. A inversão da ordem em energia dos níveis de spins $19/2^-$, 1882 keV, e $21/2^-$, 1866 keV, sugere que o nível $21/2^-$ dessa banda invisível está algo acima de 1882 keV, repelindo o nível $21/2^-$ que normalmente teria energia maior que o membro de spin $19/2^-$ da banda. O nível $19/2^-$ não é afetado, porque o seu par $19/2^-$ pertence à banda prolata desfavorecida, situando-se em energia muito superior. Acreditamos, então, que o mesmo mecanismo responde pela não observação do nível $23/2^-$: o nível $25/2^-$ da banda 1 também foi empurrado para energias abaixo daquela do nível $23/2^-$ pelo seu par da banda prolata, de maneira que terminamos sem observar esse nível, porque a energia de transição $27/2^- \rightarrow 23/2^-$ seria muito baixa, dificultando sua deteção. Esta discussão fica completa, apontando que essa banda $h_{9/2}\otimes(^{188}\mathrm{Hg})_{\mathrm{prolato}}$ deve ser desfavorecida em energia pelo bloqueio do orbital $h_{9/2}$, bastante ocupado na configuração prolata do caroço, porque as configurações de parentesco $h_{11/2}$ de maior projeção de momento angular Ω estão situadas a energias mais altas que as de parentesco $h_{9/2}$ para deformações prolatas significativas.

5.3. Octupolar e quadrupolar.

Os actinídeos leves oferecem uma oportunidade de observar os efeitos da deformação octupolar, porque os números de nêutrons e prótons além das camada N=126 e Z=82 é insuficiente para originar uma deformação quadrupolar significativa. O assunto é instigante, porque sua explicação exige a quebra de simetria de reflexão no sistema intrínseco. Participamos do estudo dos núcleos ^{218}Ra, ^{218}Ac e ^{220}Ac, mas os resultados experimentais serão apresentados detalhadamente apenas para o primeiro deles, sendo os dos demais apresentados de forma condensada e simplificada. Estes nuclídeos, em particular, são nuclídeos de transição, estando fora da classificação sistemática das bandas rotacionais nos actinídeos par-par realizada por Sood et al. [So92].

5.3.1. Estudo do ^{218}Ra.

Método Experimental

O núcleo de $^{218}Ra_{88}$ foi produzido na reação ^{208}Pb(^{14}C,4n) com feixe de 80 MeV e 4 nAp fornecido pelo acelerador van de Graaf de 18 MV do CRN de Estrasburgo. Utilizou-se um alvo auto-suportável de Pb enriquecido (>99%) com espessura efetiva de 2,5 mg/cm^2. As condições utilizadas permitem transferir até cerca de $35\hbar$ ao núcleo composto, com energia média cerca de 4 MeV acima daquela onde a seção de choque do canal 4n é máxima [Ce85].

O sistema detetor utilizado foi o Castelo de Cristal, com dois detetores de Raios-X de HPGe substituindo dois dos detetores de gama. Observaram-se 4.10^8 eventos gama-gama. As matrizes foram constituídas com eventos selecionados com diversos critérios, dois dos quais foram comuns a todas elas. Primeiro, só foram utilizados eventos onde a multiplicidade no filtro foi superior ou igual a 6, de maneira a favorecer a observação dos estados de spin mais elevado e reduzir o forte fundo de fissão. Segundo, foram selecionados apenas os eventos onde ambos os detetores de HPGe forneceram sinais de tempo no pico do espectro de tempo, de maneira a restar uma quantidade de coincidências acidentais desprezível.

Após esta seleção em multiplicidade e tempo, constituímos diversas matrizes E_γ- E_γ :

i. contendo todos os eventos;

ii. detetores coaxiais em um eixo contra detetores de Raios-X no outro;

iii. detetores a 30° ou 150° contra detetores a 30° e

iv. todos os pares de detetores em que ambos estavam a 90° .

i. Matriz com todos os eventos

Esta matriz, a de mais alta estatística pois todos os eventos selecionados pelos critérios gerais foram incluídos, forneceu a maior parte dos dados de coincidência γ-γ na qual se baseia o esquema, sendo complementado, no que se refere a gamas de baixa energia (menor ou da ordem de 100 keV) pelos dados obtidos por meio da matriz *ii.* A figura 5 apresenta o espectro obtido em coincidência com os fótons de 389 keV (transição gama para o estado fundamental do ^{218}Ra) nesta matriz.

ii. Detetores de Raios-X vs. Detetores de HPGe

Esta matriz, onde eventos em que um dos gamas foi observado por um dos detetores de Raios-X, fornece dados não observáveis por meio da matriz *i*, porque detetores de Raios-X têm espectro qualitativamente diferente de detetores de volume grande. Três são as características responsáveis por essa diferenças. Os detetores de Raios-X, comparados aos detetores grandes, têm:

a) melhor resolução em baixa energia, o que facilita a discriminação pico — componente contínua do espectro;

b) janela de entrada fina, normalmente Berílio, garantindo eficiência em baixa energia e produzindo pouco espalhamento e

c) são mais finos, o que resulta em menor eficiência para fótons de energia alta e, por isso, têm a componente contínua do espectro a baixa energia relativamente reduzida.

Neste experimento de medida em linha, com predominância de gamas de alta energia, é a característica c), sintonia a fótons de baixa energia, que é determinante.

Note que a matriz não pode ser simetrizada para beneficiar-se desta propriedade, isto é, o evento de coincidência precisa ser ordenado de maneira que o canal medido do gama observado pelo detetor de Raio-X seja sempre colocado no mesmo eixo coordenado.

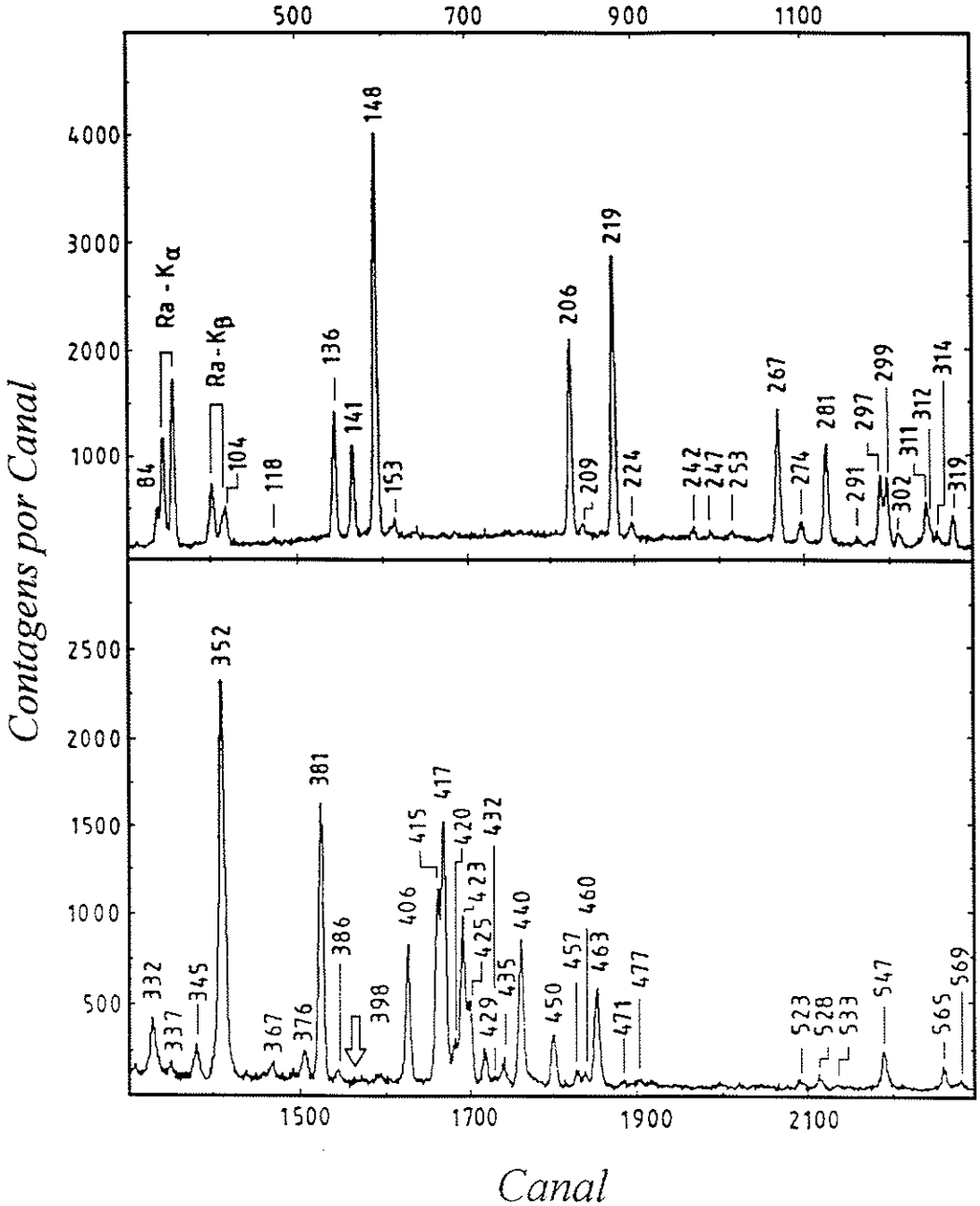


Figura 5. Espectro de gamas em coincidência com fótons de 389 keV, obtidos da matriz *i*, que inclui todos os eventos obtidos com multiplicidade gama no filtro ≥ 6 e na região do pico de tempo dos detetores de HPGe.

iii. Matriz onde um dos gamas foi observado por um dos detetores a 30° ou 150° e o outro por um detetores a 90°

Destinada a determinar as multipolaridades das transições envolvidas, a escolha dos eventos para constituir esta matriz baseou-se na teoria de correlação angular direcional de núcleos orientados [Kr73 e referências aí citadas]. O projétil transfere ao alvo grande momento angular, portanto, o momento angular do núcleo é orientado preferencialmente em um plano perpendicular à direção do feixe, de maneira os fótons emitidos e que carregam esse momento angular não têm distribuição isotrópica. Imaginando que, em nossa situação, as transições tenham uma multipolaridade predominante, as transições quadrupolares serão detetadas preferencialmente nos detetores a 30° e 150° em relação ao feixe e as dipolares a 90°. Como os espectros diretos são muito complexos, prefere-se determinar todas as intensidades em janelas de coincidência. Neste experimento, utilizamos duas matrizes, ambas contendo no eixo *Oy* (onde escolhem-se as janelas) os detetores a 30° e 150° e no eixo *Ox*, uma tem os detetores a 30° e 150° e a outra, os detetores a 90°. Chamando ao número de coincidências entre as transições γ_1 e γ_2 observadas numa matriz de $A(\gamma_1,\gamma_2)$, calculamos a razão de correlação angular direcional, r_{cad}, por

$$r_{cad} = \frac{A(\gamma 30^o, E2\ 30^o)}{A(\gamma 90^o, E2\ 30^o)} \tag{7}$$

onde escolhemos γ_2 sempre como uma transição E2, e escrevemos 30° no lugar de 30° e 150° (a distribuição angular é simétrica, de maneira que a informação de correlação fornecida pelos detetores nesses dois ângulos é idêntica). Entretanto, a correlação angular depende também do ângulo entre os planos formados pela direção do feixe e cada um dos momentos dos fótons. Optamos por utilizar apenas eventos onde os fótons e o feixe eram praticamente coplanares, o que significou constituir a matriz com eventos observados por certos pares de detetores.

O valor de r_{cad} precisa ser corrigido pela eficiência, sendo que optamos por calibrar a curva a partir de transições de multipolaridade conhecida [Fe82, Ga83, Go86].

iv. Matriz de eventos de coincidência entre detetores a 90° em relação ao feixe.

Esta matriz, onde todos os detetores envolvidos estão a um mesmo ângulo em relação ao feixe, permite melhor calibração de eficiência. Os dados desta matriz foram, portanto, utilizados para determinar o caráter

elétrico ou magnético das transições determinadas como dipolares, por meio do balanço de intensidade. A discriminação entre os dois tipos de transição é boa devido à diferença de ordem de grandeza do coeficiente de conversão, sendo que para o Rádio o coeficiente de conversão de E1 é quase desprezível enquanto o coeficiente de conversão de M1 é maior que 1 até quase 300 keV.

As dificuldades encontradas na determinação do esquema de níveis do ^{218}Ra decorrem do grande número de transições gama agrupados em multipletos mal resolvidos, como aliás pode ser observado na figura 5. Isto é consequência da estrutura nuclear do ^{218}Ra, que não chega a desenvolver uma estrutura rotacional típica, onde as transições eletromagnéticas tem energias crescentes com o spin nuclear. A superação deste desafio levou ao desenvolvimento do programa PANORAMIX [Va89], descrito na seção **3.4**.

Resultados experimentais

A figura 6 apresenta o esquema de níveis do ^{218}Ra e a tabela 3, as razões de ramificação. A referência [Ai90] contém a tabela com todos os gamas atribuídos ao ^{218}Ra, com as intensidades e energias observadas. A figura 6 apresenta os resultados obtidos com a análise da razão de correlação angular direcional.

O nível de maior spin presumivelmente observado tem spin 34^+, próximo ao momento angular transferido pelo projétil. O espectro observado é caracterizado pela pouca variação no espaçamento entre níveis, sendo dominado por um par de bandas formadas por níveis de paridades opostas. Além da dificuldade oriunda do grande número de dubletos no espectro, auto-coincidentes ou não, a banda do estado fundamental é pouco populada em torno do spin 20^+, o que dificultou descobrir a sequência dessa banda. O nível 20^+ da banda do estado fundamental é assinalado tentativamente, sendo que a estrutura proposta concorda com um nível pouco populado. Isso porque a alimentação a partir do nível 22^+ deve ser baixa, desde que o decaimento desse nível ocorrerá praticamente todo pela transição E1 de 376 keV. Supondo uma razão B(E1)/B(E2) ~ 1,5 10^{-6} fm^{-2}, a partir da transição E1 observada deduz-se que $I(22^+ \rightarrow 20^-$; 397 keV)~9% $I(22^+ \rightarrow 21^-$; 376 keV), o que corresponde a menos de 0,5% de intensidade relativa à transição para o estado fundamental. A eventual contribuição da transição E1 do nível de spin $21^- \rightarrow 20^+$ também é desprezível, menor que 0,1%, devido à pouca energia disponível, como pode ser estimado por um cálculo análogo.

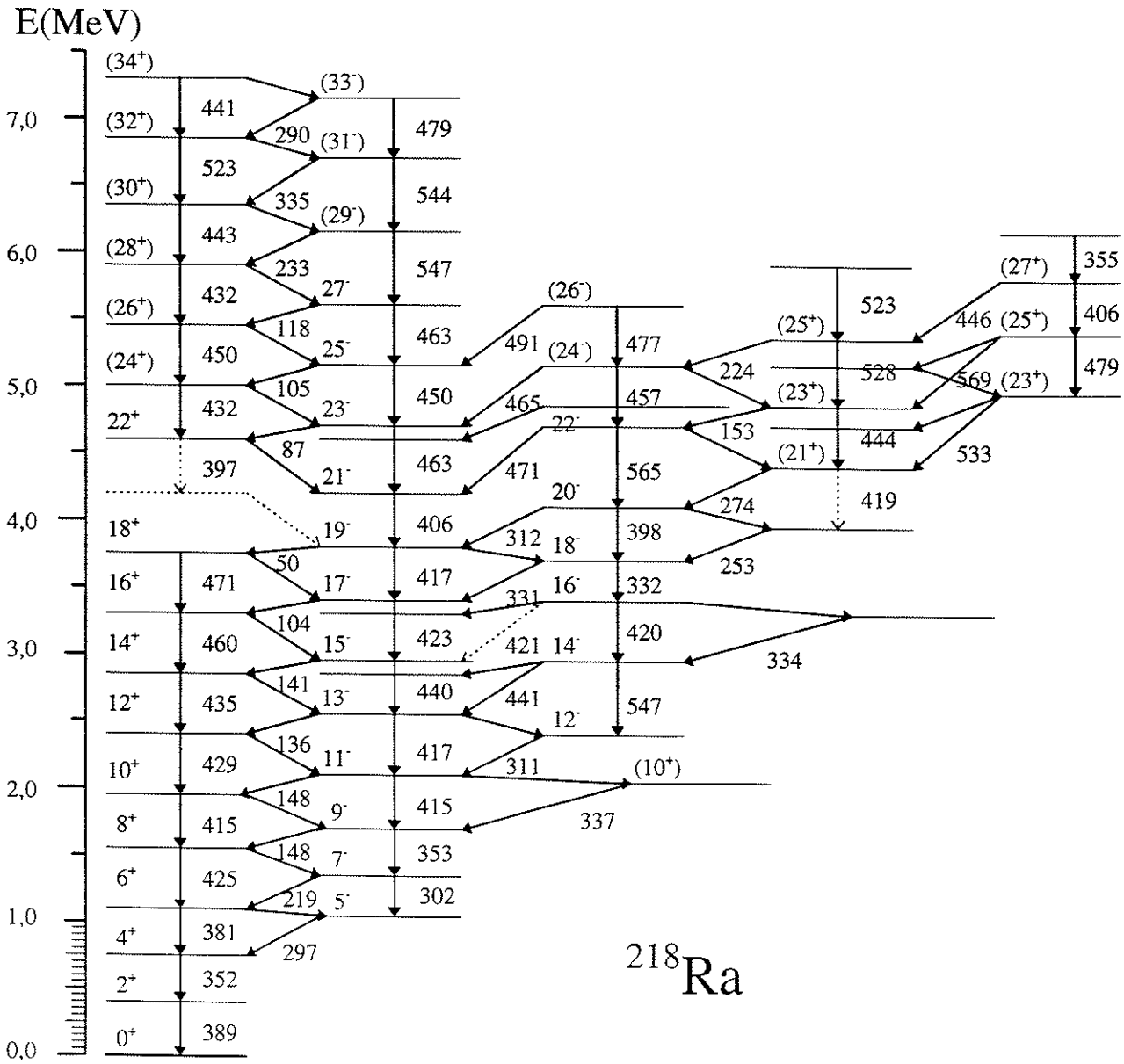


Figura 6. Esquema de níveis do ^{218}Ra, de acordo com o texto e referências citadas. As energias das transições estão em keV, sendo que para maior clareza no desenho, apenas as transições do nível *I* → *(I-1)* representadas por setas da direita para a esquerda interligando diferentes sequências de níveis com ΔI=2 foram marcadas.

Tabela 3. Razões de ramificação no decaimento do ^{218}Ra. As duas primeiras colunas identificam os níveis pela energia de excitação e spin. As energias das transições estão na 3ª coluna e têm precisão de 0,3 keV. Quando adequado, a última coluna apresenta a razão entre as probabilidades reduzidas de transição E1 e E2.

$E_{nível}$(keV)	I^{π}	E_{γ}(keV)	razão de ramificação (%)	B(E1)/B(E2) 10^{-6} fm^{-2}
1341	7^-	218,8	93,4(11)	2,6(5)
		302,4	6,6(11)	
1547	8^+	205,8	64(3)	2,2(3)
		424,6	36(3)	
1694	9^-	147,6	55(7)	1,6(5)
		353,2	45(7)	
1961	10^+	267,3	77(6)	1,7(6)
		415,0	23(6)	
2109	11^-	77,5	2(1)	0,8(6)
		147,6	41(5)	2,1(4)
		415,0	57(5)	
2390	12^+	281,4	81(2)	2,1(3)
		429,2	19(2)	
2526	13^-	106,1	0,8(5)	
		135,6	33(3)	2,0(3)
		416,9	66(3)	
2825	14^+	299,1	78(4)	1,6(4)
		434,8	22(4)	
2966	14^-	~142	≤2,5	
		440,8	10(3)	
		547,3	90(3)	
2966	15^-	140,9	26,3(22)	1,62(19)
		440,1	73,7(22)	
3285	16^+	318,7	65(6)	0,92(23)
		459,6	35(6)	
3387	16^-	86,9	<11	
		102,6	2,5(8)	0,28(9)
		420,4	84(6)	
		~421	13(6)	
3388	17^-	104,0	11(3)	1,2(3)
		422,6	89(3)	

Tabela 3. Razões de ramificação experimentais no ^{218}Ra, continuação.

3719	18^-	330,8	18(4)	
		332,2	82(4)	
3805	19^-	50,3	3,0(15)	2,4(12)
		~86	3,0(7)	
		416,9	94(17)	
4117	20^-	144,8	<5,4	
		311,9	74(6)	
		398,2	26(6)	
4682	22^-	291,5	4(2)	0,08(4)
		470,6	10(4)	
		565,0	86(4)	
4835	(23^+)	152,9	46(5)	4,5(10)
		247,4	16(4)	
		443,8	38(5)	
4924	(23^+)	242,3	57(7)	
		337,4	<7	
		533,5	43(7)	
5139	(24^-)	215,1	19(2)	
		303.8	7(3)	0,08(3)
		457,3	55(4)	
		464,9	18(4)	
5363	(25^+)	224,3	40(8)	1,9(7)
		528,4	60(8)	
5901	(28^+)	313,9	63(6)	0,65(15)
		432,0	37(6)	
6134	(29^-)	233,3	15(4)	0,54(18)
		547,3	85(4)	
6343	(30^+)	209,5	41(4)	1,00(18)
		442,6	59(4)	
6678	(31^-)	334,8	29(7)	0,39(12)
		544,2	71(7)	
6867	(32^+)	188,5	24(6)	1,5(5)
		522,6	76(6)	
7157	(33^-)	290,3	51(6)	0,81(14)
		479,2	49(6)	

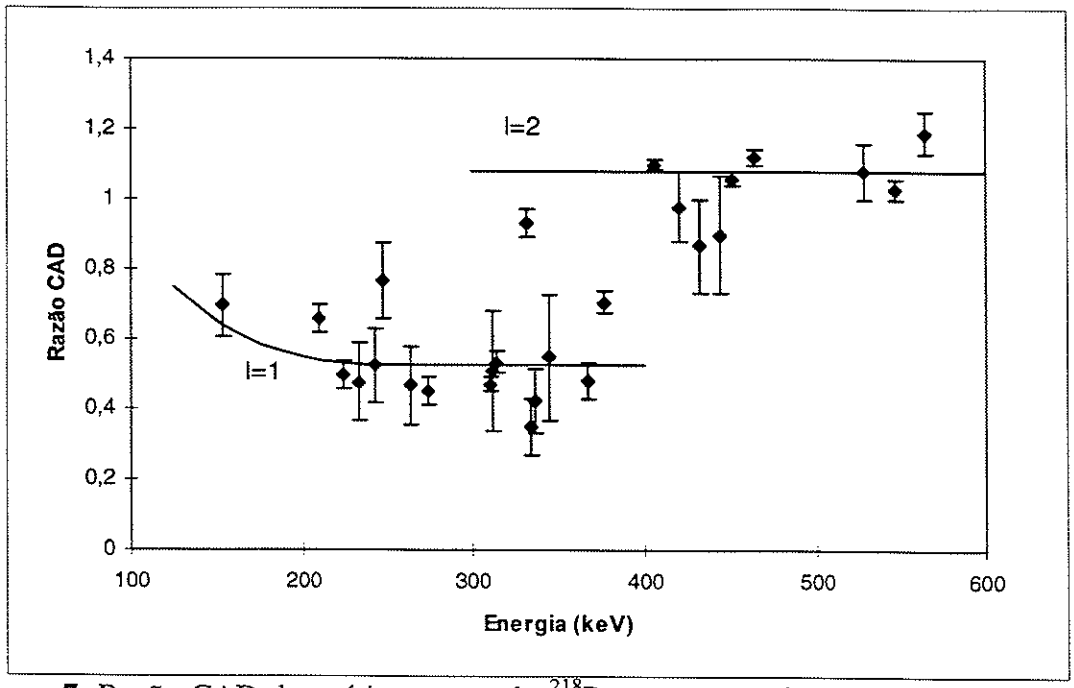


Figura 7. Razão CAD dos vários gamas do ^{218}Ra para os quais obteve-se um resultado significativo. As curvas contínuas representam os valores de razão esperados para transições quadrupolares (l=2) e dipolares (l=1).

Discussão dos resultados

A banda do estado fundamental do ^{218}Ra, consistindo numa sequência de níveis de paridade alternada, pode ser explicada por uma quebra de simetria relativa à paridade no sistema intrínseco.

As consequências da assimetria de reflexão no sistema intrínseco, já discutidas por Bohr e Mottelson [Bo75], foram revistas recentemente por Ahmad e Butler [Ah93] e Butler e Nazarewicz [Bu96], que contém uma revisão bibliográfica extensiva até 1996. Outros modelos foram propostos por Raduta, Raduta e Faessler [Ra97,Ra97a]. A questão específica da energia de separação dos dubletos de paridade foi discutida por Jolos et al. [Jo93, Jo94, Jo95]. Uma discussão geral foi efetuada por Schulz [Sc93]. Aqui, nos limitaremos a descrever o espectro do ponto de vista fenomenológico e qualitativo. As referências citadas utilizam sempre o ^{218}Ra como exemplo, de maneira que nos artigos correspondentes pode-se apreciar o acordo quantitativo de cada modelo a este caso específico.

A ocorrência de bandas de paridade alternada, conectadas por transições E1 relativamente favorecidas, é a característica da deformação

octupolar. A inclusão de uma deformação permanente incluindo componentes multipolares ímpares faz com que o Hamiltoniano intrínseco não seja simétrico nem por uma rotação de 180° em torno de um eixo perpendicular ao de simetria nem pelo operador paridade. No entanto, se a paridade no sistema de laboratório é um bom número quântico, as funções de onda totais, Ψ_+ e Ψ_-, calculadas com uma deformação incluindo componentes multipolares ímpares de amplitude positiva e negativa, respectivamente, têm mesma energia. Mantida a simetria axial, a relação entre essas duas funções de onda é, simplesmente

$$\Psi_- = P\Psi_+$$

onde P é o operador paridade. A restauração da simetria, no sistema de Laboratório, conduz ao dubleto de funções degeneradas,

$$\Psi_p = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{cases}(\Psi_+ + \Psi_-) & \text{quando } p=+1 \\ fase(\Psi_+ - \Psi_-) & \text{quando } p=-1\end{cases} \quad .$$

Este modelo prevê, portanto, a existência de duas bandas idênticas, com os estados dobrados, de paridades opostas, para todos os spins. Separando as partes intrínseca e rotacional da função de onda, obtém-se para K=0,

$$\Psi_{K=0}(sIM) = fase(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\chi_{s,K=0}\, Y_M^I(\theta,\phi) \quad ,$$

onde a função de onda intrínseca é obtida pela superposição das funções obtidas com as deformações multipolares ímpares opostas, como na fórmula precedente, e como K=0, os elementos de matriz de rotação reduzem-se a harmônicos esféricos. O número quântico s relaciona-se com a simetria remanescente, de reflexão num plano que contém o eixo de simetria, que corresponde ao produto de operadores $Pe^{+i\pi R_{y'}}$. Ele é chamado *simplex* [Na84], sendo relacionado com a paridade e o spin I por

$$p = s(-1)^I = se^{-i\pi I} \quad . \tag{8}$$

Quando $K\neq0$ obtém-se

$$\Psi_K(pIM) = \sqrt{\frac{2I+1}{16\pi^2}}\begin{cases}\chi_K D_{MK}^I(\hat{\theta}) + (-1)^{I+K}\chi_{\overline{K}} D_{M-K}^I(\hat{\theta}) & p=+1 \\ fase\left[\chi_K D_{MK}^I(\hat{\theta}) - (-1)^{I+K}\chi_{\overline{K}} D_{M-K}^I(\hat{\theta})\right] & p=-1\end{cases}$$

A aparência quase vibracional do espectro sugere uma deformação quadrupolar incipiente, o que é consistente com o valor calculado usando o método de Strutinski com o potencial de Saxon-Woods deformado [Sc89, Sk91]. Esta é uma situação diferente dos isótopos mais pesados, como o ^{226}Ra, onde ambas as deformações (quadrupolar e octupolar) são significativas [Wo93].

Um caminho aparentemente diferente pode ser tomado, também sugerido pela aparência do espectro. Recentemente, Raduta et al. [Ra97] mostraram que o espectro do ^{218}Ra pode ser bem explicado por meio de um modelo de bosons quadrupolares e octupolares. O caráter transicional do ^{218}Ra dentro da série de isótopos, porém, permanece, como fica claro na Figura 3 do referido artigo. Esta idéia já havia sido explorada, incluindo-se bosons *p* [Mi89, Ai90].

Os diferentes modelos não prevêem espectros muito diferentes, exceto para o nível 1^-. Infelizmente, nossos dados não permitiram determinar esse nível. Uma medida foi efetuada recentemente procurando especificamente determinar esse nível [Wi92]. Embora tenham determinado a posição do nível 3^- (793 keV de energia de excitação), não conseguiram determinar a posição do nível 1^-, deixando o terreno ainda aberto tanto para os modelos que supõem assimetria no sistema intrínseco quanto para os que constroem a banda de paridade negativa pelo acoplamento da banda de paridade positiva a um fonon octupolar.

5.3.2. O ^{220}Ac.

O método experimental.

Uma apresentação completa do experimento está publicada em [Sc91] e uma resumida em [Sc90]. Os estados excitados do ^{220}Ac foram obtidos por meio da reação ^{209}Bi(^{14}C,3n) no tandem de 18 MV do CRN de Estrasburgo. A energia de bombardeio foi 72 MeV. O alvo consistia em 5,5 mg/cm^2 de Bi revestido em ambos os lados por folhas de C com 10μg/cm^2 e foi posicionado a 45° em relação ao feixe. O castelo de Cristal foi utilizado numa configuração particular, onde o filtro foi reduzido a 26 cintiladores. Neste caso os eventos foram selecionados não só pela multiplicidade mas também pela energia total dos fótons detetados pelo filtro, conforme está bem descrito em [Sc91]. Os demais detalhes, inclusive a utilização de dois detetores de Raios-X, são muito parecidos com os descritos acima em relação ao ^{218}Ra.

Resultados experimentais.

A figura 8 apresenta o esquema de níveis obtido para o ^{220}Ac. Somente os spins e paridades relativos foram determinados na medida. A primeira diferença notável em relação ao ^{218}Ra é o caráter rotacional razoavelmente desenvolvido — transições E2 consecutivas diferem em várias dezenas de keV, o que, por sinal, facilitou imensamente o trabalho experimental. Mesmo com essa aparentemente maior deformação quadrupolar, os valores de B(E1)/B(E2) são em média maiores que os observados no ^{218}Ra, todos praticamente iguais a ~2,5.10^{-6} fm^{-2} .

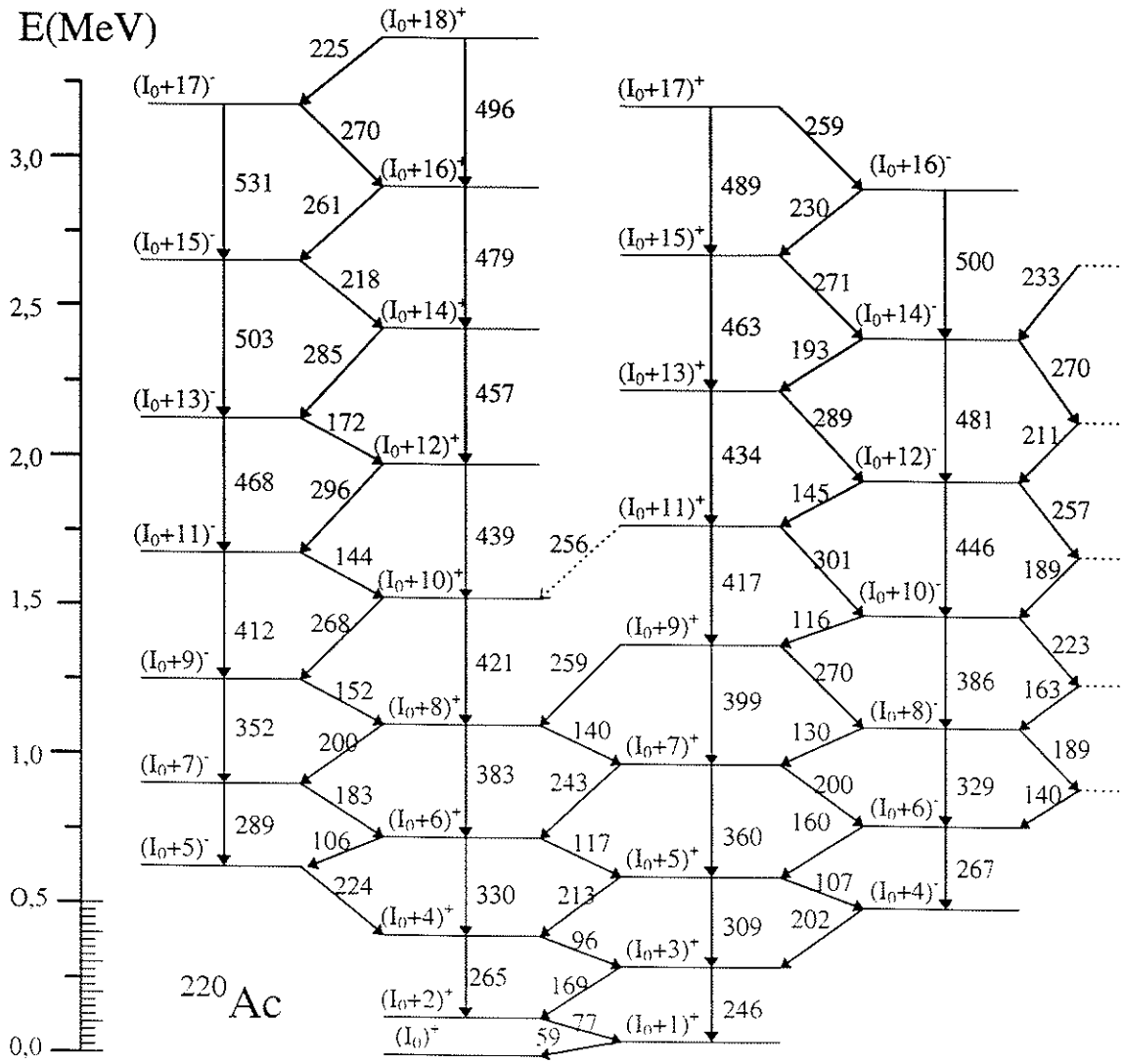


Figura 8. Parte do esquema de níveis do ^{220}Ac [Sc91]. Alguns dos níveis da banda representada mais à esquerda, de $(I_0+7)^-$ a $(I_0+15)^-$ foram representados à direita da figura com linhas pontilhadas, para facilitar a representação das transições no esquema.

Discussão.

Duas explicações diferentes podem ser propostas para esse espectro, embora infelizmente seja impossível provar qualquer uma delas definitivamente.

De um lado, pode-se imaginar que os dubletos de paridade foram observados, conforme sugerido pelo gráfico da figura 9 abaixo, comparando as energias da separação dos dubletos de paridade no ^{220}Ac,

$$\delta E(I) = E(p=-) - E(p=+) \tag{9}$$

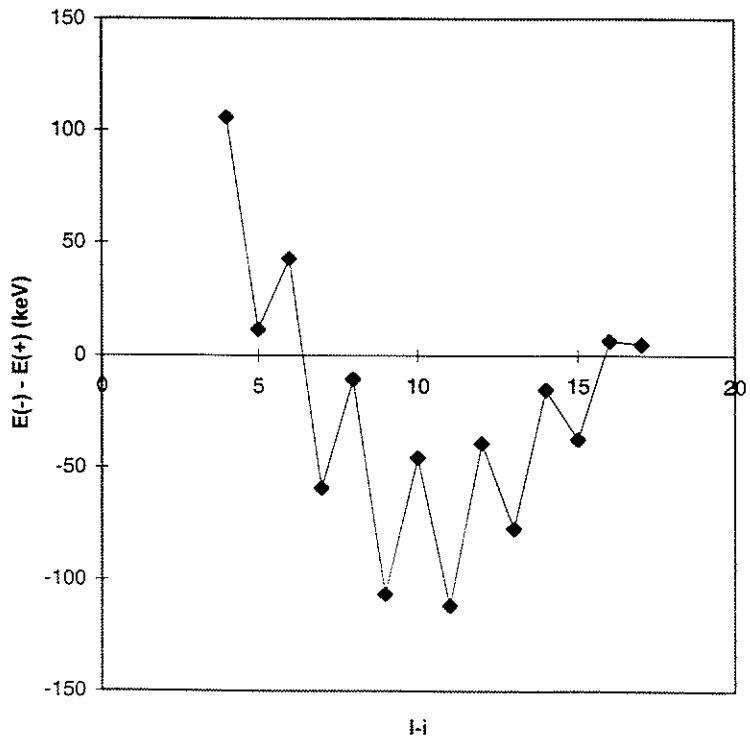


Figura 9. Energia de separação do dubleto de paridade, no ^{220}Ac. A escala de abscissas desta figura é a diferença de spin em relação ao nível de menor energia de excitação observado, I-I_0 (simbolizado **I-i** nesta figura).

Na figura 9, nota-se uma oscilação da energia de separação em torno de zero, sendo que todos os valores são menores ou da ordem de 100 keV. Os spins pares comportam-se diferentemente dos ímpares, de maneira regular ao longo de toda a faixa de spins, o que sugere um efeito dependente da assinatura. Para investigar isso, mostramos na figura 10 os gráficos das energias de separação entre níveis consecutivos das sequências de paridade

positiva e negativa, isoladamente, construídos da maneira usual para exibir os efeitos de assinatura. Observa-se que o termo de energia dependente de assinatura para os níveis de paridade par tem sinal oposto ao dos níveis de paridade ímpar, o que é uma característica do espectro em que o número simplex, e não a paridade, é um bom um número quântico [Bo75]. Nota-se, porém, que o termo de energia dependente de assinatura só tem mesma amplitude nos spins mais altos, quando os dubletos de paridade tendem a ficar degenerados em energia.

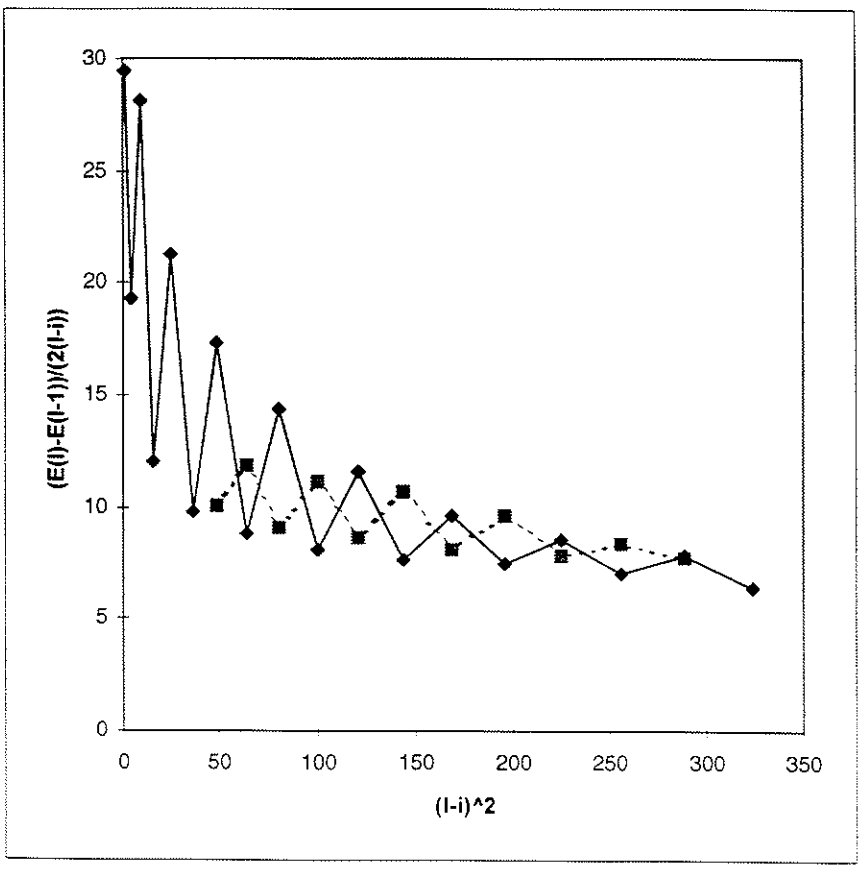


Figura 10. Gráfico da energia de separação entre níveis consecutivos de mesma paridade contra o quadrado da diferença de momento angular total em relação ao estado de menor energia observado, $(I-I_0)^2$ preparado de maneira a revelar a separação de assinaturas nas sequências de paridade positiva (linha cheia com marcadores losangulares) e negativa (linha tracejada e marcadores quadrados). Nesta figura, I_0 está simbolizado por **i**.

Pode haver, porém, outra explicação, que não exige a quebra de simetria de paridade no sistema intrínseco. Na análise do espectro do ^{218}Ac [De94], verifica-se que as bandas observadas podem ser explicadas pelo acoplamento de partículas a um caroço de ^{217}Ra, onde os níveis de paridade par do caroço par-par (^{216}Ra) corresponderiam simplesmente à banda 0^+, 2^+, 4^+ ... do estado fundamental e os níveis de paridade ímpar, à mesma banda acoplada a uma vibração octupolar, originando a sequência 3^-, 5^-, 7^- ... . A similaridade entre os espectros do ^{218}Ac e do ^{217}Ra , a ausência do nível 1^- e as propriedades eletromagnéticas sugerem esta explicação. No caso do ^{220}Ac, ambas as bandas da figura 8 corresponderiam ao acoplamento de um caroço de ^{219}Ac a diferentes orbitais de nêutrons. Nesta interpretação, os níveis de paridade par do caroço par-par (^{218}Ra) corresponderiam simplesmente à banda 0^+, 2^+, 4^+ ... do estado fundamental e os níveis de paridade par, à mesma banda acoplada a uma vibração octupolar, originando a sequência 3^-, 5^-, 7^- ... De novo, a similaridade dos espectros, inclusive pela ausência dos níveis $(I_0+3)^-$ e $(I_0+2)^-$, torna viável esta interpretação.

O spin proposto por [De94] é $(I_0)^\pi = 8^-$, sendo que a medida experimental deste spin representaria um forte reforço a essa interpretação. Recentemente, foi observada a estrutura de níveis de baixa energia do ^{220}Ac [Li96], por meio do decaimento α do ^{224}Pa, com medidas de espectros de coincidência α — γ e α — elétron de conversão. Infelizmente, o espectro observado não tem qualquer linha em comum com o da figura 8, não fornecendo, portanto, a informação desejada.

O comportamento sistemático da energia de excitação do nível de octupolo elétrico é bem conhecido [Bo75] e mostra que são os núcleos em torno de A~220 os que apresentam as menores energias de excitação, portanto, maiores deformações. A questão se essa deformação pode ser descrita como uma vibração ou exige uma descrição como deformação estática exige um conjunto mais abrangente de dados experimentais, numa região pouco acessível da tabela de isótopos.

Enfim, é a maior amplitude de deformação de octupolo - estática ou dinâmica - que definem o ^{220}Ac e o ^{218}Ra como núcleos transicionais, sendo que a possibilidade desta deformação admitir uma descrição como deformação estática, com a exigência de quebra de simetria da paridade no sistema intrínseco, pode ser uma característica exclusiva desta região da tabela de isótopos. A outra região de núcleos onde as correlações de octupolo são fundamentais para a interpretação dos espectros localiza-se em torno do ^{146}Ba. Para as terras raras leves, porém, mesmo os cálculos

prevêem que a spins intermediários ($\sim 12\hbar$), o núcleo retoma a forma simétrica por reflexão no plano $x'y'$ [Na92].

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2697
INSTITUTO DE FÍSICA

podem ser explicados recorrendo a descrições quase contraditórias, por exemplo, quando bandas devidas a estruturas intrínsecas prolatas e oblatas coexistem no mesmo núcleo. Noutras situações, mais de uma deformação multipolar é importante. No caso dos actinídeos leves, não é possível ter certeza que as bandas de paridade alternada observadas correspondem a situações de deformação octupolar permanente ou vibrações octupolares em torno de uma forma axialmente simétrica.

A possibilidade das características dos espectros dos actinídeos leves serem únicas na tabela de nuclídeos cria uma dificuldade adicional. A Estrutura Nuclear tem como proposta explicar o máximo dos fenômenos observados com o mínimo de modelos, parâmetros e hipóteses. Uma das condições de aceitação de um modelo consiste na verificação de sua aplicabilidade em uma família grande de nuclídeos, sendo que eventuais parâmetros devem variar contínua e suavemente ao longo dessa família. Não há necessidade do modelo ser aplicável a todos os núcleos, aliás, a demora em desenvolver-se o modelo rotacional talvez tenha se devido em parte ao fato de esperar-se que ou todos os núcleos rodassem ou nenhum deles o fizesse. Afinal, verificou-se que muitos núcleos apresentam o fenômeno da rotação, mas nem todos o fazem, e que os parâmetros associados à rotação variam regular e consistentemente nas regiões de aplicabilidade do modelo. Já em relação à quebra de simetria de paridade, os testes de aplicabilidade podem ficar comprometidos pela pequenez da região de validade do modelo.

Avanços tecnológicos continuam a ocorrer e, sem dúvida, a Espectroscopia Nuclear os aproveitará. Técnicas digitais de processamento dos sinais, reduzindo a interferência dos dispositivos analógicos, começam a ser utilizadas. Um melhor aproveitamento dos dados obtidos já é possível, não tendo havido ainda avanço maior devido às dificuldades com as linguagens de programação, atualmente incapazes de suportar o nível de abstração matemática dos modelos necessários. Finalmente, toda a questão do estabelecimento e das consequências da deformação do potencial nuclear médio, estática ou não, vem sendo melhor compreendida e deve permitir uma descrição cada vez mais abrangente da estrutura nuclear.

Bibliografia.

[Ab75] S.M. Abecasis, C. A. Heras e F. Krmpotic, Phys. Rev. C11 (1975) 1015

[Ah93] I. Ahmad e P.A. Butler, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 43 (1993) 71-116

[Ai90] M. Aïche, Tese de doutoramento, "Etude a Haut Moment Angulaire de l'Asymetrie de Reflexion dans le Noyau Transitionel ^{218}Ra", Universidade Louis Pasteur, Estrasburgo, França (1990).

[Am97] M. Amaku, dissertação de mestrado, "Decaimento do ^{74}As e estrutura nuclear do ^{74}Se e do ^{74}Ge", Instituto de Física da USP, 1997

[ASc90] A.M.S.Scardino. O.A.M. Helene, P.R.Pascholati e V.R. Vanin, Z. Phys. A336 (1990) 313-316

[Be85] F. Beck, Instrumentation for Heavy Ion Nuclear Research, vol. 7, pgs. 129-146 (1985) Harwood Acad. Pub., Chur, Suíça.

[Bi91] A.M. Bizzeti-Sona, P. Blasi, P.A. Mandò, P. Passalacqua e A.A. Stefanini, Z. Phys. A338 (1991) 157.

[Bu86] T.W. Burrows e M.R. Bhat, Nuclear Data Sheets 47 (1986) 1.

[Bu96] P.A. Butler e W. Nazarewicz, Rev. Of Modern Physics 68 (1996) 349-417

[Ca97] Ruy Morgado de Castro, dissertação de mestrado, "Decaimento do estado isomérico do ^{102}Rh", IFUSP, 1997

[Ce85] A.Celler et al., Nucl. Phys. A432 (1985) 421.

[De88] K. Debertin e R.G. Helmer, Gamma- and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors, North-Holland, Amsterdam, 1988.

[De94] M.E. Debray, A.J. Kreiner, M. Davidson, J. Davidson, D. Hojman, D. Santos, V.R. Vanin, N.Schulz, M. Aiche, A. Chevallier, J. Chevallier e J.C. Sens. Nucl. Phys. A568 (1994) 141-168

[Du94] J.L.M. Duarte, T. Borello-Lewin e L.B. Horodynski-Matsushigue, Phys. Rev. C50 (1994) 666-681.

[Ea71] W.T. Eadie, D. Drijard, F.E. James, M. Roos, B. Sadoulet, Statistical Methods in Experimental Physics, North-Holland, Amsterdam, 1971.

[El74] D. Elmore. Tese de Doutoramento: "Single-Particle Transfer Studies of Odd-Odd Deformed Nuclei and the Residual Neutron-Proton Interaction", Universidade de Rochester, 1974.

[Fa93] T.F. Fazzini, A. Giannatiempo, A. Nannini, A. Perego e D. Cutoiu, Z. Phys. A346 (1993) 21-24.

[Fe82] A.J. Fernandez-Niello, H. Puchta, F. Riess e W. Trautmann, Nucl. Phys. A391 (1982) 221.

[Fi90] R.B. Firestone, Nucl. Data Sheets 59 (1990) 869.

[Fr91] D. De Frenne e E. Jacobs, Nuclear Data Sheets 63 (1991) 373; P. De Gelder, D. De Frenne e E. Jacobs, Nuclear Data Sheets 35 (1982) 443.

[Ga58] C.J. Gallagher Jr. e S.A. Moszkowski, Phys. Rev. 111 (1958) 1282-1290.

[Ga83] M. Gai, J.F. Ennis, M. Ruscev, E.C. Schloemer, B. Shivakumar, S.M. Sterbenz, N. Tsoupas e D.A. Bromley, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 646.

[Ga92] A. Gammal, dissertação de mestrado, "Correlação angular gama-gama e elétron-gama no decaimento do ^{134}Cs", Instituto de Física da USP, 1992

[Gi95] A. Giannatiempo, A.Nannini, P. Sona e D. Cutoiu, Phys. Rev. C52 (1995) 2969.

[Go81] P. Gouffon, Manual do Programa IDEFIX, publicação interna do Laboratório do Acelerador Linear do IFUSP, 1981.

[Go86] Y. Gono, T. Kohno,M. Sugawara. Y. Ishikawa e M. Fukuda, Nucl. Phys. A459 (1986) 427.

[Gu67] C. Gustafson, I.L. Lamm, B. Nilsson e S.G. Nilsson, Ark. Fysik 36 (1967) 613-627.

[Ha88] F. Hannachi, G. Bastin, M.G. Porquet, C. Schück, J.P. Thibaud, C. Bourgeois, L. Hildingsson, D. Jerrestam, N. Perrin, H. Sergolle, F.A. Beck, Th. Byrski, J.C. Merdinger e J. Dudek, Nucl. Phys. A481 (1988) 135-160.

[He91] O.A.M. Helene e Vito R. Vanin, Tratamento Estatístico de Dados em Física Experimental, Editora Edgard Blücher, 2ª edição, 1991.

[He94] O. Helene e V. R. Vanin, Nucl. Instr. and Methods A335 (1993) 227-232

[Hi89] B. Hinfurtner, E. Hagn e A. Zech, Nucl. Phys A504 (1989) 467.

[Is89] Maria Célia P. Isaac, dissertação de mestrado. "O Bremsstrahlung Interno do ^{55}Fe." Instituto de Física da USP (1989)

[Is90] M.C.P.Isaac, V.R. Vanin e O.A.M. Helene, Z. Phys. A335 (1990) 243-246

[Jo93] R.V. Jolos, P. Von Brentano e F. Dönau, J. Phys. G19 (1993) L151-L155

[Jo94] R.V. Jolos e P. Von Brentano, Phys. Rev. C49 (1994) R2301-2304

[Jo94] R.V. Jolos e P. Von Brentano, Nucl. Phys. A587 (1995) 377-389

[Ke79] M. Kendall e A. Stuart, The Advanced Theory of Statistics, vol. 2, Charles Griffin & Co. Ltd., Londres, 1979.

[Ke95] G. Kenchian, Tese de Doutoramento, "Espectroscopia Gama do ^{100}Rh, IFUSP (1995).

[Ki63] L.S. Kisslinger e R.A. Sorensen, Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 853.

[Kn89] G.F. Knoll, Radiation Detection and Measurement, 2ª edição, Wiley, Singapura, 1989.

[Kr73] K.S. Krane, R.M. Steffen e R.M. Wheeler, At. Data Nucl. Data Tables 11 (1973) 351

[Kr89] A.J.Kreiner, V.R.Vanin, F.A. Beck, Ch. Bourgeois, Th. Byrski, D. Curien, G. Duchêne, B. Haas, J.C. Merdinger, M.G. Porquet, P. Romain, S.D. Rouabah e J.P. Vivien, Phys. Rev. C40 (1989) R487-R490

[Kv92] J. Kvasil, R.K. Sheline, V.O. Nesterenko, I. Hrivnacova e D. Nosek, Z.Phys. A343 (1992) 145-149

[Le78] C.M. Lederer e V.S. Shirley (editores). Table of Isotopes, 7ª edição, John Wiley & Sons, New York, 1978.

[Le87] M.C. Lee, K. Verghese e R.P. Gardener, Nucl. Instr. and Meth. A262 (1987) 430

[Li96] C.F. Liang, P. Paris, A. Plichoki, E. Ruchowska, A. Gizon, D. Barneoud, J. Genevey, G. Cãta e R.K. Sheline, Z. Phys. A354 (1996) 153-156

[Lo83] A. Lorentz, Decay data for radionuclides used as calibration standards, Technical Report Series 227, IAEA, Vienna, 1983.

[Ma63] W. Marquardt , J. Soc. Indust. Appl. Math. 11(1963) 431-441

[Me70] E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, Inc., 2ª edição, Nova Iorque, 1970.

[Me94] J.A.G. Medeiros, dissertação de mestrado, "Níveis do ^{72}Ge populado pelo decaimento do ^{72}Ga", IPEN/SP, 1994

[Mi89] I. N. Mikhailov, E.G. Nadjakov, M. Aiche, Ch. Briançon, N. Schulz e V.R. Vanin, Journal of Physics G15 (1989) L19-L24.

[Mo95] M.Moralles, P.R.Pascholati, V.R.Vanin e O. Helene, Appl. Radiat. Isot. 46 (1995) 133

[Mu87] E.R. Mucciolo e O. Helene, Nucl. Instr. and Meth. A256 (1987) 153

[Mu88] E. R. Mucciolo, dissertação de mestrado, "Duplo decaimento gama no ^{90}Zr", Instituto de Física da USP, 1988

[Mu89] E.R. Mucciolo e O. Helene, Phys. Rev. C40 (1989) 2403-2405.

[Na84] W. Nazarewics, P. Olanders, I. Ragnarsson, J. Dudek e G.A. Leander, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1272.

[Na92] W. Nazarewics e S.L. Tabor, Phys. Rev. C45 (1992) 2226

[Ni55] S.G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 29 (1955) nº 16.

[Pa87] A. P. Passaro, dissertação de mestrado, "O decaimento do ^{84}Rb", Instituto de Física da USP, 1987.

[Pa88] A. Passaro, dissertação de mestrado, "O decaimento do ^{102}Rh" , IFUSP (1988)

[Po91] M.G. Porquet, A.J. Kreiner, F. Hannachi, V.R. Vanin, G. Bastin, C. Bourgeois, J. Davidosn, M. Debray, G. Falcone, A. Korichi, H. Mosca, N.Perrin, H. Sergolle, F.A. Beck e J.C. Merdinger, Phys. Rev. C44 (1991) 2445-2450

[Pr92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling e B. P. Flannery, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 2ª edição, impressão de 1994.

[Ra89] R. Raghavan, At. Data Nucl. Data Tables 42 (1989) 189-291

[Ra97] A.A. Raduta, A.H. Raduta e A. Faessler, Journal of Physics G23 (1997) L49-L55.

[Ra97a] A.A. Raduta, A.H. Raduta e A. Faessler, Phys. Rev. C55 (1997) 1747-1761.

[Re95] W. Reviol, L.L. Riedinger, J.M. Lewis, W.F. Mueller, C.R. Bingham, J.Y. Zhang e B.E. Zimmerman, Phys. Scripta T56 (1995) 167-174.

[Re97] Z. Renrong, Z. Shunquan e P. Yunwei, Phys. Rev. C56 (1997) 175-179.

[Ri92] M.A. Rizzuto, E.W. Cybulska, V.R.Vanin, J.R.B. Oliveira, L.G.R. Emediato, R.V.Ribas, W.A. Seale, M.N. Rao, N.H. Medina, S. Botelho, J.C. Acquadro e C.L.Lima, Z. Phys. A344 (1992) 221-222.

[Sc87] A. M. S. Scardino, dissertação de mestrado, "O decaimento do ^{57}Ni", Instituto de Física da USP, 1987

[Sc89] N. Schulz, V.R.Vanin, M. Aiche, A. Chevallier, J.Chevallier, J.C.Sens, Ch. Briançon, S. Cwiok, E. Ruchowska, J. Fernandez-Niello, Ch. Mittag e J. Dudek, Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 2645-2648.

[Sc90] N. Schulz, V.R.Vanin, M. Aiche, Ch. Briançon, A. Chevallier, J.Chevallier, M.E.Debray, A.J.Kreiner, E. Ruchowska e J.C.Sens, Z. Phys. A335 (1990) 107-108

[Sc91] N. Schulz, V.R.Vanin, A.J.Kreiner, E. Ruchowska, M. Aiche, Ch. Briançon, A. Chevallier, J.Chevallier, M.E.Debray e J.C.Sens, Z. Phys. A339 (1991) 325-334

[Sh92] E.N. Shurshikov e N.V. Timofeeva, Nuclear Data Sheets 65 (1992) 365.

[Sc93] N. Schulz, Acta Phys. Polonica B24 (1993) 43

[Si96] A.J. Singh e P. K. Raina, Phys. Rev. C53 (1996) 1258

[Sk91] J. Skalski, Phys. Rev. C43 (1991) 140-145

[So92] P.C. Sood, D.M. Headly e R.K. Sheline, At. Data and Nucl. Data Tables, 51 (1992) 273

[St73] F.S. Stephens, "Rotation-Aligned Coupling Scheme", in Proc. of the International Conf. On Nuclear Physics, Munich, 1973, 368-369

[St75] F.S. Stephens, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 43.

[Tr91] D. Troltenier, J.A. Mahrun, W. Greiner, V. Velazquez Aguilar, P.O. Hess e J.H. Hamilton, Z. Phys. A338 (1991) 261-270

[Tr97] Rogério Tramontano, dissertação de mestrado, "Decaimento do ^{48}V", IFUSP, 1997.

[Va77] V.R. Vanin, Dissertação de mestrado: "A competição E2-M1 no núcleo $^{164}_{67}$Ho." Instituto de Física da USP, 1977.

[Va84] V.R. Vanin, tese de doutoramento "Estudo dos decaimentos do ^{101m}Rh e do ^{101f}Rh e estrutura nuclear do ^{101}Ru." Instituto de Física da USP (1984).

[Va85] V.R.Vanin, A. Passaro e A.M.P. Passaro, Phys. Rev. C32 (1985) 1349-1357

[Va89] V.R.Vanin e M. Aiche, Nucl. Instr. and Methods 284 (1989) 452-458.

[Va96] V.R. Vanin e P. Gouffon. Tópicos Avançados em Tratamento Estatístico de Dados em Física Experimental, edição preliminar, IFUSP, 1996.

[Va96a] V.R. Vanin, R.C. Neves, D. Bärg Filho e P.R. Pascholati, *Controlador de um Sistema Multidetetor para Atividade Residual*, comunicação oral na XIX Reunião de Trabalho em Física Nuclear no Brasil, Lindóia, SP, 1996

[Va97] V.R.Vanin, G. Kenchian, M.Moralles, O. Helene e P.R.Pascholati, Nucl. Instr. and Meth. A391 (1997) 338-344.

[Ve93] L. Venturini e V.R. Vanin, Appl. Radiat. Isot. 44 (1993) 999-1002.

[Wi93] M. Wieland, J. Fernandez Niello, B. von Fromberg, F. Riess, M. Aïche, A. Chevallier, J. Chevallier, N. Schulz, J.C. Sens, Ch. Briançon e E. Ruchowska, Phys. Rev. C46 (1992) 2628-2630.

[Wo93] H.J. Wollersheim, H. Emling, H. Grein, R. Kulessa, R.S. Simon, C. Fleischmann, J. De Boer, E. Hauber, C. Lauterbach, C. Schandera, P.A Butler, T. Czosnyka, Nucl. Phys. A556 (1993) 261-280