

<<Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова>>  
Кафедра общей ядерной физики

# Оптимизация параметров оптического потенциала для реакций рассеяния нейтронов на ядрах $^{24}\text{Mg}$ , $^{28}\text{Si}$ , $^{32}\text{S}$ .

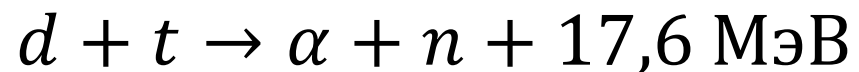
Выполнил студент гр. 413: Пампушик Григорий Владимирович

Научный руководитель: к.ф.-м. н, Третьякова Татьяна Юрьевна

Научный консультант: к.ф.-м. н, Фёдоров Никита Александрович

# Введение

- Проект <<TANGRA>> (**TA**gged **N**eutron and **G**amma **RA**ys) посвящён изучению нейтрон-ядерных взаимодействий с использованием метода меченых нейтронов (ММН).
- Энергия нейтронов на установках TANGRA: 14.1 МэВ



- Измеряются свойства  $\gamma$ -квантов (выходы, угловые распределения) и нейтронов (угловые распределения)

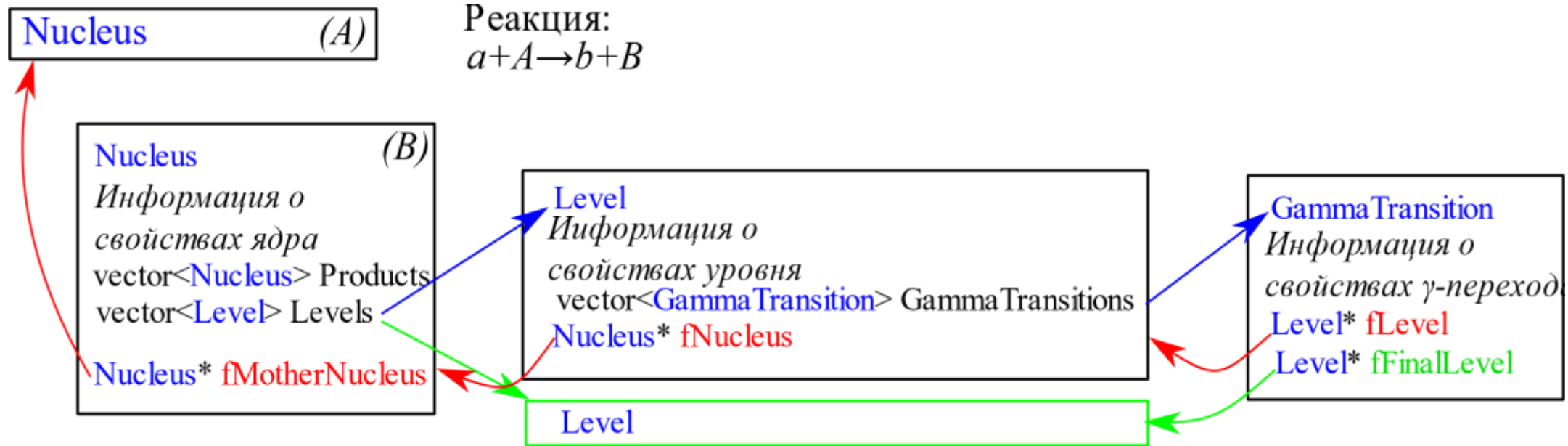
## Цели коллаборации

- Обновление баз данных по нейтрон-ядерным реакциям
- Исследование структуры атомных ядер.

# TALYS и библиотека TalysLib

- TALYS - программа позволяющая проводить расчеты свойств ядерных реакций в широком диапазоне энергий (1 кэВ - 200 МэВ) и ядер ( $A \geq 12$ ).
- TALYS объединяет в себе множество теоретических моделей для описания различных процессов (оптическая модель, метод связанных каналов, Борновское приближение искаженных волн и т.д.)
- TalysLib - объектно-ориентированная C++ библиотека, основанная на ROOT (<https://github.com/terawatt93/TalysLib>).
- TalysLib автоматизирует работу с TALYS и его базой данных.
- В ходе выполнения данной работы была добавлена возможность работы с EXFOR и ENDF, использованная для извлечения данных, на которых выполнялась оптимизация параметров оптической модели.

# Структура TalysLib



- В основе библиотеки лежат 3 класса, каждый из которых соответствует физическому объекту.
- Каждый из классов хранит указатели на объект, находящийся выше по иерархии.

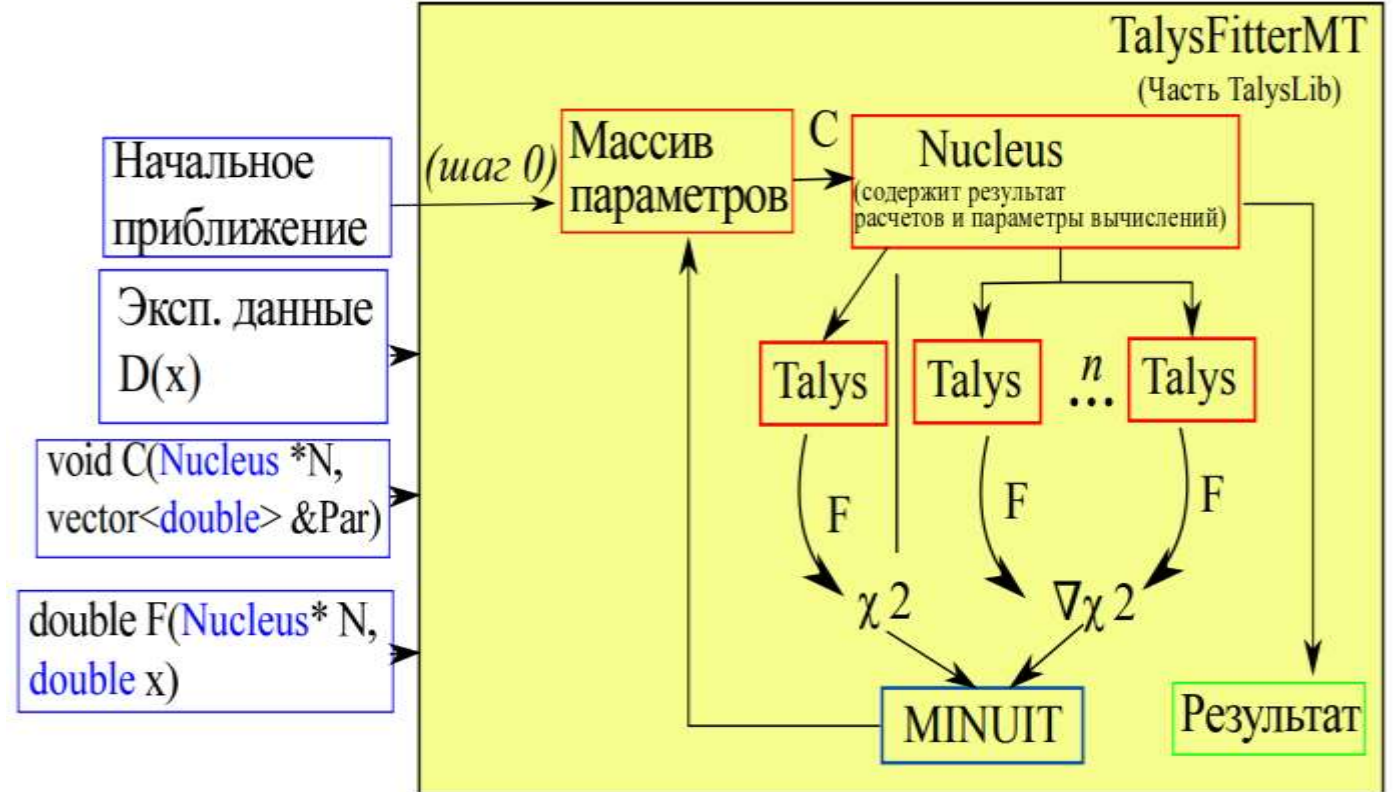
# Извлечение экспериментальных данных из EXFOR

- На сегодняшний день не существует C++ или Python-библиотек, позволяющих считывать данные из файлов EXFOR.
- Приходится выполнять поиск и обработку данных вручную.
- Автоматизация этого процесса могла бы облегчить подбор параметров теоретических моделей и сравнение результатов с экспериментальными данными.
- В ходе данной работы были проанализированы существующие форматы табулированных данных, полученные путем автоматизированной обработки файлов EXFOR: C4 и EXFORTABLES.



# Подбор параметров моделей

- Подбор параметров модели осуществляется с помощью класса TalysFitterMT и минимизатора MINUIT, встроенного в ROOT.
- Экспериментальные данные представляются в виде таблично заданной функции  $D(x)$ .
- Функция  $C$  сопоставляет набор подбираемых параметров с параметрами вычислений.
- Функция  $F$  описывает процедуру извлечения данных, соответствующих экспериментальным, из основных классов библиотеки.



Блок-схема подбора параметров.

# Оптический потенциал

Взаимодействие частицы и атомного ядра описывается комплексным потенциалом:

$$U(r) = V(r) + iW(r)$$

Феноменологический оптический потенциал из работы Кёнинга-Делароша [1]:

$$U(r, E) = -\mathcal{V}_V(r, E) - i\mathcal{W}_V(r, E) - i\mathcal{W}_D(r, E) + \\ + (\vec{l} \cdot \vec{\sigma})(\mathcal{V}_{SO}(r, E) + i\mathcal{W}_{SO}(r, E)) + \mathcal{V}_C(r)$$

$$\mathcal{V}_V(r, E) = V_V(E) f(r, R_V, a_V),$$

$$\mathcal{W}_V(r, E) = W_V(E) f(r, R_V, a_V),$$

$$\mathcal{W}_D(r, E) = -4a_D W_D(E) \frac{d}{dr} f(r, R_D, a_D),$$

$$\mathcal{V}_{SO}(r, E) = V_{SO}(E) \left( \frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}),$$

$$\mathcal{W}_{SO}(r, E) = W_{SO}(E) \left( \frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}).$$

Форм-фактор Вудса-Саксона:

$$f(r, R_i, a_i) = \left( 1 + \exp[(r - R_i)/a_i] \right)^{-1}$$

1. Koning A. J., Delaroche J. P. Nucl. Phys. A. 2003. Vol. 713, P. 231.



# Модельное описание прямых процессов

Метод искаженных волн (DWBA)

- Упругое рассеяние и поглощение являются доминирующими процессами
- Вклады каждого из отдельных каналов невелики

Метод связанных каналов (СС)

- Полный учёт нескольких избранных каналов реакции
- Влияние отброшенных каналов учитывается через оптический потенциал ядра

Сферическая форма потенциала ядра:  $R_i = r_i A^{1/3}$

Симметричный ротатор:  $R_i = r_i A^{1/3} (1 + \sum_{\lambda=2,4,\dots} \beta_\lambda Y_\lambda^0(\theta, \varphi))$

Колебательная модель:  $R_i = r_i A^{1/3} (1 + \sum a_{\lambda\mu} Y_\lambda^\mu(\theta, \varphi))$

Асимметричный ротатор:  $R_i(\Theta) = r_i A^{1/3} [1 + \beta_2 \cos \gamma Y_2^0(\Omega) + \sqrt{\frac{1}{2}} \beta_2 \sin \gamma (Y_2^2(\Omega) + Y_2^{-2}(\Omega)) + \beta_4 Y_4^0(\Omega)]$

# Объекты исследования

Тип коллективных возбуждений:

- Магний: асимметричный ротатор (AROT)
- Кремний: ротатор (ROT)
- Сера: осциллятор (VIB)

Значения параметров деформации:

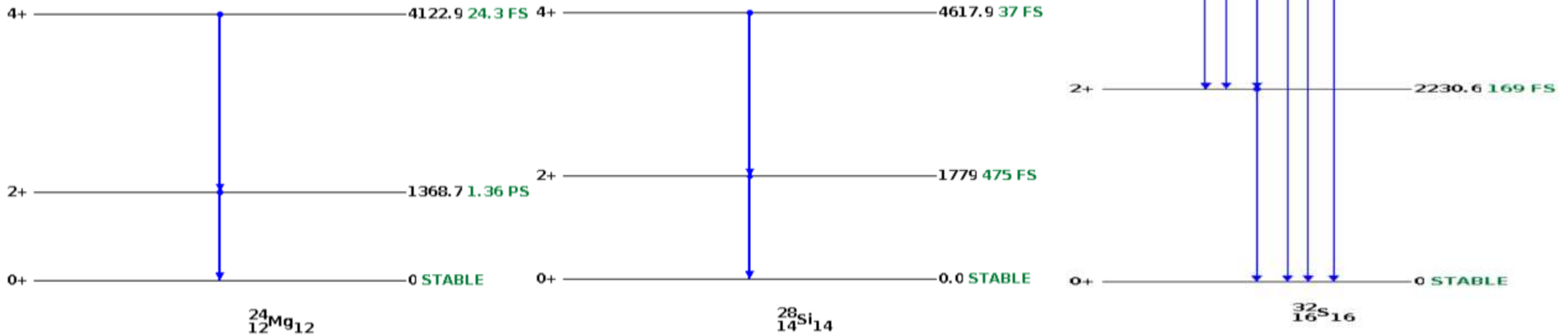
$$\beta_2 = 0.592 \quad \beta_4 = -0.05 \text{ (для всей полосы) [1]}$$

$$\beta_2 = -0.420 \quad \beta_4 = 0.2 \text{ (для всей полосы) [2]}$$

$$\beta_2 = 0.299 \text{ (для 1-ого возбужденного состояния) [1]}$$

1. TALYS 2.0 deformation files.

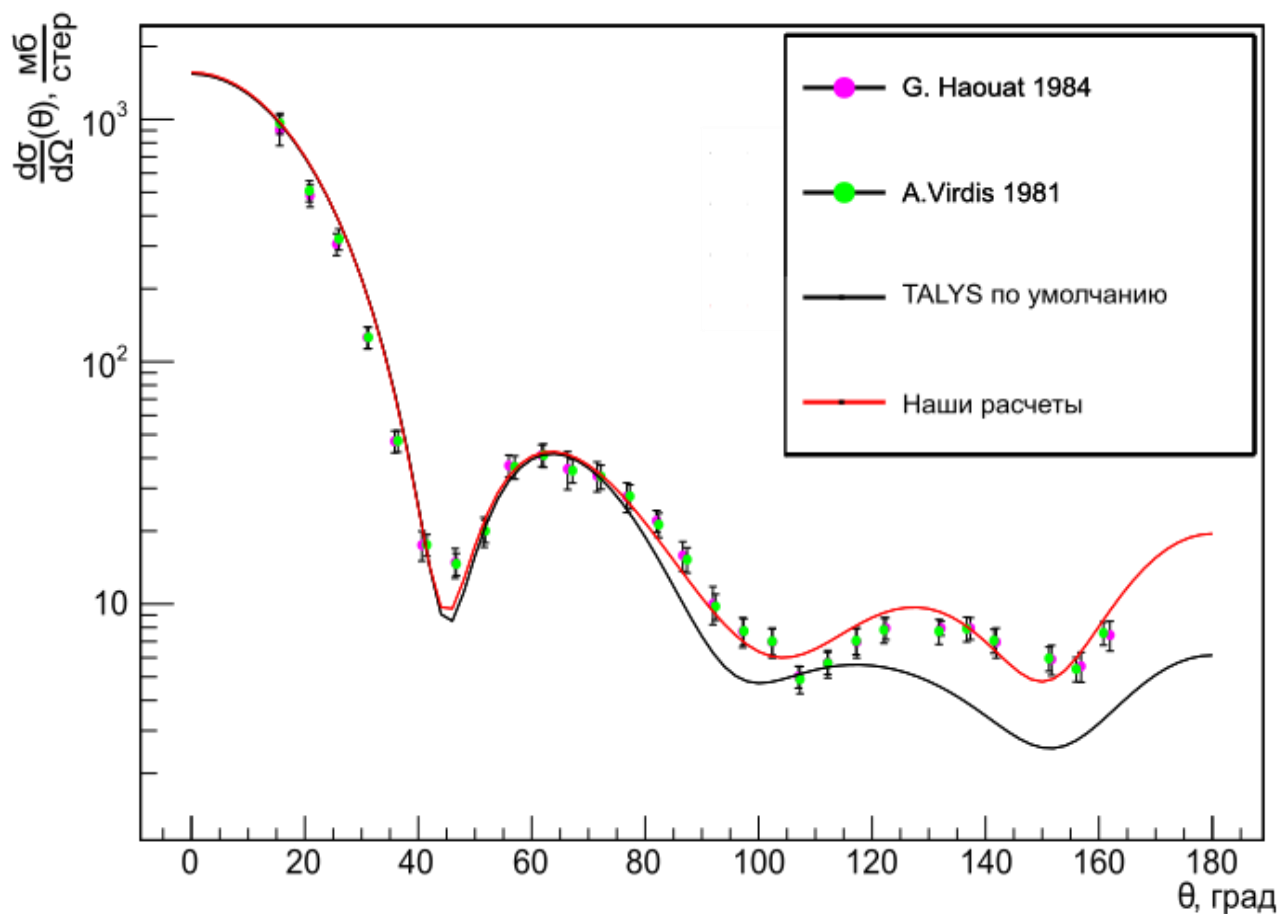
2. Haouat G. et al. Phys. Rev. C. 1984. Vol. 30, no. 6. P. 1795.



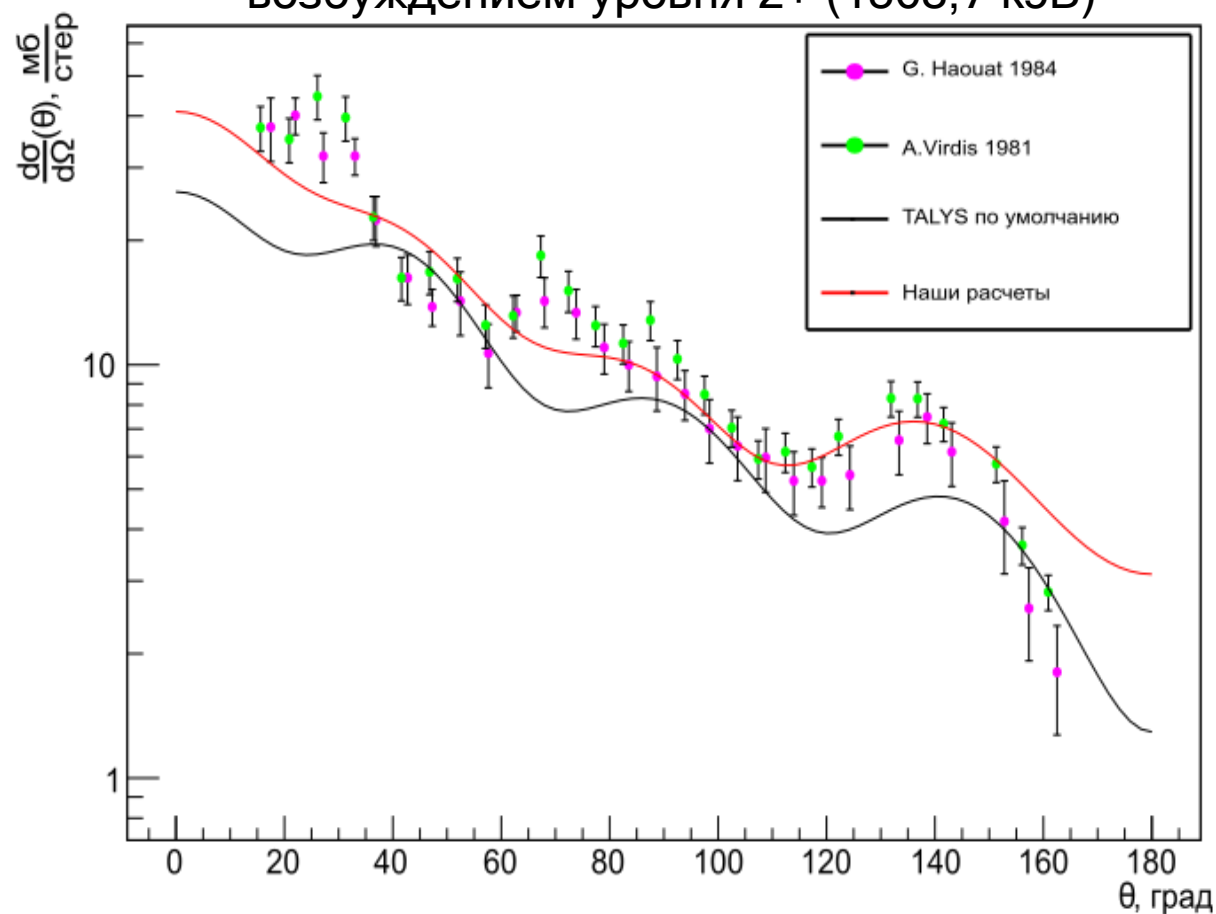
Спектры низколежащих состояний  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$ .

# Результаты аппроксимации угловых распределений рассеянных нейтронов ( $E_n$ : 14.6-15 МэВ) на ядре $^{24}\text{Mg}$

## Упругое рассеяние нейтронов на $^{24}\text{Mg}$



## Неупругое рассеяние нейтронов на $^{24}\text{Mg}$ с возбуждением уровня $2^+$ (1368,7 кэВ)

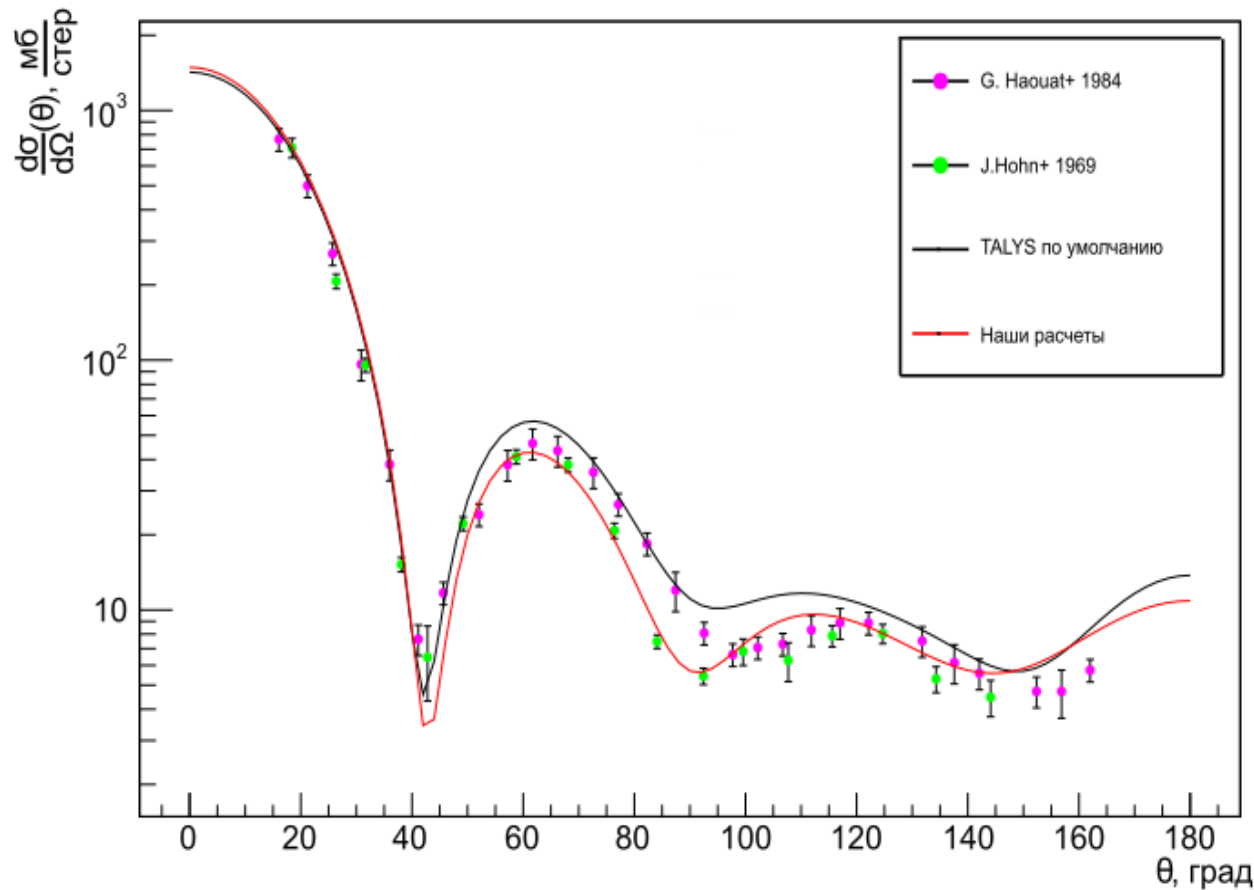


Черная линия – расчеты TALYS <<по умолчанию>> ( $\chi^2/N = 12.06$ )

Красная линия – наши расчеты ( $\chi^2/N = 3.91$ )

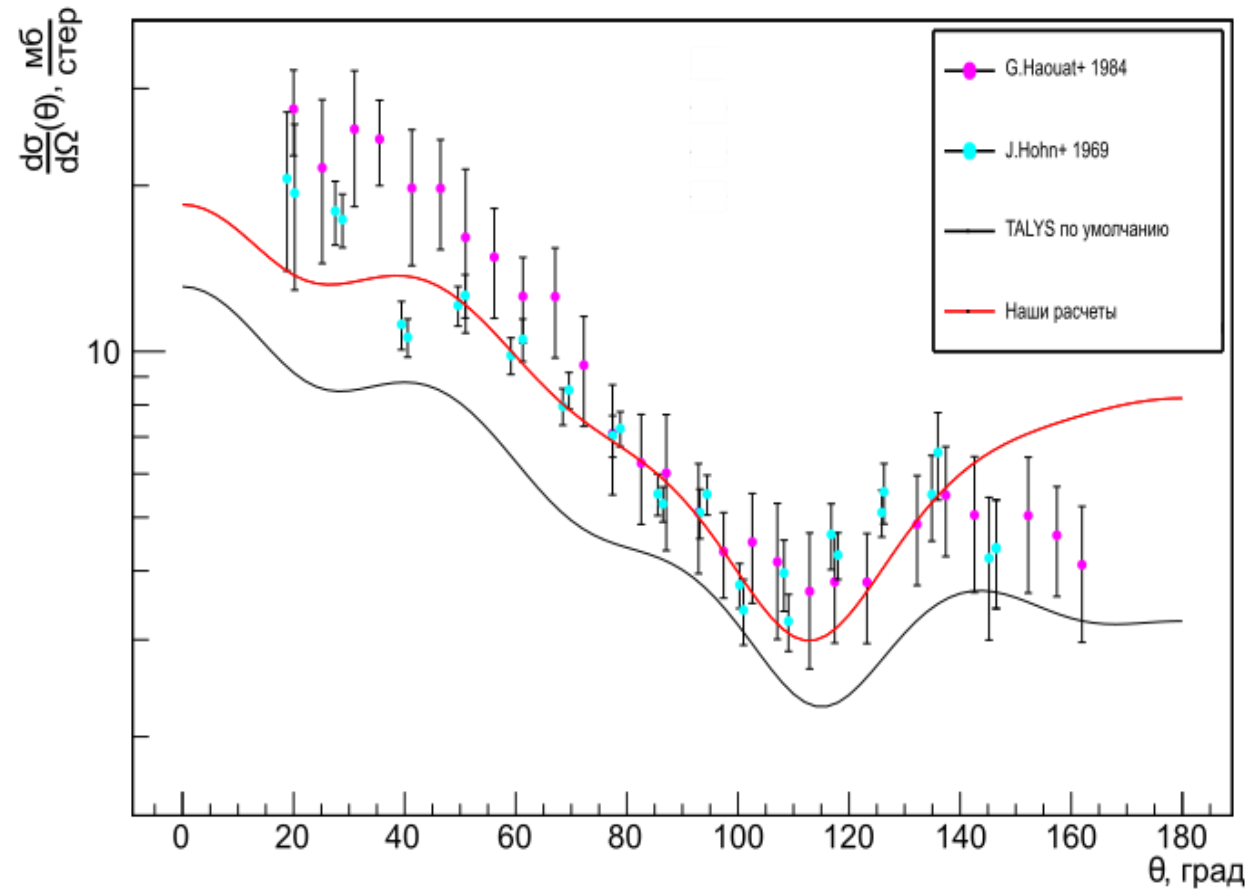
# Результаты аппроксимации угловых распределений рассеянных нейтронов ( $E_n$ : 14.6-15 МэВ) на ядре $^{28}\text{Si}$

## Упругое рассеяние нейтронов на $^{28}\text{Si}$



Черная линия – расчеты TALYS <<по умолчанию>> ( $\chi^2/N = 39.33$ )

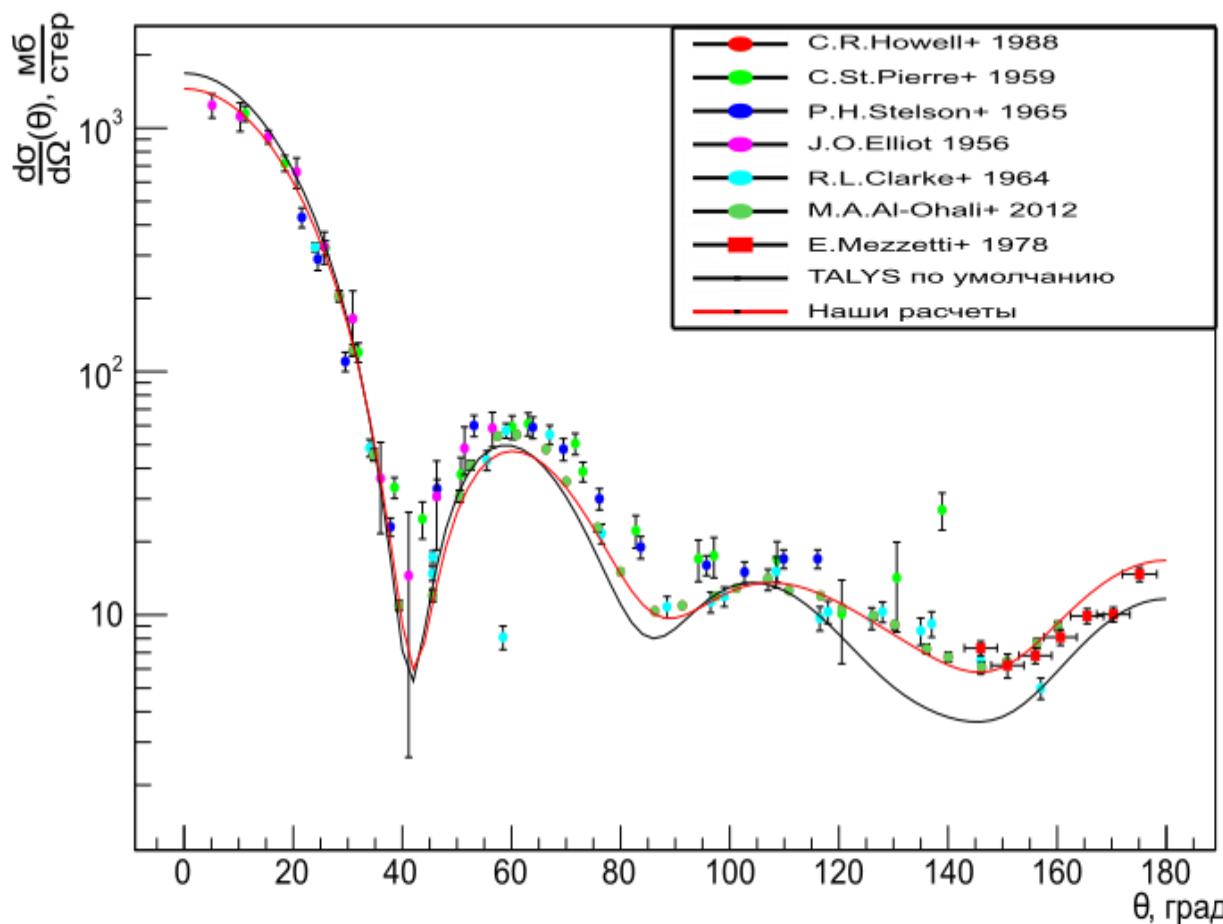
## Неупругое рассеяние нейтронов на $^{28}\text{Si}$ с возбуждением уровня $2+$ (1779 кэВ)



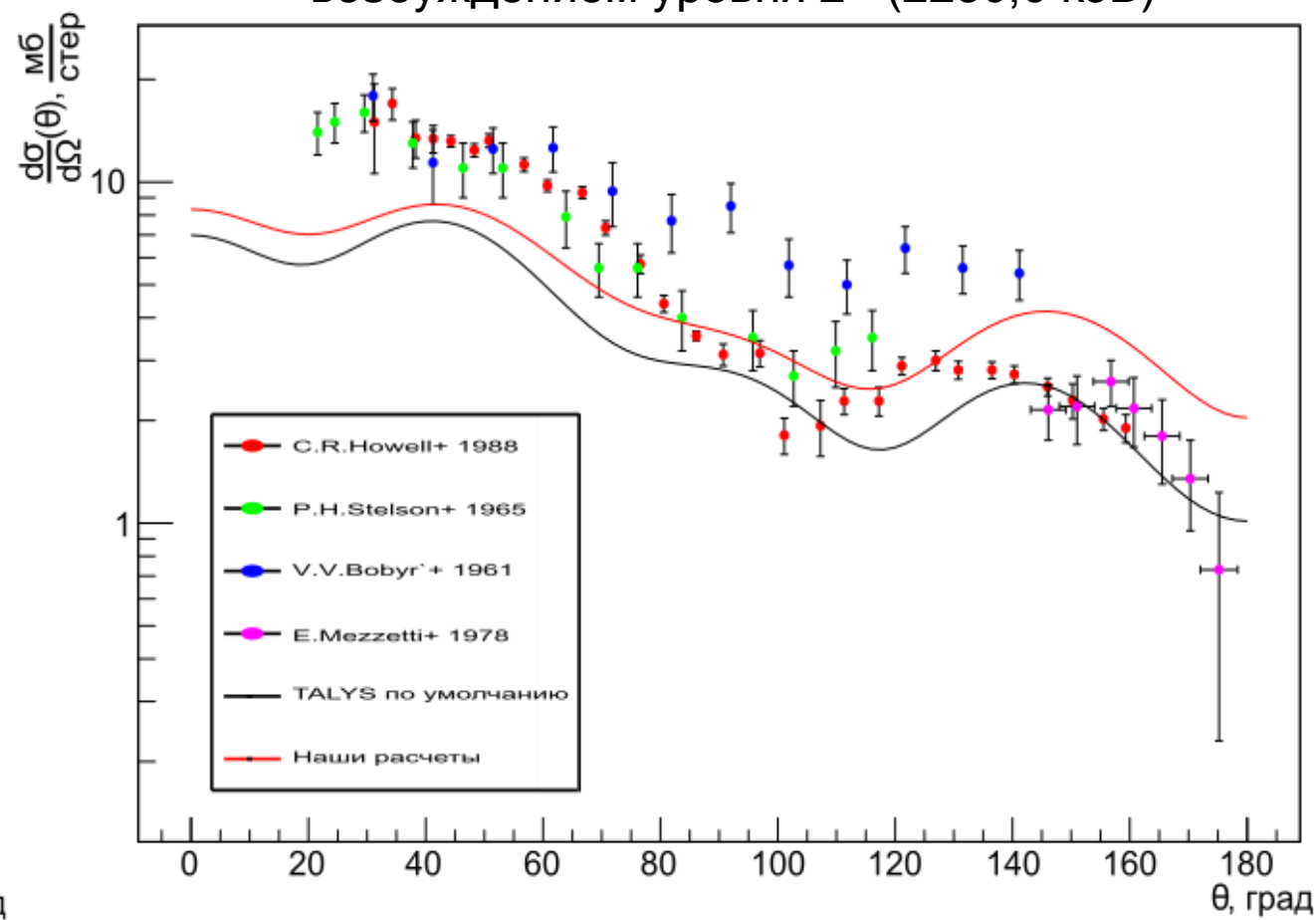
Красная линия – наши расчеты ( $\chi^2/N = 3.55$ )

# Результаты аппроксимации угловых распределений рассеянных нейтронов ( $E_n: 13.9-14.3$ МэВ) на ядре $^{32}\text{S}$

## Упругое рассеяние нейтронов на $^{32}\text{S}$



## Неупругое рассеяние нейтронов на $^{32}\text{S}$ с возбуждением уровня $2+$ (2230,6 кэВ)



Черная линия – расчеты TALYS <<по умолчанию>> ( $\chi^2/N = 74.65$ )

Красная линия – наши расчеты ( $\chi^2/N = 19.97$ )

# Результаты подбора параметров ОП

## $^{24}\text{Mg}$ (AROT)

	$\chi^2/N$	$V_V$ MeV	$W_V$ MeV	$W_D$ MeV	$V_{SO}$ MeV	$W_{SO}$ MeV	$r_V$ fm	$a_V$ fm	$r_D$ fm	$a_D$ fm	$r_{SO}$ fm	$a_{SO}$ fm	$\beta_2$	$\gamma$	$\beta_4$
TALYS def	12.06	48.70	1.286	7.63	5.413	-0.07	1.163	0.674	1.296	0.54	0.96	0.59	0.592	20	-0.05
Наши расчеты	3.91	48.36	0.971	4.79	4.735	0	1.167	0.633	1.349	0.70	0.85	0.58	0.579	20	-0.107

## $^{28}\text{Si}$ (ROT)

TALYS def	39.33	48.93	1.21	7.68	5.44	-0.07	1.17	0.67	1.29	0.54	0.97	0.59	-0.420		0.2
Наши расчеты	3.55	51.76	0.90	4.80	5.38	0	1.15	0.53	1.38	0.73	0.96	0.58	-0.413		0

## $^{32}\text{S}$ (VIB)

TALYS def	74.65	48.89	1.20	7.68	5.46	-0.07	1.18	0.67	1.29	0.54	0.98	0.59	0.299		
Наши расчеты	19.97	50.60	0.93	4.78	7.62	0	1.17	0.58	1.14	0.76	0.83	1.0	0.316		

# ИТОГИ

- Был протестирован функционал автоматического получения экспериментальных данных и подбора параметров библиотеки TalysLib.
- С помощью TalysLib были получены новые наборы параметров оптического потенциала и значений параметров деформации для ядер  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$ .
- Результаты аппроксимации угловых распределений показывают, что результаты расчетов TALYS <<по умолчанию>> могут быть значительно улучшены.

Результаты работы были представлены на конференциях:

- The XXVI International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2022)
- Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине (2022)
- Ломонсов-2023
- ISIN-29

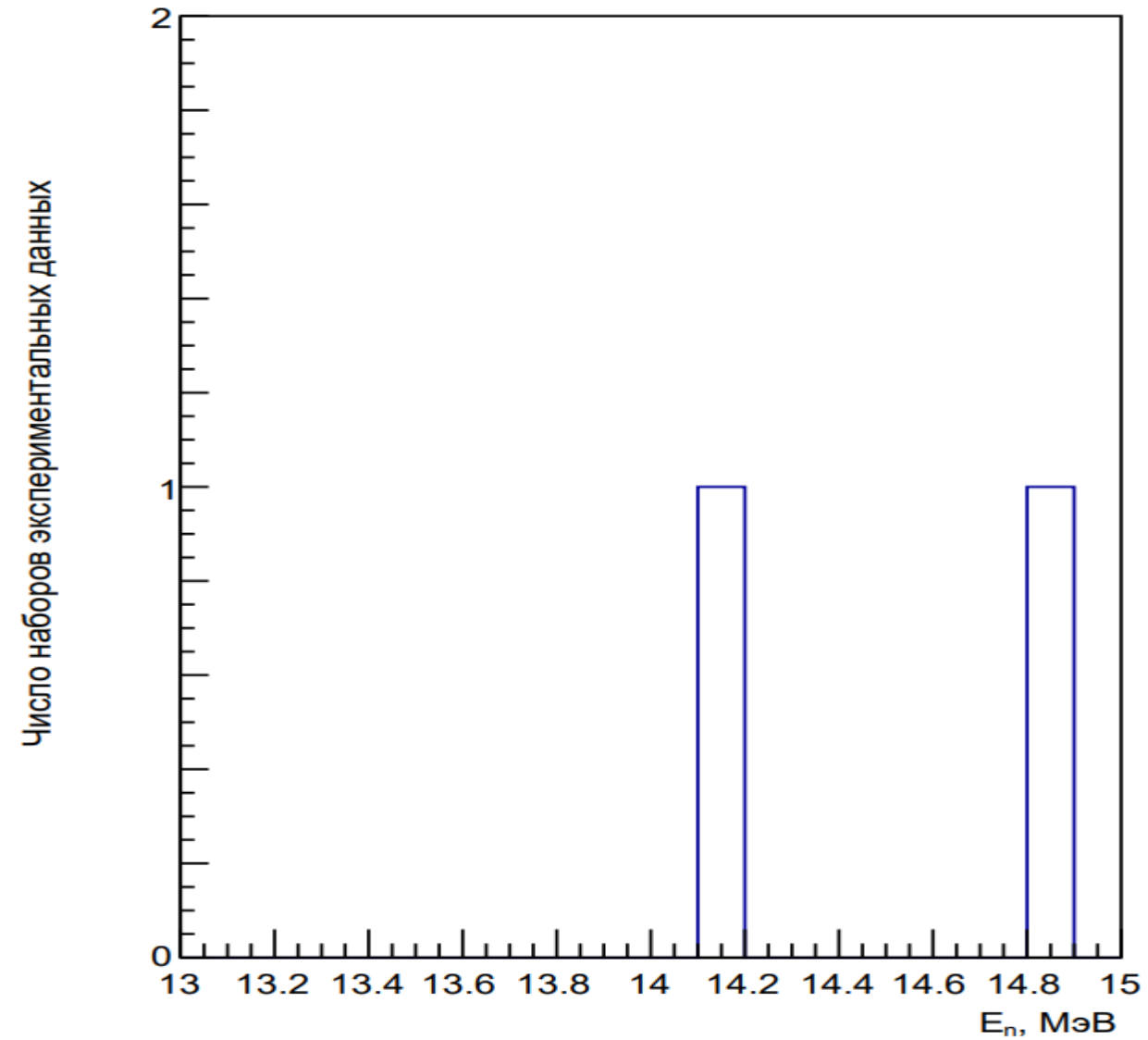
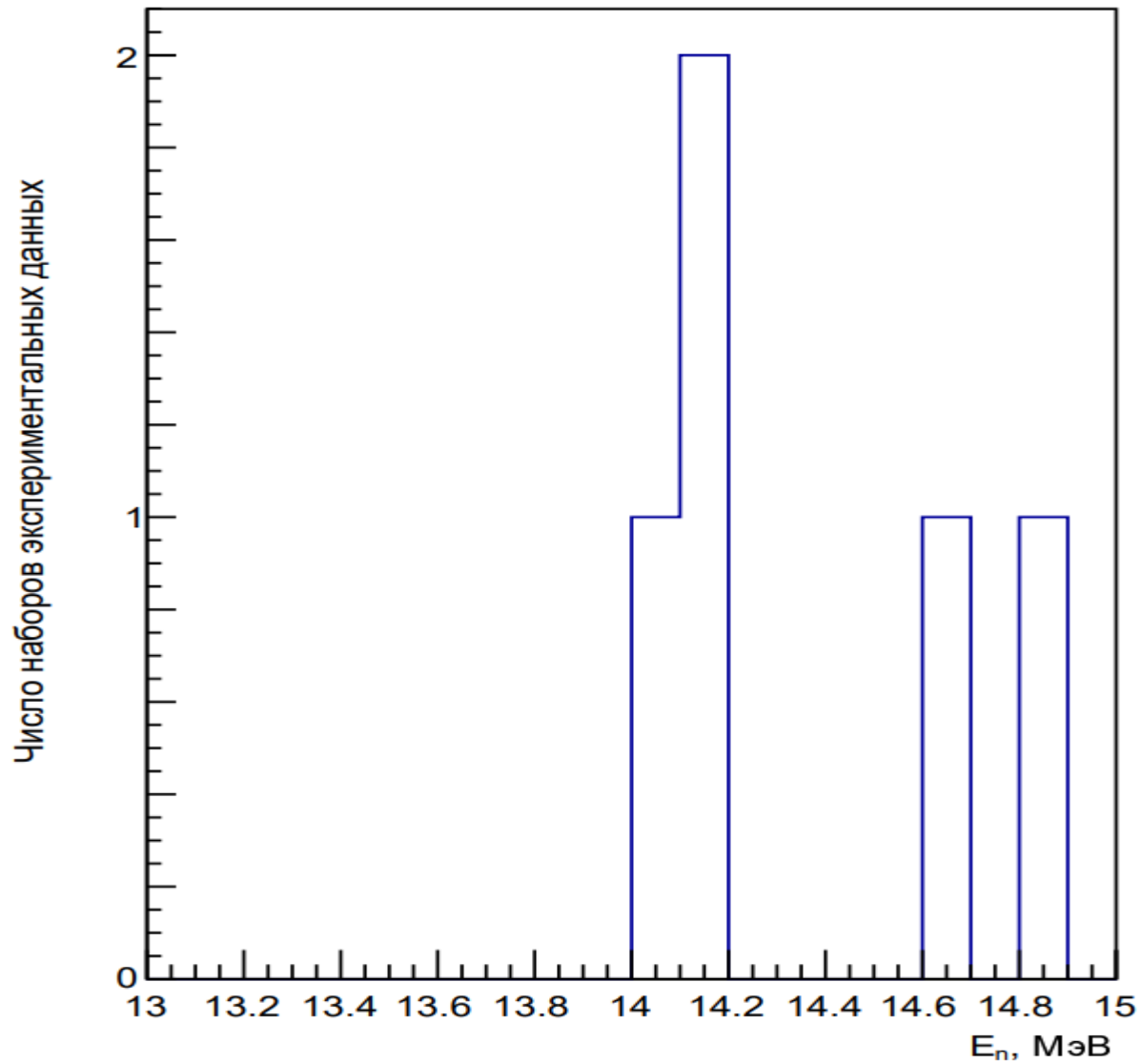
Статья с результатами принята в печать:

- Г.В. Пампушик, Н.А. Фёдоров <<Развитие библиотеки TalysLib>> Ученые записки физического факультета Московского Университета

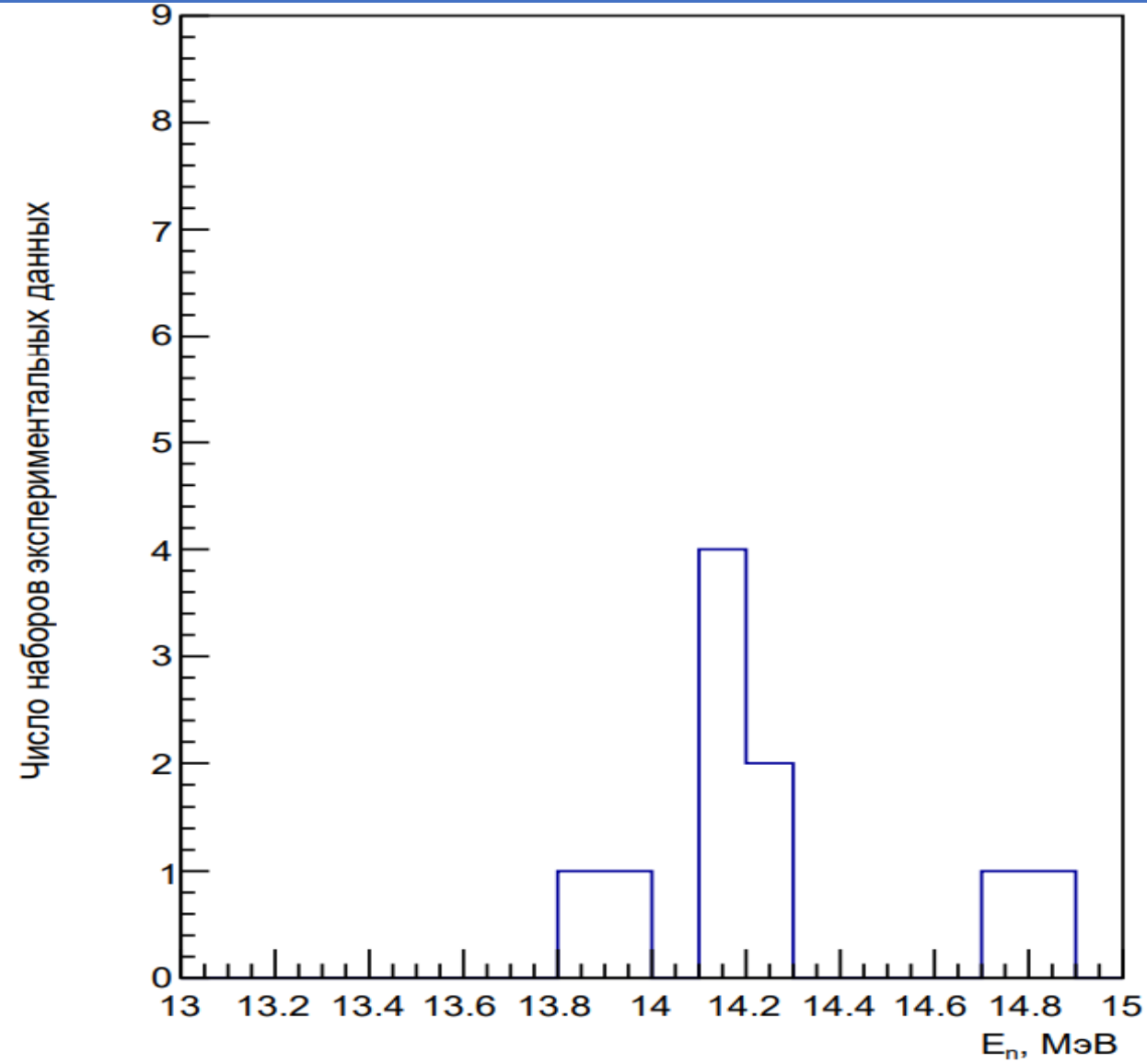
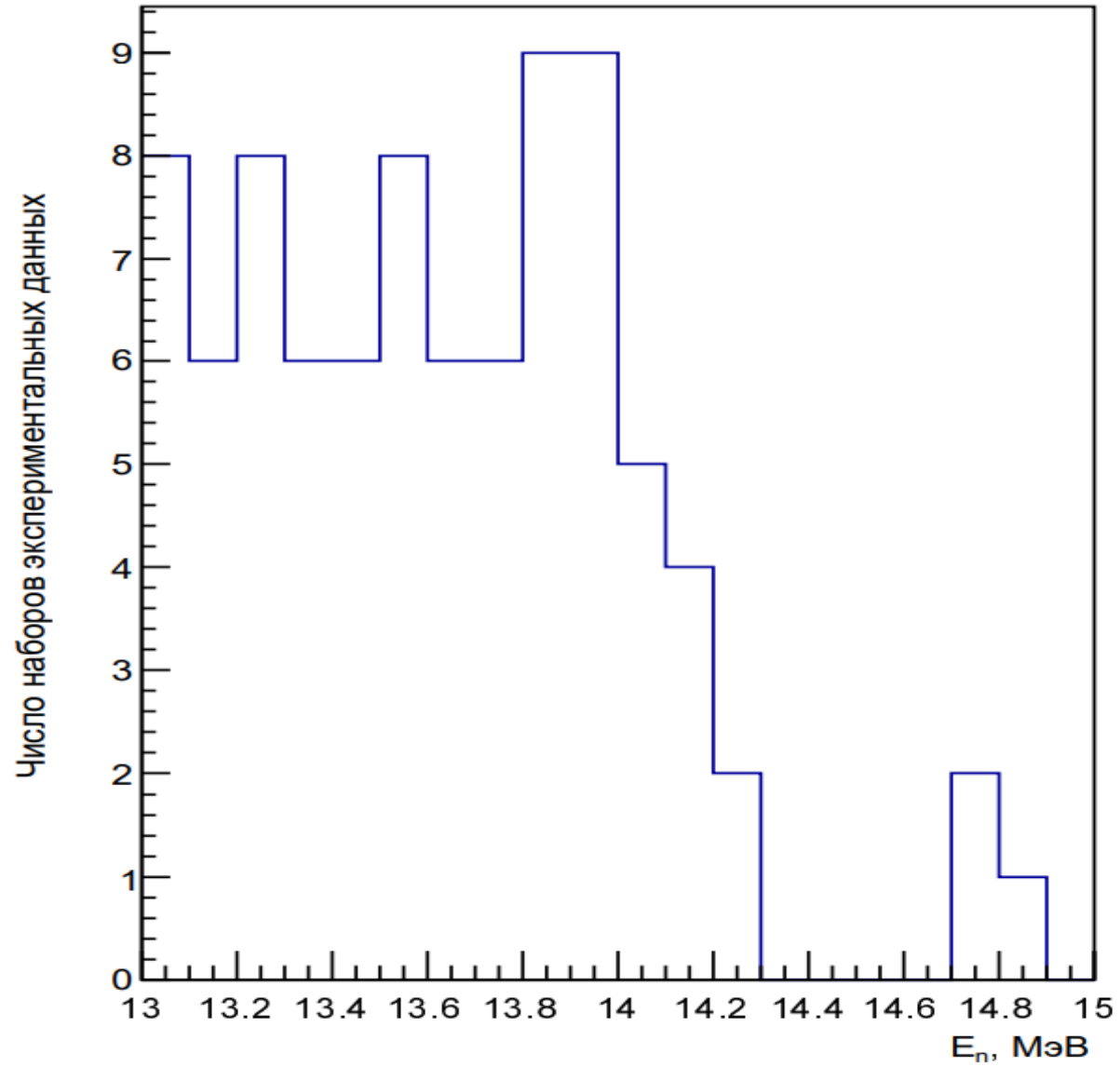
**Спасибо за внимание!**

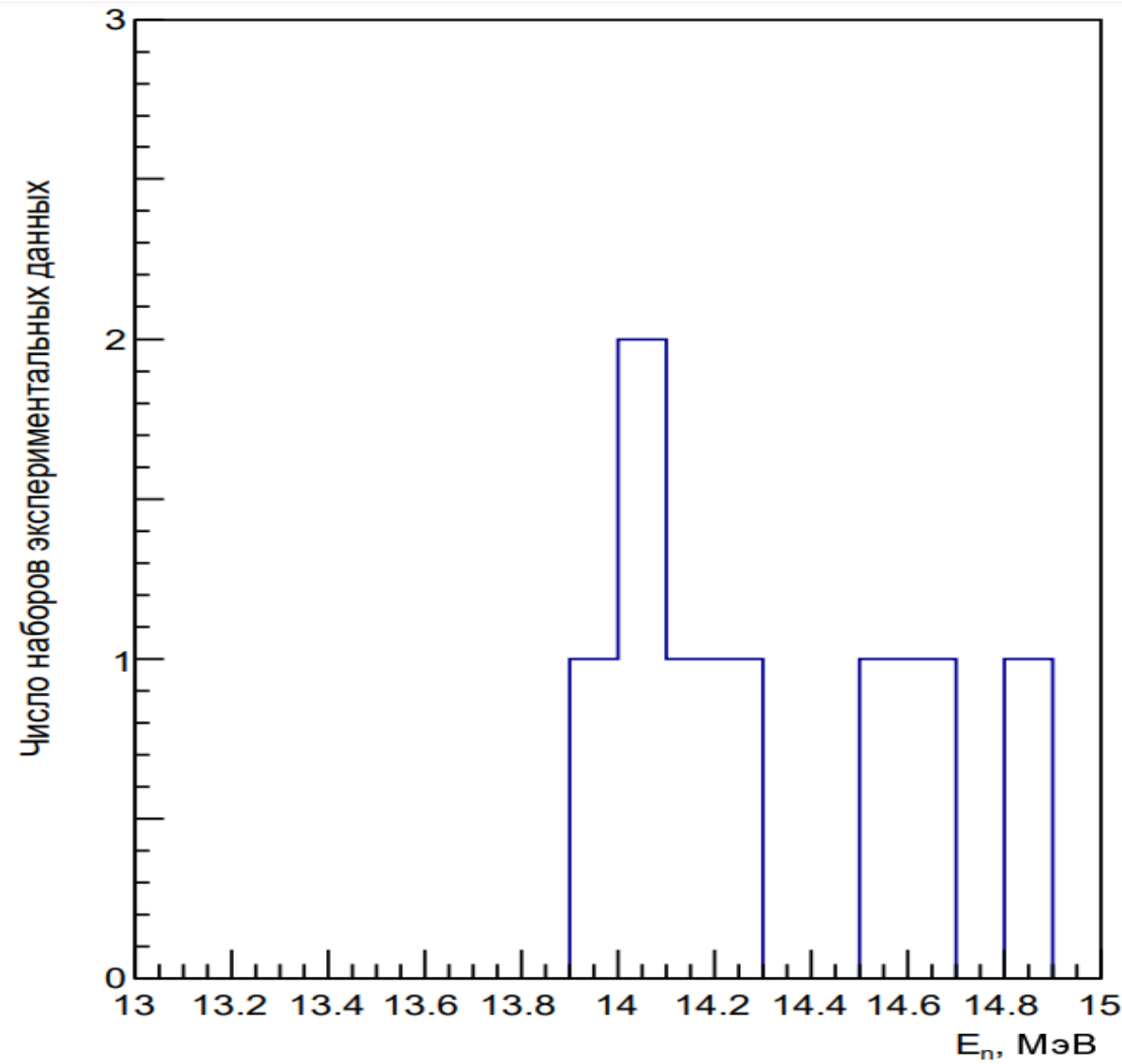
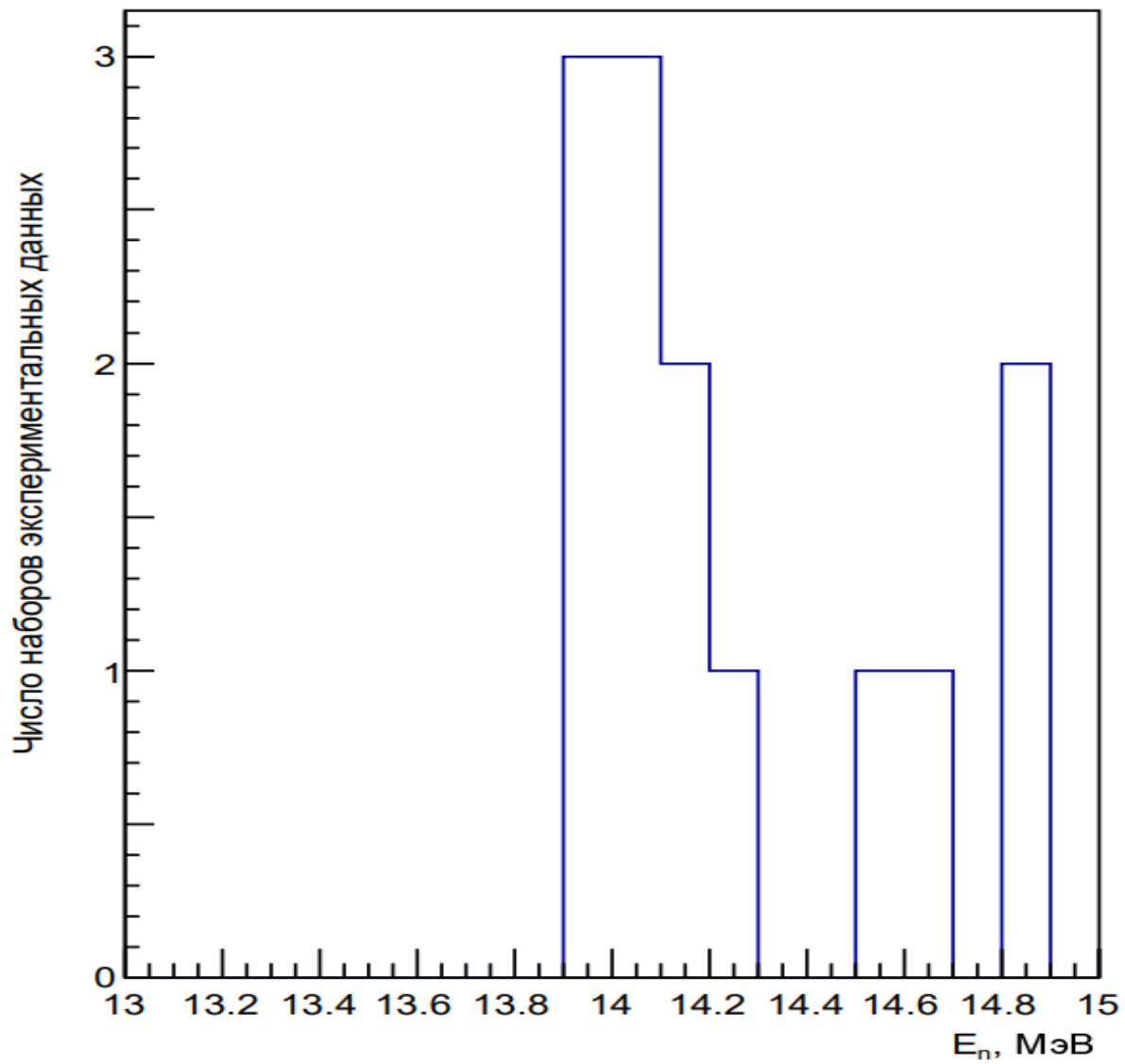


# $^{24}\text{Mg}$



# $^{28}\text{Si}$





# Приложение: зависимость параметров от $E_n$

$$V_V(E) = v_1[1 - v_2(E - E_f) + v_3(E - E_f)^2 - v_4(E - E_f)^3],$$

$$W_V(E) = w_1 \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (w_2)^2},$$

$$r_V = \text{constant},$$

$$a_V = \text{constant},$$

$$W_D(E) = d_1 \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (d_3)^2} \exp[-d_2(E - E_f)],$$

$$r_D = \text{constant},$$

$$a_D = \text{constant},$$

$$V_{SO}(E) = v_{so1} \exp[-v_{so2}(E - E_f)],$$

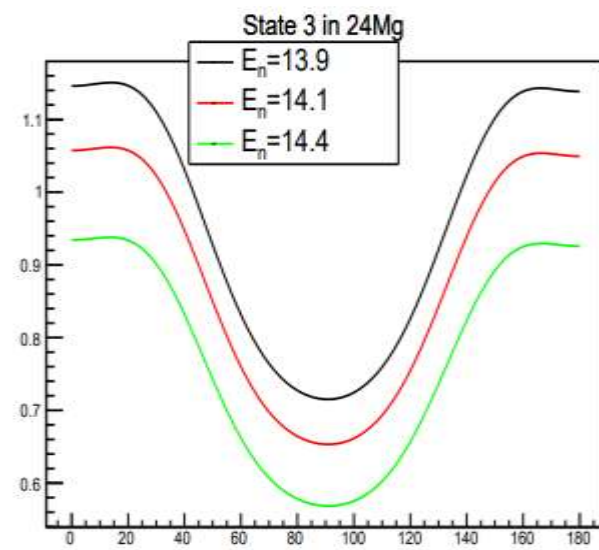
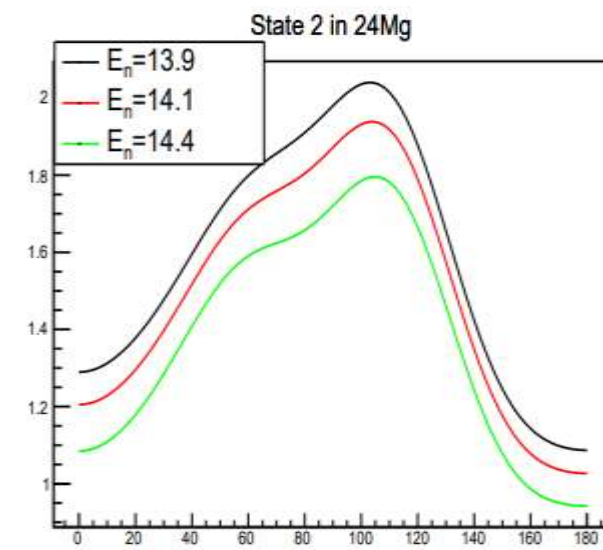
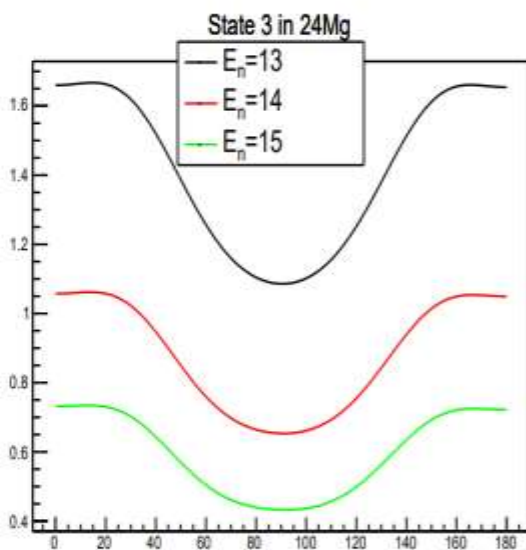
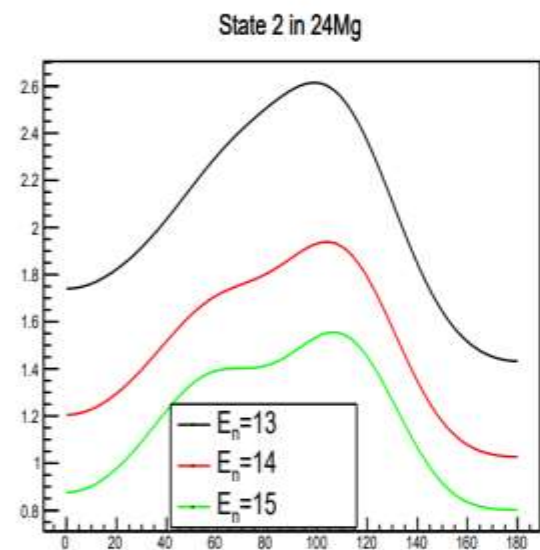
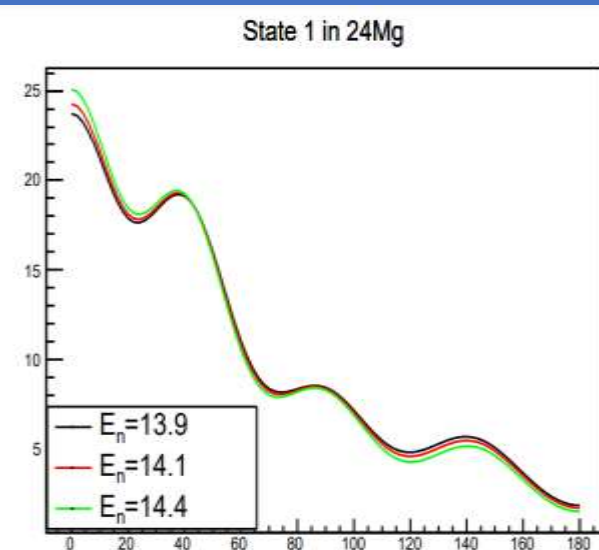
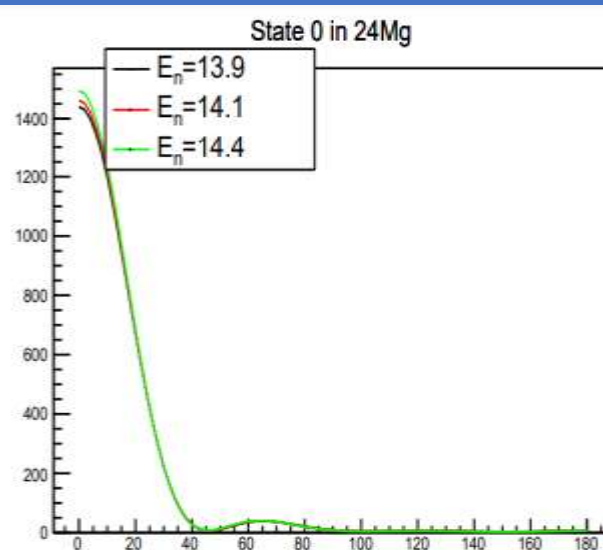
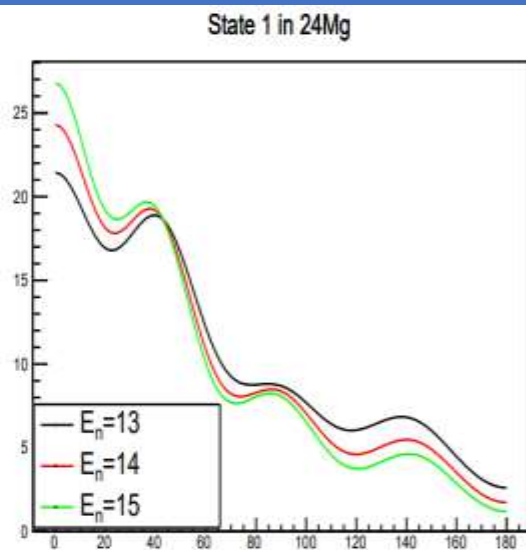
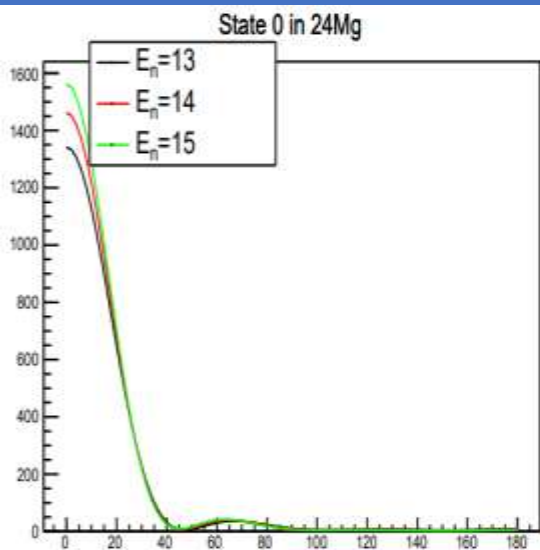
$$W_{SO}(E) = w_{so1} \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (w_{so2})^2},$$

$$r_{SO} = \text{constant},$$

$$a_{SO} = \text{constant},$$

$$r_C = \text{constant},$$

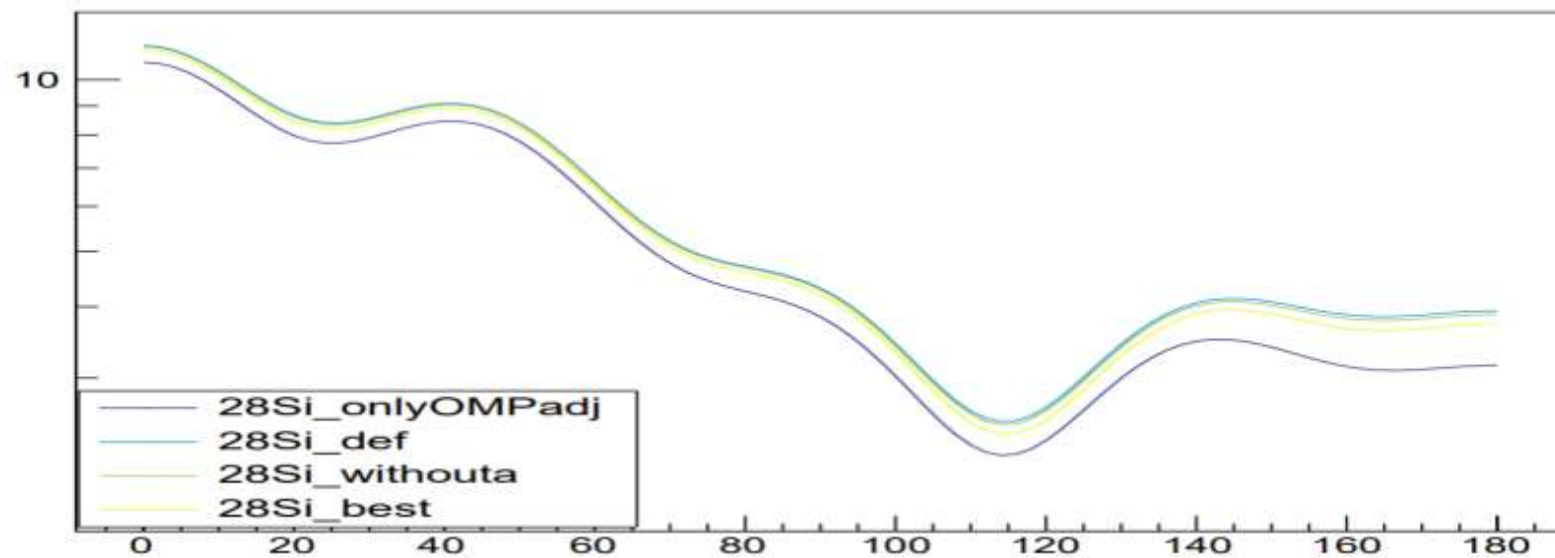
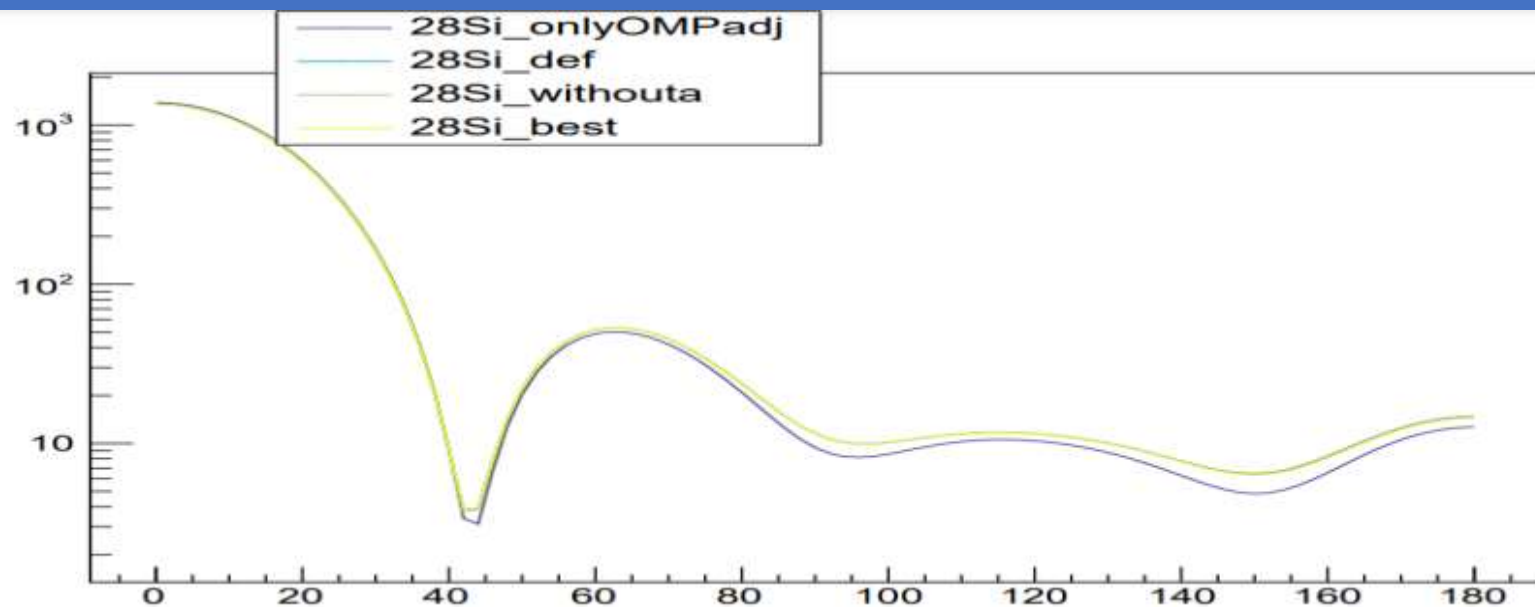
# Приложение: зависимость расчетов TALYS от $E_n$



# Приложение: параметры <<best>>

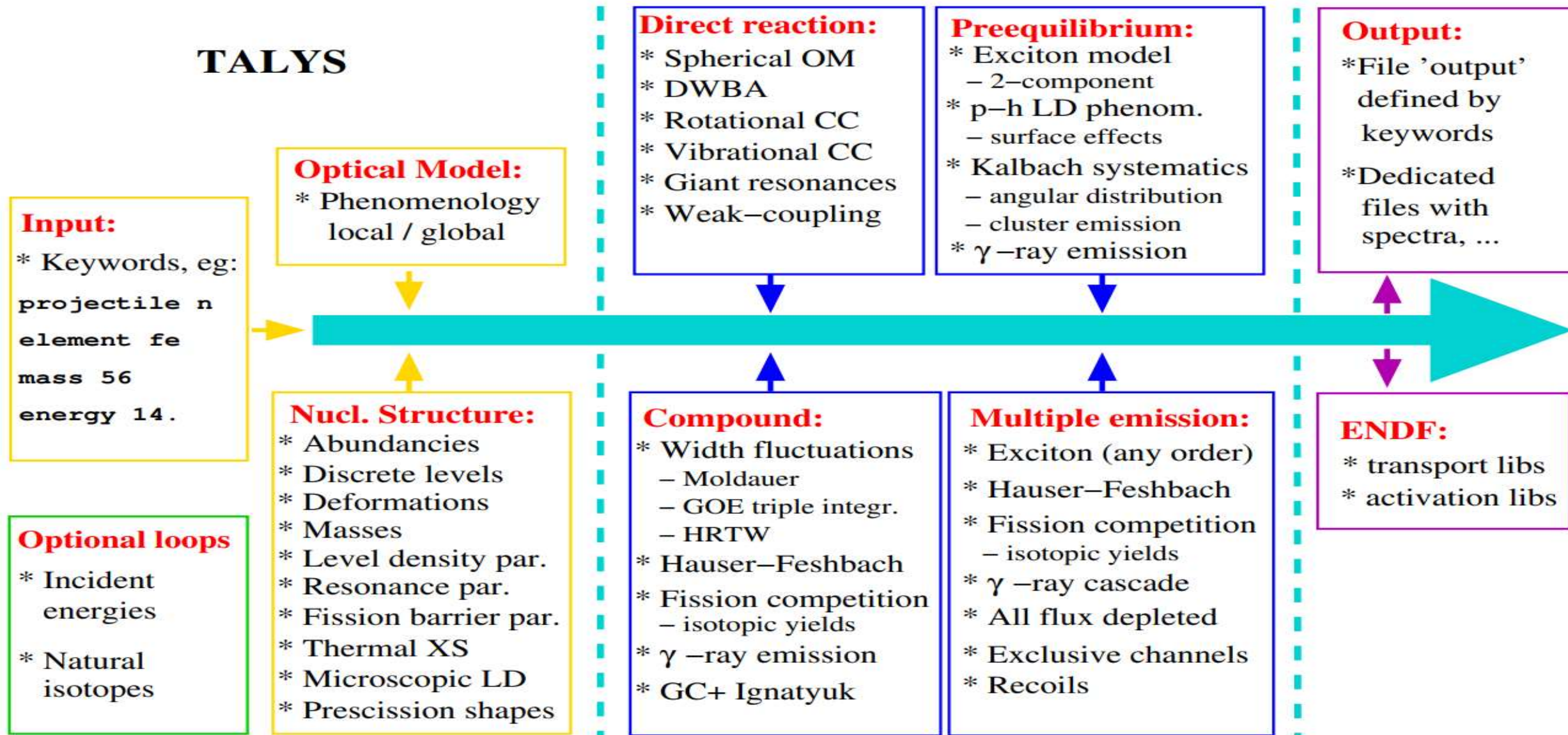
Пример для ядра  $^{28}\text{Si}$

```
#
# General
#
ldmodel 2
#
# (n,tot), (n,el), (n,inl)
#
#
# (n,p), (n,2n), (n,np)
#
rvadjust p 0.92
avadjust p 0.92
aadjust 13 28 1.00
rvadjust p 0.95
avadjust p 0.95
aadjust 13 28 1.00
#
# (n,a)
#
rvadjust a 1.10
avadjust a 1.10
#
# (n,g)
ldmodelCN 1
#
#
# Other: Isomers, (n,d), (n,t), (n,h) etc.
#
Cstrip t 2.5
Cknock t 2.5
```

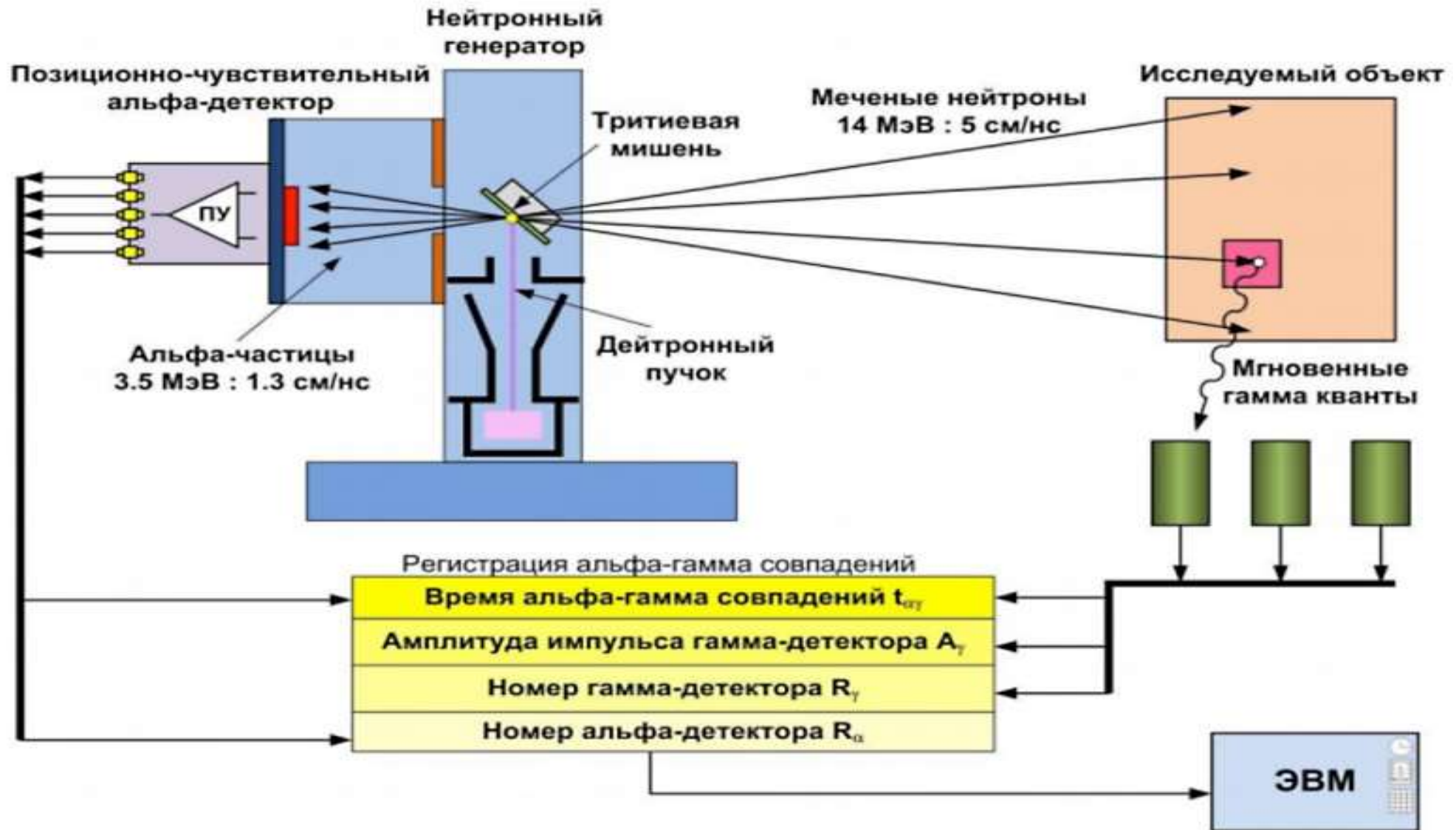


# Приложение: модели TALYS

## TALYS



# Приложение: ММН





# Приложение: экспериментальные данные

Реакция	Автор	Год	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	A. Virdis	1984	14.83
	G. Haouat+	1981	14.83
$(n, n')$	A. Virdis	1984	14.83
	G. Haouat+	1981	14.83

$^{24}\text{Mg}$  ( $E_n$ : 14.6-15 МэВ)

Реакция	Автор	Год	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	G. Haouat+	1984	14.83
	J. Hohn+	1969	14.7
$(n, n')$	G. Haouat+	1984	14.83
	J. Hohn+	1969	14.7

$^{28}\text{Si}$  ( $E_n$ : 14.6-15 МэВ)

Реакция	Автор	Год	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	C.R. Howell+	1988	13.92
	C.St. Pierre+	1959	13.95
	P.H. Stelson+	1965	14
	J.O. Elliot	1956	14
	R.L. Clarke+	1964	14.1
	M.A.Al-Ohali+	2012	13.92
	E. Mezzetti+	1978	14.2
$(n, n')$	C.R. Howell+	1988	13.92
	P.H. Stelson+	1965	14
	V.V. Bobyr+	1961	14
	E. Mezzetti+	1978	14.2

$^{32}\text{S}$  ( $E_n$ : 13.9 - 14.3 МэВ)