

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»  
(НИЯУ МИФИ)

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕХНОЛОГИЙ  
КАФЕДРА №40 «ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ»

УДК 539.17

**ОТЧЁТ**  
**О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ**  
**ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ, ДЕЛЕНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ**  
**ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДЕР**

Студент

\_\_\_\_\_ Д. А. Ситьков

Научный руководитель,  
д.ф.-м.н., доц.

\_\_\_\_\_ А. Л. Барабанов

Москва 2023

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1 Метод Хартри-Фока-Боголюбова</b>	<b>5</b>
1.1 Уравнения Хартри-Фока . . . . .	5
1.2 Представление чисел заполнения . . . . .	6
1.3 Преобразование Боголюбова и квазичастицы . . . . .	7
1.4 Гармонический и трансформированный гармонический осциллятор . . . . .	8
<b>2 Деформация ядра кислорода-16</b>	<b>10</b>
<b>3 Реакции с образованием ядер-изомеров</b>	<b>12</b>
3.1 Оценка надёжности вычислений . . . . .	12
3.2 Образование иттрия-91 . . . . .	13
<b>Заключение</b>	<b>15</b>
<b>Список использованных источников</b>	<b>16</b>

# ВВЕДЕНИЕ

Давно стало понятно, что среднее поле, в котором находятся нуклоны в атомных ядрах, должно получаться из приближений типа Хартри-Фока [1]. Однако до сих пор неизвестна природа нуклон-нуклонного взаимодействия. Это обстоятельство породило несколько подходов к параметризации данного взаимодействия, но все эти подходы включают в себя довольно сложные и долгие расчёты. Этим объясняется надобность в другом подходе, а именно в расчётах с помощью метода Хартри-Фока, использующего некоторые вводимые эффективные взаимодействия. Данный подход, хотя и не является фундаментальным, позволяет производить вычисления там, где более реалистичные вычисления не представляются возможными. Также этот подход даёт возможность производить исследования с наименьшими трудозатратами.

В данной работе исследуется метод Хартри-Фока, состоящий из прямой параметризации эффективных сил. Такие силы могут быть: 1) плотностно-независимыми [2–4], расчёты с которыми обычно испытывают трудности при описании радиусов ядер или же полных энергий связи, и всегда плохо описывают плотности одночастичных состояний тяжелых ядер; 2) плотностно-зависимыми, которые в наименьшей степени испытывают перечисленные выше трудности. К взаимодействиям последнего типа относятся силы Скирма [5].

Недавно был предложен новый метод решения уравнений Хартри-Фока [6]. А именно, использование базисных функций гармонического осциллятора (НО) для разложения решений уравнений Хартри-Фока-Боголюбова. Однако чистые НО базисные функции дают неверную асимптотику волновых функций на больших расстояниях. Для решения данной проблемы предлагается использовать базис из трансформированных базисных функций гармонического осциллятора (ТНО), который получается путём локального преобразования координат.

Работа [6] описывает код свободно распространяемой программы HFVTНО, использующей подход Хартри-Фока-Боголюбова для исследования свойств ядер с заданным количеством протонов и нейтронов, опирающейся на описанный выше базис ТНО. Обширное описание возможностей данного комплекса к деформированным ядрам дано в работе [7].

В первой части данной работы кратко описывается метод Хартри-Фока-Боголюбова с использованием ТНО базисных функций и представляются результаты освоения расчётной программы HFVTНО. На примере лёгкого ядра  $^{16}\text{O}$  показаны как расщепляются одночастичные уровни при деформации ядра.

Во второй части данной работы рассматривается задача, связанная с ядерным

синтезом. Для проектирования установок, в которых предполагается осуществить управляемую реакцию термоядерного синтеза  $d + t \rightarrow {}^4\text{He} + n$  с образованием нейтронов с энергией 14,1 МэВ (в системе центра масс), необходимы данные о реакциях, инициируемых этими нейтронами. В частности, во взаимодействии нейтронов с ядрами атомов конструкционных материалов и других элементов, использующихся в данных установках могут образовываться ядра в относительно долгоживущих изомерных состояниях, которые распадаются посредством испускания довольно жёстких гамма-квантов. Учёт этих гамма-квантов важен для оценки радиационной стойкости материалов.

В последней версии библиотеки IRDFF-II (International Reactor Dosimetry and Fusion File) [8] (база данных ENDF) представлены данные только для 4-х реакций с образованием ядер-изомеров:

1.  ${}^{93}\text{Nb}(n, 2n){}^{92m}\text{Nb}$ ;
2.  ${}^{113}\text{In}(n, n'){}^{113m}\text{In}$ ;
3.  ${}^{115}\text{In}(n, n'){}^{115m}\text{In}$ ;
4.  ${}^{115}\text{In}(n, 2n){}^{114m}\text{In}$ .

На самом деле таких реакций намного больше. Так, в частности, недавно в НИЦ «Курчатовский институт» были измерены [9] сечения следующих реакций:

1.  ${}^{91}\text{Zr}(n, p){}^{91m}\text{Y}$ ;
2.  ${}^{91}\text{Zr}(n, n\alpha){}^{87m}\text{Sr}$ ;
3.  ${}^{115}\text{In}(n, 2n){}^{114m}\text{In}$ ;
4.  ${}^{115}\text{In}(n, n'){}^{115m}\text{In}$

при энергии падающих нейтронов близкой к 14 МэВ. О надёжности этих данных можно судить, сравнивая их с ранее полученными аналогичными результатами. Однако не для всех подобных реакций такие результаты (в достаточном количестве) имеются. Поэтому представляют интерес численные оценки сечений.

Отметим, что в настоящее время достигнут значительный прогресс в области численного моделирования ядерных реакций. Подходящим примером может служить программный комплекс TALYS-1.9 [10] с открытым кодом. Этот комплекс позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. Соответственно возник вопрос о возможности использования программного комплекса TALYS-1.9 для предсказания соответствующих сечений. В работе представлены результаты расчётов сечений реакции  ${}^{91}\text{Zr}(n, p){}^{91m}\text{Y}$ , выполненных с помощью TALYS-1.9.

Данный программный комплекс интересен также тем, что в TALYS-1.9 можно внедрять собственные модели. Таким образом, можно, например, использовать одночастичные состояния, полученные в комплексе HFVTHO для расчёта плотности многочастичных состояний в сильно деформированных, в частности, делящихся ядрах.

# 1 МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА-БОГОЛЮБОВА

## 1.1 УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ-ФОКА

Кратко напомним вывод уравнений Хартри-Фока. Пусть нам дан гамильтониан системы из  $N$  частиц, включающий в себя потенциалы для одной частицы (например, оператор кинетической энергии) и взаимодействия двух частиц

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{v}_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \hat{v}_{ij}. \quad (1.1)$$

Многочастичная (фермионная) волновая функция представляется в виде определителя Слетера

$$\Psi_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \vdots & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \vdots & \psi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & \vdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}, \quad (1.2)$$

где  $\psi_i(x_j) = \phi_i(\mathbf{r}_j)\chi_i(\sigma_j)$  — ортонормированные одночастичные волновые функции, состоящие из координатной и спиновой частей. Идея метода заключается в поиске таких одночастичных функций, что матричный элемент  $\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle$  будет принимать на них минимум. Этот матричный элемент можно представить в виде

$$\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle = \sum_k \langle \psi_k | \hat{v}_k | \psi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_l \psi_k | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_k \psi_l | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle. \quad (1.3)$$

Пусть известны все одночастичные волновые функции, кроме  $|\psi_i\rangle$ . Тогда требование минимальности соотношения (1.3) определит эту функцию:

$$\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle = \langle \psi_i | \hat{v}_i | \psi_i \rangle + \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \psi_i \rangle - \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \psi_j \rangle + \text{const} \rightarrow \min_{|\psi_i\rangle}. \quad (1.4)$$

Согласно вариационному принципу задача (1.4) эквивалентна задаче Шрёдингера

$$\hat{v}_i \psi_i(x_i) + \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \rangle \psi_i(x_i) - \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \rangle \psi_j(x_i) = \epsilon_i^{\min} \psi_i(x_i), \quad (1.5)$$

что и будет являться системой нелинейных уравнений Хартри-Фока на волновые функции  $\psi_i$  и энергии  $\varepsilon_i^{\min}$ .

## 1.2 ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЙ

Пусть нам дан полный ортонормированный набор одночастичных состояний  $|\nu\rangle$ . В координатном представлении:

$$\psi_\nu(x_i) \equiv \langle x_i | \nu \rangle = \langle \mathbf{r}_i, \sigma_i | \nu \rangle = \psi_\nu(\mathbf{r}_i, \sigma_i). \quad (1.6)$$

На основе этих функций можно составить набор абсолютно антисимметричных  $N$ -частичных волновых функций

$$\Phi_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \dots \sum_{i_N=1}^N \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{\nu_1}(x_{i_1}) \psi_{\nu_2}(x_{i_2}) \dots \psi_{\nu_N}(x_{i_N}), \quad (1.7)$$

где  $\epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N}$  — абсолютно антисимметричный тензор ранга  $N$ .

Любую антисимметричную  $N$ -частичную волновую функцию можно разложить по этим волновым функциям:

$$\Psi_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N} C_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N} \Phi_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N}(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (1.8)$$

Многочастичную волновую функцию (1.7) можно характеризовать набором чисел заполнений  $\{n_\nu\}$ , который показывает сколько раз определённое одночастичное состояние  $|\nu\rangle$  встречается в этом многочастичном состоянии ( $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N$ )<sup>1)</sup>. Для фермионов, очевидно,  $n_\nu$  может принимать значения, равные 0 или 1. Следовательно,  $\sum_\nu n_\nu = N$ .

Так, волновые функции  $\Phi_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N} \equiv \Phi_{\{n_\nu\}}$  соответствуют базисным состояниям  $|n_1, n_2, \dots\rangle$  в функциональном гильбертовом пространстве, которое содержит вакуумное состояние, всевозможные одночастичные состояния, всевозможные антисимметричные двухчастичные состояния и так далее. Причём,

$$\Phi_{\{n_\nu\}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle x_1, x_2, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots \rangle. \quad (1.9)$$

Эти состояния ортонормированы:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu, \dots | n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_\nu n'_\nu} \dots \quad (1.10)$$

<sup>1)</sup>После какого-то состояния все числа заполнения будут равны 0, так как рассматриваем конечное количество частиц в системе.

Обыкновенным образом вводятся операторы уничтожения и рождения

$$\hat{a}_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0, \quad (1.11)$$

$$\hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = 0, \quad (1.12)$$

которые подчиняются антикоммутационным соотношениям

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu^\dagger\} = \delta_{\mu\nu}, \quad (1.13)$$

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\nu^\dagger\} = 0. \quad (1.14)$$

Можно показать [11], что в представлении чисел заполнения любой аддитивный *одночастичный* оператор  $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i$  можно представить в виде

$$\hat{F} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad (1.15)$$

где  $f_{\nu\nu'} = \langle \nu | \hat{f} | \nu' \rangle$ .

Так, кинетическая энергия  $N$ -частичной системы

$$\hat{T} = \sum_i \hat{t}_i \equiv \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad (1.16)$$

представится в виде

$$\hat{T} = \sum_{\nu\nu'} \sum_x \psi_\nu^\dagger(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{\nu'}(x) \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \equiv \sum_{\nu\nu'} e_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad (1.17)$$

где принято обозначение  $\sum_x \equiv \sum_\sigma \int d^3r$ .

Аналогичный вид можно придать и *двухчастичному* оператору  $\hat{V} = \sum_{i < j=1}^N \hat{v}_{ij}$  системы, а именно

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} v_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'} = \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}, \quad (1.18)$$

где  $\tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} = \langle \mu\nu | v | \mu'\nu' \rangle - \langle \mu\nu | v | \nu'\mu' \rangle$  — антисимметризованный матричный элемент.

### 1.3 ПРЕОБРАЗОВАНИЕ БОГОЛЮБОВА И КВАЗИЧАСТИЦЫ

Основная идея перехода от точных одночастичных состояний системы к одно-квазичастичным состояниям заключается в представлении основного состояния много-частичной системы, как вакуумного состояния многоквазичастичной системы.

Боголюбовские квазичастицы линейно связаны с частицами: операторы рожде-

ния  $\hat{\beta}_\nu^\dagger$  и уничтожения  $\hat{\beta}_\nu$  определяются как ( $\nu = 1, 2, \dots, N$ )

$$\hat{\beta}_\nu^\dagger = \sum_{\mu=1}^N V_{\mu\nu} \hat{a}_\mu + U_{\mu\nu} \hat{a}_\mu^\dagger, \quad \hat{\beta}_\nu = \sum_{\mu=1}^N U_{\mu\nu}^* \hat{a}_\mu + V_{\mu\nu}^* \hat{a}_\mu^\dagger \quad (1.19)$$

или в матричном виде

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\beta}^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{bmatrix} \equiv W^\dagger \begin{bmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{bmatrix}, \quad (1.20)$$

где

$$W = \begin{bmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{bmatrix}. \quad (1.21)$$

Для того, чтобы операторы квазичастиц подчинялись тем же антикоммутиационным соотношениям, что и операторы частиц налагается условие унитарности

$$W^\dagger W = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}. \quad (1.22)$$

Основное состояние  $|\Omega\rangle$  многочастичной системы для боголюбовских квазичастиц будет являться вакуумным состоянием:

$$\hat{\beta}_\nu |\Omega\rangle = 0, \quad \nu = 1, \dots, N. \quad (1.23)$$

Волновые функции, удовлетворяющие соотношению (1.23) для соответствующего набора квазичастичных операторов называются волновыми функциями Хартри-Фока-Боголюбова. Они полностью определяются<sup>2)</sup> матричными коэффициентами  $U$  и  $V$  из преобразования Боголюбова (1.20).

## 1.4 ГАРМОНИЧЕСКИЙ И ТРАНСФОРМИРОВАННЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Из (1.17) и (1.18) получим общий вид оператора Гамильтона для многочастичной системы фермионов:

$$\hat{H} = \sum_{\nu\nu'} e_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}, \quad (1.24)$$

---

<sup>2)</sup>См. § 7.2.2 из [11].



где необходимо перейти от операторов частиц к операторам квазичастиц через (1.20). Матричный элемент от такого гамильтониана является функционалом энергии

$$E = \frac{\langle \Omega | \hat{H} | \Omega \rangle}{\langle \Omega | \Omega \rangle}. \quad (1.25)$$

Повторяя аналогичные разделу 1.1 выкладки, можно получить уравнения Хартри-Фока-Боголюбова на матричные коэффициенты  $U$  и  $V$ .

Для близкодействующих сил (плотностей сил) Скирма так же можно получить уравнения Скирма-Хартри-Фока-Боголюбова (СХФБ) на плотностные матричные коэффициенты  $U = U(E, \mathbf{r}, \sigma, \tau)$  и  $V = V(E, \mathbf{r}, \sigma, \tau)$  [6]. В силу ограниченности базиса, по которому будут разложены данные квазичастичные волновые функции, квазичастичный энергетический спектр становится дискретным  $E_k$ .

Подходящим базисом для разложения квазичастичных волновых функций  $U(E_k, \mathbf{r}, \sigma, \tau)$  и  $V(E_k, \mathbf{r}, \sigma, \tau)$  может служить либо базис гармонического осциллятора (НО), либо трансформированного гармонического осциллятора (ТНО):

$$\Phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, \sigma) = \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \psi_{n_z}(z) \frac{\exp(i\Lambda\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\Sigma}(\sigma), \quad (1.26)$$

где  $\tilde{\alpha} = [n_r, n_z, \Lambda, \Sigma]$  — набор квантовых чисел, обозначающих количество узлов  $n_r$  и  $n_z$  в радиальном и аксиальном направлениях, и проекции  $\Lambda$  и  $\Sigma$  орбитального момента и спина соответственно на ось деформации  $Oz$ . Остальные обозначения совпадают с обозначениями [6]. Эти базисные функции зависят от параметра растяжения  $\beta_2 > 0$  вдоль оси  $Oz$ .

Поперечные длины деформированного осциллятора и длина вдоль оси  $Oz$  даются выражениями

$$b_{\perp} = b_0 q^{-1/6}, \quad b_z = b_0 q^{+1/3}, \quad (1.27)$$

где параметр  $q = \exp\left(-3\beta_2 \sqrt{5/16\pi}\right)$ , а  $b_0$  — заданная длина «сферического» осциллятора.

Трансформированный базис гармонического осциллятора даётся локально масштабирующим преобразованием координат:

$$r \rightarrow r' = r \frac{f(R)}{R}, \quad z \rightarrow z' = z \frac{f(R)}{R}, \quad (1.28)$$

где функция  $R = R(r, z)$  определена как

$$R(r, z) = \sqrt{\frac{r^2}{b_{\perp}^2} + \frac{z^2}{b_z^2}}, \quad (1.29)$$

а функция  $f(R)$  выбирается так, чтобы волновые функции (1.26) имели верную асимптотику на больших расстояниях.

## 2 ДЕФОРМАЦИЯ ЯДРА КИСЛОРОДА-16

С помощью программы HFVТНО были получены одночастичные спектры  $e_\alpha$  нейтронов для гамильтониана, соответствующего ядру  $^{16}\text{O}$ , в зависимости от параметра деформации ядра  $\beta_2$ . Ради экономии вычислительного времени для решения соответствующих уравнений СХФБ был выбран базис НО.

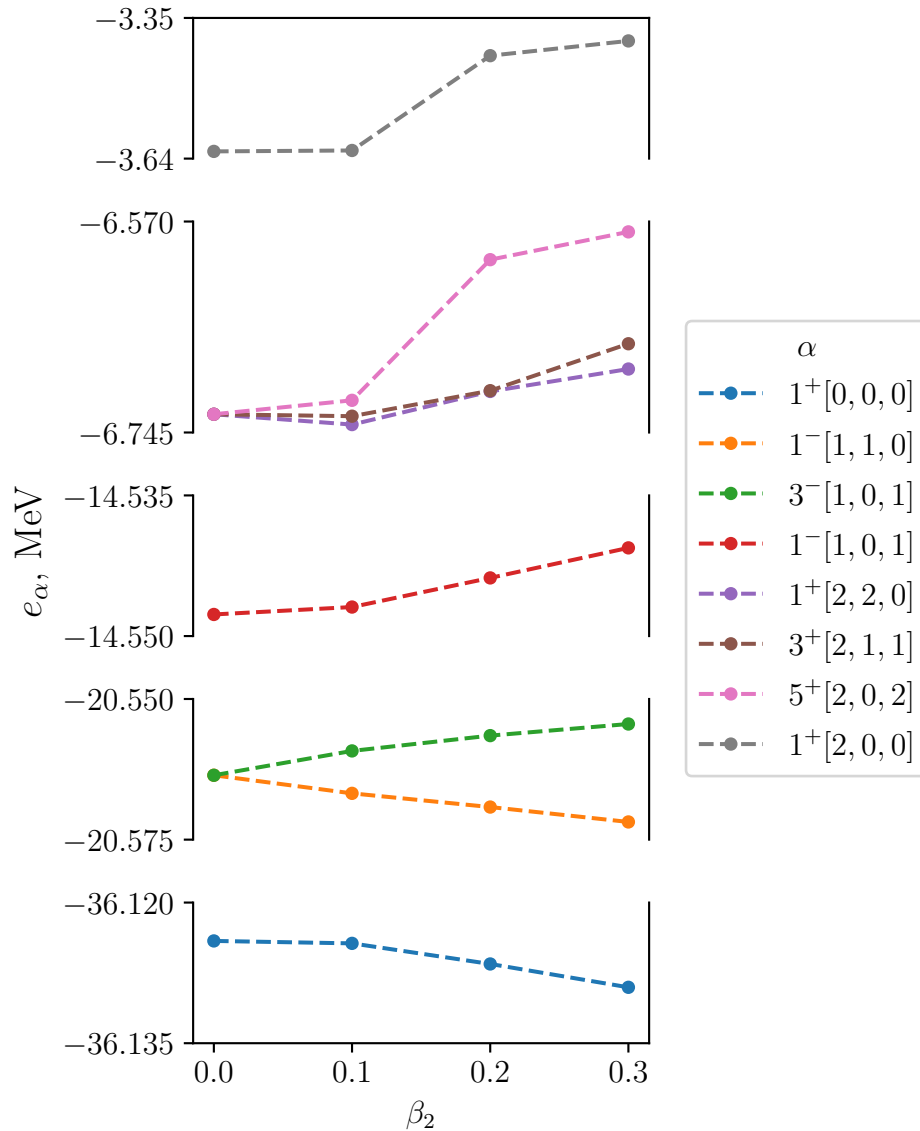


Рисунок 2.1 — Расщепление уровней нейтронов в ядре  $^{16}\text{O}$  при деформации ядра. Набор квантовых чисел  $\alpha$  соответствует недеформированным уровням (снизу вверх по энергиям)  $1s_{1/2}$ ,  $1p_{3/2}$  (расщепляется на два уровня),  $1p_{1/2}$ ,  $1d_{5/2}$  (расщепляется на три уровня),  $2s_{1/2}$ .

Недеформированные уровни (при  $\beta_2 = 0$ ) с точностью до нескольких MeV сов-

падают с уровнями, полученными, например, в [1].

## 3 РЕАКЦИИ С ОБРАЗОВАНИЕМ ЯДЕР-ИЗОМЕРОВ

В вводной части этой работы были изложены причины, по которым мы предприняли вычисления сечений реакции  $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91m}\text{Y}$  в диапазоне энергий падающих нейтронов до 20 МэВ.

Эта реакция идёт с образованием возбуждённого компаунд-ядра, поэтому плотности энергетических уровней этого ядра существенно влияют на значения сечений. В комплекс TALYS-1.9 включены шесть моделей плотности уровней: модель Гильберта-Камерона [12], модель ферми-газа с обратным смещением [13] и сверхтекучая модель, основанная на представлении о сверхтекучем ядре при малых энергиях возбуждения [14]. Следующие три модели основываются на числовых файлах, полученных в различных комбинаторных расчётах, однако надёжность этих моделей не выше, чем у предыдущих трёх.

Каждой из этих моделей поставлено в соответствие некоторое значение параметра `ldmodel` комплекса TALYS-1.9. Таким образом, для каждой реакции было вычислено сечение выхода изомерного (*m*) состояния конечного ядра с помощью программы TALYS-1.9 с параметрами `ldmodel` 1, 2 и 3 (первые 3 модели плотности уровней) в зависимости от энергии падающего нейтрона от порога реакции до 20 МэВ:  $S_1(E)$ ,  $S_2(E)$  и  $S_3(E)$  соответственно. К анализу были также привлечены:

- 1) оценённые зависимости сечений от энергии нейтронов (до 20 МэВ) из библиотеки TENDL-2021 [15];
- 2) экспериментальные данные по интересующим нас сечениям, относящиеся к энергии нейтронов до 20 МэВ, из базы данных EXFOR.

### 3.1 ОЦЕНКА НАДЁЖНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

При сравнении результатов вычислений с оценками и экспериментальными данными выяснилось, что ни одна модель плотности уровней не обладает существенными преимуществами над другими. Поэтому мы предположили, что максимальное расхождение вычисленных сечений

$$\Delta\sigma(E) = \max \{ |S_1(E) - S_2(E)|, |S_1(E) - S_3(E)|, |S_2(E) - S_3(E)| \} \quad (3.1)$$

при любой фиксированной энергии  $E$  налетающего нейтрона представляет собой неопределённость теоретического предсказания истинного сечения для этой энергии  $E$ .

В то же время среднее значение сечения

$$\sigma_{avg}(E) = \frac{S_1(E) + S_2(E) + S_3(E)}{3} \quad (3.2)$$

можно взять в качестве наиболее вероятного прогноза. Тогда коридор значений  $\sigma_{max} = \sigma_{avg} + \Delta\sigma$ ,  $\sigma_{min} = \sigma_{avg} - \Delta\sigma$  определяет область, в которой, согласно расчётным значениям, с высокой степенью вероятности находится истинное значение сечения.

## 3.2 ОБРАЗОВАНИЕ ИТТРИЯ-91

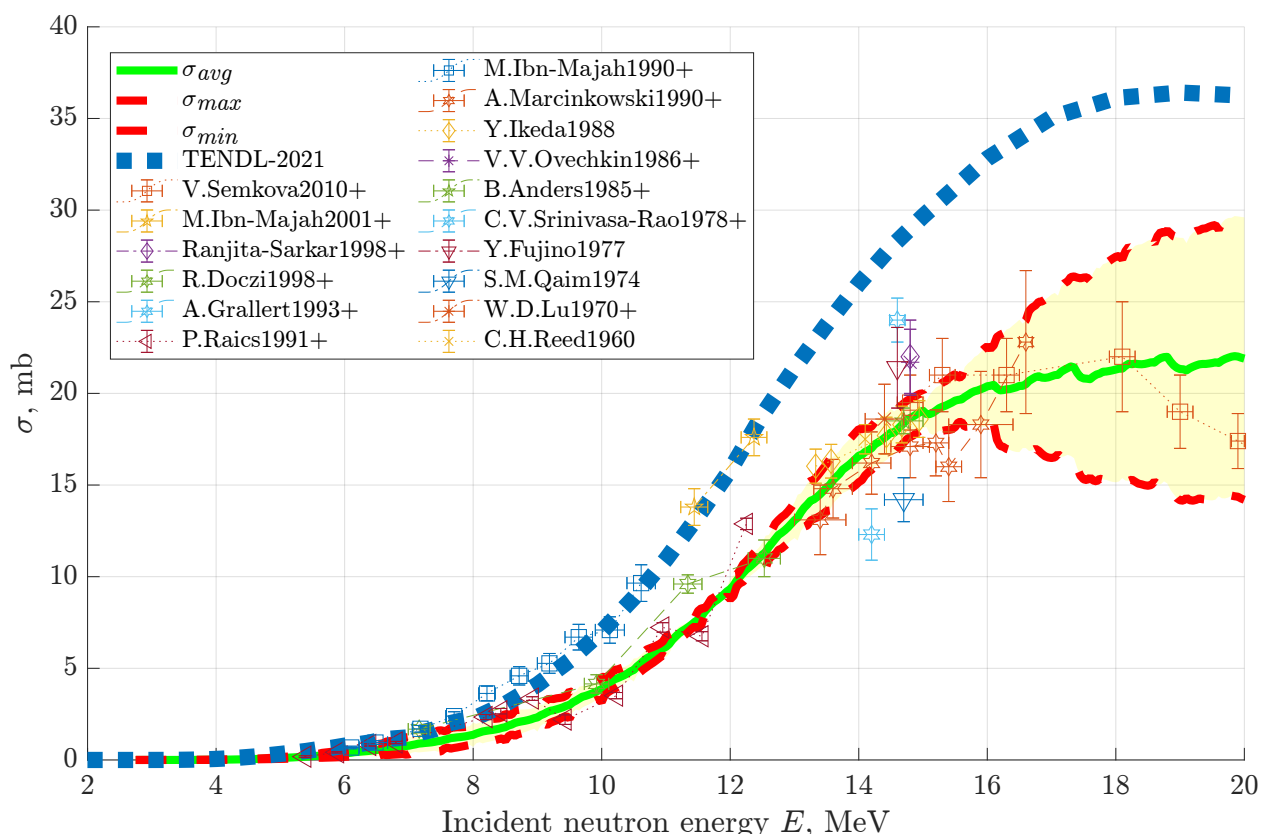


Рисунок 3.1 — Сечение выхода изомерного состояния ядра  $^{91m}\text{Y}$  в реакции  $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91m}\text{Y}$  в зависимости от энергии нейтрона.

На [рисунке 3.1](#) представлены сечения выхода изомерного состояния ядра  $^{91m}\text{Y}$  в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из EXFOR. В наиболее интересующей нас области 13–15 МэВ имеет место хорошее согласие рассчитанного по TALYS-1.9 «среднего» сечения выхода  $\sigma_{avg}$  изомерного состояния с экспериментальными данными из EXFOR. В данный энергетический диапазон укладывается порядка 60 % экспериментальных точек.

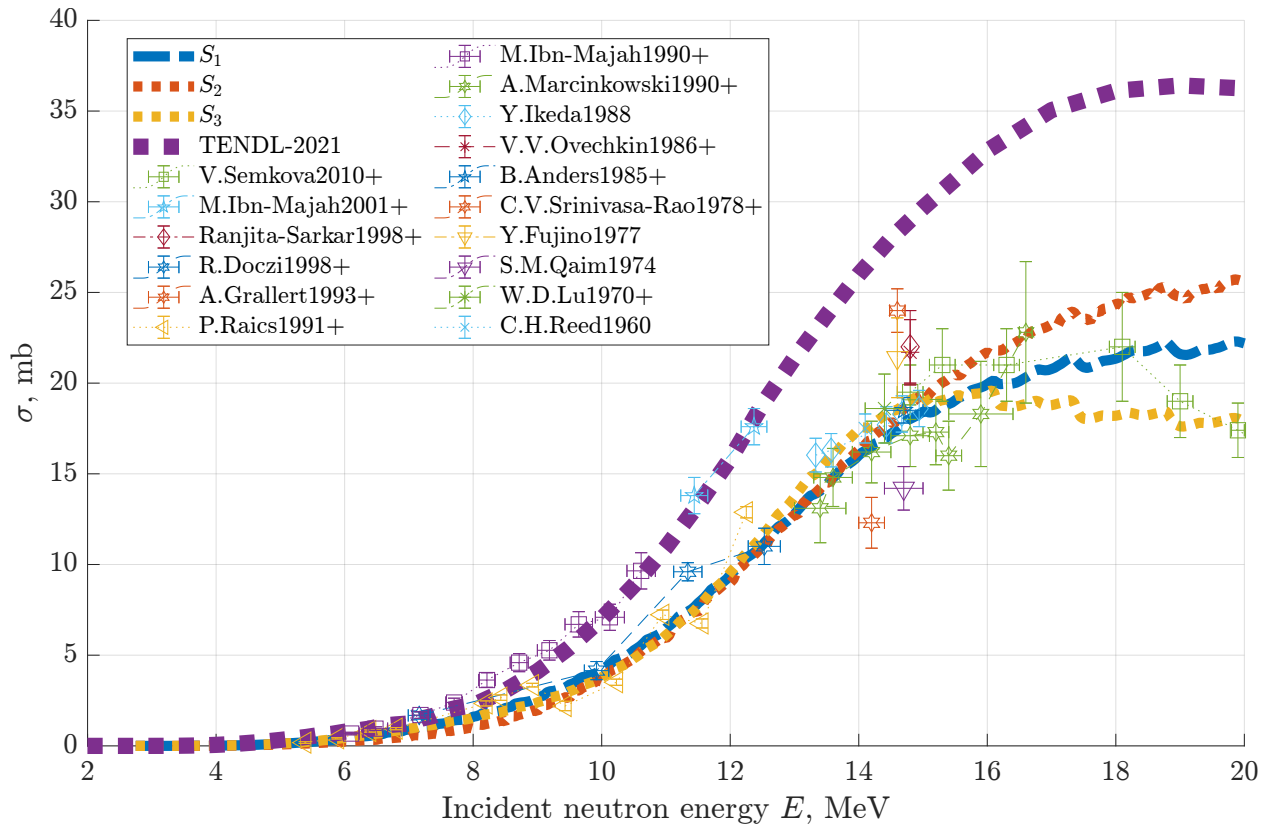


Рисунок 3.2 — Сечения выхода изомерного состояния ядра  $^{91m}\text{Y}$  в реакции  $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91m}\text{Y}$  в зависимости от выбранной модели плотности уровней.

На [рисунке 3.2](#) представлены сечения выхода изомерного состояния ядра  $^{91m}\text{Y}$  в зависимости от выбранной модели плотности уровней. Здесь также видно, что в области 13–15 МэВ значения сечений для всех трёх рассматриваемых моделей плотности уровней очень близки, что даёт в этом диапазоне энергий малый разброс «усреднённого» сечения.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В первой части данной работы было произведено ознакомление с программным комплексом HFVТНО, позволяющим исследовать ядерные свойства путём решения соответствующих уравнений Скирма-Хартри-Фока-Боголюбова. В частности, были рассмотрены одночастичные уровни ядра кислорода-16 в зависимости от деформации данного ядра. Была получена картина расщепления этих уровней при деформации ядра.

Во второй части данной работы на примере реакции  $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91\text{m}}\text{Y}$  было показано, что с разумной точностью как экспериментальные данные (из библиотеки EXFOR), так и оценки из TENDL-2021 по сечениям выхода воспроизводятся расчётами по TALYS-1.9. В качестве количественной оценки «разумной точности» величин сечений, полученных в результате расчётов по TALYS-1.9, может выступать доля экспериментальных данных, попавших в предложенный диапазон сечений. Для рассмотренной в данной работе реакции эта доля составляет 60 %. Таким образом, в ряде случаев, используя заложенные в программный комплекс TALYS-1.9 модели плотности уровней ядер, имеется возможность получать адекватные оценки сечений, то есть использовать TALYS-1.9 в качестве предсказательного инструмента. Этот вывод подтверждается более обширным исследованием сечений, указанных во введении, произведённым совместно с моим коллегой, Леонидом Трофимовым. По результатам данного исследования в журнал «Письма в ЭЧАЯ» была принята в печать наша статья.

Планируется дальнейшее освоение программы HFVТНО: исследование с её помощью барьеров деления различных ядер, то есть зависимостей полной энергии ядер от больших деформаций, а также расчёт плотности многочастичных состояний в сильнодеформированных ядрах.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Vautherin D., Brink D. M.* Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // *Physical Review C*. — 1972. — v. 5, iss. 3. — p. 626–647.
2. *Brink D. M., Boeker E.* Effective interactions for Hartree-Fock calculations // *Nuclear Physics A*. — 1967. — v. 91, iss. 1. — p. 1–26. — ISSN 0375-9474.
3. *Volkov A. B.* Equilibrium deformation calculations of the ground state energies of 1p shell nuclei // *Nuclear Physics*. — 1965. — v. 74, iss. 1. — p. 33–58. — ISSN 0029-5582.
4. *Nestor C. W., Davies K. T. R., Krieger S. J., Baranger M.* An effective nucleon-nucleon potential for use in nuclear Hartree-Fock calculations // *Nuclear Physics A*. — 1968. — v. 113, 1. — p. 14–26. — ISSN 0375-9474.
5. *Skyrme T. H. R.* The effective nuclear potential // *Nuclear Physics*. — 1958. — v. 9, iss. 4. — p. 615–634. — ISSN 0029-5582.
6. *Stoitsov M. V., Dobaczewski J., Nazarewicz W., Ring P.* Axially deformed solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. The program HFBTHO (v1.66p) // *Computer Physics Communications*. — 2005. — v. 167, iss. 1. — p. 43–63. — ISSN 0010-4655.
7. *Kortelainen M., McDonnell J., Nazarewicz W., Reinhard P.-G., Sarich J., Schunck N., Stoitsov M. V., Wild S. M.* Nuclear energy density optimization: Large deformations // *Phys. Rev. C*. — 2012. — v. 85, iss. 2, 024304.
8. *Trkov A., Griffin P., Simakov S., Greenwood L., Zolotarev K., Capote R., Aldama D., Chechev V., Destouches C., Kahler A. C. I., Konno C., Kostal M., Majerle M., Malambu E., Ohta M., Pronyaev V. G., Radulovic V., Sato S., Schulc M., Simeckova E., Vavtar I., Wagemans J., White M. C., Yashima H.* IRDFF-II: A New Neutron Metrology Library // *Nuclear Data Sheets*. — 2020. — v. 163. — p. 1–108.
9. *Titarenko Yu. E., Pavlov K. V., Titarenko A. Yu., Legostaev V. O., Zhigulina M. A., Khalikov R. S., Zhivun V. M., Kulevoy T. V., Kovalishin A. A., Dudnikov A. A., Blandinskiy V. Y., Davidenko V. D., Ioannisian M. V., I. B. V., Dyachkov I. I., Chernov K. G., Malkov M. R., Kuteev B. V., Kashchuk Y. A., Meshchaninov S. A., Obudovsky S. Y., Stankovskiy A. Y., Konobeyev A. Y.* Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets // *Fusion Science and Technology*. — 2022. — v. 78, iss. 7. — p. 549–572.



10. *Koning A. J., Rochman D.* Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System // Nuclear Data Sheets. — 2012. — v. 113, iss. 12. — p. 2841–2934.
11. *Ring P., Schuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — New York : Springer, 1980. — (Texts and Monographs in Physics). — ISBN 3540098208.
12. *Gilbert A., Cameron A. G. W.* A composite nuclear-level density formula with shell corrections // Can. J. Phys. — 1965. — v. 43. — p. 1446–1496.
13. *Dilg W., Schantl W., Vonach H., Uhl M.* Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range  $40 < A < 250$  // Nuclear Physics A. — 1973. — v. 217, iss. 2. — p. 269–298. — ISSN 0375-9474.
14. *Capote R., Herman M., Obložinský P., Young P., Goriely S., Belgya T., Ignatyuk A., Koning A., Hilaire S., Plujko V., Avrigeanu M., Bersillon O., Chadwick M., Fukahori T., Ge Z., Han Y., Kailas S., Kopecky J., Maslov V., Reffo G., Sin M., Soukhovitskii E., Talou P.* RIPL — Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nuclear Data Sheets. — 2009. — v. 110, iss. 12. — p. 3107–3214.
15. *Koning A. J., Rochman D., Sublet J.-Ch., Dzysiuk N., Fleming M., van der Marck S.* TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology // Nuclear Data Sheets. — 2019. — v. 155. — p. 1–55.