

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА  
«Оптимизация параметров оптического  
потенциала для реакций рассеяния нейтронов на  
ядрах магния, кремния и серы»

Выполнил студент  
413 группы  
Пампушик Григорий Владимирович

Научный руководитель:  
к.ф.-м.н. Т.Ю. Третьякова

Научный консультант:  
к.ф.-м.н. Н.А. Федоров

Допущена к защите  
Заведующий кафедрой  
чл.-корр. РАН Э.Э. Боос

Москва 2023

# Содержание

1	Введение	1
2	Модельное описание нейтрон-ядерных реакций	2
2.1	Оптическая модель	3
2.2	Описание прямых реакций	7
2.2.1	Борновское приближение искаженных волн	8
2.2.2	Метод связанных каналов	10
2.3	Модель составного ядра	13
2.4	Программа TALYS	15
3	Библиотека TalysLib	16
3.1	Подбор параметров моделей	18
3.2	Источники экспериментальных данных	21
4	Результаты	25
4.1	Магний	28
4.2	Кремний	32
4.3	Сера	37
5	Заключение	41

# 1 Введение

Исследование нейтрон-ядерных реакций имеет большое значение для науки и техники. Корректная информация об особенностях этих процессов необходима для моделирования ядерно-физических установок и планирования экспериментов. На основе экспериментальных данных, получаемых при изучении этих реакций могут быть уточнены параметры теоретических моделей, которые впоследствии могут быть использованы для расчета свойств других процессов. Однако, интерес к данным реакциям не ограничивается фундаментальными исследованиями. Благодаря компактности нейтронных генераторов реакции с нейтронами нашли широкое применение в элементном и изотопном анализе, а также в досмотровых установках. Точная и обширная база нейтронных данных требуется для моделирования характеристик реакторов на быстрых нейтронах.

Данная работа выполнена в рамках международной коллаборации TANGRA [1] (TAGged Neutrons and Gamma RAys), которая базируется в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ). Проект посвящен изучению нейтрон-ядерных взаимодействий с использованием метода меченых нейтронов. В качестве источника используется бинарная реакция  $d(t, \alpha)n$  в которой рождаются нейтроны с энергией 14.1 МэВ. Большинство экспериментов направлено на измерение характеристик вторичного  $\gamma$ -излучения и угловых распределений рассеянных нейтронов. Одной из основных целей коллаборации является обновление баз данных по нейтрон-ядерным реакциям. Для этого требуется анализ уже известных экспериментальных данных и их надежное модельное описание.

Целью данной работы является моделирование угловых распределений нейтронов, упруго и неупруго рассеянных на ядрах  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$  и  $^{32}\text{S}$ .

В работе будут обсуждаться различные теоретические подходы для описания нейтрон-ядерных реакций, способы получения экспериментальных данных из баз, а также будут приведены результаты модельных расчетов в рамках оптической модели.

## 2 Модельное описание нейтрон-ядерных реакций

Рассматриваемые в данной работе нейтроны с энергией 13-15 МэВ относятся к быстрым. Полное сечение взаимодействия с нейтронами в этой области энергии:  $\sigma_{tot} = 2\pi(R + \lambda_n)^2$ , где  $R$  – радиус ядра,  $\lambda_n$  – приведенная де-Бройлевская длина волны.

При взаимодействии нейтрона с ядром возможны следующие процессы: радиационный захват нейтрона  $(n, \gamma)$ , деление  $(n, f)$ , упругое  $(n, n)$  и неупругое рассеяние  $(n, n')$ . Также возможны реакции перезарядки  $(n, p)$ , реакции с вылетом нескольких нуклонов, например  $(n, 2n)$ , или образованием  $\alpha$ -частиц  $(n, \alpha)$ . Для рассматриваемых в данной работе ядер при взаимодействии с быстрыми нейтронами доминирующими процессами являются упругое и неупругое рассеяние.

При неупругом рассеянии нейтрон после попадания в ядро переводит его в возбужденное состояние. Реакция имеет энергетический порог, определяемый расстоянием между основным состоянием ядра-мишени и первым возбужденным. Если нейтрон обладает энергией, достаточной для возбуждения нескольких уровней, то возбуждение каждого из них описывается собственным парциальным сечением.

При упругом рассеянии ядро остается в прежнем состоянии, а нейтрон сохраняет свою первоначальную кинетическую энергию в системе центра инерции, а в системе отсчета мишени сохраняется суммарная кинетическая энергия нейтрона и ядра.

По механизму взаимодействия реакции можно разделить на два типа: с образованием составного ядра и прямые.

При небольших энергиях налетающих нейтронов преобладают реакции с образованием составного ядра:



Понятие составного ядра применимо только в тех случаях, когда его время жизни достаточно велико, т.е. значительно больше характерного ядерного времени  $\tau_{\text{я}} \approx 10^{-22} - 10^{-23}$  с.

С ростом энергии налетающих нейтронов возрастает влияние прямых процессов. В этом случае налетающий нейтрон сталкивается с одним или несколькими нуклонами ядра, не затрагивая остальных. Время взаимодействия нейтрона с ядром-мишенью при этом не превышает характерного ядерного времени.

## 2.1 Оптическая модель

Для описания усредненного поведения сечений Г.Фешбах, К.Портер и В.Вайскопф в 1954 году предложили оптическую модель [2]. Изначально она вводилась для описания интегральных и дифференциальных сечений взаимодействия нейтронов с атомными ядрами. Согласно оптической модели ядро представляет собой сплошную среду, преломляющую и поглощающую дебройлевские волны падающих на него частиц. Взаимодействие атомного ядра и налетающей частицы описывается комплексным потенциалом:

$$U(\vec{r}) = V(\vec{r}) + iW(\vec{r}), \quad (2)$$

где реальная часть  $V(r)$  – описывает преломление и отражение нейтронной волны на границе ядра, а мнимая часть  $W(r)$  – затухание в среде в результате поглощения нейтрона.

Оптические модели можно разделить на микроскопические и феноменологические. В микроскопическом подходе глубина и форма ядерного потенциала зависят от энергетических состояний и плотности ядерной материи, которые могут быть получены из расчетов, использующих нуклон-нуклонное эффективное взаимодействие. В феноменологической оптической модели для потенциала подбирается подходящая аналитическая форма, обычно форма Вудса-Саксона и определяются его глубина и геометрические характеристики путем подбора параметров для наилучшего воспроизведения экспериментальных данных. Примером такого потенциала является версия из работы [3]:

$$U(r, E) = -\mathcal{V}_V(r, E) - i\mathcal{W}_V(r, E) - i\mathcal{W}_D(r, E) + (\vec{l} \cdot \vec{\sigma})(\mathcal{V}_{SO}(r, E) + i\mathcal{W}_{SO}(r, E)) + \mathcal{V}_C(r), \quad (3)$$

где индексы означают:  $V$  – объемную,  $D$  – поверхностную,  $SO$  – спин-орбитальную компоненты. Здесь  $l$  и  $\sigma$  – операторы спина и углового момента. Для отдельных компонент потенциала используются следующие выражения:

$$\mathcal{V}_V(r, E) = V_V(E)f(r, R_V, a_V), \quad (4)$$

$$\mathcal{W}_V(r, E) = W_V(E)f(r, R_V, a_V), \quad (5)$$

$$\mathcal{W}_D(r, E) = -4a_D W_D(E) \frac{d}{dr} f(r, R_D, a_D), \quad (6)$$

$$\mathcal{V}_{SO}(r, E) = V_{SO}(E)\lambda_{\pi}^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}), \quad (7)$$

$$\mathcal{W}_{SO}(r, E) = W_{SO}(E)\lambda_{\pi}^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}), \quad (8)$$

где  $R_i = r_i A^{1/3}$  – радиус ядра,  $a_i$  – параметр диффузности (индекс  $i$  принимает значения  $V, D, SO$ ),  $\lambda_{\pi} = \frac{\hbar}{m_{\pi}c}$  – приведенная комптоновская длина волны пиона, а  $f(r, R_i, a_i)$  – форм-фактор:

$$f(r, R_i, a_i) = \left( 1 + \exp\left(\frac{r - R_i}{a_i}\right) \right)^{-1} \quad (9)$$

Кулоновский член имеет вид равномерно заряженной сферы:

$$\mathcal{V}_C(r) = \begin{cases} \frac{Zze^2}{2R_C} \left( 3 - \frac{r^2}{R_C^2} \right), & \text{для } r \leq R_C \\ \frac{Zze^2}{r}, & \text{для } r \geq R_C, \end{cases} \quad (10)$$

где  $Z(z)$  – заряд ядра мишени (налетающей частицы), а  $R_C = r_C A^{\frac{1}{3}}$  – кулоновский радиус.

Для построения решения задачи рассеяния нейтрона на ядре-мишени, оптический потенциал (3) подставляется в стационарное уравнение Шредингера [4]:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} U(\vec{r})\psi(\vec{r}), \quad (11)$$

где  $k = \frac{\sqrt{2m_n T_n}}{\hbar}$  – волновое число,  $\mu = \frac{A}{(A+1)} m_n$  – приведенная масса нейтрона, а  $\psi(\vec{r})$  – волновая функция нейтрона, которая ищется в виде суперпозиции сходящихся и расходящихся волн:

$$\psi(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(k, k') \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (12)$$

где  $f(k, k')$  – амплитуда рассеяния. Выражение для дифференциального

сечения задается следующим образом:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(k, k')|^2. \quad (13)$$

Для наилучшего согласия результатов расчетов оптической модели с экспериментальными данными вводится зависимость глубин потенциалов от величины  $(E - E_f)$ , где  $E$  – начальная энергия налетающей частицы в лабораторной системе отсчета, а  $E_f$  – энергия Ферми для нейтрона или протона:

$$E_f^n = -\frac{1}{2}[S_n(Z, N) + S_n(Z, N + 1)], \quad (14)$$

$$E_f^p = -\frac{1}{2}[S_p(Z, N) + S_p(Z + 1, N)]. \quad (15)$$

Примером такой параметризации является энергетическая зависимость из работы [3]:

$$V_V(E) = v_1[1 - v_2(E - E_f) + v_3(E - E_f)^2 - v_4(E - E_f)^3], \quad (16)$$

$$W_V(E) = w_1 \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (w_2)^2}, \quad (17)$$

$$W_D(E) = d_1 \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (d_3)^2} \exp[-d_2(E - E_f)], \quad (18)$$

$$V_{SO}(E) = v_{so1} \exp[-v_{so2}(E - E_f)], \quad (19)$$

$$W_{SO}(E) = w_{so1} \frac{(E - E_f)^2}{(E - E_f)^2 + (w_{so2})^2} \quad (20)$$

Параметры  $r_V$ ,  $a_V$ ,  $r_D$ ,  $a_D$ ,  $r_{SO}$ ,  $a_{SO}$ ,  $r_C$  не зависят от энергии. Данная параметризация справедлива для энергий налетающих частиц в диапазоне от 1 кэВ до 200 МэВ.

В целом, набор параметров оптического потенциала индивидуален для каждого ядра, однако, при наличии большого объема эксперимен-



тальных данных по упругому и неупругому рассеянию частиц могут быть построены глобальные параметризации оптического потенциала [3], описывающие зависимости коэффициентов  $v_{1,2,3,so1,so2}$ ,  $w_{1,2,3,so1,so2}$ ,  $d_{2,3}$ , а также радиусов  $R_i$  и диффузностей  $a_i$  от  $Z$  и  $A$ . Это позволяет оценивать глубину и форму оптического потенциала для ядер, экспериментальные данные по рассеянию частиц на которых отсутствуют, и, таким образом, проводить расчеты характеристик реакций в широком диапазоне  $A$  и  $Z$ .

## 2.2 Описание прямых реакций

Прямые ядерные реакции – процессы, в которых налетающая частица передает энергию преимущественно одному или небольшой группе нуклонов ядра-мишени. Время их протекания существенно меньше времени протекания реакций, идущих через составное ядро и сравнимо с временем пролета нуклона через ядро. К прямым процессам относятся реакции срыва  $(d, p)$ ,  $(d, n)$  и подхвата, например  $(p, d)$  и  $(n, d)$ . Также прямые они вносят существенный вклад в сечения реакций неупругого рассеяния  $(n, n')$  и перезарядки  $(n, p)$ .

Прямые процессы преобладают в тех случаях, когда ядру передается относительно небольшая энергия налетающей частицы. В случае прямой реакции можно ожидать заметную асимметрию "вперед-назад" в угловых распределениях, например, вылета частиц преимущественно в переднюю полусферу в СЦМ. При этом тот факт, что частицы взаимодействуют не свободно, а в поле тяжелого остова ядра, которому они передают часть своего импульса, приводит в некоторых случаях к симметричному относительно  $90^\circ$  угловому распределению.

Описать прямой процесс можно следующим образом: налетающая частица взаимодействует с одним из валентных нуклонов ядра-мишени, находящимся на внешней оболочке и слабо связанным с остовом ядра.

Потенциал взаимодействия можно записать следующим образом:

$$V = U + V_{res}, \quad (21)$$

где  $U$  – объемный ядерный потенциал, который может быть взят из оптической модели, а  $V_{res}$  – потенциал взаимодействия налетающей частицы с валентным нуклоном. Случай, когда  $V_{res} = 0$  соответствует упругому рассеянию на потенциале  $U$ . Если взаимодействие с налетающей частицей было однократным, то в ядре формируется частично-дырочное состояние, на возбуждение которого тратится энергия, что соответствует неупругому рассеянию. Кроме этих процессов также возможны реакции срыва и подхвата нуклона.

Таким образом, для полного описания прямой реакции необходимо решить уравнение, учитывающее большое количество возможных каналов реакций. Для решения этой задачи используют различные способы, которые будут рассмотрены дальше.

### 2.2.1 Борновское приближение искаженных волн

Наиболее распространенным подходом для описания прямых ядерных реакций является борновское приближение искаженных волн [5] (Distorted wave Born approximation, DWBA). Суть метода состоит в приближенном решении многочастичного уравнения Шредингера с использованием теории возмущений. Полный гамильтониан системы записывается в виде:

$$H = H_0 + H_1, \quad (22)$$

где  $H_0$  – гамильтониан системы, состоящей из двух частиц, взаимодействие между которыми описывается оптическим потенциалом, а  $H_1$  – гамильтониан остаточного взаимодействия налетающей частицы с ядром-

мишенью, которое рассматривается как малое возмущение, переводящее систему в конечное состояние. Для определенности рассмотрим реакцию  $A(a, b)B$ . Процесс взаимодействия налетающей частицы  $a$  с ядром-мишенью  $A$  можно разделить на 3 этапа:

1. Движение налетающей частицы  $a$  в потенциале ядра-мишени  $A$ .
2. Передача нуклонов от частицы  $a$  ядру  $A$  под воздействием остаточного взаимодействия.
3. Движение вылетающей частицы  $b$  в поле конечного ядра  $B$ .

Волновую функцию для входного и выходного каналов можно записать в виде [4]:

$$\psi_i(\vec{r}_i, \vec{k}_i) = \varphi_i \chi_i, \quad (23)$$

где  $\vec{r}_i$  – радиус-вектор частицы,  $\vec{k}_i$  – ее волновой вектор,  $\varphi_i$  – внутренняя волновая функция частицы, а  $\chi_i = e^{-i\vec{r}_i \vec{k}_i} + d_i$  волновая функция, описывающая относительное движение частиц в канале ( $d_i$  – искажающая добавка). Тогда амплитуда вероятности реакции в первом приближении определяется как:

$$f_{BA} = \int \chi_b \langle \varphi_B \varphi_b | H_{res} | \varphi_A \varphi_a \rangle \chi_a d\vec{r}_a d\vec{r}_b \quad (24)$$

Выражение для сечения имеет вид:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{|\vec{k}_b|}{|\vec{k}_a|} |f(\vec{k}_a, \vec{k}_b)|^2, \quad (25)$$

где  $\vec{k}_a$  и  $\vec{k}_b$  – волновые вектора входного и выходного каналов.

При описании неупругого рассеяния в рамках DWBA предполагается, что упругое рассеяние и поглощение являются доминирующими процессами. Если сечение неупругого рассеяния оказывается слишком

большим, то предположение нарушается и DWBA неприменимо. В таком случае необходимо использовать более высокие приближения Борна, однако такие вычисления являются достаточно сложной задачей, поэтому используют другой вариант – приближение связанных каналов [6].

### 2.2.2 Метод связанных каналов

Под каналами подразумевается состояние системы частица-ядро, в котором взаимодействие ядра с частицами пренебрежимо мало из-за большого расстояния между частями системы. Пусть частица  $a$  сталкивается с ядром-мишенью  $A$ , находящемся в основном состоянии. Если в результате столкновения ядро-мишень останется в основном состоянии:  $a + A \rightarrow A + a$ , то будем говорить, что в конечном состоянии имеем систему  $a + A$  в упругом канале. Если ядро-мишень перешло в возбужденное состояние:  $a + A \rightarrow A^* + a'$ , то будем говорить, что в конечном состоянии имеем систему  $a + A$  в неупругом канале. На близком расстоянии, там, где действует оператор взаимодействия частицы с мишенью  $\hat{V}$ , различные каналы оказываются связанными между собой, и сказать, в каком из них находится система, невозможно. Вариант теории столкновений, в котором, без каких-либо приближений, строго учитывается связь между ограниченным числом каналов, а влияние остальных отбрасывается, называется методом связанных каналов.

Рассмотрим основные уравнения метода связанных каналов на примере неупругого рассеяния нейтрона. Назовём канал  $n + A$ , в котором нейтрон налетает на некоторое ядро в основном состоянии, начальным. Тогда гамильтониан этого канала  $H_1$  и гамильтониан системы нейтрон-ядро  $H$  имеют вид [7]:

$$\hat{H}_1 = \hat{E}_n + \hat{H}_A, \quad (26)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{V}, \quad (27)$$

где  $\hat{E}_n$  – оператор кинетической энергии налетающей частицы, а  $H_A$  – внутренний гамильтониан ядра-мишени. Используя уравнение Липпмана-Швингера [7] можно получить выражение для асимптотического вида стационарных волновых функций при удалении нейтрона после взаимодействия на бесконечность:

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_A) \approx e^{ikr} \phi_1(\vec{r}_A) + \sum_a f(k, k_a) \frac{e^{ik_a r}}{r} \phi_a(\vec{r}_A), \quad (28)$$

где  $\vec{r}_A$  – совокупность координат частиц мишени, а  $\phi_a$  – собственная функция гамильтониана мишени, соответствующая энергии  $E_a$ . Первое слагаемое в выражении (28) соответствует падающей волне, а дискретные члены суммы соответствуют вылетевшему нейтрону, оставляющему мишень в одном из связанных состояний  $\phi_n$ . Дифференциальное сечение неупругого рассеяния через канал  $a$  в этом случае можно записать в виде:

$$\frac{d\sigma(\theta)_a}{d\Omega} = \frac{k_a}{k} |f(k, k_a)|^2. \quad (29)$$

Разложим теперь функцию  $\psi(\vec{r}, \vec{r}_A)$  по собственным функциям гамильтониана мишени  $\phi_a$ :

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_A) = \sum_a \eta_a(\vec{r}) \phi_a(\vec{r}_A), \quad (30)$$

где коэффициенты разложения  $\eta_a(\vec{r})$  – каналные функции. Подставляя разложение (30) в уравнение Шредингера, можно получить следующую систему связанных уравнений:

$$\frac{\nabla^2}{2m} \eta_a(\vec{r}) + \sum_{a'} \bar{V}_{aa'} \eta_{a'}(\vec{r}) = (E - E_a) \eta_a(\vec{r}), \quad (31)$$

где  $\bar{V}_{aa'}(\vec{r})$  – матрица потенциалов, которая задаётся выражением:

$$\bar{V}_{aa'}(\vec{r}) = \int \phi_{a'}^*(\vec{r}_A) V(\vec{r}, \vec{r}_A) \phi_a(\vec{r}_A) d\vec{r}_A. \quad (32)$$

При использовании метода связанных каналов большинство уравнений из системы считаются несущественными и отбрасываются. Таким образом, остается небольшое число  $N$  уравнений, соответствующие выбранным каналам.

Чтобы учесть влияние отброшенных каналов, используют деформированный оптический потенциал, который учитывает зависимость  $R_i$  (индексом  $i$  обозначаются компоненты  $V$ ,  $D$  и  $SO$ ) от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$ . Так, в случае вращательных состояний возбуждения:

$$R_i = r_i A^{\frac{1}{3}} \left( 1 + \sum_{\lambda=2,4,\dots} \beta_\lambda Y_\lambda^0(\theta, \varphi) \right), \quad (33)$$

где  $\beta_\lambda$  – параметр деформации, а  $Y(\theta, \varphi)_\lambda(\theta, \varphi)$  – сферическая функция. Наиболее значимым в процессе взаимодействия является параметр  $\beta_2$ , соответствующий квадрупольной деформации. Деформации более высоких порядков  $\beta_\lambda$  ( $\lambda = 4, 6, \dots$ ) существенно меньше по величине, чем  $\beta_2$ . В целом для описания неупругого рассеяния на первых нескольких уровнях во вращательной полосе важны только параметры  $\beta_2$  и  $\beta_4$ .

В случае колебаний  $R_i$  имеет вид:

$$R_i = r_i A^{\frac{1}{3}} \left( 1 + \sum_{\lambda\mu} a_{\lambda\mu} Y_\lambda^\mu(\theta, \varphi) \right), \quad (34)$$

Также возможны более сложные коллективные конфигурации, та-

кие как асимметричный ротатор:

$$R_i(\Theta) = r_i A^{\frac{1}{3}} [1 + \beta_2 \cos \gamma Y_2^0(\Omega) + \sqrt{\frac{1}{2}} \beta_2 \sin \gamma (Y_2^2(\Omega) + Y_2^{-2}(\Omega)) + \beta_4 Y_4^0(\Omega)] \quad (35)$$

с параметрами  $\beta_2, \beta_4, \gamma$ .

Параметры деформаций могут быть определены при оптимизации параметров оптического потенциала на экспериментальных данных по рассеянию нейтронов.

### 2.3 Модель составного ядра

Механизм составного играет важную роль при небольших энергиях налетающего нейтрона. Схематически такую реакцию можно представить в виде двухступенчатого процесса:



где  $C$  – составное ядро, образующееся в промежуточной стадии. Сечение реакции с образованием частицы  $b$  в конечном состоянии можно записать следующим образом [8]:

$$\sigma(a, b) = \sigma_C(a) W_C(b), \quad (37)$$

где  $\sigma_C(a)$  – сечение образования составного ядра  $C$  в результате поглощения налетающей частицы  $a$  исходным ядром  $A$ , а  $W_C(b)$  – вероятность распада составного ядра  $C$  с испусканием частицы  $b$  и образованием конечного ядра  $B$ .

Вероятность распада  $W_C(b)$  определяется соотношением:

$$W_C(b) = \frac{\Gamma_b}{\sum_i \Gamma_i} = \frac{\Gamma_b}{\Gamma}, \quad (38)$$

где  $\Gamma_i$  – парциальные ширины распадов (суммирование ведётся по всем возможным каналам, допустимыми законами сохранения).

Сечение образования составного ядра  $\sigma_C(a)$  можно записать в виде:

$$\sigma_C(a) = \sum_l \sigma_l = \sum_l S_l \xi_l, \quad (39)$$

где  $\sigma_l$  – парциальное сечение поглощения налетающей частицы с орбитальным моментом  $l$ ,  $S_l$  – геометрическое сечение,  $\xi_l$  – вероятность прохождения волны частицы через границу ядерного потенциала.

Парциальное геометрическое сечение можно представить как площадь кольца со средним радиусом равным прицельному параметру:

$$S_l = (2l + 1)\pi\lambda^2. \quad (40)$$

Таким образом можно записать итоговое выражение для сечения  $\sigma(a, b)$ :

$$\sigma(a, b) = \frac{\Gamma_b}{\Gamma} \sum_{l=0}^{R/\lambda} (2l + 1)\pi\lambda^2 \xi_l \quad (41)$$

Ядерные силы короткодействующие и влияют только на частицы с прицельным параметром  $b \leq R$ , поэтому в (41) суммирование ведётся от 0 до  $l_{max} = \frac{R}{\lambda}$ .

В случае когда энергия возбуждения составного ядра близка к резонансной, сечение реакции описывается формулой Брейта-Вигнера:

$$\sigma(a, b) = \frac{2J_C + 1}{(2J_A)(2s_a + 1)(2l + 1)} \cdot \frac{\pi\lambda^2 \Gamma_a \Gamma}{(E_a - E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}, \quad (42)$$



где  $J_A$  и  $J_C$  – моменты исходного ядра-мишени и компаунд ядра соответственно,  $s_a$  и  $l$  – спин и орбитальный момент налетающей частицы,  $E_a$  и  $E_r$  – энергия налетающей частицы и энергия резонанса.

## 2.4 Программа TALYS

Для расчета свойств ядерных реакций с учетом описанных выше моделей можно использовать различные программы, такие как GNASH [9], ALICE [10], STAPRE [11] и EMPIRE [12]. В данной работе использовалась программа TALYS[13]. На сегодняшний день она широко применяется для анализа реакций с участием нейтронов, фотонов, протонов, дейтронов и альфа-частиц в диапазоне энергий от 1 кэВ до 200 МэВ. В качестве мишеней можно использовать ядра с числом нуклонов  $A \geq 12$ .

Функционал TALYS позволяет использовать для расчета различных характеристик реакций (интегральные и дифференциальные сечения рассеянных нейтронов, выходы  $\gamma$ -квантов и т.д.) богатый набор теоретических моделей (Рис.1). Программа включает в себя оптическую модель, модель прямых реакций в различных приближениях, модели описания процессов, идущих через составное ядро, и предравновесных процессов, а также модели, описывающие реакции деления.

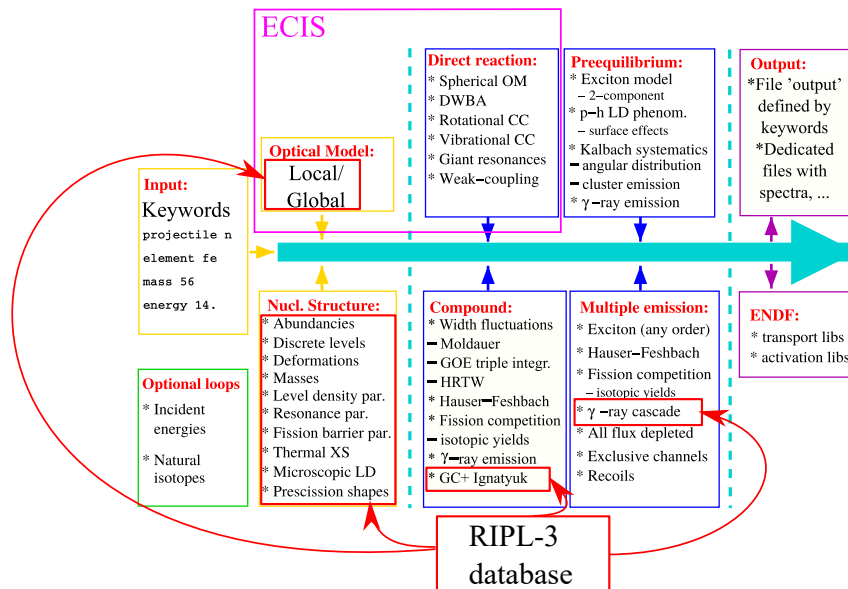


Рис. 1: Теоретические модели используемые в TALYS [13]

Расчеты в оптической модели выполняются с помощью кода ECIS, включенного в состав подпрограмм TALYS. Стоит отметить, что взаимодействие между ECIS и TALYS осуществляется посредством текстовых файлов, что замедляет процесс вычислений. Необходимая для моделирования реакций информация о структуре ядер и параметрах теоретических моделей извлекается из библиотеки RIPL-3 [14].

### 3 Библиотека TalysLib

В проекте TANGRA для упрощения использования результатов расчетов TALYS и получения информации из его базы данных была создана библиотека TalysLib. Она представляет собой объектно-ориентированную C++ библиотеку, основанную на пакете программ для анализа и обработки экспериментальных данных – ROOT [15]. В основе TalysLib лежат три класса, соответствующие реальным физическим объектам (Рис. 2).

Класс Nucleus соответствует атомному ядру и содержит информацию о его свойствах: заряде, массе, деформации, оптическом потенциале и т.д. Также в этом объекте хранится список уровней в виде вектора

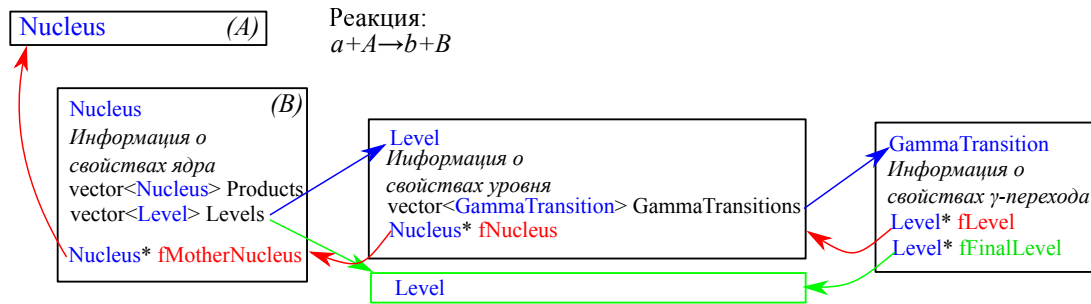


Рис. 2: Структура TalysLib

объектов типа Level.

Класс Level соответствует отдельному возбужденному состоянию ядра и содержит информацию об энергии, спине и четности состояния, списке соответствующих  $\gamma$ -переходов, сечениях возбуждения и угловых распределениях рассеянных частиц. В каждом объекте Level хранится список  $\gamma$ -переходов в виде вектора объектов GammaTransition.

Класс GammaTransition содержит данные об энергии перехода, его мультипольности и рассчитанных сечениях возбуждений.

Каждый из классов также содержит указатели на объект, находящийся выше по иерархии. Например, в случае реакции типа  $a + A \rightarrow b + B$ , объект Nucleus, соответствующий ядру  $B$ , содержит указатель на ядро  $A$ .

Взаимодействие с TALYS происходит следующим образом: на основе параметров «по умолчанию», или же заданных пользователем, создается входной файл, после чего посредством системных вызовов выполняется запуск TALYS. Результаты вычислений перенаправляются в выходной файл, который затем анализируется с целью извлечения рассчитанных характеристик реакции. В результате вычислений генерируется большой объем информации: список отдельных каналов реакций, их энергия, сечения, угловые распределения продуктов.

Использование ROOT позволяет реализовать подбор параметров моделей, используемых в TALYS, для улучшения согласия результатов рас-

четов с экспериментальными данными за счет использования встроенного минимизатора MINUIT. Применение подобранных параметров может улучшить качество описания отдельных каналов реакции и позволяет получить информацию о природе отдельных возбужденных состояний и деформации изучаемого ядра.

К настоящему моменту TalysLib может выполнять следующие операции:

1. Генерация входных файлов и файлов параметров для TALYS;
2. Считывание данных о структуре ядра из базы данных TALYS;
3. Подбор параметров моделей с помощью минимизатора MINUIT;
4. Визуализация и сохранение данных с помощью программной среды ROOT;
5. Извлечение оцененных данных из различных библиотек (ENDF [16], TENDL [17], JENDL [18], CENDL [19], BROND [20], FENDL [21], JEFF [22], MENDL [23]);
6. Извлечение экспериментальных данных из базы EXFOR [24].

### 3.1 Подбор параметров моделей

Подбор параметров моделей реализован с помощью класса TalysFitterMT, который является частью TalysLib, и минимизатора MINUIT, встроенного в ROOT. Для выполнения подгонки параметров необходимо задать некоторый начальный набор параметров модели, а также набор экспериментальных данных, представимый в виде таблично заданной функции одной переменной  $D(x)$ . Например, дифференциальное сечение упругого

и неупругого рассеяния на первом возбужденном состоянии может быть представлено следующим образом:

$$D(x) = \begin{cases} \frac{d\sigma^{el}}{d\Omega}(x), & x \leq 180; \\ \frac{d\sigma^{inl}}{d\Omega}(x - 180) & x > 180. \end{cases} \quad (43)$$

Аналогично могут быть заданы функции  $D_x^{err}(x)$  и  $D_y^{err}(x)$ , описывающие ошибки эксперимента. Также требуются две задаваемые пользователем функции C и F, первая из которых отображает набор подбираемых параметров в набор параметров вычислений, а вторая описывает процедуру извлечения данных, соответствующих экспериментальным, из основных классов библиотеки. Указатели на эти функции передаются в класс TalysFitterMT, где они используются для вычисления величины  $\chi^2$  и её градиента ( $\nabla\chi^2$ ). Выражение для  $\chi^2$  задается следующим образом:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(x_i^{exp} - x_i^{th})^2}{(\sigma_i^{exp})^2}, \quad (44)$$

где  $x_i^{exp}$  – величина, полученная в эксперименте,  $x_i^{th}$  – результат теоретического расчета,  $\sigma_i^{exp}$  – погрешность экспериментальной величины  $x_i^{exp}$ . В качестве критерия качества подбора параметров используется значение  $\chi^2/N$ , где  $N$  – количество измеренных величин, например число точек, в которых было измерено дифференциальное сечение. Блок-схема процедуры подбора параметров показана на Рис. 3.

Сама процедура подбора начинается с численного расчета значений  $\chi^2$  и  $\nabla\chi^2$  для начального приближения, которые затем передаются в MINUIT. По вычисленному  $\nabla\chi^2$  MINUIT определяет набор лежащих на градиенте точек, координаты которых с помощью функции C передаются в объект Nucleus, для создания новых входных данных TALYS. По ним снова рассчитывается значение  $\chi^2$  и определяется набор парамет-

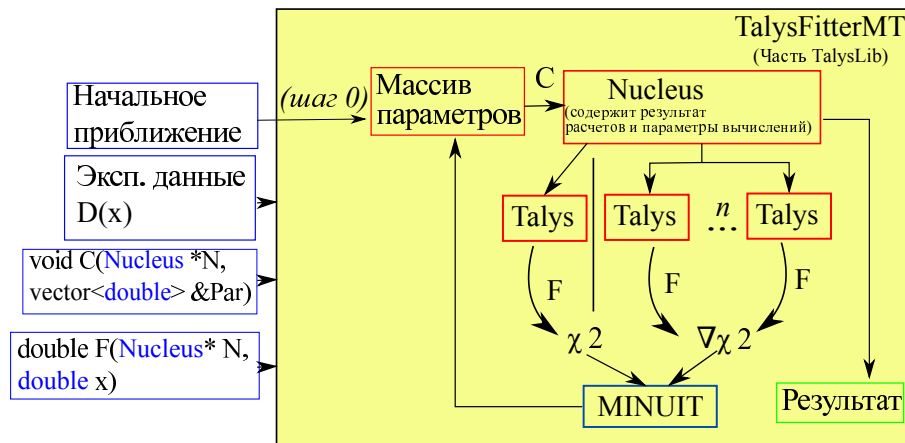


Рис. 3: Блок-схема процедуры подбора параметров теоретических моделей TalysLib

ров, для которого оно наименьшее. Для полученного набора вычисляется  $\nabla\chi^2$  и цикл повторяется. При достижении условия выхода (обнаружение минимума или превышение порогового количества итераций) MINUIT завершает процедуру подбора параметров. При этом непосредственное использование метода наименьших квадратов может приводить к неоптимальным результатам при поиске параметров оптических потенциалов. Полученные после минимизации наборы параметров нуждаются в дополнительной проверке.

При оптимизации  $n$  параметров для расчета  $\nabla\chi^2$  требуется  $2n$  запусков TALYS. TalysLib поддерживает многопоточный режим, позволяющий запускать несколько копий TALYS одновременно, что ускоряет процедуру минимизации. За ходом процесса можно наблюдать в реальном времени. Пример процесса оптимизации параметров модели (оптического потенциала) показан на Рис. 4.

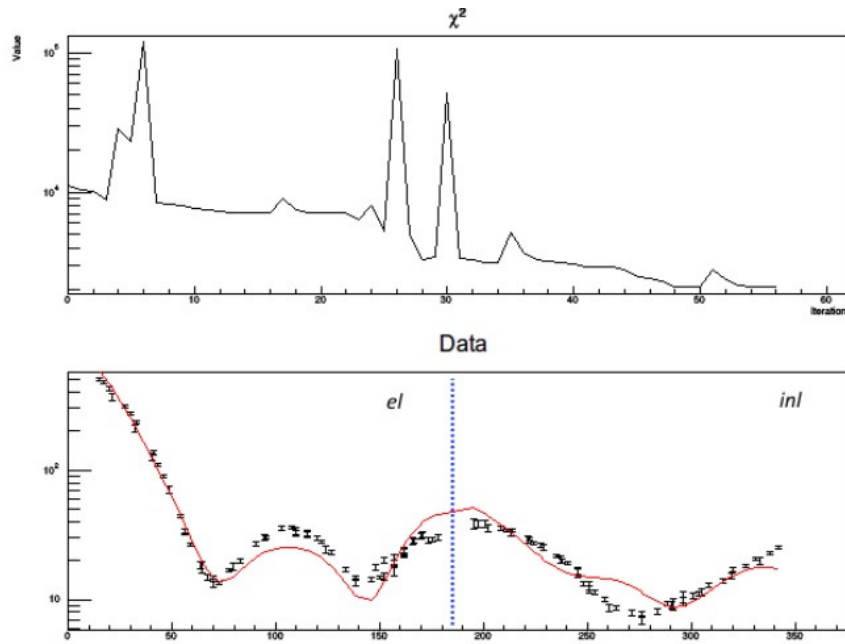


Рис. 4: Пример работы процесса подбора параметров для упругого и неупругого рассеяния нейтронов на  $^{16}\text{O}$ . Сверху – значения  $\chi^2$ , снизу – экспериментальные данные в виде  $D(x)$  (точки), результаты расчета (линия). Данные [25], соответствующие упругому (слева) и неупругому рассеянию (справа), разделены пунктирной линией

### 3.2 Источники экспериментальных данных

Основным источником экспериментальных данных является база EXFOR. На сегодняшний день не существует C++ или Python-библиотек, позволяющих считывать данные из файлов EXFOR, поэтому приходится выполнять поиск и обработку данных вручную. Автоматизация этого процесса могла бы сильно облегчить подбор параметров теоретических моделей и сравнение результатов с экспериментальными данными. С этой целью, в ходе выполнения данной работы, в TalysLib был добавлен функционал для автоматического получения экспериментальных данных из EXFOR, с помощью которого были получены все наборы данных использованные в данной работе. Стандартный формат файлов EXFOR имеет сложную структуру и неудобен для автоматической обработки, поэтому была рассмотрена возможность использования формата

C4 [26] и базы данных EXFORTABLES [27].

В каждом представлении данных, и в C4, и в EXFORTABLES для упрощенного поиска и идентификации ядерных реакций используются ENDF коды MF и MT. В соответствии с документацией ENDF [28], код MF – соответствует информации определенного типа (например, MF=3 – сечения реакций, а MF=4 – угловые распределения). В свою очередь код MT – соответствует конкретному выходному каналу реакции (например, MT=2 соответствует реакции упругого рассеяния, а MT=51 – реакции с вылетом нейтрона и образованием конечного ядра в первом возбужденном состоянии). Таким образом, различные комбинации типа начальной частицы, MF и MT кодов дают точную информацию о реакции и типе данных полученных в эксперименте.

Каждый файл C4 соответствует конкретному ядру и хранит информацию о доступных экспериментах. Каждая запись в файле содержит тип налетающей частицы, MT и MF коды, а также табулированный набор экспериментальных данных с фиксированным порядком строк и столбцов, в котором все единицы измерения совместимы с ENDF 5. Коммуникация с EXFOR осуществляется при помощи ENTRY и SubEntry кодов. Пример файла C4 приведен на Рис. 5. Вид таблиц стандартизирован и каждая строка представляет одну точку экспериментальных данных. Каждая из колонок таблицы содержит следующую информацию: 1 – ZA налетающей частицы, 2 – ZA мишени, 3 – m метастабильное состояние мишени, 4 – MF код ENDF, 5 – MT код ENDF, 6 – M метастабильное состояние остаточного ядра, статус данных и указание на систему отсчета, 7-14 – такие выходные данные, как энергия налетающей частицы, данные полученные в ходе эксперимента, неопределенности и т.д., 15-17 – автор (только первый автор) и год, entry номер EXFOR, subentry номер EXFOR. При помощи кодов MF и MT, а также типа налетающей



частицы происходит поиск нужных наборов экспериментальных данных.

```

#ENTRY      20559
#AUTHOR1   G.Haouat+
#YEAR      1975
#INSTITUTE  (2FR BRC)
#TITLE      Differential cross sections for carbon neutron
#+         elastic and inelastic scattering from 8.0 to 14.5 Mev
#AUTHOR(S) G.Haouat, J.Lachkar, J.Sigaud,
#+         Y.Patin, F.Cocu
#REF-CODE   (R,CEA-R-4641,197502)
#REFERENCE  Rept. Centre d'Etudes Nucleaires, Saclay Reports
#+         No.4641, 1975
#DATASETS   3
#
#DATASET    20559008
#DATE       20120704
#REACTION   6-C-12(N,INL)6-C-12,PAR,SIG
#PROJ       1
#TARG       6012
#MF         3
#MT         51
#PRODUCT    6-C-12
#DATA-HDR   DATA
#C4BEGIN    [ 1 6012 3 51 C ]
#X4STATUS   [COREL] Data correlated with another data set
#DATA       9

# Prj Targ M MF MT PXC Energy dEnergy Data dData Cos/LO dCos/LO ELV/HL dELV/HL I78 Refer (YY) EntrySubP
#-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><-----><----->
1 6012 3 51 C 5800000. 200000.0 9.5000-3 0.010000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 6300000. 120000.0 0.186000 0.019000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 6800000. 110000.0 0.133000 0.013000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 7000000. 100000.0 0.177000 0.018000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 7300000. 100000.0 0.206000 0.020000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 7800000. 150000.0 0.302000 0.030000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 8000000. 100000.0 0.383000 0.038000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 8300000. 100000.0 0.200000 0.020000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
1 6012 3 51 C 8800000. 100000.0 0.309000 0.031000 4439000. LVLG.Haouat,ET.AL. (75) 20559 8
#/DATA     9

```

Рис. 5: Пример файла C4 для реакции  $^{12}\text{C}(n, n')$ .

В EXFORTABLES данные распределены по следующим директориям: тип налетающей частицы/ ядро мишень/ тип данных получаемых в эксперименте/ тип реакции (MT код)/ файлы с данными. При этом сами файлы имеют похожую на C4 табулированную структуру (Рис. б). Однако при более подробном анализе базы данных EXFORTABLES были обнаружены ошибки, связанные с идентификацией типа реакции для случая неупругого рассеяния нейтронов. В ENDF данные по угловому распределению неупруго рассеянных нейтронов с образованием  $n$ -ого возбужденного состояния ядра-мишени соответствуют коды MF=4 и MT=51-90. В файлах EXFORTABLES код MT, соответствующий номеру возбужденного состояния, определяется для всего файла по первому значению в наборе данных. Это хорошо видно из примера файла EXFORTABLES на Рис. 6. Набор данных соответствует коду MT=55, однако в нём присутствуют точки с MT=51,52 и 53.

```

# Target Z      :   6
# Target A      :  12
# Target state:
# Projectile    : n
# Reaction      : Inelastic scattering
# E-inc         :  14.760 MeV
# E-exc         : 10.84400 MeV (EXFOR: 10.80000)
# Quantity      : Angular distribution
# Frame         : C
# MF            :   4
# MT            :  55
# X4 ID         : 20223003
# X4 code       : 6-C-12(N,INL)6-C-12,PAR,DA
# Author        : Kuijper
# Year          : 1972
# Data points   :   19
# Angle(deg)    xs(mb/sr)  dxs(mb/sr)  ELV/HL
4.04000E+01  1.50000E+00  8.00000E-01  10.8 MeV  MT = 55
6.99001E+01  7.50000E+00  1.70000E+00
6.43001E+01  6.80000E+00  1.40000E+00
6.00001E+01  6.50000E+00  8.00000E-01
4.89001E+01  7.80000E+00  1.40000E+00  9.6 MeV  MT = 53
3.99000E+01  8.60000E+00  1.30000E+00
2.63001E+01  6.30000E+00  1.90000E+00
6.85001E+01  1.10000E+00  4.00000E-01
6.30001E+01  4.00000E-01  5.00000E-01
5.88001E+01  1.30000E+00  5.00000E-01
4.79000E+01  1.30000E+00  4.00000E-01  7.6 MeV  MT=52
3.91000E+01  1.40000E+00  4.00000E-01
2.58000E+01  4.00000E+00  1.50000E+00
6.71001E+01  1.49000E+01  8.00000E-01
6.19001E+01  1.83000E+01  9.00000E-01
5.76000E+01  1.87000E+01  9.00000E-01
4.70000E+01  2.83000E+01  1.20000E+00  4.4 MeV  MT=51
3.83000E+01  3.10000E+01  1.10000E+00
2.52000E+01  3.91000E+01  2.70000E+00
# Reference:
#P.Kuijper, J.C.Veefkind, C.C.Jonker
#Neutron scattering from bismuth, strontium and sodium at 14.8 MeV
#Jour. Nuclear Physics, Section A Vol.181, p.545, 1972

```

Рис. 6: Пример файла EXFORTABLES  $^{12}\text{C}(n, n')$ . Значения ELV/HL, энергии возбуждения уровней, взяты из файлов C4

Таким образом, используя файлы EXFORTABLES невозможно корректно определить код MT для каждой точки экспериментального набора данных поэтому было решено использовать формат C4 для создания собственной базы данных. Однако с форматом C4 также возникли сложности. В C4 реакциям неупругого рассеяния независимо от уровня возбуждения ядра всегда присваивался код MT=51. Но в отличие от EXFORTABLES, файлы C4 содержат информацию об энергии воз-

бужденного состояния для каждой экспериментальной точки. Благодаря этому удалось провести разделение данных, связанных с неупругими процессами, по отдельным возбужденным состояниям.

## 4 Результаты

Объектами исследования в данной работе являются ядра  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$  и  $^{32}\text{S}$ . Это четно-четные ядра  $1d2s$  оболочки, для каждого из них  $N=Z$ . Известно, что возбужденные состояния ядер этой оболочки имеют коллективную природу. Используя спектры низколежащих состояний, можно сделать предположение об их природе.

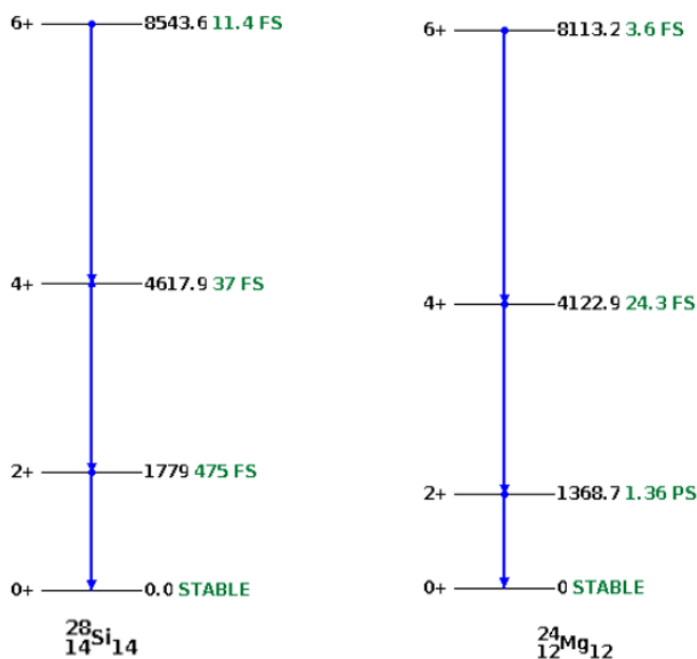


Рис. 7: Спектры низколежащих состояний ядер  $^{28}\text{Si}$  (слева) и  $^{24}\text{Mg}$  (справа)

На Рис. 7 показаны спектры низколежащих состояний для ядер  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{28}\text{Si}$ . На их основе можно сделать предположение о вращательной природе первых возбужденных состояний, так как наблюдается характерный для вращательной полосы порядок уровней:  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$ . Энер-

гетический интервал между уровнями вращательного спектра линейно связан с моментами уровней следующим образом:

$$\Delta E = E_J - E_{J-2} = \frac{\hbar(4J - 2)}{2\Theta}, \quad (45)$$

где  $\Theta = \frac{2\vartheta}{\hbar^2}$ , а  $\vartheta$  – момент инерции ядра. На основании этого выражения можно сравнить теоретическое и экспериментальное отношение  $E(0 \rightarrow J)/E(0 \rightarrow 2)$  для вращательной полосы. Результаты расчета вращательного спектра для  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{28}\text{Si}$  приведены в Таблице 1.

J	теория	$^{24}\text{Mg}$	$^{28}\text{Si}$
2	1	1	1
4	3.33	3.01	2.59
6	7	4.8	5.93

Таблица 1: Расчет вращательного спектра для  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{28}\text{Si}$

В целом сделать точный вывод о типе коллективных возбуждений, опираясь только на спектр низколежащих уровней, достаточно сложно. Во многих работах по исследованию деформаций первых возбужденных состояний этих ядер, например [29], обсуждается лучшее описание экспериментальных данных в рамках модели асимметричного ротатора для  $^{24}\text{Mg}$  и симметричного ротатора для  $^{28}\text{Si}$ . В данной работе мы использовали такие же типы коллективных возбуждений для основного и первого возбужденного состояний рассматриваемых ядер.

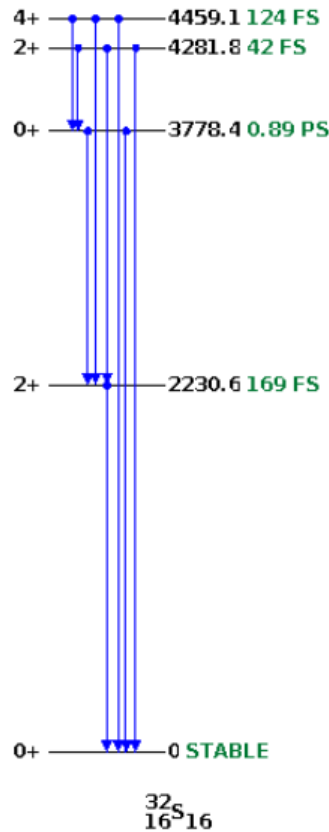


Рис. 8: Спектр низколежащих состояний ядра  $^{32}\text{S}$

В спектрах почти сферических ядер, таких как  $^{32}\text{S}$ , вращательные состояния отсутствуют или лежат очень высоко. В этом случае низколежащие возбуждения могут быть обусловлены колебаниями ядра относительно сферической равновесной формы. Наиболее существенными среди них являются квадрупольные колебания с моментом количества движения  $J = 2$ . Основное состояние четно-четного ядра имеет спин-четность  $0^+$ . Тогда первым возбужденным состоянием должен быть уровень  $2^+$  отвечающий одному квадрупольному фонону с энергией  $\hbar\omega_2$  ( $\omega_2$  – частота квадрупольного фонона). Для двух квадрупольных фононов возможны состояния со спин-четностью  $0^+$ ,  $2^+$  и  $4^+$ . При этом спектр эквидистантный ( $\frac{E(4_1^+)}{E(2_1^+)} \approx 2$ ). Данные особенности колебательного спектра четно-четных ядер наблюдаются для ядра  $^{32}\text{S}$  (Рис. 8). Поэтому мы считаем, что первое возбужденное состояние ядра серы можно описать

в рамках колебательной модели.

## 4.1 Магний

С помощью TalysLib был проведен анализ экспериментальных данных по угловому распределению рассеянных нейтронов (для упругого рассеяния и неупругого с возбуждением первого уровня) в диапазоне энергии налетающего нейтрона от 13-15 МэВ, доступных в EXFOR. На Рис. 9 приведено распределение наборов экспериментальных данных в зависимости от начальной энергии нейтрона.

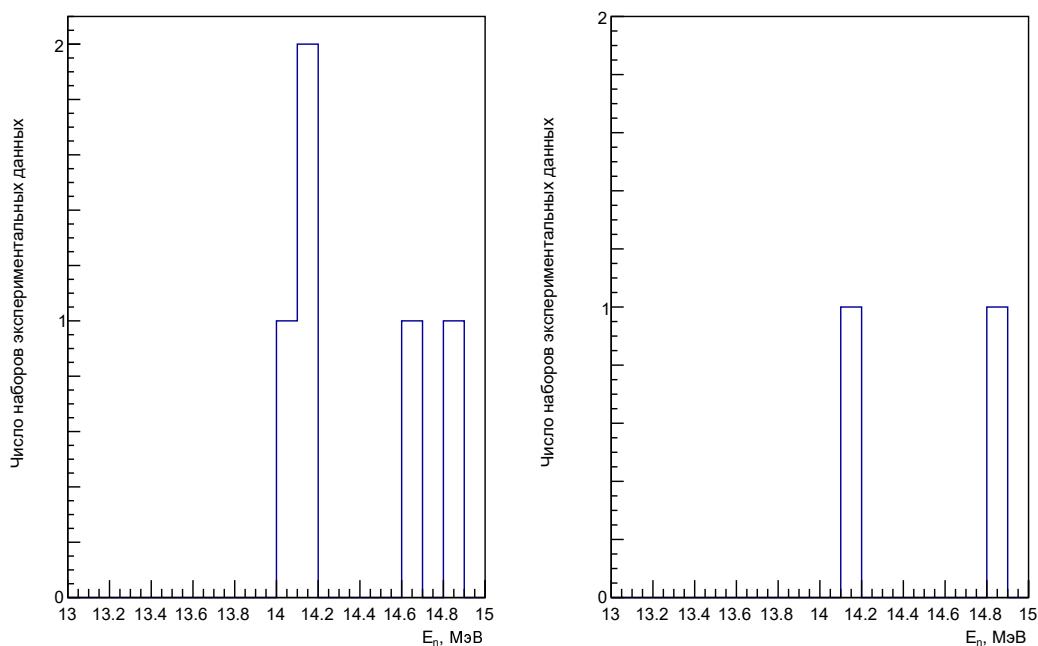


Рис. 9: Слева – гистограмма числа экспериментальных наборов данных по упругому рассеянию, справа – по неупругому

В диапазоне от 14 МэВ до 14.4 МэВ содержится 4 набора экспериментальных данных (3 по упругому рассеянию и 1 по неупругому). Однако в наборе из работы [30] (набор по упругому рассеянию) обнаружены некорректные ошибки для величины сечений.

В диапазоне от 14.6 МэВ до 15 МэВ содержится 3 набора (2 по

упругому рассеянию и 1 по неупругому), но нами также была найдена работа [29] с результатами соответствующими энергии нейтрона 14.83 МэВ, которая отсутствует в EXFOR. В данных из работы [31] (упругое рассеяние) также были обнаружены некорректные ошибки для величины сечений. Таким образом для фитирования было решено использовать экспериментальные данные из работ приведённых в Таблице 2.

Таблица 2: Набор экспериментальных данных для  $^{24}\text{Mg}$ .

Реакция	Автор	Ссылка	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	A. Viridis	[32]	14.83
	G. Haouat	[29]	14.83
$(n, n')$	A. Viridis	[32]	14.83
	G. Haouat	[29]	14.83

Подбор параметров оптического потенциала (далее ОП) был выполнен в рамках коллективной модели асимметричного ротатора (AROT). В качестве начального приближения использовались параметры глобальной параметризации Кенинга. Для параметров деформации  $\beta_2$  и  $\beta_4$  использовались значения из файла деформации TALYS «по умолчанию» (DEF).

На рис. 10 и 11 приведены результаты расчетов угловых распределений упруго и неупруго рассеянных нейтронов для случаев DEF и AROT в сравнении с экспериментальными данными.

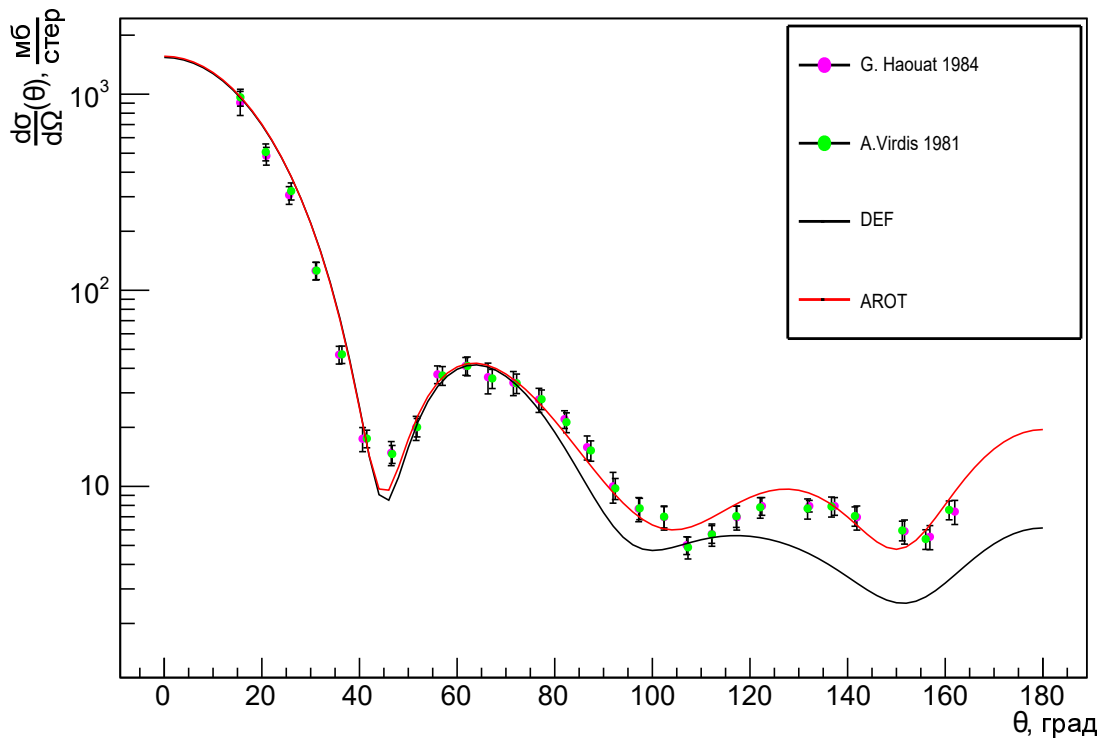


Рис. 10: Результаты аппроксимации углового распределения упруго рассеянных нейтронов на  $^{24}\text{Mg}$ . Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»

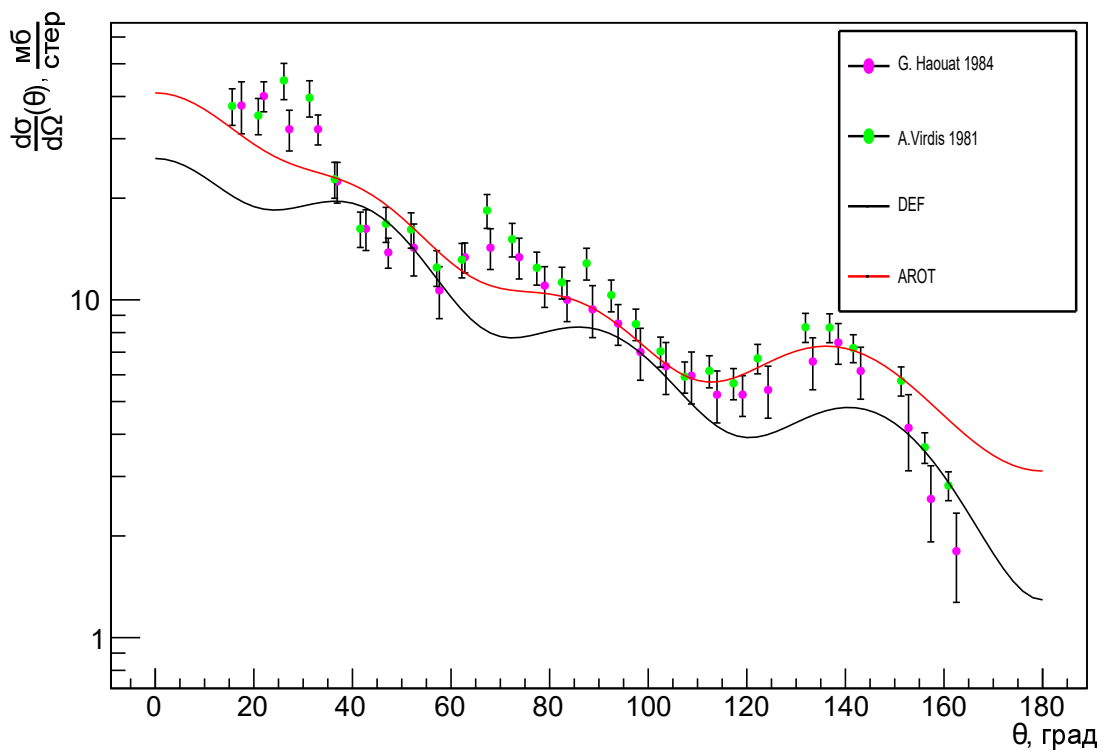


Рис. 11: Результаты аппроксимации углового распределения неупруго рассеянных нейтронов на  $^{24}\text{Mg}$  с возбуждением уровня  $2^+$  (1368,7 кэВ). Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»



В случае упругого рассеяния результаты расчетов в подходе DEF и AROT согласуются в области до  $80^\circ$ . Однако, для углов  $> 80^\circ$  лучшее описание экспериментальных данных достигается в варианте AROT. Для неупругого рассеяния расхождение между DEF и AROT наблюдается уже на всем диапазоне. При этом расчет в подходе AROT, в целом, лучше описывает экспериментальные данные на всем диапазоне за исключением углов  $> 150^\circ$ , что может быть связано с малым количеством данных в этой области. После аппроксимации величина  $\chi^2/N$  уменьшилась в 3 раза, что указывает на лучшее соглашение наших расчетов экспериментальным данным.

Полученные в результате расчетов параметры ОП и значения величины  $\chi^2/N$  для подхода AROT в сравнении с DEF приведены в табл. 3. Также для сравнения приведены результаты аналогичных расчетов из работы [29] в приближениях симметричного и асимметричного ротаторов.

Таблица 3: Подобранные параметры оптического потенциала для  $^{24}\text{Mg}$  в сравнение с DEF и результатами расчетов из работы [29].

	DEF	AROT	ROT [29]	AROT [29]
$\chi^2/N$	12.06	3.91		
$V_v$	48.70	48.36	51.04	51.04
$W_v$	1.286	0.971		
$r_v$	1.163	1.167	1.15	1.15
$a_v$	0.674	0.633	0.61	0.61
$W_d$	7.63	4.79	7.74	7.04
$r_d$	1.296	1.349	1.15	1.15
$a_d$	0.54	0.70	0.58	0.58
$V_{so}$	5.413	4.735	12	12
$W_{so}$	-0.0764	0		
$r_{so}$	0.96	0.85	1.15	1.15
$a_{so}$	0.59	0.58	0.58	0.58
$\beta_2$	0.592	0.579	0.50	0.53
$\gamma$	20	20		21.1
$\beta_4$	-0.05	-0.107	0	0

В результате процедуры подбора наиболее чувствительными оказались параметры мнимой части ОП  $W_d$  и  $W_v$ , которые изменились на 59% и 32.4% относительно DEF, соответственно. Также значительно изменилась поверхностная компонента диффузности  $a_d$  (отклонение от значения DEF 29.6%) и параметр гексадекапольной деформации  $\beta_4$  (отклонение от значения DEF 114%).

## 4.2 Кремний

Аналогичный анализ наборов экспериментальных данных (Рис. 12), полученных из EXFOR, был проведен для  $^{28}\text{Si}$ .

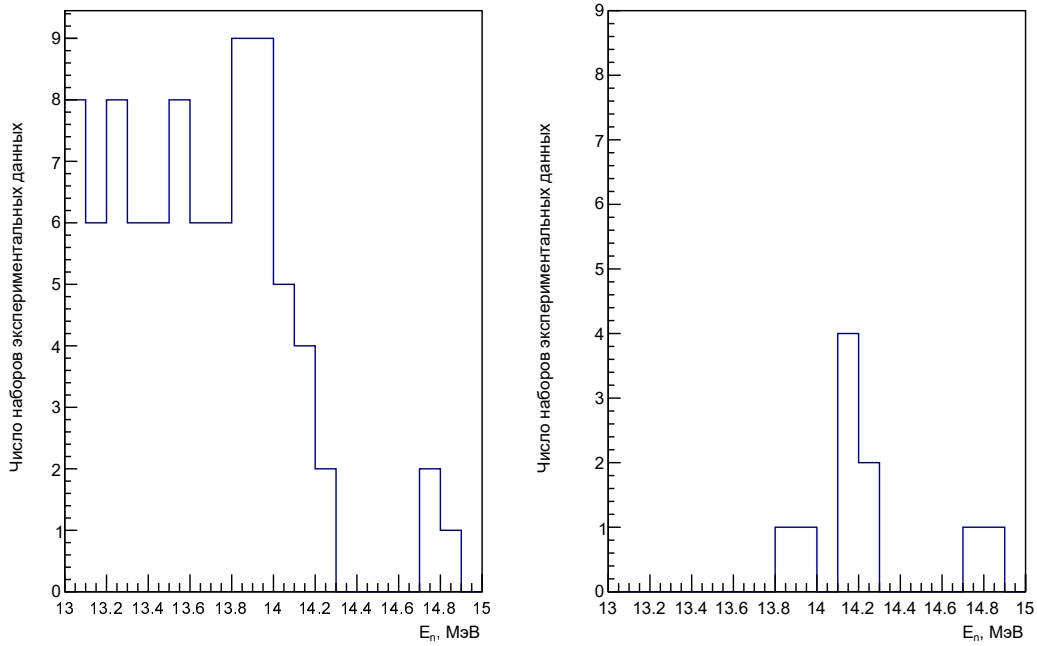


Рис. 12: Слева – гистограмма экспериментальных данных по упругому рассеянию, справа – по неупругому

В наборе данных по упругому рассеянию в области энергии от 13 МэВ до 14.2 МэВ была обнаружена работа, в которой проведено большое количество измерений сечения для углов  $15^\circ$  и  $30^\circ$  с малым шагом по энергии. Так как нам необходимо иметь данные, которые охватывают широкий диапазон углов, мы убрали эту работу из рассмотрения. В таком случае в диапазоне энергий от 13 МэВ до 14.2 МэВ остается очень мало пригодных для оптимизации параметров данных. Поэтому мы рассматривали область энергий от 14.6 МэВ до 15 МэВ для которой удалось получить по два набора для упругого и неупругого рассеяния (Таблица 4).

Однако, в данных по упругому рассеянию из работы [32] были обнаружены точки без ошибок или с очень малыми ошибками (около 0.01% от измеренного значения). Использование этого набора данных приводило к недооценке неупругого рассеяния. Поэтому мы решили отказаться от использования данного набора при подборе параметров ОП. Для дан-

Таблица 4: Набор экспериментальных данных для  $^{28}\text{Si}$ .

Реакция	Автор	Ссылка	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	A. Viridis	[32]	14.83
	G. Haouat	[29]	14.83
	J. Hohn	[33]	14.7
$(n, n')$	A. Viridis	[32]	14.83
	G. Haouat	[29]	14.83
	J. Hohn	[33]	14.7

ных из работы [33] было исправлено некорректное представление ошибок величины сечения.

Подбор параметров ОП был выполнен в рамках коллективной модели симметричного ротатора (ROT). В качестве начального приближения использовались параметры глобальной параметризации Кенинга. В файлах деформации TALYS отсутствовали значения для параметров деформации  $\beta_2$  и  $\beta_4$ , поэтому в качестве начального приближения мы использовали значения из работы [29].

На рис. 13 и 14 приведены результаты аппроксимации угловых распределений рассеянных нейтронов для случаев DEF и ROT нашего набора экспериментальных данных.

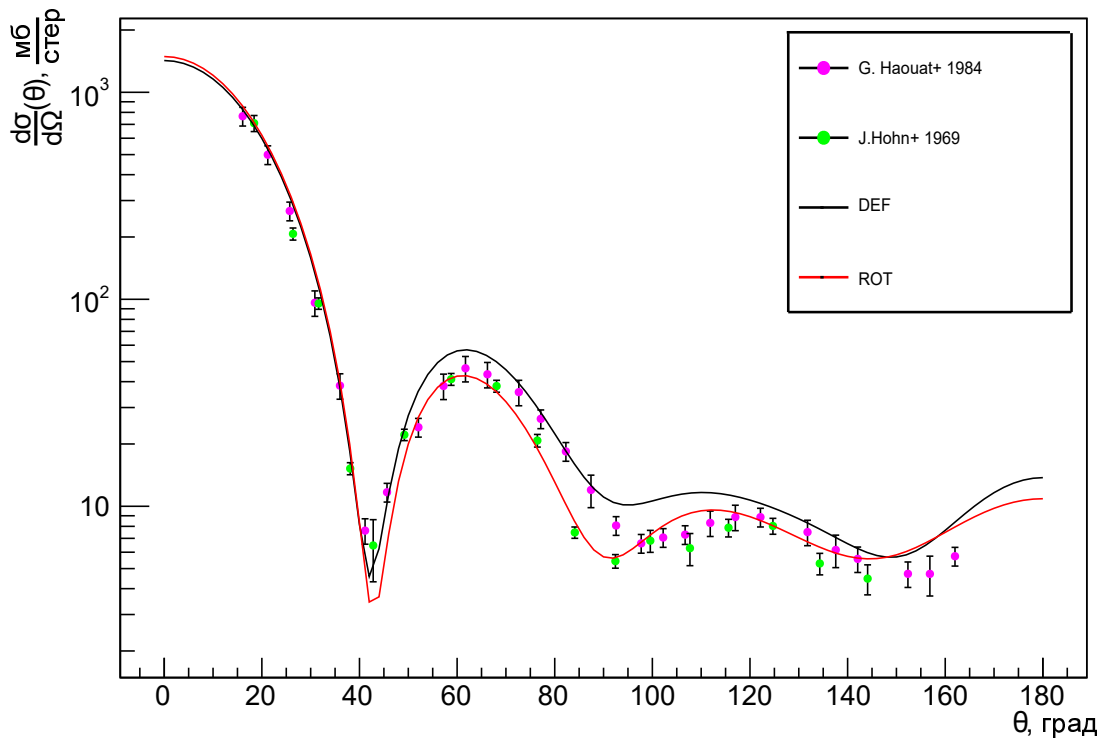


Рис. 13: Результаты аппроксимации углового распределения упруго рассеянных нейтронов на  $^{28}\text{Si}$ . Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»

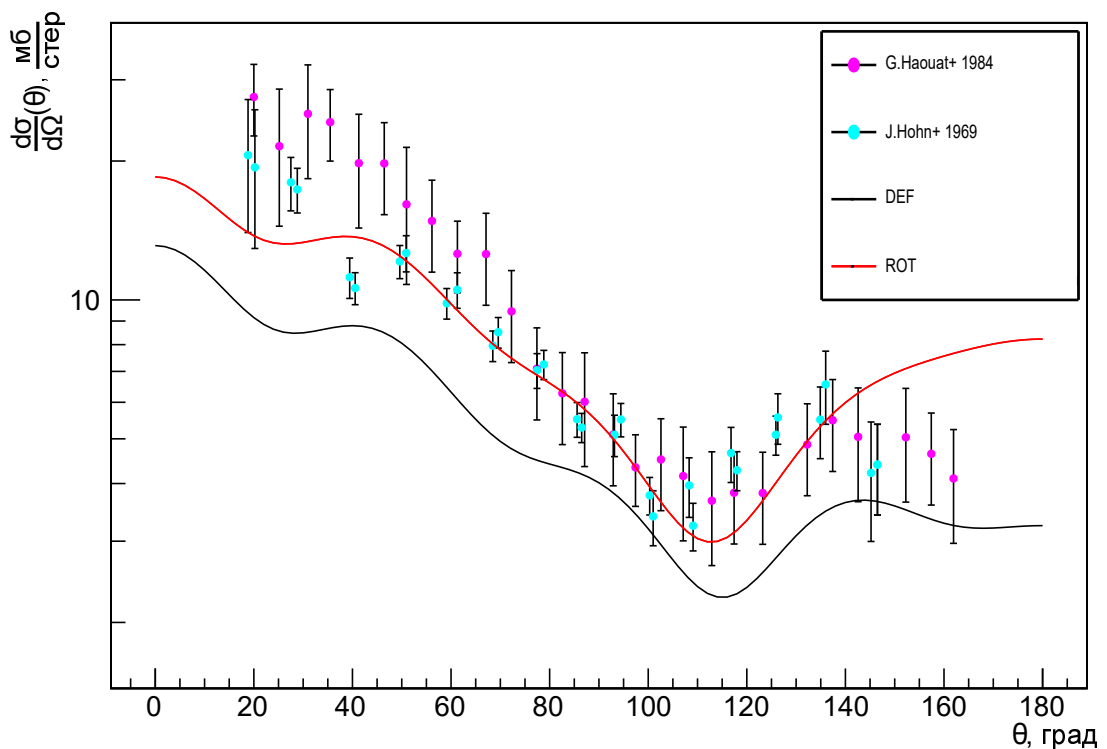


Рис. 14: Результаты аппроксимации углового распределения неупруго рассеянных нейтронов на  $^{28}\text{Si}$  с возбуждением уровня  $2^+$  (1779 кэВ). Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»

Расчеты в походе ROT показывают хорошее согласие с экспериментальными данными для случая упругого рассеяния, особенно в диапазоне углов  $60^\circ - 160^\circ$ , где расчеты в подходе DEF дают завышенную оценку сечений. Для неупругого рассеяния в подходе ROT также достигается значительное улучшение, по сравнению с DEF, описания экспериментального набора. Значение  $\chi^2/N$  в результате оптимизации параметров уменьшилось в 11 раз.

Подобранные параметры ОП для подхода ROT в сравнение с DEF приведены в табл.5.

Таблица 5: Подобранные параметры оптического потенциала для  $^{28}\text{Si}$  в сравнение с DEF (\* значения из работы [29]).

	DEF	ROT
$\chi^2/N$	39.33	3.55
$V_v$	48.93	51.76
$W_v$	1.21	0.90
$r_v$	1.17	1.15
$a_v$	0.67	0.53
$W_d$	7.68	4.80
$r_d$	1.29	1.38
$a_d$	0.54	0.73
$V_{so}$	5.44	5.38
$W_{so}$	-0.07	0
$r_{so}$	0.97	0.96
$a_{so}$	0.59	0.58
$\beta_2$	-0.420*	-0.413
$\beta_4$	0.2*	0

Так же, как и для  $^{24}\text{Mg}$ , наиболее чувствительными параметрами оказались  $W_d, W_v$  и  $a_d$  с отклонениями в 60%, 34.4% и 35.1% от DEF, соответственно. Параметр деформации  $\beta_2$  изменился незначительно, а параметр  $\beta_4$  принял значение ноль.

### 4.3 Сера

Для ядра  $^{32}\text{S}$ , набор экспериментальных данных в диапазоне энергий от 13 до 15 МэВ оказался существенно богаче (Рис. 15) чем для  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{28}\text{Si}$ .

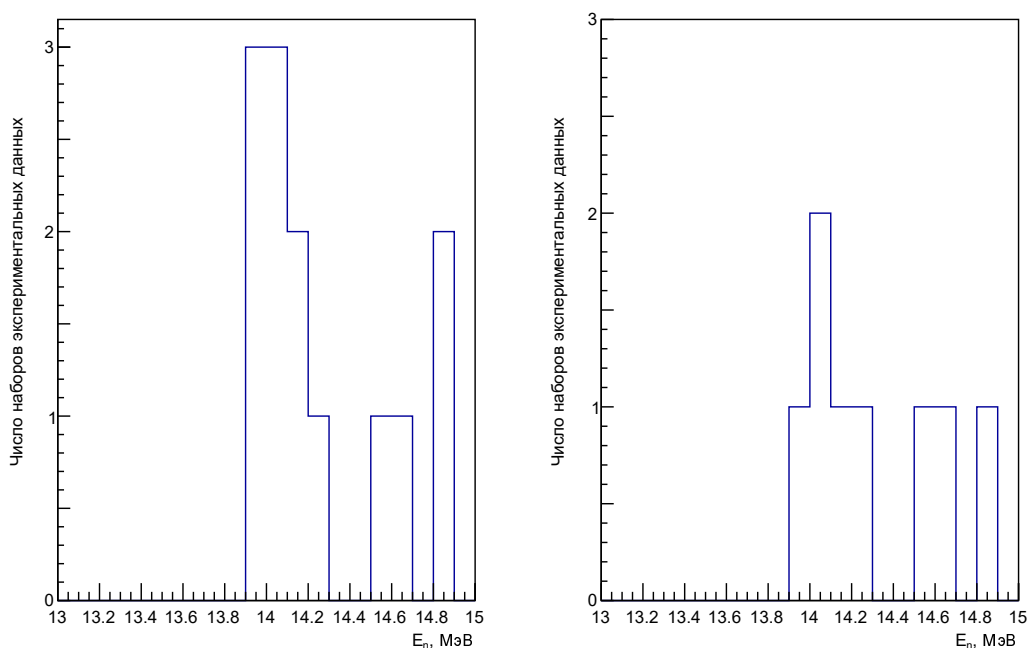


Рис. 15: Слева – гистограмма числа наборов экспериментальных данных по упругому рассеянию, справа – по неупругому

Для характерного экспериментам TANGRA диапазону энергий налетающего нейтрона 13.9-14.3 МэВ, удалось получить достаточно экспериментальных наборов как по упругому рассеянию (7 наборов), так и по неупругому (4 набора). Список использованных работ приведен в Таблице 6.

Таблица 6: Набор экспериментальных данных для  $^{32}\text{S}$ .

Реакция	Автор	Ссылка	$E_n$ , МэВ
$(n, n)$	C.R. Howell	[34]	13.92
	C.St. Pierre	[35]	13.95
	P.H. Stelson	[30]	14
	J.O. Elliot	[36]	14
	R.L. Clarke	[37]	14.1
	M.A.Al-Ohali	[38]	13.92
	E. Mezzetti	[39]	14.2
$(n, n')$	C.R. Howell	[34]	13.92
	P.H. Stelson	[30]	14
	V.V. Bobyr	[40]	14
	E. Mezzetti	[39]	14.2

Для подбора параметров ОП был задан колебательный (VIB) тип возбуждения ядра. В качестве начального приближения использовались параметры глобальной параметризации Кенинга. Для параметра деформации  $\beta_2$  использовалось значение из файла деформаций TALYS.

На рис. 16 и 17 приведены результаты расчетов угловых распределений упруго и неупруго рассеянных нейтронов для случаев DEF и VIB в сравнении с экспериментальными данными.



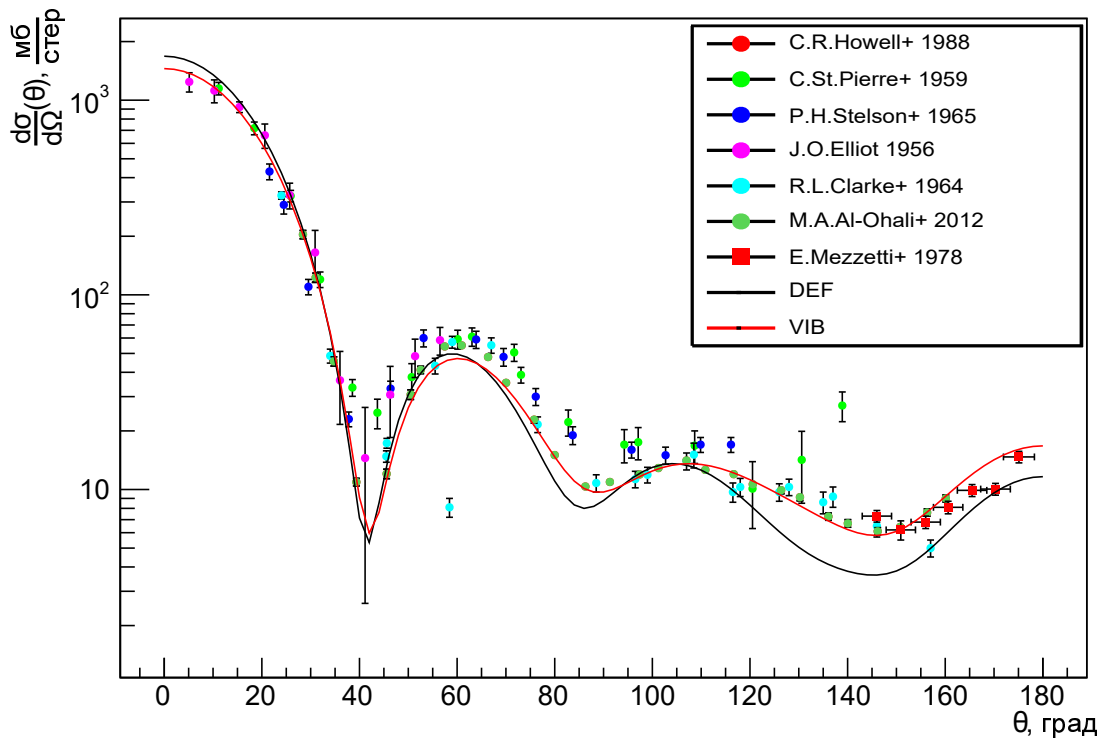


Рис. 16: Результаты аппроксимации углового распределения упруго рассеянных нейтронов на  $^{32}\text{S}$ . Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»

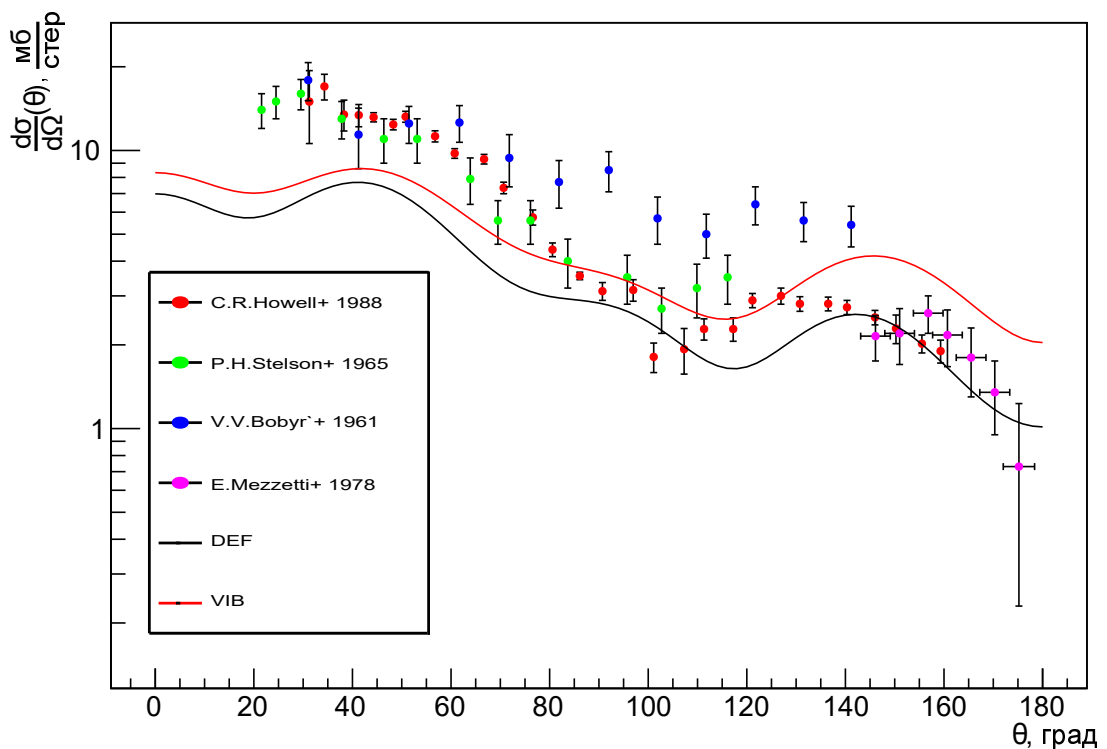


Рис. 17: Результаты аппроксимации углового распределения неупруго рассеянных нейтронов на  $^{32}\text{S}$  с возбуждением уровня  $2^+$  (2230,6 кэВ). Красная линия – наши расчеты, черная линия – расчеты TALYS «по умолчанию»

Для упругого рассеяния наблюдается улучшение описания для углов  $> 60^\circ$ . В случае неупругого рассеяния экспериментальные данные из нашего набора не очень хорошо согласуются между собой в диапазоне углов от  $60^\circ$  до  $140^\circ$ . Несмотря на это, при расчетах в подходе VIB удалось добиться достаточно хорошего описания на всем диапазоне углов. После процедуры оптимизации параметров величина  $\chi^2/N$  уменьшилась в 3.7 раза.

Полученные в результате расчетов параметры ОП и значения величины  $\chi^2/N$  в сравнении с TALYS «по умолчанию» (DEF) приведены в табл. 7.

Таблица 7: Подобранные параметры оптического потенциала для  $^{32}\text{S}$  в сравнение с DEF.

	DEF	VIB
$\chi^2/N$	74.65	19.97
$V_v$	48.89	50.60
$W_v$	1.20	0.93
$r_v$	1.18	1.17
$a_v$	0.67	0.58
$W_d$	7.68	4.78
$r_d$	1.29	1.14
$a_d$	0.54	0.76
$V_{so}$	5.46	7.62
$W_{so}$	-0.07	0
$r_{so}$	0.98	0.83
$a_{so}$	0.59	1.00
$\beta_2$	0.299	0.316

В результате процедуры подбора, как и в случае  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{28}\text{Si}$ , значительно изменились компоненты мнимой части потенциала  $W_d$  (60.6%) и  $W_v$  (29%). Также большую чувствительность показали спин-орбитальные компоненты объемной части потенциала  $V_{so}$  (39.6%) и диффузности  $a_{so}$  (69.5%). Параметр деформации  $\beta_2$  изменился незначительно.

## 5 Заключение

В ходе работы был протестирован функционал TalysLib по подбору параметров оптического потенциала, а также добавлен способ получения экспериментальных и оцененных данных из соответствующих баз: EXFOR, ENDF, TENDL, JENDL, CENDL, BROND, FENDL, JEFF, MENDL. Для этого были проанализированы существующие форматы табулированных данных, полученные путем автоматизированной обработки файлов EXFOR: C4 и EXFORTABLES. По результатам исследования формат данных C4 оказался более подходящим для дальнейшего использования и на его основе была реализована база экспериментальных данных для TalysLib. На основе извлеченных данных нами была проведена оптимизация параметров оптического потенциала для реакций рассеяния нейтронов с энергией около 14 МэВ на ядрах  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$  и  $^{32}\text{S}$ . Результаты оптимизации параметров показали значительное улучшение описания упругого и неупругого рассеяния нейтронов на рассматриваемых ядрах по сравнению с TALYS «по умолчанию», что говорит об обоснованности наших предположений о механизме возбуждения низколежащих состояний. Наибольшую чувствительность показали параметры мнимой части оптического потенциала.

## Благодарности

Автор выражает благодарность Т.Ю. Третьяковой, Н.А. Фёдорову и коллективу коллаборации TANGRA за неоценимую помощь в выполнении данной работы.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Проект «TANGRA». — <http://flnph.jinr.ru/ru/facilities/proekt-tangra>.
- [2] Feshbach H. The Optical Model and Its Justification // Annual Review of Nuclear Science. — 1958. — Vol. 8, no. 1. — P. 49–104.
- [3] Koning A. J., Delaroche J. P. Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV // Nucl. Phys. A. — 2003. — Vol. 713. — P. 231–310.
- [4] Балашов В.В. Квантовая теория столкновений. — Москва : МАКС Пресс, 2012. — С. 292.
- [5] Tamura T., Coker W., Rybicki F. Distorted wave Born approximation for nuclear reactions // Computer Physics Communications. — 1971. — Vol. 2, no. 2. — P. 94–106.
- [6] Tamura T. Analyses of the Scattering of Nuclear Particles by Collective Nuclei in Terms of the Coupled-Channel Calculation // Rev. Mod. Phys. — 1965. — Vol. 37. — P. 679–708.
- [7] Тейлор Д. Теория рассеяния: Квантовая теория нерелятивистских столкновений. — Москва : Мир, 1975. — С. 444.
- [8] Ситенко А.Г. Теория ядерных реакций. — Москва : Энергоатомиздат, 1983. — С. 352.
- [9] Young P. G., Arthur E. D., Chadwick M. B. Comprehensive Nuclear Model Calculations: Introduction to the Theory and Use of the GNASH code. — Los Alamos, Report LA-12343-MS, 1992.

- [10] Dityuk A. I., Konobeyev A. Yu., Lunev V. P. New Advanced Version of Computer Code ALICE - IPPE. — Report INDC (CCP), 1998.
- [11] Uhl M., Strohmaier B. Computer code for particle induced activation cross sections and related quantities. — IRK Report 76/01, 1976.
- [12] Herman M., Capote R. et al. EMPIRE: Nuclear Reaction Model Code System for Data Evaluation // Nucl. Data Sheets. — 2007. — Vol. 108. — P. 2655.
- [13] Koning A., Rochman D. Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System // Nuclear Data Sheets. — 2012. — Vol. 113, no. 12. — P. 2841–2934.
- [14] Capote R., Herman M. RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nuclear Data Sheets. — 2009. — Vol. 110, no. 12. — P. 3107–3214.
- [15] Brun R., Rademakers F., Canal P. root-project/root: v6.18/02. — 2019. — Aug.
- [16] ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data / Brown D., Chadwick M., Capote R., and other // Nuclear Data Sheets. — 2018. — Vol. 148. — P. 1–142.
- [17] TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology / Koning A., Rochman D., Sublet J.-C., et al. // Nuclear Data Sheets. — 2019. — Vol. 155. — P. 1–55.
- [18] Iwamoto O., Iwamoto N., Kunieda S. Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5 // Journal of Nuclear Science and Technology. — 2023. — Vol. 60, no. 1. — P. 1–60.

- [19] Ge, Zhigang, Xu, Ruirui, Wu, Haicheng. CENDL-3.2: The new version of Chinese general purpose evaluated nuclear data library // EPJ Web Conf. — 2020. — Vol. 239. — P. 09001.
- [20] Blokhin A., Ignatyuk A. NEW VERSION OF NEUTRON EVALUATED DATA LIBRARY BROND-3.1 (in Russian) // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear and Reactor Constants. — 2016. — P. 92.
- [21] FENDL-3 Library – Summary documentation / Forrest R., Capote R., Otsuka N., et al. — IAEA, 2012.
- [22] Koning A., Forrest R. et al. JEFF Report 21: The JEFF-3.1 Nuclear Data Library. — 2006.
- [23] Yu.N.Shubin, V.P.Lunev et al. Cross-Section Library MENDL-2 to Study Activation and Transmutation of Materials Irradiated by Nucleons of Intermediate Energies // report INDC(CCP)-385 (International Atomic Energy Agency). — 1995.
- [24] Towards a More Complete and Accurate Experimental Nuclear Reaction Data Library (EXFOR): International Collaboration Between Nuclear Reaction Data Centres (NRDC) / Otsuka N., Dupont E., Semkova V., et al. // Nuclear Data Sheets. — 2014. — Vol. 120. — P. 272–276.
- [25] Boerker G., Boettger R. et al. Neutron scattering cross section of oxygen from 6 to 15 MeV // Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. — 1987. — Vol. 22:4.
- [26] Cullen E., Trkov A. Program X4TOC4 // report IAEA-NDS-80, Rev. 1. — 2001.

- [27] Koning A. EXFORTABLES-1.0: An experimental nuclear reaction database based on EXFOR // IAEA NDS Document Series IAEA(NDS)-235. — 2020.
- [28] Trkov A., Brown D. A. ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files. — 2018. — 1.
- [29] Haouat G., Lagrange C., Swiniarski R. Nuclear deformations of  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ , and  $^{32}\text{S}$  from fast neutron scattering // Phys. Rev. C. — 1984. — Vol. 30. — P. 1795–1809.
- [30] Excitation of collective states by the inelastic scattering of 14 MeV neutrons / Stelson P., Robinson R., Kim H., Rapaport J., and Satchler G. // Nuclear Physics. — 1965. — Vol. 68, no. 1. — P. 97–140.
- [31] Cross W., Jarvis R. Scattering of 14.6 MeV neutrons by Mg, Ca, Cd, Ta and Bi // Nuclear Physics. — 1960. — Vol. 15. — P. 155–165.
- [32] Viridis A. Experimental study of the scattering of fast neutrons by the nuclei Mg-24, Si-28 and S-32. // Rept. Centre d'Etudes Nucleaires Saclay Reports. — 1981. — no. 5144.
- [33] Elastic and inelastic scattering of 14.7 MeV neutrons from  $^{28}\text{Si}$  / Höhn J., Pose H., Seeliger D., and Reif R. // Nuclear Physics A. — 1969. — Vol. 134, no. 2. — P. 289–307.
- [34] Howell C. R., Pedroni R. S., Honoré G. M. Scattering of polarized and unpolarized nucleons from  $^{28}\text{Si}$  // Phys. Rev. C. — 1988. — Vol. 38. — P. 1552–1570.
- [35] Pierre C. S., Machwe M. K., Lorrain P. Elastic Scattering of 14-Mev Neutrons by Al, S, Ti, and Co // Phys. Rev. — 1959. — Vol. 115. — P. 999–1003.

- [36] Elliot J. O. Differential Elastic Scattering of 14-Mev Neutrons in Bi, Ta, In, Fe, and S // Phys. Rev. — 1956. — Vol. 101. — P. 684–688.
- [37] Clarke R., Gross W. Elastic and inelastic scattering of 14.1 MeV neutrons from C, Mg, Si and S // Nuclear Physics. — 1964. — Vol. 53. — P. 177–203.
- [38] Neutron scattering from  $^{28}\text{Si}$  and  $^{32}\text{S}$  from 8.0 to 18.9 MeV, dispersive optical model analyses, and ground-state correlations / Al-Ohali M. A., Delaroche J. P., Howell C. R., et al. // Phys. Rev. C. — 2012. — Vol. 86. — P. 14.
- [39] Mezzetti E., Minetti B., Pasquarelli A. Backward scattering of 14.2 MeV neutrons from carbon and sulfur // Lettere al Nuovo Cimento. — 1978. — Vol. 22, no. 3. — P. 91–100.
- [40] Bobyr V., Grona L., Strizhak V. Angular distribution of 14-MeV neutrons inelastically scattered on carbon, nitrogen and sulfur. // Jour. Zhurnal Eksperimental'noi i Teoret. Fiziki. — 1961. — Vol. 41, no. 3. — P. 24.