



ВНИИА
РОСАТОМ

Создание теоретической базы данных сечений редких ядерных процессов, рассчитанных в модели ядерных реакций кваркового уровня CHIPS

Косов Михаил Владимирович, Грачков Алексей Александрович

ФГУП «ВНИИА»

Актуальность теоретической базы данных сечений нейтрон-ядерных реакций



ВНИИА
РОСАТОМ

Сечения многих, особенно редких nA реакций не измерены, а потому не могут быть оценены в рамках той или иной эмпирической модели:

- сечения взаимодействия нейтронов с мишенями редких изотопов;
- сечения реакций с образованием тяжёлых ядерных фрагментов, обладающих наиболее разрушительной ионизирующей способностью;
- анизотропия дифференциальной множественности ядерных фрагментов.

Ионизационные потери различных изотопов в области малых энергий:

- моделирование распределения по скоростям радиоактивных ядерных фрагментов для моделирования доплеровского уширения γ -линий,
- учёт потенциальной щели в изоляторах для расчёта процесса ионизации,
- сечение ион-ионного упругого рассеяния с учётом электронной экранировки.

Теоретическая база данных для неизвестных времён жизни γ -переходов.

- эмпирические зависимости для $E1$, $M1$, $E2$ и $M2$ γ -переходов,
- алгоритм излучения γ -квантов при кварковом обмене между возбуждённым нуклонным кластером (Квазмоном) и холодными нуклонными кластерами, ₂
- расчёт возбуждённых состояний ядра и их γ -распадов на кварковом уровне.

Алгоритм моделирования ядерных реакций в модели КИФО (CHIPS)

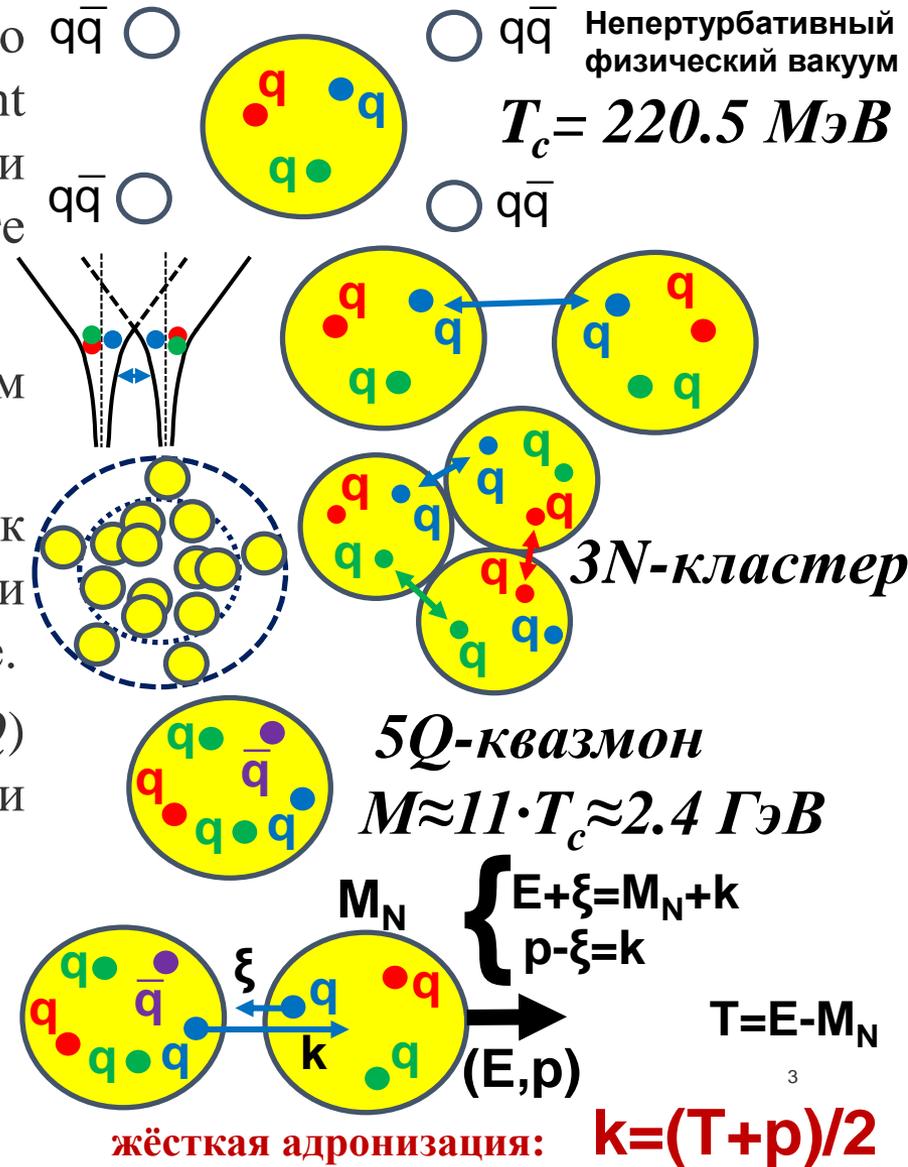
Модель Кирально-Инвариантного Фазового Объёма (КИФО, CHIPS – Chiral Invariant Phase Space) рассматривает нуклон как три безмассовых кварка в конфайнменте физического вакуум с температурой T_c .

Окружающий нуклон физический вакуум создаёт барьер для обмена кварками.

Обмен кварками одного цвета приводит к сдвигу нуклонов с массовой поверхности и образованию нуклонных *кластеров* в ядре.

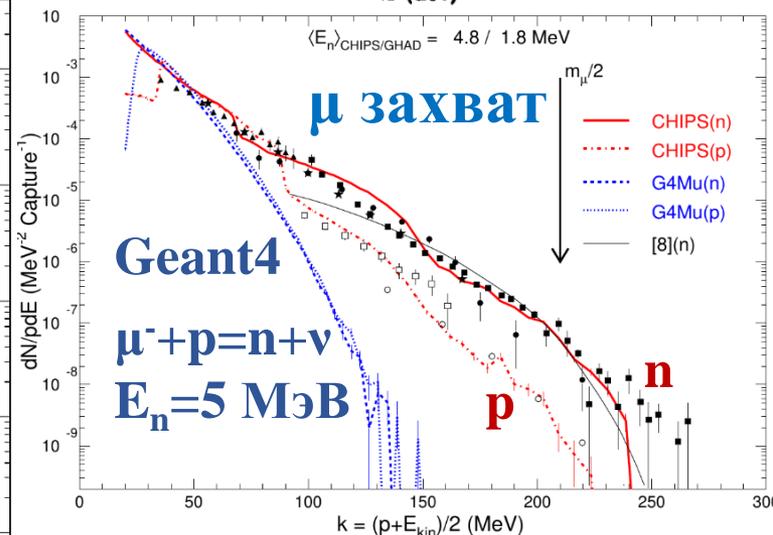
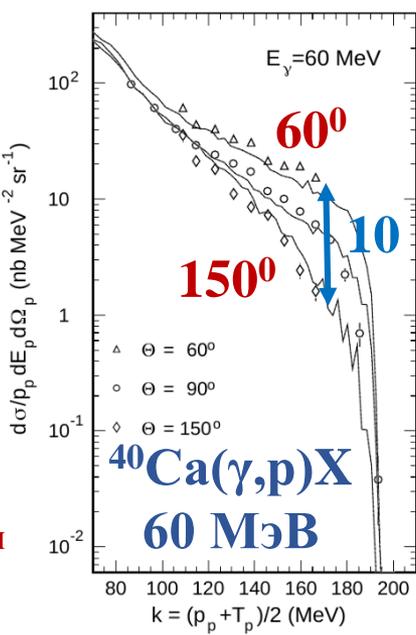
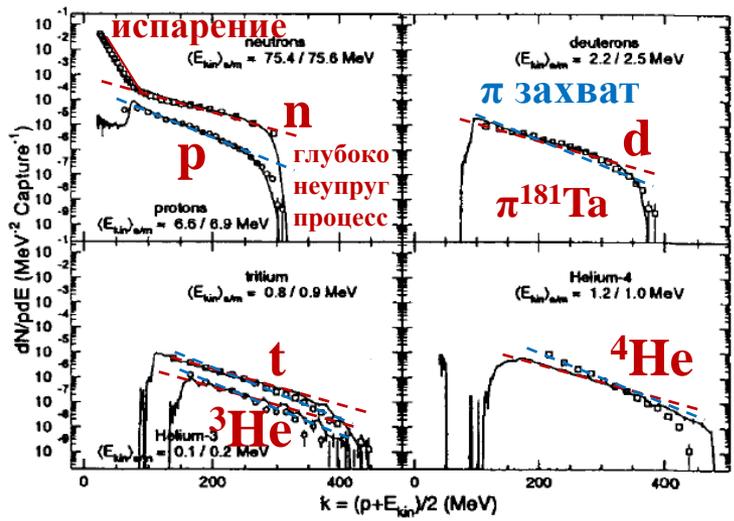
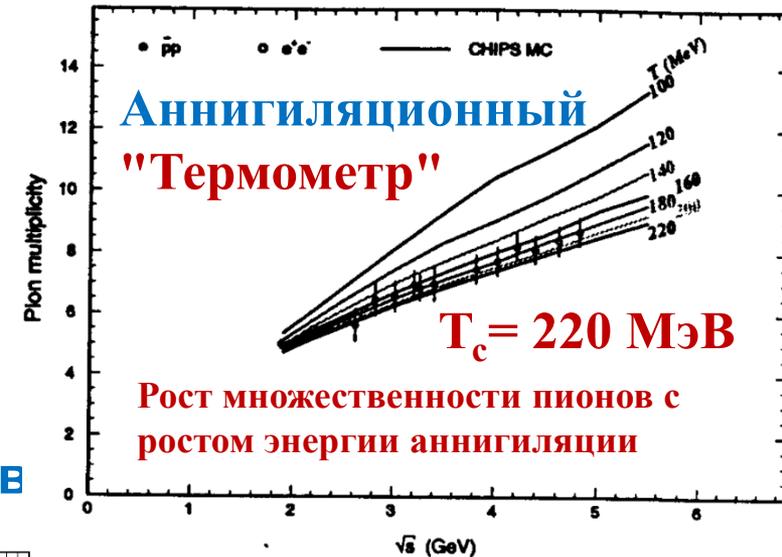
N-кластеры способны аккумулировать (Q) энергию, увеличивая число кварков n при температуре кипения T_c : $M_Q \approx (2n-1)T_c$.

Квазмон Q обменивается с окружающими *N*-кластерами кварками одного цвета и снижает свою энергию, выбивая ядерные фрагменты соответствующей энергии.



Наиболее яркие кварковые эффекты в ядерных реакциях

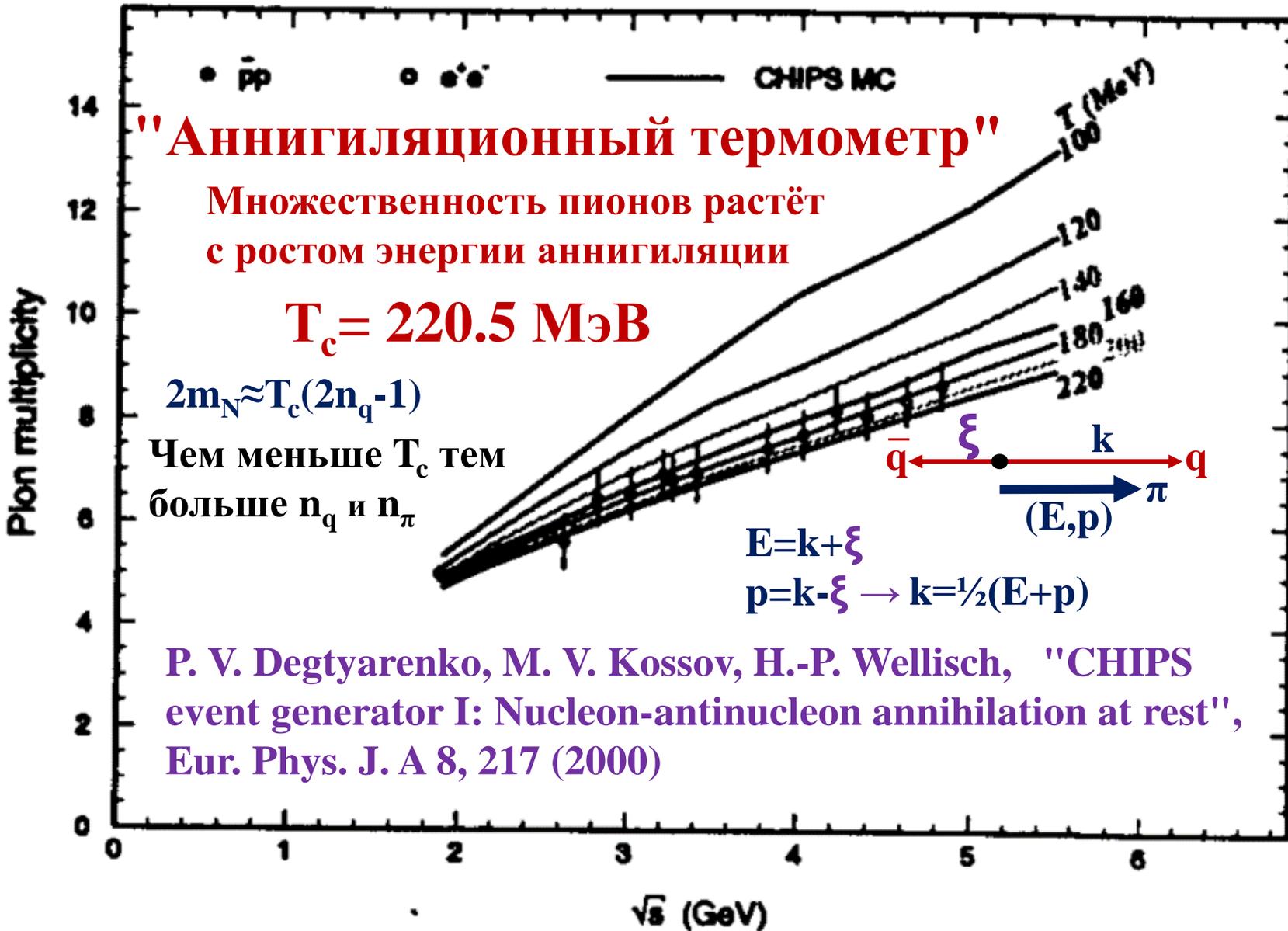
- Множественность пионов при протон-антипротонной и e^+e^- аннигиляции
- Спектр нейтронов при захвате π^- мезона
- Анизотропия протонных спектров в фото-ядерных реакциях при 60 МэВ
- Спектр нейтронов при захвате μ^- мезона
- Температура вакуума T_c и массы адронов



Глубоко неупругие (кварковые) процессы + нейтронное испарение. Моделируется выход тяжёлых ядерных фрагментов

В КИФО добавлены кварковые процессы $\mu^- + u \rightarrow d + \nu (m_\mu/2)$ и $\mu^- \rightarrow d + \text{anti-}u + \nu (m_\mu)$

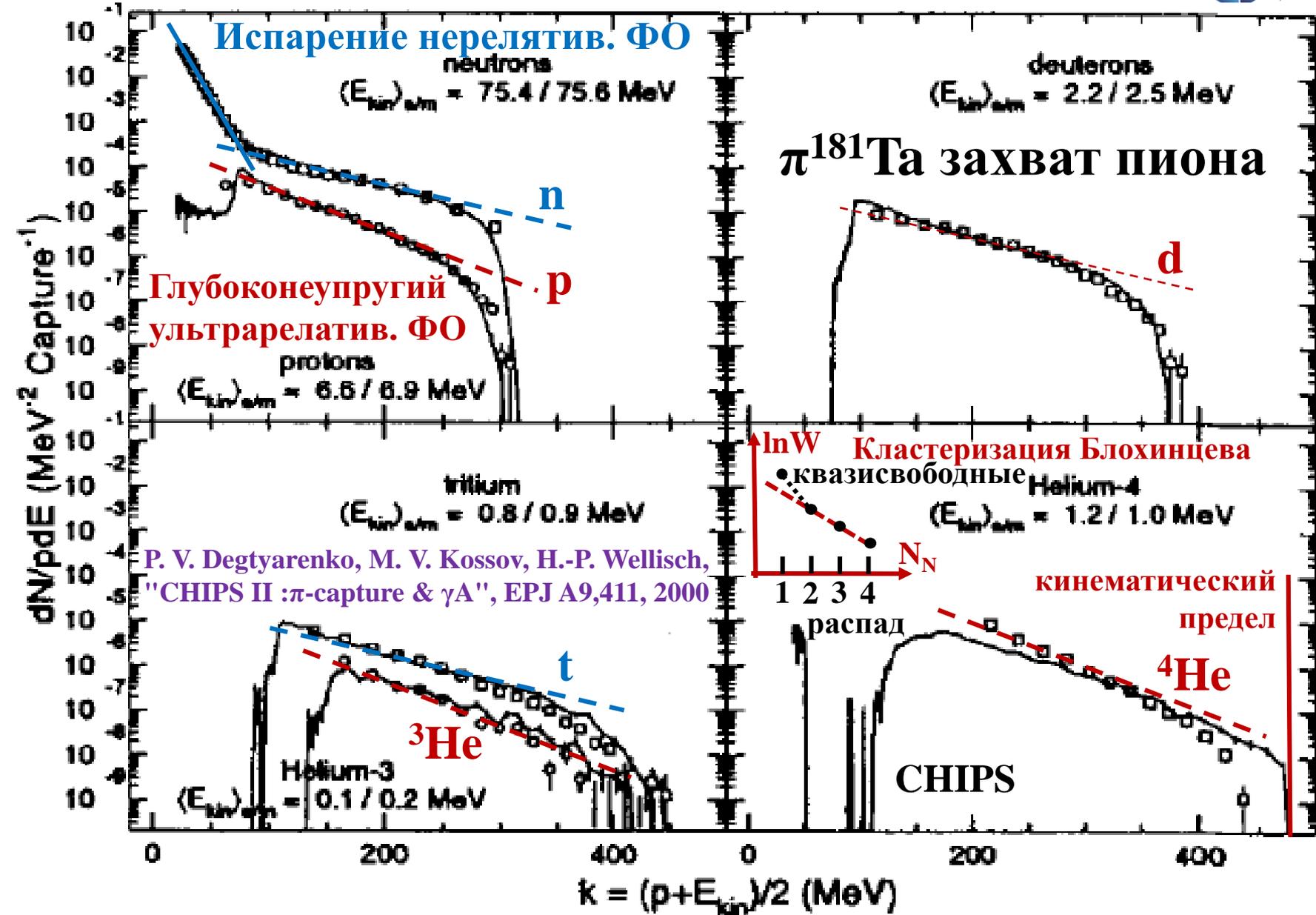
Температура вакуума при аннигиляции



Спектры фрагментов при захвате пионов



VNIIA
ROSATOM



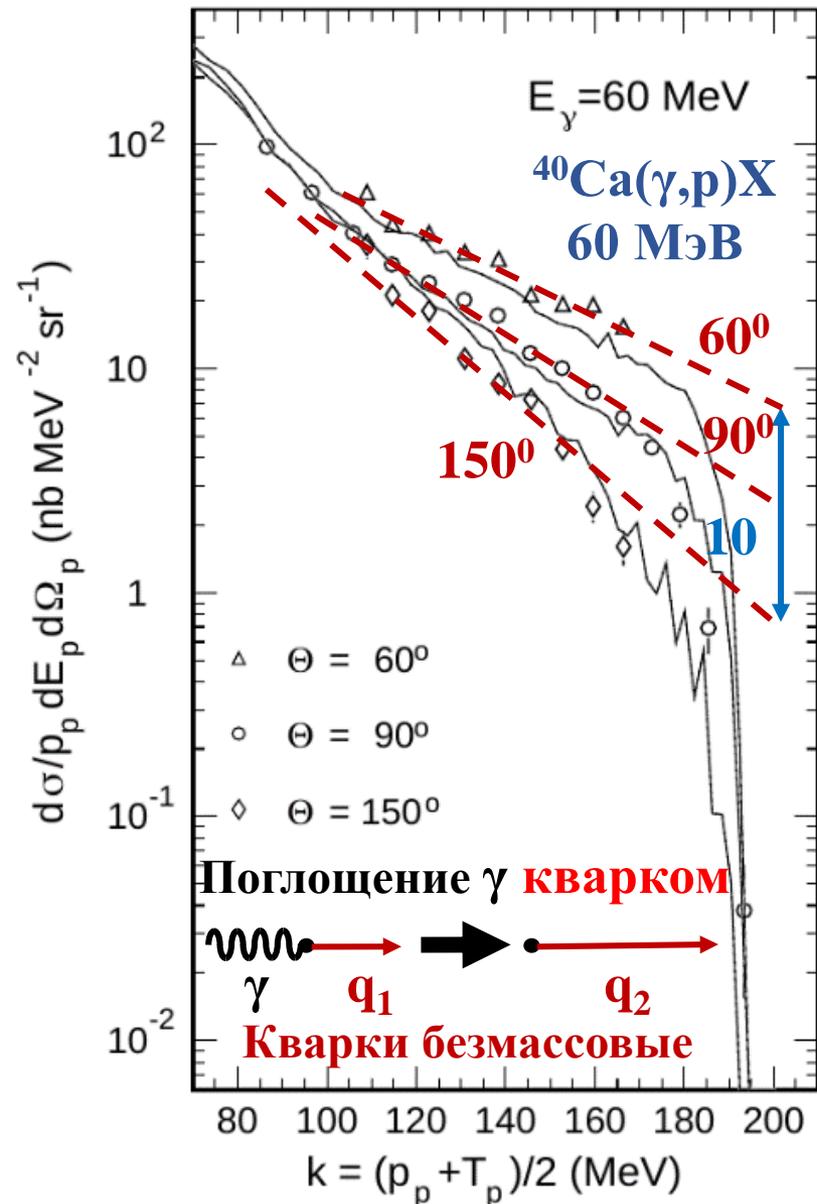
P. V. Degtyarenko, M. V. Kossov, H.-P. Wellisch,
"CHIPS II : π -capture & γA ", EPJ A9,411, 2000

Фотоядерные реакции ниже $\Delta(3,3)$

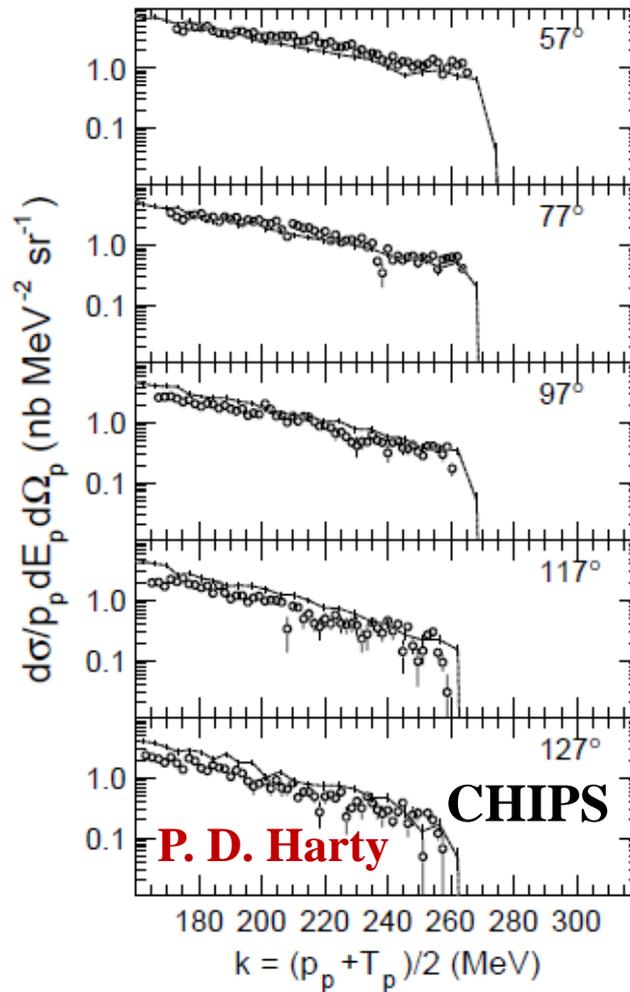


ВНИИА
РОСАТОМ

P. V. Degtyarenko, M. V. Kossov, H.-P. Wellisch,
"CHIPS event generator III: Photo-nuclear
reactions below Δ ", Eur. Phys. J. A 9, 421 (2000)



$^{12}\text{C}(\gamma, p)$ reaction at $E_\gamma = 123 \text{ MeV}$



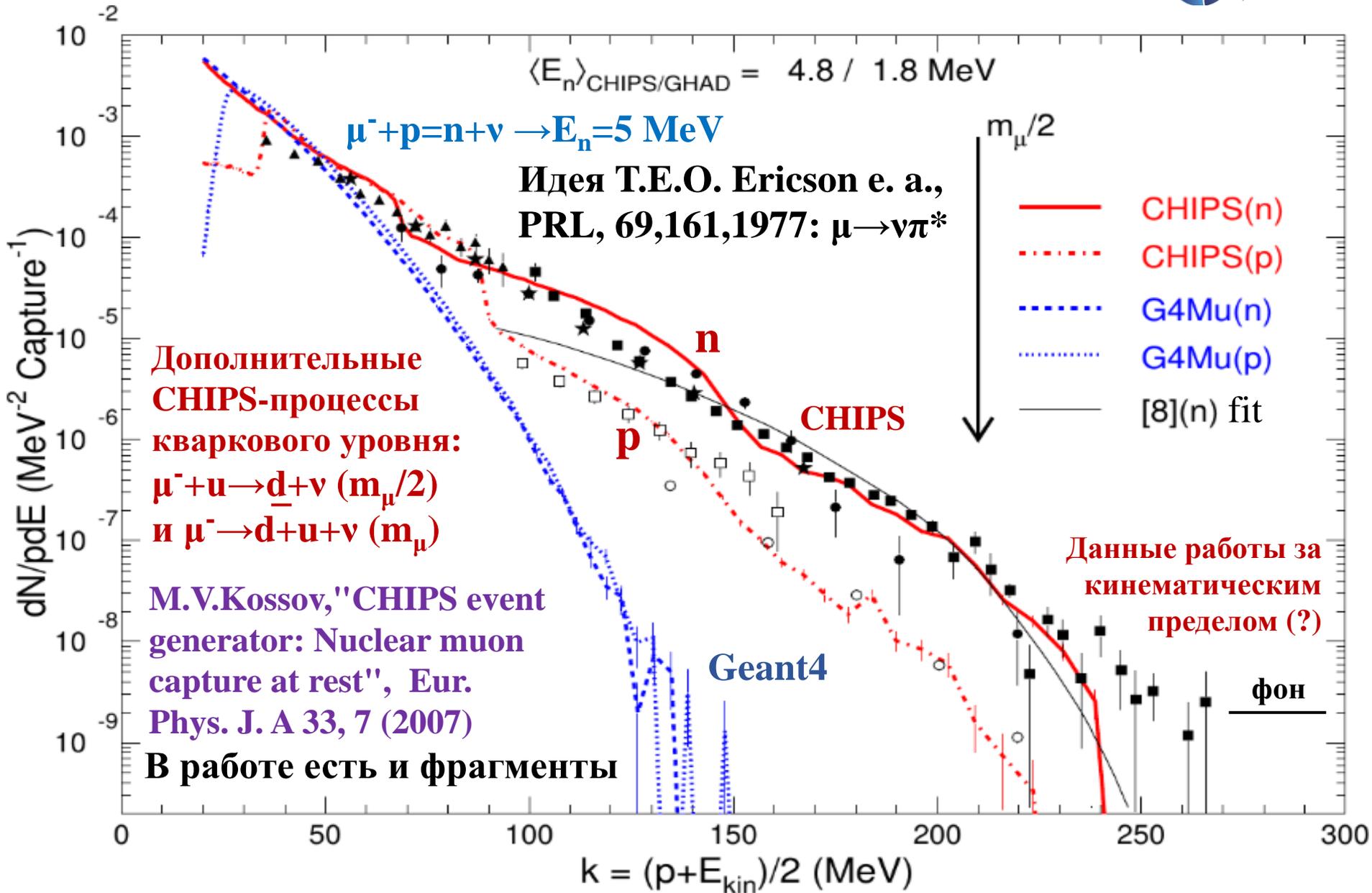
Неопубликованная
работа P.D.Harty
цитируется в PRC
49, 2704 (1994).

Никто не мог
поверить, что γ -
квант с энергией
100 МэВ может так
ускорить (буст
безмассовых
кварков) ядро
углерода. Даже
нуклон-квизмон
так не разогнать.
Только захват γ
кварком решает
проблему.

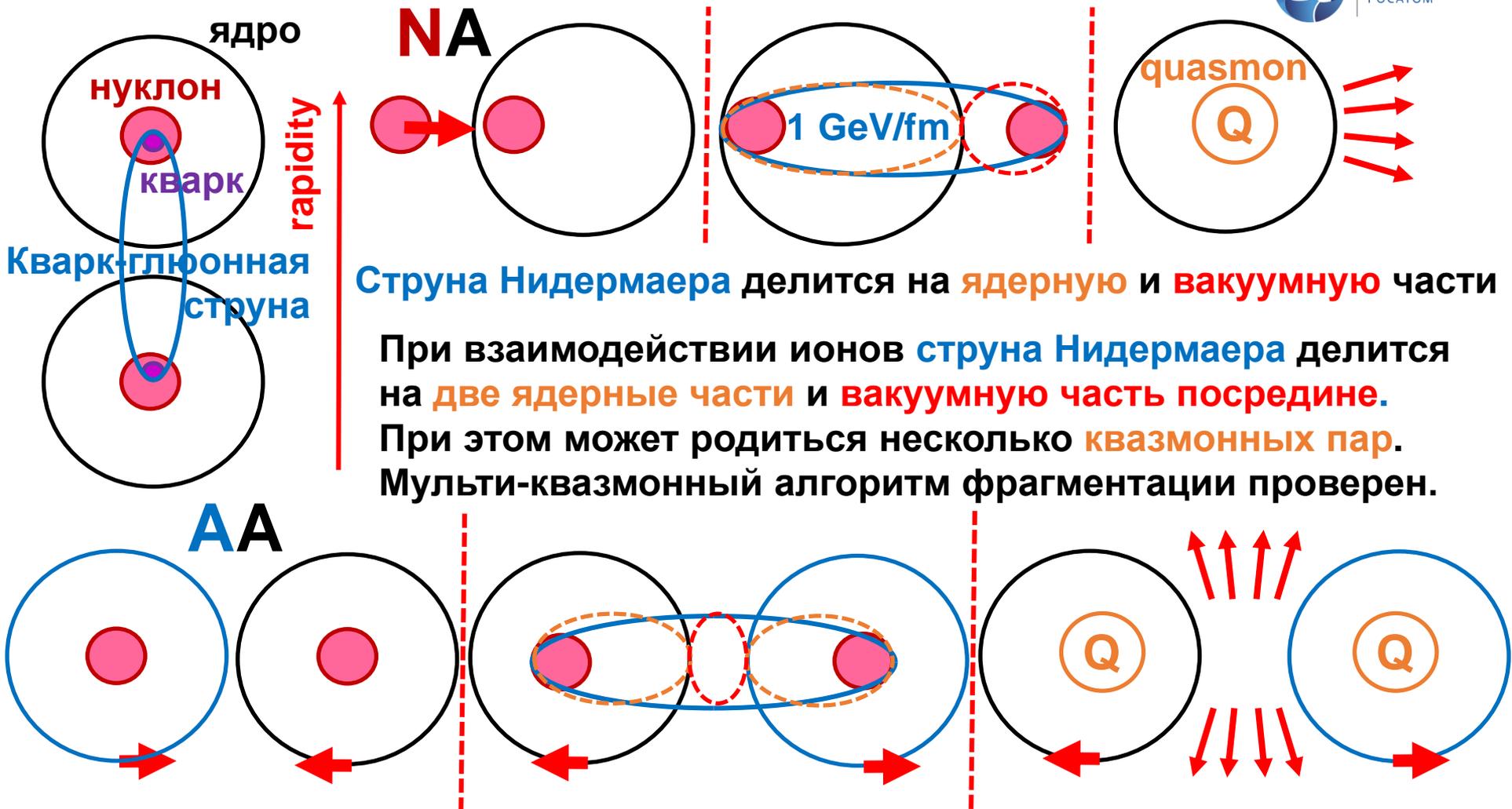
Спектры фрагментов при захвате мюонов



ВНИИА
РОСАТОМ



Моделирование ион-ионных реакций



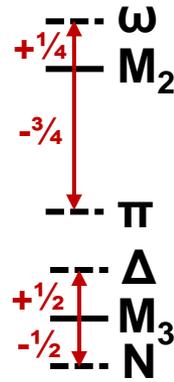
КИФА/CHIPS алгоритм – **распадный алгоритм**. Он работает быстрее **каскадных алгоритмов** других моделей (DPMJET, UrQMD, FRITIOF, VENUS).

Температура вакуума $T_c = 220.5 \text{ MeV}$ для расчёта масс $1s$ адронов



ВНИИА
РОСАТОМ

- Зависимость массы n партонов от T_c : $M = 2T_c \sqrt{n(n-1)}$
- Для q -спинов мезонов $\langle s_1, s_2 \rangle = \frac{1}{2}S(S+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = +\frac{1}{4} \quad -\frac{3}{4}$
- Мезоны: $M_2 = 2T_c \sqrt{2} = 624 \text{ MeV}$, $(3m_\omega + m_\pi)/4 = 621 \text{ MeV}$
- Для спинов барионов $2\langle s_1, s_2 \rangle = \frac{1}{3}S(S+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = +\frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2}$
- Барионы: $M_3 = 2T_c \sqrt{6} = 1080 \text{ MeV}$, $(m_N + m_\Delta)/2 = 1074 \text{ MeV}$
- Расчёт масс $1s$ -адронов из лёгких кварков: [M.V.Kossov, EPJ, A14, 265 \(2002\)](#)
- Массы всех 92 $1s$ -адронов – **послана в журнал**
- Массы глюболов (f -мезонов) без **цветомагнитных сдвигов** близки к M_2 , M_3 , $M_4 = 1528 \text{ MeV}$, $M_5 = 1972 \text{ MeV}$
- T_c может быть третьей мировой константой: $\Delta E = T_c \Delta I$ ($I = -S$)



Алгоритм расчёта сечений нейтрон-ядерных реакций с образованием ядерных фрагментов



Для нормировки дифференциальной множественности использовалась σ_{in} :

- Генератор событий CHIPS определяет продукты ядерной реакции, которые в эксклюзивных каналах могут быть отсортированы и собраны по типам ядерных фрагментов в многомерные 3N-гистограммы, где N – число фрагментов $[p_x, p_y, p_z]$;
- Ниже порогов отделения фрагментов могут рождаться только γ -возбуждённые остаточные ядра, для которых выбирается ближайший уровень γ -возбуждения и распад последнего фрагмента пересчитывается для выбранной массы ядра A^* ;
- При формировании инклюзивных спектров все тождественные частицы собираются в один спектр и вычисляются дифференциальные множественности $\rho(p)=dn/E/dp$, определяющие инклюзивные спектры $f(p)=\sigma_{in} \cdot \rho(p)$.

Распад γ -возбуждённого ядра моделируется каскадными таблицами RIPL

- Выбор "ближайшего" уровня к полученному моделированием возбуждению может проводиться с учётом ширины и силы соответствующего уровня;
- В TRT разрабатываются независимые модели E1, M1, E2 и M2 γ -переходов для оценки неизвестных вероятностей каскадных γ -переходов и их времён жизни.

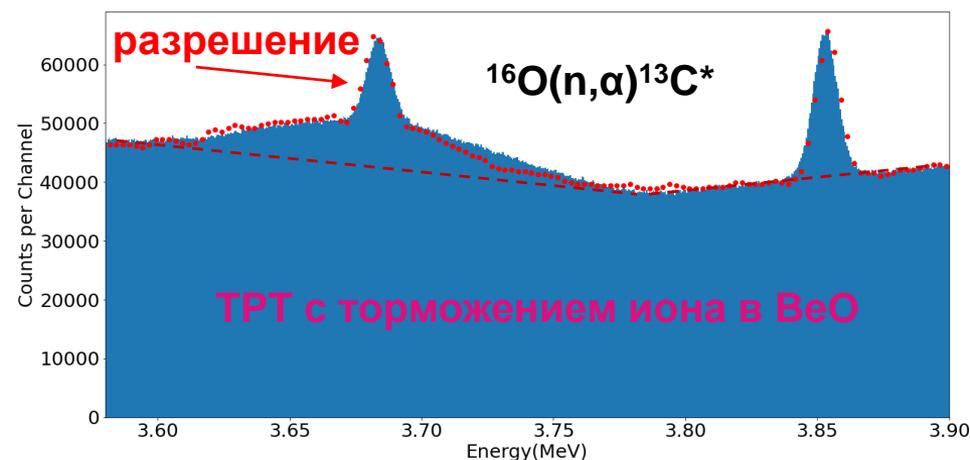
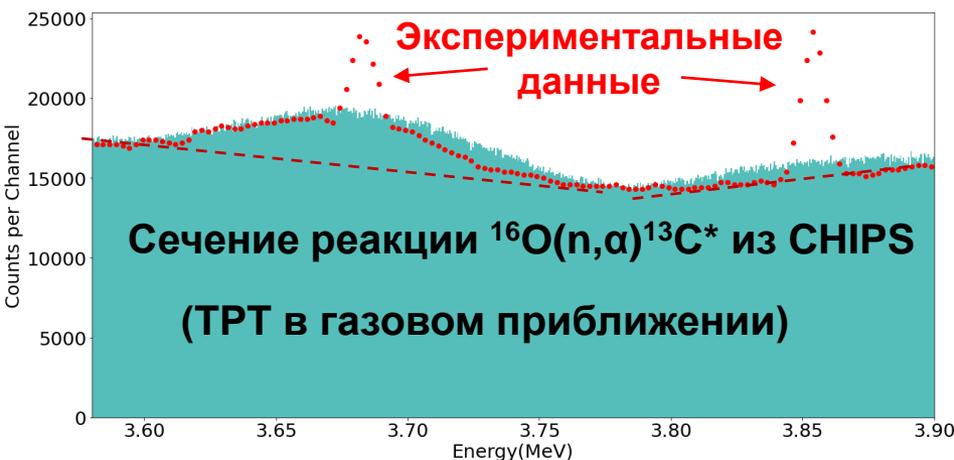
Разрабатываются модели электронных потерь для эффекта Доплера

- При расчёте эффекта Доплера фиксируется время жизни возбуждённого уровня, и электронные потери определяют по форме доплеровского уширения.

Моделирование доплеровского уширения γ -линий $^{16}\text{O}(n,\alpha)$ реакции

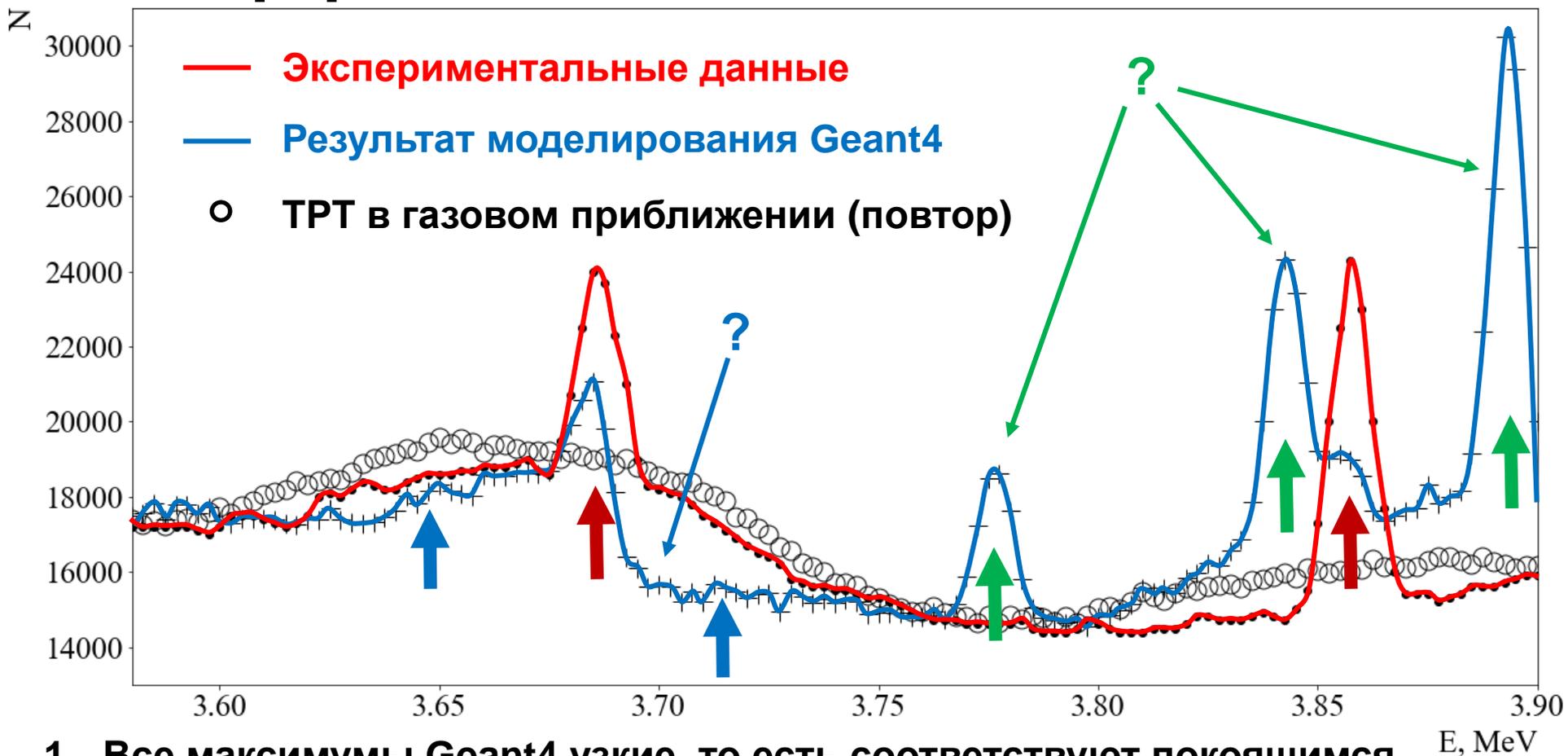
На шаге моделирования ион тормозится. При этом используются очень маленькие шаги, замедляющие вычисления. Первый ТРТ алгоритм работал в газовом приближении (без замедления), но теперь решена проблема моделирования замедления на больших шагах:

1. Учёт снижения сечения реакции синтеза из-за замедления иона в мишени нейтронного генератора (2022)
2. Учёт молекулярных и атомных связей при рассеянии тепловых нейтронов в воде (каротаж скважин, 2023)
3. Учёт торможения ядра при каскадном излучении гамма-квантов – 2024



Адекватное данным сечение реакции $^{16}\text{O}(n,\alpha)^{13}\text{C}^*$ отсутствовало как в Geant4, так и в базах данных. Оно было сгенерировано моделью ядерных реакций кваркового уровня КИФО (CHIPS). Ширина доплеровской линии зависит от времени жизни γ -уровня и от функции электронных потерь dE/dx среды, в которой происходит перенос возбуждённого остаточного ядра. На приведенном спектре видно, что уровень 3.686 МэВ имеет две ширины: одну широкую при прямом возбуждении, а вторую узкую в результате распада долгоживущего уровня 3.853 МэВ на мягкий γ -квант с энергией 167 кэВ.

Для сравнения приводится Geant4 спектр γ -линий в том же диапазоне



1. Все максимумы Geant4 узкие, то есть соответствуют покоящимся остаточным ядрам без эффекта Доплера. Слева от 3.686 МэВ – **плотный набор уровней**, а не эффект Доплера, поскольку **справа усиления нет**.
2. Geant4 производит **множество максимумов**, отсутствующих в эксперименте, но превосходящих по силе **реальные максимумы**.

Заключение

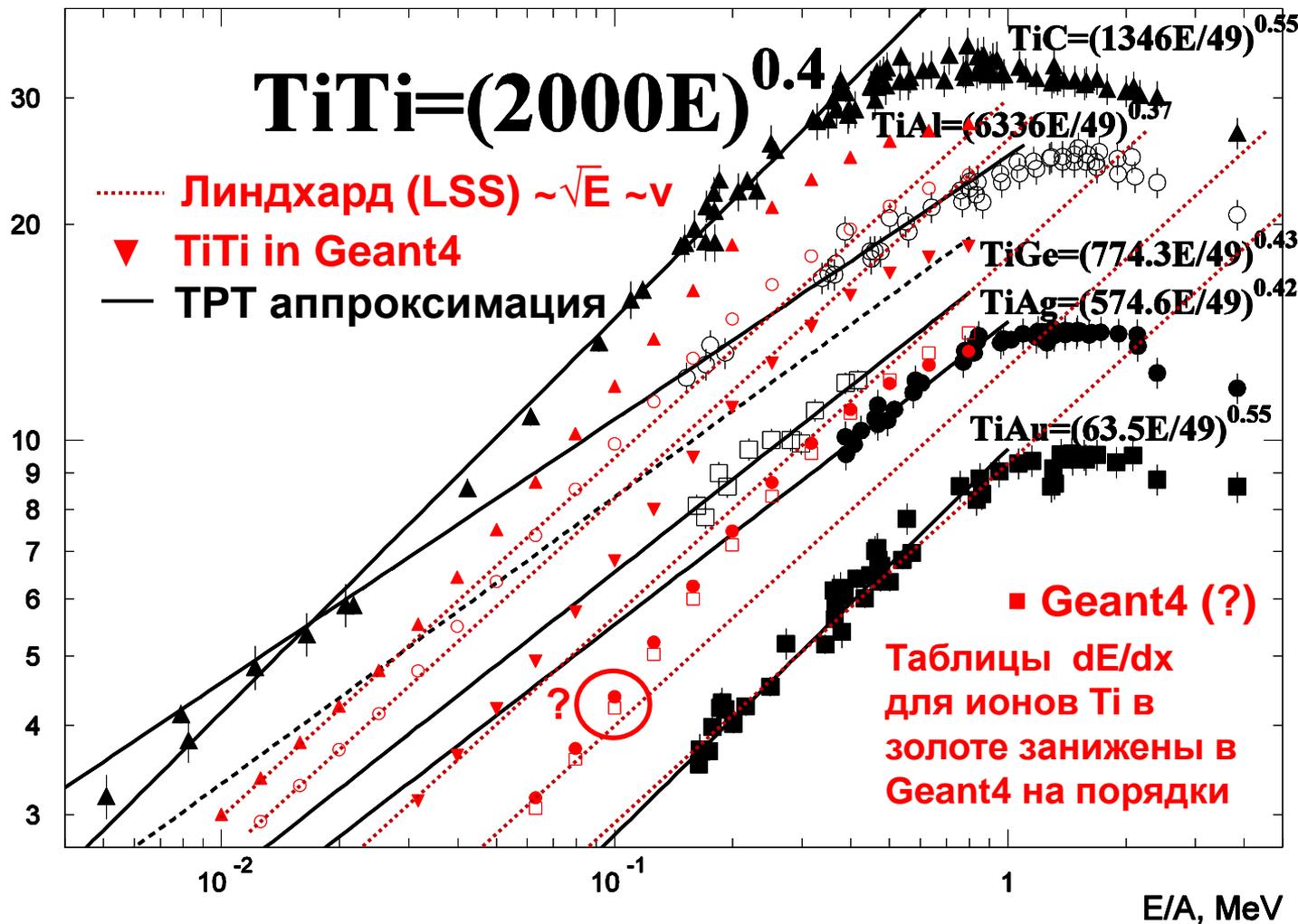
1. Теоретическая база данных КИФО (CHIPS) может восполнить пробел нейтрон-ядерных реакций с **рождением тяжёлых ядерных фрагментов.**
2. Образование ядерных фрагментов, особенно образование α -частиц (гелиевые поры), очень важно для моделирования **радиационной стойкости материалов ядерных установок.**
3. Энергичные ионы элементов, из которых составлен материал, рождаются в **упругих и неупругих нейтрон-ядерных рассеяниях.**
4. В случае выбивания ионов из решётки, и в случае рождения ядерных фрагментов надо повышать точность моделирования потерь энергии в ионных каскадах, особенно **для ионов низких энергий.**
5. Необходимо аппроксимировать все уже имеющиеся и собранные МАГАТЕ экспериментальные данные для dE/dx ионов и разработать методику измерения dE/dx **при самых низких энергиях.**
6. Модель КИФА (CHIPS) проверена в области больших энергий (ЦЕРН), при которых кинематические ограничения не важны; **при относительно низких энергиях необходимо провести дополнительную проверку,** которая может привести к уточнению модели при низких энергиях.
7. Планируется распространить модель КИФА (CHIPS) не только на нейтроны, но и на γ -кванты, и на другие **ядерные фрагменты.**

**Спасибо
за внимание**



Перспективы усовершенствования функций dE/dx от Geant4 к TPT

dE/dx MeVcm²/mg



Чёрными точками показаны данные, МАГАТЭ для dE/dx ионов титана в различных средах. Данных для ионов титана в титане нет (оценка показана штриховой кривой). Красные точки с той же формой маркеров (Geant4) пропорциональны скорости (закон Линдхарда). Для ионов малых энергий они очень далеки от данных эксперимента. Нужно варьировать степень скорости.

В этой работе для оценки доплеровского уширения использовалась **аппроксимация потерь из Geant4**, поскольку в результате α -распада ядро углерода приобретает большую скорость, а моделировать dE/dx пропорциональную скорости легче.

Расчёт шага моделирования до распада и скорости при распаде

Если $dE/dx=C \cdot v$, то $m \cdot dv=C \cdot dx$. Если x – расстояние до точки остановки ($x=0$ и $v=0$): $m \cdot v=C \cdot x$. Вычислив время распада t_d , нужно определить расстояние x_d , в которое остаточное ядро перейдёт за время жизни t_d . Подставив $v=dx/dt$, получим $m \cdot d \ln x=C \cdot dt$, то есть время до полной остановки ($x=0$, $v=0$) бесконечно. Если радиоактивный ион родился в точке $x=m \cdot v/C$, то распадётся он через время t_d в точке x_d , так что получаем $m \cdot \ln(x/x_d)=C \cdot t_d \rightarrow x_d=x \cdot \exp(-C \cdot t_d/m)$, и шаг $L=x \cdot [1 - \exp(-C \cdot t_d/m)]$. Поскольку $x_d=m \cdot v_d/C$, где v_d – скорость в точке распада, получаем $m \cdot \ln(v/v_d)=C \cdot t_d$, откуда $v_d=v \cdot \exp(-C \cdot t_d/m)$.

В случае, если электронные потери пропорциональны другой степени скорости, можно записать $dE/dx=C \cdot v^\alpha$, где закон Линдхарда (LSS модель) соответствует $\alpha=1$. В этом случае, делая замену $dx=v \cdot dt$, получим $m \cdot dv=C \cdot v^\alpha \cdot dt$ или $m \cdot dv^{1-\alpha}=(1-\alpha)C \cdot dt$, то есть $m \cdot v^{1-\alpha}=(1-\alpha)C \cdot (t-t_0)$. Если $\alpha < 1$, то время остановки до $x=0$, $v=0$ ($t_0=0$) фиксировано $t=m \cdot v^{1-\alpha}/(1-\alpha)/C$. Если $t_d > t$, то ядро успевает остановиться и распадается в покое, а если меньше, то остаётся со скоростью $v_d=[(t-t_d)(1-\alpha)C/m]^{1/(1-\alpha)}$, что можно записать и без t : $v_d=[v^{1-\alpha} - t_d(1-\alpha)C/m]^{1/(1-\alpha)}$. Если же $\alpha > 1$, то, как и в случае $\alpha=1$ (LSS), время остановки до нулевой скорости бесконечно, и для любых времён t_d будет справедлива та же формула, но записанная в виде $v_d=[v^{1-\alpha} + t_d(\alpha-1)C/m]^{1/(1-\alpha)}$. Чтобы получить длину шага $L=x-x_d$, надо проинтегрировать скорость иона по времени $L=\int v(t)dt$ от 0 до t_d : $L=\{[v^{1-\alpha} + t_d(\alpha-1)C/m]^{(2-\alpha)/(1-\alpha)} - v^{2-\alpha}\} \cdot m/C/(\alpha-2)$. Эта формула справедлива для любого α , но в случае $\alpha < 1$, при $t_d > t$ шаг ограничен точкой остановки $L=v^{2-\alpha} \cdot m/C/(2-\alpha)$. С этого момента радиоактивное ядро покоится и распадается без эффекта Доплера. Видно, что при $\alpha \neq 1$ вычисления несколько усложняются, но вычисление шага до распада и скорости при распаде остаются легко рассчитываемыми в один шаг моделирования.

TRT аппроксимация измеренных значений dE/dx (МАГАТЕ) в золоте

