
MODELAGEM DE ESPECTROS DE LINHAS DE DESEXCITAÇÃO NUCLEAR EM EXPLOSÕES SOLARES UTILIZANDO O PACOTE MONTE CARLO FLUKA

Raphael Malagoli Thereza¹, Sergio Szpigel¹, Carlos Guillermo Giménez de Castro^{1,2}, Alexander L. MacKinnon³, Paulo José A. Simões¹

¹ Centro de Rádio-Astronomia e Astrofísica Mackenzie (CRAAM), Escola de Engenharia, Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, Brazil

² Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET, Buenos Aires, Argentina

³ School of Physics and Astronomy, University of Glasgow, Glasgow, UK

Resumo

A modelagem de espectros de emissão de raios- γ observados em explosões solares é geralmente realizada via melhor ajuste de dados utilizando-se um conjunto de *templates* e funções independentes para as componentes espectrais produzidas pelos vários processos relevantes (*bremstrahlung* de elétrons e pósitrons, desexcitação nuclear, captura de nêutrons, aniquilação de pósitrons e decaimento de píons). Trabalhos recentes têm demonstrado o potencial do pacote Monte Carlo FLUKA como ferramenta efetiva para a simulação de processos nucleares no contexto de explosões solares, bem como sua capacidade de implementar um tratamento autoconsistente de todas as componentes típicas de espectros de emissão de raios- γ observados. Neste trabalho, implementamos uma nova estratégia de simulação com o FLUKA que permite melhorar a estatística e a resolução em energia dos espectros de emissão de raios- γ gerados. Utilizando essa estratégia, calculamos espectros de linhas de desexcitação nuclear que apresentam boa concordância com os calculados com o código desenvolvido por Murphy *et al.* (2009), considerando os mesmos parâmetros de modelo. A partir desses espectros, construímos *templates* que podem ser incorporados ao

programa Objective Spectral Executive (OSPEX) e utilizados na análise de dados de emissão de raios- γ de eventos observados com instrumentos tais como o *Gamma-ray Burst Monitor* (GBM) e o *Large Area Telescope* (LAT), ambos a bordo do satélite Fermi, e o *Reuven Ramaty High Energy Spectroscopic Imager* (RHESI).

Palavras-chave: Explosão solar. Linhas de desexcitação nuclear. FLUKA.

1 INTRODUÇÃO

As explosões solares são eventos transientes e intensos que ocorrem nas regiões ativas da atmosfera solar e resultam em um abrilhantamento repentino observado no disco solar (Tandberg-Hanssen; Emslie, 2009). Esses eventos envolvem a liberação de energias da ordem de 10^{27} a 10^{32} erg em poucas dezenas de segundos até dezenas de minutos. Eventualmente, também podem ocorrer explosões solares de longa duração nas quais se observa emissão de fótons de alta energia ($\sim 0,1$ a $1,0$ GeV) que persiste por várias horas depois que outras manifestações se completaram (Ajello *et al.*, 2014).

De acordo com Priest e Forbes (1992), a energia inicialmente armazenada nos arcos magnéticos próximos das regiões ativas da atmosfera solar é liberada através do processo de reconexão magnética, aquecendo o plasma magneto-ativo ambiente e acelerando elétrons e íons (prótons, partículas- α e núcleos mais pesados). Esse processo resulta na emissão de radiação praticamente em todas as faixas do espectro eletromagnético, de ondas de rádio até raios- γ , através de diversos mecanismos. O plasma magneto-ativo aquecido produz emissão de radiação ultravioleta (UV) e raios-X moles por *bremsstrahlung* de elétrons térmicos (emissão *free-free*). Os elétrons acelerados (não térmicos) produzem emissão de radiação girossincrotrônica na faixa de rádio e micro-ondas e emissão contínua de raios-X duros e raios- γ por *bremsstrahlung*. Os íons acelerados a altas energias (\sim MeV até GeV), que precipitam da coroa para as regiões mais densas da cromosfera e fotosfera próximas aos pés dos arcos magnéticos, produzem emissão de raios- γ através de reações nucleares. Mais detalhes sobre os processos nucleares em explosões solares podem ser encontrados em Vilmer, MacKinnon e Hurford (2011).

Desde o trabalho seminal de Lingenfelter e Ramaty (1967), vários modelos têm sido desenvolvidos para analisar os espectros de emissão de raios- γ observados em explosões solares (Ramaty; Kozlovsky; Lingenfelter, 1979; Dermer, 1986; Kozlovsky; Lingenfelter; Ramaty, 1987; Murphy; Dermer; Ramaty, 1987; Mandzhavidze; Ramaty,

1992; Hua *et al.*, 2002; Kozlovsky; Murphy; Ramaty, 2002; Vilmer *et al.*, 2003; Murphy *et al.*, 2005, 2009; Pelowitz, 2013; Murphy; Share, 2018). Esses modelos envolvem cálculos complexos de aceleração, transporte e interações de partículas primárias e secundárias, e a consequente emissão de raios- γ .

A modelagem e interpretação de espectros de emissão de raios- γ observados são geralmente realizadas via melhor ajuste de dados, utilizando-se um conjunto de *templates* e funções independentes para as componentes espectrais produzidas pelos vários processos relevantes (*bremstrahlung* de elétrons e pósitrons, desexcitação nuclear, captura de nêutrons, aniquilação de pósitrons e decaimento de píons), fornecendo diagnósticos importantes sobre os mecanismos de aceleração de partículas primárias, bem como sobre a estrutura e a evolução do plasma magneto-ativo ambiente.

Em trabalhos recentes (Tuneu, 2016; Tuneu *et al.*, 2017; Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019; MacKinnon *et al.*, 2020), tem sido demonstrado o potencial do pacote Monte Carlo FLUKA (Ferrari *et al.*, 2011; Battistoni *et al.*, 2015) como ferramenta efetiva para a simulação de processos nucleares no contexto de explosões solares, bem como sua capacidade de implementar um tratamento autoconsistente de todas as componentes típicas dos espectros de emissão de raios- γ observados na faixa de energia de centenas de keV a centenas de MeV.

Neste trabalho, implementamos uma nova estratégia de simulação com o FLUKA que permite melhorar a estatística e a resolução em energia dos espectros de emissão de raios- γ gerados (Thereza, 2021). Utilizando essa estratégia, calculamos espectros de linhas de desexcitação nuclear que apresentam boa concordância com os calculados com o código desenvolvido por Murphy *et al.* (2009) considerando os mesmos parâmetros de modelo. A partir desses espectros, construímos *templates* que podem ser incorporados ao programa Objective Spectral Executive – OSPEX (Freeland; Handy, 1998) e utilizados na análise de dados de emissão de raios- γ de eventos observados com instrumentos tais como o *Gamma-ray Burst Monitor* (GBM) e o *Large Area Telescope* (LAT), ambos a bordo do satélite Fermi (Meegan *et al.*, 2009), e o *Reuven Ramaty High Energy Spectroscopic Imager* – RHESSI (Lin *et al.*, 2002).

2 LINHAS DE DESEXCITAÇÃO NUCLEAR EM EXPLOSÕES SOLARES

As interações de elétrons e íons acelerados em explosões solares com os núcleos da atmosfera solar ambiente produzem fótons com energias na faixa de raios- γ através de

diferentes processos (Lang, 2009; Vilmer; MacKinnon; Hurford, 2011). Os elétrons acelerados produzem emissão contínua de raios- γ pelo processo de *bremstrahlung*. Os íons acelerados com energias no intervalo de $\sim 1 - 100$ MeV/núcleon produzem núcleos excitados cuja desexcitação produz emissão de linhas de raios- γ na faixa de $\sim 0,4 - 8$ MeV. Os íons acelerados com energias maiores que $\sim 200 - 300$ MeV/núcleon podem produzir píons secundários que contribuem para a emissão contínua de raios- γ através de processos de decaimento. Os píons neutros (π^0) decaem diretamente em dois fótons de 67,5 MeV. Os píons carregados (π^\pm) decaem em múons (μ^\pm), cujo decaimento subsequente resulta em pósitrons e elétrons secundários que produzem emissão contínua de raios- γ pelo processo de *bremstrahlung*. Os pósitrons também produzem emissão contínua de raios- γ pelo processo de aniquilação em voo, bem como a linha de 511 keV pelo processo de aniquilação em repouso após termalização. As interações dos íons acelerados também podem produzir nêutrons, cuja captura por núcleos de H na fotosfera resulta na linha de 2,223 MeV.

Entre os vários processos de emissão de raios- γ em explosões solares, destaca-se neste trabalho o processo de desexcitação de núcleos excitados produzidos por colisões de íons acelerados com núcleos da atmosfera solar ambiente, que resulta em linhas de emissão na faixa de $\sim 0,4 - 8$ MeV (Ramaty; Kozlovsky; Lingenfelter, 1979; Kozlovsky; Murphy; Ramaty, 2002). As reações denominadas diretas, envolvendo colisões de prótons, partículas- α e ^3He acelerados com núcleos mais pesados da atmosfera solar ambiente, produzem emissão de linhas estreitas devido à velocidade de recuo relativamente baixa dos núcleos pesados excitados, o que resulta em um alargamento *Doppler* pequeno. As reações denominadas inversas, envolvendo colisões de íons mais pesados primários acelerados com núcleos de H, ^4He e ^3He da atmosfera solar ambiente, produzem emissão de linhas largas devido à alta velocidade de recuo dos núcleos excitados, o que resulta em um alargamento *Doppler* significativo. Na Tabela 1 são listadas as principais linhas de desexcitação nuclear com suas respectivas energias, transições nucleares, tempos de vida e larguras de linha (Aschwanden, 2005).

TABELA 1

Principais linhas de desexcitação nuclear.

Energy (MeV)	Reaction	Transition	Mean lifetime (s)	Line width (keV)
0.339	$^{56}\text{Fe}(\alpha, n)^{59}\text{Ni}^*$	$^{59}\text{Ni}^*0.339 \mapsto \text{g.s.}$	9.8×10^{-11}	4
0.429 ^a	$^4\text{He}(\alpha, n)^7\text{Be}^*$	$^7\text{Be}^*0.429 \mapsto \text{g.s.}$	1.9×10^{-13}	5
0.478 ^a	$^4\text{He}(\alpha, p)^7\text{Li}^*$	$^7\text{Li}^*0.478 \mapsto \text{g.s.}$	1.1×10^{-13}	10
0.451 ^b	$^{24}\text{Mg}(p, x)^{23}\text{Mg}^*$	$^{23}\text{Mg}^*0.451 \mapsto \text{g.s.}$	1.6×10^{-12}	30
0.847	$^{56}\text{Fe}(p, p)^{56}\text{Fe}^*$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, \alpha)^{56}\text{Fe}^*$	$^{56}\text{Fe}^*0.847 \mapsto \text{g.s.}$	8.9×10^{-12}	5(1.2+2.9) ^c
0.931	$^{56}\text{Fe}(p, x)^{55}\text{Fe}^*$	$^{56}\text{Fe}^*0.931 \mapsto \text{g.s.}$	1.2×10^{-11}	5
1.369	$^{24}\text{Mg}(p, p)^{24}\text{Fe}^*$ $^{25}\text{Mg}(p, p)^{24}\text{Mg}^*$ $^{26}\text{Mg}(p, p2n)^{24}\text{Mg}^*$ $^{24}\text{Mg}(\alpha, \alpha)^{24}\text{Mg}^*$ $^{28}\text{Si}(p, x)^{24}\text{Mg}^*$	$^{56}\text{Fe}^*0.847 \mapsto \text{g.s.}$	2.0×10^{-12}	16(21+8) ^c
1.634	$^{20}\text{Ne}(p, p)^{20}\text{Ne}^*$ $^{20}\text{Ne}(\alpha, \alpha)^{20}\text{Ne}^*$ $^{24}\text{Mg}(p, x)^{20}\text{Ne}^*$ $^{24}\text{Mg}(\alpha, x)^{20}\text{Ne}^*$ $^{28}\text{Si}(p, x)^{20}\text{Ne}^*$	$^{20}\text{Ne}^*1.624 \mapsto \text{g.s.}$	1.1×10^{-12}	20(17.6+4.3) ^c
1.779	$^{28}\text{Si}(p, p)^{28}\text{Si}^*$ $^{28}\text{Si}(\alpha, \alpha)^{28}\text{Si}^*$ $^{32}\text{Si}(p, x)^{28}\text{Si}^*$	$^{28}\text{Si}^*1.779 \mapsto \text{g.s.}$	6.9×10^{-13}	20(16.7+4.5) ^c
2.614	$^{20}\text{Ne}(p, p)^{20}\text{Ne}^*$ $^{20}\text{Ne}(\alpha, \alpha)^{20}\text{Ne}^*$ $^{24}\text{Mg}(p, x)^{20}\text{Ne}^*$ $^{28}\text{Si}(p, x)^{20}\text{Ne}^*$	$^{20}\text{Ne}^*4.248 \mapsto ^{20}\text{Ne}^*1.634$	9.2×10^{-14}	60
4.439	$^{12}\text{C}(p, p)^{12}\text{C}^*$ $^{12}\text{C}(\alpha, \alpha)^{12}\text{C}^*$ $^{14}\text{N}(p, x)^{12}\text{C}^*$ $^{14}\text{N}(\alpha, x)^{12}\text{C}^*$ $^{16}\text{O}(p, xx)^{12}\text{C}^*$ $^{16}\text{O}(\alpha, x)^{12}\text{C}^*$	$^{12}\text{C}^*4.439 \mapsto \text{g.s.}$	6.1×10^{-14}	145(92+42) ^c
6.129	$^{16}\text{O}(p, p)^{16}\text{O}^*$ $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}^*$ $^{20}\text{Ne}(p, x)^{16}\text{O}^*$	$^{16}\text{O}^*6.129 \mapsto \text{g.s.}$	2.7×10^{-14}	145(122+68) ^c

Fonte: Aschwanden (2005).

O estudo detalhado da produção de linhas de desexcitação nuclear realizado por Ramaty, Kozlovsky e Lingenfelter (1979) resultou no desenvolvimento de um código Monte Carlo para o cálculo do espectro de linhas de desexcitação. Esse código foi

atualizado por Kozlovsky, Murphy e Ramaty (2002) com novos dados de seções de choque obtidos em laboratório. Uma versão aperfeiçoada, referida neste trabalho como código RMK, foi desenvolvida por Murphy *et al.* (2009) incorporando seções de choque calculadas com o código de reações nucleares Talys (Koning; Hilaire; Duijvestijn, 2005). Tabelas contendo a listagem completa das linhas incluídas no código RMK e os valores numéricos das seções de choque das reações correspondentes estão disponíveis na versão *on-line* do artigo de Murphy *et al.* (2009), que pode ser acessada no *link* <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0067-0049/183/1/142>.

3 DESCRIÇÃO DOS MÉTODOS COMPUTACIONAIS

3.1 O pacote FLUKA

O FLUKA (Ferrari *et al.*, 2011; Battistoni *et al.*, 2015) é um pacote de rotinas integradas de uso geral para o cálculo Monte Carlo do transporte e das interações de partículas em materiais arbitrários. O pacote tem sido amplamente utilizado no desenvolvimento de aplicações em diversas áreas de pesquisa, tais como física experimental de altas energias, raios cósmicos, *design* de telescópios e detectores, dosimetria, calorimetria, radiologia e física médica.

O pacote FLUKA pode simular com alta precisão o transporte e as interações de aproximadamente 60 tipos diferentes de partículas, incluindo elétrons e múons com energias de 1 keV até 1.000 TeV, fótons com energias de 100 eV até 10.000 TeV, hádrons com energias de 1 keV até 10.000 TeV e todas as antipartículas correspondentes, bem como neutrinos, nêutrons de baixa energia (abaixo de 20 MeV) e íons pesados com energias até 10.000 TeV/núcleon. As interações são implementadas utilizando-se modelos físicos robustos e modernos, continuamente verificados e otimizados através de comparação com dados experimentais no nível de interações individuais.

Os modelos utilizados no FLUKA para implementar o transporte e as interações de partículas eletromagnéticas (elétrons, pósitrons e fótons) e múons cobrem um amplo conjunto de processos físicos, incluindo *bremsstrahlung*, espalhamentos Compton, Rayleigh, Bhabha e Moller, ionização, efeito fotoelétrico, produção de pares elétron-pósitron, aniquilação de pósitrons em repouso (após termalização) e em voo, interações fotonucleares e fotoprodução de múons (Ferrari *et al.*, 1992). O transporte e as perdas de energia por ionização são implementados através de uma abordagem comum a

todas as partículas carregadas. O transporte é implementado por um algoritmo original para o cálculo de espalhamentos múltiplos (Ferrari *et al.*, 1992), baseado na teoria de Molière melhorada por Bethe (1953), suplementado por um algoritmo para o cálculo de espalhamento simples, baseado na fórmula de Rutherford. O tratamento das perdas de energia por ionização é baseado na teoria de Bethe-Block (Bethe; Heitler, 1934), suplementada com potenciais de ionização e parâmetros de efeitos de densidade determinados de acordo com a compilação de Sternheimer, Berger e Seltzer (1984) e com correções de camada derivadas da fórmula de Ziegler e Andersen (1977).

O tratamento das interações hadrônicas no FLUKA é baseado em uma abordagem microscópica em que são utilizados vários modelos ajustados aos diferentes intervalos de energia envolvidos (Ferrari; Sala, 1998; Battistoni *et al.*, 2015). Em energias abaixo de 5 GeV, interações inelásticas hádron-hádron são implementadas através de um modelo baseado na produção e no decaimento ressonante de partículas, enquanto interações elásticas e de troca de carga são implementadas através da análise dos deslocamentos de fase e da aproximação eikonal. Em energias no intervalo de 5 a 20 TeV, as interações inelásticas hádron-hádron são implementadas através do *Dual Parton Model* (DPM) acoplado a um esquema de hadronização (Capella *et al.*, 1994).

As interações inelásticas hádron-núcleo no intervalo de energia do limiar de reação até 20 TeV são implementadas através do modelo do FLUKA denominado *PreEquilibrium Approach to Nuclear Thermalization* – Peanut (Ferrari; Sala, 1994, 1998; Fasso *et al.*, 1994; Battistoni *et al.*, 2006). O Peanut descreve as interações entre hádrons e núcleos como uma sequência dos seguintes passos: cascata de espalhamentos múltiplos (modelo de Glauber-Gribov); cascata intranuclear generalizada (*Generalized IntraNuclear Cascade* – Ginc); estágio pré-equilíbrio (emissão baseada em éxcitons); estágio de equilíbrio (incluindo os processos de evaporação, fissão, *break-up* de Fermi e emissão de raios- γ por desexcitação nuclear).

O processo de emissão de raios- γ por desexcitação nuclear é particularmente importante para nossas simulações do espectro de raios- γ em explosões solares. Após o processo de evaporação, a energia de excitação residual dos núcleos é dissipada pela emissão de fótons de raios- γ produzidos por desexcitação nuclear. Em altas energias de excitação, a cascata de transições de raios- γ é implementada através de um modelo estatístico assumindo uma densidade contínua de níveis nucleares, enquanto em baixas energias de excitação (abaixo de um limiar arbitrário) é utilizado um banco de dados com níveis nucleares experimentais discretos tabulados (Ferrari *et al.*, 1996). A extensão para o tratamento de interações núcleo-núcleo é implementada através de geradores de eventos externos conectados ao FLUKA, baseados respectivamente nos modelos *Boltzmann Master Equation* – BME (Cerutti *et al.*, 2006), *Relativistic Quantum Molecular Dynamics* – RQMD (Sorge; Stöcker; Greiner, 1989) e *Dual Parton Model and JETs* – DPMJET-III (Roesler; Engel; Ranft, 2001).

O tratamento utilizado no FLUKA para os nêutrons de baixa energia (isto é, com energias cinéticas ≤ 20 MeV) também é relevante para nossas simulações do espectro de raios- γ em explosões solares, uma vez que fornece a emissão da linha de captura de nêutrons em 2,223 MeV. O transporte e as interações de nêutrons de baixa energia são implementados no FLUKA através de um algoritmo baseado no método de multigrupos (Ferrari *et al.*, 2011; Battistoni *et al.*, 2015). As matrizes de espalhamento para os canais de reação são calculadas a partir de dados de seções de choque de nêutrons fornecidos por uma biblioteca dedicada na qual o intervalo de energia de interesse é dividido em 260 grupos de nêutrons (31 dos quais são térmicos) e 42 grupos gama.

3.2 Modelo para a simulação

Nas simulações de processos nucleares em explosões solares com o pacote FLUKA realizadas neste trabalho, consideramos um modelo em que feixes de íons primários acelerados (prótons, partículas- α e núcleos mais pesados) são injetados em um alvo com características similares às da atmosfera solar ambiente. O algoritmo implementado pelo FLUKA segue a evolução das partículas primárias e secundárias individualmente conforme se propagam através do alvo, rastreando suas interações com o meio até saírem da região do alvo, atingirem o repouso ou apresentarem uma energia abaixo de um limiar definido para o transporte.

Adotamos uma geometria plano-paralela simples para a estrutura vertical da atmosfera solar ambiente, uma vez que em geral as dimensões da região de interação e emissão em uma explosão solar são sempre muito menores que o raio solar. A Figura 1 mostra uma representação em duas dimensões da geometria utilizada nas simulações, na qual a região de interação da atmosfera solar ambiente é aproximada por uma caixa cúbica centrada na origem de um sistema de coordenadas cartesianas (O_x , O_y , O_z) com aresta de comprimento $2L = 2 \times 10^9$ cm e faces orientadas perpendicularmente aos eixos coordenados. A coordenada z corresponde à profundidade vertical na atmosfera solar ambiente. Um plano (xy) em $z = 0$ divide a caixa cúbica em dois hemisférios. O hemisfério superior ($z > 0$) corresponde à região cromosférica/fotosférica, e o hemisfério inferior ($z < 0$), à região coronal. A caixa cúbica é inserida no interior de uma outra caixa cúbica com aresta maior, definindo a região denominada no FLUKA como *Blackhole*, em que as partículas não são mais rastreadas.

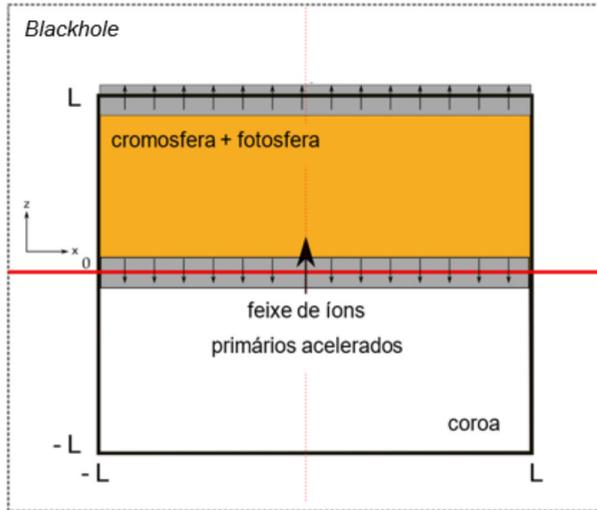


Figura 1 Representação em duas dimensões da geometria utilizada nas simulações de processos nucleares em explosões solares com o pacote FLUKA.

Fonte: Elaborada pelos autores.

Considerando que as densidades coronais são extremamente baixas ($< 10^{-10} \text{ g/cm}^3$), assumimos, por simplicidade, que o hemisfério inferior (região coronal) é preenchido com vácuo (densidade nula), de modo que as partículas são transportadas, mas não interagem. O hemisfério superior (região cromosférica/fotosférica) é preenchido com um material denso e neutro para o qual assumimos uma composição típica da atmosfera solar com abundâncias $a_{amb,j}$ de núcleos de ^4He , C, N, O, Ne, Mg, Al, Si, S, Ca e Fe relativas ao H dadas pelo modelo de Asplund *et al.* (2009), conforme indicadas na Tabela 2.

TABELA 2

Abundâncias relativas utilizadas para os núcleos da atmosfera solar ambiente ($a_{amb,j}$) e para os íons primários acelerados ($a_{acc,j}$).

i	$a_{amb,j}$	$a_{acc,j}$ (explosão impulsiva)
H	1.0	1.0
^3He	-	0.1
^4He	8.50×10^{-2}	0.1
C	2.69×10^{-4}	9.30×10^{-4}
N	6.76×10^{-5}	2.48×10^{-4}
O	4.90×10^{-4}	2.00×10^{-3}
Ne	8.51×10^{-5}	9.10×10^{-4}
Mg	3.98×10^{-5}	1.18×10^{-3}
Al	2.82×10^{-6}	3.14×10^{-5}
Si	3.24×10^{-5}	9.10×10^{-4}
S	1.32×10^{-5}	1.91×10^{-4}
Ca	2.19×10^{-6}	2.12×10^{-5}
Fe	3.16×10^{-5}	2.68×10^{-3}

Fonte: Elaborada pelos autores.

O hemisfério superior é dividido em 52 camadas com espessuras Δl_k e perfil de densidade vertical ρ_k ($k = 1, \dots, 52$) dados pelo modelo VAL-C da cromosfera (Vernazza; Avrett; Loeser, 1981) mais uma camada adicional, correspondendo à fotosfera, com espessura $\Delta l_{53} = 8,9 \times 10^8$ cm e densidade $\rho_{53} = 3,19 \times 10^{-7}$ g/cm³. As densidades das camadas do modelo VAL-C variam de $2,35 \times 10^{-15}$ g/cm³ na camada mais externa até $3,19 \times 10^{-7}$ g/cm³ na camada mais interna. Entretanto, materiais com densidades menores que 10^{-10} g/cm³ são tratados pelo FLUKA como vácuo. Para contornar essa característica, atribuímos uma densidade de 2×10^{-10} g/cm³ para todas as camadas com densidades menores que 10^{-10} g/cm³ e redimensionamos suas espessuras Δl_k de modo a manter os valores para as densidades de coluna conforme dados no modelo VAL-C. A densidade de coluna total obtida pela soma das contribuições das 53 camadas é $h_{col} = 292$ g/cm², valor que corresponde ao range¹ na aproximação de perda contínua de energia (*Continuous Slowing-Down Approximation* – CSDA) para prótons injetados com energia cinética $E_0 \sim 1,6$ GeV em um alvo de hidrogênio (Berger

1 O range de uma partícula injetada em um alvo (geralmente expresso em g/cm²) é definido como sendo a distância média percorrida ao longo do eixo vertical Oz até atingir o repouso.

et al., 2005). Dessa forma, o hemisfério superior satisfaz a condição de alvo espesso para íons primários acelerados com energias cinéticas de até 1,6 GeV/núcleon.

Conforme indicado na Figura 1, os feixes de íons primários acelerados são injetados na região cromosférica/fotosférica ($z > 0$) a partir de um ponto ($x = 0, y = 0, z = -z_0$) situado na região coronal ($z < 0$) a uma distância z_0 muito próxima do plano (xy) em $z = 0$, evitando artefatos numéricos que poderiam ocorrer se a fonte fosse colocada exatamente na interface entre as duas regiões. Nas simulações realizadas neste trabalho, consideramos feixes de íons primários acelerados com composição para explosão solar impulsiva, conforme definida por Mandzhavidze e Ramaty (1993), Ramaty, Mandzhavidze e Kozlovsky (1996) e Murphy *et al.* (1997). Nesse sentido, para a razão entre o número de partículas- α e o número de prótons acelerados, adotamos o valor $\alpha/p = 0,1$ e, para os íons primários acelerados de C, N, O, Ne, Mg, Al, Si, S, Ca e Fe, assumimos as abundâncias relativas aumentadas $a_{acc,i}$ dadas em Murphy *et al.* (2007), conforme indicadas na Tabela 2. É importante notar que esses valores de abundância são reduzidos por um fator 5 com relação aos apresentados em Murphy *et al.* (2007), correspondentes a $\alpha/p = 0,5$. Além disso, incluímos os íons de ${}^3\text{He}$ na composição dos feixes de íons primários acelerados, assumindo ${}^3\text{He}/\alpha = 1$, uma vez que produzem linhas importantes para a interpretação dos espectros de emissão de raios- γ (Murphy; Kozlovsky; Share, 2016).

Executamos simulações separadas para as reações envolvendo cada espécie i de íon primário acelerado. Em cada simulação, consideramos 10^6 íons primários acelerados com distribuição de energia do tipo lei de potência dada por:

$$\frac{dN(E)}{dE} = CE^{-\delta}(E_{m\acute{a}x} - E) H(E - E_{m\acute{i}n}), \quad (1)$$

onde E é a energia cinética por núcleon do íon primário acelerado em um dado intervalo de energia de $E_{m\acute{i}n}$ até $E_{m\acute{a}x}$, δ é o índice espectral, H é a função de Heavyside e C é uma constante de normalização definida tal que:

$$\int_0^{\infty} \frac{dN(E)}{dE} dE = 1, \quad (2)$$

isto é, a distribuição de energia é normalizada a um íon primário acelerado com energia cinética por núcleon no intervalo de $E_{m\acute{i}n}$ até $E_{m\acute{a}x}$.

Para gerar as distribuições de energia do tipo lei de potência para os íons primários acelerados, utilizamos uma versão modificada da sub-rotina *source.f* distribuída com o FLUKA, desenvolvida para realizar simulações em trabalhos anteriores (Tuneu, 2016;

Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019; MacKinnon *et al.*, 2020). Essa versão da sub-rotina permite selecionar as energias cinéticas por núcleon dos íons primários randomicamente a partir da distribuição lei de potência no intervalo de E_{min} até E_{max} , ou, equivalentemente, selecionar essas energias randomicamente a partir de uma distribuição uniforme no mesmo intervalo e atribuir pesos aos íons primários de acordo com a distribuição lei de potência. Essa última estratégia, utilizada nas simulações realizadas neste trabalho, permite reduzir as flutuações estatísticas da contribuição dos íons primários de mais alta energia para os fluxos de fótons. A sub-rotina também fornece opções para gerar feixes de íons primários acelerados com diferentes tipos de distribuição angular: feixe unidirecional (paralelo ao eixo Oz), feixe com distribuição angular semi-isotrópica no hemisfério superior (isto é, na região acima do plano (xy) em $z = 0$), feixe moderadamente colimado na direção do eixo Oz e feixe moderadamente concentrado na direção perpendicular ao eixo Oz (*pancake*). Nas simulações realizadas neste trabalho, consideramos apenas feixes com distribuição angular semi-isotrópica.

3.3 Cálculo dos espectros de emissão de raios- γ

O FLUKA fornece várias ferramentas de estimativa, denominadas *detectores*, que permitem calcular diferentes quantidades de interesse. Nas simulações realizadas em trabalhos anteriores (Tuneu, 2016; Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019; MacKinnon *et al.*, 2020), foi utilizado o detector USRBDX para determinar o espectro de energia dos fótons produzidos que escapam da região cromosférica/fotosférica para a região coronal. Esse tipo de detector permite estimar a distribuição diferencial dupla do fluxo de fótons que atravessam o plano (xy) em $z = 0$ por intervalo de energia e de ângulo sólido, $d^2\phi/dEd\Omega$, em unidades de fótons $\text{GeV}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$ por íon primário acelerado injetado. Integrando o fluxo de fótons através do plano (xy) em $z = 0$ em ângulo sólido e sobre toda a área da superfície determinada pelo plano (xy) em $z = 0$, obtemos o espectro de energia correspondente, $d\phi/dE$, em unidades de fótons GeV^{-1} por íon primário acelerado injetado. A resolução em energia do detector é determinada pelo usuário especificando-se o número de *bins* e os valores mínimo e máximo de energia dos fótons a serem registrados. Somando as contribuições de cada espécie i de íon primário acelerado ponderadas pelas respectivas abundâncias relativas $a_{acc,i}$, obtemos o espectro total de energia dos fótons em unidades de fótons GeV^{-1} por próton primário acelerado no intervalo de energia por núcleon de E_{min} até E_{max} :

$$\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{ph}} = \sum_i a_{acc,i} \frac{d\Phi_i(E_{ph})}{dE_{ph}}, \quad (3)$$

onde E_{ph} denota a energia do fóton.

De forma similar, obtemos as componentes espectrais produzidas pelas reações diretas (que envolvem as interações entre prótons, partículas- α e ^3He primários acelerados com todos os núcleos da atmosfera ambiente) e pelas reações inversas (que envolvem as interações entre os íons primários acelerados mais pesados com os núcleos de H e ^4He e da atmosfera solar ambiente), dadas por:

$$\frac{d\Phi_{dir}(E_{ph})}{dE_{ph}} = \frac{d\Phi_p(E_{ph})}{dE_{ph}} + a_{acc,\alpha} \frac{d\Phi_\alpha(E_{ph})}{dE_{ph}} + a_{acc,^3\text{He}} + \frac{d\Phi_{^3\text{He}}(E_{ph})}{dE_{ph}}, \quad (4)$$

$$\frac{d\Phi_{inv}(E_{ph})}{dE_{ph}} = \sum_{i \neq p, \alpha, ^3\text{He}} a_{acc,i} \frac{d\Phi_i(E_{ph})}{dE_{ph}}. \quad (5)$$

Os resultados obtidos em trabalhos anteriores utilizando o modelo descrito acima (Tuneu, 2016; Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019; MacKinnon *et al.*, 2020) demonstraram que o FLUKA é capaz de gerar autoconsistentemente todas as componentes típicas dos espectros de emissão de raios- γ observados na faixa de energia de centenas de keV a centenas de MeV. No entanto, o efeito das flutuações estatísticas devido às seções de choque comparativamente mais baixas para a produção de algumas linhas de desexcitação nuclear, combinado com a resolução limitada dos *bins* de energia uniformemente espaçados utilizados pelo detector USRBDX, resultou em espectros relativamente menos detalhados do que desejado, em particular para energias ≤ 2 MeV. Neste trabalho, implementamos uma nova estratégia para a simulação de processos nucleares em explosões solares com o FLUKA que permite melhorar a estatística e a resolução em energia dos espectros de emissão de raios- γ gerados (Thereza, 2021).

O primeiro ingrediente da nova estratégia implementada neste trabalho consiste em uma modificação das simulações executadas para obtenção da componente espectral produzida pelas reações diretas. Em vez de injetarmos prótons e partículas- α primários acelerados em um alvo composto constituído por um material com a composição completa da atmosfera solar ambiente, executamos simulações separadas considerando alvos simples constituídos por cada espécie j de núcleo. Para que as perdas de energia dos prótons e partículas- α primários acelerados injetados nos alvos simples sejam equivalentes às que ocorrem no alvo composto original, utilizamos um conjunto constituído por 53 materiais alternativos com a composição completa da

atmosfera solar ambiente. Esses materiais são associados a uma geometria com estrutura idêntica à definida anteriormente para a região cromosférica/fotosférica (isto é, constituídos por 52 camadas com perfil de densidade vertical ρ_k dado pelo modelo VAL-C da cromosfera e uma camada adicional com densidade fotosférica). As taxas médias de perda de energia dE_{kj}/dl em cada camada k do alvo simples constituído por uma dada espécie j de núcleo são definidas utilizando-se as taxas médias de perda de energia $\langle dE_k/dl \rangle$ dos materiais alternativos correspondentes. Obtemos, assim, alvos “híbridos” constituídos por uma única espécie j de núcleo, mas com taxas médias de perda de energia determinadas por parâmetros da fórmula de Bethe-Bloch (Getachew, 2007; Tanabashi *et al.*, 2018) equivalentes aos do alvo composto original.

O fluxo de fótons integrado no tempo produzido por um íon primário acelerado da espécie i que atravessa a camada k do alvo composto original devido a colisões com núcleos da espécie j é dado por:

$$I_{k;ij}(E_{ph}) = a_{amb,j} n_k \int_{E_{k,0}}^{E_{k,l}} \frac{d\sigma_{ij}(E, E_{ph})}{dE_{ph}} \frac{1}{\langle dE_k/dl \rangle} dE, \quad (6)$$

onde $d\sigma_{ij}(E, E_{ph})/dE_{ph}$ é a seção de choque diferencial para a produção de fótons de energia E_{ph} na reação, $E_{k,0}$ e $E_{k,l}$ são, respectivamente, as energias inicial e final do íon primário acelerado, e n_k é a densidade de número dos núcleos de todas as espécies na camada k , dada por:

$$n_k = \frac{N_A \rho_k}{\langle A \rangle}, \quad (7)$$

onde $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ é o número de Avogadro, $\langle A \rangle = \sum_j a_{amb,j} A_j$ é a massa atômica média dos núcleos do alvo composto e A_j denota a massa atômica dos núcleos da espécie j (em g/mol).

No caso dos alvos híbridos considerados nas simulações, constituídos por uma única espécie j de núcleo, o fluxo de fótons integrado no tempo produzido por um íon primário acelerado da espécie i que atravessa a camada k é dado por:

$$I_{k;ij}(E_{ph}) = n_{k,j} \int_{E_{k,0}}^{E_{k,l}} \frac{d\sigma_{ij}(E, E_{ph})}{dE_{ph}} \frac{1}{\langle dE_k/dl \rangle} dE, \quad (8)$$

onde $n_{k,j}$ é a densidade de número dos núcleos da espécie j na camada k , dada por:

$$n_{k,j} = \frac{N_A \rho_k}{A_j} \quad (9)$$

Portanto, para obter a contribuição efetiva de cada espécie j de núcleo, é necessário multiplicar o fluxo de fótons obtido na simulação correspondente pelo fator f_j dado por:

$$f_j = \frac{I_{k,i,j}(E_{ph})}{\tilde{I}_{k,i,j}(E_{ph})} = a_{ambj} \frac{n_k}{n_{k,j}} = a_{ambj} \frac{A_j}{A} \quad (10)$$

Conforme descrito anteriormente, o espectro de energia dos fótons, $d\phi/dE$, é obtido integrando-se em ângulo sólido o fluxo de fótons que escapam da região cromosférica/fotosférica para a região coronal. A propagação dos fótons produzidos em cada camada k através da região cromosférica/fotosférica é implementada pelo algoritmo de transporte do FLUKA, que inclui os efeitos devidos ao espalhamento Compton, ao espalhamento Rayleigh, à produção de pares elétron-pósitron e à absorção fotoelétrica. Assim, a componente espectral produzida pelas reações diretas (Equação 4) é calculada somando-se as contribuições efetivas das reações envolvendo prótons, partículas- α e ^3He primários acelerados e cada espécie j de núcleo da atmosfera ambiente:

$$\frac{d\Phi_{dir}(E_{ph})}{dE_{ph}} = \sum_i f_j \left[\frac{d\Phi_{p,j}(E_{ph})}{dE_{ph}} + a_{acc,\alpha} \frac{d\Phi_{\alpha,j}(E_{ph})}{dE_{ph}} + a_{acc,^3\text{He}} \frac{d\Phi_{^3\text{He},j}(E_{ph})}{dE_{ph}} \right] \quad (11)$$

O cálculo da componente espectral produzida pelas reações inversas (Equação 5), por sua vez, é implementado seguindo a mesma estratégia utilizada em trabalhos anteriores, isto é, somando-se as contribuições obtidas em simulações separadas nas quais os íons pesados primários acelerados de cada espécie i (com abundâncias relativas $a_{acc,i}$) são injetados em um alvo com a composição completa da atmosfera solar ambiente.

O segundo ingrediente da nova estratégia consiste em utilizar a sub-rotina padrão *mgdraw.f* distribuída com o FLUKA em combinação com um código em Python desenvolvido pelos autores deste trabalho para gerar as contribuições para o espectro de raios- γ produzidas pelas reações diretas e inversas. Esse procedimento oferece maior flexibilidade em comparação com a utilização do detector USRBDX, que fornece espectros para valores específicos dos parâmetros da distribuição de energia lei de potência dos íons primários acelerados (índice espectral δ e energias cinéticas mínima E_{min} e máxima E_{max}). A sub-rotina *mgdraw.f* é geralmente utilizada para realizar uma

análise mais complexa dos dados de transporte das partículas primárias e secundárias gerados nas simulações Monte Carlo, permitindo registrar em um arquivo de saída todos os eventos de transporte selecionados pelo usuário. Neste trabalho, registramos as energias E_{pb} dos fótons que escapam da região cromosférica/fotosférica para a região coronal juntamente com as energias cinéticas por núcleon E dos íons primários que dão origem aos mesmos. O registro dessas informações permite sintetizar espectros de fótons para distribuições de energia lei de potência com valores diferentes de δ , E_{min} e E_{max} a partir dos fluxos de fótons para distribuição de energia uniforme fornecidos pela versão modificada da sub-rotina *source.f*, aplicando-se posteriormente os pesos $E^{-\delta}$ e a constante de normalização C (ver seção 3.2). Além disso, é possível obter espectros de fótons utilizando um número arbitrário de *bins* de energia, bem como implementar *bins* não uniformes para melhorar a resolução do espectro em torno de linhas mais estreitas.

Neste trabalho, utilizamos a estratégia descrita acima para calcular espectros de linhas de desexcitação nuclear. Para realizar as simulações incluindo apenas o processo de produção de linhas de desexcitação nuclear, utilizamos as funcionalidades do FLUKA que permitem desativar os processos de *bremstrahlung* de elétrons e pósitrons, produção de pares elétron-pósitron, aniquilação de pósitrons, captura de nêutrons, espalhamento Compton e decaimento de píons. Além disso, ativamos as reações de fusão de modo a incluir nos espectros as linhas de desexcitação nuclear produzidas por esses processos. Particularmente, são incluídas contribuições importantes para o espectro de emissão de raios- γ em explosões solares, tais como as linhas do complexo α - α em 0,429, 0,478 e 3,563 MeV produzidas respectivamente pelas reações ${}^4\text{He}(\alpha, p){}^7\text{Li}^*$, ${}^4\text{He}(\alpha, n){}^7\text{Be}^*$ e ${}^4\text{He}(\alpha, pn){}^6\text{Li}^*$, a linha em 3,563 MeV produzida pela reação ${}^4\text{He}({}^3\text{He}, p){}^6\text{Li}^*$, as linhas em 0,937, 1,042 e 1,081 MeV produzidas pela reação ${}^{16}\text{O}({}^3\text{He}, p){}^{18}\text{F}^*$ e a linha em 2,263 MeV produzida pela reação ${}^{20}\text{Ne}(\alpha, p){}^{23}\text{Na}^*$. Essas contribuições são incluídas na componente devida às reações diretas. Nas simulações realizadas em trabalhos anteriores (Tuneu, 2016; Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019; MacKinnon *et al.*, 2020), optamos por desativar as reações de fusão nuclear, uma vez que a versão do FLUKA utilizada não incluía as linhas do complexo α - α .

Conforme descrito anteriormente, um dos ingredientes fundamentais para o cálculo dos espectros de linhas de desexcitação nuclear são as seções de choque em função da energia do projétil para as reações que produzem os núcleos excitados. As seções de choque utilizadas no código RMK para essas reações, nos respectivos intervalos de energia desde o *threshold* até um dado valor máximo, são construídas a partir de medidas em laboratório e cálculos realizados com o código de reações nucleares Talys (Koning; Hilaire; Duijvestijn, 2005). Para realizar uma comparação mais consistente entre os espectros de linhas de desexcitação nuclear calculados com o código RMK e com o FLUKA, implementamos as simulações para obtenção da componente espec-

tral produzida pelas reações diretas considerando os mesmos valores dos *thresholds* para as seções de choque dados em Murphy *et al.* (2009). Verificamos que a aplicação desses *thresholds* reduz significativamente as flutuações estatísticas na componente espectral devida às reações diretas. Para algumas reações, que produzem linhas de desexcitação nuclear específicas, também consideramos fatores multiplicativos de correção da seção de choque dados em Kozlovsky, Murphy e Ramaty (2002).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Conforme descrito anteriormente, os espectros de fótons gerados nas simulações com o FLUKA são calculados integrando-se em ângulo sólido apenas o fluxo de fótons que escapam da região cromosférica/fotosférica para a região coronal. Dessa forma, para feixes de íons primários acelerados com distribuição angular semi-isotrópica os espectros de fótons obtidos correspondem a uma média de espectros para explosões que ocorrem em ângulos heliocêntricos entre $\theta_{obs} = 0^\circ$ (centro do disco solar) e $\theta_{obs} = 90^\circ$ (limbo) e que, portanto, apresentam deslocamentos *Doppler* semelhantes aos de um espectro para uma explosão em $\theta_{obs} = 60^\circ$ (considerando que a magnitude dos deslocamentos *Doppler* varia linearmente com $\cos(\theta_{obs})$ de 0 para uma explosão no limbo até um valor mínimo negativo para uma explosão no centro do disco solar). Assim, para realizar uma comparação mais consistente entre os espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos nas simulações com o FLUKA e nos cálculos com o código RMK, geramos os espectros RMK para $\theta_{obs} = 60^\circ$. Além disso, dividimos os espectros RMK por um fator 2, uma vez que são obtidos integrando-se o fluxo de fótons em todas as direções.

Os espectros de linhas de desexcitação nuclear calculados com o código RMK são normalizados a um próton primário acelerado com energia ≥ 30 MeV. Assim, para permitir uma comparação apropriada, renormalizamos os espectros obtidos nas simulações com o FLUKA aplicando um fator multiplicativo:

$$\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{pb}} \rightarrow \frac{N_{30}}{N} \frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{pb}}, \quad (12)$$

onde N_{30} é a constante de normalização para as distribuições de energia do tipo lei de potência consideradas nos cálculos com o código RMK, dada por:

$$N_{30} = \left[\int_{30 \text{ MeV}}^{E_{\text{máx}}} E^{-\delta} dE \right] \quad (13)$$

Na Figura 2, são mostrados os espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA (painel superior) e com o código RMK (painel inferior), considerando feixes constituídos por 10^6 íons primários acelerados com distribuição de energia do tipo lei de potência de índice espectral $\delta = 4,0$ no intervalo de energia cinética por núcleon de $E_{\text{min}} = 1 \text{ MeV}$ a $E_{\text{máx}} = 200 \text{ MeV}$.

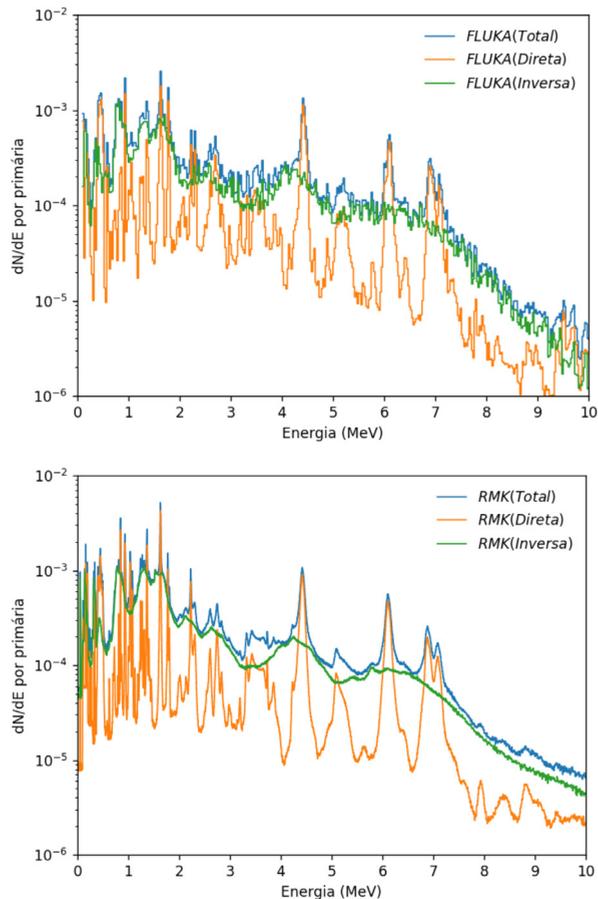


Figura 2 Espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA (painel superior) e com o código RMK (painel inferior) considerando feixes de íons primários acelerados com distribuição de energia lei de potência de índice espectral $\delta = 4,0$.

Fonte: Elaborada pelos autores.

Nas figuras 3, 4 e 5, comparamos os resultados obtidos com o FLUKA e com o código RMK, respectivamente, para as componentes produzidas pelas reações diretas e inversas e para o espectro total. Os espectros FLUKA foram construídos utilizando-se 400 *bins* lineares de energia no intervalo de 100 keV a 10 MeV. Os espectros RMK, por sua vez, foram calculados utilizando-se 3.500 *bins* não uniformes no mesmo intervalo de energia. Assim, para realizar uma comparação mais adequada entre os espectros FLUKA e RMK, considerando a mesma resolução em energia, rebinamos os espectros RMK para os mesmos *bins* dos espectros FLUKA. Com o objetivo de avaliar quantitativamente as diferenças entre os espectros obtidos com o FLUKA e com o código RMK, nos painéis inferiores das figuras são mostrados os resíduos normalizados em cada *bin* *i* de energia:

$$r_i = \frac{1}{\sigma} \left(\left[\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{ph}} \right]_{i,FLUKA} - \left[\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{ph}} \right]_{i,RMK} \right), \quad (14)$$

onde σ é o desvio padrão, dado por:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n_b - 1} \sum_{i=1}^{n_b} \left(\left[\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{ph}} \right]_{i,FLUKA} - \left[\frac{d\Phi(E_{ph})}{dE_{ph}} \right]_{i,RMK} \right)^2}, \quad (15)$$

sendo $n_b = 400$ o número de *bins* no intervalo de energia de 0 e 10 MeV.

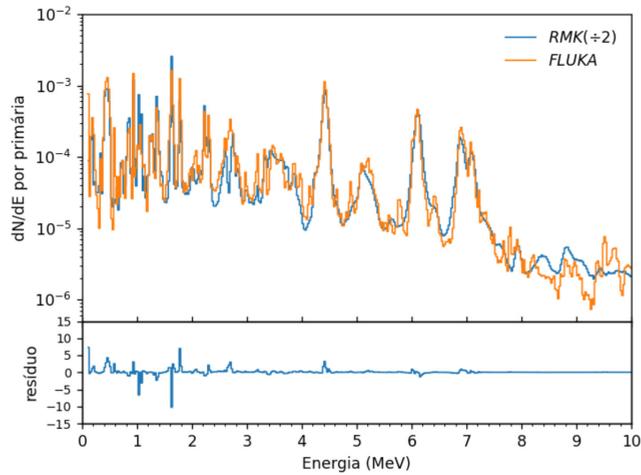


Figura 3 Componentes do espectro de linhas de desexcitação nuclear produzidas pelas reações diretas obtidas com o FLUKA e com o código RMK.

Fonte: Elaborada pelos autores.

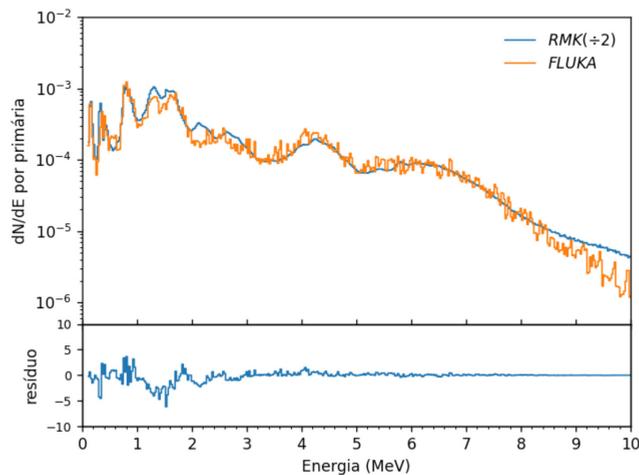


Figura 4 Componentes do espectro de linhas de desexcitação nuclear produzidas pelas reações inversas obtidas com o FLUKA e com o código RMK.

Fonte: Elaborada pelos autores.

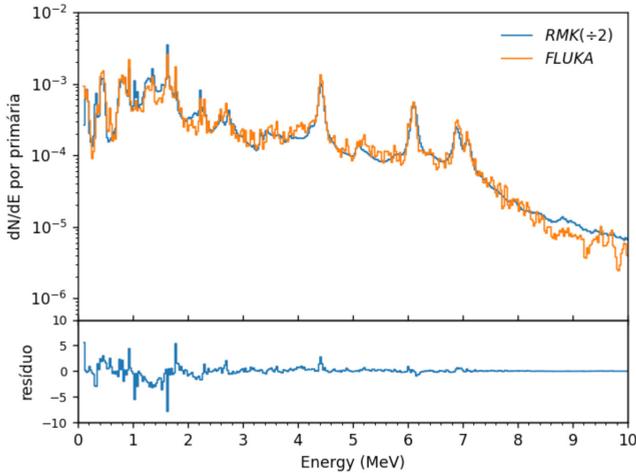


Figura 5 Espectros totais de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA e com o código RMK para índice espectral $\delta = 4$.

Fonte: Elaborada pelos autores.

Observa-se uma concordância muito boa entre os espectros obtidos com o FLUKA e com o código RMK, particularmente para energias > 2 MeV. Para energias < 2 MeV, observa-se algumas discrepâncias entre os espectros gerados com os dois códigos, sendo que as mais significativas ocorrem para as linhas em 0,937, 1,042 e 1,081 MeV, produzidas na reação (${}^3\text{He} + \text{O}$), em 1,634 MeV produzida na reação ($p + \text{Ne}$) e em 1,779 MeV produzida na reação ($p + \text{Si}$). Essas discrepâncias podem ser atribuídas às flutuações estatísticas e a possíveis diferenças entre as bases de dados utilizadas no FLUKA e no código RMK com respeito ao conjunto de reações incluídas e aos valores das seções de choque para a produção de linhas de desexcitação nuclear.

Conforme descrito anteriormente, a partir dos fluxos de fótons obtidos nas simulações para íons primários acelerados com distribuição de energia uniforme, é possível sintetizar espectros de linhas de desexcitação nuclear para valores arbitrários do índice espectral δ . Nas figuras 6, 7 e 8, são mostrados os resultados obtidos para as componentes produzidas pelas reações diretas e inversas e para o espectro total, respectivamente, para $\delta = 2,0, 3,0$ e $3,5$. Observa-se que os espectros apresentam menores flutuações estatísticas à medida que as distribuições de energia consideradas nas simulações tornam-se mais duras.

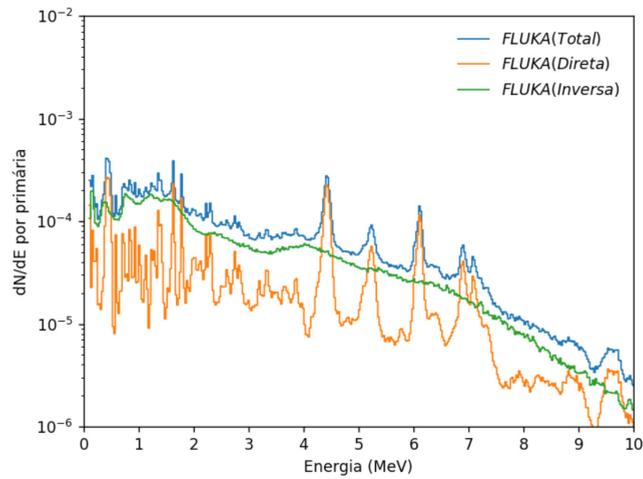


Figura 6 Espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA considerando feixes de íons primários acelerados com distribuição de energia lei de potência de índice espectral $\delta = 2,0$.

Fonte: Elaborada pelos autores.

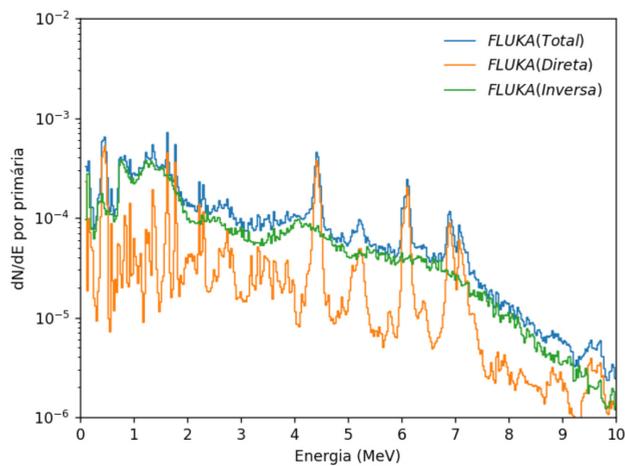


Figura 7 Espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA considerando feixes de íons primários acelerados com distribuição de energia lei de potência de índice espectral $\delta = 3,0$.

Fonte: Elaborada pelos autores.

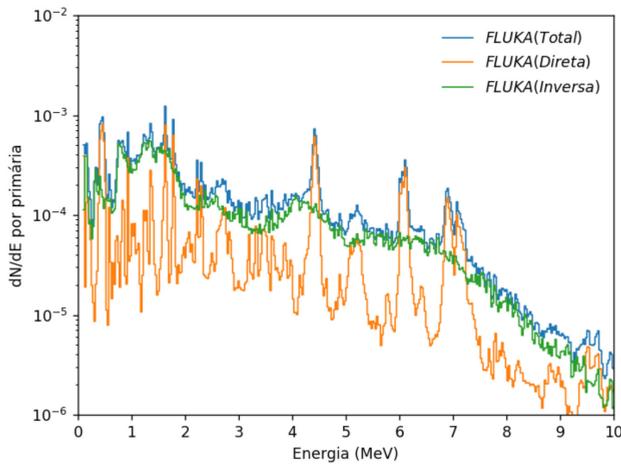


Figura 8 Espectros de linhas de desexcitação nuclear obtidos com o FLUKA considerando feixes de íons primários acelerados com distribuição de energia lei de potência de índice espectral $\delta = 3,5$.

Fonte: Elaborada pelos autores.

5 SUMÁRIO E CONCLUSÕES

Neste trabalho, otimizamos as simulações de processos nucleares em explosões solares com o FLUKA, visando ao desenvolvimento de *templates* para a modelagem de espectros de emissão de raios- γ de eventos observados com instrumentos tais como o GBM e o LAT, ambos a bordo do satélite Fermi, e o RHESSI. Para tanto, implementamos uma nova estratégia de simulação que permite melhorar a estatística e a resolução em energia dos espectros de emissão de raios- γ gerados. Utilizando essa estratégia, calculamos espectros de linhas de desexcitação nuclear que apresentam concordância muito boa com os calculados com o código RMK (Murphy *et al.*, 2009) considerando os mesmos parâmetros de modelo.

As discrepâncias observadas entre os dois espectros podem ser atribuídas principalmente às flutuações estatísticas e a possíveis diferenças entre as bases de dados utilizadas no FLUKA e no código RMK com respeito ao conjunto de reações incluídas e aos valores das seções de choque para a produção de linhas de desexcitação

nuclear. É importante observar que as flutuações estatísticas podem ser reduzidas realizando as simulações com um número maior de íons primários acelerados.

Os resultados obtidos mostram uma melhora significativa na estatística e resolução dos espectros em comparação com os resultados obtidos em trabalhos anteriores (Tusnski, 2018; Tusnski *et al.*, 2019), particularmente para energias ≤ 2 MeV. Em trabalhos futuros, pretendemos realizar simulações com o pacote FLUKA para o cálculo dos espectros completos de emissão de raios- γ (isto é, incluindo todos os processos físicos relevantes). A partir desses espectros, serão construídos *templates* para o ajuste de espectros de emissão de raios- γ de eventos observados utilizando o programa OSPEX.

MODELLING OF NUCLEAR DE-EXCITATION LINE SPECTRA IN SOLAR FLARES USING THE MONTE CARLO PACKAGE FLUKA

Abstract

The modelling of γ -ray emission spectra observed in solar flares is generally carried out via best-fit of data using a set of independent templates and functions for the spectral components produced by the several relevant processes (bremsstrahlung of electrons and positrons, nuclear de-excitation, neutron capture, positron annihilation and decay of pions). Recent works have demonstrated the potential of the Monte Carlo package FLUKA as an effective tool for the simulation of nuclear processes in the context of solar flares, as well as its capability to implement a self-consistent treatment of all the typical components of observed γ -ray emission spectra. In this work, we have implemented a new simulation strategy which allows to improve the statistics and the energy resolution of the generated γ -ray emission spectra. Using this strategy, we have calculated nuclear de-excitation spectra which show good agreement with those calculated with the code developed by Murphy *et al.* (2009) considering the same model parameters. From these spectra, we have built templates which can be incorporated into the software package Objective Spectral Executive (OSPEX) and used in the analysis of γ -ray emission data of events observed with instruments such as the Gamma-ray Burst Monitor (GBM) and the Large Area Telescope (LAT), both on board of the Fermi satellite, and the Reuven Ramaty High Energy Spectroscopic Imager (RHESSI).

Keywords: Solar flare. Nuclear processes. FLUKA.

REFERÊNCIAS

- AJELLO, M. *et al.* Impulsive and long duration high-energy gamma-ray emission from the very bright 2012 March 7 solar flares. *Astrophysical Journal*, v. 789, n. 1, p. 20, 2014.
- ASCHWANDEN, M. J. *Physics of the solar corona: an introduction*. Chichester, UK: Springer, 2005.
- ASPLUND, M. *et al.* The chemical composition of the Sun. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, v. 47, p. 481, 2009.
- BATTISTONI, G. *et al.* Recent developments in the FLUKA nuclear reaction models. In: GADIOLI, E. (ed.). *Proceedings of the 11th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms*. [S. l.: s. n.], 2006. p. 483.
- BATTISTONI, G. *et al.* Overview of the FLUKA code. *Annals of Nuclear Energy*, v. 82, p. 10, 2015.
- BERGER, M. J. *et al.* ESTAR, PSTAR and ASTAR: computer programs for calculating stopping-power and range tables for electrons, protons and helium ions. 2005. Disponível em: <https://www.nist.gov/pml/stopping-power-range-tables-electrons-protons-and-helium-ions>. Acesso em: 14 out. 2021.
- BETHE, H. Molière's theory of multiple scattering. *Physical Review*, v. 89, p. 1259, 1953.
- BETHE, H.; HEITLER, W. On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 146, p. 83, 1934.
- CAPELLA, A. *et al.* Dual parton model. *Physics Reports*, v. 236, p. 225, 1994.
- CERUTTI, F. *et al.* Low energy nucleus-nucleus reactions: the BME approach and its interface with FLUKA. In: GADIOLI, E. (ed.). *Proceedings of the 11th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms*. [S. l.: s. n.], 2006.
- DERMER, C. D. Secondary production of neutral pi-mesons and the diffuse galactic gamma radiation. *Astronomy and Astrophysics*, v. 157, p. 223, 1986.
- FASSO, A. *et al.* FLUKA: performances and applications in the intermediate energy range. In: *Proceedings AEN/NEA Specialists' Meeting on Shielding Aspects of Accelerators, Targets and Irradiation Facilities*. Nuclear Energy Agency (org.) [S. l.: s. n.], 1994. p. 287.
- FERRARI, A.; SALA, P. A new model for hadronic interactions at intermediate energies for the FLUKA code. In: DRAGOVITSCH, P.; LINN, S.; BURBANK, M. (ed.). *Proceedings MC93 International Conference on Monte Carlo Simulation in High Energy and Nuclear Physics*. [S. l.: s. n.], p. 277, 1994.
- FERRARI, A.; SALA, P. The physics of high energy reactions. In: GANDINI, A.; REFFO, G. (ed.). *Proceedings Workshop on Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors Physics, Design and Safety*. [S. l.: s. n.], 1998. p. 424.

- FERRARI, A. *et al.* An improved multiple scattering model for charged particle transport. *Nuclear Instrumental and Methods in Physics Research*, v. B71, p. 412, 1992.
- FERRARI, A.; RANFT, J.; ROESLER, S. *et al.* Cascade particles, nuclear evaporation, and residual nuclei in high energy hadron-nucleus interactions. *Z Phys C - Particles and Fields*, v. 70, p. 413-426, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s002880050119>
- FERRARI, A. *et al.* FLUKA: a multiple-particle code. Technical Report CERN-2005-10. CERN, 2011.
- FREELAND, S. L.; HANDY, B. N. Data analysis with the Solar Soft System. *Solar Physics*, v. 182, p. 497, 1998.
- GETACHEW, A. *Stopping power and range of protons of various energies in different materials*. 2007. Dissertation (Masters) – Addis Ababa University, Addis Abada, 2007.
- HUA, X.-M. *et al.* Angular and energy-dependent neutron emission from solar flare magnetic loops. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 140, n. 2, p. 563, 2002.
- KONING, A. J.; HILAIRE, S.; DUIJVESTIJN, M. C. Talys: comprehensive nuclear reaction modeling. *AIP Conference Proceedings*, v. 769, n. 1, p. 1154, 2005.
- KOZLOVSKY, B.; LINGENFELTER, R. E.; RAMATY, R. Positrons from accelerated particle interactions. *Astrophysical Journal*, v. 316, p. 801, 1987.
- KOZLOVSKY, B.; MURPHY, R. J.; RAMATY, R. Nuclear deexcitation gamma-ray lines from accelerated particle interactions. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 141, p. 523, 2002.
- LANG, K. R. *The sun from space*. [S. l.]: Springer, 2009.
- LIN, R. P. *et al.* The Reuven Ramaty High-Energy Solar Spectroscopic Imager (RHESSI). *Solar Physics*, v. 210, n. 1, p. 3, 2002.
- LINGENFELTER, R. E.; RAMATY, R. *High energy nuclear reactions in solar flares*. New York: Benjamin, 1967.
- MACKINNON, A.; SZPIGEL, S.; GIMENEZ DE CASTRO, C. G.; TUNEU, J. FLUKA Simulations of Pion decay gamma-radiation from energetic flare ions. *Solar Physics*, v. 295, n. 12, p. 174, 2020.
- MANDZHAVIDZE, N.; RAMATY, R. High-energy gamma-ray emission from pion decay in a solar flare magnetic loop. *Astrophysical Journal*, v. 389, p. 739, 1992.
- MANDZHAVIDZE, N.; RAMATY, R. Particle acceleration in solar flares. *Nuclear Physics B – Proceedings Supplements*, v. 33, n. 1, p. 141, 1993.
- MEEGAN, C. *et al.* The Fermi Gamma-ray Burst Monitor. *Astrophysical Journal*, v. 702, n. 1, p. 791, 2009.
- MURPHY, R.; DERMER, C. D.; RAMATY, R. High-energy processes in solar flares. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 63, p. 721, 1987.
- MURPHY, R.; SHARE, G. Compton scattering of deexcitation-line and continuum gamma rays in solar flares. *Solar Physics*, v. 293, n. 12, p. 163, 2018.

MURPHY, R. J.; KOZLOVSKY, B.; SHARE, G. H. Evidence for enhanced ^3He in flare-accelerated particles based on new calculations of the gamma-ray line spectrum, *Astrophysical Journal*, v. 833, n. 2, p. 196, 2016.

MURPHY, R. J. *et al.* Accelerated particle composition and energetics and ambient abundances from gamma-ray spectroscopy of the 1991 June 4 solar flare. *Astrophysical Journal*, v. 490, p. 883, 1997.

MURPHY, R. J. *et al.* The physics of positron annihilation in the solar atmosphere. *Astrophysical Journal Letters*, v. 161, n. 2, p. 495, 2005.

MURPHY, R. J. *et al.* Using gamma-ray and neutron emission to determine solar flare accelerated particle spectra and composition and the conditions within the flare magnetic loop. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 168, p. 167, 2007.

MURPHY, R. J. *et al.* Nuclear gamma-ray de-excitation lines and continuum from accelerated particle interactions in solar flares *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 183, p. 142, 2009.

PELOWITZ, D. E. MCNP6 user's manual, version 1.0. Technical Report LA-CP-13-00634. Los Alamos National Laboratory, 2013.

PRIEST, E. R.; FORBES, T. G. Does fast magnetic reconnection exist? *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, v. 97, n. A11, p. 16757, 1992.

RAMATY, R.; KOZLOVSKY; LINGENFELTER, R. E. Nuclear gamma-rays from energetic particle interactions. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 40, p. 487, 1979.

RAMATY, R.; MANDZHAVIDZE, N.; KOZLOVSKY, B. Solar atmospheric abundances from gamma ray spectroscopy. In: RAMATY, R.; MANDZHAVIDZE, N.; HUA, X.-M. (ed.). *AIP Conference Series*. [S. l.: s. n.], 1996. v. 374, p. 172.

ROESLER, S.; ENGEL, R.; RANFT, J. The Monte Carlo event generator DPMJET-III. In: KLING, A. *et al.* (ed.). *Advanced Monte Carlo for radiation physics, particle transport simulation and applications*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2001. p. 1033.

SORGE, H.; STÖCKER, H.; GREINER, W. Poincaré invariant Hamiltonian dynamics: modelling multi-hadronic interactions in a phase space approach. *Annals of Physics*, v. 192, p. 266, 1989.

STERNHEIMER, R.; BERGER, M.; SELTZER, S. Density effect for the ionization loss of charged particles in various substances. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, v. 30, p. 261, 1984.

TANABASHI, M. *et al.* Review of particle physics. *Physical Review D*, v. 98, n. 446, p. 030001, 2018.

TANDBERG-HANSEN, E.; EMSLIE, G. *The physics of solar flares*. New York: Cambridge University Press, 2009.

THEREZA, R. M. *Desenvolvimento de templates para modelagem do espectro de linhas de desexcitação nuclear em explosões solares utilizando o pacote FLUKA*. 2021. Dissertação (Mestrado em Ciências e Aplicações Geoespaciais) – Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, 2021.

TUNEU, J. *Contribuição de pósitrons e elétrons secundários de alta energia para o espectro em rádio de explosões solares*. 2016. Dissertação (Mestrado em Ciências e Aplicações Geoespaciais) – Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, 2016.

TUNEU, J.; SZPIGEL, S.; GIMÉNEZ DE CASTRO, C. G.; MACKINNON, A. L. Contribution of energetic ion secondary particles to solar flare radio spectra. *In: NANDY, D.; VALIO, A.; PETIT, P. (ed.). Living around active stars: IAU Symposium. 2017. v. 328, p. 120, Cambridge University Press, Cambridge, UK.*

TUSNSKI, D. S. *Modelagem de processos nucleares de alta energia em explosões solares utilizando o pacote FLUKA*. 2028. Tese (Doutorado em Ciências e Aplicações Geoespaciais) – Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, 2018.

TUSNSKI, D. S.; SZPIGEL, S.; GIMÉNEZ DE CASTRO, C. G.; MACKINNON, A. L.; SIMÕES, P. J. A. Self-consistent modeling of gamma-ray spectra from solar flares with the Monte Carlo simulation package FLUKA. *Solar Physics*, v. 294, n. 8, p. 103, 2019.

VERNAZZA, J. E.; AVRETT, E. H.; LOESER, R. Structure of the solar chromosphere, III – models of the EUV brightness components of the quiet-sun. *Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 45, p. 635, 1981.

VILMER, N.; MACKINNON, A. L.; HURFORD, G. J. Properties of energetic ions in the solar atmosphere from γ -ray and neutron observations. *Space Science Reviews*, v. 159, p. 167, 2011.

VILMER, N. *et al.* High energy particles accelerated during the large solar flare of 1990 May 24: X/ γ -ray observations. *Astronomy and Astrophysics*, v. 412, p. 865, 2003.

ZIEGLER, J.; ANDERSEN, H. *The stopping and ranges of ions in matter*. New York: Pergamon Press, 1977. 4 v.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa de São Paulo (Fapesp) através de Auxílio à Pesquisa – Regular (Processo nº 2017/13282-5). Raphael Malagoli Thereza recebeu apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) através de bolsa de mestrado.

Contato

Raphael Malagoli Thereza
E-mail: raphaelmalogoli@gmail.com

Tramitação

Recebido em: 08/11/2021
Aprovado em: 19/06/2023