

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

ESCOLA DE ENGENHARIA

Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica - CPGEE

**ESTUDO, PROPOSTA E PREVISÃO DE DESEMPENHO DE
UM FILTRO DE ENERGIA PARA EXPERIMENTOS COM
ALTA RESOLUÇÃO DE COMPRIMENTO DE ONDA EM
FONTES PULSANTES DE NÊUTRONS**

ANDRÉ DE AZEVEDO PARIZZI

Dissertação para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Porto Alegre

2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

ESCOLA DE ENGENHARIA

Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica - CPGEE

**ESTUDO, PROPOSTA E PREVISÃO DE DESEMPENHO DE
UM FILTRO DE ENERGIA PARA EXPERIMENTOS COM
ALTA RESOLUÇÃO DE COMPRIMENTO DE ONDA EM
FONTES PULSANTES DE NÊUTRONS**

ANDRÉ DE AZEVEDO PARIZZI

Engenheiro Eletricista

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica - CPGEE, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Área de concentração: Automação e Instrumentação Neutrônica.

Desenvolvida no Laboratório de Automação do Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em colaboração com o *Argonne National Laboratory (Spallation Neutron Source Project)*, EUA, estabelecida através da Fundação Empresa/Escola de Engenharia de Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Co-orientador no *Argonne National Laboratory*: Professor Frank Klose (Dr. Pela Universidade de Göttingen, Alemanha).

Porto Alegre

2002

ESTUDO, PROPOSTA E PREVISÃO DE DESEMPENHO DE UM FILTRO DE ENERGIA PARA EXPERIMENTOS COM ALTA RESOLUÇÃO DE COMPRIMENTO DE ONDA EM FONTES PULSANTES DE NÊUTRONS

ANDRÉ DE AZEVEDO PARIZZI

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de Mestre em Engenharia e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Orientador: _____

Prof. Carlos Eduardo Pereira, DELET - UFRGS

Dr. pela Universidade de Stuttgart, Alemanha

Banca Examinadora:

Prof. Alexandre Sanfelice Bazanella, DELET – UFRGS

Dr. pela Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis – UFSC – 1997

Prof. João Manoel Gomes da Silva Jr., DELET – UFRGS

Dr. pela Universidade Paul Sabatier, Toulouse (França) – UPS – 1997

Prof. Sérgio Bampi, II - UFRGS

Dr. Pela Universidade de Stanford, Stanford, CA (EUA) – SU – 1986

Coordenador do CPGEE: _____

Prof. Dr. Carlos Eduardo Pereira

Porto Alegre, julho de 2002.

À família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (CPGEE/UFRGS) e ao povo brasileiro por me terem proporcionado a oportunidade de cursar este mestrado e à Fundação Empresa/Escola de Engenharia da UFRGS, que possibilitou a provisão da bolsa de auxílio. Agradeço especialmente ao co-Orientador no *Argonne National Laboratory*, Professor Dr. Frank Klose, e aos colegas do projeto *Spallation Neutron Source* (Departamento de Energia dos Estados Unidos) e da *Intense Pulsed Neutron Source* pelo suporte no decorrer dos trabalhos no *Argonne National Laboratory* e ao Orientador, Professor Dr. Carlos Eduardo, pela disposição de aceitar o desafio deste projeto. Estendo minha gratidão a todos os Professores, colegas e funcionários do Departamento de Engenharia Elétrica da UFRGS pelo coleguismo e dedicação.

Dedico qualquer mérito que tenha resultado deste trabalho à minha família e a minha esposa, Gabriela, pelo apoio irrestrito e pela abdicção em elementos importantes de suas próprias vidas, em favor deste passo por minha realização profissional e pessoal.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS	xiii
RESUMO	xvii
ABSTRACT	xix
1 INTRODUÇÃO.....	20
1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO	21
1.2 NÊUTRONS	22
1.3 FONTES DE NÊUTRONS PARA PESQUISA	23
1.4 O PROJETO SNS E O INSTRUMENTO ESCOLHIDO PARA BASEAR O DESENVOLVIMENTO DO FILTRO	25
2 INCERTEZA DE COMPRIMENTO DE ONDA EM FONTES DE NÊUTRONS POR <i>SPALLATION</i>	29
3 BREVE REVISÃO DE LITERATURA (RELAÇÃO ENTRE TÓPICOS E REFERÊNCIAS).....	34
4 PRINCÍPIO DE FUNCIONAMENTO DO FILTRO DE COMPRIMENTO DE ONDA/ENERGIA PROPOSTO.....	36
5 MODELAMENTO MATEMÁTICO DO INVERSOR DE <i>SPIN</i> SELETIVO DE DRABKIN POR RESSONÂNCIA ESPACIAL.....	42
5.1 NOÇÕES SOBRE FEIXES POLARIZADOS DE NÊUTRONS	42
5.2 RESSONÂNCIA ESPACIAL DO <i>SPIN</i> (SSR) E CONDIÇÃO ÓTIMA DE RESSONÂNCIA.....	43
5.3 MODELAMENTO DO RESSONADOR.....	46
6 ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS DO FILTRO E EXEMPLOS DE CONFIGURAÇÕES PARA A GERAÇÃO DOS CAMPOS.....	48
6.1 OTIMIZAÇÃO DOS PERFIS MAGNÉTICOS	48
6.1.1 Especificação do perfil de campo magnético para o campo guia.....	48
6.1.2 Geração do campo magnético guia	53

6.1.3	Especificação do perfil e geração do campo magnético perpendicular.....	57
6.1.3.1	Supressão de máximos secundários através da modulação do campo perpendicular	59
6.1.3.2	Dimensões mínimas para as folhas de corrente e cálculo do perfil lateral do ressonador	63
6.2	INDUÇÃO DE CORRENTES PARASITAS EM FOLHAS DE CORRENTE PELA VARIAÇÃO DO CAMPO GUIA LONGITUDINAL	65
6.3	ALGUMAS BREVES CONSIDERAÇÕES SOBRE O ACIONAMENTO DOS CAMPOS	72
7	ESTUDOS SOBRE A INFLUÊNCIA DE OUTROS PARÂMETROS NO DESEMPENHO DO FILTRO, CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS FINAIS	76
7.1	SENSIBILIDADE ANGULAR	76
7.2	INFLUÊNCIA DAS DISTÂNCIAS ENTRE OS ELEMENTOS NA LINHA DE NÊUTRONS	78
7.3	PERDA DE EFICIÊNCIA PROVENIENTE DE IMPERFEIÇÕES NOS PERFIS MAGNÉTICOS	79
7.4	INFLUÊNCIA DOS ELEMENTOS ÓTICOS NO DESEMPENHO DO FILTRO	80
7.5	EMULAÇÃO DE UM EXPERIMENTO COMPLETO (VERIFICAÇÃO DO DESEMPENHO POTENCIAL DO FILTRO EM OPERAÇÃO DINÂMICA)	83
7.6	COMENTÁRIOS FINAIS	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	87

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Representação das áreas nas quais se utiliza espalhamento de nêutrons, desde o início da utilização (há cerca de meio século) até a atualidade (cortesia do <i>website</i> do ISIS, Reino Unido).	21
Figura 1.2 – Evolução do fluxo efetivo de nêutrons térmicos em instalações de pesquisa baseadas em reatores e fontes pulsantes (fontes: <i>Neutron Scattering</i> , K. Skold and D. L. Price, eds., Academic Press, 1986 e <i>SNS website</i> , 2000).	24
Figura 1.3 – Localização dos diversos componentes em desenvolvimento e construção para o projeto SNS.	25
Figura 1.4 – Grupo de instrumentos recomendados por comitês da comunidade de ciência de nêutrons para a SNS.	26
Figura 1.5 – Visão geral dos componentes do Reflectômetro para Estudos de Magnetismo em desenvolvimento para a SNS.	27
Figura 1.6 – Detalhe da área de operação do Reflectômetro para Estudos de Magnetismo da SNS.	27
Figura 2.1 – Diagrama de tempos e distância ao detector para determinação dos comprimentos de onda (λ).	30
Figura 2.2 – Dependência de tempo e comprimento de onda para a emissão de nêutrons a partir da face do moderador de Hidrogênio líquido inferior da SNS - simulação Monte Carlo (IVERSON, 2000 – ii). A linha tracejada indica a posição do pico de intensidade para cada comprimento de onda.	31
Figura 2.3 – Cálculo do perfil da intensidade do feixe de nêutrons na posição do detector (19 m da fonte), em função do tempo e do comprimento de onda associado. Estes resultados estão normalizados em relação ao pico de intensidade a cada instante detector. Os insertes menores no gráfico mostram os perfis de dois cortes nas curvas de nível, nos instantes 15 ms e 45 ms após t_0	32
Figura 2.4 – Diagrama mostrando o efeito desejado de um filtro dinâmico sobre o espectro resultante em um determinado instante de medida.	33
Figura 4.1 – Diagrama esquemático representando os elementos básicos da filtragem de feixes por ressonância espacial de <i>spin</i>	36
Figura 4.2 – Possível configuração de um resonador para inversão seletiva do <i>spin</i> de nêutrons por ressonância espacial de <i>spin</i>	37
Figura 4.3 – Protótipo de um inversor de <i>spin</i> por ressonância espacial construído por L. Passell (<i>Brookhaven National Laboratory</i>) e cedido a este projeto para experimentos.	37
Figura 4.4 – Probabilidade de inversão do <i>spin</i> em um resonador espacial de Drabkin sob condições ideais de ressonância, em função do comprimento de onda, para diferentes números de inversões (M) do campo perpendicular.	38
Figura 4.5 – Partindo de um feixe com espectro “branco” uniforme, perfeitamente polarizado (100% <i>spin-up</i>) e processado no inversor seletivo de <i>spin</i> de Drabkin, este seria o espectro relativo à parcela do feixe resultante com <i>spin-up</i>	38
Figura 4.6 – Forma de corrente requerida para gerar ressonância variante conforme a estrutura temporal de uma fonte pulsante, para um resonador posicionado a 9 m da fonte.	39

Figura 4.7 – Operação do filtro de energia por ressonância espacial de <i>spin</i> em modo dinâmico, de forma que o comprimento de onda ressonante varie de acordo com a estrutura temporal da fonte de nêutrons.	40
Figura 4.8 – Espectro resultante analisado como <i>spin-down</i> para uma variação de condição ressonante do inversor de <i>spin</i> em concordância com a estrutura temporal da distribuição de intensidades do pulso na posição do detector. Os gráficos menores comparam os cortes da distribuição original da figura 2.3 (em vermelho) com cortes na distribuição resultante da aplicação do filtro (em azul).	41
Figura 4.9 – Intensidades relativas momentâneas de um feixe polarizado de nêutrons com a distribuição temporal da figura 2.2, guiado através de um ressonador magnético. Este dispositivo inverte o <i>spin</i> de nêutrons com comprimento de onda dentro de uma banda restrita, reajustada a cada instante conforme a estrutura temporal da distribuição. A fração do feixe que tem os <i>spins</i> invertidos (b) pode ser separada do resto do feixe através de um analisador de polarização (c). A distribuição em azul (c) constitui um instante de um pulso neutrônico com menor incerteza de comprimento de onda (“melhor resolução”) do que a original (a).	41
Figura 5.1 – Polarização com precessionamento sob campo magnético constante. O ângulo em vermelho depende do vetor de polarização inicial $P(0)$	43
Figura 5.2 – Estes diagramas mostram como ocorre o processo de transição não adiabática com um nêutron quando este atravessa uma folha de corrente para duas folhas adjacentes. Supõe-se que, para o comprimento de onda aqui exemplificado, no caminho entre duas folhas, o nêutron precessiona meia volta. Esta é a situação desejada para o comprimento de onda ressonante, pois desta forma se obtém o aumento máximo de ângulo ao longo do inversor, chegando a um aumento total de 180°	45
Figura 5.3 – Solução numérica para a equação de movimento de um nêutron atravessando a distribuição de campo gerada por um ressonador com 60 folhas de corrente, com um campo guia longitudinal (na mesma direção do movimento do nêutron). As linhas azuis mostram a posição das folhas de corrente e as setas indicam a direção do vetor de polarização a cada instante.	45
Figura 6.1 – Exemplo de campos calculados para “bobinas quadradas” otimizadas, gerando duas componentes de campo magnético longitudinais: uma uniforme e uma com um gradiente linear.	49
Figura 6.2 – Exemplo numérico de requisitos para o campo magnético guia, considerando uma distância de 9 metros do centro do dispositivo à face do moderador e uma distância entre folhas de corrente adjacentes de 2 mm. O ângulo formado entre a grade na superfície do gráfico e as curvas de nível (linhas brancas) representa o gradiente espacial necessário para a compensação do tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador.	52
Figura 6.3 – Emulações do remodelamento de pulsos feitas (a) sem e (b) com a correção do gradiente magnético espacial (centro do ressonador a 9 m da fonte, com o detector a 19 m da fonte, tendo o ressonador 0,3 m de comprimento e 200 inversões de campo perpendicular), apresentada aqui para um instante em particular.	53
Figura 6.4 – Exemplo de campos calculados para “bobinas quadradas” otimizadas, gerando duas componente de campo magnético longitudinais: uma uniforme e uma com um gradiente linear. O gráfico de cima mostra o perfil otimizado para a distância entre os condutores que formam as espiras quadradas e o eixo central, em função da distância ao centro do ressonador. O gráfico de baixo mostra os campos calculados analiticamente, normalizados à corrente injetada, tendo a bobina de geração do campo uniforme 211 espiras e a bobina de geração do campo gradiente 231 espiras. As linhas tracejadas delimitam a região ativa do ressonador. ..	54
Figura 6.5 – Exemplo de campos calculados para dois grupos de “bobinas quadradas” com refinamento da densidade de espiras, gerando dois componentes de campo magnético	

longitudinais: um uniforme e um com um gradiente linear. O gráfico de cima mostra os campos calculados analiticamente, normalizados à corrente injetada. As linhas tracejadas delimitam a região ativa do ressonador. O primeiro diagrama do quadro logo abaixo do gráfico apresenta as densidades de espiras da bobina que gera o campo uniforme, sendo o segundo o diagrama equivalente à bobina de geração do campo com componente gradiente (estas duas bobinas seriam montadas em camadas próximas, com lados internos de 20 cm)..55

Figura 6.6 – Exemplo de configuração de condutores para a geração de um campo magnético guia vertical uniforme (abaixo) e cálculo do perfil magnético axial para um conjunto de parâmetros refinados através de um processo iterativo. 56

Figura 6.7 – Perfis de campo magnético perpendicular H_{per} (H_x ao longo do ressonador) – explicações mais detalhadas no texto desta seção. 58

Figura 6.8 – Diferença normalizada entre os campos perpendiculares H_{per} (H_x ao longo do ressonador) imediatamente anterior e imediatamente posterior às folhas de corrente, em função do índice da folha de corrente para o perfil mostrado na figura 6.7d. 59

Figura 6.9 – Distância entre as bordas das folhas de corrente e o eixo central em função da distância da folha a partir do centro do ressonador (esquerda) e exemplo de construção do ressonador para obtenção de uma modulação gaussiana para o campo perpendicular (direita).60

Figura 6.10 – Perfil magnético do campo perpendicular (H_x ao longo do ressonador) gerado por configurações de 200 folhas de corrente, obedecendo o perfil de largura das folhas apresentado na figura 6.9. 61

Figura 6.11 – Probabilidade de inversão do *spin* em função do comprimento de onda, calculada para um ressonador de largura constante e para um ressonador com modulação gaussiana. 61

Figura 6.12 – Construção do ressonador com “lados dobrados” 62

Figura 6.13 – Medidas de densidade de fluxo magnético perpendicular do primeiro protótipo de lados dobrados, feitas em diferentes posições da seção do feixe de nêutrons previsto para o Reflectômetro para Estudos de Magnetismo da SNS (o feixe deverá ter uma seção quadrada de 1,27 cm por 1,27 cm). Foi usada uma corrente constante de 20 Amperes fluindo pelas folhas de Alumínio. 63

Figura 6.14 –Desvio percentual do campo H_x no limite lateral do feixe de nêutrons ($x = 1,27$ cm), em relação ao campo perpendicular H_{per} no eixo do ressonador, para um ressonador com largura mínima de 7 cm, com 200 folhas de corrente e modulação gaussiana de profundidade $\sigma = 0,010755$ 64

Figura 6.15 – Perfil lateral calculado para um ressonador de 200 folhas com modulação gaussiana de profundidade $\sigma_m = 0,010755$ e largura central de 7 cm. 64

Figura 6.16 – O protótipo de inversor seletivo de *spin* desenvolvido pelo *Brookhaven National Laboratory* (esquerda) não se mostra adequado para operação dinâmica devido às distorções de campo magnético geradas pelas correntes parasitas em sua estrutura metálica, decorrentes da variação do campo externo. Os dois gráficos (à direita) são simulações de modelos elétricos que ilustram a relação entre o campo gerado pela corrente externa e o campo resultante, para uma estrutura com baixa resistividade (acima) e uma estrutura com alta resistividade (abaixo). 65

Figura 6.17 – Densidade de fluxo magnético do campo guia resultante medido (curva em azul) ao se aplicar a variação de corrente desejada (curva em vermelho) ao equipamento cedido pelo *Brookhaven National Laboratory*. 66

Figura 6.18 – Densidade de correntes parasitas calculada para uma placa de 10 cm x 10 cm com a resistividade aproximada do Alumínio ($\rho = 1 \cdot 10^{-8} \Omega m$) e com 50 mm de espessura, submetida a uma variação perpendicular constante e homogênea de indução magnética de 1 T/s. 68

Figura 6.19 – Aproximação da solução com o aumento do número de malhas em que a placa é dividida (regularmente, neste caso) – cálculo de indução de correntes em uma única placa feito para uma posição axial a 5 cm da placa com resistividade $1 \cdot 10^{-8} \Omega m$, $50 \mu m$ de espessura x 16 cm de altura x 10 cm de largura e com lados dobrados de 1,5 cm em 5 camadas.	69
Figura 6.20 – Estimativa do campo resultante no ponto central de um ressonador com 200 placas com resistividade de $1,8 \cdot 10^{-8} \Omega m$, $50 \mu m$ de espessura, 16 cm de altura e com o perfil de largura descrito na seção 6.1.3.2.	70
Figura 6.21 – Cálculo aproximado do campo resultante no ponto central do ressonador descrito na seção 6.1.3.2, sendo mostrada a densidade de fluxo magnético obtida com o ajuste de fase (curva em azul) e o erro percentual do campo, em relação aos valores ótimos na faixa ativa de TOF (equivalente aos comprimentos de onda a serem medidos).	71
Figura 6.22 – Formas de corrente e tensão para operação ativa entre 2 \AA e $3,5 \text{ \AA}$ à 15 m da fonte de nêutrons para um solenoide de 24 mH. Além de permitir a operação nesta faixa do pulso, é necessário que a fonte possa recuperar a corrente de “B” para “A” em 10,98 ms.	73
Figura 6.23 – Exemplo de simulações executadas para verificar o desempenho das fontes de corrente disponíveis no mercado (as curvas em vermelho representam a corrente desejada e as curvas em azul a corrente obtida). O gráfico mais abaixo mostra um detalhe da operação na banda de comprimento de onda mais crítica da aplicação.	74
Figura 6.24 – Medidas feitas em um solenoide com cerca de 0,15 mH, com e sem o uso de um capacitor de compensação adicionado ao laço de controle.	75
Figura 6.25 –Aspecto da “macro” desenvolvida para o cálculo, geração e carregamento das curvas de controle de corrente do filtro. Trechos de curvas inversamente proporcionais ao tempo e contendo uma componente constante que compense campos de fundo constantes são ajustadas entre os pontos medidos para ressonância em diferentes TOF no detector. É feito então um deslocamento da curva resultante em tempo, para obtenção da ressonância correta na posição do centro do ressonador.	75
Figura 7.1 – (a) A distância efetiva a' entre duas folhas de corrente muda em função do ângulo α . (b) Esta distorção gera um pequeno deslocamento da ressonância espacial de <i>spin</i>	77
Figura 7.2 – O filtro montado a partir do protótipo de Brookhaven (esquerda) e os equipamentos de controle e monitoração (direita), na execução do primeiro experimento, no instrumento POSY I (<i>Intense Pulsed Neutron Source – Argonne National Laboratory</i>).	77
Figura 7.3 – Cálculos e medições da sensibilidade angular do inversor de <i>spin</i> por ressonância espacial. As medidas foram efetuadas no reflectômetro polarizado POSY I, na <i>Intense Pulsed Neutron Source (Argonne National Laboratory, EUA)</i> , em março de 2001.	78
Figura 7.4 – Filtragens emuladas para diferentes posições do filtro na linha de nêutrons, utilizando um filtro de 200 folhas de corrente (inversões de H_{per}).	78
Figura 7.5 – (a) Calibração da corrente do ressonador. (b) Efeitos das distorções no campo guia (região ativa em vermelho na curva do perfil do campo magnético).	79
Figura 7.6 – Cálculo do percentual de nêutrons com <i>spin down</i> presentes logo após o ressonador para diferentes razões $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow$ características de <i>supermirrors</i> polarizadores.	81
Figura 7.7 – Cálculo da incerteza de comprimento de onda em função da razão de reflectividade do elemento polarizador (assumindo um analisador ideal, ou seja, razão de transmissão do analisador $I_t^\downarrow/I_t^\uparrow = \infty$) – s é o desvio padrão da distribuição resultante (PARIZZI <i>et al.</i> , 2001 - iii).	81
Figura 7.8 – Cálculo da transmissão resultante do analisador em função do comprimento de onda para diferentes razões $I_t^\downarrow/I_t^\uparrow = I_r^\uparrow/I_r^\downarrow$ assumindo uma razão de reflectividade do <i>spin</i> $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow = 30$ para o polarizador, comparando os resultados ao caso de polarizador e analisador ideais.	82

Figura 7.9 – Cálculo ilustrando a influência da razão de transmissão de <i>spin</i> do analisador sobre a incerteza de comprimento de onda (assumindo uma razão de reflectividade do <i>spin</i> $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow = 30$ para o polarizador).	82
Figura 7.10 – Cálculo aproximado do campo resultante no ponto central do ressonador descrito na seção 6.1.3.2, sendo mostrada a densidade de fluxo magnético obtida com o ajuste de fase (curva em azul) e o erro percentual do campo, em relação aos valores ótimos na faixa ativa de TOF (equivalente aos comprimentos de onda a serem medidos – de 3,5 Å a 5 Å). ...	84
Figura 7.11 – (a) As medidas de reflectividade são modeladas como uma convolução entre a curva real de reflectividade e a forma de pulso do feixe incidente. (b) Exemplo de resultados esperados para um experimento convencional de reflectividade no reflectômetro de magnetismo da SNS e um experimento com a utilização do filtro proposto. Esta medida foi emulada para operação na faixa entre 3,5 Å e 5 Å.	85

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

a	- distância entre folhas de corrente consecutivas no ressonador espacial de <i>spin</i>
A_o	- $d \left(\frac{H_{o-g}}{I_{o-g}} \right)$ - $\frac{d}{dz}$
a_1	- parte real da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-up</i>
a_2	- parte real da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-down</i>
a'	- distância efetiva entre dois pontos de folhas de corrente adjacentes que fazem parte de um caminho não perpendicular às folhas
B	- indução magnética (densidade de fluxo magnético)
b_c	- largura equivalente de uma folha de corrente no centro do ressonador
b_p	- largura da p -ésima folha de corrente do ressonador
B_o	- parcela constante de $\frac{H_{o-g}}{I_{o-g}}$
b_1	- parte imaginária da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-up</i>
b_2	- parte imaginária da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-down</i>
C_1	- constante ajustada para a relação $t_{partida}/\lambda_{res}$
C_2	- agregado de parâmetros e constantes naturais $\left(\frac{\pi}{a \cdot \gamma_n \cdot C_3} \right)$
C_3	- razão $\frac{m_n}{h}$
d	- espessura das folhas de Alumínio do ressonador
d_d	- distância entre o alvo do feixe de prótons e o detector de nêutrons
D_f	- transformação linear que modela o comportamento do ressonador
D_n	- transformação linear que modela o comportamento da n^a configuração magnética do ressonador
FWHM	- largura de uma distribuição a meia intensidade (<i>Full Width at Half Maximum</i>)
GeV	- giga-elétron-Volt = 10^9 elétron-Volts
h	- constante de Planck ($6,62606876 \cdot 10^{-34}$ J · s)
H	- intensidade de campo magnético
H_o	- campo magnético guia
H_{o-g}	- parcela do campo magnético guia com gradiente linear na região ativa do ressonador
H_{o-u}	- parcela do campo magnético guia uniforme na região ativa do ressonador
H_{per}	- campo magnético perpendicular ao campo magnético guia e à direção do feixe de nêutrons
h_q	- vetor unitário na direção do campo magnético resultante local
h_x	- componente do vetor h_q na direção x
h_y	- componente do vetor h_q na direção y
h_z	- componente do vetor h_q na direção z

h_{\pm}	- variável auxiliar = $h_x \pm i \cdot h_y$
i	- definido como $\sqrt{-1}$
ICANS	- <i>International Conference on Advanced Neutron Sources</i>
ICNS	- <i>International Conference on Neutron Scattering</i>
IPNS	- <i>Intense Pulsed Neutron Source</i> (instalação de espalhamento de nêutrons por <i>Spallation</i> no <i>Argonne National Laboratory</i>)
i_o	- corrente exigida da fonte para o acionamento do campo magnético guia
I_{o_g}	- corrente injetada para a geração da parcela gradiente do campo magnético guia
I_{o_u}	- corrente injetada para a geração da parcela uniforme do campo magnético guia
I_r^{\uparrow}	- Intensidade refletida com o estado <i>spin-up</i>
I_r^{\downarrow}	- Intensidade refletida com o estado <i>spin-down</i>
I_t^{\uparrow}	- Intensidade transmitida com o estado <i>spin-up</i>
I_t^{\downarrow}	- Intensidade transmitida com o estado <i>spin-down</i>
K	- razão $\frac{H_{o_u}}{I_{o_u}}$
L_{coil}	- Indutância da bobina de geração do campo guia
M	- número de folhas de corrente = número de inversões do campo perpendicular
MeV	- mega-elétron-Volt = 10^6 elétron-Volts
mH	- miliHenry = 10^{-3} Henrys
m_n	- massa de um nêutron em repouso
ms	- milissegundo = 10^{-3} segundos
MW	- mega-Watt = 10^6 Watts
ns	- nanosegundo = 10^{-9} segundos
p	- índice das folhas de corrente do ressonador
P	- vetor de polarização do <i>spin</i> do nêutron
POSY I	- reflectômetro com feixe de nêutrons polarizado da IPNS
P_x	- componente do vetor de polarização do <i>spin</i> do nêutron na direção x
P_y	- componente do vetor de polarização do <i>spin</i> do nêutron na direção y
P_z	- componente do vetor de polarização do <i>spin</i> do nêutron na direção z
q	- “vetor de espalhamento”, dado em 1/(unidade de comprimento)
R_{coil}	- Resistência da bobina de geração do campo guia
s	- desvio padrão estimado
SNS	- <i>Spallation Neutron Source</i>
SPIE	- <i>The International Society for Optical Engineering</i>
SSR	- ressonância espacial do <i>spin</i> (<i>Spatial Spin Resonance</i>)
<i>ster</i>	- unidade de ângulo sólido (uma esfera completa corresponde a 4π <i>ster</i>)
SU(2)	- grupo de matrizes unimodulares unitárias de segunda ordem
$s^{\uparrow}/i^{\uparrow}$	- probabilidade de transição “feixe incidente <i>spin-up</i> para feixe espalhado <i>spin-up</i> ”
$s^{\uparrow}/i^{\downarrow}$	- probabilidade de transição “feixe incidente <i>spin-up</i> para feixe espalhado <i>spin-down</i> ”
$s^{\downarrow}/i^{\uparrow}$	- probabilidade de transição “feixe incidente <i>spin-down</i> para feixe espalhado <i>spin-up</i> ”
$s^{\downarrow}/i^{\downarrow}$	- probabilidade de transição “feixe incidente <i>spin-down</i> para feixe espalhado <i>spin-down</i> ”
T	- Tesla

$t_{chegada}$	- tempo de chegada de um nêutron ao centro do ressonador, contado a partir de t_o
$t_{partida}$	- tempo de partida de um nêutron da face do moderador, contado a partir de t_o
t_{pico}	- tempo do fluxo de nêutrons máximo na face do moderador para um determinado comprimento de onda, contado a partir de t_o
T_t	- tempo que o nêutron leva para atravessar o espaço entre duas folhas de corrente
t_o	- representação do instante em que o feixe de prótons incide sobre o alvo
TI	- Trabalho Individual
TOF	- <i>Time-Of-Flight</i> ou tempo de percurso
v	- velocidade da partícula
V	- tensão exigida da fonte de corrente para o acionamento do campo magnético guia
v_{res}	- velocidade de ressonância dos nêutrons
w^{\uparrow}	- probabilidade do estado <i>spin-up</i>
w^{\downarrow}	- probabilidade do estado <i>spin-down</i>
x	- posição horizontal lateral na linha de nêutrons
y	- posição vertical na linha de nêutrons em relação ao eixo central
z	- posição na linha de nêutrons sobre o eixo perpendicular ao plano de detecção
z_o	- distância entre o centro do ressonador e a face do moderador
α	- ângulo entre o caminho real do nêutron e o caminho perpendicular, entre folhas de corrente adjacentes
β_n	- ângulo que o vetor do <i>spin</i> precessiona ao redor do eixo local de quantização ao longo da n^{a} configuração magnética do ressonador
γ_n	- razão giromagnética do nêutron ($-1.832\ 471\ 88 \cdot 10^4\ \text{s}^{-1} \cdot \text{Oe}^{-1}$)
$\Delta\theta$	- incremento do ângulo de precessionamento do vetor de <i>spin</i> do nêutron ao longo do ressonador
θ	- ângulo de incidência do feixe de nêutrons sobre a amostra
λ	- comprimento de onda associado (de De Broglie)
μm	- microns = 10^{-6} metros
μs	- microsegundo = 10^{-6} segundos
μ_o	- permeabilidade magnética do espaço livre ($4 \cdot \pi \cdot 10^{-7}\ \text{H/m}$)
π	- razão entre o perímetro e o diâmetro de uma circunferência (3.141592...)
ρ	- resistividade elétrica
σ	- condutividade elétrica
σ_m	- profundidade da modulação espacial do campo perpendicular H_{per}
τ_{skin}	- tempo “de superfície” característico de um “condutor fino” (<i>skin time</i>)
ϕ^{\uparrow}	- amplitude de probabilidade do estado <i>spin-up</i>
ϕ^{\downarrow}	- amplitude de probabilidade do estado <i>spin-down</i>
$\phi^{\uparrow*}$	- conjugado da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-up</i>
$\phi^{\downarrow*}$	- conjugado da amplitude de probabilidade do estado <i>spin-down</i>
ϕ_f^{\uparrow}	- amplitude de probabilidade final do estado <i>spin-up</i>
ϕ_f^{\downarrow}	- amplitude de probabilidade final do estado <i>spin-down</i>
ϕ_o^{\uparrow}	- amplitude de probabilidade inicial do estado <i>spin-up</i>
ϕ_o^{\downarrow}	- amplitude de probabilidade inicial do estado <i>spin-down</i>
ω	- frequência angular

Ω	- frequência de precessionamento de Larmor
\AA	- Ångstrom = 10^{-10} metros
(α, n)	- representação de reações nucleares onde a incidência de partículas alfa resulta na emissão de nêutrons
$[I]$	- vetor de correntes de malha usado no cálculo de correntes parasitas
$[\dot{I}]$	- vetor de derivadas temporais das correntes de malha usado no cálculo de correntes parasitas
$[L]$	- matriz de indutâncias de malha usado no cálculo de correntes parasitas
$[V]$	- vetor de forças eletro-motrizes de malha usado no cálculo de correntes parasitas
$[R]$	- matriz de resistências de malha usado no cálculo de correntes parasitas
\uparrow	- estado <i>spin-up</i>
\downarrow	- estado <i>spin-down</i>

RESUMO

Em fontes de nêutrons por *spallation* para pesquisa de materiais, o comprimento de onda dos nêutrons é geralmente determinado pelos tempos de percurso (TOF) dos nêutrons desde a fonte até o detector. A precisão atingível é limitada pelo fato de o tempo de emissão do pulso característico do sistema alvo/moderador ser diferente de zero (a situação ideal fictícia seria a emissão se ocorresse na forma de um impulso). “Moderadores acoplados” (elementos usados para produzir feixes de alta intensidade com nêutrons de baixa energia) apresentam um decaimento de intensidade em função do tempo muito longo, ao longo de todo o espectro usado nos experimentos. Por este motivo, “moderadores desacoplados”, os quais produzem feixes com intensidade mais reduzida, são freqüentemente usados para instrumentos que requerem alta resolução.

Neste trabalho, propusemos e analisamos uma nova técnica de filtragem dinâmica de feixes de nêutrons polarizados de baixa energia para experimentos que utilizam TOF na determinação do comprimento de onda. O dispositivo consiste de um sistema ótico polarizador/analizador e um inversor de spin seletivo em energia, o qual funciona por ressonância espacial do *spin*. Variando a condição de ressonância em sincronia com a estrutura temporal do pulso de nêutrons (através do controle de campos magnéticos), o filtro pode ajustar a resolução de energia (ou de comprimento de onda) de pulsos de banda larga em tais experimentos, separando os nêutrons com a correta relação “TOF/comprimento de onda” dos demais.

Um método para o cálculo de desempenho do sistema foi apresentado em um Trabalho Individual (TI) (PARIZZI *et al.*, 2002 - i), do qual se fará aqui uma breve revisão além de amplo uso na otimização dos parâmetros a serem ajustados para o projeto do filtro. Os resultados finais mostram que ganhos consideráveis em resolução podem ser obtidos com a aplicação desta técnica em experimentos de reflectometria por tempo de percurso, sem que para tal seja necessário comprometer a intensidade do feixe usado pelo mesmo instrumento quando operado em um modo de baixa resolução, dando ao usuário do instrumento a opção de escolher a relação ótima entre intensidade e resolução para seu experimento.

Como parte da conclusão desta dissertação, é apresentada uma proposta de parâmetros para a construção deste tipo de filtro e previsão de desempenho da configuração proposta, baseada no software de modelamento desenvolvido.

ABSTRACT

At spallation neutron sources, the wavelength of a neutron is generally determined by its time-of-flight (TOF) from the source to the detector. The achievable precision is ultimately limited by the non-zero emission-time width of the source/moderator system (the fictitious ideal case would be to have the emission with the shape of a δ -function). Particularly, coupled moderators that are used to produce high intensity cold neutron beams show long “tails” in the intensity/time distribution for all wavelengths. For this reason, much less intense decoupled moderators are often used for instruments that require high resolution.

In this study, we propose and analyze a novel technique for dynamic energy filtering of thermal and cold polarized neutron beams. The device consists of a polarizer/analyzer system and an energy-selective spin-resonance flipper. By drifting its resonance condition in synchronization with the TOF, the filter controls the energy resolution of a broad bandwidth TOF neutron pulse, separating neutrons with the right TOF/wavelength relation from the others.

A method to predict the performance of such a system was presented in a progress report (“TI” - Individual Work) developed by the student (PARIZZI *et al.*, 2002 - i), of which a brief review will be presented herein. The method has been applied to the optimization of the filter parameters. These calculations show that substantial resolution gains are obtainable by applying this technique to a TOF neutron reflectometer, without compromising the intensity of the neutron beam used by the instrument when operated in a low resolution mode, giving the user the option to trade intensity and resolution, according to the needs of a particular experiment.

As part of the conclusion, a conceptual design of a prototype filter and an analysis of its expected performance are presented, based on a computer program developed to model the application.

1 INTRODUÇÃO

Fontes de raios-x e de nêutrons são utilizadas em grande escala para estudar novos materiais e compreendê-los em escalas atômicas. Para ilustrar a utilidade da “ciência neutrônica”, pode-se citar exemplos de seu uso como ferramenta no melhoramento de supercondutores para altas temperaturas, análise de estruturas leves de alumínio e desenvolvimento de ímãs mais leves e poderosos, assim como para estudos de medicamentos e em engenharia genética. As técnicas de espalhamento de nêutrons têm um papel fundamental no estudo de misturas óleo-aquosas, como emulsões e cremes. Com estas técnicas se pode determinar a “reação” de moléculas próximas, se existe uma tendência de atração ou repulsão, possibilitando previsões de durabilidade ou envelhecimento de uma combinação de materiais.

Partindo de investigações físicas básicas de antiferromagnetismo em isoladores e metais-terras-raras, a gama de disciplinas que utilizam espalhamento de nêutrons expandiu-se muito além do que se esperava inicialmente (figura 1.1). Nêutrons já foram utilizados, por exemplo, para investigar a mineralização de ossos em desenvolvimento e estudar a desmineralização no processo de osteoporose, ajudando no teste de medicamentos contra doenças desmineralizadoras. Estudos estruturais de minerais complexos submetidos a altas temperaturas e pressões fornecem pistas sobre processos geológicos, como a atividade de vulcões e terremotos. Nêutrons podem revelar informações que muitas vezes não podem ser obtidas com o uso de outras técnicas, como espectroscopia ótica, microscopia eletrônica ou difração de raios-x. Em geral, cientistas fazem uso de mais de uma destas técnicas, para obter o máximo de informações sobre um determinado material. Por exemplo: para a determinação das estruturas de moléculas quimicamente modificadas, ambas as técnicas de espalhamento de nêutrons e de raios-x são necessárias.

Este trabalho de mestrado se propôs a estudar e desenvolver o conceito de um equipamento que sirva para o ajuste automático e rápido de um parâmetro utilizado em praticamente todos os experimentos possíveis que utilizam espalhamento de nêutrons: a resolução de comprimento de onda (ou, equivalentemente, a resolução de energia).

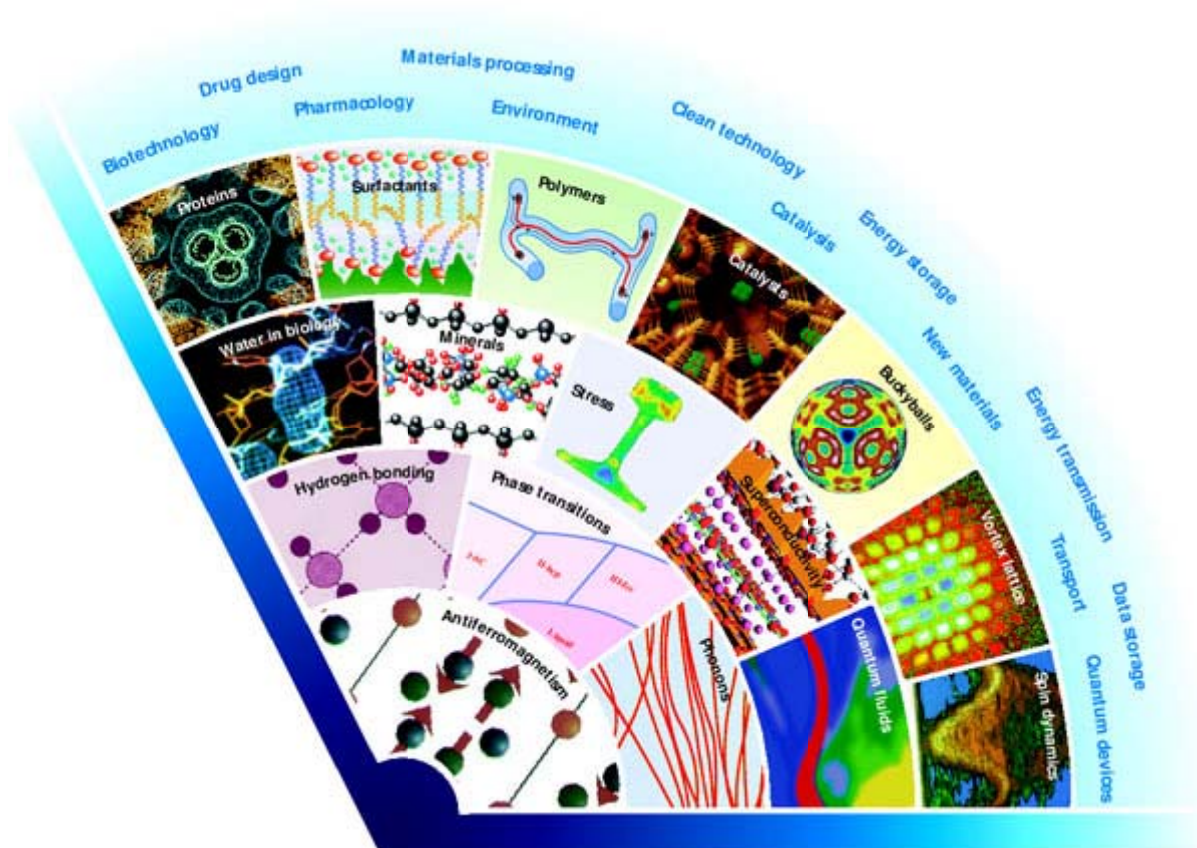


Figura 1.1 – Representação das áreas nas quais se utiliza espalhamento de nêutrons, desde o início da utilização (há cerca de meio século) até a atualidade (cortesia do *website* do ISIS, Reino Unido).

1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO

Em fontes pulsantes de nêutrons por *spallation* o comprimento de onda é geralmente determinado pelo sistema de aquisição de dados com base no tempo de percurso do nêutron (conhecido por TOF, do Inglês *time-of-flight*) da fonte de nêutrons (conhecida como alvo) até o detector. A resolução de comprimento de onda característica de um instrumento é, por sua vez, determinada pela arquitetura do sistema moderador-refletor e pelo comprimento do instrumento (distância entre a fonte e o detector de nêutrons) (CARPENTER, 1977). Ambos fatores são fixos em uma instalação e, uma vez determinados, o instrumento tem sua resolução definida. Qualquer modificação no moderador implica em uma parada geral por longos períodos em tais instalações. Modificações no comprimento de um instrumento são igualmente improváveis e inviáveis.

Uma situação desejável em fontes pulsantes de nêutrons seria a utilização de um equipamento independente que determinasse a relação ótima entre fluxo e resolução para cada experimento, permanecendo tanto o instrumento, assim como o sistema moderador-refletor,

imutável. Propostas de dispositivos que cumprissem esse papel foram apresentadas nas últimas três décadas, mas nenhuma delas foi implementada com o sucesso desejado. A idéia apresentada neste trabalho visa permitir tal ajuste de relação ótima entre resolução e intensidade através de um princípio de funcionamento ótico-magnético, sem partes mecânicas móveis e com ajuste eletrônico instantâneo. Tal equipamento teria a capacidade de “desacoplar” a dependência que existe entre o tipo de sistema moderador-refletor de uma linha de nêutrons e os possíveis experimentos que se possa executar em um instrumento instalado nesta linha.

O dispositivo proposto consiste de um sistema polarizador/analizador de nêutrons e um inversor de spin seletivo em energia por ressonância espacial do *spin*. Variando a condição de ressonância conforme a estrutura temporal do pulso de nêutrons (através do controle de campos magnéticos), o filtro permite o ajuste da resolução de energia/comprimento de onda de pulsos neutrônicos de banda larga, separando os nêutrons com a correta relação “TOF/comprimento de onda” dos demais.

Nesta dissertação, é dada uma breve introdução às propriedades fundamentais dos feixes de nêutrons, às fontes de nêutrons e ao espalhamento de nêutrons. Após, são enfocados o modelamento em computador para cálculos da ação destes campos sobre os feixes polarizados de nêutrons (fazendo referências ao Trabalho Individual – TI – e outras publicações), alguns exemplos de configurações para a geração dos campos magnéticos e uma proposta de filtro com uma análise teórica de seu desempenho.

1.2 NÊUTRONS

Em 1932, o inglês James Chadwick provou a existência de nêutrons, o que lhe rendeu o Prêmio Nobel de Física de 1935. Um nêutron é uma partícula subatômica sem carga elétrica, com uma massa equivalente a cerca de 1839 vezes a massa do elétron. Nêutrons permanecem estáveis ao se chocar com núcleos atômicos, tendo um tempo de vida médio, como uma partícula livre, da ordem de 1000 segundos (CARPENTER, comunicação privada e notas pessoais, 2000). Nêutrons e prótons formam quase toda a massa de um núcleo atômico, fazendo por isso parte do grupo dos núcleons. Nêutrons também podem ser descritos de uma forma diferente do ponto de vista da Cromodinâmica Quântica. Embora não viremos a tratar em detalhes esta descrição, ela deve ser citada e sua validade dada por aceita (esta já foi verificada exhaustivamente em um grande número de experimentos), pois parte dessa teoria

que descreve o *spin* do nêutron nos será útil para a previsão de resultados neste projeto (PARIZZI *et al.*, 2002 – ii).

1.3 FONTES DE NÊUTRONS PARA PESQUISA

Um nêutron livre no espaço tem uma vida de apenas alguns minutos (se não for antes capturado por algum núcleo atômico). Logo, fontes de nêutrons devem ser baseadas em processos que emitam nêutrons continuamente de núcleos, ou seja, baseadas em reações nucleares (CARPENTER, comunicação privada e notas pessoais, 2000). Em 1942, o italiano Enrico Fermi demonstrou que nêutrons provenientes de fissões nucleares poderiam manter uma reação em cadeia controlada. Fermi já havia feito anteriormente uma descoberta muito importante: nêutrons com velocidade reduzida (chamados nêutrons térmicos, por sua energia cinética ser similar à energia cinética de um átomo à temperatura ambiente) têm maior probabilidade de interação do que nêutrons rápidos. Por esta descoberta, Fermi havia recebido o Prêmio Nobel de 1938. Esta propriedade dos nêutrons “lentos” os faz apropriados à determinação da posição e movimentos dos átomos.

A partir de meados da década de 40, pesquisadores tiveram acesso, nos Estados Unidos, a intensos feixes de nêutrons que pequenos reatores conseguiam fornecer. Mesmo antes da construção de reatores nucleares de pesquisa, resultados obtidos utilizando fontes de nêutrons mais simples, indicavam que feixes de nêutrons poderiam ser usados para estudar sólidos e líquidos. O Prêmio Nobel de 1994 foi concedido a Bertram Brockhouse e Clifford Shull, por suas contribuições pioneiras para o desenvolvimento das técnicas de espalhamento de nêutrons, tendo desenvolvido a partir dos anos 50 as técnicas de difração e espectroscopia neutrônica.

Já foram desenvolvidos vários tipos de fontes de nêutrons, como por exemplo as **fontes baseadas em reações (α , n)** (WEINSTEIN *et al.*, 1964), as **fontes foto-neutrônicas** (WEINSTEIN *et al.*, 1964), nêutrons provenientes de outras várias formas de **decaimento de estados excitados**, ou ainda, os **reatores nucleares** (WEINSTEIN *et al.*, 1964; TUM Technische Universität München Brochure, 2001), que é a forma mais conhecida e difundida de se produzir nêutrons térmicos para pesquisa. Nêutrons também podem ser produzidos em reações que utilizam partículas eletricamente carregadas (como, por exemplo, prótons), provenientes de aceleradores de partículas, aceleradas contra um alvo. Essas são as chamadas **fontes baseadas em aceleradores** (CARPENTER, comunicação privada e notas pessoais, 2000; WEINSTEIN *et al.*, 1964). Este tipo de produção de nêutrons por **reações com**

partículas carregadas são induzidas por partículas com energia relativamente baixa (tipicamente menores do que 10 MeV). Uma seqüência complexa de reações, capaz de produzir um número razoavelmente grande de nêutrons em um processo de colisões múltiplas, pode ser iniciada pela interação entre partículas com altíssima energia (da ordem de GeV) e núcleos pesados. Este fenômeno foi batizado em 1947 por W.H. Sullivan e G.T. Seaborg como *spallation*. Em termos de eficiência na produção de nêutrons em relação ao calor gerado, o processo de *spallation* é cerca de cinco vezes mais eficiente do que o processo de fissão (CARPENTER, 1977) utilizado em reatores nucleares. É importante lembrar que a produção de nêutrons por *spallation* é inerentemente segura, pois esta pára quando o feixe de prótons é desligado. Além disso, este processo produz menos “lixo radioativo” do que os reatores de fissão. A figura 1.2 mostra a evolução do fluxo efetivo de nêutrons térmicos em fontes para a pesquisa.

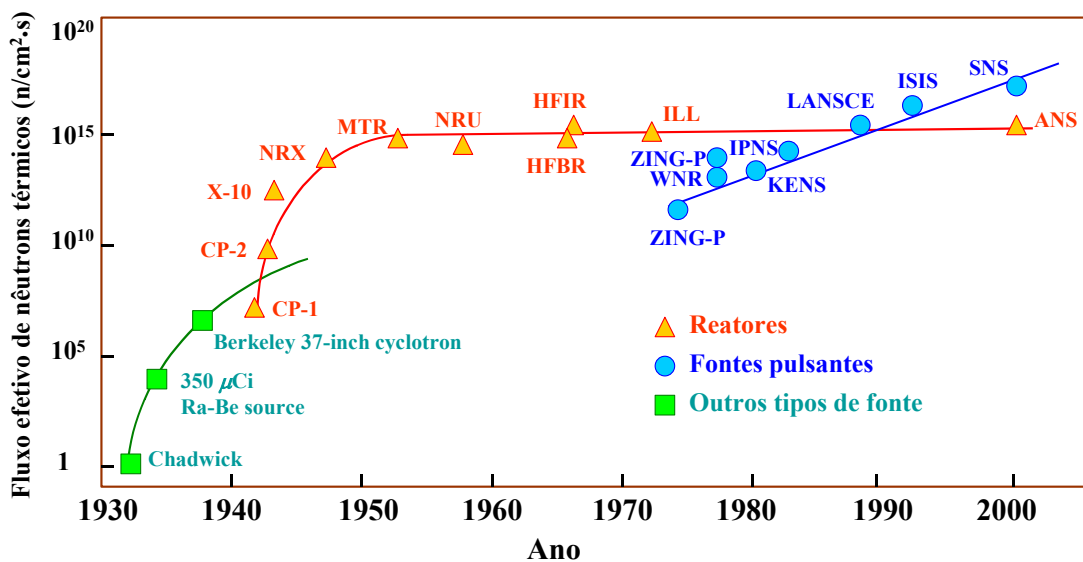


Figura 1.2 – Evolução do fluxo efetivo de nêutrons térmicos em instalações de pesquisa baseadas em reatores e fontes pulsantes (fontes: *Neutron Scattering*, K. Skold and D. L. Price, eds., Academic Press, 1986 e SNS website, 2000).

No que diz respeito ao regime de operação, fontes de nêutrons podem ser divididas em **fontes constantes** e **fontes pulsantes**. No que tange as instalações de alto fluxo, aceleradores pulsantes acionam a maioria das fontes pulsantes, enquanto as fontes constantes são, em geral, reatores de pesquisa. Fontes pulsantes têm como principais características, a duração dos pulsos e sua freqüência. Em um extremo estão as **fontes de pulso curto** (duração típica do pulso menor do que 5 μs). Como um meio termo entre fontes de pulso curto e fontes constantes, aparecem as **fontes de pulso longo** (com duração de pulso da ordem de 1 ms). Uma vantagem inerente aos regimes pulsantes é a obtenção de intensidades instantâneas

muito acima da intensidade média, com uma geração média de calor relativamente baixa (CARPENTER, comunicação privada e notas pessoais, 2000). Experimentos que permitem a utilização de uma faixa mais larga de energia de nêutrons, sendo esta energia determinada pelo tempo de percurso (TOF) dos nêutrons, são particularmente beneficiados com a utilização de fontes pulsantes. Ou seja, enquanto que em um experimento de espalhamento de nêutrons baseado em um reator nuclear praticamente todos os nêutrons produzidos são descartados, sendo utilizada apenas uma pequena fração de nêutrons dentro de uma faixa estreita de comprimentos de onda (geralmente filtrada através da reflexão do feixe sobre um cristal monocromatizador), em um experimento baseado em uma fonte pulsante uma banda mais larga de comprimentos de onda pode ser efetivamente utilizada, diferenciando os comprimentos de onda pelo tempo de percurso do ponto onde o pulso é gerado até o detector.

1.4 O PROJETO SNS E O INSTRUMENTO ESCOLHIDO PARA BASEAR O DESENVOLVIMENTO DO FILTRO



Figura 1.3 – Localização dos diversos componentes em desenvolvimento e construção para o projeto SNS.

A preocupação com intensidade e eficiência na utilização de feixes neutrônicos produzidos por novas fontes para pesquisa é fundamental, pois a realização de experimentos que ainda não são possíveis hoje depende da superação dos padrões vigentes nas fontes em

operação. A SNS (*Spallation Neutron Source*) deverá produzir pulsos de nêutrons cerca de 10 vezes mais “brilhantes” do que as fontes pulsantes mais intensas existentes, com frequência de 60 Hz. O alto “brilho” dessa fonte deverá trazer novas oportunidades para o estudo de amostras extremamente pequenas, como nos casos em que um determinado material é ainda muito novo para estar disponível em grandes quantidades, ou quando a geração da amostra é muito demorada e altamente custosa. Outro motivo para se desejar feixes mais intensos de nêutrons é a realização de experimentos com boa “resolução em tempo”.

A SNS poderá fornecer resultados de difração em poucos minutos, ou até mesmo segundos, permitindo que processos em andamento sejam mais precisamente acompanhados. Isto se aplica ao estudo de baterias ou células de combustível em operação, efeitos da mudança de temperatura em processos catalíticos, mudanças em estruturas cristalinas, mudanças no tamanho de partículas por hidratação, entre outras aplicações. Um consórcio de 6 laboratórios nacionais norte-americanos é responsável pelo projeto e construção dessa nova fonte de nêutrons para pesquisa.

A instalação terá, inicialmente, uma estação de alvo operando em 60 Hz. Dois moderadores térmicos e dois moderadores “sub-térmicos” (*cold moderators*), servirão 18 linhas de nêutrons. Os feixes de nêutrons produzidos serão guiados através de passagens blindadas (*shutters*) e transportados por guias de nêutrons até os instrumentos. Essas guias são normalmente feitas de substratos de vidro ou Silício revestidos com camadas de filmes finos de Níquel, Titânio ou outros materiais apropriados. No caminho até os instrumentos, os feixes passam por lâminas girantes (*choppers*) para a definição da banda de energia a ser utilizada nos experimentos e casamento dos “quadros” de energia (ou de comprimento de onda respectivo) com o comprimento do instrumento (*frame definition process*).

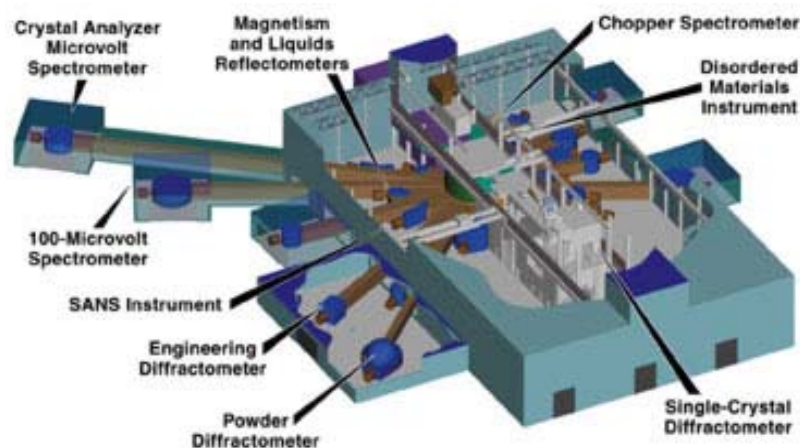


Figura 1.4 – Grupo de instrumentos recomendados por comitês da comunidade de ciência de nêutrons para a SNS.

O *Argonne National Laboratory* é responsável pelo desenvolvimento, projeto e construção de parte dos instrumentos de espalhamento de nêutrons planejados para a SNS. Os instrumentos a serem desenvolvidos são determinados através de consultas à comunidade de usuários. Em um encontro (*Instrumentation Needs and Performance Metrics*) promovido em 1996 pelo *Oak Ridge National Laboratory*, representantes da comunidade de usuários de nêutrons recomendaram e priorizaram um grupo de 10 instrumentos para instalação inicial na estação alvo de 60 Hz – figura 1.4.

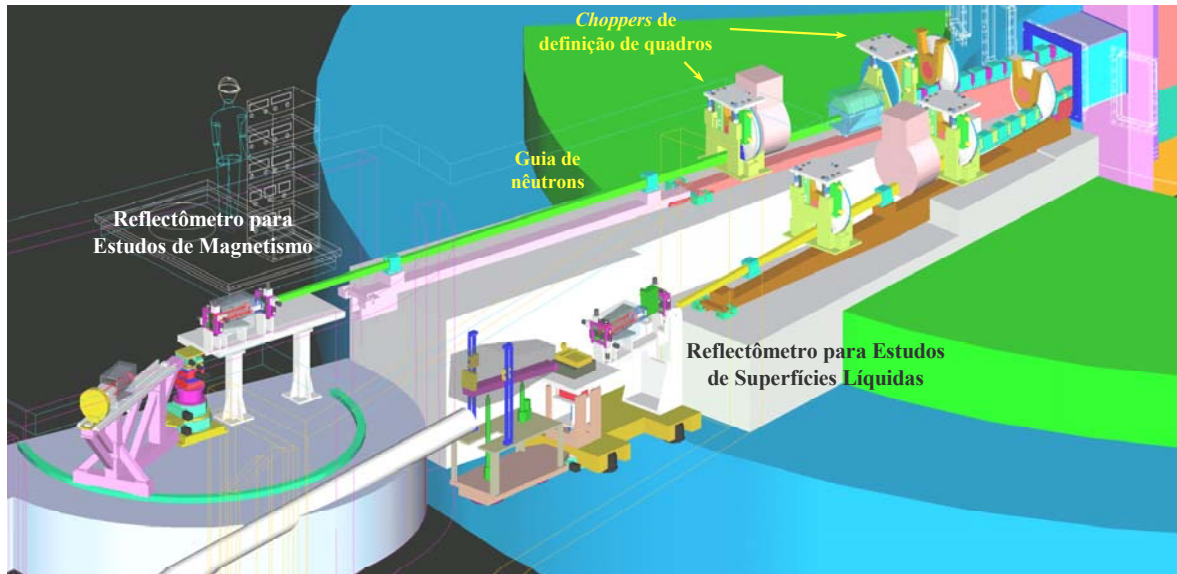


Figura 1.5 – Visão geral dos componentes do Reflectômetro para Estudos de Magnetismo em desenvolvimento para a SNS.

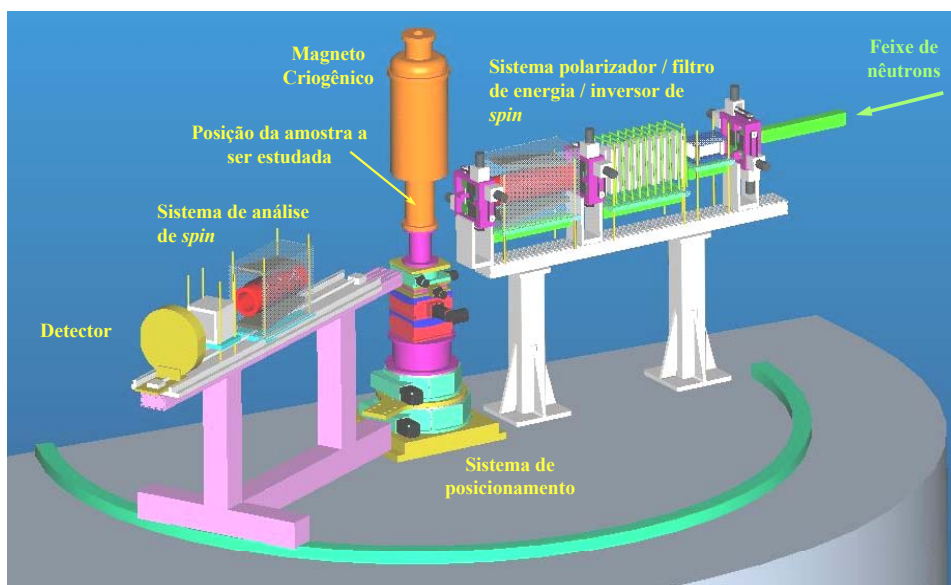


Figura 1.6 – Detalhe da área de operação do Reflectômetro para Estudos de Magnetismo da SNS.

As figuras 1.5 e 1.6 apresentam um modelo CAD de um dos instrumentos de espalhamento de nêutrons recomendados, o Reflectômetro para Estudos de Magnetismo, em

desenvolvimento para a SNS (KLOSE, 2000). Embora o filtro de energia que estamos propondo seja útil para a grande maioria dos instrumentos de espalhamento de nêutrons, este reflectômetro é o instrumento da SNS mais apropriado para teste e desenvolvimento do filtro. A característica mais importante na escolha de um instrumento para a instalação do filtro é a possibilidade de polarização e análise de *spin* do feixe, pois o filtro faz uso destas propriedades em seu princípio de funcionamento.

2 INCERTEZA DE COMPRIMENTO DE ONDA EM FONTES DE NÊUTRONS POR *SPALLATION*

O ajuste ótimo da resolução de comprimento de onda é um dos problemas mais complicados no projeto e operação de um instrumento de espalhamento de nêutrons. Em fontes constantes de nêutrons, esta resolução é normalmente ajustada pela escolha de um cristal “monocromatizador” ou com o uso de um seletor de velocidade. Para experimentos baseados em “tempo de percurso” (TOF) em reatores, a resolução de comprimento de onda pode ser ajustada, por exemplo, com a modificação das velocidades ou aberturas das janelas dos *choppers* (dispositivos com lâminas girantes). Para instrumentos que utilizam TOF em fontes por *spallation*, a resolução de comprimento de onda é determinada pela combinação da arquitetura do sistema alvo-moderador e o comprimento do instrumento, sendo, de um modo geral, fixa.

Em fontes pulsantes por *spallation* (CARPENTER, 1977; CARPENTER, comunicação privada e notas pessoais, 2000; IVERSON, comunicação privada, 2000 - i), nêutrons são “produzidos” (libertados dos núcleos, seria o termo mais preciso para o processo) pelo impacto de um feixe de prótons sobre um alvo de determinado material. Como resultado, a maior parte das partículas emitidas é composta por nêutrons com alta energia (equivalente a nêutrons com alta velocidade, ou curto comprimento de onda relacionado – nos referimos aqui ao comprimento de onda de De Broglie), os quais são desacelerados a energias úteis para experimentos por um moderador. Para garantir um bom aproveitamento do fluxo total gerado, o sistema alvo-moderador é cercado por um arranjo refletor de nêutrons, o qual reflete de volta ao moderador nêutrons que seriam perdidos por terem sido emitido em direções indesejáveis. De uma maneira geral, pode-se dividir arranjos moderador-refletor em duas classes: “desacoplados” (*decoupled*), nos quais uma folha absorvedora previne o retorno atrasado de nêutrons lentos, e “acoplados” (*coupled*), nos quais todos os nêutrons, incluindo os desacelerados que ficam por mais tempo no refletor, podem reentrar no moderador. Naturalmente, moderadores acoplados provêm fluxos mais intensos de nêutrons do que moderadores desacoplados. Eles têm, no entanto, a desvantagem de produzirem uma longa extensão na distribuição de intensidade em função do tempo, ao longo de todo o espectro dos

pulsos de nêutrons. Essa extensão é comumente chamada de *tail* (“cauda”). Esta “cauda” degrada a resolução de comprimento de onda em experimentos com espalhamento de nêutrons (PARIZZI *et al.*, 2001 - i).

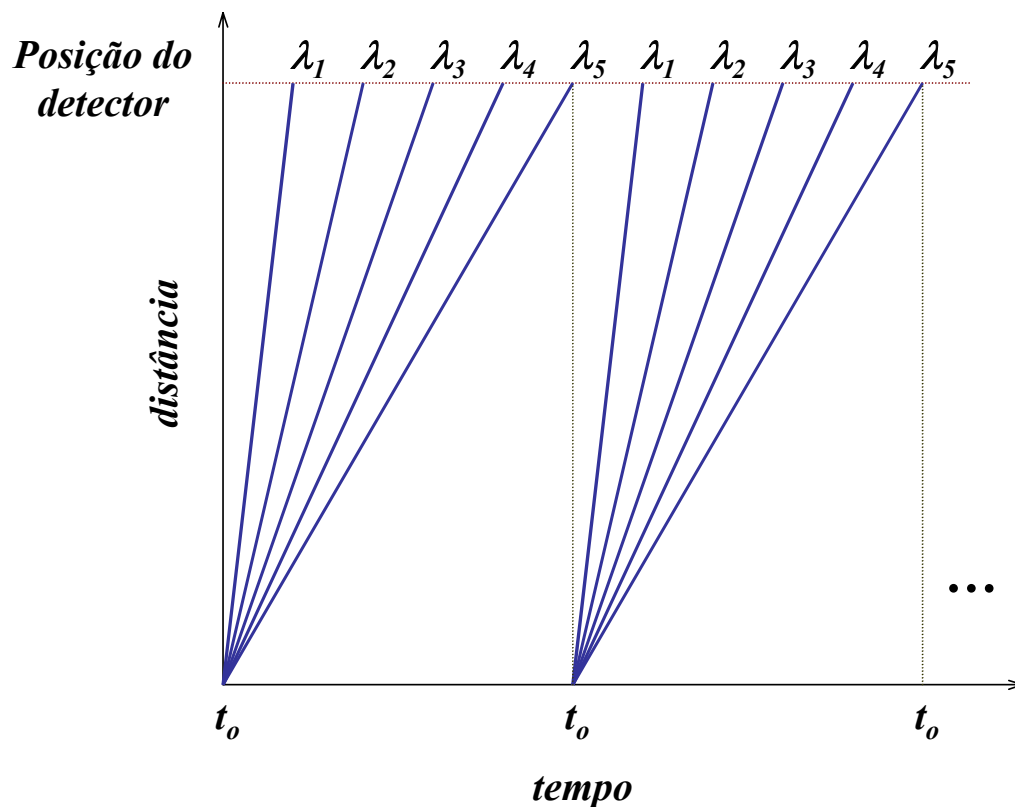


Figura 2.1 – Diagrama de tempos e distância ao detector para determinação dos comprimentos de onda (λ).

O sistema de aquisição de dados interpreta as contagens registradas pelos detectores, relacionando estas com comprimentos de onda (grandeza que tem relação direta com a velocidade das partículas), de acordo com o tempo de chegada dos nêutrons no detector, contado a partir do início de cada pulso (veja o diagrama da figura 2.1). Um exemplo de perfil de emissão típico de um conjunto alvo-moderador-refletor é apresentado na figura 2.2 (IVERSON, 2000 - ii). Os dois gráficos menores (à direita, na figura 2.2) apresentam o perfil de emissão para dois comprimentos de onda específicos, onde se pode observar claramente a existência da “cauda” de nêutrons atrasados.

Para determinar a relação entre o tempo de percurso e o comprimento de onda associado aos nêutrons térmicos, devemos relacionar este comprimento de onda com a velocidade destas partículas, que é dada pela expressão (PARIZZI, 2002 - iii):

$$v = \frac{h}{m_n \cdot \lambda}, \tag{1}$$

onde h é a constante de Planck - que relaciona o momento de uma partícula com seu comprimento de onda associado, sendo seu valor $6,62606876 \cdot 10^{-34}$ J·s (*National Institute of Standards and Technology, 2002*) - , m_n é a massa de um nêutron em repouso - $1,67492716 \cdot 10^{-27}$ kg (*National Institute of Standards and Technology, 2002*) - e λ é o comprimento de onda associado. O tempo de percurso é então dado simplesmente por:

$$TOF = \frac{d_d}{v}, \tag{2}$$

onde d_d é a distância entre o alvo e o detector.

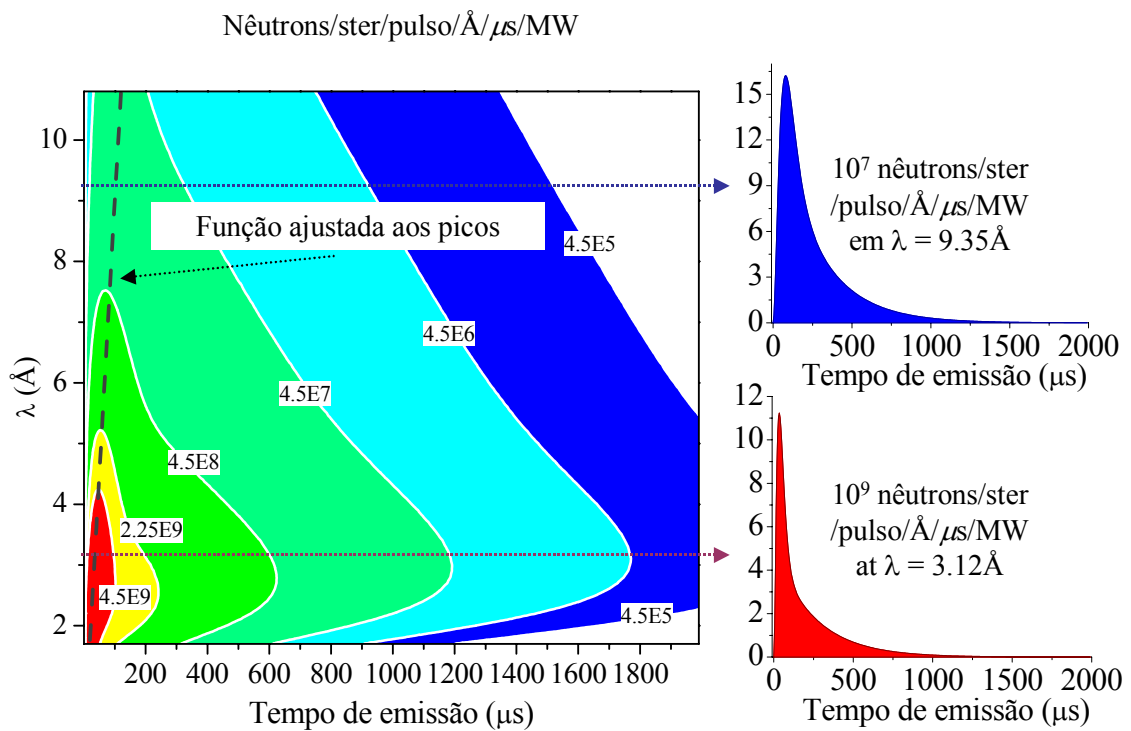


Figura 2.2 – Dependência de tempo e comprimento de onda para a emissão de nêutrons a partir da face do moderador de Hidrogênio líquido inferior da SNS - simulação Monte Carlo (IVERSON, 2000 – ii). A linha tracejada indica a posição do pico de intensidade para cada comprimento de onda.

Aplicando (1) e (2) aos dados de simulação da figura 2.2 e normalizando este resultado em relação às intensidades máximas para cada comprimento de onda, é possível

obter um perfil normalizado da distribuição em tempo e comprimento de onda na posição do detector. Para o Reflectômetro para Estudos em Magnetismo em desenvolvimento para a SNS, a distância planejada entre a face do moderador e o detector é de 19 m. O resultado desta operação (PARIZZI *et al.*, 2001 - ii) é apresentado na figura 2.3. Observando os espectros (cortes) da figura 2.3, nota-se que a “cauda” em tempo da figura 2.2 gera uma “cauda” em direção a valores menores de comprimento de onda nos espectros instantâneos registrados na posição do detector, que é o mais forte motivo da incerteza de comprimento de onda, fator limitante da resolução dos experimentos (o surgimento desta “cauda” de forma bem pronunciada é uma característica típica de moderadores “acoplados”). No algoritmo do sistema de aquisição de dados, o instante $t = 15$ ms, por exemplo, corresponderia ao comprimento de onda 3.12 \AA e o instante $t = 45$ ms ao comprimento de onda 9.35 \AA – cortes/insertes na figura 2.3. Valores típicos para o desvio do comprimento de onda em relação ao comprimento de onda nominal são apresentados nas análises da seção 7.4 deste texto.

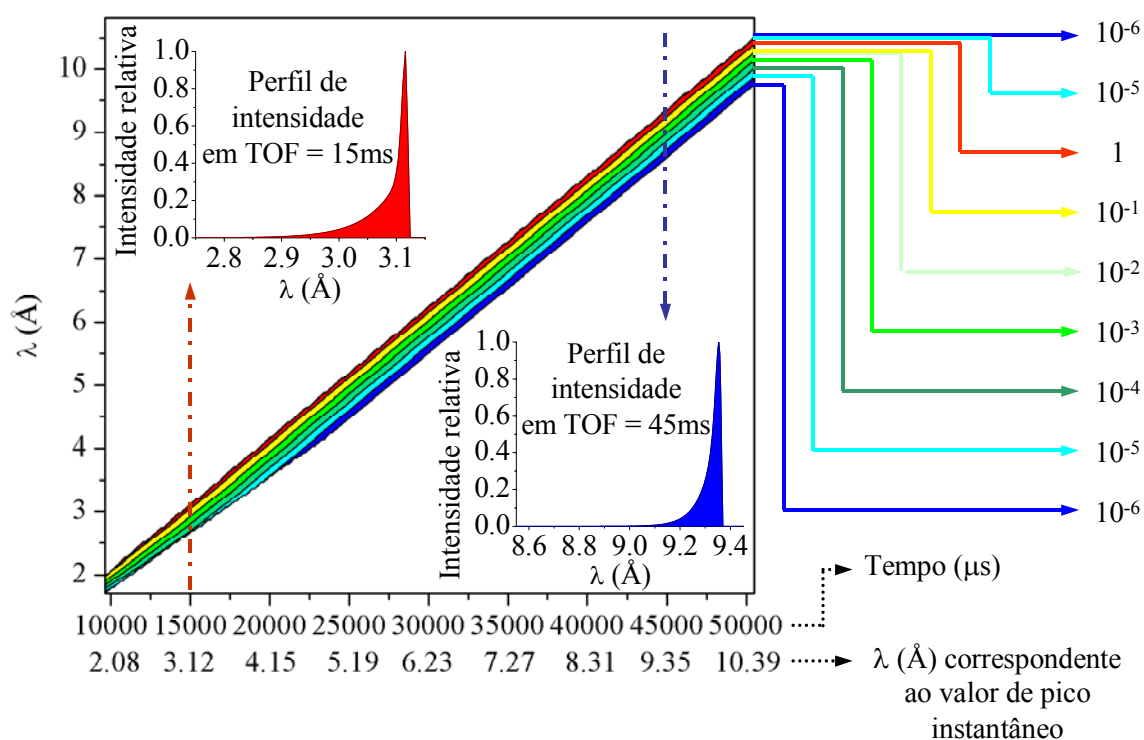


Figura 2.3 – Cálculo do perfil da intensidade do feixe de nêutrons na posição do detector (19 m da fonte), em função do tempo e do comprimento de onda associado. Estes resultados estão normalizados em relação ao pico de intensidade a cada instante detector. Os insertes menores no gráfico mostram os perfis de dois cortes nas curvas de nível, nos instantes 15 ms e 45 ms após t_0 .

A figura 2.4 mostra esquematicamente o efeito que se deseja obter com a utilização de um filtro dinâmico de energia/comprimento de onda sobre o espectro instantâneo do feixe.

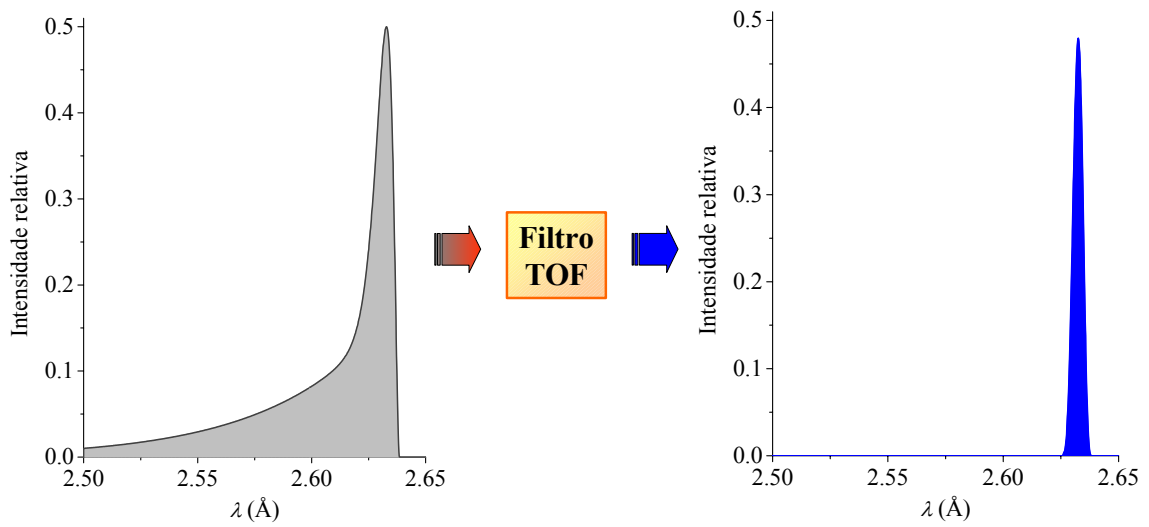


Figura 2.4 – Diagrama mostrando o efeito desejado de um filtro dinâmico sobre o espectro resultante em um determinado instante de medida.

3 BREVE REVISÃO DE LITERATURA (RELAÇÃO ENTRE TÓPICOS E REFERÊNCIAS)

Algumas das idéias apresentadas neste trabalho não foram baseadas em textos publicados, mas sim em comunicações privadas e até mesmo em notas pessoais cedidas por prestativos colaboradores como John Carpenter, Frank Klose, Erik Iverson, John Ankner, Gian Felcher, Michael Agamalian, Volker Christoph, Douglas Abernathy, Charles Majkrzak, Laurence Passel e Wai-Tung Lee (entre outros), aos quais sou muito grato pelas discussões esclarecedoras. No entanto, a maioria dos conceitos e definições se encontra na literatura disponível, conforme os tópicos descritos nos parágrafos a seguir.

As referências [35-37, 39] (PARIZZI, 2002 – iii; PARIZZI *et al.*, 2001 – i; PARIZZI *et al.*, 2001 - ii; PARIZZI *et al.*, 2002 – ii) resumem parte do **trabalho desenvolvido pelo aluno no projeto SNS**, porém com um enfoque mais conceitual. Das referências [51] (WEINSTEIN *et al.*, 1964), [49] (TUM Brochure, 2001) e [7] (CARPENTER, 1977) foram retirados os **conceitos básicos de ciência de nêutrons, fontes de nêutrons para pesquisa e fontes por spallation**.

O fenômeno da **ressonância espacial de spin com nêutrons** foi previsto, descrito e comprovado nas publicações [13, 14] (DRABKIN, 1962; DRABKIN *et al.*, 1968). De [17] (FEYNMAN *et al.*, 1965), [2] (AGAMALIAN *et al.*, 1988), [50] (VILENKIN *et al.*, 1968) e [45] (SCHIFF, 1968) foram retirados os conceitos de **física quântica** e as **ferramentas matemáticas** necessárias para o desenvolvimento do modelo do sistema em computador.

Conceitos de **feixes polarizados de nêutrons** e de experimentos com **análise do spin do nêutron** foram obtidos a partir de [5,6] (BLUME, 1963; BLUME, 1964), [19] (HALPERN *et al.*, 1939), [20] (HAYTER, 1978), [22] (HUGHES *et al.*, 1951), [46] (SCHWINGER, 1937), [33] (MOON *et al.*, 1969), [44] (SCHERMER *et al.*, 1968), [18] (GUREVICH *et al.*, 1968), [32] (MARSHALL *et al.*, 1969), [3] (BACON, 1975) e [29] (LOVESEY, 1977).

O equacionamento básico e a descrição dos conceitos envolvidos no modelamento do filtro em computador foram desenvolvidos no Trabalho Individual [41] (PARIZZI *et al.*,

2002 - i). Cálculos mostrando o **desempenho esperada do filtro com a tecnologia corrente para os elementos óticos** são apresentados em [38] (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii). Alguns desses cálculos são mostrados nos capítulos seguintes.

Informações detalhadas sobre os procedimentos utilizados para estimar a **grandeza do campo gerado por correntes parasitas induzidas nas placas de corrente no interior do ressonador** podem ser encontradas nas referências [10, 25, 52, 53] (CHRISTENSEN, 1979; KAMEARI, 1981; WEISSENBURGER, 1979; WEISSENBURGER *et al.*, 1982).

Mais detalhes sobre as publicações citadas são apresentados ao longo dos capítulos seguintes, sendo indicadas as respectivas referências.

4 PRINCÍPIO DE FUNCIONAMENTO DO FILTRO DE COMPRIMENTO DE ONDA/ENERGIA PROPOSTO

Na década de 60 G.M. Drabkin propôs (DRABKIN, 1962) e confirmou experimentalmente (DRABKIN *et al.*, 1968) a validade de um novo método para selecionar a velocidade de nêutrons polarizados. A idéia básica é a passagem de um feixe polarizado de nêutrons através de um dispositivo que inverte o *spin* de nêutrons com comprimento de onda dentro de uma banda restrita ajustável, através de um processo de ressonância magnética espacial do *spin*. A fração do feixe que tem os *spins* invertidos pode ser separada do resto do feixe através de um analisador de polarização (como, por exemplo, um analisador do tipo “divisor de feixe” (KRIST *et al.*, 1998), o qual permite a análise completa de *spin* em um mesmo pulso). O diagrama da figura 4.1 mostra esquematicamente este processo.

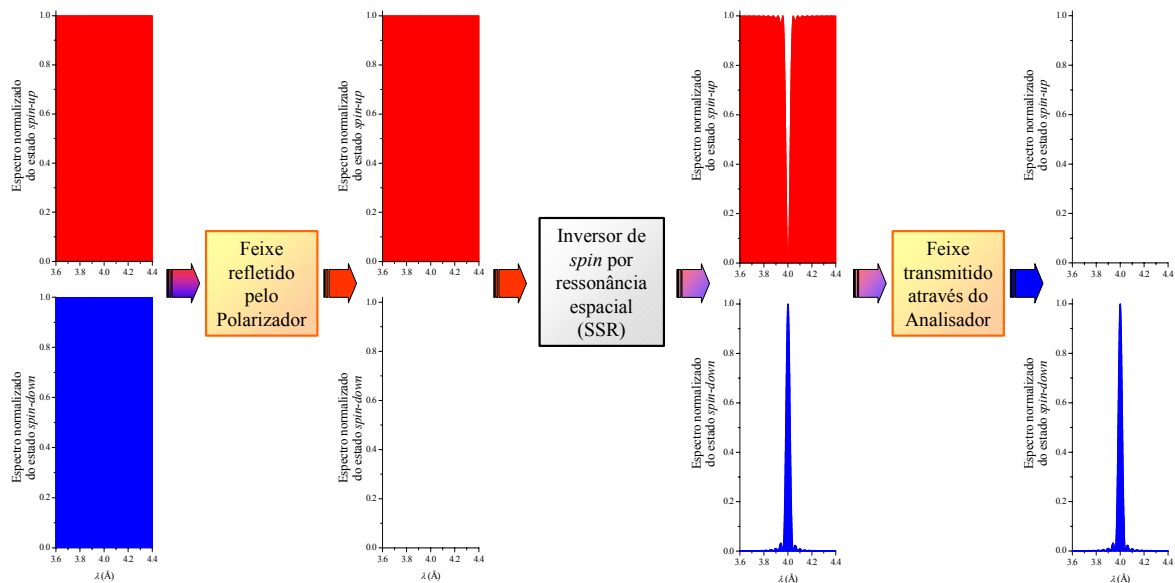


Figura 4.1 – Diagrama esquemático representando os elementos básicos da filtragem de feixes por ressonância espacial de *spin*.

A figura 4.2 mostra possíveis implementações do sistema. O ressonador em si é composto por uma folha de Alumínio moldada na forma de uma onda quadrada, como mostrado na figura. Ao aplicar corrente nesta estrutura se cria uma cadeia de campos magnéticos H_{per} perpendiculares à corrente, os quais são atravessados pelo feixe de nêutrons também perpendicularmente. Adicionalmente, um campo magnético uniforme mais intenso

H_0 determina (predominantemente) o eixo de quantização e a “**frequência de precessionamento**” Ω (veja as definições na seção 5.1) dos vetores de polarização dos nêutrons. Mantendo uma determinada relação entre os campos guia e perpendicular (DRABKIN, 1962) se obtém uma função de probabilidade de inversão do *spin* otimizada (com 100% de inversão no comprimento de onda ressonante) e o ajuste da intensidade destes campos permite um controle apropriado da condição de ressonância.

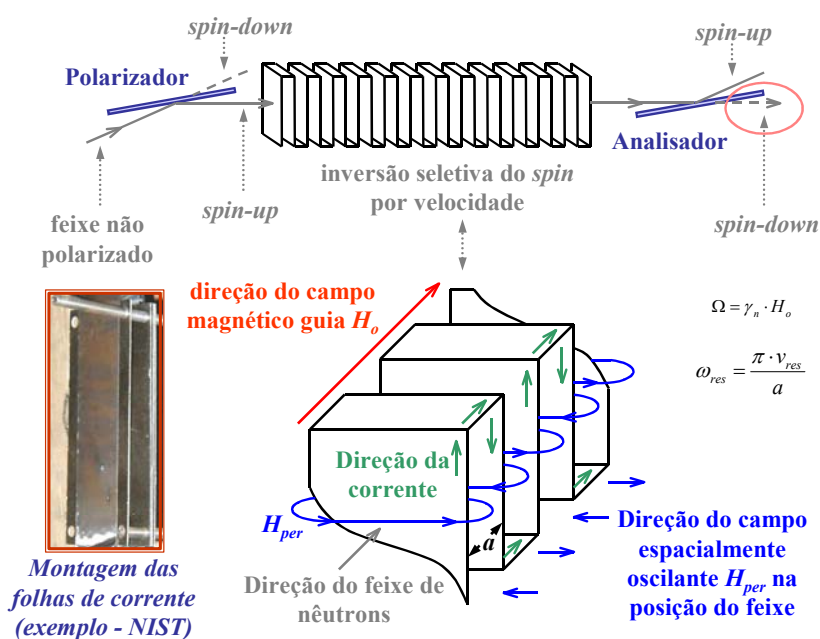


Figura 4.2 – Possível configuração de um ressonador para inversão seletiva do *spin* de nêutrons por ressonância espacial de *spin*.

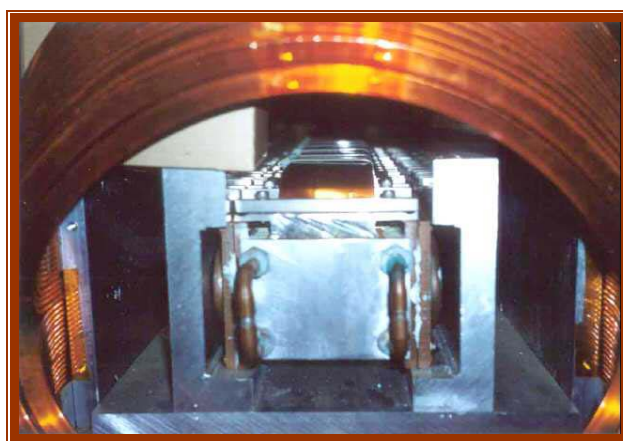


Figura 4.3 – Protótipo de um inversor de *spin* por ressonância espacial construído por L. Passell (Brookhaven National Laboratory) e cedido a este projeto para experimentos.

Veremos no capítulo 5 que as probabilidades de inversão de *spin* podem ser calculadas de forma relativamente simples com um enfoque quanto-mecânico, utilizando matrizes de Pauli (AGAMALIAN *et al.*, 1988; FEYNMAN *et al.*, 1965; VILENKIN, 1968)

com transformações do grupo SU(2) (AGAMALIAN *et al.*, 1988; VILENKIN, 1968) para o processo de inversão de *spin* (BLUME, 1963; BLUME, 1964; PARIZZI *et al.*, 2002 – ii). A probabilidade resultante de inversão do *spin* por ressonância espacial (SSR) é apresentada na figura 4.4, em função do comprimento de onda.

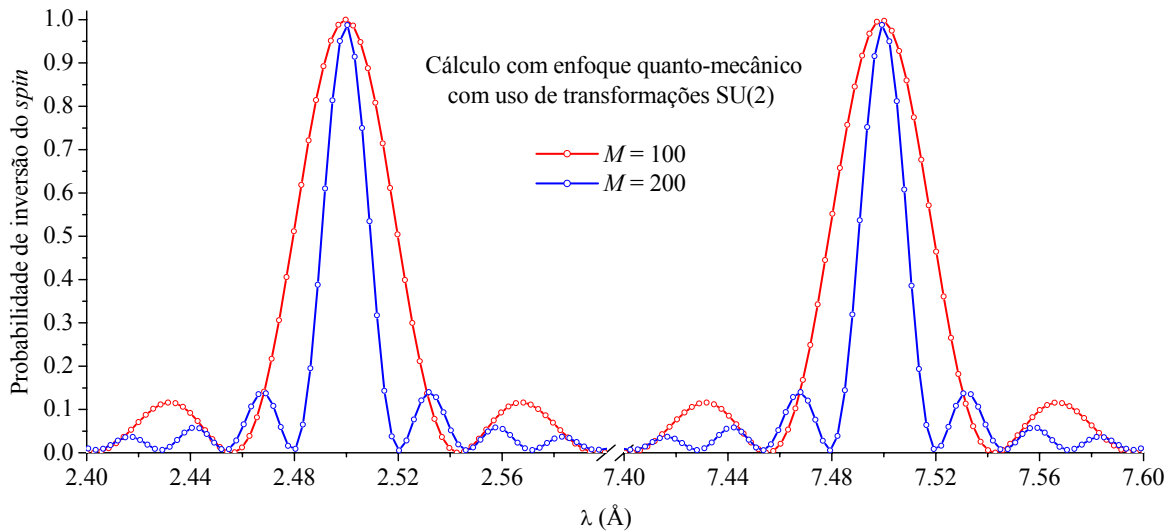


Figura 4.4 – Probabilidade de inversão do *spin* em um ressonador espacial de Drabkin sob condições ideais de ressonância, em função do comprimento de onda, para diferentes números de inversões (M) do campo perpendicular.

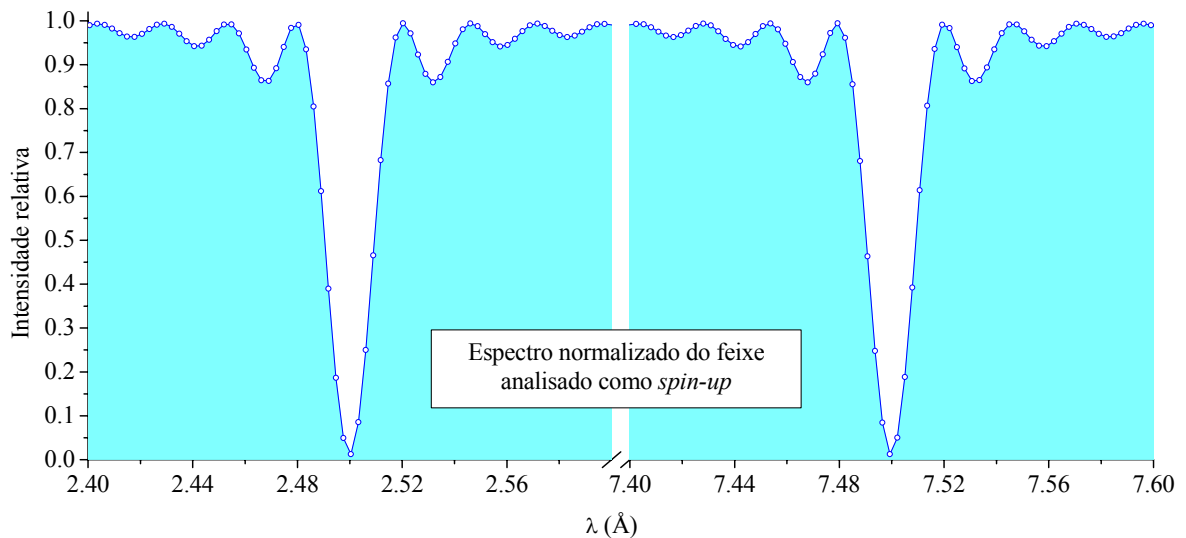


Figura 4.5 – Partindo de um feixe com espectro “branco” uniforme, perfeitamente polarizado (100% *spin-up*) e processado no inversor seletivo de *spin* de Drabkin, este seria o espectro relativo à parcela do feixe resultante com *spin-up*.

Nos cálculos da figura 4.4 os valores dos campos magnéticos foram ajustados para que a ressonância fundamental ocorresse para um comprimento de onda de 2.5 \AA (veremos rapidamente como se determinam estas condições também no capítulo 5). Se necessário, métodos para a atenuação dos máximos secundários (ou até mesmo para a eliminação completa destes, em alguns casos) foram concebidos e testados com sucesso em trabalhos anteriores (AGAMALIAN *et al.*,1988; AGAMALIAN *et al.*,1983) (um exemplo é mostrado na seção 6.1.3.1). Podemos agora dizer que partindo de um feixe com espectro “branco” perfeitamente polarizado (suponhamos todos os nêutrons com *spin-up*), processado por um inversor de *spin* de, por exemplo, 200 reversões de campo perpendicular, sendo então separado em *spin* por um analisador ideal, teremos como resultado dois feixes distintos: um de nêutrons com *spin-down* (com um espectro normalizado pelo valor máximo que corresponde à figura 4.4) e outro de nêutrons com *spin-up* e com o espectro complementar (figura 4.5).

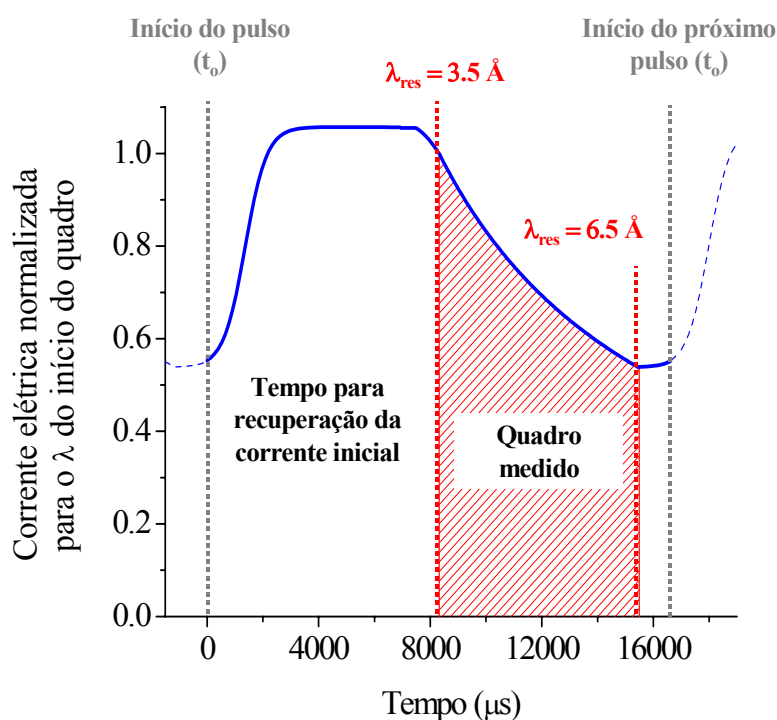


Figura 4.6 – Forma de corrente requerida para gerar ressonância variante conforme a estrutura temporal de uma fonte pulsante, para um ressonador posicionado a 9 m da fonte.

Agora, imaginemos o espectro de uma fonte pulsante por *spallation* conforme este se revela na posição do detector, como o da figura 2.3, por exemplo. Se variarmos os campos magnéticos no tempo, de forma que a condição de ressonância acompanhe o comprimento de onda relativo ao pico da distribuição da figura 2.3 (veja a forma de onda da figura 4.6), estaremos de certa forma “afinando” ou “remoldando” esta distribuição com base nas

probabilidades de inversão de *spin* obtidas (no capítulo 5 determinaremos as condições ótimas de ressonância e no capítulo 6 os perfis ideais de campo requeridos para a obtenção dessas condições). A busca desse tipo de variação da condição de ressonância para fontes pulsantes foi proposta pela primeira vez por G.P. Felcher (FELCHER, 2000), para fins de remodelamento de pulsos, e por G. Badurek (BADUREK *et al.*, 1991) (que obteve relativo sucesso experimental), para aplicações em espectroscopia, há cerca de 10 anos. A figura 4.7 mostra um diagrama de blocos representando o funcionamento do filtro de energia aqui proposto, em modo dinâmico de operação.

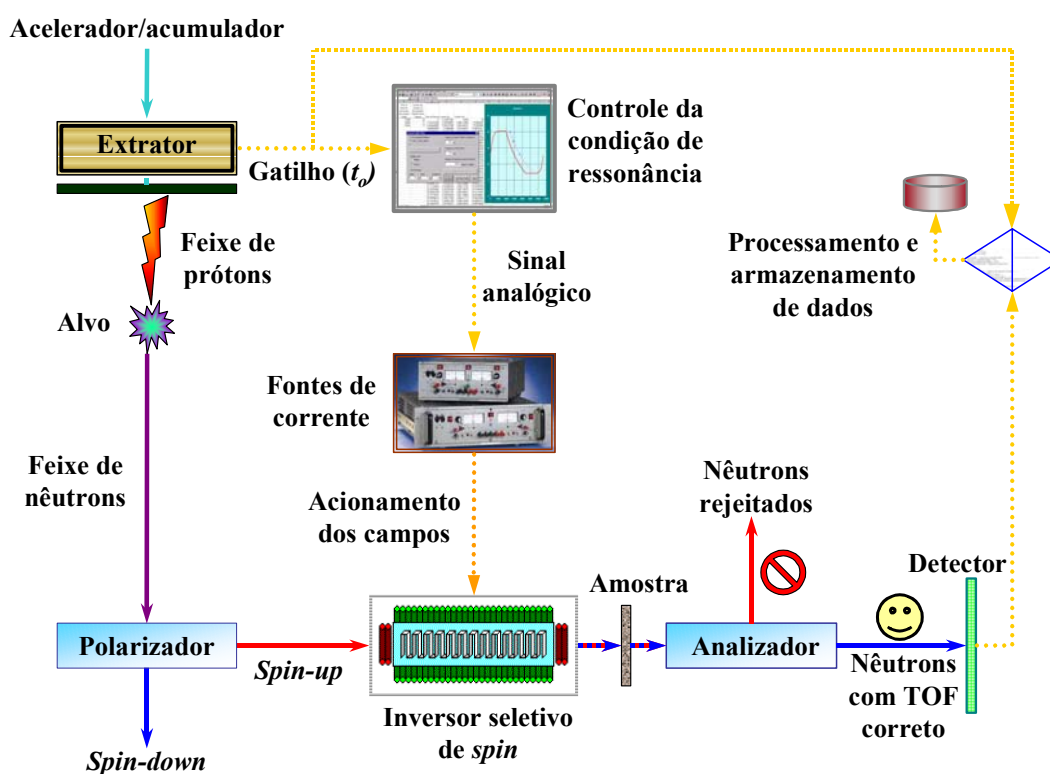


Figura 4.7 – Operação do filtro de energia por ressonância espacial de *spin* em modo dinâmico, de forma que o comprimento de onda ressonante varie de acordo com a estrutura temporal da fonte de nêutrons.

Ao executar o processo dinâmico de variação da condição de ressonância, o que resulta é a distribuição apresentada na figura 4.8. O processo que ocorre a cada instante, resultando nos espectros momentâneos representados nos dois cortes das curvas de nível da figura 4.8, pode ser mais bem compreendido no diagrama da figura 4.9, onde o sinal, positivo ou negativo, das intensidades relativas representa o *eigenstate* do *spin* (*spin-up* + e *spin-down* -). O gráfico (c) na figura 4.9 mostra a parcela a ser usada para experimentos de espalhamento de nêutrons com alta resolução de comprimento de onda.

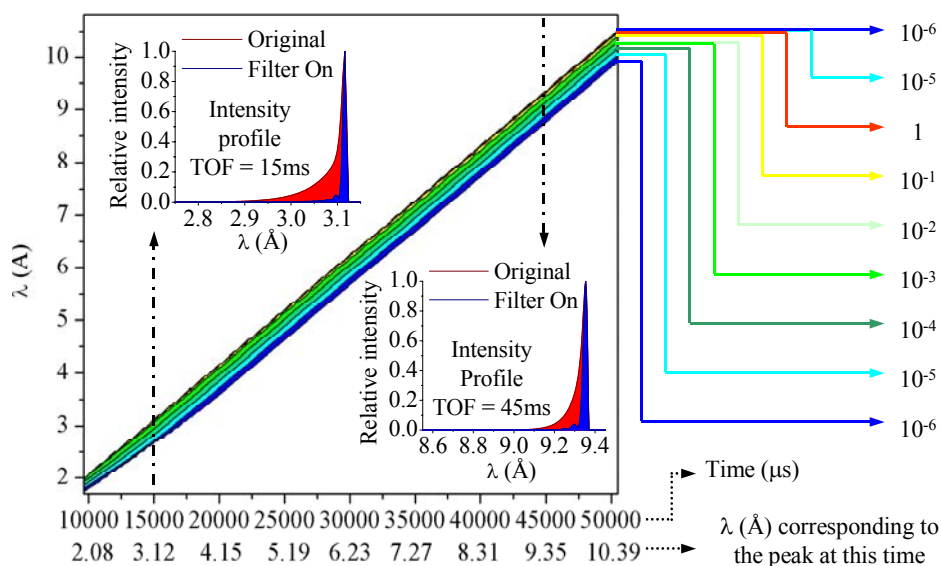


Figura 4.8 – Espectro resultante analisado como *spin-down* para uma variação de condição ressonante do inversor de *spin* em concordância com a estrutura temporal da distribuição de intensidades do pulso na posição do detector. Os gráficos menores comparam os cortes da distribuição original da figura 2.3 (em vermelho) com cortes na distribuição resultante da aplicação do filtro (em azul).

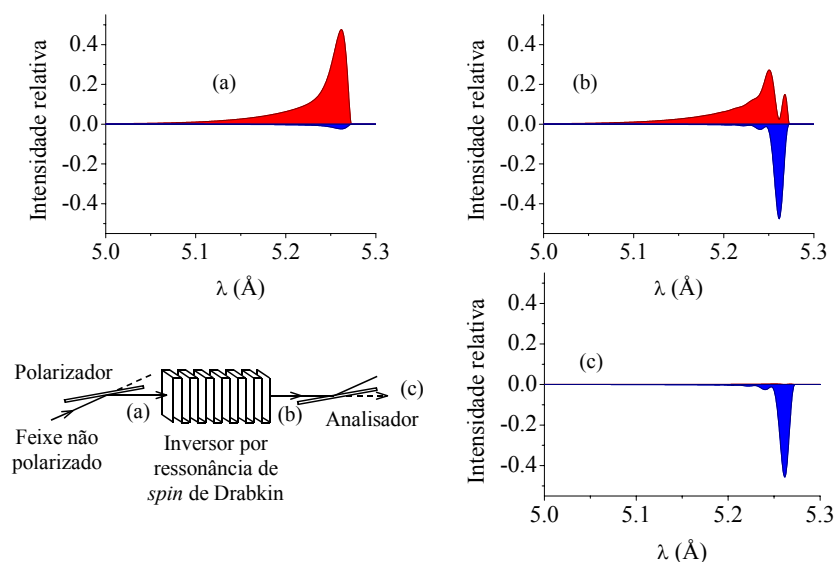


Figura 4.9 – Intensidades relativas momentâneas de um feixe polarizado de nêutrons com a distribuição temporal da figura 2.2, guiado através de um ressonador magnético. Este dispositivo inverte o *spin* de nêutrons com comprimento de onda dentro de uma banda restrita, reajustada a cada instante conforme a estrutura temporal da distribuição. A fração do feixe que tem os *spins* invertidos (b) pode ser separada do resto do feixe através de um analisador de polarização (c). A distribuição em azul (c) constitui um instante de um pulso neutrônico com menor incerteza de comprimento de onda (“melhor resolução”) do que a original (a).

5 MODELAMENTO MATEMÁTICO DO INVERSOR DE *SPIN* SELETIVO DE DRABKIN POR RESSONÂNCIA ESPACIAL

Este tema foi tratado com razoável nível de detalhes em um Trabalho Individual (TI) (PARIZZI *et al.*, 2002 - i), mas faremos aqui uma breve revisão dos conceitos utilizados no modelo.

5.1 NOÇÕES SOBRE FEIXES POLARIZADOS DE NÊUTRONS

Hughes e Burgy (HUGHES *et al.*, 1951) provaram experimentalmente, em 1951, que a origem do momento magnético do nêutron (HAYTER, 1978) seria uma distribuição de corrente (SCHWINGER, 1937), pois a interação entre campos magnéticos e nêutrons ocorre de acordo com a indução magnética (B) e não com o campo magnético (H). Este resultado permitiu que se interpretasse detalhadamente experimentos com nêutrons polarizados.

Pode-se modelar a polarização de um feixe de nêutrons como um sistema de dois estados possíveis, ou dois *eigenstates* para descrever seu *spin* (FEYNMAN *et al.*, 1965; MOON *et al.*, 1969; SCHIFF, 1968). Um feixe submetido a um campo magnético guia tem seus nêutrons com *spin* orientado de forma paralela ou antiparalela ao campo. Vamos nos referir aos possíveis estados como \uparrow (*spin-up*) e \downarrow (*spin-down*). Um elemento polarizador, antes da amostra, faz com que quase todos os nêutrons do feixe incidente na amostra sejam de um único estado, \uparrow ou \downarrow . O feixe espalhado pela amostra é então analisado, estando parte deste no *eigenstate* \uparrow e parte no *eigenstate* \downarrow , resultando em valores de probabilidade para cada caso. Maiores detalhes sobre análise de polarização em medidas neutrônicas podem ser encontrados nas referências [3, 5, 6, 18, 29, 32, 41, 44] (BACON, 1975; BLUME, 1963; BLUME, 1964; GUREVICH *et al.*, 1968; LOVESEY, 1977; MARSHALL *et al.*, 1971; PARIZZI *et al.*, 2002 - i; SCHERMER *et al.*, 1968).

As componentes do vetor de polarização de um nêutron térmico interagindo com um campo magnético constante H paralelo ao eixo z são dadas por (HAYTER, 1978):

$$P_x(t) = \cos(\Omega \cdot t) \cdot P_x(0) - \sin(\Omega \cdot t) \cdot P_y(0) \quad (3)$$

$$P_y(t) = \sin(\Omega \cdot t) \cdot P_x(0) + \cos(\Omega \cdot t) \cdot P_y(0) \quad (4)$$

$$P_z(t) = P_z(0), \quad (5)$$

onde Ω é a “frequência de precessionamento de Larmor”, que para o espaço livre tem seu valor dado por $\Omega = \gamma_n \cdot H$ (6), sendo $\gamma_n = -1.832\,471\,88 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1} \cdot \text{Oe}^{-1}$ (*National Institute of Standards and Technology*, 2002) a razão giromagnética do nêutron no espaço livre. As expressões (3-5) descrevem que o eixo do momento angular gerado pelo *spin* de um nêutron “oscila” em torno da direção do campo magnético (“eixo de quantização”), conforme apresentado na figura 5.1. Este fenômeno (chamado de “precessionamento”) é a base de funcionamento do inversor de *spin* por ressonância espacial de Drabkin.

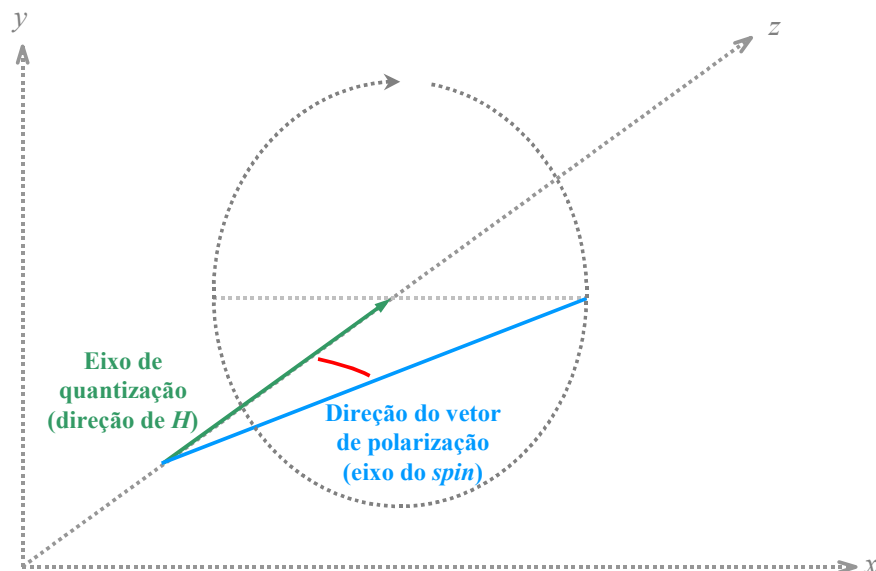


Figura 5.1 – Polarização com precessionamento sob campo magnético constante. O ângulo em vermelho depende do vetor de polarização inicial $P(0)$.

5.2 RESSONÂNCIA ESPACIAL DO *SPIN* (SSR) E CONDIÇÃO ÓTIMA DE RESSONÂNCIA

Quando um nêutron com velocidade v atravessa o ressonador, o campo perpendicular H_{per} (figura 4.1) age sobre o *spin* do nêutron como um campo alternado de frequência $\omega = \pi \cdot v/a$ (7) (em radianos), onde a é a distância entre folhas de corrente adjacentes (desprezada a espessura da folha). A equação (7) nos ajuda a compreender o fato

do inversor de *spin* por ressonância espacial poder ser altamente seletivo, pois os nêutrons “enxergam” diferentes frequências de campo, conforme suas velocidades. A probabilidade de inversão atinge 100% para nêutrons com uma velocidade v_{res} tal que $\omega(v_{res}) = \Omega$ (8).

Substituindo a condição (8) em (6) e (7) e considerando a condição $H_o \gg H_{per}$, podemos escrever:

$$\frac{\pi \cdot h}{a \cdot m_n \cdot \lambda_{res}} \cong \gamma_n \cdot H_o. \quad (9)$$

Desta forma se calcula o campo magnético necessário para obter ressonância para um determinado comprimento de onda.

A descrição do comportamento do vetor polarização para o *spin* do nêutron da seção 5.1 é válida para um campo magnético constante. O que ocorre então para um campo variante? De uma forma geral, o vetor polarização não acompanha perfeitamente a variação do campo, comportando-se com uma espécie de “escorregamento”, sendo necessário para a obtenção de um resultado exato que se solucione a equação de movimento dos nêutrons com tratamento do *spin* na presença da distribuição de campo magnético do sistema. Soluções obtidas numericamente para distribuições de nêutrons são processos bastante demorados, tornando a análise dos resultados e o reajuste correspondente dos parâmetros do filtro bastante ineficientes. No entanto, para campos com variação “lenta”, pode-se aproximar que o vetor polarização acompanha perfeitamente o campo de quantização, sendo este “escorregamento” de fato desprezível (transição adiabática). Já para variações muito rápidas do vetor resultante de campo magnético, este “escorregamento” é predominante, permanecendo o vetor polarização na condição imediatamente anterior a esta variação (transição não adiabática). Estas aproximações podem descrever de forma bastante precisa o nosso sistema, pois entre folhas adjacentes de corrente, o campo permanece substancialmente constante, ocorrendo uma variação brusca da componente transversal cada vez que um nêutron atravessa uma folha de corrente (veja a figura 4.1).

Podemos agora utilizar estes dois conceitos para entender o que acontece com o eixo de *spin* do nêutron ao longo do ressonador (figura 5.2). Utilizando relações trigonométricas básicas aplicadas à figura 5.2, podemos escrever o ângulo que o nêutron deve precessionar ao atravessar cada configuração magnética como (PARIZZI *et al.*, 2002 - i):

$$\Delta\theta = 2 \cdot \arctan\left(\frac{H_{per}}{H}\right) = \frac{\pi}{M} \quad (10), \text{ ou } \frac{H_{per}}{H} = \tan\left(\frac{\pi}{2 \cdot M}\right). \quad (11)$$

Considerando a condição $H_o \gg H_{per}$, podemos aproximar a relação ótima entre os campos como sendo:

$$\frac{H_{per}}{H_o} = \tan\left(\frac{\pi}{2 \cdot M}\right). \quad (12)$$

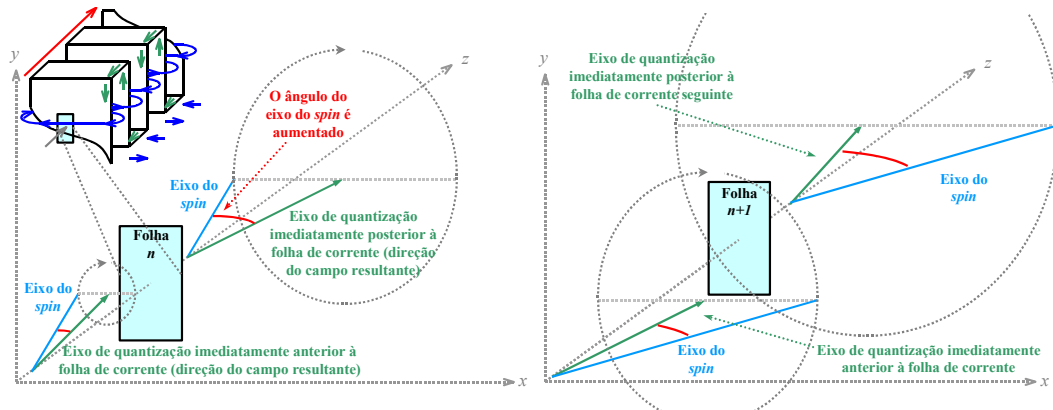


Figura 5.2 – Estes diagramas mostram como ocorre o processo de transição não adiabática com um nêutron quando este atravessa uma folha de corrente para duas folhas adjacentes. Supõe-se que, para o comprimento de onda aqui exemplificado, no caminho entre duas folhas, o nêutron precessiona meia volta. Esta é a situação desejada para o comprimento de onda ressonante, pois desta forma se obtém o aumento máximo de ângulo ao longo do inversor, chegando a um aumento total de 180 °.

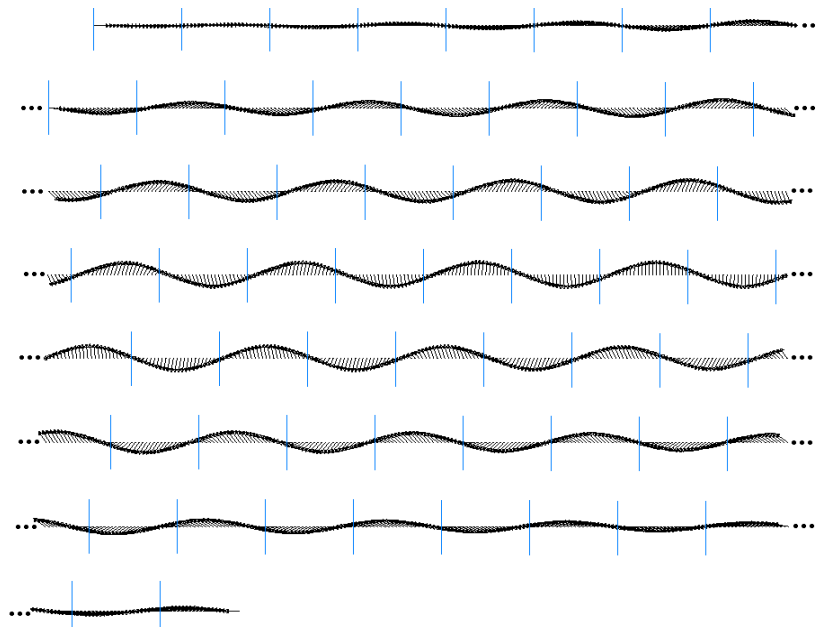


Figura 5.3 – Solução numérica para a equação de movimento de um nêutron atravessando a distribuição de campo gerada por um ressonador com 60 folhas de corrente, com um campo guia longitudinal (na mesma direção do movimento do nêutron). As linhas azuis mostram a posição das folhas de corrente e as setas indicam a direção do vetor de polarização a cada instante.

A validade das aproximações de transições perfeitamente adiabáticas e completamente não adiabáticas foi verificada com o auxílio de um programa de computador (CHRISTOPH, 2001) desenvolvido para solucionar a equação de movimento de um nêutron submetido a campos magnéticos, incluindo o comportamento do *spin* (SEEGER *et al.*, 2001). Os resultados da solução desta equação para um único nêutron atravessando o ressonador são mostrados na figura 5.3, onde se verificou que o nêutron teve seu *spin* invertido como esperado, utilizando as relações descritas anteriormente.

5.3 MODELAMENTO DO RESSONADOR

A partir da validação das aproximações de transições perfeitamente adiabáticas e completamente não adiabáticas, foi possível implementar um método bastante prático e computacionalmente simples para a determinação do desempenho do filtro, incluídos os efeitos de algumas imperfeições óticas, mecânicas, elétricas e magnéticas. O método faz uso de algumas ferramentas usadas no cálculo de probabilidades em Mecânica Quântica (PARIZZI *et al.*, 2002 - i). Sistemas com dois estados possíveis podem ter amplitudes atribuídas às suas probabilidades, constituindo um vetor bidimensional complexo, para o caso dos estados de *spin* normalmente conhecido como *spinor*, tendo a forma (PARIZZI *et al.*, 2002 - ii; FEYNMAN *et al.*, 1965; AGAMALIAN *et al.*, 1988; VILENKIN, 1968; PARIZZI *et al.*, 2002 - i):

$$\begin{bmatrix} \phi^\uparrow \\ \phi^\downarrow \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (a_1 + b_1 \cdot i) \\ (a_2 + b_2 \cdot i) \end{bmatrix} \quad (13), \text{ onde as probabilidades de se ter } \textit{spin-up} \text{ e } \textit{spin-down}$$

são dadas por (FEYNMAN *et al.*, 1965; AGAMALIAN *et al.*, 1988):

$$w^\uparrow = \phi^{\uparrow*} \cdot \phi^\uparrow \quad (14) \text{ e } w^\downarrow = \phi^{\downarrow*} \cdot \phi^\downarrow \quad (15).$$

Com base nas aproximações validadas para as transições, podemos dizer que quando um nêutron atravessa uma folha que separa duas regiões magnéticas vizinhas, a mudança na direção do eixo do *spin* pode ser desprezada. Se um nêutron viaja ao longo da n^{a} região magnética, seu *spin* precessiona ao redor do eixo local de quantização um ângulo β_n dado por (AGAMALIAN *et al.*, 1988):

$$\beta_n = \int_0^{T_i} \gamma_n \cdot |H(t)| \cdot dt, \quad (16)$$

onde T_t é o tempo que o nêutron leva para atravessar o espaço entre duas folhas de corrente e $|H(t)|$ é o módulo do campo magnético local a cada instante.

Dadas as distribuições dos campos magnéticos ao longo do ressonador, a probabilidade de inversão do *spin* pode ser calculada utilizando transformações do grupo SU(2) (FEYNMAN *et al.*, 1965; AGAMALIAN *et al.*, 1988; VILENKIN, 1968). Ao longo da n^a região magnética, o precessionamento do eixo do *spin* é determinado com a aplicação de uma transformação linear dada por (AGAMALIAN *et al.*, 1988):

$$D_n(\lambda) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) + i \cdot h_{z_n} \cdot \sin\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) & i \cdot h_{-n} \cdot \sin\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) \\ i \cdot h_{+n} \cdot \sin\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) - i \cdot h_{z_n} \cdot \sin\left(\frac{\beta_n(\lambda)}{2}\right) \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Na transformação (17), $h_{\pm} = h_x \pm i \cdot h_y$ (18) e as projeções h_x , h_y e h_z são as componentes do vetor h_q , o qual representa um vetor unitário na direção do eixo de quantização local. Podemos, portanto, calcular a polarização resultante após a passagem do feixe por um ressonador de M folhas de corrente, aplicando a transformação

$$D_f(\lambda) = \prod_{n=1}^M D_n(\lambda) \quad (19)$$

à polarização (*spinor*) inicial.

Da polarização resultante $\begin{bmatrix} \phi_f^{\uparrow} & \phi_f^{\downarrow} \end{bmatrix}^T = D_f(\lambda) \cdot \begin{bmatrix} \phi_o^{\uparrow} & \phi_o^{\downarrow} \end{bmatrix}^T$ (20), se calculam as probabilidades finais de cada *eigenstate*, utilizando as expressões (14) e (15). As distribuições apresentadas nas figuras 4.3 e 4.4 são exemplos de resultados de cálculos feitos usando este método. A multiplicação das probabilidades obtidas para cada comprimento de onda pelo espectro do feixe entregue pelo moderador em um determinado instante resulta nos espectros da figura 4.8.

6 ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS DO FILTRO E EXEMPLOS DE CONFIGURAÇÕES PARA A GERAÇÃO DOS CAMPOS

Neste capítulo iniciamos o processo de especificação dos parâmetros do filtro que permitam que o desempenho desejada seja atingida. Serão descritas as considerações e conclusões mais importantes envolvendo os aspectos elétricos e magnéticos do sistema.

Analisando, inicialmente, casos ideais (sem flutuações de parâmetros, ou outras imperfeições dos elementos), escolheremos as configurações magnéticas que melhor possam atender as exigências da aplicação. Determinados os “objetivos magnéticos”, discutiremos formas de alcançá-los, considerando as limitações elétricas e magnéticas.

6.1 OTIMIZAÇÃO DOS PERFIS MAGNÉTICOS

6.1.1 Especificação do perfil de campo magnético para o campo guia

As publicações anteriores a este projeto referentes a sistemas de monocromatização por ressonância espacial que foram coletadas (DRABKIN, 1962; DRABKIN *et al.*, 1968, AGAMALIAN *et al.*, 1988, AGAMALIAN *et al.*, 1983; BADUREK *et al.*, 1991; MAJKRZAK *et al.*, 1981; MAJKRZAK *et al.*, 1988) sugerem, em geral, que o campo magnético guia seja constante e o mais uniforme possível. No entanto, nesta aplicação em particular, o fato de estarmos variando a condição de ressonância em função do tempo nos levou a sugerir um perfil magnético não constante para o campo guia ao longo da região ativa do ressonador, conforme explicado a seguir.

Um dos problemas que se deve resolver ao utilizar este tipo de filtro em experimentos de TOF é o fato do ressonador não ter um comprimento desprezível. Ou seja, ao passar pelo ressonador, um nêutron com um comprimento de onda respectivo a um determinado instante deveria estar submetido ao campo equivalente a sua ressonância ao longo de todo o ressonador. Porém, como estamos constantemente variando os campos magnéticos conforme a estrutura temporal dos pulsos de nêutrons, o campo terá o valor

correto apenas em uma posição do filtro, estando fora de sintonia no resto do ressonador. Isso gera fortes distorções na função de probabilidade, “remoldando” o pulso de forma extremamente insatisfatória – veja o resultado de uma emulação com variação temporal e campo espacialmente uniforme na figura 6.3(a).

Uma proposta para compensar este efeito indesejado foi elaborada por G.P. Felcher (FELCHER, 2000), onde a diferença da condição ressonante ótima seria compensada em cada posição por uma variação no espaçamento entre as folhas de corrente. A desvantagem desta solução é que, uma vez construído um filtro para uma determinada posição em uma linha de nêutrons, este não poderia ser usado em posições diferentes. Outra solução proposta por G. Badurek *et al.* (BADUREK *et al.*, 1991) foi o uso de chaveamento seqüencial de campos independentes, o que poderia reduzir o comprimento equivalente do filtro a distâncias equivalentes às distâncias entre folhas de corrente adjacentes. Esta seria uma solução mais complicada e de custo mais elevado.

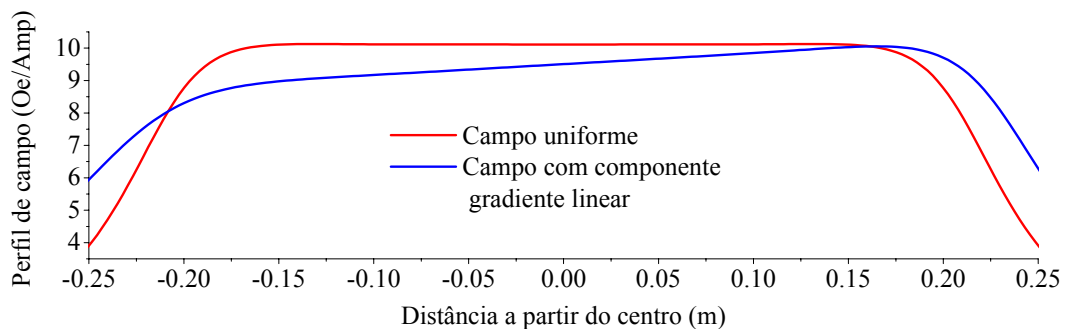


Figura 6.1 – Exemplo de campos calculados para “bobinas quadradas” otimizadas, gerando duas componentes de campo magnético longitudinais: uma uniforme e uma com um gradiente linear.

A solução que encontramos foi a utilização de um gradiente magnético controlado por uma corrente de mesma forma de onda superposto ao campo uniforme – veja a figura 6.1. Tal solução não é apenas mais barata do que a segunda opção recém apresentada, como também é mais efetiva e flexível do que ambas as soluções anteriores (sendo muito conveniente para a aplicação proposta, pois, após os testes no reflectômetro para estudos de magnetismo, o filtro deverá ser testado em diferentes instrumentos, a diferentes distâncias da fonte). Desta forma se consegue gerar a condição de ressonância ótima, reduzindo o “comprimento equivalente” do ressonador efetivamente a **zero** (as emulações com variação temporal mostradas em figuras anteriores incluem esta correção espacial nos perfis

magnéticos). Além disso, com o ajuste da relação entre a corrente do campo uniforme e a corrente do campo gradiente, pode-se compensar este tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador virtualmente para qualquer posição do filtro na linha, fazendo com que este tenha total flexibilidade de uso em uma instalação.

Para ajudar na compreensão do funcionamento desta solução e permitir que calculemos as especificações dos elementos magnéticos, é apresentado a seguir um equacionamento do processo de compensação da variação temporal dos campos magnéticos. Nosso objetivo inicial é a obtenção de uma expressão que retorne o valor de campo magnético requerido em função do tempo (t) transcorrido após o início do pulso (t_o) e da distância percorrida a partir da fonte (z). Para tal, devemos definir o comprimento de onda ressonante (λ_{res}) para cada instante e posição. Como primeiro passo, devemos obter uma expressão para o tempo transcorrido desde t_o para os nêutrons atingirem uma determinada posição em função de seus comprimentos de onda, ou seja: $t_{chegada}(\lambda, z) = t_{partida}(\lambda) + TOF(\lambda, z)$ (21), onde TOF é o tempo de percurso da face do moderador até uma posição z qualquer na linha.

Aplicando a expressão (1), podemos substituir $TOF(\lambda, z)$, obtendo:

$$t_{chegada}(\lambda, z) = t_{partida}(\lambda) + \frac{m_n \cdot \lambda \cdot z}{h} . \quad (22)$$

Embora na maioria das aplicações que utilizam TOF para determinação do comprimento de onda, o algoritmo de aquisição de dados é ajustado para interpretar o “centro de massa” da distribuição de intensidade como o TOF nominal de um determinado λ , o objetivo de nossa aplicação é eliminar a cauda do espectro, não apenas aumentando o fator de mérito do espectro, mas também tornando-o praticamente simétrico, movendo, como consequência, o centro de massa da distribuição em direção ao instante referente ao pico de intensidade. Logo, é coerente que usemos como referência para o relacionamento entre TOF e λ_{res} em nossa aplicação, o pico da distribuição para cada λ . Definiremos, portanto, $t_{partida}(\lambda, 0) = t_{pico}(\lambda, 0)$. Observamos também que é razoável usarmos uma aproximação linear para a função $t_{pico}(\lambda, 0)$, como mostra a linha tracejada na figura 2.2. Podemos, então, reescrever (21) como:

$$t_{chegada}(\lambda_{res}, z) = C_1 \cdot \lambda_{res} + \frac{m_n \cdot \lambda_{res} \cdot z}{h} , \quad (23)$$

onde C_1 é uma constante a ser ajustada conforme as características do sistema alvo/moderador usado.

Vale lembrar que nesta relação, λ foi substituído por λ_{res} por ser o comprimento de onda relacionado com o pico de intensidade, sendo portanto o comprimento de onda no qual se deseja centralizar a ressonância do sistema a cada instante. Isolando agora λ_{res} em função de $t_{chegada}$ teremos:

$$\lambda_{res}(t_{chegada}, z) = \frac{t_{chegada}}{C_1 + z \cdot \frac{m_n}{h}}, \quad (24)$$

de onde podemos então, aplicando a relação (9), derivar uma expressão para o campo guia requerido a uma distância z da face do moderador, em um instante $t_{chegada}$. Temos então:

$$H_o(t_{chegada}, z) = \frac{\pi \cdot h}{a \cdot \gamma_n \cdot m_n \cdot \lambda_{res}(t_{chegada}, z)} = \frac{\pi \cdot h \cdot \left(C_1 + z \cdot \frac{m_n}{h} \right)}{a \cdot \gamma_n \cdot m_n \cdot t_{chegada}}. \quad (25)$$

Agrupando as constantes naturais do nêutron e demais parâmetros fixos, podemos reescrever a expressão (25) como:

$$H_o(t_{chegada}, z) = \frac{C_2}{t_{chegada}} \cdot (C_1 + z \cdot C_3), \quad (26)$$

onde $C_2 = \frac{\pi}{a \cdot \gamma_n \cdot C_3}$ (27) e $C_3 = \frac{m_n}{h}$ (28).

Conclui-se que o campo magnético requerido na região ativa do ressonador, para a obtenção da condição de ressonância equivalente ao caso estático em uma aplicação dinâmica (com *TOF*), é composto por uma parcela constante e uniforme no espaço (dada pelo coeficiente C_1), mais uma parcela que varia linearmente com a posição z (conforme C_3), ambas as parcelas variando conforme o fator $\frac{C_2}{t_{chegada}}$ (onde $t_{chegada}$ é o tempo transcorrido desde o instante t_o). Um exemplo numérico de requisitos de campo magnético guia é apresentado na figura 6.2, onde foram substituídos valores para as constantes naturais – conforme (*National Institute of Standards and Technology*, 2002) – e escolhidos valores típicos para a distância do dispositivo a partir da face do moderador (9 metros) e para a distância entre folhas de corrente adjacentes (2 mm).

Se construirmos uma bobina para a geração do campo uniforme com um fator entre campo magnético e corrente dado por $\frac{H_{o-u}}{I_{o-u}} = K$ e uma bobina para a geração do campo

com o gradiente linear com um fator $\frac{H_{o-g}}{I_{o-g}} = A_o \cdot (z - z_o) + B_o$, onde z_o é a distância entre o centro do ressonador e a face do moderador, (um exemplo deste tipo de configuração é mostrado na figura 6.1) desprezados ruídos magnéticos e os campos provenientes de correntes parasitas, obteremos um campo total H_o dado por:

$$H_o(z) = I_{o-u} \cdot K + I_{o-g} \cdot [A_o \cdot (z - z_o) + B_o]. \quad (29)$$

Igualando (26) e (29), chegamos a:

$$I_{o-u} \cdot K + I_{o-g} \cdot [A_o \cdot (z - z_o) + B_o] = \frac{C_2}{t_{chegada}} \cdot (C_1 + z \cdot C_3) \quad (30).$$

Trabalhando algebricamente esta expressão, chegamos à forma de corrente e ao fator de relacionamento entre as correntes para atender os requisitos de ressonância da aplicação, resultando em:

$$I_{o-g} = \frac{C_2 \cdot C_3}{A_o} \cdot \frac{1}{t_{chegada}} \quad (31) \text{ e } I_{o-u} = \frac{C_2}{K} \cdot \left[C_1 - C_3 \cdot \left(\frac{B_o}{A_o} - z_o \right) \right] \cdot \frac{1}{t_{chegada}} \quad (32).$$

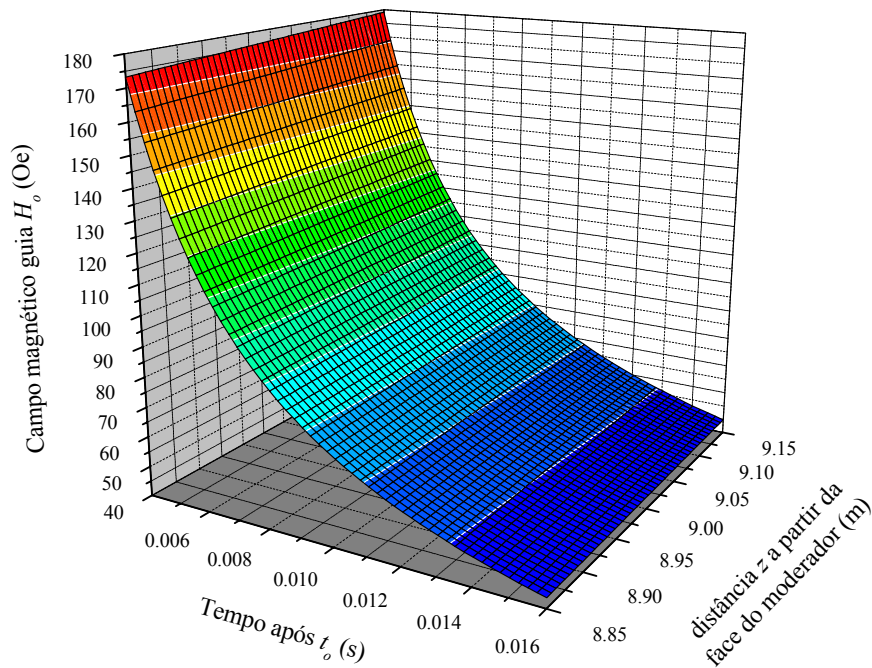


Figura 6.2 – Exemplo numérico de requisitos para o campo magnético guia, considerando uma distância de 9 metros do centro do dispositivo à face do moderador e uma distância entre folhas de corrente adjacentes de 2 mm. O ângulo formado entre a grade na superfície do gráfico e as curvas de nível (linhas brancas) representa o gradiente espacial necessário para a compensação do tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador.

Este resultado nos mostra que, uma vez construída a configuração de espiras, ambas componentes devem ter suas correntes variadas com a mesma forma de onda ($\propto \frac{1}{t}$), diferindo apenas por um fator de ganho, e que a configuração pode anular o efeito do tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador virtualmente para qualquer posição, bastando para isso ajustar a relação entre as correntes I_{o_u} e I_{o_g} , conforme a posição z_o escolhida. A efetividade desta solução para a eliminação do efeito do tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador foi verificada através de emulações e um exemplo de resultados é apresentado na figura 6.3.

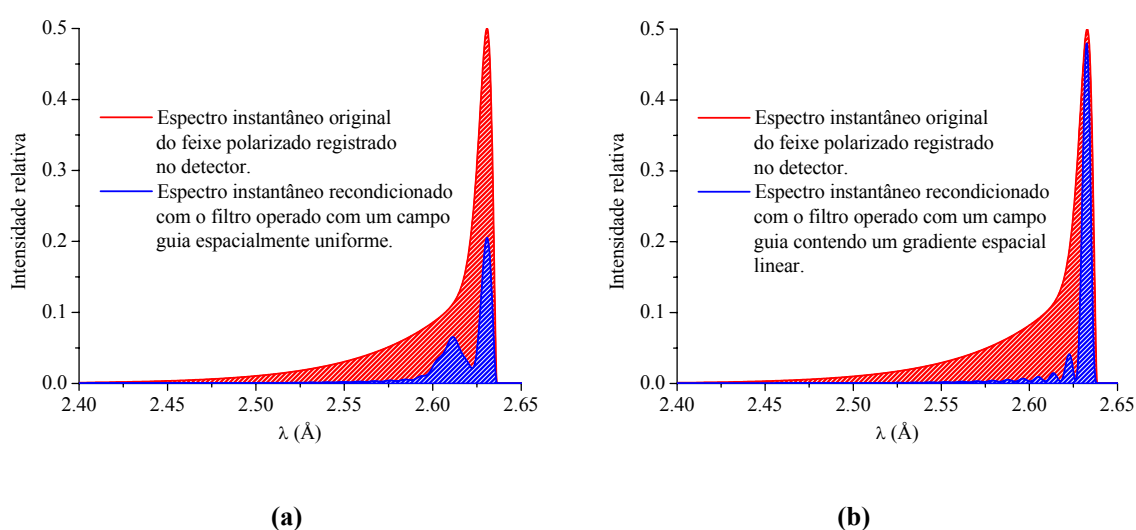


Figura 6.3 – Emulações do remodelamento de pulsos feitas (a) sem e (b) com a correção do gradiente magnético espacial (centro do ressonador a 9 m da fonte, com o detector a 19 m da fonte, tendo o ressonador 0,3 m de comprimento e 200 inversões de campo perpendicular), apresentada aqui para um instante em particular.

6.1.2 Geração do campo magnético guia

Do ponto de vista do princípio de funcionamento do inversor de *spin* por ressonância espacial, o único requisito de orientação para o campo magnético guia (H_o) é que este seja perpendicular ao campo H_{per} gerado pelas folhas de corrente. Ou seja, este poderia ser longitudinal (na mesma direção da translação dos nêutrons) ou vertical (perpendicular à translação dos nêutrons e à direção do campo H_{per}).

O caso do campo longitudinal se mostrou mais simples de ser tratado no que tange os requisitos de uniformidade da parcela espacialmente constante e linearidade da parcela linearmente variante no espaço dos campos, facilitando também a obtenção de relações campo magnético/corrente mais vantajosas. Algumas configurações de condutores para a geração de campos longitudinais foram estudadas e otimizadas. Um exemplo de configuração para a

geração de ambas as parcelas com um perfil otimizado é mostrado na figura 6.4, onde a variação da distância ao eixo central de condutores formando espiras quadradas, em função da distância ao centro do ressonador, permitiu que se atingisse uma uniformidade teórica, calculada analiticamente, de cerca de 0.2% na componente constante e uma linearidade de 0.5% na componente gradiente, sem que o sistema precise ocupar um espaço muito maior do que a região ativa (cerca de 30 cm ao longo do eixo z para este caso) e com alta eficiência de campo/corrente.

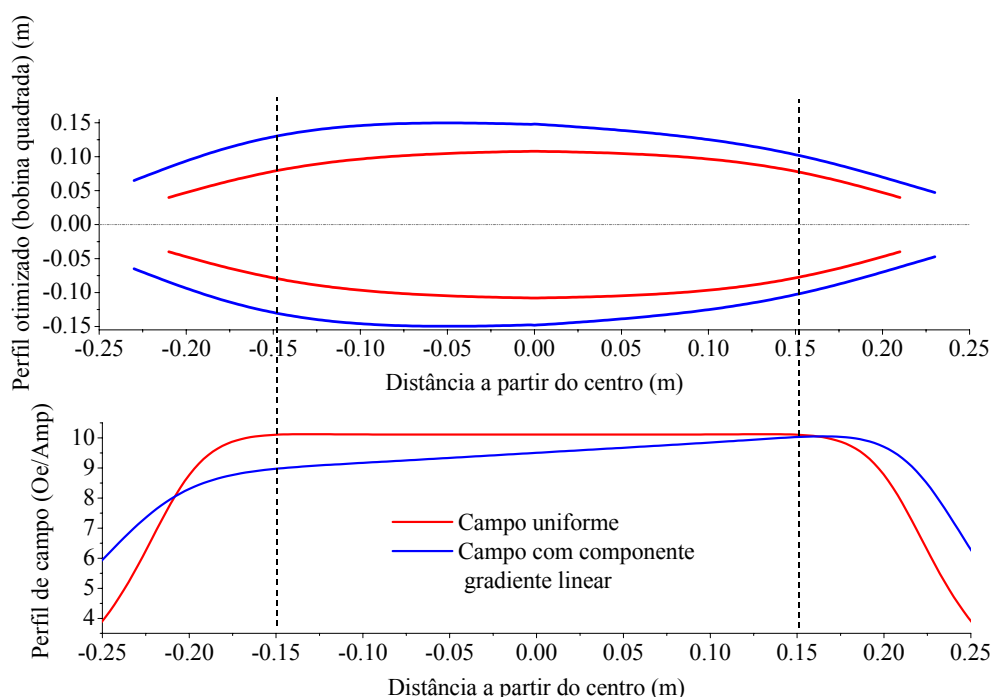


Figura 6.4 – Exemplo de campos calculados para “bobinas quadradas” otimizadas, gerando duas componente de campo magnético longitudinais: uma uniforme e uma com um gradiente linear. O gráfico de cima mostra o perfil otimizado para a distância entre os condutores que formam as espiras quadradas e o eixo central, em função da distância ao centro do ressonador. O gráfico de baixo mostra os campos calculados analiticamente, normalizados à corrente injetada, tendo a bobina de geração do campo uniforme 211 espiras e a bobina de geração do campo gradiente 231 espiras. As linhas tracejadas delimitam a região ativa do ressonador.

Outra forma de implementação é apresentada na figura 6.5, onde a otimização da uniformidade e da linearidade foi obtida com variação da densidade de espiras quadradas (neste caso em particular, foi obtida uma uniformidade teórica de 0.8% com um erro máximo de 2% para o componente gradiente, tendo o ressonador um comprimento ativo de cerca de 38 cm).

Por estarmos objetivando uma variação contínua da condição de ressonância em função do tempo transcorrido após t_0 , ao usar um campo guia longitudinal devemos nos

preocupar com possibilidade de indução de correntes nas folhas de Alumínio, pois tal configuração (conforme apresentado na figura 4.1) atravessa perpendicularmente as folhas, podendo constituir um alto fator de acoplamento, sendo que sua variação tenderia a gerar correntes no plano perpendicular ao campo guia, o qual, por coincidir com o plano das folhas de corrente, apresenta menor resistência ao surgimento de correntes parasitas, podendo induzir um erro não desprezível no campo resultante. Este pode ser ou não um fator relevante, dependendo da espessura das folhas de corrente, do fator real de acoplamento entre o campo guia e a superfície das folhas e de outros fatores a serem discutidos mais adiante neste texto. Seguiremos com a discussão deste aspecto da indução de campos pelas correntes parasitas nas folhas de Alumínio na seção 6.2, onde o campo guia variante com o tempo e as folhas de Alumínio são analisados em conjunto.

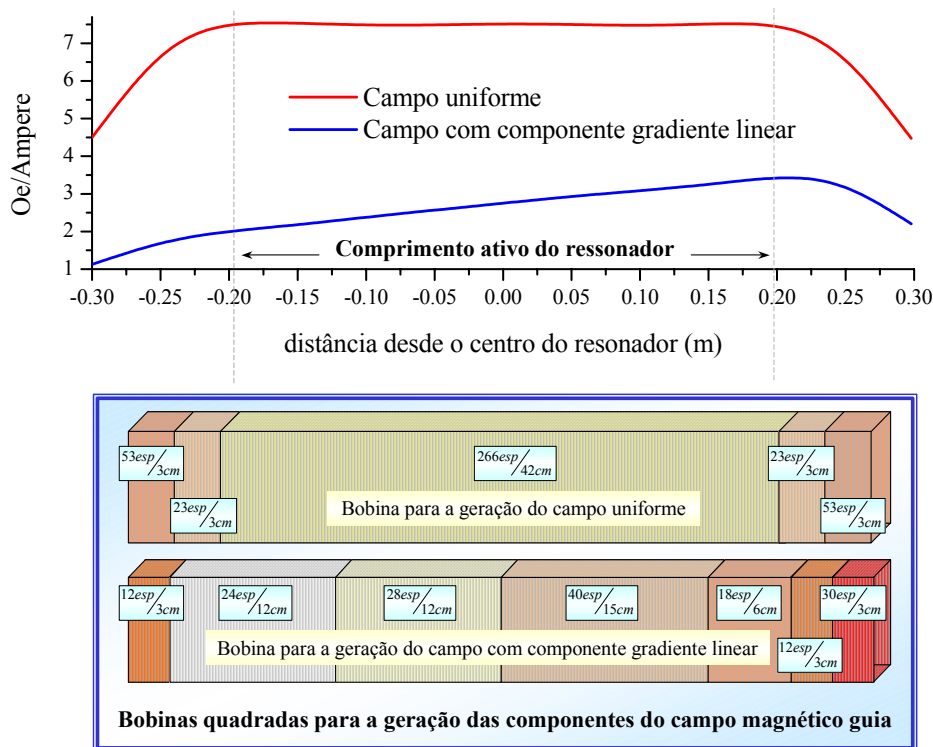


Figura 6.5 – Exemplo de campos calculados para dois grupos de “bobinas quadradas” com refinamento da densidade de espiras, gerando dois componentes de campo magnético longitudinais: um uniforme e um com um gradiente linear. O gráfico de cima mostra os campos calculados analiticamente, normalizados à corrente injetada. As linhas tracejadas delimitam a região ativa do ressonador. O primeiro diagrama do quadro logo abaixo do gráfico apresenta as densidades de espiras da bobina que gera o campo uniforme, sendo o segundo o diagrama equivalente à bobina de geração do campo com componente gradiente (estas duas bobinas seriam montadas em camadas próximas, com lados internos de 20 cm).

No que tange a geração de um campo vertical, mesmo esta apresentando em geral desvantagens nas relações entre corrente e campo gerado e entre espaço utilizado e a uniformidade e linearidade alcançadas, esta pode vir a ser preferível se a indução de correntes

nas folhas de Alumínio vir a se tornar um problema, pois neste caso a variação do campo ocorre em um plano perpendicular à laminação das folhas de corrente que geram o campo H_{per} . Algumas diferentes configurações de condutores para a geração de campos verticais foram examinadas. A configuração esquematizada na figura 6.6 é um dos exemplos que retornou bons resultados, sendo refinada por um processo iterativo (programa de computador desenvolvido neste projeto) para obtenção de valores otimizados para o ângulo η e para os comprimentos A , B e C , aplicadas certas restrições aos parâmetros ($A_{máx} = 55$ cm e $C_{máx} = 30$ cm). Uma uniformidade de $\pm 0.75\%$ foi estimada para este caso, através de cálculos analíticos.

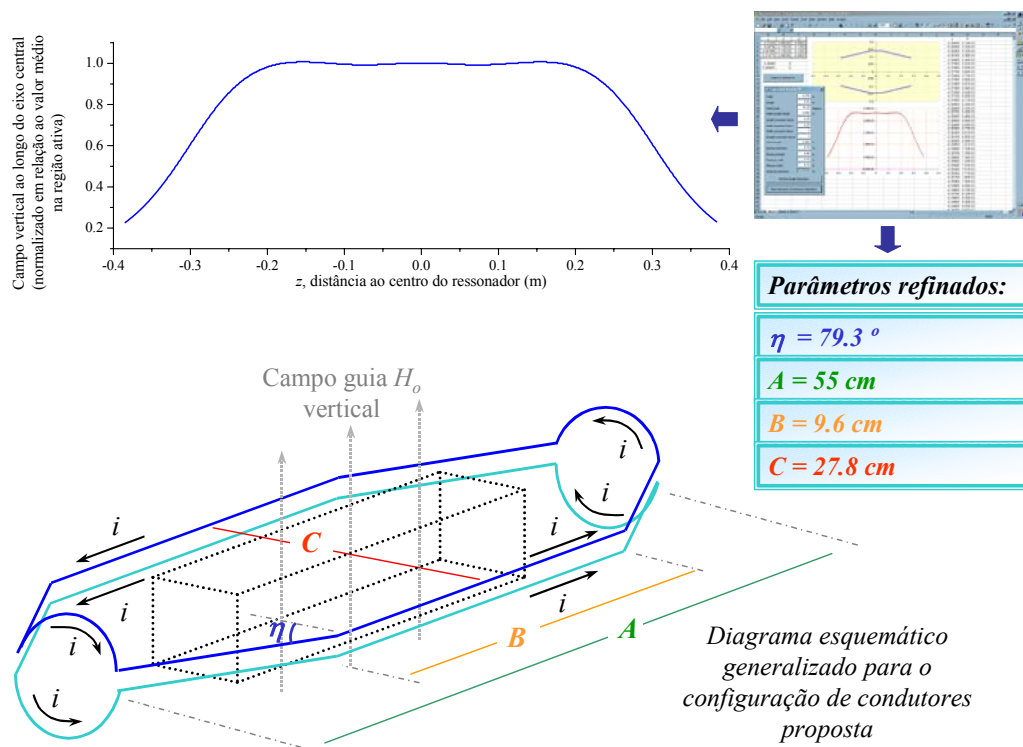


Figura 6.6 – Exemplo de configuração de condutores para a geração de um campo magnético guia vertical uniforme (abaixo) e cálculo do perfil magnético axial para um conjunto de parâmetros refinados através de um processo iterativo.

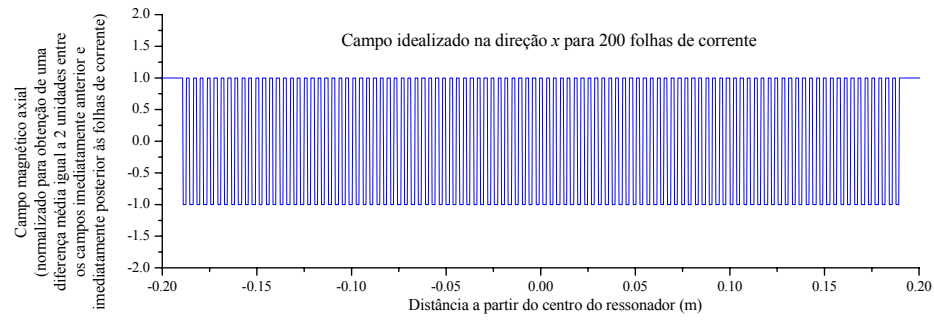
Para decidir entre um campo magnético guia vertical ou longitudinal precisamos antes avaliar a geração de correntes parasitas nas folhas de Alumínio, sendo que, para tal, precisamos antes obter informações sobre as dimensões geométricas e a disposição das folhas em relação ao campo guia. Portanto, antes de prosseguir com uma avaliação de correntes induzidas pela variação do campo e outras considerações elétricas, magnéticas e temporais, vamos analisar, na seção seguinte, a especificação do campo perpendicular (H_{per}), além de discutir algumas implicações devidas a imperfeições deste.

6.1.3 Especificação do perfil e geração do campo magnético perpendicular

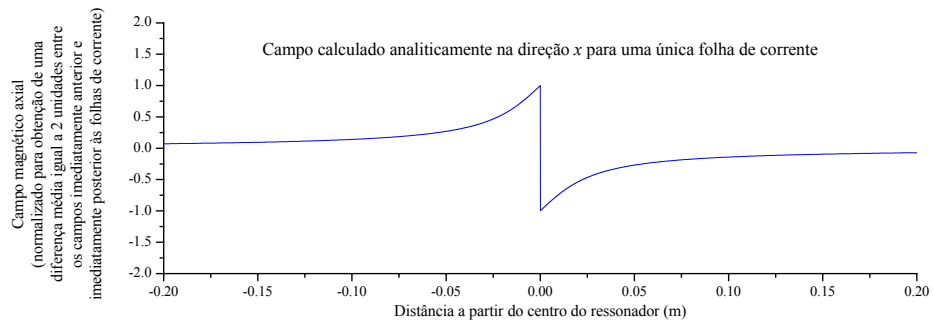
Vamos visualizar, inicialmente, uma aplicação estática (sem variação da ressonância com o tempo). Calculamos, na seção 5.2, a magnitude ideal do campo H_{per} distribuindo o aumento desejado do ângulo de precessionamento do *spin* pelo número de interfaces entre configurações magnéticas, considerando a distribuição deste campo ao longo do ressonador como simétrica em relação ao campo nulo (figura 6.7a). As figuras 6.7b, 6.7c e 6.7d mostram resultados de cálculos de perfis magnéticos típicos de uma configuração de folhas de corrente construída conforme sugerido no diagrama da figura 4.1. Estes cálculos foram feitos analiticamente, considerando as folhas de corrente como semifinitas (limitadas apenas em sua largura), conforme [54] (ZAKY *et al.*, 1974). A figura 6.7 mostra ainda a diferença típica de perfil magnético perpendicular (H_{per}) entre um ressonador com um número ímpar e com um número par de folhas de corrente (figuras 6.7c e 6.7d).

Concluimos que o campo real gerado por tal configuração difere consideravelmente do campo idealizado (com perfil no formato de uma onda quadrada). No entanto, como a magnitude do campo H_{per} é desprezível se comparada à do campo guia, o fator relevante para a obtenção da condição ideal de ressonância é a diferença entre o campo imediatamente anterior e imediatamente posterior a cada folha de corrente. Mesmo com a assimetria e as variações de magnitude do campo perpendicular, esta diferença permanece relativamente constante ao longo do ressonador (figura 6.8), não afetando a função de probabilidade de inversão do *spin* do dispositivo (a emulação da figura 6.3, por exemplo, foi feita com um perfil realista, como o mostrado na figura 6.7d). Além disso, as pequenas variações observadas na figura 6.8 são simétricas em relação ao valor médio, fazendo com que o aumento do ângulo de precessionamento em excesso gerado por uma determinada interface seja compensado pela seguinte.

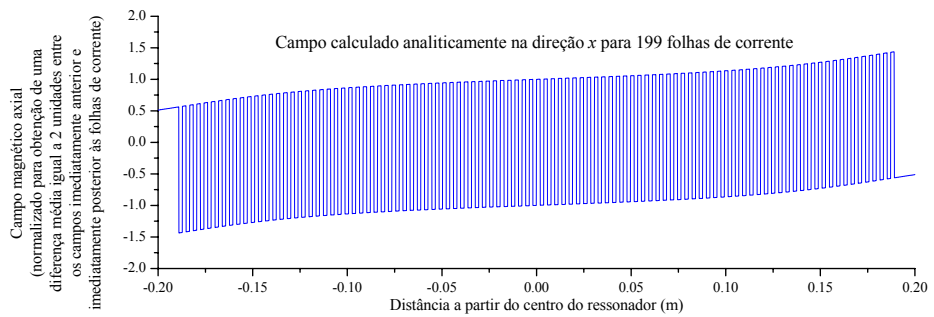
Quando variamos a condição de ressonância com o tempo, estando os campos sintonizados para o comprimento de onda nominal de cada instante na posição central do ressonador, a diferença ideal (calculada na seção 5.2) entre o valor de campo imediatamente anterior e imediatamente posterior a cada folha de corrente será observada somente na posição central do ressonador. Ainda assim, o objetivo final é que o aumento total de ângulo imposto pelo sistema seja 180° , não sendo necessário que a contribuição de cada aumento seja a mesma.



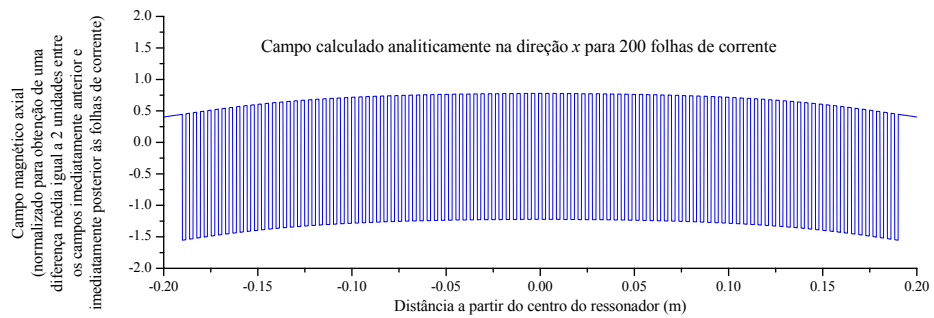
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.7 – Perfis de campo magnético perpendicular H_{per} (H_x ao longo do ressonador) – explicações mais detalhadas no texto desta seção.

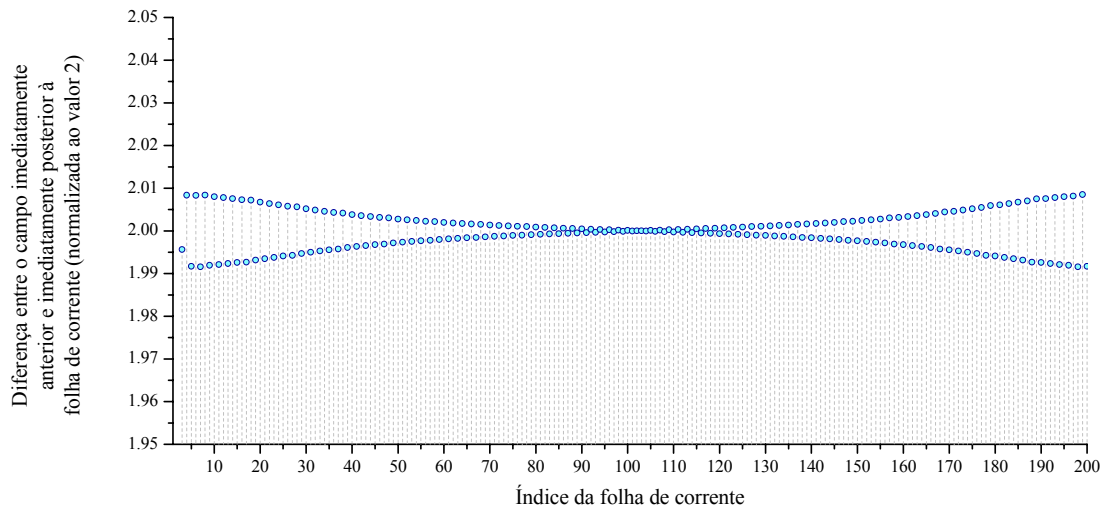


Figura 6.8 – Diferença normalizada entre os campos perpendiculares H_{per} (H_x ao longo do ressonador) imediatamente anterior e imediatamente posterior às folhas de corrente, em função do índice da folha de corrente para o perfil mostrado na figura 6.7d.

De fato, sendo feita a compensação espacial (gradiente) somente para o campo guia e mantendo o campo perpendicular com a distribuição espacial original e sintonizado para o centro do ressonador, o aumento de ângulo em excesso imposto pelas interfaces (folhas de corrente) anteriores ao centro é compensado pelo aumento reduzido das interfaces posteriores ao centro, mantendo-se o aumento total de ângulo desejado para todos os comprimentos de onda. A emulação representada na figura 6.3 foi feita desta forma, compensando espacialmente apenas o campo guia e mantendo o campo perpendicular com o perfil calculado originalmente, sem compensação.

6.1.3.1 Supressão de máximos secundários através da modulação do campo perpendicular

Em trabalhos anteriores a este, foi demonstrado e comprovado experimentalmente (AGAMALIAN *et al.*, 1988) que é possível suprimir os máximos secundários da função de probabilidade de inversão do *spin* através de modulações espaciais específicas do campo perpendicular. Em especial, modulações gaussianas se mostraram satisfatoriamente eficientes em testes experimentais anteriores (AGAMALIAN *et al.*, 1988; AGAMALIAN *et al.*, 1983). A referência [2] (AGAMALIAN *et al.*, 1988) fornece as informações necessárias para o cálculo da modulação, além das novas relações entre os campos magnéticos. Para a obtenção de uma modulação gaussiana sobre o campo perpendicular dada por

$$h_{p-\frac{1}{2}} = h_{per} \cdot e^{\left\{-\sigma_m^2 \left[\frac{M}{2} - (p-\frac{1}{2})\right]^2\right\}} \quad (33)$$

onde h_{per} é o campo perpendicular central determinado pela nova condição de inversão completa do *spin* para esta modulação (AGAMALIAN *et al.*, 1988)

$$h_{per} = H_o \cdot \tan \left[\frac{\sigma_m \cdot \pi}{4 \cdot \left(1 - e^{\frac{-\sigma \cdot M}{2}}\right)} \right], \quad (34)$$

σ_m é a “profundidade” da modulação, M é o número de folhas de corrente e p é o índice da folha de corrente ($p = 1, 2, 3, \dots, M$), a largura b das folhas de corrente deve variar em função do índice p de acordo com a relação

$$b_p = b_c \cdot e^{\frac{-\sigma_m^2}{4}} \cdot \sec h \left[\sigma_m^2 \cdot \left(\frac{M}{2} - p\right) \right] \cdot e^{\left\{\sigma_m^2 \cdot \left[\left(\frac{M}{2} - p\right)^2 + \frac{1}{4}\right]\right\}}, \quad (35)$$

sendo b_c a largura de folha de corrente no centro do ressonador.

Um exemplo de perfil magnético axial calculado para um ressonador com 30 cm de comprimento e 200 folhas de corrente e uma modulação com $\sigma_m = 0.01$ é apresentado na figura 6.10, tendo o perfil de largura das folhas mostrado na figura 6.9.

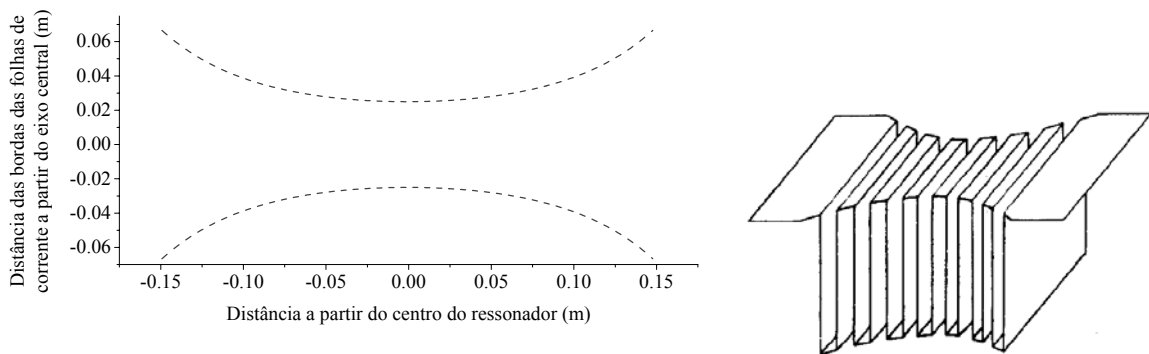


Figura 6.9 – Distância entre as bordas das folhas de corrente e o eixo central em função da distância da folha a partir do centro do ressonador (esquerda) e exemplo de construção do ressonador para obtenção de uma modulação gaussiana para o campo perpendicular (direita).

A redução dos máximos secundários obtida através da emulação de um ressonador modelado conforme os perfis das figuras 6.9 e 6.10 é apresentada na figura 6.11, onde pode-se observar que o primeiro máximo relativo lateral passou de 12% para 3% do máximo central.

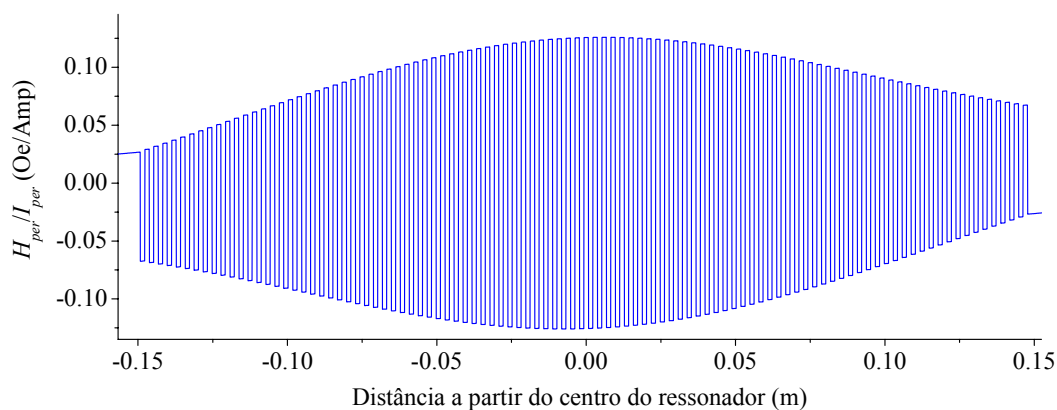


Figura 6.10 – Perfil magnético do campo perpendicular (H_x ao longo do ressonador) gerado por configurações de 200 folhas de corrente, obedecendo o perfil de largura das folhas apresentado na figura 6.9.

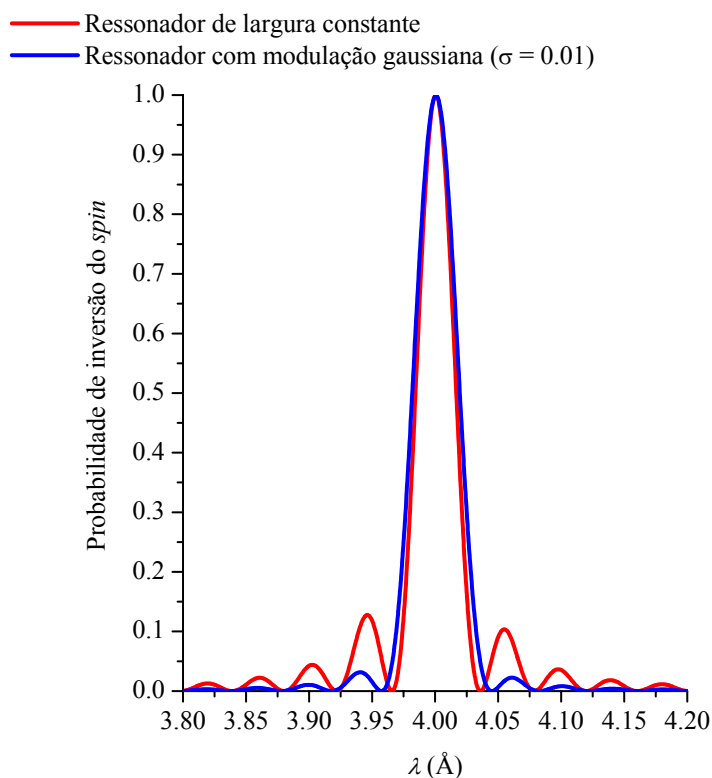


Figura 6.11 – Probabilidade de inversão do *spin* em função do comprimento de onda, calculada para um ressonador de largura constante e para um ressonador com modulação gaussiana.

Limitações geométricas deste tipo de solução são em geral dadas pelo espaço disponível na linha de nêutrons a ser equipada pelo equipamento, pelas especificações do elemento gerador do campo guia e pela uniformidade desejada na direção x , paralela às folhas de corrente. Um problema apontado pelos pesquisadores que efetuaram experimentos com

equipamento similares anteriormente (M.M. Agamalian e C.F. Marjkrzak) foi o fato de se chegar a valores proibitivos na prática para relação entre a largura máxima nas pontas e a largura mínima no centro do ressonador, quando se buscava um valor mais eficiente para σ . A figura 6.9 apresenta, à direita, um exemplo de corte da folha de Alumínio e construção deste tipo de configuração, mostrado em perspectiva.

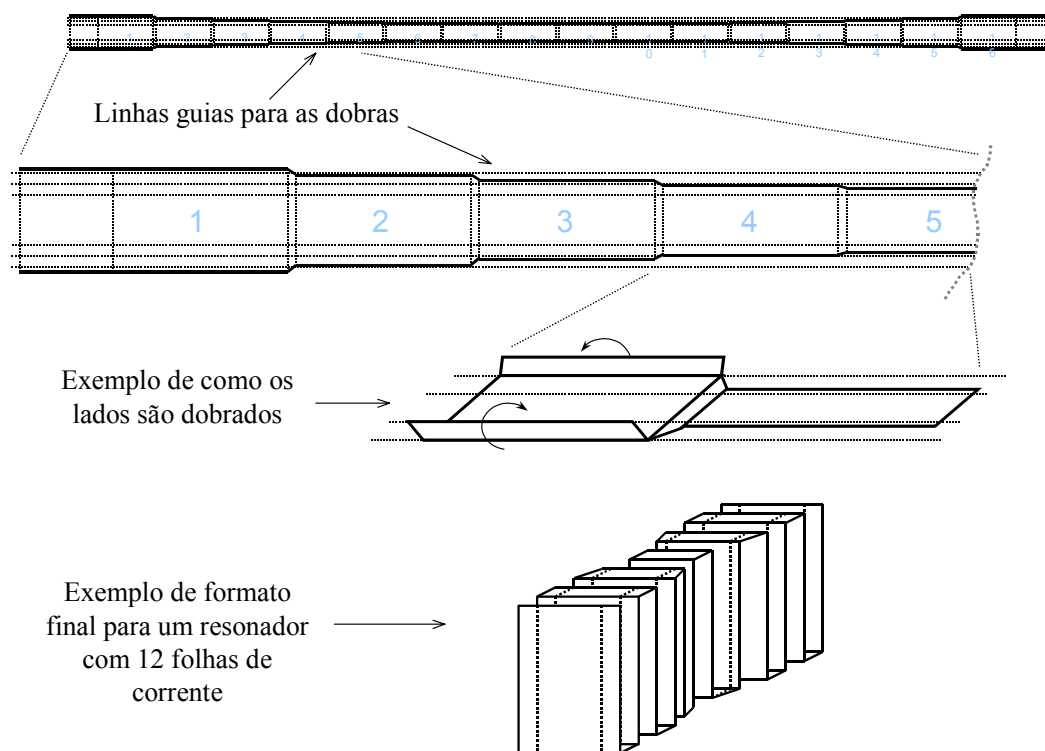


Figura 6.12 – Construção do ressonador com “lados dobrados”.

Para reduzir esta limitação, foi sugerido pelo Professor Frank Klose que se buscasse uma nova geometria para a construção do equipamento, de forma que a distribuição da densidade de corrente se mantivesse conforme a modulação gaussiana desejada, porém com um menor volume total para o ressonador. Isto pôde ser obtido com dobras nas laterais das folhas de corrente mais próximas das pontas do equipamento. Um protótipo reduzido para esta versão do ressonador, a qual batizamos de “lados dobrados” (*folded sides*), foi concebido conforme mostrado na figura 6.12 e teve seu funcionamento verificado através de emulações e a validade de seu perfil magnético foi confirmada através de cálculos analíticos e medidas. A figura 6.13 mostra, à direita, o resultado de medidas do campo H_{per} , comparadas aos valores de campos obtidos através de cálculos analíticos para uma configuração equivalente sem os lados dobrados. Este primeiro protótipo com lados dobrados (mostrado na figura 6.13, à esquerda), possui 12 folhas de corrente, com 8 mm de distância entre folhas adjacentes. A

variação da largura das folhas respeita as relações (33-35), para uma largura central de 7 cm e dobras de 1 cm.

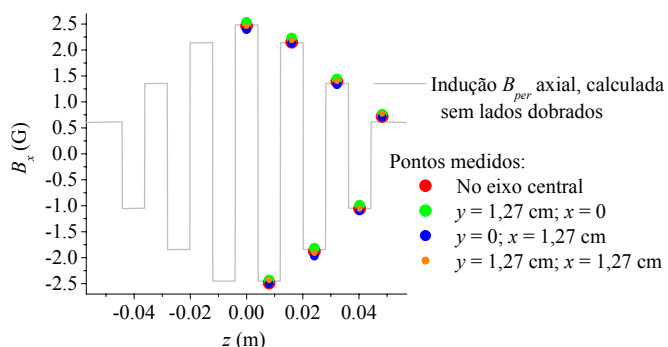
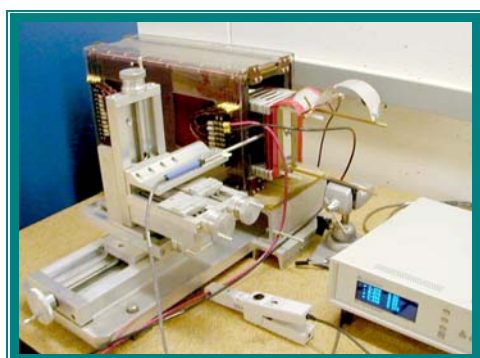


Figura 6.13 – Medidas de densidade de fluxo magnético perpendicular do primeiro protótipo de lados dobrados, feitas em diferentes posições da seção do feixe de nêutrons previsto para o Reflectômetro para Estudos de Magnetismo da SNS (o feixe deverá ter uma seção quadrada de 1,27 cm por 1,27 cm). Foi usada uma corrente constante de 20 Amperes fluindo pelas folhas de Alumínio.

Concluiu-se, a partir de cálculos e medidas, que a construção com lados dobrados resulta em resultados plenamente satisfatórios, ocupando um volume muito menor na linha de nêutrons.

6.1.3.2 Dimensões mínimas para as folhas de corrente e cálculo do perfil lateral do ressonador

Através de emulações feitas com diferentes uniformidades de campo perpendicular na direção x , chegamos a uma especificação de variação máxima de H_{per} de $\pm 0.5\%$. Esta especificação é atendida, com certa folga, com uma largura mínima de 7 cm para a folha central de um ressonador de 200 folhas (veja a figura 6.14). Determinamos, diretamente através do manuseio de folhas de Alumínio de $50 \mu\text{m}$ (espessura escolhida com base nos requerimentos de dissipação de calor, maleabilidade para a construção, resistência mecânica e absorção/espalhamento de nêutrons), que seriam feitas, no máximo, 5 dobras laterais de 1,5 cm nas folhas.

Considerando ainda uma distância nominal de 1,91 mm entre folhas adjacentes (esta é a distância mais próxima da desejável – 2 mm – que podemos obter combinando as molduras de Mica e os espaçadores disponíveis para o projeto no Laboratório), chegamos a um ressonador que pode ser contido dentro de um paralelepípedo de 382 mm x 100 mm x 160 mm (comprimento x largura x altura - os limites de altura e largura foram determinados a partir das molduras disponíveis e dos limites impostos pelo espaço na linha de nêutrons).

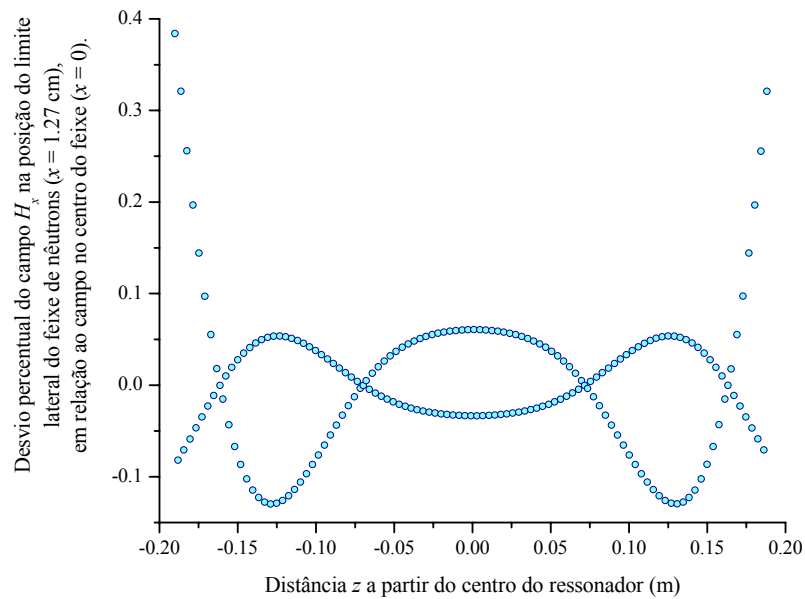


Figura 6.14 – Desvio percentual do campo H_x no limite lateral do feixe de nêutrons ($x = 1,27$ cm), em relação ao campo perpendicular H_{per} no eixo do ressonador, para um ressonador com largura mínima de 7 cm, com 200 folhas de corrente e modulação gaussiana de profundidade $\sigma = 0,010755$.

Consideradas todas as restrições impostas, a profundidade de modulação máxima atingível para a operação com 200 folhas de corrente é $\sigma_m = 0,010755$. O perfil resultante de largura das folhas é mostrado na figura 6.15.

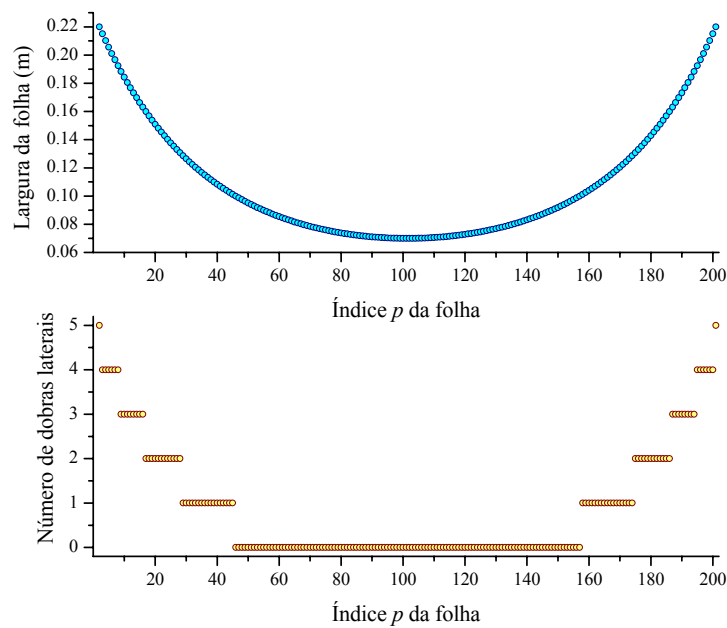
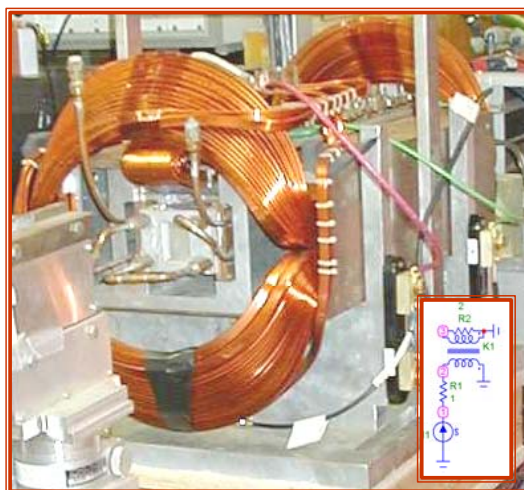


Figura 6.15 – Perfil lateral calculado para um ressonador de 200 folhas com modulação gaussiana de profundidade $\sigma_m = 0,010755$ e largura central de 7 cm.

6.2 INDUÇÃO DE CORRENTES PARASITAS EM FOLHAS DE CORRENTE PELA VARIAÇÃO DO CAMPO GUIA LONGITUDINAL

Agora que já temos dados suficientes sobre os campos requeridos para a aplicação e sobre a geometria e posição espacial dos elementos condutores do dispositivo, podemos fazer uma avaliação da geração de correntes parasitas pela variação dos campos e dos possíveis erros e imperfeições gerados por estas correntes. Embora tenhamos observado em simulações e testes práticos que as fontes de corrente disponíveis no mercado conseguem controlar satisfatoriamente as correntes para a geração dos campos desejados, mesmo que um equipamento deste tipo seja construído evitando-se materiais ferromagnéticos, a geração de correntes parasitas em corpos condutores que façam parte da estrutura do equipamento (ou que estejam próximos a este) podem acarretar distorções no campo que comprometam o seu funcionamento.



Protótipo do *Brookhaven National Laboratory* no instrumento POSY I / IPNS – *Argonne National Laboratory*

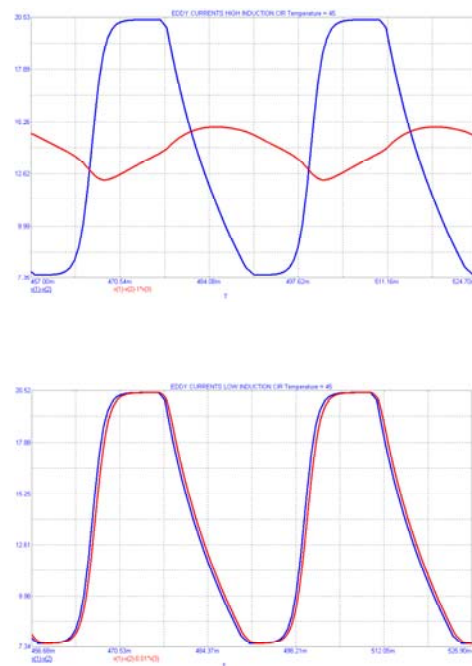


Figura 6.16 – O protótipo de inversor seletivo de *spin* desenvolvido pelo *Brookhaven National Laboratory* (esquerda) não se mostra adequado para operação dinâmica devido às distorções de campo magnético geradas pelas correntes parasitas em sua estrutura metálica, decorrentes da variação do campo externo. Os dois gráficos (à direita) são simulações de modelos elétricos que ilustram a relação entre o campo gerado pela corrente externa e o campo resultante, para uma estrutura com baixa resistividade (acima) e uma estrutura com alta resistividade (abaixo).

Um exemplo disso é o inversor seletivo de *spin* construído no *Brookhaven National Laboratory* (figura 6.16), o qual tem uma estrutura formada por placas grossas de Alumínio, sendo portanto adequado para uso magnetostático, sem variação dos campos, mas inadequado para operação dinâmica. Na figura 6.16, à direita, é apresentado o resultado de simulações feitas com um modelo elétrico para o acoplamento entre a bobina externa e as placas de Alumínio, mostrando os resultados para um secundário (placas) com baixa e alta resistividade. A figura 6.17 mostra uma medida dinâmica de densidade de fluxo magnético feita com este mesmo protótipo, confirmando a existência do problema da indução de correntes parasitas na estrutura de Alumínio do equipamento.

Como em nossa aplicação precisamos avaliar o campo induzido nas folhas de corrente do ressonador com razoável precisão em espaços reduzidos (< 2 mm) e a distâncias muito pequenas das placas, foi descartada a idéia de basear a análise somente em medidas. Além disso, a construção de um ressonador com dezenas, ou centenas de folhas é um processo trabalhoso, sendo então conveniente que se efetue um cálculo aproximado da distorção de campo decorrente das correntes parasitas antes de se propor um protótipo com um número maior de folhas de corrente, tendo as características descritas na seção anterior.

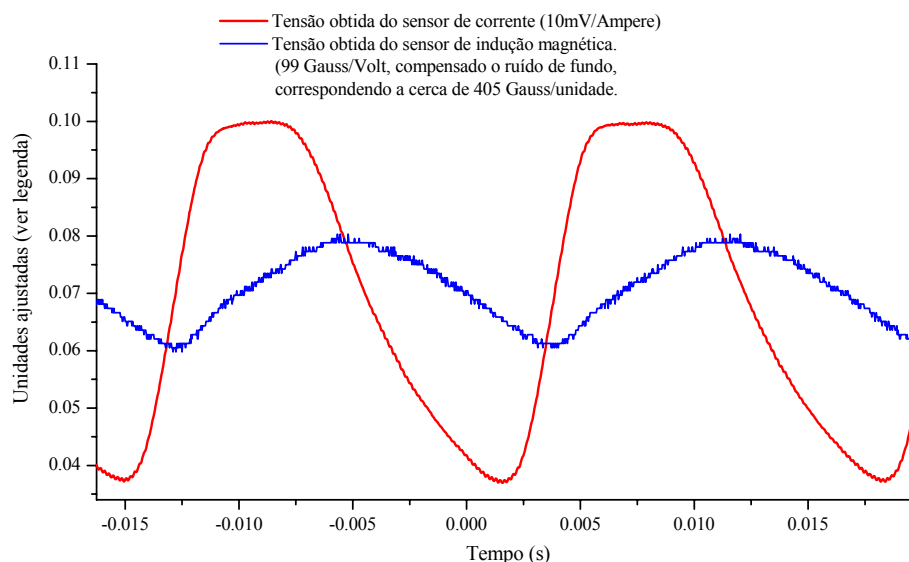


Figura 6.17 – Densidade de fluxo magnético do campo guia resultante medido (curva em azul) ao se aplicar a variação de corrente desejada (curva em vermelho) ao equipamento cedido pelo *Brookhaven National Laboratory*.

Para o cálculo das correntes parasitas foi utilizado um método de divisão de um “condutor fino” (placa fina) em uma rede de malhas elétricas (WEISSENBURGER *et al.*,

1982). Na aplicação da aproximação de um “condutor fino”, o tempo τ_{skin} (*skin time*) do condutor, dado por $\tau_{skin} \cong \mu_o \cdot \sigma \cdot d^2$ (36) (μ_o é a permeabilidade magnética do vácuo, σ é a condutividade elétrica do condutor e d é a espessura da placa), deve ser suficientemente pequeno comparado ao tempo característico das variações dos campos externos (KAMEARI, 1981). Em nosso caso, $\tau_{skin} \cong 4 \cdot \pi \cdot 10^{-7} \cdot 2 \cdot 10^7 \cdot (50 \cdot 10^{-6})^2 s \cong 62,83ns$. Neste intervalo de tempo, mesmo no início do primeiro quadro de medida do Reflectômetro de Estudos de Magnetismo da SNS (que é o instante de filtragem com variação mais abrupta do campo magnético guia), estando o centro do filtro a 9 metros da fonte (situação mais exigente possível para esta linha de nêutrons), ocorre uma variação máxima de 0.0015% no campo, a qual podemos considerar desprezível, validando portanto a aproximação de “condutor fino”.

Foi escrito um programa de computador para modelar a geração de correntes parasitas em placas finas e este foi testado comparando resultados obtidos com o uso do mesmo método em trabalhos de outros pesquisadores (CHRISTENSEN, 1979; WEISSENBURGER *et al.*, 1979) e com expressões analíticas para casos particulares (KAMEARI, 1981; WEISSENBURGER *et al.*, 1979). O programa divide as superfícies das placas em malhas retangulares e monta um sistema de equações diferenciais que, em forma matricial, é descrito por

$$[\dot{i}] = [L]^{-1} \cdot [[V] - [R] \cdot [I]], \quad (37)$$

onde $[\dot{i}]$ é o vetor contendo as derivadas temporais das “correntes de malha”, $[L]$ é a matriz de “indutâncias de malha”, $[V]$ é o vetor de “tensões de malha”, calculado a partir da relação entre a variação das correntes externas (“fontes de campo”) e as indutâncias mútuas da placa em relação aos elementos externos de corrente, $[R]$ é a matriz de “resistências de malha” e $[I]$ é o vetor de correntes de malha a ser calculado. As relações usadas para transformar elementos de ramos (resistências, indutâncias, correntes, etc) em elementos de malha e outros detalhes sobre o método usado podem ser encontrados em [10, 25] (CHRISTENSEN, 1979; KAMEARI, 1981). O programa soluciona a equação (37) numericamente pela aplicação do método de Runge-Kutta convencional (DANIEL *et al.*, 1970; HENRICI, 1962; PRESS *et al.*, 1992). Os métodos usados para a manipulação de matrizes (e.g. inversão) estão detalhados em [15] (FADDEEV *et al.*, 1963).

Para podermos ter uma idéia de como as correntes parasitas se distribuem em um plano condutor, mostramos na figura 6.18 uma distribuição típica de correntes parasitas sobre

uma placa de 10 cm x 10 cm, calculada para uma taxa de variação constante e uniforme de indução magnética de 1 T/s, em regime permanente. Se em um determinado instante a derivada segunda do campo magnético é diferente de zero, nos instantes subseqüentes, as linhas de densidade de corrente seguirão uma distribuição diferente da mostrada na figura 6.18, em caráter transiente. Tanto a densidade de correntes parasitas como o campo gerado por essas correntes (que é o objetivo principal desta análise) podem ser obtidos a partir da matriz de correntes de malha ou da matriz de correntes de ramos (KAMEARI, 1981; WEISSENBURGER *et al.*, 1982).

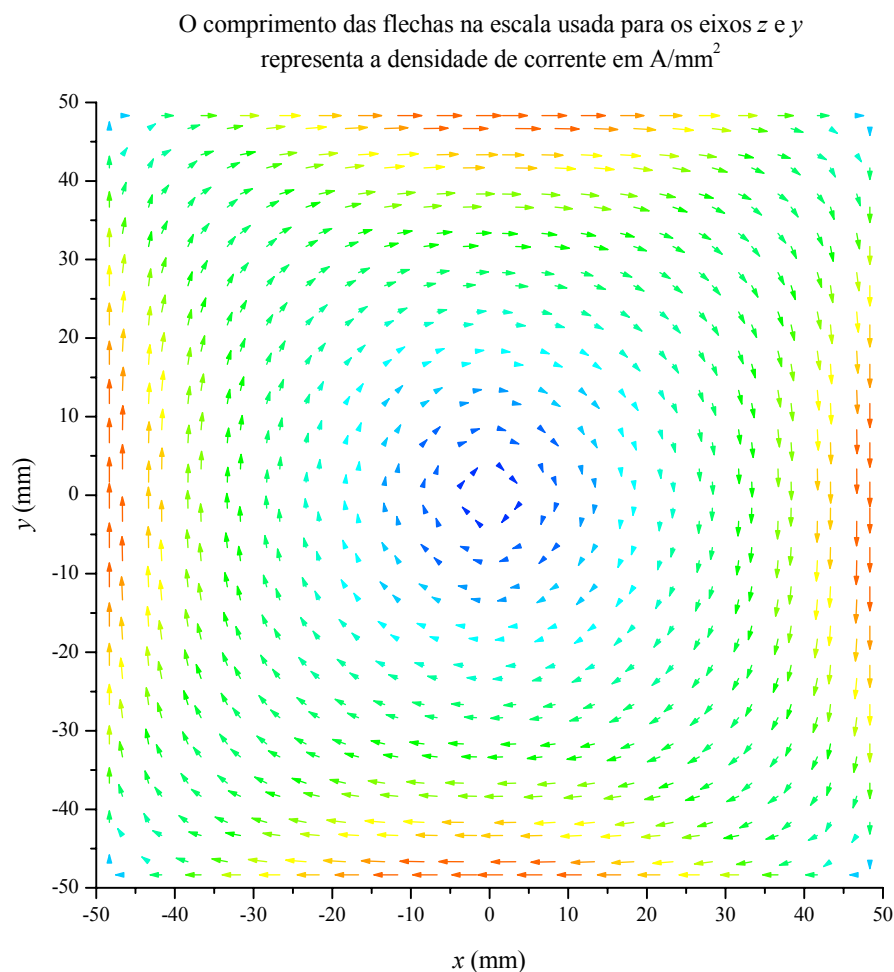


Figura 6.18 – Densidade de correntes parasitas calculada para uma placa de 10 cm x 10 cm com a resistividade aproximada do Alumínio ($\rho = 1 \cdot 10^{-8} \Omega m$) e com 50 mm de espessura, submetida a uma variação perpendicular constante e homogênea de indução magnética de 1 T/s.

Iniciamos a análise de nosso problema usando um modelo de uma única placa condutora correspondendo às dimensões das placas nos extremos de um ressonador com os

parâmetros apresentados na figura 6.15 (10 cm de largura por 16 cm de altura, com 50 μm de espessura). A espessura nas bordas laterais da placa foi ajustada para representar de forma aproximada as laterais dobradas. Foram consideradas, além das resistências equivalentes de malha da rede, as indutâncias próprias e mútuas de cada malha. Como a resistividade do Alumínio varia conforme sua pureza, temperatura e outros parâmetros, utilizamos para os cálculos a menor resistividade dentre as que encontramos na literatura (CHOU *et al.*, 1998) (foram encontrados valores entre $1,8 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$ e $5 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$), buscando modelar o pior caso possível.

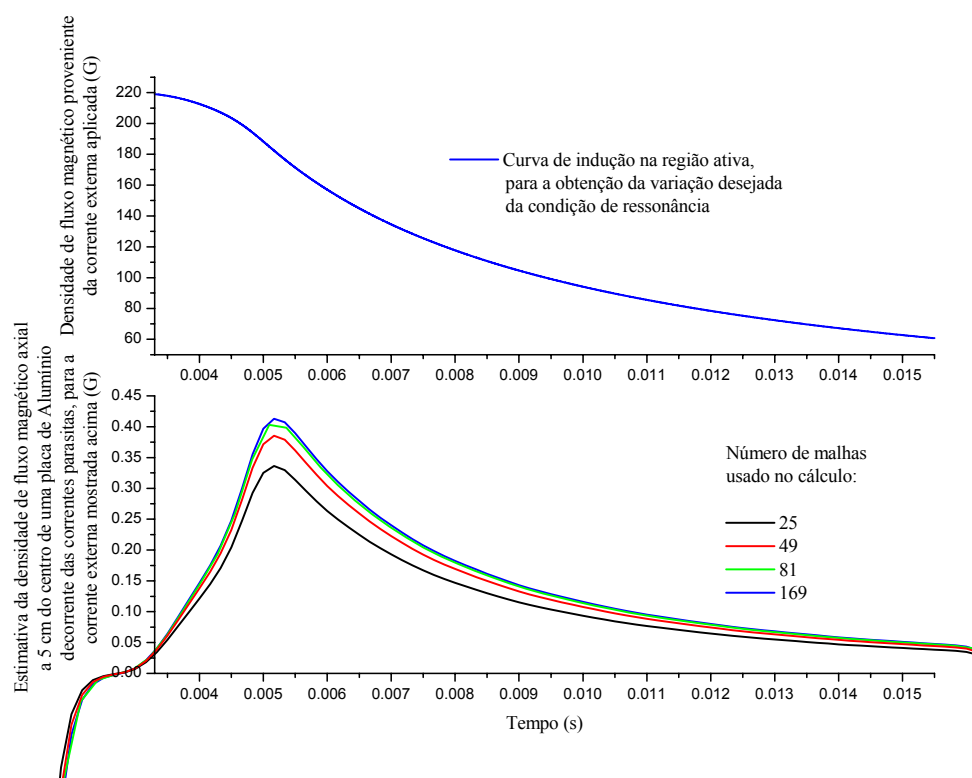


Figura 6.19 – Aproximação da solução com o aumento do número de malhas em que a placa é dividida (regularmente, neste caso) – cálculo de indução de correntes em uma única placa feito para uma posição axial a 5 cm da placa com resistividade $1 \cdot 10^{-8} \Omega\text{m}$, 50 μm de espessura x 16 cm de altura x 10 cm de largura e com lados dobrados de 1,5 cm em 5 camadas.

Na figura 6.19 mostramos a influência que o número de malhas em que uma placa é dividida tem sobre o resultado do cálculo do campo induzido pelas correntes parasitas. Observamos que os cálculos feitos com mais de 81 malhas por placa apresentam um erro menor do que 2% para a corrente total, em relação às soluções analíticas para casos simples em regime permanente (a estimativa da indução gerada por estas correntes também terá um erro pequeno, desde que as dimensões das malhas sejam pelo menos 4 vezes menor do que a distância entre o ponto avaliado e a posição da malha). Assumindo que teremos uma distorção

do campo guia provocada por correntes parasitas de no máximo 10% para o campo resultante este erro de estimativa seria da ordem de 0.2% (o erro é maior e de mais difícil avaliação para posições muito próximas da placa). Em geral, a otimização da distribuição das malhas é feita de forma que se divida as áreas com densidade de corrente mais alta e maior gradiente de corrente em malhas menores. No entanto, ao avaliar posições muito próximas das placas, se faz necessário dividir em malhas menores a área próxima ao ponto avaliado.

Nos cálculos seguintes, as divisões de malhas foram adequadas manualmente para cada posição a ser avaliada, sempre usando um número de malhas entre 169 e 225 por placa. O valor da densidade de fluxo magnético na superfície da placa foi estimado a partir de pontos vizinhos por interpolação, usando polinômios de terceira ordem – interpolação com *Spline* cúbica (PRESS *et al.*, 1992). É importante lembrar que encontrar soluções aproximadas razoáveis para um modelo completo do ressonador (com 200 folhas e suas interconexões) seria impraticável com os recursos computacionais disponíveis, sendo então necessário fazer uso de diversas condições de simetria, redistribuições das malhas e aproximações (CHRISTENSEN, 1979; KAMEARI, 1981; PARIZZI, 2002 - iii; WEISSENBURGER *et al.*, 1979; WEISSENBURGER *et al.*, 1982) que permitam a redução do número de variáveis do sistema e da memória necessária.

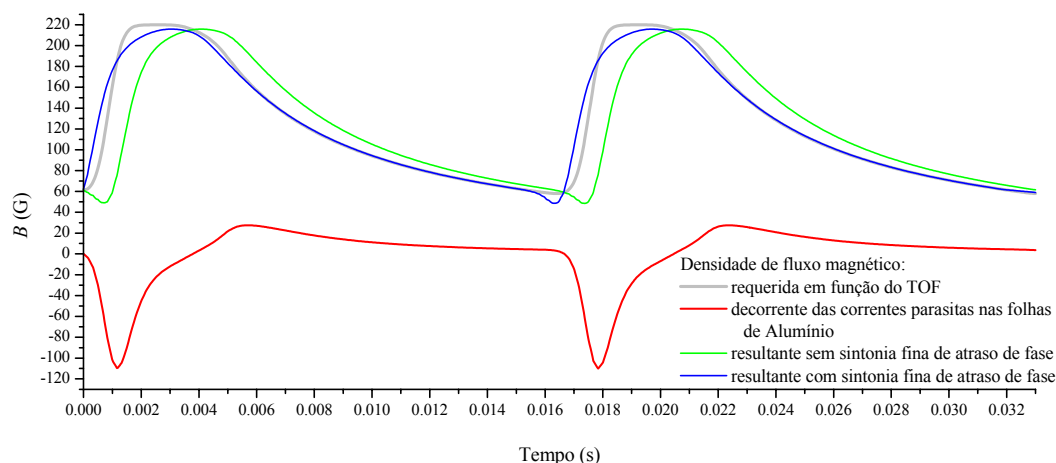


Figura 6.20 – Estimativa do campo resultante no ponto central de um ressonador com 200 placas com resistividade de $1,8 \cdot 10^{-8} \Omega m$, 50 μm de espessura, 16 cm de altura e com o perfil de largura descrito na seção 6.1.3.2.

A figura 6.20 apresenta o resultado de um cálculo aproximado para dois pulsos consecutivos de corrente aplicados ao ressonador proposto na seção 6.1.3.2. Os arredondamentos e aproximações foram feitos de forma desvantajosa à aplicação (no sentido

do maior desvio em relação ao campo desejado), buscando garantir o funcionamento do dispositivo na prática. As indutâncias das placas provocam um atraso do efeito da força eletromotriz gerada pela variação da corrente externa e a distorção de campo só não é ainda maior graças às indutâncias mútuas entre as placas. Embora a distorção pareça muito grande para permitir a operação do equipamento de forma simples, a inclusão de um “adiantamento” da fase do pulso de corrente em relação ao gatilho (t_o) reduz o erro de indução magnética a valores aceitáveis (melhor do que um desvio 0.5% em ambas as direções, que é o nosso objetivo nesta aplicação). O campo resultante após o ajuste de fase é apresentado em azul nas figuras 6.20 e 6.21. A figura 6.21 apresenta a distorção da densidade de fluxo magnético no centro do ressonador para a faixa de TOF equivalente aos quadros de comprimento de onda a serem usados em medidas nos reflectômetros da SNS.

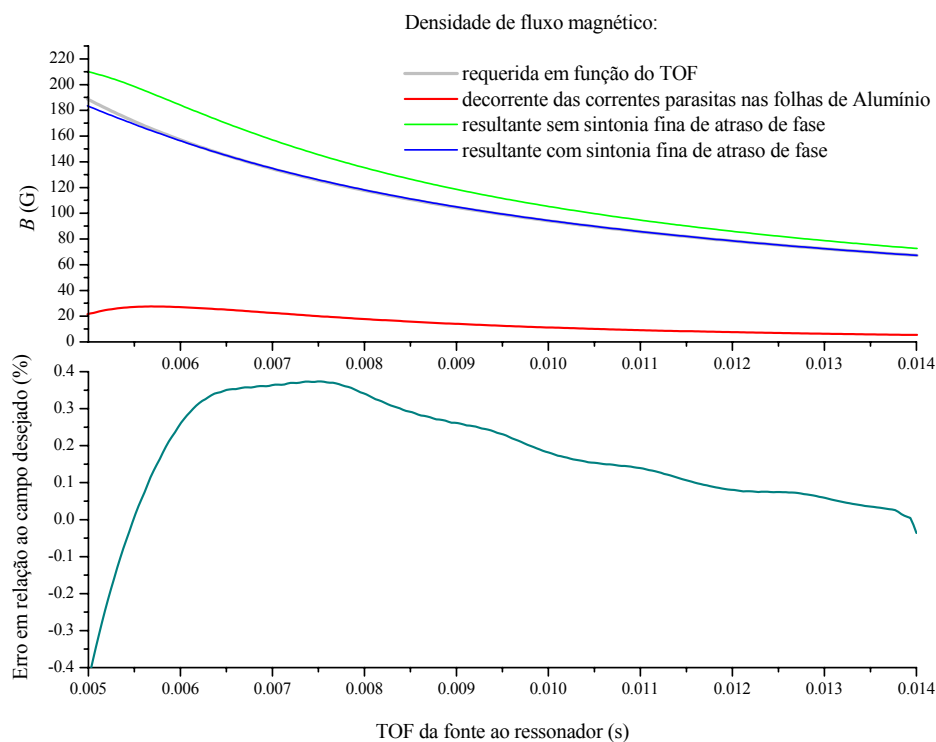


Figura 6.21 – Cálculo aproximado do campo resultante no ponto central do ressonador descrito na seção 6.1.3.2, sendo mostrada a densidade de fluxo magnético obtida com o ajuste de fase (curva em azul) e o erro percentual do campo, em relação aos valores ótimos na faixa ativa de TOF (equivalente aos comprimentos de onda a serem medidos).

Esse tipo de análise é fundamental na previsão de desempenho do filtro e na determinação de seu escopo de uso. Por exemplo: observando o erro percentual apresentado na figura 6.21 fica bastante claro que, neste exemplo, medidas feitas com a exclusão de comprimentos de onda entre 2 Å e 2.5 Å (equivalente à faixa de TOF entre 5 ms e 6,2 ms)

apresentarão um desempenho muito melhor, com precisão de até $\pm 0,2\%$ do valor do campo ressonante requerido.

6.3 ALGUMAS BREVES CONSIDERAÇÕES SOBRE O ACIONAMENTO DOS CAMPOS

Especificamos nos capítulos 4 e 6 critérios para a obtenção de sincronismo entre a condição de ressonância do inversor seletivo de *spin* e a estrutura de tempo de percurso (TOF) do instrumento a ser equipado com o filtro. A corrente que controla os campos deve ser inversamente proporcional ao tempo transcorrido desde o início do pulso (conforme mostrado na figura 4.5) durante o período equivalente à faixa de comprimento de onda a ser medido (quadro de medida) na posição do centro do filtro (aplicada a compensação de tempo de percurso dos nêutrons dentro do ressonador por um gradiente espacial linear conforme definido na seção 6.1.1). Nesta seção pretendemos apenas fazer alguns comentários pertinentes à especificação das fontes de corrente que deverão acionar os elementos de geração dos campos magnéticos requeridos para a aplicação. Não trataremos de detalhes específicos, mas achamos importante chamar a atenção sobre alguns cuidados que devem ser tomados ao selecionar e preparar as fontes de corrente para este tipo de aplicação.

O acionamento das folhas de corrente é uma aplicação mais simples, e em testes feitos em laboratório obtivemos resultados satisfatórios, muito próximos aos obtidos para um cálculo resistivo simples. Já o acionamento do campo guia constitui uma aplicação mais exigente para as fontes de corrente. Na seção 6.2, demonstramos com o uso de métodos numéricos que as correntes parasitas não devem gerar uma distorção do campo guia acima da aceitável, mesmo quando este é aplicado longitudinalmente no inversor de *spin* com um ressonador conforme definido na seção 6.1.3.2, sendo usado um ajuste fino de fase para o disparo de cada período de controle da corrente. No entanto, em um passo anterior a este (não descrito nesta dissertação por uma questão de prioridades) estivemos estudando o comportamento de fontes de corrente comerciais que pudessem fornecer às bobinas as devidas correntes variantes com o tempo, com a devida estabilidade e precisão.

Selecionadas as fontes com os limites de corrente necessário e com a capacidade de variar a corrente (*slew rate*) com a taxa máxima desejada, se estabeleceram as tensões exigidas da fonte a cada instante durante os pulsos, usando a relação

$$V = \frac{di_o}{dt} \cdot L_{coil} + R_{coil} \cdot i_o \quad (38).$$

Em (38), V e i_o são a tensão e a corrente exigidas, e L_{coil} e R_{coil} são a indutância e a resistência do solenoide acionado pela fonte. A figura 6.22 ilustra um caso típico para um solenoide com alta indutância (24 mH – este é o valor máximo estimado para uma das configurações a ser implementada no projeto, onde o efeito da indutância é mais visível). Deste tipo de análise, se obtém o valor extremo de tensão exigido da fonte de corrente a ser utilizada (neste caso, cerca de -70 V).

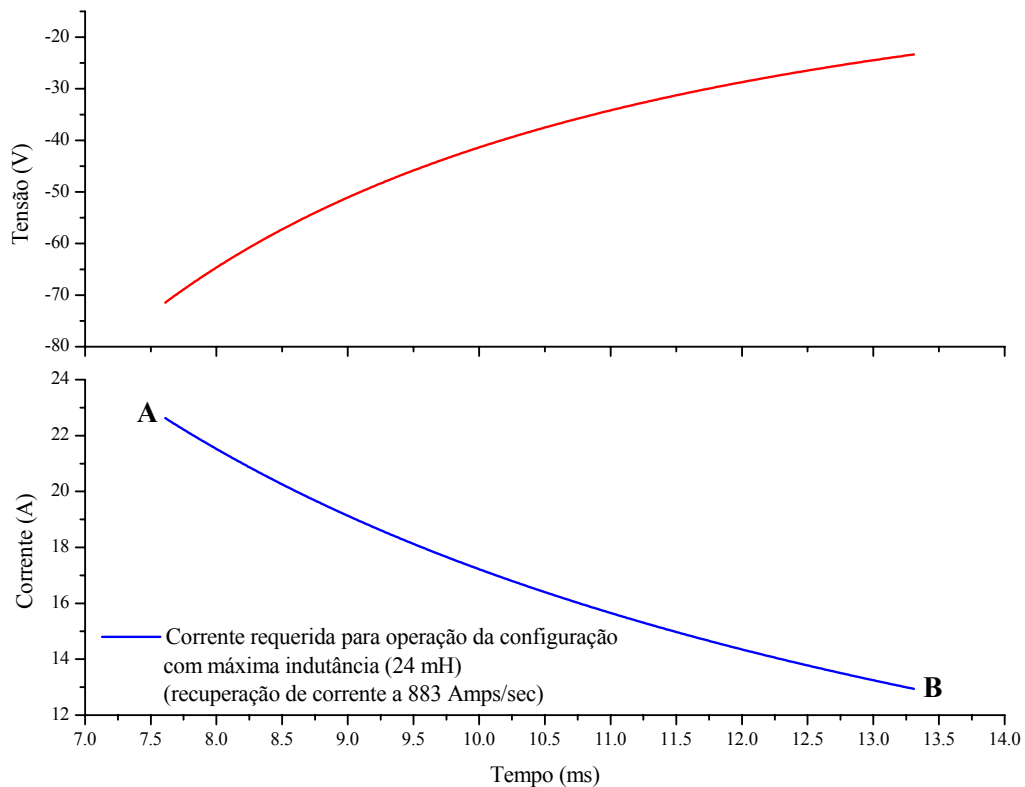


Figura 6.22 – Formas de corrente e tensão para operação ativa entre 2 Å e 3,5 Å à 15 m da fonte de nêutrons para um solenoide de 24 mH. Além de permitir a operação nesta faixa do pulso, é necessário que a fonte possa recuperar a corrente de “B” para “A” em 10,98 ms.

Foram elaborados modelos simplificados para as fontes de corrente disponíveis no mercado e seu desempenho dinâmica avaliada através de simulações (um exemplo é mostrado na figura 6.23). Fizemos então medidas com a configuração que apresentou o melhor desempenho. Os cuidados a serem tomados ao se implementar estas configurações incluem o uso de uma compensação adequada para o laço de controle de corrente e o uso de um filtro capacitivo na saída da fonte, quando necessário. Embora existam fontes de corrente disponíveis no mercado com boa estabilidade para a maioria das aplicações propostas para este filtro e dentro dos devidos limites de tensão e corrente especificados, o sistema pode se tornar instável para cargas com indutância muito alta. Nestes casos, é desejável que se tenha

acesso aos terminais de compensação do laço de controle, onde se possa adicionar um capacitor para evitar que o sistema oscile.

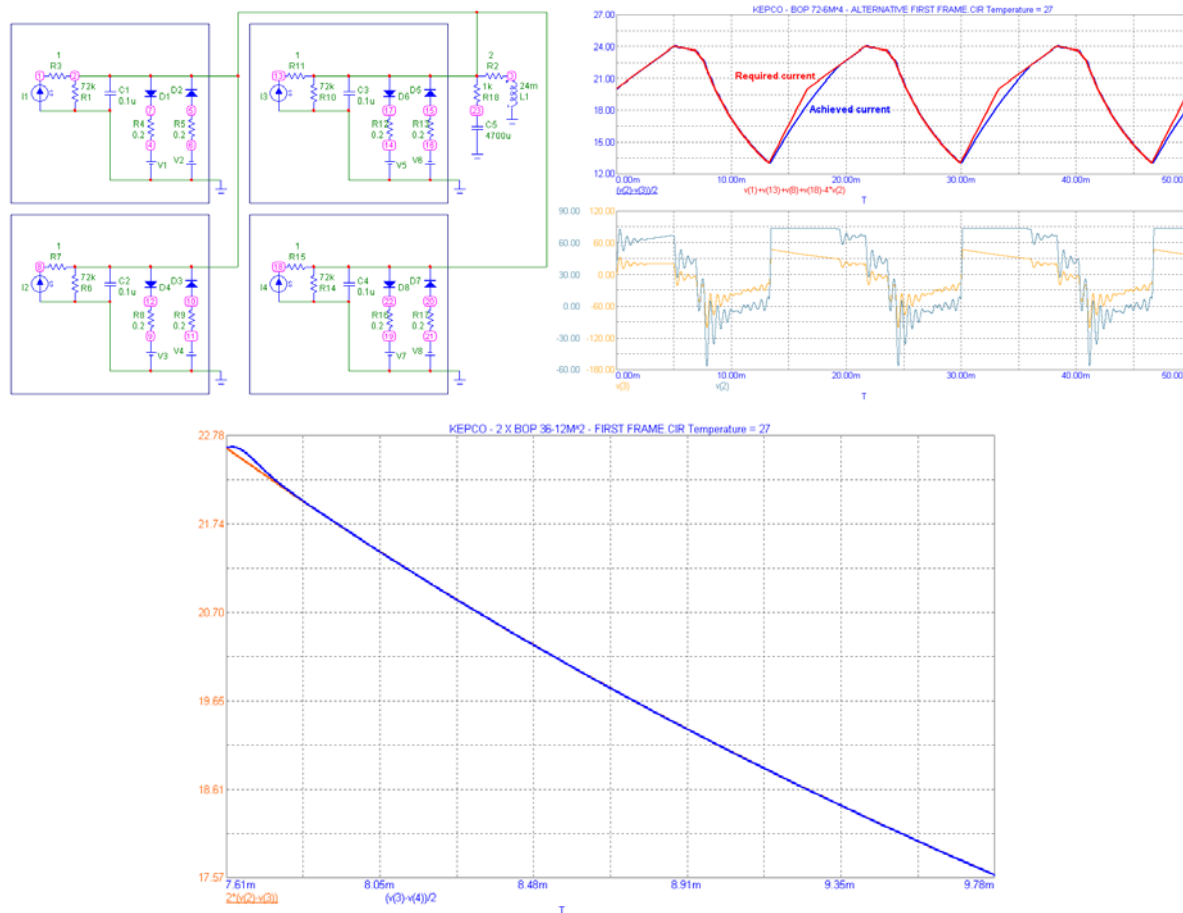


Figura 6.23 – Exemplo de simulações executadas para verificar o desempenho das fontes de corrente disponíveis no mercado (as curvas em vermelho representam a corrente desejada e as curvas em azul a corrente obtida). O gráfico mais abaixo mostra um detalhe da operação na banda de comprimento de onda mais crítica da aplicação.

A figura 6.24 ilustra a importância do cuidado com a compensação interna da fonte de corrente, apresentando um exemplo de medidas feitas em um solenoide com cerca de 0,15 mH de indutância, com e sem o uso de um capacitor de compensação no laço de controle. Foi usada uma fonte bipolar comercial Kepco BOP 20-20 operando em modo de controle de corrente. Estas fontes são projetadas para operação rápida, e por isso vêm de fábrica sem capacitores de compensação interna, permitindo também a desconexão dos capacitores de saída (usados para fornecer corrente em surtos). No entanto, os terminais para a adição de capacitores de compensação ao laço de realimentação são disponibilizados ao usuário. Nas medidas da figura 6.24, a fonte foi controlada através de um sinal analógico proveniente de um gerador de função programado para fornecer a forma de onda desejada (uma “macro” desenvolvida para a aplicação, permitiu programar o gerador de função a partir de pontos medidos experimentalmente - figura 6.25).

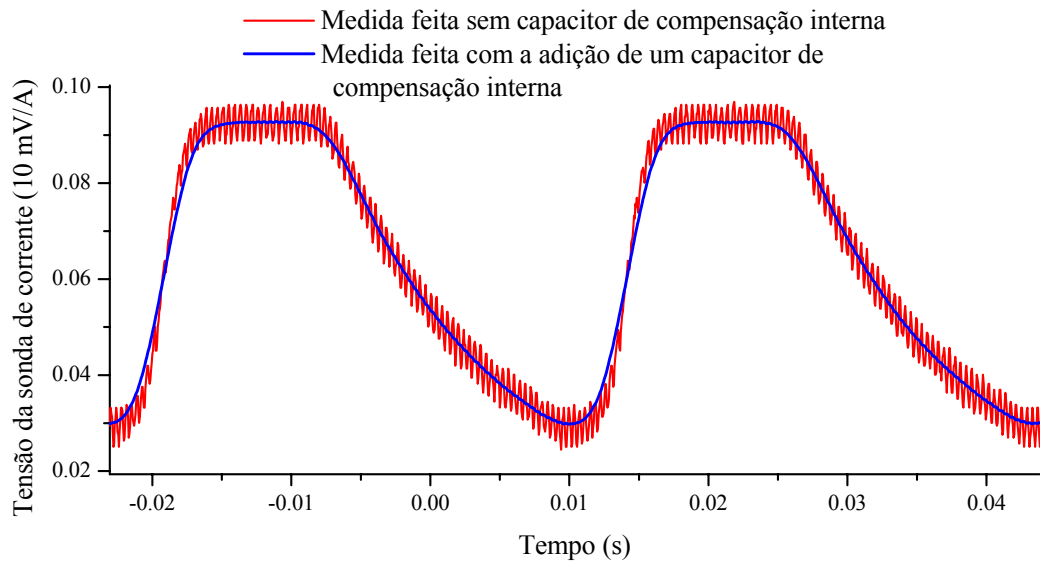


Figura 6.24 – Medidas feitas em um solenoide com cerca de 0,15 mH, com e sem o uso de um capacitor de compensação adicionado ao laço de controle.

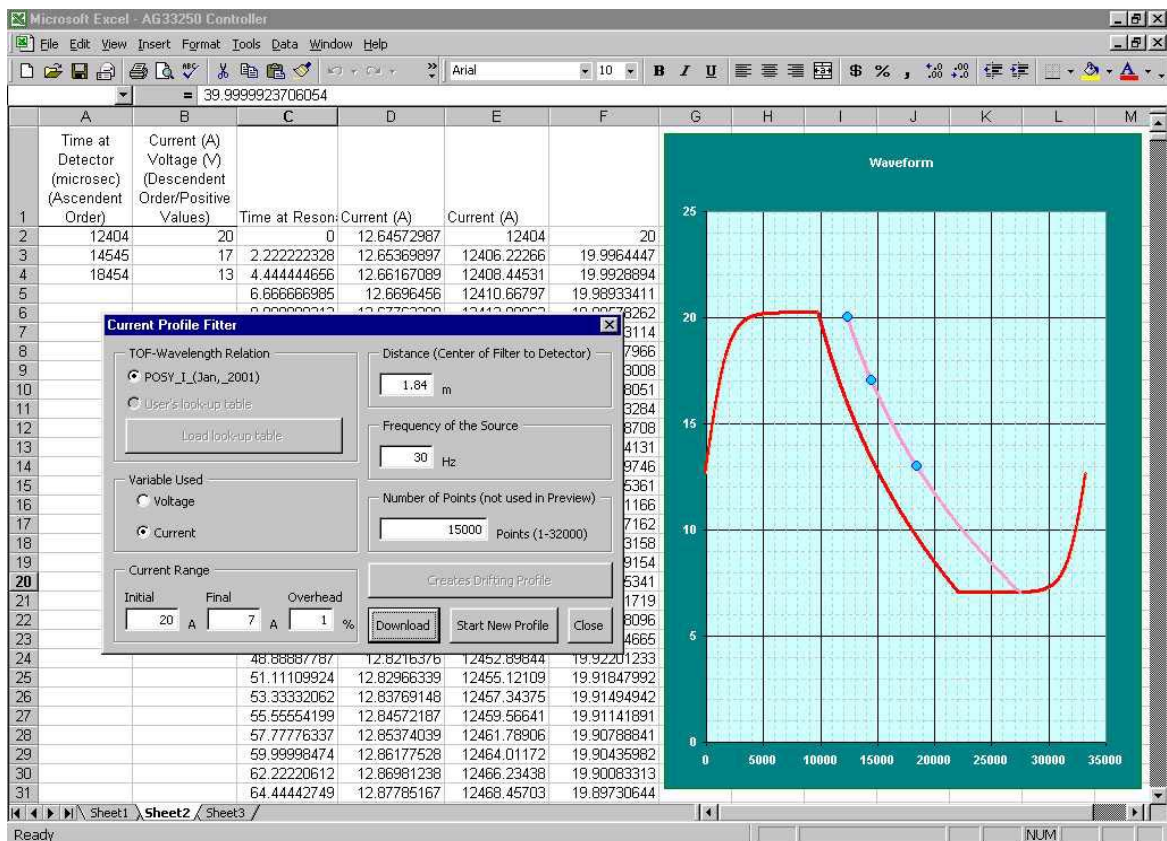


Figura 6.25 –Aspecto da “macro” desenvolvida para o cálculo, geração e carregamento das curvas de controle de corrente do filtro. Trechos de curvas inversamente proporcionais ao tempo e contendo uma componente constante que compense campos de fundo constantes são ajustadas entre os pontos medidos para ressonância em diferentes TOF no detector. É feito então um deslocamento da curva resultante em tempo, para obtenção da ressonância correta na posição do centro do ressonador.

7 ESTUDOS SOBRE A INFLUÊNCIA DE OUTROS PARÂMETROS NO DESEMPENHO DO FILTRO, CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS FINAIS

Nesta dissertação nos concentramos em determinar os campos magnéticos desejados e a mostrar alguns aspectos importantes a serem considerados ao se especificar os elementos para a geração destes campos. Neste capítulo final faremos uma breve coletânea de outros aspectos que foram estudados durante o projeto, concluindo com uma emulação do funcionamento do filtro onde todos os parâmetros citados são considerados, mostrando o efeito que o filtro teria sobre um experimento típico de reflectividade feito com nêutrons.

7.1 SENSIBILIDADE ANGULAR

Uma das propriedades mais interessantes deste filtro de energia por ressonância de *spin* é sua insensibilidade à divergência angular do feixe incidente (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii). Esta é uma grande vantagem deste filtro sobre outros tipos de elementos com propriedades monocromatizadoras, como cristais (elemento mais usado para esta finalidade na atualidade) ou *supermirrors* de multicamadas, nos quais a resolução angular e de comprimento de onda têm uma grande interdependência.

No ressonador de *spin* de Drabkin, a incidência sobre as folhas de corrente em um ângulo diferente de 90° gera uma distorção da distância entre as folhas, conforme representado no diagrama da figura 7.1(a). Se o feixe está percorrendo um caminho mais longo, nêutrons mais rápidos do que o desejado satisfazem a condição de ressonância espacial, tendendo a deslocar a função de probabilidade na direção de comprimentos de onda mais curtos. A distância efetiva entre folhas, para nêutrons de feixes deslocados de um ângulo α em relação à incidência normal, é dada por $a' = a \cdot \sqrt{1 + \tan^2(\alpha)}$ (39), onde a é a distância nominal (perpendicular) entre folhas de corrente. Na figura 7.1(b) é mostrado o resultado de cálculos considerando esta distorção, mostrando o quão insensível à divergência angular este inversor de *spin* se apresenta. O programa de emulação desenvolvido pondera as intensidades do feixe em diferentes ângulos, conforme suas características, permitindo incluir os efeitos da

divergência angular na probabilidade de inversão e na emulação de experimentos de medição de reflectividades.

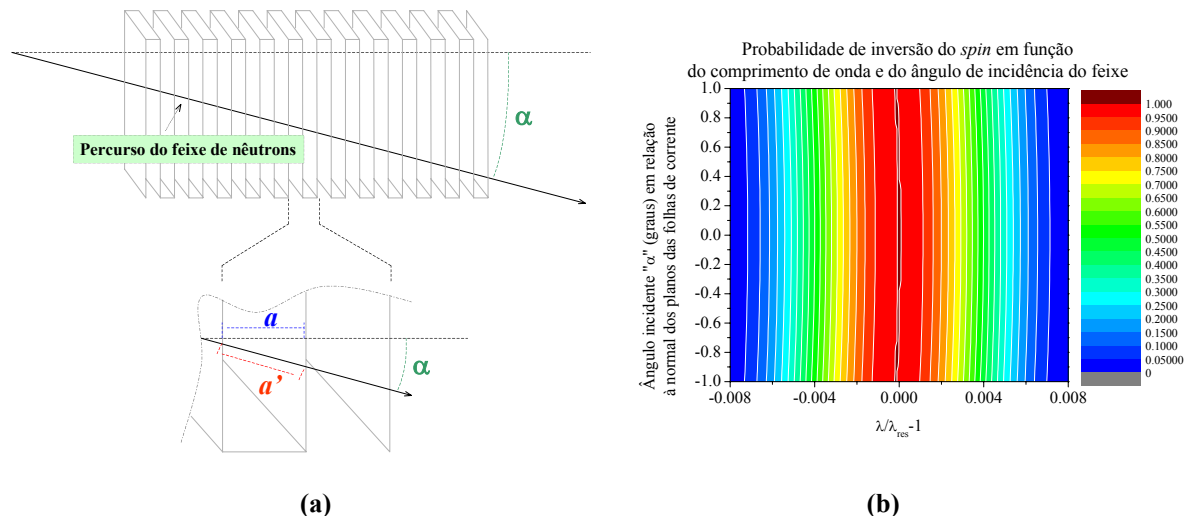


Figura 7.1 – (a) A distância efetiva a' entre duas folhas de corrente muda em função do ângulo α . (b) Esta distorção gera um pequeno deslocamento da ressonância espacial de *spin*.



Figura 7.2 – O filtro montado a partir do protótipo de Brookhaven (esquerda) e os equipamentos de controle e monitoração (direita), na execução do primeiro experimento, no instrumento POSY I (*Intense Pulsed Neutron Source – Argonne National Laboratory*).

Tivemos a oportunidade de confirmar experimentalmente a insensibilidade angular do dispositivo. Resultados obtidos na medição da sensibilidade angular do inversor de *spin* por ressonância espacial são apresentados na figura 7.3. Constatou-se que o sistema se mostra muito mais sensível à instabilidade das fontes de corrente utilizadas e aos ruídos magnéticos provenientes de outras fontes de campo do que à divergência angular do feixe aplicado ao inversor seletivo de *spin* por ressonância espacial.

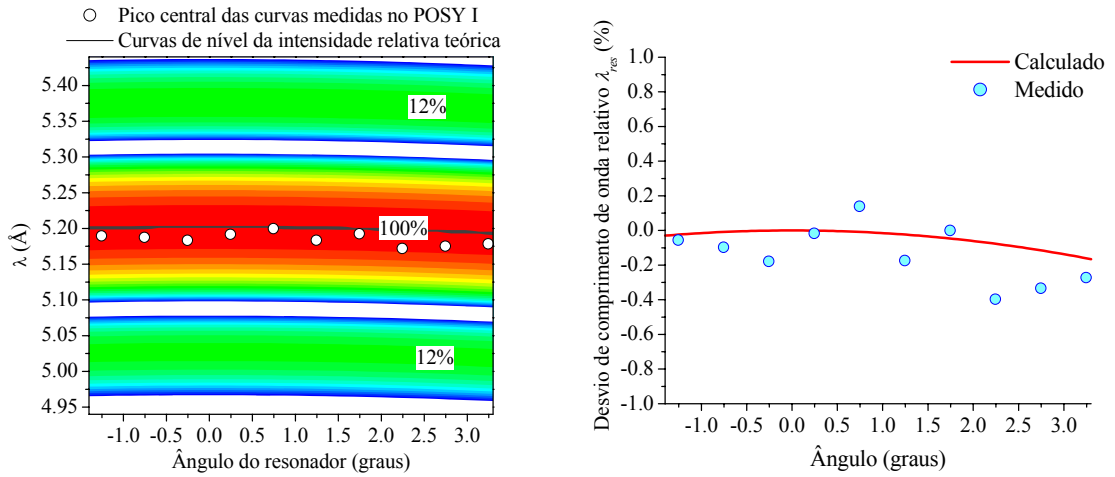


Figura 7.3 – Cálculos e medições da sensibilidade angular do inversor de *spin* por ressonância espacial. As medidas foram efetuadas no reflectômetro polarizado POSY I, na *Intense Pulsed Neutron Source* (Argonne National Laboratory, EUA), em março de 2001.

7.2 INFLUÊNCIA DAS DISTÂNCIAS ENTRE OS ELEMENTOS NA LINHA DE NÊUTRONS

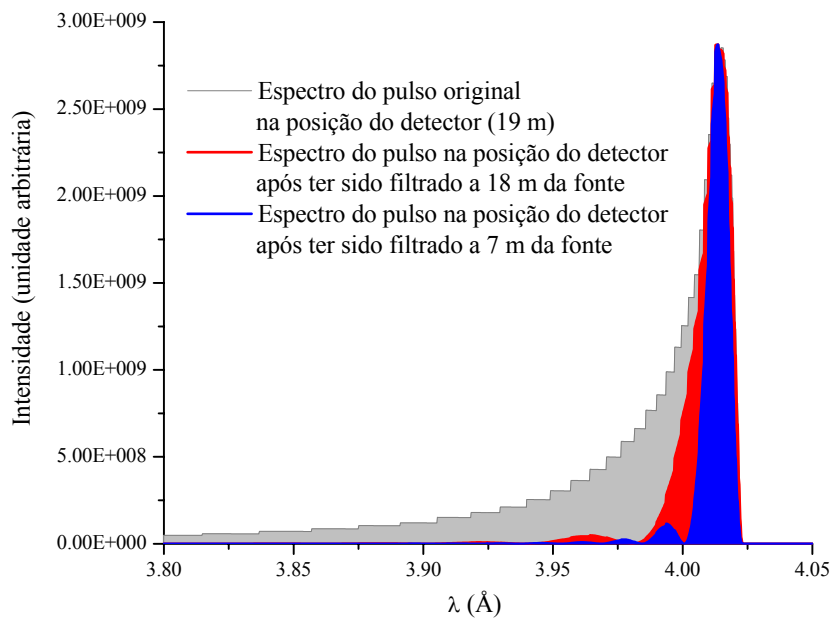


Figura 7.4 – Filtragens emuladas para diferentes posições do filtro na linha de nêutrons, utilizando um filtro de 200 folhas de corrente (inversões de H_{per}).

Foram também estudadas diferentes possibilidades para o posicionamento do filtro na linha. Como se pode observar a partir das curvas de nível das figuras 2.2 e 2.3 que à medida que o feixe se afasta da fonte, nêutrons de diferentes comprimentos de onda ficam

mais separados em tempo, diminuindo a largura dos espectros instantâneos. Visto que o nosso filtro, operando de forma dinâmica (ressonância ajustada para o comprimento de onda nominal de cada instante), corta o espectro de forma aproximadamente igual em qualquer posição, se cortarmos o espectro na posição do detector, a incerteza de comprimento de onda será aproximadamente a largura do “corte” feito pelo filtro. Porém, se o mesmo filtro, com as mesmas características, for posicionado mais próximo da fonte, o espectro será “cortado” com a mesma largura nesta nova posição e, pelo feixe viajar uma certa distância até o detector, o espectro aparecerá ainda mais estreitado. Portanto, para um número fixo de folhas de corrente, quanto mais próximo da fonte e longe do detector estiver o filtro, melhor será o fator de mérito da distribuição resultante. Os resultados de filtrações emuladas mostraram o efeito esperado na figura 7.4.

7.3 PERDA DE EFICIÊNCIA PROVENIENTE DE IMPERFEIÇÕES NOS PERFIS MAGNÉTICOS

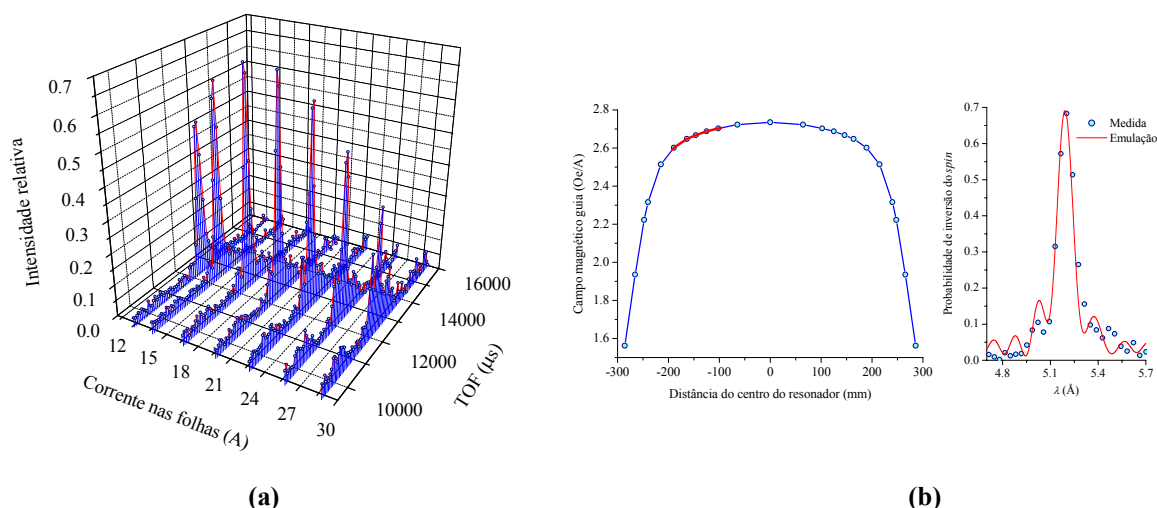


Figura 7.5 – (a) Calibração da corrente do ressonador. (b) Efeitos das distorções no campo guia (região ativa em vermelho na curva do perfil do campo magnético).

A figura 7.2 mostra um protótipo do filtro montado com um inversor de *spin* por ressonância espacial cedido pelo *Brookhaven National Laboratory* (esquerda), o qual possui uma uniformidade de campo considerada muito baixa para nossa aplicação – veja a figura 7.5(b). Além disso, a presença de diversas fontes externas de campo próximas ao equipamento a ser testado (ímãs permanentes e laços de corrente utilizados para a operação de outros elementos da linha, como o analisador de *spin* e o inversor de *spin* de banda larga) geram um campo magnético de fundo com gradientes não desprezíveis na região ativa do ressonador. Outro fator que reduziu consideravelmente a eficiência máxima atingível da

configuração montada para este experimento foi a presença de defeitos internos de conexão entre os blocos de folhas de Alumínio (este é um protótipo muito antigo, porém era único prontamente disponível na época), forçando-nos a utilizar os blocos próximos às bordas do ressonador, com uma uniformidade de campo ainda pior (veja a curva em vermelho na figura 7.5(b)).

As medidas foram feitas no instrumento POSY I (IPNS, Argonne) e os equipamentos de controle e monitoramento também são mostrados na figura 7.2 (à direita). A calibração da relação entre os campos sob as condições do experimento foi feita como mostrado na figura 7.5(a), buscando a eficiência máxima no comprimento de onda ressonante. A eficiência mais alta que conseguimos obter neste experimento foi cerca de 70% de probabilidade de inversão para o TOF/ λ ressonante, o qual está muito abaixo do que se espera obter com um primeiro protótipo para a SNS, mas que se ajusta razoavelmente bem às emulações executadas com os perfis magnéticos medidos para esta configuração - figura 7.5(b).

7.4 INFLUÊNCIA DOS ELEMENTOS ÓTICOS NO DESEMPENHO DO FILTRO

Um estudo foi feito para determinar a influência dos elementos óticos (polarizador e analisador) no desempenho do filtro (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii). O motivo mais forte que evitou a utilização de forma permanente de inversores por ressonância espacial de Drabkin em instrumentos foi o fato de não se obter uma diferença suficientemente alta entre as seções de choque para cada estado do *spin*, o que resulta em alto *background* (ruído de fundo) no espectro resultante dos feixes filtrados. No entanto, estas aplicações foram geralmente implementadas em fontes baseadas em reatores, onde se tentava filtrar um espectro “branco” (o espectro é na verdade limitado e altamente não uniforme, mas em experimentos com espalhamento de nêutrons é comum chamar os feixes criados em reatores de “feixes brancos”, sendo de fato possível aproximar faixas relativamente estreitas do espectro como uniformes). Os resultados desse estudo foram publicados em [38] (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii) e apresentamos a seguir apenas algumas conclusões gerais, que também foram levadas em consideração na emulação conclusiva desta dissertação.

A figura 7.6 mostra a probabilidade resultante de inversão do *spin* calculada com o programa de emulação desenvolvido, levando-se em consideração a razão de inversão de reflectividade dependente do *spin* (*spin reflectivity ratio*, $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow$) do polarizador, dada pela

razão entre as intensidades de cada estado de *spin* logo após o polarizador refletindo um feixe originalmente não polarizado (contendo a mesma intensidade para ambos os estados de *spin*).

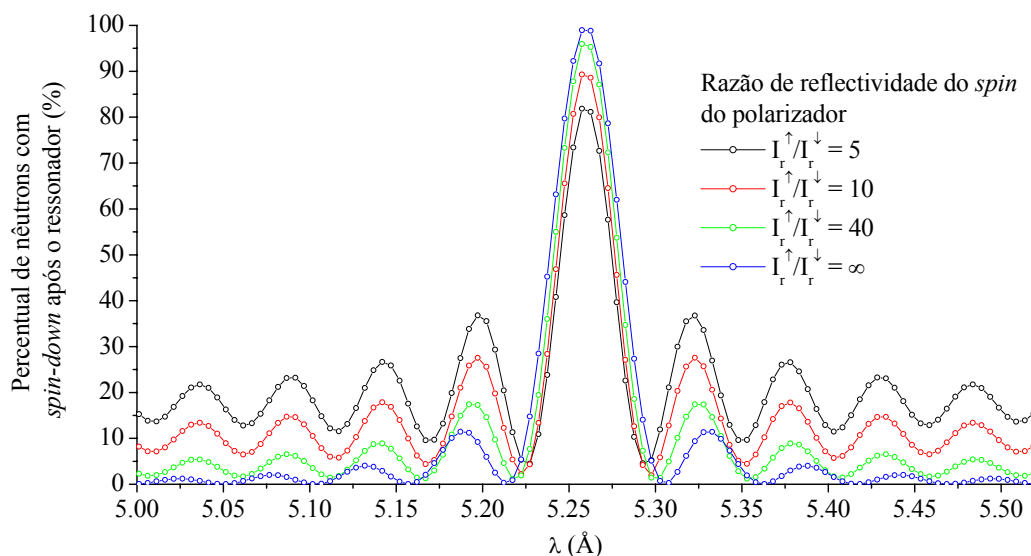


Figura 7.6 – Cálculo do percentual de nêutrons com *spin* down presentes logo após o ressonador para diferentes razões $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow$ características de *supermirrors* polarizadores.

A figura 7.7 compara a largura do espectro a meia intensidade (FWHM, do Inglês *Full Width at Half Maximum*) e o desvio padrão das distribuições resultantes em relação à ressonância central para as probabilidades da figura 7.6 aplicadas a um espectro branco (aplicação em reator nuclear de pesquisa) e ao espectro de uma fonte pulsante (espectro do moderador de Hidrogênio líquido a ser usado nas linhas dos reflectômetros da SNS), considerando o elemento analisador seja ideal (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii).

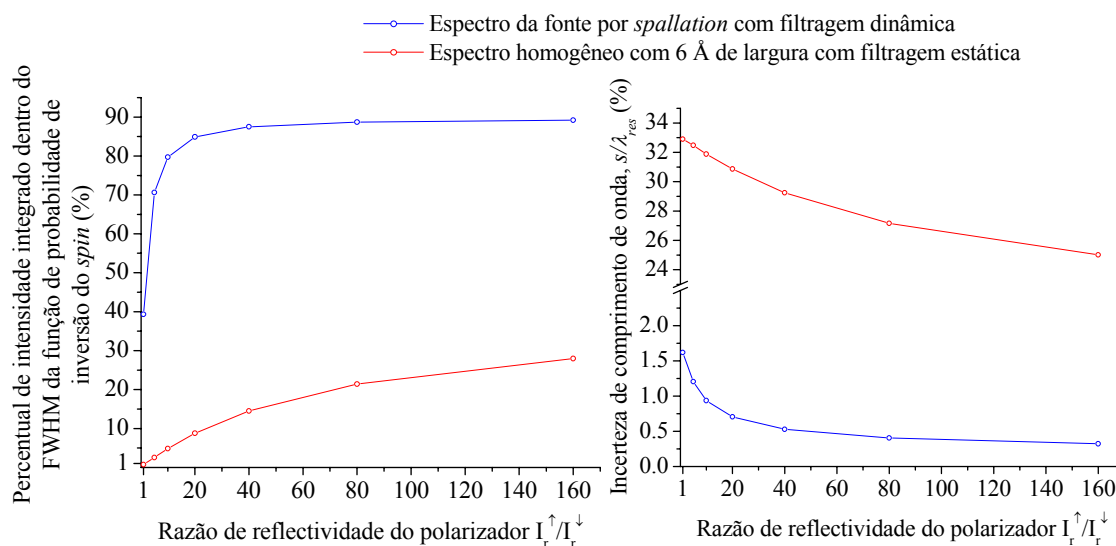


Figura 7.7 – Cálculo da incerteza de comprimento de onda em função da razão de reflectividade do elemento polarizador (assumindo um analisador ideal, ou seja, razão de transmissão do analisador $I_r^\downarrow/I_r^\uparrow = \infty$) – s é o desvio padrão da distribuição resultante (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii).

As figuras 7.8 e 7.9 apresentam uma comparação semelhante, incluindo a influência das razões de transmissão e reflectividade do *spin* para o analisador.

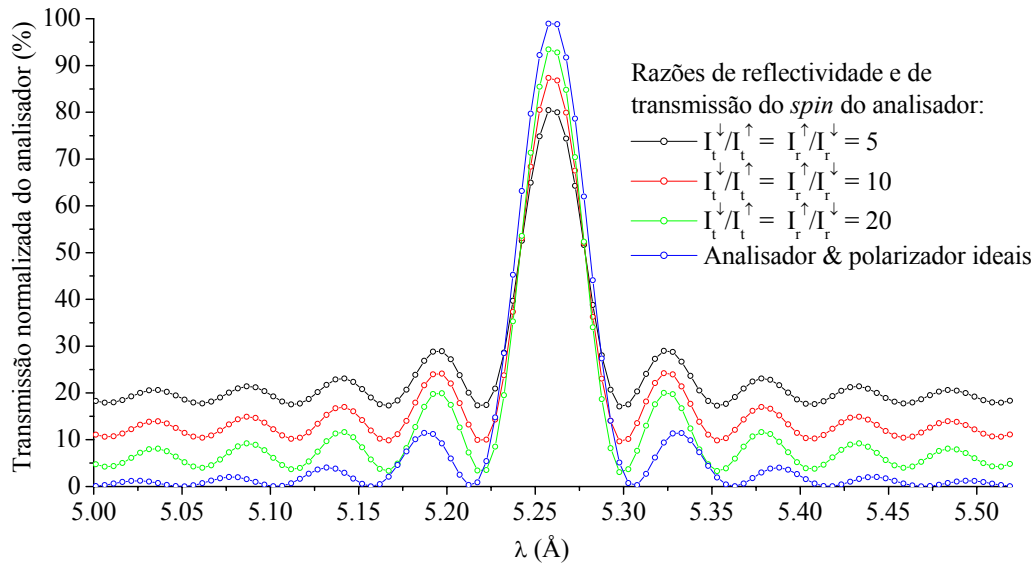


Figura 7.8 – Cálculo da transmissão resultante do analisador em função do comprimento de onda para diferentes razões $I_t^\downarrow/I_t^\uparrow = I_r^\uparrow/I_r^\downarrow$ assumindo uma razão de reflectividade do *spin* $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow = 30$ para o polarizador, comparando os resultados ao caso de polarizador e analisador ideais.

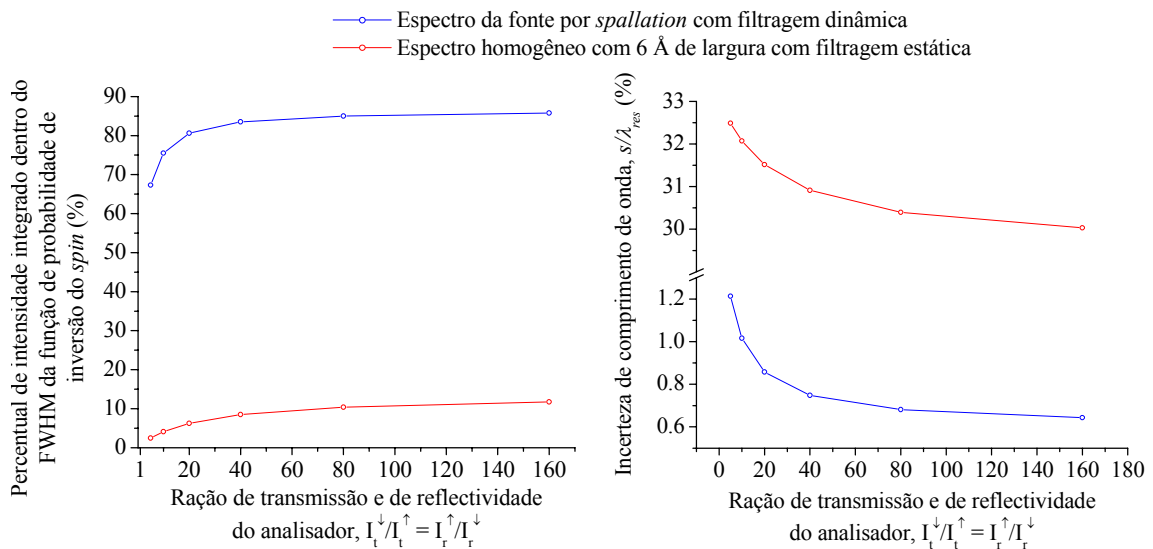


Figura 7.9 – Cálculo ilustrando a influência da razão de transmissão de *spin* do analisador sobre a incerteza de comprimento de onda (assumindo uma razão de reflectividade do *spin* $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow = 30$ para o polarizador).

Na análise da influência do analisador, assumimos uma razão de reflectividade $I_r^\uparrow/I_r^\downarrow = 30$ para o polarizador (valor típico da tecnologia corrente). Enfim, concluiu-se que, embora o uso do filtro proposto em reatores (espectro considerado aproximadamente homogêneo e constante em função do tempo, para bandas estreitas de comprimento de onda) exija a obtenção de elementos polarizadores e analisadores com desempenho muito acima da

tecnologia corrente, a filtragem feita com operação dinâmica em fontes pulsantes oferece um desempenho próximo do ideal usando elementos óticos com razões de transmissão e reflectividade acima de 20 (que atualmente são facilmente obtíveis na prática). Enfim, estimamos que pouco ganho de desempenho é obtido com o uso de elementos com razões muito acima desta.

7.5 EMULAÇÃO DE UM EXPERIMENTO COMPLETO (VERIFICAÇÃO DO DESEMPENHO POTENCIAL DO FILTRO EM OPERAÇÃO DINÂMICA)

Agregando todos os estudos feitos separadamente durante este projeto, chegamos a um cálculo mais realista da performance do sistema proposto. A partir dos dados obtidos de simulação Monte Carlo para a estrutura temporal da fonte a ser usada (IVERSON, 2000 - ii) ($t_{partida} = t_{pico}$, definido na seção 6.1.1 e ajustado a uma função na figura 2.2), se obteve um perfil desejado de campo magnético ao longo do ressonador em função do tempo, conforme as definições da seção 6.1.1. Aplicando essa curva ao perfil de campo da figura 6.4 se obtém o perfil magnético em função do tempo e da distância da fonte. É então adicionada a distorção de campo inserida pelas correntes parasitas (calculada conforme mostrado na seção 6.2), com um ajuste adiantamento de fase de 1049 μs , resultando em erro relativo mostrado, para o centro do ressonador, na figura 7.10, dentro da banda a ser utilizada (de 3,5 Å a 5 Å, equivalente a uma banda de TOF aproximadamente de 8,7 ms a 12,4 ms na posição emulada).

O exemplo emulado é um experimento simples de medição da espessura de uma camada única de 0,7 μm de Níquel sobre um substrato de Silício. A espessura da camada é obtida a partir de um ajuste de curva feito sobre um perfil de reflectividade. Esta medida de reflectividade é um experimento de espalhamento elástico, normalmente feita em função do chamado “vetor de espalhamento” q , dado por (SQUIRES, 1992)

$$q = \frac{4 \cdot \pi}{\lambda} \cdot \text{sen}(\theta), \quad (40)$$

onde λ e θ são o comprimento de onda e o ângulo do feixe incidente. Como este é um espalhamento elástico, os comprimentos de onda dos nêutrons resultantes são os mesmos dos incidentes. Logo, para um ângulo fixo, é possível descrever esta curva em função do comprimento de onda, facilitando a compreensão do processo de medida, convertendo o resultado em função de q posteriormente. Em um experimento de TOF, cada instante tem seu comprimento de onda nominal, mas a reflectividade real da amostra não é “amostrada por” um impulso ideal, mas sim com um pulso que tem a forma apresentada na capítulo 2, com

uma “cauda”. O termo “amostrada por” foi utilizado apenas para dar uma idéia intuitiva do processo, pois o mais correto seria dizer que “a curva real de reflectividade é convoluída com a forma do pulso de nêutrons” – veja a figura 7.11(a) – resultando em uma curva “parecida” com a real, a qual é, de certa forma, ajustada a uma curva ideal para a determinação da espessura de camadas (SQUIRES, 1992).

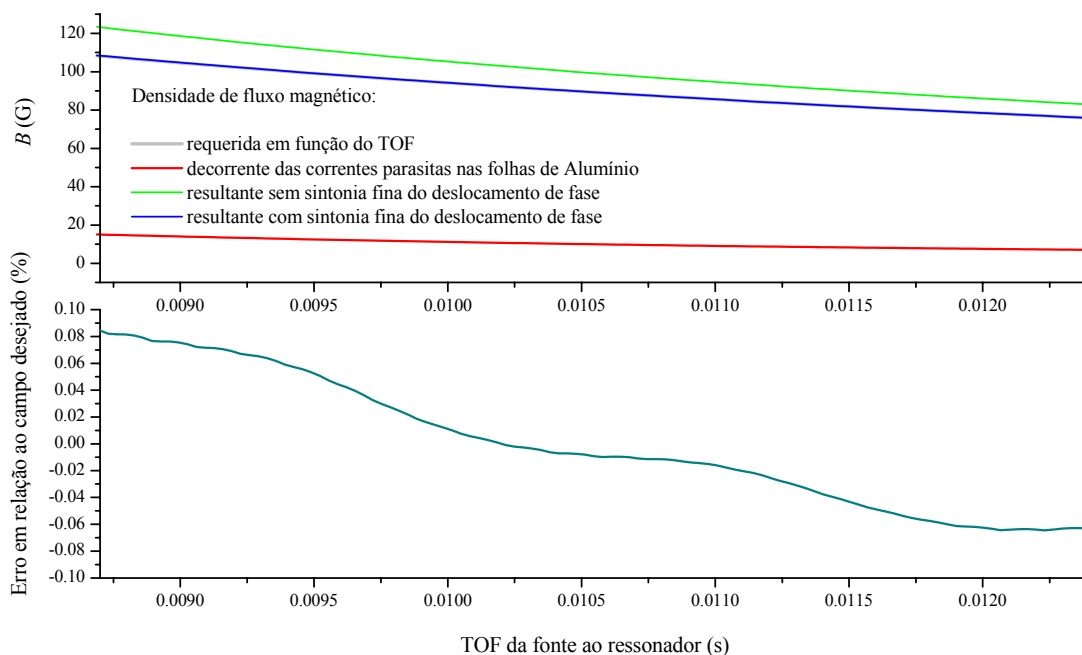


Figura 7.10 – Cálculo aproximado do campo resultante no ponto central do ressonador descrito na seção 6.1.3.2, sendo mostrada a densidade de fluxo magnético obtida com o ajuste de fase (curva em azul) e o erro percentual do campo, em relação aos valores ótimos na faixa ativa de TOF (equivalente aos comprimentos de onda a serem medidos – de 3,5 Å a 5 Å).

Foram também incluídos neste cálculo os efeitos dos elementos polarizador e analisador com todas as razões de reflectividade e transmissão tendo o valor 30, além de uma divergência angular de $0.625 \cdot 10^{-3}^\circ$ e um passo de integração temporal (conhecido como *time binning*) de $10 \mu s$. Conclui-se, observando a figura 7.11(b), que uma medida muito mais próxima da reflectividade real da amostra pode ser obtida com o uso do filtro proposto (curva em azul)

Um fator muito importante que não está incluído nestas emulações e que deve ser considerado em análises futuras é a influência das estatísticas de contagem de nêutron no detector com e sem o uso do equipamento, onde é levada em consideração a absorção dos elementos postos no caminho do feixe (folhas de Alumínio, polarizador e analisador) e avaliação do tempo necessário para se efetuar as medidas. Este passo deverá ser executado

agregando o modelamento aqui desenvolvido a módulos de simulação Monte Carlo (LEE *et al.*, 2002) e em experimentos futuros.

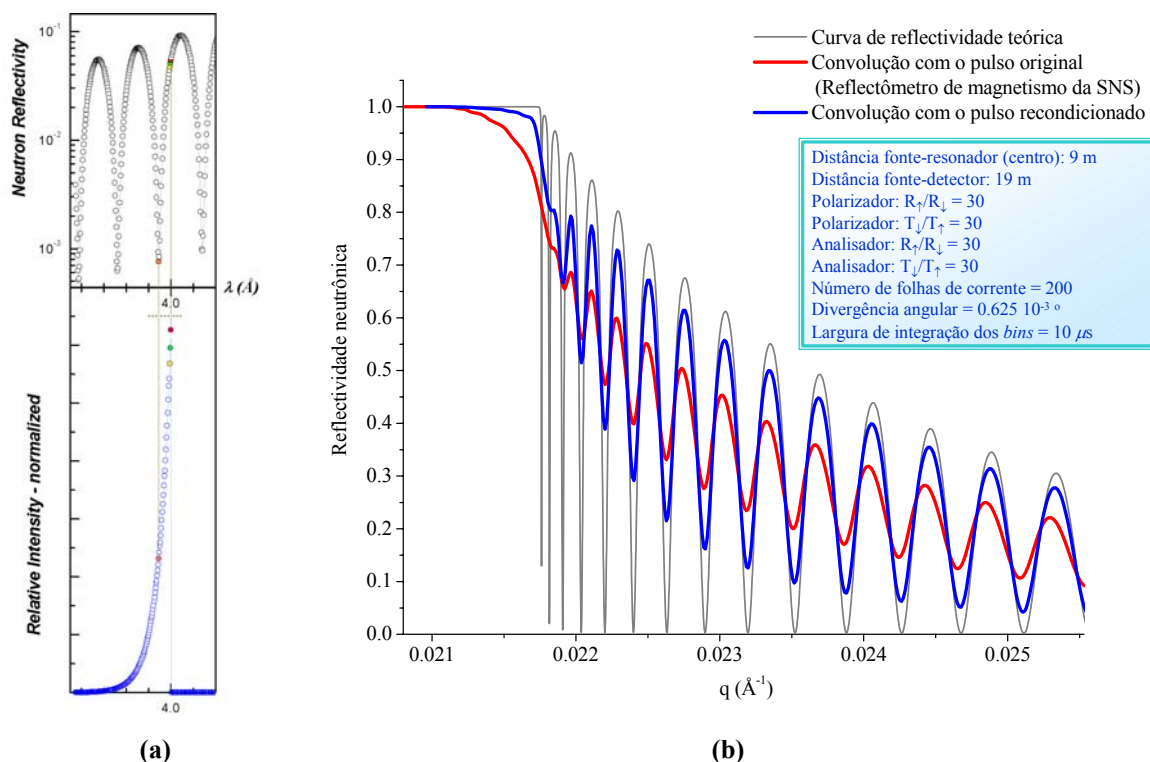


Figura 7.11 – (a) As medidas de reflectividade são modeladas como uma convolução entre a curva real de reflectividade e a forma de pulso do feixe incidente. (b) Exemplo de resultados esperados para um experimento convencional de reflectividade no reflectômetro de magnetismo da SNS e um experimento com a utilização do filtro proposto. Esta medida foi emulada para operação na faixa entre 3,5 Å e 5 Å.

7.6 COMENTÁRIOS FINAIS

Nesta dissertação um novo conceito de remodelamento de pulsos neutrônicos através da aplicação da ressonância espacial do *spin* foi analisado teoricamente. A especificação de perfis de campo magnético e as implicações de se operar o equipamento de forma variante no tempo foram detalhadas, e cálculos determinando o desempenho potencial do sistema foram desenvolvidos. O projeto SNS prosseguirá estudando e desenvolvendo este filtro, preparando protótipos próprios com base na avaliação de desempenho aqui apresentada. Pelo menos dois protótipos devem ser desenvolvidos. Um que se adapte à operação no Reflectômetro para Estudos de Magnetismo, mas que também possa ser testado linhas de nêutrons de diferentes instrumentos (conforme descrito no capítulo 6 desta dissertação) e outro dedicado à estudos inelásticos, com capacidade ainda mais alta de resolução, tendo porém peso e volume maiores. Protótipos mais dedicados à operação em instrumentos específicos podem ser desenvolvidos fazendo usos dos métodos apresentados.

O foco do trabalho desenvolvido foi a compreensão dos fenômenos envolvidos no processo de filtragem proposto e o desenvolvimento de métodos e ferramentas para projeto de filtros desta natureza, tendo em vista as dificuldades de preparação de protótipos e de experimentos para teste de instrumentação neutrônica. Conseguimos demonstrar através da emulação final que ganhos consideráveis de resolução de comprimento de onda são obtidos com a aplicação do filtro proposto. Portanto, a aplicação que serviu de motivação inicial para o estudo deste filtro (o remodelamento de pulsos) é a mais direta para o equipamento, permitindo que instrumentos baseados em linhas de nêutrons de alto fluxo não tenham sua resolução permanentemente afetada pelas características temporais dos pulsos entregues por um determinado moderador. O sistema pode também servir de base para novos tipos de instrumentos de espalhamento de nêutrons – e.g. espectrometros por ressonância espacial de *spin* (PARIZZI *et al.*, 2002 - iv).

O desenvolvimento desses métodos, a formalização do conceito de filtragem dinâmica por ressonância espacial de *spin* e as possibilidades de avanços em instrumentação neutrônica com o uso do sistema estudado geraram 5 publicações (PARIZZI *et al.*, 2001 - ii; PARIZZI *et al.*, 2001 - i; PARIZZI *et al.*, 2001 - iii; PARIZZI *et al.*, 2002 - ii; PARIZZI *et al.*, 2002 - iv), 1 trabalho individual (PARIZZI *et al.*, 2002 - i) e dezenas de relatórios internos de projeto (PARIZZI, 2002 - iii). Além de ser tema de 2 palestras dentro do projeto SNS e da apresentação do seminário de andamento previsto no programa de mestrado, o trabalho foi apresentado em 3 conferências (ICANS 2000 – Japão –, SPIE 2001 – EUA – e ICNS 2001, Alemanha) e 1 *workshop*, sendo selecionado para apresentação oral em todas essas oportunidades. Tendo passado pelo criticismo de *referees* e de audiências especializadas nas conferências, o projeto ganhou a credibilidade necessária para que se iniciasse o processo de compra de materiais e de montagem de protótipos próprios. Os testes desses protótipos estão sendo propostos e deverão gerar, juntamente com o desenvolvimento detalhado de novos conceitos de instrumentos (PARIZZI *et al.*, 2001 - iii), material suficiente e de alta qualidade para a preparação de uma tese de doutorado em instrumentação neutrônica.

Juntamente com a aquisição de novos conhecimentos na área de pesquisa de materiais, a criação de canais para o estabelecimento de novos contatos e colaborações que permitam que pesquisadores brasileiros tenham mais oportunidades na utilização de técnicas de ponta na análise de materiais (seja em instalações na América Latina, América do Norte ou na Europa) foi também um aspecto fundamental deste projeto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS E FONTES DE CONSULTA

- [1] AGAMALIAN, M.M.; DERIGLAZOV, V.V. *Soviet Physics JETP*, **56 (1)**, p.166 (1983).
- [2] AGAMALIAN, M.M.; DRABKIN, G.M.; SBITNEV, V.I. *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)*, **168**, p.265 (1988).
- [3] BACON, G.E. *Neutron Diffraction*, terceira edição, Clarendon Press, Oxford (1975).
- [4] BADUREK, G.; KOLMAR, A.; SEEGER, A.; SCHALT, W. *Nuclear Instruments and Methods*, **A309**, p.275-283 (1991).
- [5] BLUME, M. *Physics Rev.*, **130**, p.1670 (1963).
- [6] BLUME, M. *Physics Rev.*, **133**, A p.1366 (1964).
- [7] CARPENTER, J.M. *Nuclear Instruments and Methods*, **145**, p.91-113 (1977).
- [8] CARPENTER, J.M. comunicação privada e notas pessoais (2000).
- [9] CHOU, W.; ISHIMARU, H. *Particle Accelerator Conference Proceedings – PAC-97 (Vancouver, B.C., Canada) - IEEE*, p.110-112 (1998).
- [10] CHRISTENSEN, U.R. *Princeton Plasma Physics Laboratory Report*, **PPPL 1516** (1979).
- [11] CHRISTOPH, VOLKER *Programa de computador para a solução da equação de movimento do nêutron (cálculos de campos magnéticos e do comportamento do spin incluídos)*, desenvolvido pelo HTW (Dresden – Alemanha), em colaboração com o projeto SNS (2001).

- [12] DANIEL, J.W.; MOORE, R.E. *Computation and Theory in Ordinary Differential Equations*, W. H. Freeman and Company, San Francisco (1970).
- [13] DRABKIN, G.M. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **43**, p.1107 (1962).
- [14] DRABKIN, G.M.; TRUNOV, V.A.; RUNOV, V.V. *Soviet Physics JETP*, volume **27-2**, p.194-196 (1968).
- [15] FADDEEV, D.K.; FADDEEVA, V.N. *Computational Methods of Linear Algebra*, W. H. Freeman and Company, San Francisco (1963).
- [16] FELCHER, G.P. comunicação privada e notas pessoais (2000).
- [17] FEYNMAN, R.P.; LEIGHTON, R.B.; SANDS, M. *Lectures on Physics, Quantum Mechanics, Volume 3*, Addison-Wesley, Reading, MA (1965).
- [18] GUREVICH, I.I.; TARASOV, L.V. *Low-Energy Neutron Physics*, North-Holland, Amsterdam (1968).
- [19] HALPERN, O.; JOHNSON, M.H. *Physics Rev.*, **55**, p.898 (1939).
- [20] HAYTER, J.B. *Neutron diffraction*, capítulo **2**, Springer – Berlim (1978).
- [21] HENRICI, P. *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1962).
- [22] HUGHES, D.J.; BURGY, M.T. *Physics Rev.*, **81**, p.498 (1951).
- [23] IVERSON, E.B. comunicação privada (2000 - i).
- [24] IVERSON, E.B. “Detailed SNS neutronic calculations for scattering instruments design”, SNS/TSR – **203**, POI5 configuration, documentação de projeto, (13 de setembro de 2000 - ii).
- [25] KAMEARI, A. *Journal of Computational Physics*, **42**, p.124-140 (1981).
- [26] KLOSE, F. “Design criteria document for the SNS magnetism reflectometer”, SNS-**07050000-DC00001** (2000).
- [27] KRIST, T.; KLOSE, F.; FELCHER, G.P. *Physica B*, **248**, p.372 (1998).

- [28] LEE, W.-T.; WANG, X.-L.; ROBERTSON, J.L.; KLOSE, F.; REHM, C. **Applied Physics A. Material Science & Processing (supplement ICNS 2001)**, (aceito em 2001 para publicação em 2002).
- [29] LOVESEY, S.W. *Dynamics of solids and liquids by neutron scattering, Topics in Current Physics, Volume 3*, Springer – Berlim, Heidelberg – Nova Iorque (1977).
- [30] MAJKRZAK, C.F.; GLINKA, C.J.; SATIJA, S.K. *SPIE Proceedings*, **983**, p.129-143 (1988).
- [31] MAJKRZAK, C.F.; PASSEL, L.; SAXENA, A.M. *AIP Proceedings*, **89**, p.131-134 (1981).
- [32] MARSHALL, W.; LOVESEY, S.W. *Theory of Thermal Neutron Scattering*, Clarendon Press, Oxford (1971).
- [33] MOON, R.M.; RISTE, T.; KOEHLER, W.C. *Physics Rev.*, **181**, p.920 (1969).
- [34] Página na Internet de constantes universais do *National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce*, <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html> (2002).
- [35] PARIZZI, A.A. Relatórios mensais do projeto do filtro de energia, SNS, (2000-2002 - iii).
- [36] PARIZZI, A.A.; FELCHER, G.P.; KLOSE, F. *Proceedings of ICANS-XV (2000)*, **Volume I**, p.572-580, Instituto Japonês de Pesquisa em Energia Atômica, Tsukuba – Japão (2001 - ii).
- [37] PARIZZI, A.A.; LEE, W.-T.; FELCHER, G.P.; KLOSE, F. “*Decoupled moderators – Do we always need them? Or: a new approach for pulse reshaping*”, *Journal of Neutron Research*, aceito para publicação (2001 - i).
- [38] PARIZZI, A.A.; LEE, W.-T.; KLOSE, F. “*Requirements for the optical elements of a spin-resonance energy filter for neutrons at reactor and pulsed source instruments*”, *SPIE Proceedings (Neutron Optics)*, **4509**, p.114-125 (2001 - iii).

- [39] PARIZZI, A.A.; LEE, W.-T.; KLOSE, F. “*Modeling the spin-flip process in a time-of-flight spin-resonance energy filter*”, ***Applied Physics A. Material Science & Processing (supplement ICNS 2001)***, (aceito em 2001 para publicação em 2002 - ii).
- [40] PARIZZI, A.A.; LEE, W.-T.; KLOSE, F. “Possibilities for polarized pulsed neutron instrumentation based on the time-of-flight spin resonance energy filter”, ***Applied Physics A. Material Science & Processing (supplement ICNS 2001)***, (aceito em 2001 para publicação em 2002 - iv).
- [41] PARIZZI, A.A.; PEREIRA, C.E.; KLOSE, F. “*Estudo e previsão de performance de um filtro de energia para experimentos com alta resolução de comprimento de onda em fontes pulsantes de nêutrons: Equacionamento básico e modelamento do filtro de energia por ressonância espacial de spin*”, ***Trabalho Individual, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul*** (2002 - i).
- [42] PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; AND VETTERLING, W. T. ***Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing, 2nd ed.*** Cambridge, England: Cambridge University Press , capítulo 3 (1992).
- [43] PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; AND VETTERLING, W. T. ***Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing, 2nd ed.*** Cambridge, England: Cambridge University Press, capítulo 16 (1992).
- [44] SCHERMER, R.I.; BLUME, M. ***Physics Rev.***, **166**, p.554 (1968).
- [45] SCHIFF, L.I. ***Quantum Mechanics***, capítulo 10, terceira edição, McGraw-Hill (1968).
- [46] SCHWINGER, J. ***Physics Rev.***, **51**, p.544 (1937).
- [47] SEEGER, P.A.; DAEMEN, L.L. ***Nuclear Instruments and Methods***, **A457**, p.338-346 (2001).
- [48] SQUIRES, G. L. ***Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering***, Dover, Mineola, NY (1992).

- [49] TUM Brochure, *Research with neutrons – Experimental facilities at FRM-II*, Technische Universität München (2001).
- [50] VILENKIN, N.J. *Special functions and the theory of group representations*, capítulo 3, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island (1968).
- [51] WEINSTEIN, R.; BOLTAX, A.; LANZA, G. *Nuclear Engineering Fundamentals*, McGraw-Hill (1964).
- [52] WEISSENBURGER, D.W.; CHRISTENSEN, U.R. *Princeton Plasma Physics Laboratory Report, PPPL 1517* (1979).
- [53] WEISSENBURGER, D.W.; CHRISTENSEN, U.R. *IEEE Transactions on Magnetics*, **MAG-18**, No. 2, p.422-425 (1982).
- [54] ZAKY, A.A.; HAWLEY, R. *Fundamentals of Electromagnetic Theory*, Harrap, London (1974).

Outras fontes consultadas durante a geração deste relatório

- *Acumulator Ring Poster*, Brookhaven National Lanoratory, documentos internos de Projeto, SNS (2000).
- BENDAT, J.S.; PIERSOL, A.G. *Random data: analysis and measurement procedures*, Wiley, Nova Iorque (1986).
- BEVINGTON, P.R. *Data reduction and data analysis for the physical sciences*, capítulo 2, McGraw-Hill (1969).
- BRUN, T.O. et. al. (Centro de Ciência de Nêutrons de Los Alamos – *Los Alamos National Laboratory* e Departamento de Química do *Brookhaven National Laboratory*), Characteristics of the partially-coupled liquid hydrogen moderator at the Manuel Lujan, Jr. Neutron Scattering Center, documentação do seminário em espalhamento de nêutrons, *Los Alamos National Laboratory* (2000).
- CIOVATI, G. et. al. (*Jefferson Lab*, ORNL-SNS, INFN Milano, LANL, INFN Genova, DESY, Univ. Helsinki), “*Superconducting prototype cavities for the Spallation Neutron Source (SNS) project*”, documentação de projeto, SNS (2001).
- DRABKIN, G.M.; RUBAN, V.A.; SBITNEV, V.I. *Zh. Tekh. Fiz.*, **42**, p.1076 (1972).
- FITZSIMMONS, M.R. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, **383**, p.549-565 (1996).
- GRIGORIEV, S.V.; RUNOV, V.V.; OKOROV, A.I.; TRETAKOV, A.D.; GUBIN, O.A.; KOPITSA, G.P.; RUNOVA, M.K. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, **389**, p.441-446 (1997).
- *IPNS Progress Report 1996-2001*, Information and Publishing Division, Argonne National Laboratory (2001).

Websites consultados

Argonne National Laboratory, www.anl.gov

Australian Nuclear Science and Technology Organisation, www.ansto.gov.au

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, www.cbpf.br

Eric Weisstein's World of Mathematics, www.mathworld.wolfram.com

Intense Pulsed Neutron Source, www.pns.anl.gov

ISIS, www.isis.rl.ac.uk

Lawrence Berkeley National Laboratory, www.lbl.gov

National Institute of Standards and Technology, www.nist.gov

Projeto SNS, www.sns.gov

Thomas Jefferson National Accelerator Facility, www.jlab.org

Fontes adicionais usadas no projeto

- MAJKRZAK, C.F. comunicação privada e notas pessoais (2000).
- PASSEL, L. comunicação privada e notas pessoais (2000).