



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ
ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

**ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ (n,2n)
ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ ΤΩΝ ΙΣΟΤΟΠΩΝ ^{191,193}Ir ΜΕ
ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΤΟΥ ΚΩΔΙΚΑ EMPIRE 3.2.2
MALTA**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Κωστή Κομποθανάση

Επιβλέπων: Μιχάλης Κόκκορης

Αθήνα, Ιούνιος, 2018

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους συναδέλφους και συναδέλφισσες στην ομάδα Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ της ΣΕΜΦΕ, ιδιαίτερα τους καθηγητές μου κ. Μιχάλη Κόκκορη, κα. Ρόζα Βλαστού καθώς και τους υποψήφιους διδάκτορες Θάνο Σταματόπουλο και Αντιγόνη Καλαμαρά, για την πολύτιμη βοήθειά τους στην εκπόνηση αυτής της εργασίας. Ευχαριστώ την οικογένειά μου και τους Σ. Σύρο, Γ. Ζάγκα και Γ. Μπόσκο για τη στήριξή τους.

Περίληψη

Σκοπός της εργασίας αυτής ήταν η θεωρητική μελέτη της ενεργού διατομής των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$.

Οι θεωρητικοί υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν με χρήση του προγράμματος EMPIRE 3.2.2 Malta, για όλο το ενεργειακό εύρος νετρονίων στο οποίο το κανάλι (n,2n) είναι ανοιχτό, από 8 έως 25 MeV, ενώ στα πλαίσια του Στατιστικού Προτύπου Hauser-Feshbach, λήφθηκαν υπόψη οι μηχανισμοί Άμεσης Αντίδρασης, της Πρώιμης Αποδιέγερσης Σύνθετου Πυρήνα και του μηχανισμού Σύνθετου Πυρήνα με χρήση του προτύπου Οπτικού Δυναμικού του Varner (αριθμός καταλόγου RIPL-2100) για το ^{191}Ir και το ^{193}Ir . Στην περιγραφή της πυκνότητας καταστάσεων στο συνεχές των πυρήνων χρησιμοποιήθηκε το πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM).

Οι υπολογισμοί αυτοί συνοδεύουν τις πειραματικές μετρήσεις της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ, για την ενεργό διατομή των συγκεκριμένων αντιδράσεων, που πραγματοποιήθηκαν με τη μέθοδο της ενεργοποίησης σε σχέση με αυτήν της αντίδρασης $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$, για ενέργειες δέσμης νετρονίων 17.1 και 20.9 MeV. Οι μονοενεργειακές δέσμες νετρονίων παράχθηκαν στον επιταχυντή Tandem T11/25 των 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», μέσω της αντίδρασης $^3\text{H}(d,n)^4\text{He}$, χρησιμοποιώντας στόχο τριτίου, ενώ υπήρχε δυνατότητα ελέγχου της νετρονικής ροής μέσω του ανιχνευτή BF₃.

Abstract

The purpose of this study was the theoretical calculation of the cross section of the reactions $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ and $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$.

The theoretical calculations were performed with the code EMPIRE 3.2.2, in the energy range between 8 and 25 MeV, in the framework of the Hauser-Feshbach theory, taking into account the direct reaction mechanism, the pre-equilibrium mechanisms of a compound nucleus and the compound reaction mechanism. The optical model potential of Varner (RIPL catalogue number 2100) was used in both Iridium isotopes, $^{191,193}\text{Ir}$, and the level densities of the involved nuclei were treated with the Generalized Superfluid Model (GSM).

These theoretical calculation results follow the experimental measurements of the cross sections of the above reactions, by the NTUA Nuclear Physics group, at 17.1 and 20.9 MeV neutron energies at the 5.5MV rtandem T11/25 Accelerator Laboratory of NCSR “Demokritos”, using the activation method. The neutron beams were produced by means of the $^3\text{H}(d,n)^4\text{He}$ reaction. The neutron flux has been deduced implementing the $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$ reference reaction, while the flux variation of the neutron beam was monitored by using a BF3 detector.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή.....	11
1.1	Πυρηνική Ενέργεια	11
1.2	Πυρηνικές Αντιδράσεις.....	14
1.2.1	Άμεσες Αντιδράσεις	16
1.2.2	Αντιδράσεις Σύνθετου Πυρήνα	16
1.2.3	Προϊσορροπία (Pre-equilibrium)–Πρώιμη Αποδιέγερση.....	17
1.2.4	Αντιδράσεις και Ενέργεια	17
1.3	Ενεργός διατομή	17
1.4	Αντιδράσεις (n,2n) και Ιρίδιο.....	19
1.5	Οι αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$	21
2	Θεωρητικά Πρότυπα που χρησιμοποιήθηκαν.....	26
2.1	Οπτικό Πρότυπο Πυρηνικού Δυναμικού (Optical Model Potential)	27
2.1.1	Οπτικό Δυναμικό και η Λειτουργική Μορφή του	27
2.1.2	Συζευγμένα κανάλια (coupled channels) και Άμεσες Αντιδράσεις.....	29
2.2	Πυκνότητες Καταστάσεων Πυρήνα.....	31
2.2.1	Πρότυπο Αερίου Φέρμι (Fermi Gas Model-FGM).....	32
2.2.2	Πρότυπο Σταθερής Θερμοκρασίας (Constant temperature model-CTM)	33
2.2.3	Πρότυπο Gilbert-Cameron.....	33
2.2.4	Backshifted Πρότυπο Αερίου Φέρμι (Backshifted Fermi gas model).....	34
2.2.5	Γενικευμένο Πρότυπο Υπερρευστού (Generalized superfluid model).....	34
2.2.6	Συλλογικά αποτελέσματα στην Πυκνότητας Καταστάσεων (collective effects in the level density).....	35
2.2.7	Μικροσκοπικές Πυκνότητες Καταστάσεων Πυρήνα	37
2.3	Συναρτήσεις Ισχύος Ακτινοβολίας-γ (Gamma ray Strength Functions).....	38
2.3.1	Πρότυπα για Συναρτήσεις Ισχύος Ακτινοβολίας-γ	38
2.3.2	Επανακανονικοποίηση των Συναρτήσεων Ισχύος Ακτινοβολίας-γ (renormalization of gamma-ray strength functions)	40
2.3.3	Ενεργός Διατομή Απορρόφησης φωτονίων (Photoabsorption cross section)	41

2.4	Αντιδράσεις Σύνθετου Πυρήνα (Compound Nucleus Reactions)	42
2.5	Πρότυπα Πρώιμης Αποδιέγερσης (Pre-equilibrium Model).....	45
2.5.1	Πρότυπο εξιτονίων δύο συστατικών (Two component exciton model).....	46
2.5.2	Φωτονικό Πρότυπο Εξιτονίων (Photon exciton model).....	48
3	Κώδικας EMPIRE 3.2.2 Malta.....	50
3.1	Βασικά χαρακτηριστικά του κώδικα EMPIRE 3.2.2 Malta.....	50
3.2	Αρχείο Εισόδου στον κώδικα EMPIRE.....	54
3.3	Συμβατότητα MSC, MSD και PCROSS στον κώδικα EMPIRE 3.2.2	62
3.4	Ανάλυση αρχείου προτύπου Οπτικού δυναμικού	63
4	Θεωρητικοί Υπολογισμοί αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$, μελέτη προτύπων Οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων.....	66
4.1	Πρότυπο Οπτικού Δυναμικού και Πυκνότητα καταστάσεων	66
4.1.1	Μελέτη κατάλληλου συνδυασμού προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον θεωρητικό υπολογισμό ενεργού διατομής της $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$	68
4.1.2	Μελέτη κατάλληλου συνδυασμού προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον θεωρητικό υπολογισμό ενεργού διατομής της $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$	82
4.2	Τελικά αποτελέσματα θεωρητικών υπολογισμών	91
4.2.1	Ισότοπο ^{191}Ir	91
4.2.2	Ισότοπο ^{193}Ir	94
4.3	Δοκιμή Οπτικού Δυναμικού των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee	95
4.4	Συμπεράσματα και Προοπτικές	101
5	Βιβλιογραφία.....	103

1

Εισαγωγή

1.1 Πυρηνική Ενέργεια

Η ανακάλυψη και η εκμετάλλευση νέων πηγών ενέργειας ήταν πάντοτε βασικό θέμα για την επιβίωση και την πρόοδο του ανθρώπινου γένους. Από την καύση βιομάζας, στα πρώτα βήματα, στην αξιοποίηση της αιολικής ενέργειας και την εκμετάλλευση της δύναμης των ποταμών, φτάσαμε πολύ αργότερα στην καθολική εκμετάλλευση της χημικής ενέργειας της καύσης του πετρελαίου, του φυσικού αερίου και διαφόρων υδρογονανθράκων. Η πυρηνική ενέργεια, που εμφανίστηκε στα μέσα του 20^{ου} αιώνα, είναι το νεότερο είδος ενέργειας που χρησιμοποιήθηκε σε μεγάλη κλίμακα. Βεβαίως δεν υπήρξε πάντοτε πρόοδος με τη εκμετάλλευση του εκάστοτε είδους ενέργειας. Πολλές δραστηριότητες του ανθρώπου λειτούργησαν εις βάρος άλλων ανθρώπων, άλλων έμβιων οργανισμών και κυρίως εις βάρος του περιβάλλοντος

Ο εξηλεκτρισμός της κοινωνίας ταυτίστηκε με τον εκσυγχρονισμό. Ο ηλεκτρισμός είναι το βασικό γρανάζι σε όλη τη σφαίρα της τεχνολογίας, από τις βασικές ανάγκες στην κατοικία μας, τις μεταφορές, την επικοινωνία και την ψυχαγωγία μας, μέχρι τη βιομηχανία και την ιατρική. Η εξέλιξη της τεχνολογίας καλωσορίστηκε από τη μεγάλη πλειοψηφία των ανθρώπων, στις αναπτυγμένες χώρες, ενώ οι αυξανόμενες ενεργειακές απαιτήσεις στη σύγχρονη κοινωνία οδήγησε στην ανάγκη ανακάλυψης εναλλακτικών πηγών ενέργειας, πέρα από τα ορυκτά καύσιμα που εξακολουθούν να έχουν τον κυρίαρχο ρόλο των καυσίμων τους

τελευταίους αιώνες μέχρι σήμερα. Η αύξηση του παγκόσμιου πληθυσμού, ο προβληματισμός για την αντικατάσταση των μη ανανεώσιμων πηγών ενέργειας και η ρύπανση του περιβάλλοντος από την καύση τους (εκπομπές CO₂, φαινόμενο θερμοκηπίου), έδωσαν στην παγκόσμια επιστημονική κοινότητα την ώθηση για την εύρεση εναλλακτικών λύσεων. Οι λύσεις αυτές μπορούν να ενταχθούν σε 2 μεγάλες βασικές κατηγορίες:

1. **Ανανεώσιμες πηγές ενέργειας.** Η υδροηλεκτρική, η αιολική, η ηλιακή ενέργεια κ.α. προκύπτουν αποκλειστικά από τον Ήλιο και είναι αδύνατο να εξαντληθούν για τα επόμενα δισεκατομμύρια χρόνια. Η γεωθερμική και η παλιρροϊκή ενέργεια θεωρούνται επίσης ανανεώσιμες παρόλο που δεν εξαρτώνται από τον Ήλιο. Φυσικά, για τη διεύρυνση της εκμετάλλευσης αυτών των πηγών, υπάρχουν σαφείς περιορισμοί που οφείλονται στην εύρεση των κατάλληλων συνθηκών, την κατάλληλη μορφολογία του εδάφους και του περιβάλλοντος.
2. **Πηγές πυρηνικής ενέργειας.** Η σχάση και η σύντηξη πυρήνων ατόμων ραδιενεργών στοιχείων αποτελούν την κατηγορία αυτή. Η σύντηξη πυρήνων θα αποτελούσε μια ανεξάντλητη πηγή ενέργειας, μα η δημιουργία ενός αποτελεσματικού συστήματος εκμετάλλευσής της παραμένει μακριά από τις τεχνολογικές μας δυνατότητες. Η ενέργεια που μπορούμε να εκμεταλλευθούμε είναι αυτή της σχάσης ραδιενεργών πυρήνων. Σήμερα, η πυρηνική ενέργεια της σχάσης αντιμετωπίζει προβλήματα αποδοχής από το κοινό αλλά και οικονομικών ανταγωνισμών[1].

Για τις ανεπτυγμένες χώρες, όπου οι ενεργειακές απαιτήσεις θα είναι σαφώς αυξημένες τις επόμενες δεκαετίες, προβλέπονται μέτρα που περιλαμβάνουν:

- Τη σταδιακή αντικατάσταση των εργοστασίων παραγωγής ενέργειας με λιγνίτη από πυρηνικά εργοστάσια.
- Τη χρήση πυρηνικής ενέργειας αντί για φυσικό αέριο, ώστε αυτό με τη σειρά του να μπορέσει να αντικαταστήσει το πετρέλαιο και το λιγνίτη.
- Την απαλλαγή από την εξάρτηση του πετρελαίου στις μεταφορές. Η πυρηνική ενέργεια μπορεί να τροφοδοτήσει με ηλεκτρισμό ηλεκτρικά οχήματα, αυξάνοντας την απόδοση στις μηχανές τους και μειώνοντας τους ρύπους.
- Την αντικατάσταση ορυκτών καυσίμων με ηλεκτρισμό, στη θέρμανση, από τη βιομηχανία ως τις κατοικίες μας.

Εστιάζοντας στην κατηγορία ενέργειας που μας ενδιαφέρει, θα μπορούσε κάποιος να ξεκινήσει από τη σχάση του Ουρανίου, η οποία αναγνωρίστηκε το 1938. Μαζί με τις τεράστιες ποσότητες ενέργειας, οι επιστήμονες παρατήρησαν και το μονοπάτι για την αλυσιδωτή αντίδραση, τη βασική αρχή λειτουργίας ενός πυρηνικού αντιδραστήρα ή μιας πυρηνικής βόμβας. Τις πρώτες εκείνες δεκαετίες οι έρευνες για την Ραδιενέργεια, την

ιοντίζουσα ακτινοβολία, είχαν αποκλειστικά κατεύθυνση την ανάπτυξη πυρηνικών όπλων, καθώς δεν υπήρχε εκείνη την περίοδο πρόβλημα αφθονίας ορυκτών καυσίμων. Οι πρώτοι αντιδραστήρες κατασκευάστηκαν στα μέσα της δεκαετίας του '50.

Από την άλλη, η ραδιενέργεια και η έκθεση στις ιοντίζουσες ακτινοβολίες συχνά θεωρούνταν περιβαλλοντικά προβλήματα προερχόμενα από τη σύγχρονη επιστήμη και τεχνολογία. Παρόλα αυτά σημαντικές ποσότητες ραδιενέργειας υπάρχουν στον ίδιο τον πλανήτη μας, μέσω ραδιενεργών στοιχείων από την εποχή της δημιουργίας του, ενώ κάθε βιολογικός οργανισμός στη Γη εξελίχθηκε μέσα σε αυτό το ραδιενεργό περιβάλλον. Βεβαίως, με την ελεγχόμενη πυρηνική σχάση ο άνθρωπος κατάφερε να υπερβεί κατά πολύ αυτά τα ποσά της φυσικής ραδιενέργειας. Για την ελαχιστοποίηση της έκθεσής του στη ραδιενέργεια, απομόνωσε τα ραδιενεργά στοιχεία και χρησιμοποίησε τη θωράκιση στον περιβάλλοντα χώρο. Επίγνωση επί της ύπαρξης ιοντίζουσών ακτινοβολιών απέκτησε το 1896, όταν ο Wilhelm Roentgen ανακάλυψε τις ακτίνες-x, ενώ μέσα στα επόμενα 5 χρόνια ο Henri Becquerel με την Marie και τον Pierre Curie ανακάλυψαν τις ιοντίζουσες ακτινοβολίες του ουρανίου ορυκτών. Ο Becquerel παρατήρησε πως τα ορυκτά αυτά μαύριζαν φωτογραφικές πλάκες όπως οι ακτίνες-x και πως η ακτινοβολία που ήταν υπεύθυνη γι' αυτό αποτελείτο από τρεις συνιστώσες. Κατά τη διέλευσή τους μέσα από μαγνητικό πεδίο, η πρώτη απέκλινε ως ένα θετικό φορτισμένο σωματίο, η δεύτερη ως ένα ελαφρά αρνητικά φορτισμένο σωματίο ενώ η τρίτη παρέμενε ανεπηρέαστη απ' το μαγνητικό πεδίο. Οι ακτινοβολίες αυτές ονομάστηκαν τότε άλφα σωματίδια, βήτα σωματίδια και ακτινοβολία-γ. Σήμερα γνωρίζουμε ότι:

- Η ακτινοβολία-α είναι πυρήνες ${}^4\text{He}$ που εκπέμπονται αυθόρμητα από βαρείς πυρήνες
- Η ακτινοβολία-β είναι e^+ και e^- που προέρχονται από τις βασικές μεταπτώσεις

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu} \quad (1.1.1)$$

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu \quad (1.1.2)$$

- Η ακτινοβολία-γ είναι ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία που εκπέμπεται από την αποδιέγερση διεγερμένων καταστάσεων του πυρήνα.

Σωματίδια λοιπόν αυτών των ακτινοβολιών καθώς και η κοσμική ακτινοβολία, αποτελούν τη φυσική ιοντίζουσα ακτινοβολία. Η αντίστοιχη τεχνητή ιοντίζουσα ακτινοβολία, προέρχεται από μηχανές ακτίνων-x, από επιταχυντές σωματιδίων και πυρηνικούς αντιδραστήρες κι από τα τεχνητά ραδιονουκλίδια που παράγονται κατά τη λειτουργία αυτών. Από την παραγωγή αυτών των ραδιενεργών πυρήνων προκύπτουν σημαντικά ζητήματα ασφάλειας και περιβαλλοντικών επιπτώσεων, που προφανώς μεταπίπτουν σε προβλήματα υγείας. Οι κίνδυνοι λοιπόν της ιοντίζουσας ακτινοβολίας σχετίζεται με το επίπεδο της ραδιενεργού δόσης και έκθεσης σε αυτήν.

Τα δύο βασικότερα ζητήματα που προκύπτουν σε αυτήν την προσπάθεια «εξημέρωσης» της πυρηνικής ενέργειας είναι:

- Ο σχεδιασμός και η κατασκευή συστημάτων παραγωγής πυρηνικής ενέργειας, στα οποία να αποκλείεται η πιθανότητα ανεξέλεγκτης αλυσιδωτής αντίδρασης (υπερκρίσιμης κατάστασης λειτουργίας).
- Η διαχείριση και η εκμετάλλευση των πυρηνικών αποβλήτων, των ραδιονουκλιδίων δηλαδή που προκύπτουν ώστε να μην υπάρχουν επιπτώσεις στον άνθρωπο και το περιβάλλον.

Μια επιμέρους λύση στα πυρηνικά απόβλητα δίνεται με τη μετατροπή τους σε εκμεταλλεύσιμα ενεργειακά ισότοπα μέσω της μεταστοιχείωσης, σε Αντιδραστήρες Ταχέων Νετρονίων και σε «Συστήματα Οδηγούμενα από επιταχυντή» (ADS). Με τον όρο «μεταστοιχείωση» χαρακτηρίζεται η μετατροπή ενός χημικού στοιχείου σε κάποιο άλλο. Οι πυρηνικές αντιδράσεις, προκαλούν ακριβώς αυτές τις μετατροπές, μεταστοιχειώνοντας τα μακρόβια ραδιενεργά ισότοπα, σε βραχύβια. Έτσι, η μεταστοιχείωση πυρηνικών αποβλήτων τα μετατρέπει σε καύσιμα, εξασφαλίζοντας έτσι την παραγωγή «καθαρής» πυρηνικής ενέργειας.

Με την εφαρμογή Αντιδραστήρων Ταχέων Νετρονίων, η παραγωγή ενέργειας γίνεται πολύ πιο αποτελεσματική σε σχέση με τους παραδοσιακούς πυρηνικούς αντιδραστήρες, παρόλο που η χρήση ως καύσιμο των U, Pu και Th, μελλοντικά μπορεί να αποτελέσει πρόβλημα λόγω περιορισμένων αποθεμάτων U (^{238}U μεταστοιχειώνεται στο ^{239}Pu μέσα από αλυσιδωτές συλλήψεις νετρονίων και διασπάσεων- β κ.ο.κ.). Επιπλέον, τα συστήματα ADS είναι συστήματα παραγωγής ενέργειας που αποτελούνται από έναν επιταχυντή υψηλών ενεργειών, συζευγμένο με έναν πυρηνικό αντιδραστήρα. Μεγάλο μέρος από τα απαραίτητα νετρόνια για την παραγωγή ενέργειας μέσω σχάσης, παρέχονται από τον επιταχυντή ενώ το υπόλοιπο από το σχάσιμο υλικό. Μέρος της παραγόμενης στον αντιδραστήρα ενέργειας χρησιμοποιείται για την τροφοδότηση του επιταχυντή. Με αυτόν τον τρόπο δημιουργείται ένα αυτόνομο σύστημα παραγωγής ενέργειας, το οποίο ανά πάσα στιγμή μπορεί να σταματήσει τη λειτουργία του με τη διακοπή της λειτουργίας του επιταχυντή, επιτυγχάνοντας έτσι την παραγωγή «ασφαλούς» πυρηνικής ενέργειας. Επιπλέον, εφόσον τα νετρόνια στον πυρήνα του αντιδραστήρα δε θα παράγονται αποκλειστικά από το σχάσιμο υλικό των καυσίμων, το όλο σύστημα θα μπορεί να είναι μονίμως σε υποκρίσιμη κατάσταση [2].

1.2 Πυρηνικές Αντιδράσεις

Όταν ταχέως κινούμενα σωματίδια από έναν αντιδραστήρα ή έναν επιταχυντή προσπέσουν σε στόχο, υπάρχει η πιθανότητα να λάβει χώρα μια πυρηνική αντίδραση. Καθώς λοιπόν ένα

τέτοιο βλήμα εισέλθει εντός του πυρήνα και ενσωματωθεί με αυτόν, μπορεί υπό ορισμένες προϋποθέσεις να προκαλέσει τη διάσπασή του[3]. Ως βλήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν σωμάτια- α ή και άλλα σωμάτια (νετρόνια, πρωτόνια κ.λ) στα οποία προσδίδονται μεγάλες ταχύτητες μέσω κατάλληλων επιταχυντικών διατάξεων. Με την ενσωμάτωση του βλήματος στον πυρήνα προκύπτει η ακαριαία διάσπαση του τελευταίου, παράγοντας διάφορα θραύσματα, ανάλογα με την περίπτωση, όπως πρωτόνια, σωμάτια α , νετρόνια κ.λ. αλλά και νέους πυρήνες. Κατά τη διάσπαση αυτή έχουμε την τεχνητή μεταστοιχείωση που αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα. Μεταξύ των δύο αρχικών σωματίδων (πυρήνα και βλήματος) και των θραυσμάτων είναι δυνατό να γραφεί μια σχέση σε μορφή εξίσωσης, ανάλογη της Χημικής αντίδρασης. Αυτός είναι και ο λόγος που οι τεχνητές διασπάσεις του πυρήνα καλούνται πυρηνικές αντιδράσεις.

Μια τυπική πυρηνική αντίδραση γράφεται:



όπου a το ταχέως κινούμενο σωματίο της δέσμης, X ο ακίνητος πυρήνας-στόχος στο εργαστήριο, ενώ Y και b τα προϊόντα της αντίδρασης. Συνήθως, το Y είναι βαρύ προϊόν που σταματά επάνω στο στόχο και δεν είναι άμεσα παρατηρήσιμο, ενώ το b είναι νουκλεόνια, ένας ελαφρύς πυρήνας ή, περιστασιακά, ακτινοβολία- γ . Οι πυρηνικές αντιδράσεις χωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες, τις *Άμεσες Αντιδράσεις* και τις *Αντιδράσεις Σύνθετου Πυρήνα*, ανάλογα με τον *συνολικό χρόνο διεξαγωγής τους* και την *έκλυση ή απορρόφηση διαθέσιμης ενέργειας του συστήματος*. Βέβαια, ανεξάρτητα από το χρόνο αλληλεπίδρασης, ο πυρήνας-στόχος καταλήγει σε μια διεγερμένη κατάσταση από την οποία στη συνέχεια αποδιεγείρεται με εκπομπή σωματίων ή ακτινοβολίας- γ . Το είδος της αποδιέγερσης καθορίζεται από την ενέργεια, τη στροφορμή και την παραμόρφωση του πυρήνα. Η αποδιέγερση μέσω ακτινοβολίας- γ κυριαρχεί στις χαμηλές ενέργειες διέγερσης, ενώ, καθώς αυτές αυξάνουν, γίνεται ενεργειακά δυνατή η αποδιέγερση με την εκπομπή σωματίων. Στις υψηλότερες ενέργειες διέγερσης η μεγάλη παραμόρφωση του πυρήνα οδηγεί σε διεγερμένα θραύσματα μικρότερης μάζας, τα οποία αποδιεγείρονται με τους ίδιους όρους. Η σχάση του πυρήνα σε δύο θραύσματα επιτυγχάνεται μόνο σε βαρείς πυρήνες, ακόμη και με χαμηλές ενέργειες διέγερσης, εφόσον υπάρξει σημαντική παραμόρφωση σε αυτούς.

Για την περιγραφή του μηχανισμού της θερμοδυναμικής εξισορρόπησης του πυρήνα και της πυκνότητας των καταστάσεών του κατά την αποδιέγερσή του πριν τη θερμοδυναμική ισορροπία, θεωρείται ότι στη βασική του κατάσταση, ο πυρήνας αποτελείται από έναν αριθμό σωματιδίων που συμπληρώνουν τις στάθμες του, μέχρι την ενέργεια Fermi. Κατά τη διέγερσή του, ορισμένα από αυτά τα σωματίδια μεταπηδούν σε στάθμες μεγαλύτερης ενέργειας από την ενέργεια Fermi, αφήνοντας πίσω τους αντίστοιχες οπές.

1.2.1 Άμεσες Αντιδράσεις

Κοινό χαρακτηριστικό όλων των άμεσων αντιδράσεων (direct reactions) είναι ο μικρός χρόνος αλληλεπίδρασης (της τάξης των 10^{-22} sec), όσος χρόνος δηλαδή θα χρειαζόταν ένα σωματίο να διασχίσει τον πυρήνα. Η «μνήμη» των αντιδρώντων σωματίων δε χάνεται, η ενεργός διατομή έχει ασθενή εξάρτηση από την ενέργεια και παρουσιάζει ισχυρά ανισοτροπική γωνιακή κατανομή (angular distribution). Αυτές οι ιδιότητες οδήγησαν στην θεωρητική «περιγραφή ενός βήματος» (single-step description) της διαδικασίας, που επίσης λέγεται και «Distorted Wave Approximation» (DWA).

Επιπλέον, ορισμένες από τις άμεσες αντιδράσεις είναι οι εξής:

1. Η Ελαστική Σκέδαση (elastic scattering). Κατά τη διεργασία αυτή το μόνο που αλλάζει είναι η κινητική ενέργεια και η διεύθυνση του βλήματος. Περιγράφεται ως: $X(a,a)X$.
2. Η μη-Ελαστική Σκέδαση (inelastic scattering). Κατά την αλληλεπίδραση αυτή, ο αρχικός πυρήνας μεταπίπτει σε διεγερμένη κατάσταση, δηλαδή: $X(a,a)X^*$.
3. Οι Αντιδράσεις Απογύμνωσης (stripping reactions). Κατά την διαδικασία αυτή σωματίο-βλήμα αλληλεπιδρά με ένα ή δύο νουκλεόνια του στόχου-πυρήνα X , αφήνοντας ανεπηρέαστα τα υπόλοιπα νουκλεόνια.
4. Οι Αντιδράσεις Μεταφοράς (pick up reactions). Κατά τη διεργασία αυτή το βλήμα αλληλεπιδρά, συλλαμβάνει και απομακρύνει ένα ή δύο νουκλεόνια του πυρήνα X .

1.2.2 Αντιδράσεις Σύνθετου Πυρήνα

Οι αντιδράσεις σύνθετου πυρήνα (compound nucleus reactions) έχουν ως βασικό χαρακτηριστικό τον μεγάλο χρόνο αλληλεπίδρασης βλήματος-στόχου. Στις αντιδράσεις αυτές παρουσιάζεται μια σχεδόν οριακή κατάσταση του σύνθετου πυρήνα, με καλά καθορισμένους κβαντικούς αριθμούς (όπως ενέργεια, στροφορμή και ομοτιμία). Σαφώς, η διέγερση της κατάστασης του σύνθετου πυρήνα δε μπορεί να περιγραφεί με την (single step) διαδικασία των άμεσων αντιδράσεων. Το βλήμα χάνει την ταυτότητά του και συγχωνευμένο με τον πυρήνα-στόχο σχηματίζεται η κατάσταση του «σύνθετου πυρήνα». Ο σύνθετος πυρήνας ζει για πεπερασμένο χρόνο ($\sim 10^{-16}$ - 10^{-18} sec) και μπορεί να αποσυνθεθεί/διασπαστεί εκπέμποντας διάφορα προϊόντα.



Η υπόθεση ότι ο σύνθετος πυρήνας βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, έχει να κάνει με την αποδοχή μας ότι αυτός μπορεί να περιγραφεί σαν ένα θερμοδυναμικό σύστημα σε ισορροπία.

1.2.3 Προϊσορροπία (Prequilibrium)–Πρώιμη Αποδιέγερση

Ανάμεσα σε αυτές τις δύο κατηγορίες βρίσκονται αντιδράσεις που ο πυρήνας-στόχος δεν έχει προλάβει να φτάσει σε πλήρη θερμοδυναμική ισορροπία. Κατά τη διάρκεια του αντίστοιχου χρονικού διαστήματος που χρειάζεται το βλήμα για να διανύσει το πεδίο του πυρήνα, εκείνος δέχεται μια περιορισμένη διέγερση. Στις αντιδράσεις αυτές, θεωρείται μια αλληλουχία αλληλεπιδράσεων δύο σωματίων, νουκλεονίου-νουκλεονίου, τα οποία διεγείρονται και αλληλεπιδρούν ξανά με τα νουκλεόνια του πυρήνα. Ανάλογα την ενέργεια του βλήματος, αυτή η αλληλουχία αλληλεπιδράσεων οδηγεί στη διέγερση νουκλεονίων και συσσωματωμάτων νουκλεονίων τα οποία, υπακούοντας στους κανόνες αποδιέγερσης που περιγράφηκαν παραπάνω, μπορούν ακόμη και να εξέλθουν του πυρήνα.

1.2.4 Αντιδράσεις και Ενέργεια

Τέλος, μπορούμε να διαχωρίσουμε τις πυρηνικές αντιδράσεις ως προς την ενέργεια που απορροφάται ή εκλύεται κατά τη διάρκεια της διεξαγωγής τους.

1. Εξώθερμες Αντιδράσεις, οι οποίες γίνονται αυτόματα κι αυθόρμητα, εφόσον το ενεργειακό επίπεδο των προϊόντων βρίσκεται χαμηλότερα από αυτό των αντιδρώντων. Η διαθέσιμη ενέργεια (Q_{value}) σε αυτές τις αντιδράσεις έχει πάντα θετική τιμή.
2. Ενδόθερμες Αντιδράσεις, στις οποίες το ενεργειακό επίπεδο των προϊόντων είναι υψηλότερο. Αυτή η ενεργειακή διαφορά λοιπόν πρέπει να δοθεί στο σύστημα, σε μορφή κινητικής ενέργειας του βλήματος προκειμένου να πραγματοποιηθεί η αντίδραση. Προφανώς εδώ η διαθέσιμη ενέργεια παίρνει αρνητικές τιμές, ενώ στην περίπτωση που είναι μηδενική, έχουμε ελαστική σκέδαση

Η διαθέσιμη ενέργεια υπολογίζεται από τον τύπο:

$$Q = (m_a + m_x - m_y - m_b)c^2$$
$$\text{ή } Q = \Delta_a + \Delta_x - \Delta_y - \Delta_b \quad (1.2.4.1)$$

με $\Delta = m-A$ το έλλειμμα μάζας, m τη μάζα του ουδέτερου ατόμου σε amu και A ο μαζικός αριθμός του ατόμου, επίσης σε amu.

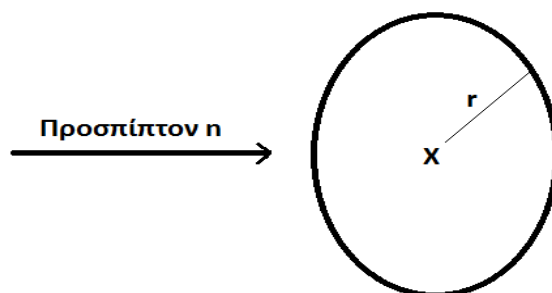
1.3 Ενεργός διατομή

Καθώς ένα νετρόνιο προσεγγίζει έναν ακίνητο στόχο, η πιθανότητα να διέλθει από οποιοδήποτε σημείο ενός κύκλου ακτίνας r , με κέντρο τη θέση του πυρήνα και με το επίπεδο του κάθετο στη διεύθυνση κίνησης του νετρονίου, είναι ομοιόμορφη (Σχήμα 1). Η

πιθανότητα δηλαδή να διέλθει το νετρόνιο από μια επιφάνεια εμβαδού δA θα είναι $\delta A/(\pi r^2)$. Το μέγεθος του πυρήνα και η ακτίνα r πρέπει να είναι μεγάλη συγκρινόμενη με το νετρόνιο, το οποίο το θεωρούμε σαν ένα κβαντικό κυματοπακέτο. Τα νετρόνια, όντας ηλεκτρικά ουδέτερα, δεν αλληλεπιδρούν με τις δυνάμεις Coulomb, και μπορούμε να θεωρήσουμε ότι αλληλεπιδρούν μόνο μέσω των μικρής εμβέλειας πυρηνικών δυνάμεων. Εφόσον λοιπόν το r είναι αρκετά μεγάλο, η πιθανότητα αλληλεπίδρασης είναι αντίστροφα ανάλογη του εμβαδού πr^2 :

$$P_i = \frac{\sigma_{tot}}{\pi r^2} \quad (1.3.1)$$

με p_i την πιθανότητα αλληλεπίδρασης και τη σταθερά σ_{tot} που ονομάζεται ολική ενεργός διατομή αλληλεπίδρασης, έχοντας μονάδες επιφάνειας: $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$. Η ολική ενεργός διατομή μπορεί να θεωρηθεί ως το ενεργό εμβαδό που παρουσιάζει ο πυρήνας στο νετρόνιο, επισημάνοντας όμως ότι η ενεργός διατομή είναι μια ιδιότητα των σωματιδίων που αλληλεπιδρούν με τον εκάστοτε πυρήνα, και για δοσμένο πυρήνα είναι μια συνάρτηση της ενέργειας του εισερχόμενου σωματιδίου.



Σχήμα 1.3.1 Νετρόνιο που προσπίπτει σε επιφάνεια με ακίνητο πυρήνα στο κέντρο της.

Καθώς δέσμη νετρονίων προσπίπτει σε στόχο, υπάρχει η πιθανότητα αλληλεπίδρασης p_i σε αντιστοιχία μερική ενεργό διατομή σ_i , με τους πυρήνες μέσω των καναλιών i που αναφέρθηκαν σε προηγούμενη ενότητα. Η ολική ενεργός διατομή θα δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{tot} = \sum \sigma_i \quad (1.3.2)$$

Έξετάζοντας κάποιο κανάλι αλληλεπίδρασης, προκύπτει ανισότροπη κατανομή σε διαφορετικές γωνίες. Στην προσπάθεια υπολογισμού του πλήθους των σωματιδίων που σκεδάζονται ανά μονάδα χρόνου και στερεάς γωνίας $d\Omega$ που σχηματίζει γωνία θ με τη διεύθυνση της προσπίπτουσας δέσμης, ορίζεται η διαφορική ενεργός διατομή:

$$\sigma(\theta) = \frac{d\theta}{d\Omega} \quad (1.3.3)$$

και αντίστοιχα η ολική ενεργός διατομή :

$$\sigma_{\text{tot}} = \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \rightarrow \sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (1.3.4)$$

Προφανώς, η ενεργός διατομή των αντιδράσεων είναι η βασική μετρήσιμη ποσότητα με την οποία ασχοληθήκαμε στους θεωρητικούς υπολογισμούς μας[4][5].

1.4 Αντιδράσεις ($n,2n$) και Ιρίδιο

Γενικότερα, η μελέτη νετρονικών αντιδράσεων έχει σπουδαία σημασία στη θεμελιώδη μελέτη της πυρηνικής φυσικής και της αστροφυσικής, καθώς και πρακτική εφαρμογή στις πυρηνικές τεχνολογίες, στην ιατρική και τη βιομηχανία. Η μελέτη αντιδράσεων νετρονίων και του εποικισμού ισομερών καταστάσεων, έχουν μεγάλη σημασία στη δοκιμή πυρηνικών μοντέλων-προτύπων. Τα πρότυπα αυτά αποτελούν βάση των θεωρητικών υπολογισμών αντιδράσεων ενώ ταυτόχρονα υποστηρίζονται σε μεγάλο βαθμό από ημιεμπειρικές παραμέτρους. Η χρήση των παραμέτρων αυτών παίζουν καταλυτικό ρόλο ώστε τα θεωρητικά μοντέλα να αποδίδουν με ικανοποιητική ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα πυρηνικών αντιδράσεων. Ο έλεγχος της αξιοπιστίας των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στους θεωρητικούς υπολογισμούς μειώνεται με την έλλειψη πειραματικών δεδομένων. Ένας βασικός λόγος λοιπόν πειραματικής και θεωρητικής διερεύνησης αντιδράσεων (n,xn) είναι ο ακριβής προσδιορισμός παραμέτρων των μοντέλων για τους πυρήνες που συμμετέχουν στις αντιδράσεις αυτές, αυξάνοντας την ακρίβεια των θεωρητικών υπολογισμών.

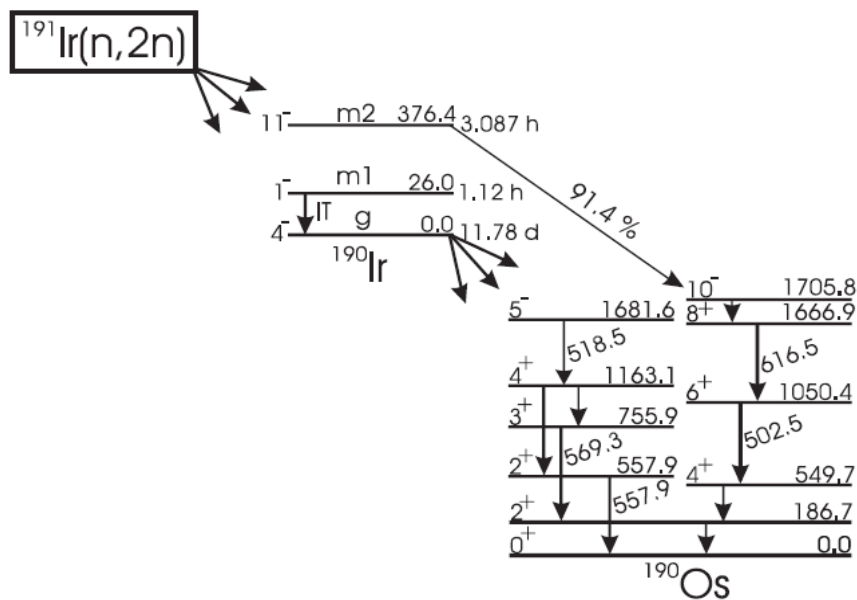
Η περιοχή των πυρήνων ${}_{76}\text{Os} \rightarrow {}_{82}\text{Pb}$, στην οποία ανήκουν και τα εξεταζόμενα ισότοπα του ιριδίου, έχει αποτελέσει αντικείμενο μελέτης λόγω της μεταβολής της πυρηνικής δομής από ωοειδές σχήμα μέχρι το σφαιρικό σχήμα, λόγω περιστροφής ή δόνησης [6,7,8]. Η μεταβολή σχήματος πυρήνα οφείλεται σε κατανομές νουκλεονίων που περιέχουν στάθμες-εισβολείς (intruder states) οι οποίες αποκτούν χαμηλότερη ενέργεια, ανάλογα με τον μαζικό αριθμό A του πυρήνα, καθορίζοντας το σχήμα και τις ιδιότητες του πυρήνα σε χαμηλές ενέργειες διέγερσης. Έτσι και στα ισότοπα ${}^{190}\text{Ir}$ και ${}^{192}\text{Ir}$, έχουν βρεθεί χαρακτηριστικές μετασταθείς στάθμες με μεγάλη τιμή του σπιν σε σχέση με τη βασική τους στάθμη (ground state), ενώ επιβεβαιώνεται ο κανόνας ότι η ενέργεια της μετασταθούς αυξάνεται όσο μειώνεται ο μαζικός αριθμός A του ισότοπου:

- Για το ${}^{190}\text{Ir}$, η 1^{n} μετασταθείς έχει $T_{1/2} = 1.12\text{h}$ στα 26 keV ενώ η 2^{n} έχει $T_{1/2} = 3.087\text{h}$ στα 376 keV.
- Για το ${}^{192}\text{Ir}$, η 1^{n} μετασταθείς έχει $T_{1/2} = 1.45\text{m}$ στα 57keV ενώ η 2^{n} έχει $T_{1/2} = 241\text{y}$ στα 155keV.

Η πρώτη m1 συνυπολογίζεται με τη βασική στάθμη, ενώ η δεύτερη μετασταθή στάθμη m2, μελετάται χωριστά . Πιο συγκεκριμένα, λόγω του μικρού χρόνου ημιζωής της m1 δεν καθίσταται εύκολος ο πειραματικός διαχωρισμός της από τη βασική στάθμη. Αυτός είναι και ο λόγος που στη βιβλιογραφία, τα περισσότερα δεδομένα της ενεργού διατομής παραγωγής βασικής στάθμης (g) των ισοτόπων $^{190}\text{Ir} - ^{192}\text{Ir}$ περιέχουν και την ενεργό διατομή παραγωγής της πρώτης μετασταθούς (g+m1) [9].

Γενικά, οι ενεργές διατομές σχηματισμού των ισομερών σταθμών είναι πιο δύσκολο να προβλεφθούν σε σχέση με τις ολικές ενεργές διατομές των καναλιών αντιδράσεων, καθώς πρέπει να ληφθούν υπόψη περισσότερες λεπτομέρειες για τη δομή του υπολειπόμενου πυρήνα [10]. Η σχετική πιθανότητα της δημιουργίας ισομερών σταθμών σε έναν πυρήνα εξαρτάται από το σπιν των εμπλεκόμενων σταθμών (στάθμες εισβολείς), καθώς και της κατανομής του σπιν των διεγερμένων καταστάσεων του σύνθετου πυρήνα. Το υψηλό σπιν, 11⁻, της δεύτερης μετασταθούς του ^{190}Ir , σε σχέση με το σπιν 4⁻ της βασικής κατάστασης προσφέρει τις κατάλληλες συνθήκες για τη μελέτη της κατανομής του σπιν στον υπολειπόμενο πυρήνα.

Τα βασικά χαρακτηριστικά της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)$ διακρίνονται στο Σχήμα 1.4.1. Ο παραγόμενος πυρήνας από την αντίδραση (n,2n) του ^{191}Ir είναι το ^{190}Ir , έχοντας 2 μετασταθείς στάθμες οι οποίες αποδιηγείρονται στο ^{190}Os μέσω διαφορετικών ακτίνων-γ.



Σχήμα 1.4.1 Ενεργειακό διάγραμμα και η αποδιέγερση της μετασταθούς 11- του ^{190}Ir [9]

Τα σταθερά ισότοπα ^{191}Ir και ^{193}Ir υπάρχουν στη φύση σε ποσοστό 37.3% και 62.7% αντίστοιχα. Το ^{191}Ir παράγεται επίσης σε αντιδραστήρα σχάσης μέσω διάσπασης-β του ^{191}Os και ηλεκτρονιακής σύλληψης του ^{191}Pt . Το ^{193}Ir μπορεί να παραχθεί με διάσπαση-β του ^{192}Os ή του ^{193}Pt μέσω ηλεκτρονιακής σύλληψης. Τα ισότοπα αυτά χρησιμοποιούνται κατά βάση σε

ραδιοχημικούς ανιχνευτές. Το ισότοπο ^{192}Ir έχει την ιδιότητα να εκπέμπει μεγάλες ποσότητες ακτίνων- γ και γι' αυτόν το λόγο χρησιμοποιείται ευρέως σε διάφορους τομείς: στην ανάλυση και δοκιμή υλικών (non-destructive testing), σε θεραπευτικές αγωγές στην ιατρική και στον ακτινογραφικό έλεγχο συγκολλήσεων σε χαλύβδινους σωλήνες στη βιομηχανία. Επίσης το ^{192}Ir έχει $T_{1/2}=73.82$ days στη βασική του στάθμη, ενώ με διάσπαση- β παράγει ^{192}Os και με ηλεκτρονιακή σύλληψη ^{193}Pt [11][12].

1.5 Οι αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκαν θεωρητικά, με τη βοήθεια του κώδικα EMPIRE, αντιδράσεις όπου νετρόνια διαφόρων ενεργειών προσπίπτουν στα ισότοπα $^{191,193}\text{Ir}$, οδηγώντας στην παραγωγή σύνθετων πυρήνων $^{192}\text{Ir}^*$ και $^{194}\text{Ir}^*$. Με τον υπολογισμό της διαθέσιμης ενέργειας (Q_{value}) των πιθανών καναλιών εξόδου, βρίσκουμε ουσιαστικά το Ενεργειακό Κατώφλι ($E_{Threshold}$) της εκάστοτε αντίδρασης, δηλαδή τις ενέργειες που απαιτούνται για να ανοίξουν τα συγκεκριμένα κανάλια εξόδου [12], όπως φαίνεται στους ακόλουθους πίνακες.

Πίνακας 1.5.1: Δυνατά κανάλια εξόδου από την αποδιέγερση του $^{192}\text{Ir}^*$

Αλληλεπίδραση	Κανάλι Εξόδου	Ενέργεια	Είδος
Εισόδου		Κατωφλίου(MeV)	Αλληλ/σης
$n+^{191}\text{Ir}$	$n + ^{191}\text{Ir}$	0	Ελαστ.Σκεδαση
	$2n + ^{190}\text{Ir}$	12.59	Ενδόθερμη
	$3n + ^{189}\text{Ir}$	14.39	Ενδόθερμη
	$np + ^{190}\text{Os}$	5.29	Ενδόθερμη
	$p + ^{191}\text{Os}$	-0.47	Εξώθερμη
	$n\alpha + ^{187}\text{Re}$	-2.08	Εξώθερμη
	$\alpha + ^{188}\text{Re}$	-7.96	Εξώθερμη

Πίνακας 1.5.2: Δυνατά κανάλια εξόδου από την αποδιέγερση του $^{194}\text{Ir}^*$

Αλληλεπίδραση	Κανάλι Εξόδου	Ενέργεια	Είδος
Εισόδου		Κατωφλίου(MeV)	Αλληλ/σης
$n+^{193}\text{Ir}$	$n + ^{193}\text{Ir}$	0	Ελαστ.Σκεδαση
	$2n + ^{192}\text{Ir}$	7.77	Ενδόθερμη
	$3n + ^{191}\text{Ir}$	13.96	Ενδόθερμη
	$np + ^{192}\text{Os}$	5.94	Ενδόθερμη
	$p + ^{193}\text{Os}$	0.36	Ενδόθερμη
	$n\alpha + ^{189}\text{Re}$	-1.02	Εξώθερμη
	$\alpha + ^{190}\text{Re}$	-6.68	Εξώθερμη

Κατόπιν, για να σχεδιαστούν τα αντίστοιχα ενεργειακά διαγράμματα των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$ ώστε να προβλεφθούν τα κανάλια που θα ανοίξουν κατά την ακτινοβόληση, μελετάμε τις προηγούμενες αντιδράσεις με επίπεδο αναφοράς το ενεργειακό επίπεδο των σύνθετων πυρήνων $^{192}\text{Ir}^*$ και $^{194}\text{Ir}^*$.

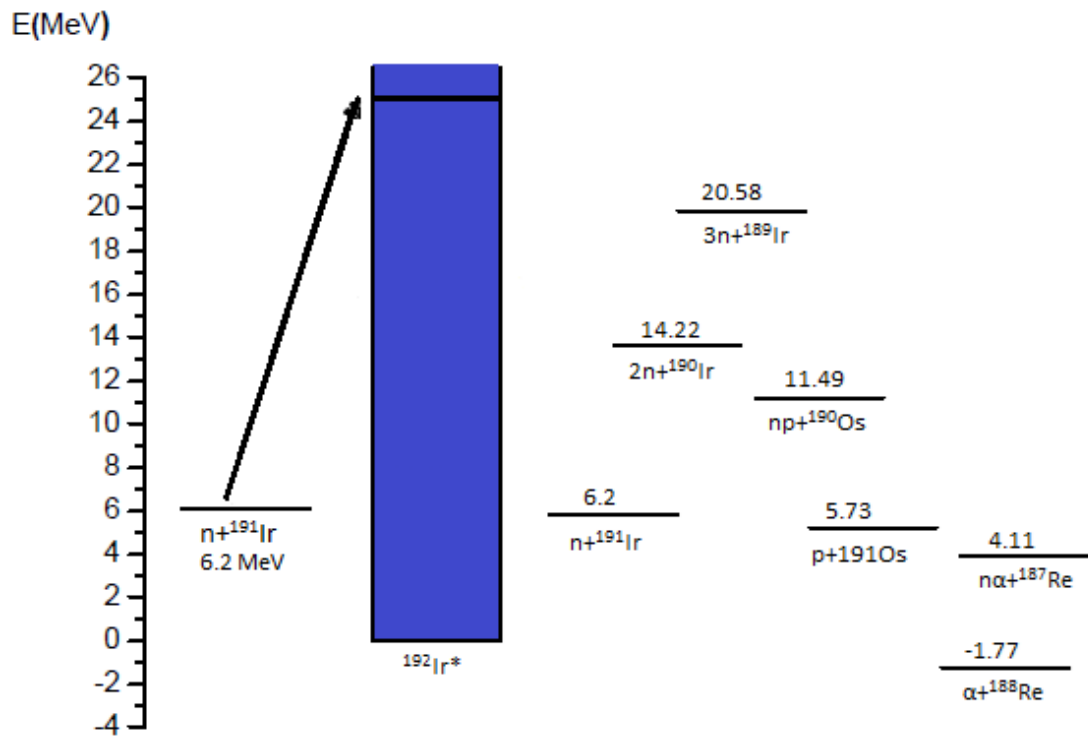
Πίνακας 1.5.3: Δυνατά κανάλια εξόδου και ενέργειες που απαιτείται για να ανοίξουν σε σχέση με τη θεμελιώδη στάθμη του σύνθετου πυρήνα $^{192}\text{Ir}^*$.

Σύνθετος Πυρήνας	Κανάλι Εξόδου	Ενεργειακό Επίπεδο(MeV)
$^{192}\text{Ir}^*$	$n + ^{191}\text{Ir}$	6.2
	$2n + ^{190}\text{Ir}$	14.22
	$3n + ^{189}\text{Ir}$	20.58
	$np + ^{190}\text{Os}$	11.49
	$p + ^{191}\text{Os}$	5.28
	$n\alpha + ^{187}\text{Re}$	4.11
	$\alpha + ^{188}\text{Re}$	-1.76

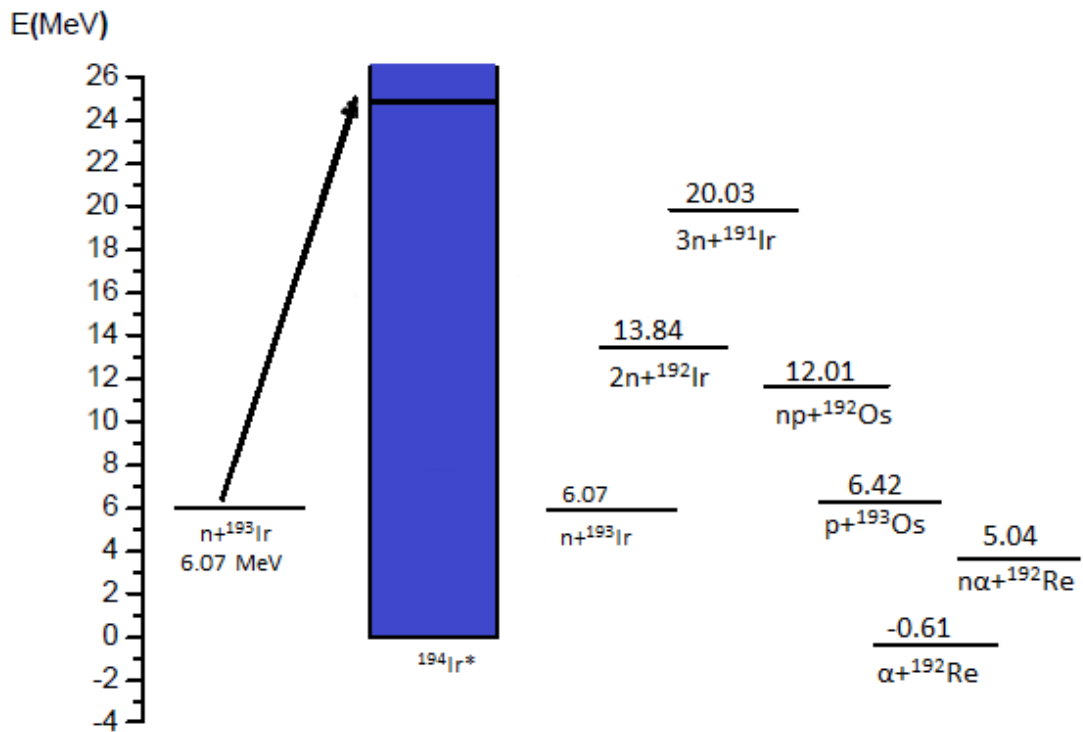
Πίνακας 1.5.4: Δυνατά κανάλια εξόδου και ενέργειες που απαιτείται για να ανοίξουν σε σχέση με τη θεμελιώδη στάθμη του σύνθετου πυρήνα $^{194}\text{Ir}^*$.

Σύνθετος Πυρήνας	Κανάλι Εξόδου	Ενεργειακό Επίπεδο(MeV)
$^{194}\text{Ir}^*$	$n + ^{193}\text{Ir}$	6.07
	$2n + ^{192}\text{Ir}$	13.84
	$3n + ^{191}\text{Ir}$	20.03
	$np + ^{192}\text{Os}$	12.01
	$p + ^{193}\text{Os}$	6.43
	$n\alpha + ^{189}\text{Re}$	5.04
	$\alpha + ^{190}\text{Re}$	-0.61

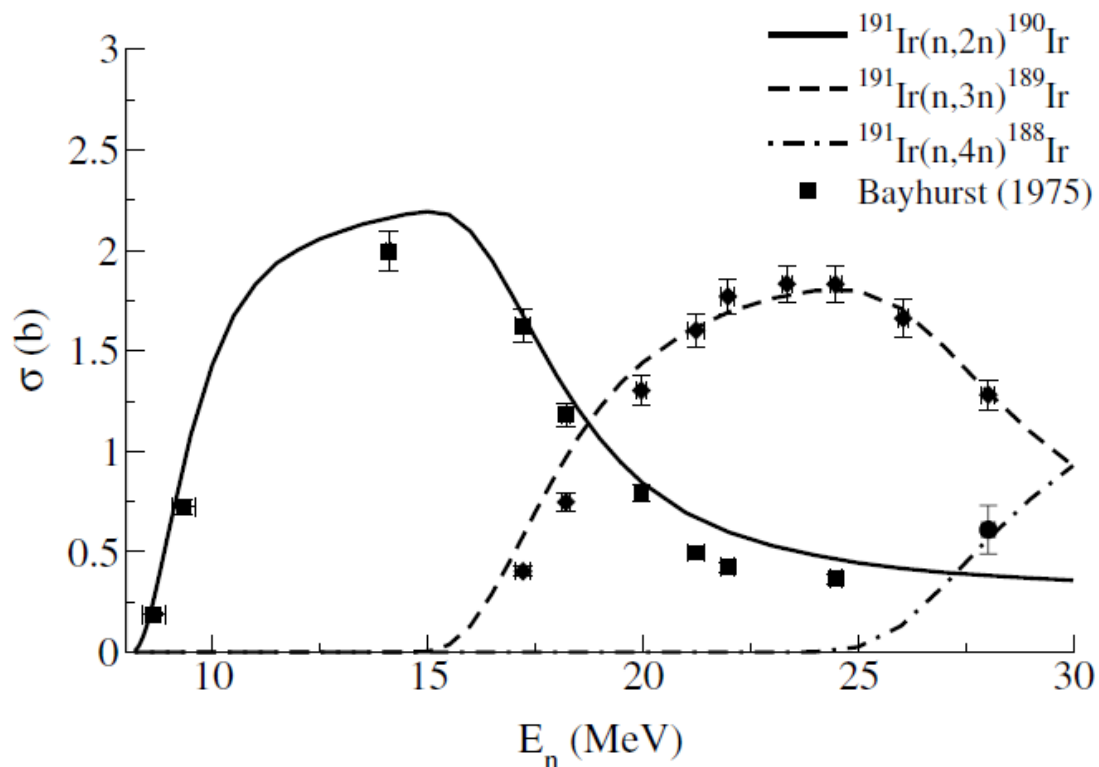
Ο θεωρητικός υπολογισμός των ενεργών διατομών γίνεται για όλο το ενεργειακό εύρος στο οποίο το κανάλι (n,2n) είναι ανοιχτό (8 με 25 MeV). Πειραματικά, οι βαρείς πυρήνες των ισοτόπων του ιριδίου θα μας υποχρεώσαν να εξαιρέσουμε από τους υπολογισμούς τα κανάλια εξόδου εκπομπής φορτισμένων σωματιδίων, λόγω υψηλού φράγματος Coulomb, το οποίο μειώνει σημαντικά την ενεργό διατομή των αντιδράσεων.



Σχήμα 1.5.1. Ενεργειακό διάγραμμα της αντίδρασης $n+^{191}\text{Ir}$ στο εύρος των 8 έως 25 MeV.



Σχήμα 1.5.2. Ενεργειακό διάγραμμα της αντίδρασης $n+^{193}\text{Ir}$ στο εύρος των 8 έως 25 MeV.



Σχήμα 1.5.5 Θεωρητικοί υπολογισμοί των Cowell και Talou [13] για τις ολικές ενεργές διατομές των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,xn)$, σε σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα [14]

Οι ελαστικές αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,n)^{191}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,n)^{193}\text{Ir}$, δε μελετώνται με τη μέθοδο της ακτινοβόλησης, μελετώνται ωστόσο με άλλες πειραματικές μεθόδους. Όπως περιγράφεται στο Σχήμα 1.5.5, η ενεργός διατομή των (n,3n) αυξάνει και γίνεται σημαντική εις βάρος των ενεργών διατομών του (n,2n) καναλιού. Καθώς λοιπόν θα αυξάνει η ενέργεια και «ανοίξει» το κανάλι (n,3n), αναμένουμε την ταυτόχρονη μείωση της ενεργού διατομής της (n,2n). Επίσης, το κανάλι (n,4n) ανοίγει μετά τα 25 MeV και για αυτόν το λόγο δεν περιλαμβάνεται στους υπολογισμούς μας.

Στους θεωρητικούς μας υπολογισμούς, μέσω του κώδικα EMPIRE, περιλαμβάνονται και τα κανάλια των (n,p) αντιδράσεων παρόλη τη μικρή ενεργό διατομή τους. Στις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,np)^{190}\text{Os}$ $^{193}\text{Ir}(n,np)^{192}\text{Os}$, τα ισότοπα του Οσμίου που προκύπτουν είναι σταθερά, επομένως δεν μελετώνται οι ενεργές διατομές τους. Ομοίως για την αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,na)^{187}\text{Re}$, όπου το ισότοπο του ρηνίου έχει τεράστιο χρόνο ημιζωής $T_{1/2}=4.35 \cdot 10^{10}$ years. Για την πραγματοποίηση θεωρητικών υπολογισμών ενεργών διατομών αντιδράσεων, όπως έχει ήδη αναφερθεί, λαμβάνονται υπόψη όλοι οι μηχανισμοί αλληλεπίδρασης μέσω αντίστοιχων θεωρητικών προτύπων τα οποία αναλύονται στο επόμενο κεφάλαιο.

2

Θεωρητικά Πρότυπα που χρησιμοποιήθηκαν

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται θεμελιώδη θεωρητικά πρότυπα με στόχο να περιγραφεί ο τρόπος με τον οποίο παρέχονται βασικές θεωρητικές και πειραματικές πληροφορίες πυρηνικών αντιδράσεων, στις βάσεις δεδομένων πυρηνικής φυσικής. Τα συστατικά αυτής της διαδικασίας είναι: κώδικες πυρηνικών μοντέλων, πειραματικά δεδομένα αντιδράσεων καθώς και βιβλιοθήκες πληροφοριών. Κώδικες πυρηνικών μοντέλων, όπως STAPRE, TNG, ALICE, GNASH και EMPIRE, αναπαράγοντας κι εκτιμώντας υπάρχοντα πειραματικά δεδομένα ώστε να γίνουν στη συνέχεια προβλέψεις για σημαντικά κανάλια αντιδράσεων, σε ενέργειες όπου δεν υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Το τελικό προϊόν κάθε πρόβλεψης αποθηκεύεται σε βάσεις δεδομένων (βιβλιοθήκες πυρηνικών δεδομένων), μαζί με όλες τις σχετικές ακριβείς λεπτομέρειες του στόχου και του βλήματος κάθε αντίδρασης. Η σύγκριση λοιπόν της θεωρίας και του πειράματος μας δίνει μια εικόνα της θεμελιώδους αλληλεπίδρασης πυρήνων και σωματιδίων, αναβαθμίζοντας ταυτόχρονα τις παραμέτρους που χρησιμοποιούν τα θεωρητικά μοντέλα πρόβλεψης και εκτίμησης αποτελεσμάτων. Παρακάτω παρουσιάζονται τα πυρηνικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για τους θεωρητικούς υπολογισμούς μας.

2.1 *Οπτικό Πρότυπο Πυρηνικού Δυναμικού (Optical Model Potential)*

Για την ανάλυση κάθε πυρηνικής αντίδρασης, οι υπολογισμοί του οπτικού δυναμικού έχουν πρωταρχικό ρόλο. Το οπτικό πρότυπο δυναμικού (OMP) περιγράφει την πολύπλοκη αλληλεπίδραση μεταξύ του προσπίπτοντος σωματιδίου και του πυρήνα, μέσω ενός πεδίου δυναμικού, που διαχωρίζει τη ροή της αντίδρασης στο κομμάτι της ελαστικής σκέδασης και των υπολοίπων διαθέσιμων καναλιών αντιδράσεων με τρόπο ανάλογο της ανάκλασης κι απορρόφησης του φωτός από μια σφαίρα. Στα πλαίσια αυτού του προτύπου, υπολογίζουμε την ελαστική γωνιακή κατανομή, την πόλωση, την ολική ενεργό διατομή της εκάστοτε αντίδρασης. Η ουσιαστική αξία ενός καλού οπτικού μοντέλου δυναμικού έχει να κάνει με την αξιόπιστη πρόβλεψη αυτών των ποσοτήτων, για ενέργειες και νουκλίδια που δεν υπάρχουν στις βιβλιοθήκες πυρηνικών δεδομένων. Επίσης, η ποιότητα των μη άμεσα παρατηρήσιμων ποσοτήτων που υπολογίζονται από το οπτικό δυναμικό έχουν μιας ίσης αξίας επίδραση στον υπολογισμό διαφόρων καναλιών αντιδράσεων. Τα πιο γνωστά παραδείγματα είναι οι συντελεστές διάδοσης, για σύνθετους πυρήνες και αποδιέγερση πολλών βημάτων σύνθετων πυρήνων (multi-step compound decay), καθώς και των παραμορφωμένων κυματοσυναρτήσεων (distorted wave functions) που χρησιμοποιούνται στις άμεσες ανελαστικές αντιδράσεις. Επίσης, η ενεργός διατομή των αντιδράσεων που υπολογίζονται με το μοντέλο οπτικού δυναμικού, είναι κρίσιμη για τα ημι-κλασικά μοντέλα πρώιμης αποδιέγερσης.

Οι υπολογισμοί του οπτικού προτύπου δυναμικού γίνονται μέσω του ECIS-06, που έχει εφαρμοστεί ως υπορουτίνα στον κώδικα EMPIRE. Οι υπολογισμοί αυτοί αρχικά εκτελούνται και αποθηκεύονται για όλα τα κανάλια των πιθανών εξερχόμενων σωματιδίων και ενεργειών, ώστε οι εμπλεκόμενοι συντελεστές διάδοσης να χρησιμοποιηθούν στους υπολογισμούς της πρώιμης αποδιέγερσης και του σύνθετου πυρήνα. Έπειτα, γίνεται υπολογισμός για το εκάστοτε ποσό ενέργειας εισερχόμενου σωματιδίου που έχει προκαθορίσει ο χρήστης [15].

2.1.1 *Οπτικό Δυναμικό και η Λειτουργική Μορφή του*

Το φαινομενολογικό OMP για σκέδαση νουκλεονίου-πυρήνα, είναι συνήθως τύπου Woods-Saxon και ορίζεται ως εξής:

$$U(r, E) = -V_v(r, E) - iW_v(r, E) - iW_D(r, E) + V_{SO}(r, E)l\sigma + iW_{SO}(r, E)l\sigma + V_C(r) \quad (2.1.1.1)$$

Όπου V και W το φανταστικό και το πραγματικό μέρος του όγκου του κεντρικού δυναμικού (volume-central) (V), του επιφανειακού κεντρικού δυναμικού (D) και του σπιντροχιάς (SO) δυναμικού αντίστοιχα. Ως E συμβολίζεται η ενέργεια εργαστηρίου του προσπίπτοντος σωματίου σε MeV. Τα μέρη αυτά του δυναμικού χωρίζονται σε ενεργειακώς εξαρτημένα πηγάδια δυναμικού βάθους, V_V , W_V , W_D , V_{SO} και W_{SO} , και σε ενεργειακώς ανεξάρτητα ακτινικά μέρη (radial parts) f , δηλαδή:

$$\begin{aligned} V_V(r, E) &= V_V(E) f(r, R_V, a_V) \\ W_V(r, E) &= W_V(E) f(r, R_V, a_V) \\ W_D(r, E) &= -4a_D W_D(E) \frac{d}{dr} f(r, R_D, a_D) \\ V_{SO}(r, E) &= V_{SO}(E) \left(\frac{\hbar}{m_\pi c}\right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}) \\ W_{SO}(r, E) &= W_{SO}(E) \left(\frac{\hbar}{m_\pi c}\right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}) \end{aligned} \quad (2.1.1.2)$$

Ο παράγοντας μορφής $f(r, R_i, a_i)$ είναι μορφής Woods-Saxon:

$$f(r, R_i, a_i) = (1 + \exp[\frac{(r - R_i)}{a_i}])^{-1} \quad (2.1.1.3)$$

όπου οι γεωμετρικές παράμετροι είναι η ακτίνα $R_i = r_i A^{1/3}$ a_i οι παράμετροι διάχυσης και A ο ατομικός αριθμός του στόχου. Για φορτισμένα βλήματα, το δυναμικό Coulomb V_C περιγράφεται ως εκείνο το δυναμικό ομοιόμορφης φορτισμένης σφαίρας, από τη σχέση:

$$\begin{aligned} V_C(r) &= \frac{Zze^2}{2R_C} \left(3 - \frac{r^2}{R_C^2}\right), \text{ για } r \leq R_C \\ V_C(r) &= \frac{Zze^2}{r}, \text{ για } r \geq R_C \end{aligned} \quad (2.1.1.4)$$

με Z το φορτίο του στόχου, z το φορτίο της δέσμης και $R_C = r_C A^{1/3}$ η ακτίνα της σφαίρας.

Όταν υπάρχουν αρκετά πειραματικά δεδομένα σκέδασης για συγκεκριμένο πυρήνα, τότε μπορεί να κατασκευαστεί ένα τοπικό (local) πρότυπο οπτικού δυναμικού. Ο κώδικας EMPIRE λαμβάνει τις τιμές των παραμέτρων του εκάστοτε OMP και του πυρήνα στόχου που χρησιμοποιείται, από τη βάση δεδομένων που βρίσκεται εγκατεστημένη σε υποφακέλους του (RIPL). Στην περίπτωση που η παραμετροποίηση ενός τοπικού OMP δεν είναι διαθέσιμη στη βάση δεδομένων, χρησιμοποιούνται αυτόματα παγκόσμια πρότυπα οπτικού δυναμικού (global OMP) τα οποία μπορούν να εφαρμοστούν για οποιονδήποτε συνδυασμό Z και A . Επίσης, για τη σύγκριση των θεωρητικών υπολογισμών με πειραματικά δεδομένα, μέσα στο συνολικό πακέτο του κώδικα EMPIRE υπάρχει η πλήρης βιβλιοθήκη πειραματικών

δεδομένων EXFOR. Το προεπιλεγμένο οπτικό πρότυπο δυναμικού που δίνεται στο EMPIRE είναι αυτό των Koning-Delaroche [16], τοπικής (local) και παγκόσμιας (global) παραμετροποίησης. Γενικά, παρεκκλίνουμε αυτής της παραμετροποίησης στην περίπτωση όπου μπορούμε να αποκτήσουμε έναν καλύτερο συμβιβασμό μεταξύ των παρατηρούμενων καναλιών του βασικού αυτού OMP και των μη ελαστικών καναλιών

2.1.2 Συζευγμένα κανάλια (*coupled channels*) και Άμεσες Αντιδράσεις

Για την κατηγορία των άμεσων αντιδράσεων, υπάρχουν διάφορα μοντέλα μηχανισμών που περιλαμβάνονται στο EMPIRE: το DWBA για (σχεδόν) σφαιρικά νουκλίδια, το μοντέλο ασθενούς σύζευξης (*weak coupling model*) για πυρήνες με περιττό αριθμό νουκλεονίων, όπως επίσης και έναν γιγάντιο συντονισμό (*giant resonance contributions*) συνεισφοράς στο συνεχές. Σε κάθε περίπτωση, το EMPIRE μέσω του ECIS [18], εκτελεί τους υπολογισμούς και παρουσιάζει τα αποτελέσματα είτε ως ενεργές διατομές διακριτών σταθμών, είτε ως γωνιακές κατανομές ή συνεισφορές στο συνεχές του πυρήνα.

Η πιο γενική μέθοδος συζευγμένων καναλιών επικαλείται να περιγράψει ταυτόχρονα το κανάλι της ελαστικής σκέδασης και τις χαμηλότερες ενεργειακά καταστάσεις (low lying states), οι οποίες διεγείρονται στην ανελαστική σκέδαση, λόγω του συλλογικού χαρακτήρα τους. Αυτές οι συλλογικές διεγέρσεις μπορούν να περιγραφούν ως αποτέλεσμα στατικών και δυναμικών παραμορφώσεων, οι οποίες προκαλούν τη δόνηση και την περιστροφή του ρευστού του πυρήνα.

Για παραμορφωμένους πυρήνες υπάρχουν ποικίλα συλλογικά πρότυπα. Σημειώνεται ότι το σφαιρικό πρότυπο οπτικού δυναμικού της εξίσωσης (2.1.1.2), περιγράφεται με αναφορά στην ακτίνα του πυρήνα, $R_i = r_i A^{1/3}$. Για παραμορφωμένους πυρήνες αυτή η έκφραση γενικεύεται ώστε να περιλαμβάνει και συλλογικές κινήσεις. Παρακάτω περιγράφονται ορισμένα από αυτά τα συλλογικά πρότυπα:

A. Συμμετρικά περιστρεφόμενο πρότυπο (Symmetric rotational model).

Στο συγκεκριμένο πρότυπο, οι ακτίνες των διάφορων όρων του OMP εκφράζονται ως

$$R_i = r_i A^{1/3} [1 + \sum_{\lambda=2,4,\dots} \beta_\lambda Y_\lambda^0(\theta, \varphi)] \quad (2.1.3.1)$$

όπου τα β_λ είναι οι παράμετροι μόνιμης και στατικής παραμόρφωσης, ενώ οι Y συναρτήσεις είναι οι σφαιρικές αρμονικές. Η τετραπολική παραμόρφωση β_2 παίζει κύριο ρόλο στη διαδικασία της αλληλεπίδρασης. Οι μεγαλύτερης τάξης παραμορφώσεις β_λ (με $\lambda=4,6,\dots$) είναι μικρότερες σε μέγεθος από τη β_2 . Η συμπερίληψη των β_4 και β_6 παραμορφώσεων στους υπολογισμούς συζευγμένων καναλιών παράγει αλλαγές στις προβλέψεις, αλλά γενικά, μόνο το β_2 και β_4 είναι σημαντικά για την περιγραφή της ανελαστικής σκέδασης στα πρώτα επίπεδα μιας ζώνης περιστροφής (**rotational band**). Η βάση δεδομένων, παραμέτρων

πυρηνικών προτύπων του κώδικα EMPIRE προσδιορίζει το αν ένα περιστρεφόμενο πρότυπο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για συγκεκριμένο πυρήνα, μαζί με τις περιλαμβανόμενες παραμέτρους καταστάσεων και παραμόρφωσης. Επίσης, μπορεί να προσδιοριστεί μια παράμετρος παραμόρφωσης β_λ , όπως και ένα μήκος παραμόρφωσης (deformation length) $\delta_\lambda = \beta_\lambda r_i A^{1/3}$. Το μήκος παραμόρφωσης γενικά προτείνεται καθώς έχει περισσότερη φυσική σημασία από το β_λ και δεν εξαρτάται από την ενέργεια της πρόσπτωσης του βλήματος. Λαμβάνουμε το δ_λ ίδιο για τα τρία μέρη του OMP V_V , W_V και W_D , ενώ αφήνουμε ανέπαφο το κομμάτι του σπιν-τροχιάς δυναμικού. Το ίδιο ισχύει για τα πρότυπα δόνησης (vibrational) και τα συλλογικά πρότυπα.

B. Πρότυπο Αρμονικής Δόνησης (Harmonic vibrational model)

Ένας δονούμενος πυρήνας έχει μια σφαιρικά συμμετρική βασική κατάσταση. Στα πρότυπα αρμονικής δόνησης, οι ακτίνες των διάφορων όρων του OMP εκφράζονται ως:

$$R_i = r_i A^{1/3} [1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu} Y_\lambda^\mu(\theta, \varphi)] \quad (2.1.3.2)$$

Όπου ο τελεστής $\alpha_{\lambda\mu}$ μπορεί να συσχετιστεί με τις παραμέτρους παραμόρφωσης β_λ , περιγράφοντας το πλάτος της δόνησης πολυπολικότητας λ . Διευρύνοντας το OMP στη πρώτη ή τη δεύτερη τάξη αυτής της ακτίνας, δίνει τις εκφράσεις του OMP για τη διέγερση της κατάστασης ενός φωνονίου (πρότυπο δόνησης πρώτης τάξης-first order vibrational model) ή δύο φωνονίων (πρότυπο δόνησης δεύτερης τάξης) [18]. Για έναν δονούμενο πυρήνα, ο ελάχιστος αριθμός σταθμών για σύζευξη είναι δύο. Για περιττούς-περιττούς πυρήνες, χρησιμοποιούμε την $(0^+, 2^+)$ σύζευξη, όπου το 2^+ επίπεδο είναι μια διέγερση τετραπολικού φωνονίου. Το επίπεδο του συστήματος ενός δονούμενου πυρήνα συχνά αποτελείται από τη στάθμη ενός φωνονίου (one-phonon state) (2^+) συνοδευόμενο από μια $(0^+, 2^+, 4^+)$ τριάδα σταθμών δύο φωνονίων. Όταν συμβαίνει αυτό, όλα τα επίπεδα περιλαμβάνονται στο σύστημα σύζευξης με το σχετιζόμενο μήκος παραμόρφωσης δ_2 (ή της παραμέτρου παραμόρφωσης β_2).

Γ. Πρότυπο Περιστρεφόμενης Δόνησης (Vibration Rotation model)

Σε συγκεκριμένα νουκλίδια, το ενεργειακό διάγραμμα (level scheme) του συστήματος αποτελείται από μία ή περισσότερες ζώνες περιστροφής (rotational bands), αλλά κι από μια ή περισσότερες ζώνες δόνησης (vibrational bands), οι οποίες μπορούν να συμπεριληφθούν στο σύστημα σύζευξης.

Δ. Προσέγγιση Born για το Παραμορφωμένο Κύμα (distorted wave Born approximation-DWBA)

Το πρότυπο αυτό είναι έγκυρο μόνο για μικρές παραμορφώσεις. Μέχρι την άφιξη πιο γενικών φορμαλισμών συζευγμένων καναλιών, το πρότυπο DWBA ήταν η πιο συνήθης μέθοδος

περιγραφής ανελαστικής σκέδασης για ασθενώς και ισχυρά συζευγμένων ενεργειακών επιπέδων (energy levels) [19]. Στον κώδικα EMPIRE, το DWBA χρησιμοποιείται:

- Αν δεν είναι διαθέσιμο κάποιο OMP παραμόρφωσης (deformed OMP). Αυτό εφαρμόζεται για σφαιρικά OMPs, τα οποία είναι όλα βασιζόμενα μόνο στις παρατηρήσιμες ελαστικές σκεδάσεις. Επομένως, αν δεν έχουμε κατασκευάσει ένα δυναμικό συζευγμένων καναλιών, ο κώδικας EMPIRE, θα χρησιμοποιήσει αυτόματα παραμέτρους παραμόρφωσης για υπολογισμούς DWBA.
- Αν κάποιο OMP παραμόρφωσης χρησιμοποιείται μόνο για τις πρώτες διεγερμένες καταστάσεις. Για τα ενεργειακά επίπεδα που δεν ανήκουν σε αυτό το βασικό σύστημα σύζευξης (coupled scheme), π.χ. για καταστάσεις σε σχετικά μεγαλύτερη ενέργεια διέγερσης, χρησιμοποιούμε το DWBA με πολύ μικρές παραμέτρους παραμόρφωσης.

2.2 Πυκνότητες Καταστάσεων Πυρήνα

Οι πυκνότητες καταστάσεων σε υψηλές ενέργειες διέγερσης είναι αναγκαίες σε στατιστικά μοντέλα για την πρόβλεψη πυρηνικών αντιδράσεων, όπου πληροφορίες διακριτών καταστάσεων δεν διατίθενται ή είναι ελλιπείς [20,21]. Μαζί με το πρότυπο οπτικού δυναμικού, μια έγκυρη πυκνότητα καταστάσεων είναι το πιο κρίσιμο συστατικό για ένα αξιόπιστο θεωρητικό υπολογισμό ενεργών διατομών, γωνιακών κατανομών κ.α. Αυτός είναι και ένας από τους λόγους που οι πυκνότητες καταστάσεων έχουν μελετηθεί διεξοδικά στο παρελθόν. Η υπάρχουσα βιβλιογραφία επί του θέματος αποτελείται από μια σειρά μοντέλων, που κυμαίνονται από τις μικροσκοπικές πυκνότητες καταστάσεων που λαμβάνονται απευθείας από συνδυαστικές μεθόδους και Hartree–Fock προσεγγίσεις, μέχρι τις φαινομενολογικές αναλυτικές εκφράσεις-φόρμουλες που μέχρι σήμερα χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς πυρηνικών αντιδράσεων. Πρακτικά, προτιμώνται οι μικροσκοπικές προσεγγίσεις, ενώ ο συνδυασμός της προόδου της πυρηνικής φυσικής με τη δραματική αύξηση ισχύος του υπολογιστή, μας έδωσε τη δυνατότητα να μπορέσουμε να πινακοποιήσουμε τις τιμές της πυκνότητας καταστάσεων, για διάφορες τιμές της ομοτιμίας και μεγάλο εύρος τιμών σπιν νουκλιδίων.

Οι περιορισμένες μελέτες για την πυκνότητα καταστάσεων, στην περιοχή χαμηλών ενεργειών διακριτών καταστάσεων ή την ενεργειακή περιοχή γύρω και πάνω από την ενέργεια διαχωρισμού του νετρονίου, επιτάσσουν τη δημιουργία ενός αξιόπιστου και μεγάλου εύρους ενέργειας προτύπου. Η αξιοπιστία των προτύπων πυκνότητας καταστάσεων πλήττεται από ζητήματα όπως η εύρεση ενός κατάλληλου μηχανισμού απόσβεσης των συλλογικών φαινομένων (collective effects) σε υψηλές ενέργειες ή η δυσκολία της εφαρμογής της

πληρότητας του φορμαλισμού και της παραμετροποίησης, σε μεγάλο αριθμό πυρηνικών αντιδράσεων. Στη συνέχεια δίνεται περιγραφή στην παραμετροποίηση των βασικών προτύπων πυκνότητας καταστάσεων που εφαρμόζονται στο EMPIRE, των μαθηματικών σχέσεων και το εύρος των αβεβαιοτήτων στις παραμέτρους των προτύπων αυτών.

2.2.1 Πρότυπο Αερίου Φέρμι (*Fermi Gas Model-FGM*)

Η πυκνότητα καταστάσεων ρ_F Αερίου Φέρμι για σπιν J , ομοτιμία π και ενέργεια διέγερσης E_x είναι:

$$\rho_F(E_x, J, \pi) = \frac{1}{2} \frac{R_F(E_x, J)}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp(2\sqrt{\alpha U})}{a^{1/4} U^{5/4}} \quad (2.2.1.1)$$

όπου ο πρώτος παράγοντας $\frac{1}{2}$ υποδεικνύει την κατανομή ισο-ομοτιμίας (equiparity distribution), ενώ η κατανομή σπιν του Αερίου Φέρμι δίνεται από τον παράγοντα:

$$R_F(E_x, J) = \frac{2J+1}{2\sigma^2} \exp\left[-\frac{(J+\frac{1}{2})}{2\sigma^2}\right] \quad (2.2.1.2)$$

όπου ο παράγοντας αποκοπής σ^2 (*spin cut-off parameter*) δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_F^2(E_x) = R_\sigma \frac{A^{5/3}}{\tilde{\alpha}} \sqrt{\alpha U} \quad (2.2.1.3)$$

με $R_\sigma=0.01389$. Κατά μέσο όρο, η ποσότητα $\sqrt{\alpha U} / \tilde{\alpha}$ έχει την ίδια εξάρτηση μάζας και ενέργειας με τη θερμοκρασία $\sqrt{U/a}$. Οι διαφορές προκύπτουν στις περιοχές με μεγάλες επιδράσεις φλοιών (shell effects).

Με U συμβολίζουμε την αποτελεσματική ενέργεια διέγερσης (*effective excitation energy*) η οποία ορίζεται από τη σχέση $U = E_x - \Delta$, όπου Δ η ενέργεια σύζευξης με τιμή

$$\Delta = \chi \frac{12}{\sqrt{A}} \quad (2.2.1.4)$$

Όπου $\chi=0,1$ ή 2 για περιττούς-περιττούς, περιττούς-άρτιους ή άρτιους-άρτιους πυρήνες αντίστοιχα.

Η παράμετρος α στην πυκνότητα καταστάσεων είναι ενεργειακά εξαρτημένη και λαμβάνει υπόψη την απόσβεση των επιδράσεων του φλοιού (damping of shell effects) σε μεγάλη ενέργεια διέγερσης [20], είναι:

$$\alpha(E_x) = \tilde{\alpha} \left[1 + \delta W \frac{1 - \exp(-\gamma U)}{U} \right] \quad (2.2.1.5)$$

Εδώ ως δW θεωρούμε την ενέργεια διόρθωσης φλοιών (shell correction energy) σε MeV την οποία λαμβάνουμε ως τη διαφορά ανάμεσα στην πραγματική μάζα του πυρήνα και τη μάζα σύμφωνα με το πρότυπο υγρής σταγόνας των Myers και Swiatecki [22]. Η ασυμπτωτική τιμή $\tilde{\alpha}$ πυκνότητας καταστάσεων δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{\alpha} = \alpha A + \beta A^{2/3} \quad (2.2.1.6)$$

στην οποία χρησιμοποιούμε τις παραμέτρους:

$$\alpha = 0.0666, \quad \beta = 0.2587 \quad (2.2.1.7)$$

τις οποίες αποκτούμε από ταυτόχρονη προσαρμογή (fit) των σχετιζόμενων καταστάσεων πυκνότητας του τύπου (2.2.1.1) σε όλες τις μέσες παραμέτρους απόστασης συντονισμών (average resonance spacing parameters) D_0 της βάσης δεδομένων RIPL (Reference Input Parameter Library) [17], στην ενέργεια διαχωρισμού νετρονίου S_n ,

$$\frac{1}{D_0} = \sum_{J=|I-1/2|}^{J=I+1/2} \rho_F(S_n, J, \pi) \quad (2.2.1.8)$$

όπου I το σπιν του στόχου πυρήνα.

Από την ίδια προσαρμογή (fit) αποκτούμε το ακόλουθο συστηματικό τύπο για την παράμετρο γ απόσβεσης φλοιού (shell damping parameter γ),

$$\gamma = \frac{0.459}{A^{1/3}} \text{MeV}^{-1}. \quad (2.2.1.9)$$

2.2.2 Πρότυπο Σταθερής Θερμοκρασίας (Constant temperature model-CTM)

Στο πρότυπο Σταθερής Θερμοκρασίας (CTM), με την παραδοχή σταθερής θερμοκρασίας T σε όλο το ενεργειακό εύρος των καταστάσεων του πυρήνα, η πυκνότητα καταστάσεων υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\rho(E) = \frac{1}{T} \exp[(E - E_0)/T] \quad (2.2.2.1)$$

με E_0 και T ελεύθερες παράμετροι που υπολογίζονται από προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα.

2.2.3 Πρότυπο Gilbert-Cameron

Το πρότυπο αυτό είναι ο συνδυασμός και των δύο προηγούμενων μοντέλων, πρότυπο Σταθερής Θερμοκρασίας-CTM στις χαμηλές ενέργειες και πρότυπο Αερίου Φέρμι-FGM στις υψηλές. Η σύνδεση μεταξύ των παραμέτρων των 2 φορμαλισμών γίνεται απαιτώντας τη

συνέχεια της πυκνότητας καταστάσεων και της πρώτης παραγώγου της ως προς την ενέργεια, σε μία *ενέργεια σύνδεσης* E_m (*matching energy*). Οι απαιτήσεις αυτές οδηγούν στις εξισώσεις:

$$E_m = E_0 + T \ln \rho_{FG}(E_m) \quad (2.2.3.1)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\sqrt{a}}{E_m^*} - \frac{3}{2E_m^*} \quad (2.2.3.2)$$

με E_m^* μια *δραστική ενέργεια* σύνδεσης που περιλαμβάνει τις διορθώσεις λόγω συσχετισμών νουκλεονίων [23]. Η παράμετρος πυκνότητας καταστάσεων a προσδιορίζεται από προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα και είναι σταθερή σε όλο το ενεργειακό εύρος.

2.2.4 *Backshifted Πρότυπο Αερίου Φέρμι (Backshifted Fermi gas model)*

Το πρότυπο αυτό περιέχει το γενικό φορμαλισμό του Αερίου Φέρμι (εξισώσεις 2.2.11 ως 2.2.19) με μια διαφορά: αντί για τον παράγοντα της σταθερής θερμοκρασίας (CTM), το πρότυπο αυτό είναι εκφρασμένο με όρους μιας αποτελεσματικής ενέργειας διέγερσης (effective excitation energy) $U = E_x - \Delta^{BFM}$, όπου η ενεργειακή μεταβολή (energy shift) δίνεται από τον τύπο:

$$\Delta^{BFM} = \chi \frac{12}{\sqrt{A}} + \delta \quad (2.2.4.1)$$

με

$$\chi = -1, \text{ για περιττούς - περιττούς}$$

$$\chi = 0, \text{ για περιττούς - άρτιους}$$

$$\chi = 1, \text{ για άρτιους - άρτιους} \quad (2.2.4.2)$$

Και δ μια ρυθμιζόμενη παράμετρος για την προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων ανά πυρήνα. Το πρότυπο αυτό έχει τις δικίες του ασυμπτωτικές παραμέτρους πυκνότητας καταστάσεων a και β .

2.2.5 *Γενικευμένο Πρότυπο Υπερρευστού (Generalized superfluid model)*

Το πρότυπο αυτό λαμβάνει υπόψη υπεραγωγίμους συσχετισμούς ζεύγους (super conductive pairing correlations) σύμφωνα με τη θεωρία των Bardeen-Cooper-Schrieffer. Η φαινομενολογική έκδοση του προτύπου [24,25] χαρακτηρίζεται από μια μετάβαση φάσης (phase transition) από τη συμπεριφορά υπερρευστού στις χαμηλές ενέργειες, όπου οι συσχετισμοί σύζευξης (pairing correlations) επηρεάζουν έντονα την πυκνότητα καταστάσεων, στην περιοχή υψηλών ενεργειών που η πυκνότητα καταστάσεων περιγράφεται από το πρότυπο Αερίου Φέρμι. Το γενικευμένο πρότυπο υπερρευστού (GSM)

διαφοροποιείται επομένως στις υψηλές και τις χαμηλές ενέργειες, θυμίζοντας το πρότυπο σταθερής θερμοκρασίας (CTM), γεγονός που περιγράφεται με φυσικό τρόπο από τη θεωρία χωρίς να εξαρτάται από συγκεκριμένες διακριτές καταστάσεις που καθορίζουν μια αντίστοιχη ενέργεια. Για τις δύο περιοχές ο τύπος υπολογισμού της μονοσωματιδιακής πυκνότητας καταστάσεων $\rho_{SP}(E)$ είναι:

$$\rho_{SP}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \frac{e^S}{\sqrt{D}}, \quad (2.2.5.1)$$

όπου όμως τα διάφορα θερμοδυναμικά μεγέθη, μεταβάλλονται με την ενέργεια με διαφορετικό τρόπο.

2.2.6 Συλλογικά αποτελέσματα στην Πυκνότητας Καταστάσεων (*collective effects in the level density*)

Οι πρώτες διεγερμένες καταστάσεις ενός πυρήνα προκύπτουν από διεγέρσεις φερμιονίων του. Το πρότυπο Αερίου Φέρμι όμως δεν είναι κατάλληλο να περιγράψει τέτοιες καταστάσεις. Παρόλα αυτά, τα πρότυπα που παρουσιάστηκαν ως τώρα, μπορούν να εφαρμοστούν επιτυχώς ενσωματώνοντας τη συλλογικότητα στην πυκνότητα καταστάσεων μέσω μιας κατάλληλης επιλογής τιμών των ενεργειακά εξαρτημένων παραμέτρων της πυκνότητας καταστάσεων.

Σε ορισμένους υπολογισμούς, ειδικά αν η «εξαφάνιση» των συλλογικών αποτελεσμάτων με την ενέργεια διέγερσης παίζουν κάποιο ρόλο (όπως π.χ. στη σχάση), δημιουργείται η ανάγκη μοντελοποίησης των συλλογικών αυτών αποτελεσμάτων με περισσότερες λεπτομέρειες. Τα συλλογικά αποτελέσματα μπορούν να παρασταθούν με τη εισαγωγή συλλογικών συντελεστών ενίσχυσης (*collective enhancement factors*) πάνω από μια ενδογενή πυκνότητα καταστάσεων $\rho_{F,int}(E_x, J, \pi)$. Έτσι, η παραμορφωμένη πυκνότητα καταστάσεων Αερίου Φέρμι $\rho_{F,def}(E_x, J, \pi)$ είναι:

$$\rho_{F,def}(E_x, J, \pi) = K_{rot}(E_x) K_{vib}(E_x) \rho_{F,int}(E_x, J, \pi) \quad (2.2.6.1)$$

ενώ οι ολικές πυκνότητες καταστάσεων $\rho_{F,def}^{tot}$ και $\rho_{F,int}^{tot}$ σχετίζονται με τον ίδιο τρόπο. Οι όροι K_{rot} και K_{vib} καλούνται συντελεστές ενίσχυσης περιστροφής και δόνησης, αντίστοιχα. Λαμβάνοντας υπόψη τους συντελεστές αυτούς, η $\rho_{F,int}(E_x, J, \pi)$ μπορεί να περιγράψει καθαρά μονοσωματιδιακές διεγέρσεις (*single particle excitations*) και να επαναπροσδιοριστεί με τη φόρμουλα του Αερίου Φέρμι.

Η ενίσχυση δόνησης (*vibrational enhancement*) της πυκνότητας καταστάσεων είναι [28]

$$K_{vid} = \exp[\delta S - (\delta U / T)] \quad (2.2.6.2)$$

όπου δS και δU είναι μεταβολές στην εντροπία και την ενέργεια διέγερσης αντίστοιχα λόγω δόνησης, με T τη θερμοκρασία του πυρήνα. Οι μεταβολές αυτές περιγράφονται από τις σχέσεις Αερίου Bose, π.χ.

$$\delta S = \sum_i (2\lambda_i + 1) [(1 + n_i) \ln(1 + n_i) - n_i \ln n_i]$$

$$\delta U = \sum_i (2\lambda_i + 1) \omega_i n_i \quad (2.2.6.3)$$

όπου ω_i είναι οι ενέργειες, λ_i U και n_i οι αριθμοί κατάληψης (occupation numbers) για διεγέρσεις δόνησης σε συγκεκριμένη θερμοκρασία. Η «εξαφάνιση» των συλλογικών ενισχύσεων της πυκνότητας καταστάσεων σε υψηλές θερμοκρασίες μπορεί να υπολογιστεί με τον ορισμό των αριθμών κατάληψης από τον τύπο

$$n_i = \frac{\exp(-\gamma_i / 2\omega_i)}{\exp(\omega_i / T) - 1} \quad (2.2.6.4)$$

Όπου γ_i το πλάτος των διεγέρσεων δόνησης. Το σχετικό αυτό πλάτος των συλλογικών διεγέρσεων στους πυρήνες μπορεί να γραφεί ως:

$$\gamma_i = C(\omega_i^2 + 4\pi^2 T^2) \quad (2.2.6.5)$$

Δίνεται επίσης ένας εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού του συντελεστή δόνησης συλλογικής ενίσχυσης:

$$K_{\text{vib}}(E_x) = \exp(0.0555 A^{\frac{2}{3}} T^{\frac{4}{3}}) \quad (2.2.6.6)$$

Μια πιο σημαντική συμβολή στη συλλογική ενίσχυση της πυκνότητας καταστάσεων, προέρχεται από τις διεγέρσεις περιστροφής. Τα αποτελέσματα είναι πολύ ισχυρότερα ($K_{\text{rot}} \sim 10-100$ ενώ το $K_{\text{vib}} \sim 3$) αλλά η μορφή για την περιστροφική ενίσχυση (*rotational enhancement*) εξαρτάται επίσης από το σχήμα του πυρήνα. Αυτό το καθιστά καίριας σημασίας για την περιγραφή των ενεργών διατομών σχάσης. Η έκφραση για το συντελεστή ενίσχυσης περιστροφής εξαρτάται από την παραμόρφωση [17,26]. Το K_{rot} είναι ίσο με την κάθετη παράμετρο τερματισμού ιδιοπεριστροφής (perpendicular spin cut-off parameter) σ_{\perp}^2 ,

$$\sigma_{\perp}^2 = I_{\perp} T \quad (2.2.6.7)$$

ενώ η ροπή αδράνειας του στερεού σώματος (*rigid body*), κάθετη στον άξονα συμμετρίας δίνεται από τη σχέση:

$$I_{\perp} = I_0 \left(1 + \frac{\beta_2}{3}\right) = 0.01389 A^{5/3} \left(1 + \frac{\beta_2}{3}\right) \quad (2.2.6.8)$$

όπου β_2 η τετραπολική παραμόρφωση βασικής κατάστασης, την οποία λαμβάνουμε από τις βάσεις πυρηνικών δεδομένων. Συνεπώς,

$$\sigma_{\perp}^2 = 0.01389 A^{5/3} \left(1 + \frac{\beta_2}{3} \sqrt{\frac{U}{a}}\right) \quad (2.2.6.9)$$

Για μεγάλες ενέργειες διέγερσης, είναι γνωστό ότι η περιστροφική συμπεριφορά εξαφανίζεται. Λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός αυτό, εισάγεται μια φαινομενολογική συνάρτηση απόσβεσης $f(E_x)$ που ισούται με 1 στην περίπτωση καθαρής παραμόρφωσης και 0 στη σφαιρική περίπτωση. Η έκφραση για την πυκνότητα καταστάσεων τότε γίνεται:

$$\begin{aligned} \rho(E_x, J, \pi) &= [1 - f(E_x)] K_{\text{vib}}(E_x) \rho_{F,\text{int}}(E_x, J, \pi) + f(E_x) \rho_{F,\text{def}}(E_x, J, \pi) \\ &= K_{\text{rot}}(E_x) K_{\text{vib}(E_x)} \rho_{F,\text{int}}(E_x, J, \pi) \end{aligned} \quad (2.2.6.10)$$

όπου

$$K_{\text{rot}}(E_x) = \max(1 + [\sigma_{\perp}^2 - 1] f(E_x), 1) \quad (2.2.6.11)$$

Η συνάρτηση $f(E_x)$ λαμβάνεται από ένα συνδυασμό συναρτήσεων Φέρμι,

$$f(E_x) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_x - E_{\text{col}}^{g.s.}}{d_{\text{col}}^{g.s.}}\right)} \quad (2.2.6.12)$$

ο οποίος δίνει την επιθυμητή ιδιότητα του K_{rot} να τείνει στο 1 για μεγάλες ενέργειες διέγερσης. Δεν υπάρχουν αρκετά στοιχεία για τις παραμέτρους που κυριαρχούν σε αυτήν την απόσβεση, παρόλα αυτά στο EMPIRE παίρνουν τιμές $E_{\text{col}}^{g.s.} = 30\text{MeV}$ και $d_{\text{col}}^{g.s.} = 5\text{MeV}$.

Τέλος, αυτές οι συλλογικές εκφράσεις ενίσχυσης μπορούν να εφαρμοστούν σε διάφορα φαινομενολογικά πρότυπα πυκνότητας καταστάσεων πυρήνα. Ο φορμαλισμός CTM μπορεί να διευρυνθεί με σαφή συλλογική ενίσχυση, και η ολική πυκνότητα καταστάσεων για παράδειγμα μπορεί να γίνει

$$\begin{aligned} \rho^{\text{tot}}(E_x) &= \rho_T^{\text{tot}}(E_x) \text{ αν } E_x \leq E_M \\ \rho^{\text{tot}}(E_x) &= K_{\text{rot}}(E_x) K_{\text{vib}}(E_x) \rho_{F,\text{int}}^{\text{tot}}(E_x), \text{ αν } E_x \geq E_M \end{aligned} \quad (2.2.6.13)$$

και αντίστοιχα για την πυκνότητα καταστάσεων $\rho(E_x, J, \pi)$.

2.2.7 Μικροσκοπικές Πυκνότητες Καταστάσεων Πυρήνα

Εκτός των φαινομενολογικών προτύπων στον κώδικα EMPIRE υπάρχει η δυνατότητα χρήσης πιο μικροσκοπικών προσεγγίσεων. Με βάση τους υπολογισμούς Hartree-Fock και τη βάση δεδομένων RIPL, ο Goriely [27] εκτίμησε πυκνότητες καταστάσεων πυρήνων για ενέργειες διεγέρσεων ως 150 MeV και για τιμές σπίν ως $I=30$. Ο Goriely με τον Hilaire [28], χρησιμοποίησαν ένα συνδυαστικό μικροσκοπικό πρότυπο, που περιλαμβάνει μικροσκοπικούς υπολογισμούς της ενδογενούς πυκνότητας καταστάσεων (intrinsic state Density), ενώ η μόνη

φαινομενολογική πτυχή του είναι μια συνάρτηση απόσβεσης για τις επιδράσεις περιστροφής. Με αυτόν τον τρόπο, πυκνότητες καταστάσεων 8500 πυρήνων έγιναν διαθέσιμες σε μορφή πίνακα, για ενέργειες μέχρι 200 MeV και σπιν ως $J=49$.

Η προσαρμογή αυτών των μικροσκοπικών πυκνοτήτων καταστάσεων με τα πειραματικά δεδομένα γίνεται με τη βοήθεια της συνάρτησης,

$$\rho(E_x, J, \pi) = \exp(C_{\text{HFM}} \sqrt{E_x - \delta_{\text{HFM}}}) \rho_{\text{HFM}}(E_x - \delta_{\text{HFM}}, J, \pi) \quad (2.2.7.1)$$

με C_{HFM} και δ_{HFM} να λαμβάνουν τιμές από τους πίνακες. Η μετατόπιση σύζευξης (*pairing shift*) δ_{HFM} σημαίνει τη λήψη της πυκνότητας καταστάσεων από τον πίνακα σε μια διαφορετική ενέργεια. Η σταθερά C_{HFM} παίζει παρόμοιο ρόλο με τη παράμετρο α της πυκνότητας καταστάσεων στα φαινομενολογικά πρότυπα. Η ταυτόχρονη ρύθμιση των C_{HFM} και δ_{HFM} δίνει ευελιξία προσαρμογής σε χαμηλές και υψηλές ενέργειες.

2.3 Συναρτήσεις Ισχύος Ακτινοβολίας- γ (*Gamma ray Strength Functions*)

Οι συντελεστές διάδοσης ακτινοβολίας- γ (*gamma ray transmission coefficients*) είναι σημαντικοί για την περιγραφή του καναλιού της εκπομπής ακτινοβολίας- γ στις πυρηνικές αντιδράσεις. Όπως και οι συντελεστές διάδοσης σωματιδίων (*particle transmission coefficients*) που προκύπτουν από το οπτικό πρότυπο, οι συντελεστές διάδοσης ακτινοβολίας- γ μπαίνουν στο πρότυπο των Hauser-Feshbach για τον υπολογισμό του ανταγωνισμού των φωτονίων σε σχέση με άλλα σωματίδια.

Οι συντελεστές διάδοσης ακτινοβολίας- γ για πολυπολικότητα ℓ

$$T_{X\ell}(E_\gamma) = 2\pi f_{X\ell}(E_\gamma) E_\gamma^{2\ell+1} \quad (2.3.1)$$

όπου E_γ δηλώνει την ενέργεια γ και $f_{X\ell}(E_\gamma)$ την ενεργειακά εξαρτημένη συνάρτηση ισχύος ακτινοβολίας- γ .

2.3.1 Πρότυπα για Συναρτήσεις Ισχύος Ακτινοβολίας- γ

Στον κώδικα EMPIRE χρησιμοποιούνται τέσσερα πρότυπα για τις συγκεκριμένες συναρτήσεις. Το πρώτο καλείται Brink-Axel [29], στο οποίο μια κλασική λορεντζιανή μορφή περιγράφει το σχήμα του γιγάντιου διπολικού συντονισμού (*giant dipole resonance shape*),

$$f_{X\ell}(E_\gamma) = K_{X\ell} \frac{\sigma_{X\ell} E_\gamma \Gamma_{X\ell}^2}{(E_\gamma^2 - E_{X\ell}^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_{X\ell}^2} \quad (2.3.1.1)$$

όπου $\sigma_{X\ell}$, $E_{X\ell}$ και $\Gamma_{X\ell}$ η ισχύς, η ενέργεια και το πλάτος των γιγάντιων συντονισμών αντίστοιχα, ενώ:

$$K_{X\ell} = \frac{1}{(2\ell + 1)\pi^2 \hbar^2 c^2} \quad (2.3.1.2)$$

Επί του παρόντος, χρησιμοποιούμε την επιλογή Brink-Axel για όλους τους τύπους μεταβάσεων (transmission types) εκτός του E1. Για την ακτινοβολία E1, χρησιμοποιείται στο EMPIRE μια γενικευμένη Λορεντζιανή μορφή των Kordecky και Uhl [30],

$$f_{E1}(E_\gamma, T) = K_{E1} \left(\frac{E_\gamma \tilde{\Gamma}_{E1}(E_\gamma)}{(E_\gamma^2 - E_{E1}^2)^2 + E_\gamma^2 \tilde{\Gamma}_{E1}(E_\gamma)^2} + \frac{0.7 \Gamma_{E1} 4\pi^2 T^2}{E_{E1}^3} \right) \sigma_{E1} \Gamma_{E1} \quad (2.3.1.3)$$

όπου το ενεργειακά εξαρτημένο πλάτος απόσβεσης $\tilde{\Gamma}_{E1}(E_\gamma)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{\Gamma}_{E1}(E_\gamma) = \Gamma_{E1} \frac{E_\gamma^2 + 4\pi^2 T^2}{E_{E1}^2} \quad (2.3.1.4)$$

και T η θερμοκρασία του πυρήνα που δίνεται [42] από τη σχέση:

$$T = \sqrt{\frac{E_n + S_n - \Delta - E_\gamma}{\alpha(S_n)}} \quad (2.3.1.5)$$

όπου S_n η ενέργεια διαχωρισμού νετρονίου, E_n η ενέργεια του προσπίπτοντος νετρονίου, Δ η διόρθωση σύζευξης και α η παράμετρος πυκνότητας καταστάσεων στην ενέργεια S_n .

Για τις μεταβάσεις E1, υπάρχουν παράμετροι για διάφορα νουκλίδια που είναι καταχωρημένες στις βάσεις δεδομένων του κώδικα. Για όλες τις μεταβάσεις εκτός της E1, χρησιμοποιείται μια συστηματική σχέση του Kordecky [30] για τις παραμέτρους συντονισμού που χρησιμοποιούνται. Για τις μεταβάσεις E1 που δεν υπάρχουν στοιχεία στους πίνακες δεδομένων, έχουμε:

$$\begin{aligned} \sigma_{E1} &= 1.2 \times 120NZ / (A\pi\Gamma_{E1}) \text{mb}, \\ E_{E1} &= 31.2A^{-1/3} + 20.6A^{-1/6} \text{MeV}, \\ \Gamma_{E1} &= 0.026E_{E1}^{1.91} \text{MeV} \end{aligned} \quad (2.3.1.6)$$

Για μεταβάσεις E2 χρησιμοποιούμε:

$$\begin{aligned} \sigma_{E2} &= 0.00014Z^2 E_{E2} / (A^{1/3} \Gamma_{E2}) \text{mb} \\ E_{E2} &= 63A^{-1/3} \text{MeV}, \\ \Gamma_{E2} &= 6.11 - 0.012A \text{MeV} \end{aligned} \quad (2.3.1.7)$$

Για ακτινοβολίες υψηλότερης πολυπολικότητας της E2 είναι:

$$\begin{aligned}
\sigma_{E\ell} &= 8.10^4 \sigma_{E(\ell-1)} \\
E_{E\ell} &= E_{E(\ell-1)} \\
\Gamma_{E\ell} &= \Gamma_{E(\ell-1)}
\end{aligned} \tag{2.3.1.8}$$

Ενώ για μεταβάσεις M1 είναι

$$\begin{aligned}
f_{M1} &= 1.58A^{0.47} \text{ στα } 7 \text{ MeV,} \\
E_{M1} &= 41.A^{-1/3} \text{ MeV,} \\
\Gamma_{M1} &= 4 \text{ MeV}
\end{aligned} \tag{2.3.1.9}$$

όπου η εξίσωση (2.3.1.1) πρέπει να τροποποιηθεί στα 7 MeV για να λάβουμε την τιμή της σ_{M1} . Για πολυπολική ακτινοβολία υψηλότερη της M1, έχουμε:

$$\sigma_{M\ell} = 8.1^4 \sigma_{M(\ell-1)}, E_{M\ell} = E_{M(\ell-1)}, \Gamma_{M\ell} = \Gamma_{M(\ell-1)} \tag{2.3.1.10}$$

Παρέχονται επίσης δύο μικροσκοπικές επιλογές για την ακτινοβολία E1, με συναρτήσεις ισχύος ακτινοβολίας- γ υπολογιζόμενες σύμφωνα με το πρότυπο BCS των Hartree-Fock και του προτύπου Hartree-Fock-Bogolyubov [17]. Επειδή αυτές οι μικροσκοπικές συναρτήσεις ισχύος (microscopical strength functions), f_{HFM} , δεν έχουν προσαρμοστεί σε πειραματικά δεδομένα, προσθέτουμε μια ευελιξία προσαρμογής μέσω μιας συνάρτησης,

$$f_{E1}(E_\gamma) = f^{\text{nor}} f_{HFM}(E_\gamma + E_{\text{shift}}) \tag{2.3.1.11}$$

όπου $f^{\text{nor}}=1$ και $E_{\text{shift}}=0$ ως προεπιλογή. Ο όρος E_{shift} δηλώνει ότι λαμβάνεται η πυκνότητα καταστάσεων από τη βάση δεδομένων για διάφορες ενέργειες. Η ταυτόχρονη ρύθμιση των f^{nor} και E_{shift} μας δίνει την ζητούμενη ευελιξία προσαρμογής.

2.3.2 Επανακανονικοποίηση των Συναρτήσεων Ισχύος Ακτινοβολίας- γ

(renormalization of gamma-ray strength functions)

Σε επαρκώς χαμηλές ενέργειες προσπιπτόντων νετρονίων, το μέσο πλάτος ραδιενεργού σύλληψης Γ_γ (the average radiative capture width Γ_γ) οφείλεται αποκλειστικά στην αλληπίδραση s-κύματος (s-wave interaction), ενώ σε ενέργειες νετρονικού διαχωρισμού S_n , χρησιμοποιείται για την κανονικοποίηση των συντελεστών διάδοσης ακτινοβολίας- γ [31]. Οι τιμές Γ_γ , όταν είναι διαθέσιμες, διαβάζονται από τη βάση πυρηνικών δεδομένων. Για νουκλίδια για τα οποία δεν υπάρχουν πειραματικά δεδομένα, με $40 < A < 250$ χρησιμοποιούμε τον πίνακα παρεμβολής (interpolation) του Kopecky, ενώ για $A > 250$ ισχύει:

$$\Gamma_\gamma = 1593 / A^2 \text{ eV} \quad (2.3.2.1)$$

Επίσης, για $A < 40$ δεν εφαρμόζουμε κανονικοποίηση.

Το πλάτος ακτινοβολίας s-κύματος μπορεί να βρεθεί ολοκληρώνοντας τους συντελεστές διάδοσης ακτινοβολίας-γ ως προς την πυκνότητα των τελευταίων καταστάσεων που μπορεί να προκύψουν από το πρώτο βήμα της *gamma ray cascade*. Η κανονικοποίηση τότε διεξάγεται ως εξής,

$$\frac{2\pi\Gamma_\gamma}{D_0} = G_{\text{norm}} \sum_J \sum_\Pi \sum_{X\ell} \sum_{I'=|J-\ell|}^{J+\ell} \sum_{\Pi'} \int_0^{S_n} dE_\gamma T_{X\ell}(E_\gamma) \rho(S_n - E_\gamma, I', \pi') f(X, \pi', \ell) \quad (2.3.2.2)$$

όπου D_0 ο μέση απόσταση μεταξύ των συντονισμών (average resonance spacing) και ρ η πυκνότητα καταστάσεων. Το άθροισμα J, π αναφέρεται στις καταστάσεις σύνθετου πυρήνα με σπιν J και ομοτιμία π που μπορούν να σχηματιστούν με προσπίπτοντα σωματίδια s-κύματος, ενώ τα I', π' παριστάνουν το σπιν και την ομοτιμία των τελικών καταστάσεων. Οι κανόνες επιλογής πολυπολικότητας (multipole selection rules) είναι $f(E, \pi', \ell) = 1$ αν $\pi = \pi'(-1)^\ell$, $f(M, \pi', \ell) = 1$ αν $\pi = \pi'(-1)^{\ell+1}$ και σε άλλη περίπτωση 0. Το ολοκλήρωμα επί του E_γ περιλαμβάνει το άθροισμα διακριτών καταστάσεων. Το G_{norm} είναι ο παράγοντας κανονικοποίησης που εγγυάται την ισότητα (2.3.2.2). Πρακτικά, οι συντελεστές διάδοσης (2.3.1) μπορούν να πολλαπλασιαστούν με τον παράγοντα G_{norm} πριν εισαχθούν στους υπολογισμούς της πυρηνικής αντίδρασης, έχοντας ως προεπιλεγμένη τιμή το αποτέλεσμα της εξίσωσης (2.3.2.2).

2.3.3 Ενεργός Διατομή Απορρόφησης φωτονίων (*Photoabsorption cross section*)

Σύμφωνα με τον Chadwick [32] η ενεργός διατομή απορρόφησης φωτονίων δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{\text{abs}}(E_\gamma) = \sigma_{\text{GDR}}(E_\gamma) + \sigma_{\text{QD}}(E_\gamma) \quad (2.3.3.1)$$

Ο όρος GDR σχετίζεται με τις συναρτήσεις ισχύος που περιγράφονται παραπάνω, ενώ δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{\text{GDR}}(E_\gamma) = \sum_i \sigma_{\text{E1},i} \frac{(E_\gamma \Gamma_{E_{1,i}})^2}{(E_\gamma^2 - E_{\text{E1},i}^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_{E_{1,i}}^2} \quad (2.3.3.2)$$

Το άθροισμα επί του i ισχύει για μεγαλύτερους αριθμούς από τον αριθμό των τμημάτων στα οποία χωρίζεται το GDR.

Ο όρος ψεύδο-δευτερίου (quasi-deuteron component) σ_{QD} δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{\text{QD}}(E_\gamma) = L \frac{NZ}{A} \sigma_d(E_\gamma) f(E_\gamma) \quad (2.3.3.3)$$

Εδώ, το $\sigma_d(E_\gamma)$ είναι η πειραματική ενεργός διατομή φωτο-αποσύνθεσης (photo-disintegration cross section), και παραμετροποιείται ως εξής:

$$\sigma_d(E_\gamma) = 61.2 \frac{(E_\gamma - 2.224)^{3/2}}{E_\gamma^3} \quad (2.3.3.4)$$

για $E_\gamma > 2.224 \text{ MeV}$, ενώ είναι 0 σε άλλη περίπτωση. Η παράμετρος Levinger είναι $L=6.5$ και η συνάρτηση Pauli υπολογίζεται προσεγγιστικά από την πολυωνυμική έκφραση:

$$f(E_\gamma) = 8.371410^{-2} - 9.834310^{-3} E_\gamma + 4.122210^{-4} E_\gamma^2 - 3.476210^{-6} E_\gamma^3 + 9.353710^{-9} E_\gamma^4 \quad (2.3.3.5)$$

για $20 < E_\gamma < 140 \text{ MeV}$,

$$f(E_\gamma) = \exp(-73.3 / E_\gamma) \quad (2.3.3.6)$$

για $E_\gamma < 20 \text{ MeV}$, και

$$f(E_\gamma) = \exp(-24.2348 / E_\gamma) \quad (2.3.3.7)$$

για $E_\gamma > 140 \text{ MeV}$.

2.4 Αντιδράσεις Σύνθετου Πυρήνα (Compound Nucleus

Reactions)

Η ορολογία «Αντίδραση Σύνθετου Πυρήνα» χρησιμοποιείται συνήθως για δύο διαφορετικές διεργασίες: (1) τη σύλληψη του βλήματος από τον πυρήνα στόχο και το σχηματισμό ενός «σύνθετου πυρήνα» που στη συνέχεια εκπέμπει σωματίδια ή ακτινοβολία-γ, (2) πολλαπλές εκπομπές από την αλυσίδα των εναπομειναντων διεγερμένων νουκλιδίων που ακολουθούν την διττή αυτή αντίδραση. Για την περιγραφή μιας πυρηνικής αντίδρασης είναι αναγκαία τα στοιχεία και των δύο ερμηνειών. Στις χαμηλές ενέργειες η (1) παίζει καθοριστικό ρόλο και διαφέρει από την (2) σε δύο σημαντικά σημεία:

- I. Στην παρουσία διορθώσεων διακύμανσης πλάτους (width fluctuation corrections) στην έκφραση του σύνθετου πυρήνα
- II. Στις μη ισοτροπικές, αλλά ακόμη συμμετρικές, γωνιακές κατανομές.

Σύμφωνα με τη σχέση $a + X \rightarrow C^* \rightarrow Y + b$, σωματίδιο a αλληλεπιδρά με τον πυρήνα X και έπειτα από σκεδάσεις στο εσωτερικού του πυρήνα, σχηματίζεται ο σύνθετος πυρήνας C , ο οποίος υποθέτουμε ότι βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία. Η συμπεριφορά του πυρήνα αυτού δεν εξαρτάται από τον τρόπο που δημιουργήθηκε, επομένως θα αποδιεγερθεί με τρόπο ανεξάρτητο του τρόπου δημιουργίας του (αρχή ανεξαρτησίας Bohr). Η ενεργός διατομή της αντίδρασης $X(a,b)Y$ δίνεται από τον τύπο:

$$\sigma_{ab} = \sigma_a P_b \quad (2.4.1)$$

με σ_a την ενεργό διατομή του σχηματισμού του σύνθετου πυρήνα C και P_b την πιθανότητα αποδιέγερσης με εκπομπή του σωματιδίου b .

Η ενεργός διατομή απορρόφησης σωματιδίου a και σχηματισμού σύνθετου πυρήνα C υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\sigma_a = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) T_\ell(\epsilon) \quad (2.4.2)$$

Υποθέτοντας ότι η ανεξαρτησία ισχύει για ενεργές διατομές που αντιστοιχούν σε δεδομένες τιμές της στροφορμής και της ομοτιμίας, εξετάζουμε πρώτα την απλούστερη περίπτωση καναλιών εισόδου και εξόδου, περιλαμβάνοντας σωματίδια χωρίς σπιν. Η νέα υπόθεση ανεξαρτησίας μπορεί να εκφραστεί για ένα τυχαίο κανάλι εισόδου χρησιμοποιώντας τους συντελεστές διάδοσης T_ℓ (transmission coefficients) στη σχέση:

$$\sigma_{ab} = \left[\frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) T_\ell(\epsilon_a) \right] P_b \quad (2.4.3)$$

με ϵ_a την ενέργεια του σωματιδίου βλήματος a . Από το θεώρημα της αντιστροφής [33], προκύπτει ότι ο λόγος των πιθανοτήτων αποδιέγερσης σύνθετου πυρήνα για τυχαίο ζεύγος καναλιών εξόδου είναι ίσος με το λόγο των αντίστοιχων συντελεστών διάδοσης:

$$\frac{P_a}{T_\ell(\epsilon_a)} = \frac{P_b}{T_\ell(\epsilon_b)} \quad (2.4.4)$$

με ϵ_b την ενέργεια εκπομπής σωματιδίου b κατά την αποδιέγερση του σύνθετου πυρήνα C . Επομένως, η πιθανότητα αποδιέγερσης με εκπομπή σωματιδίου b , στην περίπτωση της αντίδρασης $X(a,b)Y$, για συγκεκριμένες τιμές στροφορμής και ομοτιμίας είναι:

$$P_b = \frac{T_\ell(\epsilon_b)}{\sum_\gamma T_{\gamma,\ell}} \quad (2.4.5)$$

όπου στον παρονομαστή το άθροισμα παριστάνει όλα τα γ επιτρεπτά κανάλια εξόδου.

Για τη γενίκευση της σχέσης (2.4.4), υποθέτουμε πως υπάρχουν $\Omega(E_B^*)$ καταστάσεις ενέργειας E_B^* ή αλλιώς, πυκνότητα καταστάσεων ίση με $\rho_B(E_B^*) = \frac{\Omega_B(E_B^*)}{\Delta E}$. Η πιθανότητα αποδιέγερσης σε οποιαδήποτε από αυτές τις καταστάσεις μπορεί να βρεθεί πολλαπλασιάζοντας τη σχέση (2.4.4) με το $\Omega(E_B^*)$. Επομένως αν για κάθε τελική ενέργεια επιτρεπτού καναλιού εξόδου ισχύει το ίδιο, τότε ισχύει:

$$P_b = \frac{T_\ell(\epsilon_b)\rho_B(E_B^*)}{\sum_\gamma T_{\gamma,\ell}\rho_G(E_G^*)} \quad (2.4.6)$$

με $\rho_G(E_G^*)$ την πυκνότητα καταστάσεων για το κανάλι εξόδου γ .

Από τα παραπάνω, η ενεργός διατομή στη θεωρία Hauser-Feshbach για σωματίδια χωρίς σπιν υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\sigma_{ab} = \sum_\ell \frac{\pi}{k^2} (2\ell+1) T_\ell(\epsilon_a) \frac{T_\ell(\epsilon_b)\rho_B(E_B^*)}{\sum_\gamma T_{\gamma,\ell}\rho_G(E_G^*)} \quad (2.4.7)$$

Για σωματίδια με σπιν, θεωρώντας ότι η συνολική στροφορμή και η ομοτιμία διατηρούνται κατά την αντίδραση, η ενεργός διατομή για το σχηματισμό τελικών καταστάσεων ενέργειας E_B^* και στροφορμής S' υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \sigma_{ab}(J, S') &= \sigma_a(J) \frac{\sum_{\ell_j, \ell', j'} T_{\ell'}(\epsilon_b)\rho_B(E_B^*, S')}{\sum_{\gamma, \ell'', j''} T_{\gamma, \ell''}\rho_G(E_G^*)} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell, j} (2\ell+1) g_a T_\ell(\epsilon_a) \frac{\sum_{\ell_j, \ell', j'} T_{\ell'}(\epsilon_b)\rho_B(E_B^*, S')}{\sum_{\gamma, \ell'', j''} T_{\gamma, \ell''}\rho_G(E_G^*)} \\ \sigma_{ab} &= \frac{\pi}{k^2} \frac{(2J+1)}{(2s+1)(2S+1)} \frac{\sum_{\ell_j, \ell', j'} T_\ell(\epsilon_a) T_{\ell'}(\epsilon_b)\rho_B(E_B^*, S')}{\sum_{\gamma, \ell'', j''} T_{\gamma, \ell''}\rho_G(E_G^*)} \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

με τις τονούμενες ποσότητες να αναφέρονται στο κανάλι εξόδου της αντίδρασης. Ο στατιστικός παράγοντας g_a πολλαπλασιάζει την ποσότητα $(2\ell+1)$, και για να δώσει την ενεργό διατομή για δεδομένη ολική στροφορμή J πολλαπλασιάζεται με την πιθανότητα $\frac{(2j+1)}{(2s+1)(2S+1)}$ να προκύψει τιμή στροφορμής j για το κανάλι εισόδου, σε συνδυασμό με τα

σπιν του βλήματος s και του πυρήνα-στόχου S , επί την πιθανότητα $\frac{(2J+1)}{(2s+1)(2S+1)}$ να

προκύψει τιμή ολικής στροφορμής J από συνδυασμό του j με τροχιακή στροφορμή ℓ . Τα

αθροίσματα στα j και l παίρνουν τιμές $|S-s|$ ως $|S+s|$ και από $|J-j|$ ως $|J+j|$ αντίστοιχα.

2.5 Πρότυπα Πρώιμης Αποδιέγερσης (*Pre-equilibrium Model*)

Στα πλαίσια μιας αντίδρασης σύνθετου πυρήνα, προτού συμβεί οποιαδήποτε αποδιέγερση, το σύστημα φτάνει σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, καθώς το προσπίπτον σωματίο έχει διεγείρει τον πυρήνα βάσει της ενέργειας και του σπιν του, αλληλεπιδρώντας με αρκετά από τα νουκλεόνια. Σε μια αντίδραση πρώιμης αποδιέγερσης όμως, ο πυρήνας που σχηματίζεται από το σωματίο βλήμα και τον πυρήνα στόχο (σύνθετος πυρήνας – composite nucleus) αποδιεγείρεται προς τα ανοικτά κανάλια της αντίδρασης πριν επέλθει η θερμοδυναμική ισορροπία. Στη διαδικασία θεωρείται ότι συμμετέχει περιορισμένος αριθμός σωματιδίων, μέσω της αλληλεπίδρασης των οποίων, ο πυρήνας διεγείρεται σταδιακά από καταστάσεις μικρής πολυπλοκότητας σε καταστάσεις που περιλαμβάνουν μεγαλύτερο αριθμό αλληλεπιδρόντων σωματιδίων. Κατά τη διάρκεια αυτών των αλληλεπιδράσεων, υπάρχει πεπερασμένη πιθανότητα αποδιέγερσης του πυρήνα, με εκπομπή σωματιδίου προς κάποιο από τα ανοικτά κανάλια της αντίδρασης. Η αρχική θεώρηση του Griffin [34] αποτελεί τη βάση για τα πρότυπα που περιγράφουν το μηχανισμό αυτό, σύμφωνα με την οποία ο μόνος τύπος αλληλεπίδρασης που συνεισφέρει είναι αυτός της αλληλεπίδρασης δύο σωματιδίων. Με αυτήν την *αλληλουχία αλληλεπιδράσεων νουκλεονίου-νουκλεονίου (nucleon-nucleon interaction cascade)*, θεωρείται πως είναι δυνατή η διέγερση ακόμη και νουκλεονίων, ή συσσωματωμάτων νουκλεονίων (π.χ. πυρήνες δευτερίου) σε μη δέσμιες καταστάσεις και με αυτόν τον τρόπο να γίνει αποδιεγερθεί ο σύνθετος πυρήνας προς τα ανοικτά κανάλια του συστήματος. Σύμφωνα με αυτόν το μηχανισμό διέγερσης του πυρήνα, η κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας επέρχεται έπειτα από διαδοχικές αλληλεπιδράσεις, με τις οποίες διεγείρεται ο μεγαλύτερος δυνατός αριθμός βαθμών ελευθερίας του πυρήνα, ενώ στην κατάσταση αυτή ο μηχανισμός αποδιέγερσης που επικρατεί είναι αυτός του Σύνθετου Πυρήνα που περιγράφεται από το στατιστικό πρότυπο Hauser-Feshbach.

Σύμφωνα με το πρότυπο εξιτονίων του Griffin [34], η διέγερση πυρήνα πάνω στον οποίο έχει προσπέσει ένα πρωτόνιο ή νετρόνιο, ξεκινά με τη διέγερση ενός σωματιδίου του πυρήνα πάνω από την ενέργεια Fermi, δημιουργώντας έτσι ένα σωματίο και μια οπή. Έτσι, ο αρχικός σύνθετος πυρήνας έχει 3 στο σύνολο σωματία και οπές πάνω από την ενέργεια Fermi, που ονομάζονται διεγερμένα εξιτόνια (*excitons*). Βασική θεώρηση του μοντέλου είναι ότι η αλληλεπίδραση συνεχίζεται μόνο μέσω μεταβάσεων που μεταβάλλουν το πλήθος των οπών και των σωματιδίων, n_h και n_p αντίστοιχα, κατά 1 ή ισοδύναμα τον συνολικό αριθμό n των εξιτονίων κατά 2. Ο περιορισμός αυτός συνοψίζεται στις σχέσεις:

$$\Delta n = 0, \pm 2, \quad \Delta n_p = \Delta n_h = 0, \pm 1 \quad (2.5.1)$$

στις οποίες αντανακλάται η αρχική θεώρηση της αλληλουχίας αλληλεπιδράσεων νουκλεονίου-νουκλεονίου.

Υπάρχουν δύο αντίπαλοι τρόποι αποδιέγερσης του συστήματος:

- Η αποδιέγερση μέσω αλληλεπιδράσεων εξιτονίου-εξιτονίου, διεγείροντας όλο και πιο πολύπλοκες καταστάσεις του σύνθετου πυρήνα.
- Η αποδιέγερση μέσω εκπομπής σωματιδίου στο συνεχές.

2.5.1 Πρότυπο εξιτονίων δύο συστατικών (Two component exciton model)

Η βασική φόρμουλα για το πρότυπο εξιτονίων δύο συστατικών είναι:

$$\frac{d\sigma_k^{\text{EM}}}{dE_k} = \sigma^{\text{CF}} \sum_{p_\pi=p_\pi^0}^{p_\pi^{\text{eq}}} \sum_{p_\nu=p_\nu^0}^{p_\nu^{\text{eq}}} W_k(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E_k) S_{\text{pre}}(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu) \quad (2.5.1.1)$$

Όπου το $p_\pi(p_\nu)$ είναι ο αριθμός πρωτονίων (νετρονίων) του σωματιδίου, το $h_\pi(h_\nu)$ ο αριθμός οπής πρωτονίου(νετρονίου), σ^{CF} η ενεργός διατομή σχηματισμού σύνθετου πυρήνα και S_{pre} η χρονοεξαρτώμενη ισχύς που καθορίζει πόσο χρόνο θα παραμείνει το σύστημα σε συγκεκριμένη διάταξη εξιτονίων. Οι αρχικοί σωματιδιακοί αριθμοί πρωτονίου και νετρονίου συμβολίζονται με $p_\pi^0 = Z_p$ και $p_\nu^0 = N_p$, ενώ με $Z_p(N_p)$ συμβολίζεται ο αριθμός πρωτονίων (νετρονίων) του βλήματος. Γενικά, $h_\pi = p_\pi - p_\pi^0$ και $h_\nu = p_\nu - p_\nu^0$ ώστε οι αρχικοί αριθμοί οπών να είναι μηδέν, π.χ. $h_\pi^0 = h_\nu^0 = 0$ για βασική εκπομπή πρώιμης αποδιέγερσης. Στην εξίσωση (2.5.1.1) οι σωματιδιακοί αριθμοί θερμοδυναμικής ισορροπίας (equilibrium particle numbers) είναι $p_\pi^{\text{eq}} = p_\nu^{\text{eq}} = 6$, ενώ το υπόλοιπο της ροής αντίδρασης (reaction flux) διανέμεται μέσω του προτύπου Hauser-Feshbach για αντιδράσεις σύνθετου πυρήνα.

Ο ρυθμός εκπομπής W_k για εκπεμπόμενο σωματίδιο k με σπιν s_k , δίνεται από τη σχέση:

$$W_k(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E_k) = \frac{2s_k + 1}{\pi^2 \hbar^3} \mu_k E_k \sigma_{k,\text{inv}}(E_k) \times \frac{\omega(p_\pi - Z_k, p_\nu, N_k, h_\nu, E_x)}{\omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E^{\text{tot}})} \quad (2.5.1.2)$$

όπου $\sigma_{k,\text{inv}}$ η αντίστροφη ενεργός διατομή όπως υπολογίζεται στο οπτικό μοντέλο, ω η πυκνότητα κατάστασης των δυο συστατικών (σωματίδιο-οπή), για την οποία χρησιμοποιούμε την έκφραση Dobes και Betak [35]:

$$\omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E_x) = \frac{g_\pi^{n_\pi} g_\nu^{n_\nu}}{p_\pi! h_\pi! p_\nu! h_\nu! (n-1)!} \times (U - A(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu))^{n-1} f(p, h, U, V) \quad (2.5.1.3)$$

Η συνάρτηση πεπερασμένου πηγαδιού (the finite well function) $f(p, h, E_x, V)$ συνδέεται με το γεγονός ότι μια οπή δε μπορεί να έχει λιγότερη ενέργεια από τον πυθμένα ενός πηγαδιού δυναμικού V . Δίνεται από τη σχέση:

$$f(p, h, E_x, V) = 1 + \sum_{i=1}^h (-1)^i \binom{h}{i} \left[\frac{E_x - iV}{E_x} \right]^{n-1} \Theta(E_x - iV) \quad (2.5.1.4)$$

όπου Θ η συνάρτηση βήματος μονάδας (unit step function). Σημειώνεται ότι το f διαφέρει της τιμής 1 μόνο για ενέργειες διέγερσης μεγαλύτερες από V . Στην αρχική εκδοχή των Dobes και Betak, το V δίνεται από το βάθος E_f του πηγαδιού Φέρμι. Αυτό γενικεύτηκε από τον Kalbach [36,37] για την ανάπτυξη μιας αποτελεσματικής μεθόδου που θα περιλαμβάνει επιδράσεις επιφάνειας, στα πρώτα στάδια της αλληλεπίδρασης, που οδηγούν σε σκληρότερο φάσμα πρώιμης αποδιέγερσης (harder pre equilibrium spectrum). Στο πρώτο μέρος, το μέγιστο βάθος της οπής πρέπει να είναι σημαντικά μειωμένο, αφού στην επιφάνεια το δυναμικό είναι πιο ρηχό από το εσωτερικό. Έτσι αυτόματα αφήνεται περισσότερη ενέργεια να υιοθετηθεί από το διεγερμένο σωματίο, αποδίδοντας μεγαλύτερη εκπομπή στις υψηλότερες εξερχόμενες ενέργειες. Επίσης, χρησιμοποιούμε την ακόλουθη συναρτησιακή μορφή του V , με ενέργεια βλήματος E_p και μάζας A ,

$$V = 22 + 16 \frac{E_p^4}{E_p^4 + (450/A^{1/3})^4} \text{ MeV} \quad \text{για } h=1 \text{ και προσπίπτοντα πρωτόνια}$$

$$V = 12 + 26 \frac{E_p^4}{E_p^4 + (245/A^{1/3})^4} \text{ MeV} \quad \text{για } h=1 \text{ και προσπίπτοντα νετρόνια}$$

$$V = E_f = 38 \text{ MeV} \quad \text{για } h>1 \quad (2.5.1.5)$$

Τέλος, χρησιμοποιούμε τις μερικές παραμέτρους ενεργού διατομής $g_\pi = Z/15$ και $g_\nu = N/15 \text{ MeV}^{-1}$.

Η έκφραση S_{pre} περιέχει το ρυθμιζόμενο στοιχείο πίνακα μετάβασης (adjustable transition matrix element) M^2 για κάθε δυνατή μετάβαση μεταξύ νετρονίου-πρωτονίου σε διατάξεις εξιτονίων. Για το στοιχείο του πίνακα M^2 , έχουμε την έκφραση:

$$M^2 = \frac{1}{A^3} \left[6.8 + \frac{4.2 \times 10^5}{\left(\frac{E^{tot}}{n} + 10.7 \right)^3} \right] MeV^2 \quad (2.5.1.6)$$

όπου ο ολικός αριθμός εξιτονίων δίνεται από τη σχέση $n = p_\pi + h_\pi + p_\nu + h_\nu$. Για τη δυναμική των δύο συστατικών, ο ακόλουθος λόγος πρωτονίου-νετρονίου για τα τετραγωνικά στοιχεία πίνακα εσωτερικής μετάβασης (the squared internal transition matrix elements) υιοθετήθηκε για να δοθεί μεγαλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα

$$M_{\pi\pi}^2 = R_{\pi\pi} M^2, R_{\pi\pi} = 1$$

$$M_{\nu\nu}^2 = R_{\nu\nu} M^2, R_{\nu\nu} = 1.5$$

$$M_{\pi\nu}^2 = R_{\pi\nu} M^2, R_{\pi\nu} = 1$$

$$M_{\nu\pi}^2 = R_{\nu\pi} M^2, R_{\nu\pi} = 1 \quad (2.5.1.7)$$

2.5.2 Φωτονικό Πρότυπο Εξιτονίων (Photon exciton model)

Για την εκπομπή φωτονίων κατά την πρώιμη αποδιέγερση, έχει εισαχθεί το πρότυπο των Akkermans και Grupperlaar [38]. Το πρότυπο αυτό δίνει μια απλουστευμένη εξομοίωση της άμεσης ή ήμι-άμεσης διαδικασίας σύλληψης μέσα στα πλαίσια του προτύπου των εξιτονίων.

Αναλογικά με τους ρυθμούς εκπομπής σωματιδίων, οι εκπομπές ακτινοβολίας γ από το συνεχές μπορούν να προκύψουν από την αρχή της λεπτομερούς ισορροπίας (the principle of detailed balance) ή της μικροσκοπικής αναστρεψιμότητας (microscopic reversibility), υποθέτοντας ότι συνεισφέρουν μόνο οι μεταβάσεις E1 (E1 transitions). Στην εικόνα των δύο συστατικών, έχουμε

$$W_\gamma(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E_\gamma) = R_\gamma \frac{E_\gamma^2}{\pi^2 \hbar^3 c^2} \frac{\sigma_{\gamma,abs}(E_\gamma)}{\omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E^{tot})} \\ \times \left(\frac{g^2 E_\gamma}{2} \frac{1}{\omega(p_\pi - 1, h_\pi - 1, p_\nu, h_\nu, E_x - E_\gamma)} \right) \\ \frac{1}{g(n-2) + g^2 E_\gamma}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{g^2 E_\gamma \frac{1}{2} \omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu - 1, h_\nu - 1, E_x - E_\gamma)}{g(n-2) + g^2 E_\gamma} \\
& + \frac{gn \omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E_x - E_\gamma)}{gn + g^2 E_\gamma} \Big) \tag{2.5.2.1}
\end{aligned}$$

όπου $\sigma_{\gamma,\text{abs}}(E_\gamma)$ η ενεργός διατομή φωτοαπορρόφησης και R_γ μια ρυθμιζόμενη παράμετρος.

3

Κώδικας EMPIRE 3.2.2 Malta

3.1 Βασικά χαρακτηριστικά του κώδικα EMPIRE 3.2.2 Malta

Το EMPIRE είναι ένας σύνθετος κώδικας που έχει σχεδιαστεί για θεωρητικούς υπολογισμούς πυρηνικών αντιδράσεων και για την αξιολόγηση πειραματικών δεδομένων, για ένα ευρύ φάσμα ενεργειών και προσπίπτοντων σωματιδίων. Ο κώδικας αυτός λαμβάνει υπόψη τα περισσότερα από τα πρότυπα πυρηνικών αντιδράσεων με τη βοήθεια αντίστοιχων υπορουτίνων. Για παράδειγμα, όπως θα δούμε στην επεξήγηση του αρχείου εισόδου του κώδικα στην επόμενη ενότητα, για το οπτικό πρότυπο δυναμικού, τα συζευγμένα κανάλια και την προσέγγιση DWBA [19] αντιστοιχούν οι υπορουτίνες ECIS06 και OPTMAN, για το πρότυπο των multi-step direct αντιδράσεων αντιστοιχεί ο συνδυασμός κωδίκων/υπορουτίνων ORION και TRISTAN, για τις multistep compound και το μοντέλο εξιτονίων η υπορουτίνα PCROSS κ.α..

Η πρώτη έκδοση του κώδικα EMPIRE κυκλοφόρησε το 1980, περιέχοντας αρχικά τη θεωρία Hauser-Feshbach, το κλασικό υβριδικό μοντέλο περιγραφής των επιδράσεων της πρώιμης αποδιέγερσης, ενώ η διόρθωση διακύμανσης πλάτους (width fluctuation correction) εφαρμόστηκε υπό όρους προσέγγισης HRTW [39,40]. Από τότε, ο κώδικας αναπτύσσεται συνεχώς, κυκλοφορώντας σε εκδόσεις με προστιθέμενους μηχανισμούς πολλαπλών βημάτων άμεσων αντιδράσεων και σύνθετου πυρήνα. MSD και MSC αντίστοιχα (HMS-EMPIRE, EMPIRE MSC [41,42]), μηχανισμούς αντιδράσεων που προκαλούνται από βαρέα ιόντα

(EMPIRE HI) καθώς και μηχανισμούς συνδυαστικών υπολογισμών για πυκνότητες καταστάσεων οπών-σωματιδίων. Η έκδοση του κώδικα EMPIRE 3.2.2 Malta ακολούθησε την έκδοση Rivoili του 2011 και περιλαμβάνει τις εξής βελτιώσεις:

- I. Φάσματα ταχέων νετρονίων σχάσης (prompt fission neutron spectra PFNS) περιλαμβάνοντας την αυτόματη προσαρμογή πειραματικών δεδομένων. Η δυσκολία στη μοντελοποίηση τέτοιων φασμάτων έγκειται στο ότι το σχήμα τους δεν είναι καλά καθορισμένο πειραματικά
- II. Αναπαράσταση σε σχεδιαγράμματα των PFNS, $\bar{\mu}$ και $\bar{\nu}$ (ενεργειακό διάγραμμα νετρονίων σχάσης, το μέσο συνημίτονο της γωνίας σκέδασης για ελαστική σκέδαση νετρονίων και ο μέσος αριθμός νετρονίων που παράγονται ανά σχάση)
- III. Ανισοτροπικές γωνιακές κατανομές για σύνθετες ελαστικές και ανελαστικές σκεδάσεις.
- IV. Προσομοίωση του μετασχηματισμού Engelbrecht-Weidenmuller
- V. Νέες υπορουτίνες διαχείρισης των αρχείων τύπου ENDF-6 (μορφή αρχείων εξόδου EMPIRE).

Τα ουσιαστικά βήματα του κώδικα EMPIRE 3.2.2, για τον υπολογισμό αντιδράσεων νουκλεονίων-πυρήνων, περιλαμβάνοντας την πρώτη αποδιέγερση και την εκπομπή Hauser-Feshbach είναι:

1. Διαβάζει το αρχείο εισόδου EMPIRE, μορφοποιημένο από το χρήστη
2. Κατασκευάζει πίνακα με τους εμπλεκόμενους πυρήνες
3. Διαβάζει από τη βιβλιοθήκη παραμέτρων εισόδου (RIPL)
 - a. Παραμέτρους οπτικού προτύπου δυναμικού
 - b. Διακριτές καταστάσεις
 - c. Συλλογικές καταστάσεις
 - d. Μάζες και ενέργειες δέσμευσης
 - e. Παραμέτρους πυκνότητας καταστάσεων
 - f. Παραμέτρους φραγμών σχάσης
 - g. Διορθώσεις φλοιού
 - h. Παραμορφώσεις βασικής κατάστασης
 - i. Παρατηρήσιμα χαμηλών ενεργειών (low energy observables)(διατάξεις συντονισμού και συναρτήσεις ισχύος Γ_γ - resonance spacing, strength functions)
4. Υπολογίζει

- a. Οπτικό πρότυπο δυναμικού περιλαμβάνοντας την άμεση διέγερση διακριτών καταστάσεων, εφόσον ζητηθεί.
 - b. Εκπομπή ακτινοβολίας-γ, νουκλεονίων ή συμπλεγμάτων στην πρόιμη αποδιέγερση του σύνθετου πυρήνα
 - c. Διάσπαση σύνθετου πυρήνα
 - d. Φάσμα σχάσης
5. Λαμβάνει πειραματικά δεδομένα από τη βιβλιοθήκη EXFOR
6. Δημιουργεί τοπικά αρχεία εισόδου (local input files), για εξοικονόμηση χρόνου
7. Καθορίζει τις ενεργές διατομές του οπτικού προτύπου δυναμικού, συμπεριλαμβανομένης της άμεσης διέγερσης συλλογικών καταστάσεων. Αν ζητηθεί, υπολογίζονται επίσης η ενεργός διατομή σχάσης και η άμεση ανελαστική σκέδαση.
8. Υπολογίζει τις εκπομπές πρόιμης αποδιέγερσης PE. Συνήθως δε χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα τα ακόλουθα PE μοντέλα, καθώς ακολουθούνται ορισμένοι κανόνες συμβατότητας μεταξύ αυτών (γίνεται εκτενής αναφορά στην επόμενη ενότητα).
- a. Υπολογίζει διπλές διαφορικές διατομές για ανελαστική σκέδαση μέσω του μηχανισμού MSD, εποικίζει το συνεχές του εναπομείναντος πυρήνα και των διακριτών καταστάσεων, αποθηκεύει το φάσμα ανακρουόμενων σωματιδίων (recoil spectra)
 - b. Υπολογίζει τα φάσματα νετρονίου, πρωτονίου, σωματίου-α, δευτερίου, τριτίου ^3He και εκπεμπόμενης ακτινοβολίας-γ σύμφωνα με το πρότυπο εξιτονίων (κώδικα PCROSS), εποικίζει το συνεχές του εναπομείναντος πυρήνα και των διακριτών καταστάσεων.
 - c. Υπολογίζει το φάσμα των νετρονίων, των πρωτονίων και της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας-γ σύμφωνα με το μηχανισμό HMS (κώδικας DDHMS), εποικίζει το συνεχές του εναπομείναντος πυρήνα και των διακριτών καταστάσεων, αποθηκεύει το φάσμα ανάκρουσης.
 - d. Υπολογίζει το ενεργειακό φάσμα των νετρονίων, των πρωτονίων και της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας γ σύμφωνα με το μηχανισμό MSC, εποικίζει το συνεχές του εναπομείναντος πυρήνα και των διακριτών καταστάσεων.
9. Στα πλαίσια του προτύπου Hauser-Feshbach, υπολογίζει τα πλάτη εκπομπών νετρονίων, πρωτονίων, σωματίων-α, δευτερίου, τριτίου ^3He , γ και ελαφρών ιόντων.
10. Υπολογίζει τη σχάση, με βάση το πρότυπο σχάσης που έχει επιλεγθεί στο αρχείο εισόδου, εφόσον έχει επιλεγθεί.

11. Κανονικοποιεί τα πλάτη εκπομπής και σχάσης με τον παρονομαστή Hauser-Feshbach και την ενεργό διατομή σύντηξης για να λάβει το φάσμα σύνθετου πυρήνα και την εποίκιση (population) του συνεχούς και των διακριτών καταστάσεων του εναπομείναντος πυρήνα.
12. Τυπώνει τα αποτελέσματα της διάσπασης του επιθυμητού πυρήνα.
13. Δημιουργεί αντίστοιχα αρχεία εξόδου.

Με τον κώδικα EMPIRE, μπορούμε να υπολογίσουμε:

- Ολικές, ελαστικές και ανελαστικές ενεργές διατομές
- Γωνιακές κατανομές ελαστικής σκέδασης
- Ενεργές διατομές ανελαστικής σκέδασης και γωνιακές κατανομές σε διακριτές καταστάσεις
- Ενεργές διατομές «αποκλειστικών» (exclusive) καναλιών εξόδου
- Παραγωγή φωτονίων για διακριτές καταστάσεις και στο συνεχές του πυρήνα
- Ενεργές διατομές βασικών και μετασταθών σταθμών.
- Ενεργές διατομές σχάσης
- Ενεργές διατομές υπολειπόμενου πυρήνα
- Ολικές ενεργές διατομές σωματιδίων, π.χ. (n,xn), (n,xp)
- Ρυθμοί αστροφυσικών πυρηνικών αντιδράσεων

Για το θεωρητικό υπολογισμό της ενεργού διατομής μιας αντίδρασης με το στατιστικό πρότυπο Hauser-Feshbach μέσω του κώδικα EMPIRE 3.2.2, ουσιαστικό ρόλο παίζει η επιλογή κατάλληλου:

1. Προτύπου οπτικού δυναμικού (OMP). Στο αρχείο εισόδου του κώδικα EMPIRE, ο χρήστης εισάγει τον αριθμό καταλόγου RIPL του προτύπου οπτικού δυναμικού που επιθυμεί να χρησιμοποιηθεί, global ή local, στην αλληλεπίδραση πυρήνα και προσπίπτοντων σωματιδίων. Οι υπορουτίνες ECIS06 και OPTMAN λαμβάνουν τις αντίστοιχες τιμές των παραμέτρων για όλα τα στοιχεία που προαναφέρθηκαν στο 3^ο βήμα εκτέλεσης του κώδικα.
2. Προτύπου για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων στο συνεχές κάθε πυρήνα. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα επιλογής πέντε μοντέλων, με αντίστοιχες παραμετροποιήσεις που υπάρχουν αποθηκευμένες επίσης στη βιβλιοθήκη RIPL. Τα τρία από αυτά είναι φαινομενολογικά: το πρότυπο Gilbert-Cameron εφαρμοσμένο στα νέα πειραματικά δεδομένα (refitted GCM) [43], το πρότυπο γενικευμένου υπερρευστού (GSM) [44,45] και το βελτιωμένο πρότυπο γενικευμένου υπερρευστού (EGSM) [46]. Ένα πρότυπο βασίζεται στο μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-

Bogoliubov (HFBM) [47] κι ακόμη ένα στην προσέγγιση Gilbert-Cameron (έκδοσης EMPIRE 2.18) [43] εφαρμοσμένο στα πειραματικά δεδομένα παλαιότερης βιβλιοθήκης RIPL-2

3. Προτύπων πρώιμης αποδιέγερσης (Pre-equilibrium models). Εδώ υπάρχει ο διαχωρισμός μεταξύ κβαντομηχανικών και φαινομενολογικών προτύπων πρώιμης αποδιέγερσης ενός πυρήνα. Στην πρώτη κατηγορία βρίσκονται η στατιστική προσέγγιση άμεσων αντιδράσεων πολλαπλών βημάτων MSD (Multistep Direct Reactions) των Tamura, Udagawa και Lenske [48] και η προσέγγιση του Nishioka (NVWY theory) [42] για τις διαδικασίες πολλαπλών βημάτων Σύνθετου πυρήνα MSC (Multistep Compound). Στη δεύτερη κατηγορία των φαινομενολογικών προτύπων βρίσκεται το Κλασικό Πρότυπο Εξιτονίων [34], που βασίζεται στη λύση της βασικής εξίσωσης [49] σε μορφή που προτάθηκε από τους Cline [50] και Ribansky [51], με τον κώδικα PCROSS. Στην ίδια κατηγορία ανήκουν και οι προσομοιώσεις Monte Carlo (με τον κώδικα DDHMS) για την εκπομπή νουκλεονίων στην πρώιμη αποδιέγερση, που προτάθηκε από τον M.Blann [52].

Τέλος, το σύνολο των δεδομένων του κώδικα EMPIRE, από τα οποία παίρνει στοιχεία για την πυρηνική δομή και τις παραμέτρους των διάφορων προτύπων, προέρχεται από τη βιβλιοθήκη RIPL (Reference Input Parameter Library) [17]. Η RIPL είναι μια βάση δεδομένων-αποτέλεσμα πολλών προγραμμάτων του I.A.E.A., με την οποία οι προγραμματιστές των διάφορων προτύπων μπορούν να επικεντρωθούν στις εφαρμογές μηχανισμών αντίδρασης, καθώς η καταχώρηση των απαραίτητων στοιχείων και παραμέτρων γίνεται αυτόματα.

3.2 Αρχείο Εισόδου στον κώδικα EMPIRE

Μέσω της φιλικής για το χρήστη πλατφόρμας λειτουργίας του κώδικα EMPIRE (Graphical User Interface) GUI, μπορούμε εύκολα να μορφοποιήσουμε το αρχείο εισόδου (.input) για τους επιθυμητούς υπολογισμούς. Ο κώδικας EMPIRE έχει σχεδιαστεί έτσι ώστε να λαμβάνει όσο το δυνατόν περισσότερες πληροφορίες από την βιβλιοθήκη RIPL (*empire/RIPL/*) και τη βιβλιοθήκη τοπικών παραμέτρων εισόδου (*empire/data*). Ο χρήστης λοιπόν οφείλει να εισάγει μόνο τις παραμέτρους εισόδου που ο κώδικας δε μπορεί να γνωρίζει, δηλαδή την ενέργεια πρόσπτωσης, το είδος του βλήματος και του στόχου, τον αριθμό αλλά και το είδος των εκπεμπόμενων σωματιών.

Το αρχείο εισόδου χωρίζεται σε δύο μέρη, το Υποχρεωτικό (Mandatory input) και το Προαιρετικό μέρος (Optional input). Ως παράδειγμα, παρουσιάζεται ένα από τα αρχεία

εισόδου και η επεξήγηση των σχετικών εντολών που χρησιμοποιήθηκαν στους θεωρητικούς υπολογισμούς της παρούσας εργασίας.

Στο υποχρεωτικό τμήμα του αρχείου εισόδου (Σχήμα 3.2.1), περιέχονται οι βασικές και αναγκαίες πληροφορίες για τον προσδιορισμό της περίπτωσης αλληλεπίδρασης, ενώ η δομή του απεικονίζεται στην παρακάτω εικόνα:

```

      8.100           ;INCIDENT ENERGY (IN LAB)
191.  77.          ;TARGET A , Z
      1    0        ;PROJECTILE A, Z
      3            ;NUMBER OF NEUTRONS TO BE EMITTED
      1            ;NUMBER OF PROTONS TO BE EMITTED
      0            ;NUMBER OF ALPHAS TO BE EMITTED
      0            ;NUMBER OF DEUTERONS TO BE EMITTED
      0            ;NUMBER OF TRITONS TO BE EMITTED
      0            ;NUMBER OF He-3 TO BE EMITTED
      0  0.  0.    ;NUMBER OF L.I. TO EMITTEDM AND ITS A AND Z

```

Σχήμα 3.2.1. Υποχρεωτικό Τμήμα του αρχείου εισόδου

Στην πρώτη γραμμή προσδιορίζεται η ενέργεια πρόσπτωσης στο σύστημα εργαστηρίου (MeV). Στη δεύτερη και τρίτη γραμμή προσδιορίζονται οι μάζες και οι ατομικοί αριθμοί του στόχου και του βλήματος αντίστοιχα, ενώ στις υπόλοιπες επτά προσδιορίζεται ο αριθμός των εκπομπών κάθε είδους σωματίου που θα ακολουθήσει από τον διεγερμένο πυρήνα. Ο κώδικας αυτόματα υπολογίζει όλες τις δυνατές αλληλουχίες εκπομπής σωματίων μέχρι να φθάσει τον επιθυμητό εναπομείναντα πυρήνα. Στην τελευταία γραμμή προσδιορίζεται η συμπερίληψη ή μη της εκπομπής κάποιου είδους ιόντος, ελαφρού ή βαρέως. Στην έκδοση αυτή όμως του κώδικα δεν επιτρέπεται η εκπομπή ιόντος βαρύτερου του σωματίου α.

Στο προαιρετικό τμήμα μας επιτρέπεται να επιλέξουμε τα επιθυμητά μοντέλα παραμετροποίησης. Για πρακτικούς λόγους το χωρίζουμε σε τέσσερα κομμάτια. Όπως φαίνεται, στο πρώτο κομμάτι, Σχήμα 3.2.2., υπάρχουν εντολές που καθορίζουν το αρχείο εξόδου του κώδικα αλλά και εντολές χειρισμού των υπολογισμών

```

IOUT      3.
NEX       080.           Number of points in the
outgoing energy grid
ENDF      0.           No ENDF formatting by
default (much faster runs)
RECOIL    0.           No recoils are calculated.
Sizeable speed-up if no ENDF file is required

```

Σχήμα 3.2.2. Προαιρετικό Τμήμα αρχείου εισόδου (1/4)

Στην πρώτη γραμμή, η εντολή IOUT χειρίζεται το τί θα τυπωθεί στο αρχείο εξόδου και παίρνει τιμές από 1 έως 6. Για IOUT=1 (προεπιλογή),

- τυπώνονται τα δεδομένα του αρχείου εισόδου και τα ουσιαστικά αποτελέσματα των θεωρητικών υπολογισμών των επιθυμητών αλληλεπιδράσεων (όλες οι ενεργές διατομές).

=2,

- τυπώνεται στο αρχείο εισόδου ό,τι και στην επιλογή της τιμής 1, συν την κατανομή σπιν σύντηξης, *yrastr state population*, παραμέτρους γ-μετάβασης, φράγματα σύντηξης, ενεργειακά φάσματα.

=3,

- τυπώνεται ό,τι στην τιμή 2 συν φάσματα ακτινοβολίας-γ και σωματιδίων, αποσύνθεση διακριτών καταστάσεων (*discrete levels' decay*) και διπλές διαφορικές ενεργές διατομές (εφόσον $MSD > 0$).

=4

- τυπώνεται ό,τι και στην τιμή 2 συν αρχείο εξόδου ORION, πληθυσμός συνεχούς υπολειπόμενου πυρήνα.

=5

- τυπώνεται ό,τι και στην τιμή 2 συν αρχείο εξόδου ORION, συντελεστές διάδοσης (*transmission coefficients*)

=6

- τυπώνεται ό,τι και στην τιμή 2 μαζί με αρχείο εξόδου ORION και πυκνότητες καταστάσεων.

Η εντολή NEX δηλώνει τον αριθμό σημείων στο εξερχόμενο ενεργειακό δίκτυο (τιμή 50 για προεπιλογή)(η ενεργός διατομή κάθε καναλιού υπολογίζεται με την ολοκλήρωση του ενεργειακού φάσματος).

Ο κώδικας EMPIRE παρέχει μη-αποκλειστικές (*inclusive*) ενεργές διατομές για την παραγωγή των υπολειμάτων (*residues*) π.χ. όλοι οι δρόμοι για τον τελικό πυρήνα προσθέτονται (π.χ. $(n,np)+(n,pn)+(n,d)$). Μόνο για τις αντιδράσεις που περιλαμβάνουν εκπομπή ενός μοναδικού είδους σωματίου οι ενεργές διατομές είναι αποκλειστικές (*exclusive*), π.χ. (n,n) , $(n,2n)$, $(n,3n)$,... ή (n,p) , $(n,2p)$,... . Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει πόσες εκπομπές θα αντιμετωπιστούν με την αποκλειστική προσέγγιση, ενώ οι υπόλοιπες εκπομπές θα είναι μη-αποκλειστικές. Έτσι για παράδειγμα, αντί να μας παρέχει αποκλειστικές ενεργές διατομές και ενεργειακά φάσματα για την εκάστοτε αντίδραση ξεχωριστά, ο κώδικας EMPIRE μπορεί να τυπώσει στο αρχείο εξόδου μη αποκλειστικές ενεργές διατομές, φάσματα και διπλές διαφορικές διατομές. Αυτή είναι η αντιμετώπιση του κώδικα όταν απαιτείται η μορφοποίηση ENDF. Η εντολή ENDF εκφράζει αυτού του είδους τη μορφοποίηση του αρχείου εξόδου και την αποκλειστική ή μη αποκλειστική εκπομπή. Τα ENDF αρχεία υπακούουν σε κανόνες ταξινόμησης των πληροφοριών, σε αύξουσα σειρά ανά είδος πληροφορίας (αριθμός MF) και είδος αντίδρασης (αριθμός MT). Αυτού του είδους η μορφοποίηση χρησιμοποιείται σε κώδικες θεωρητικών υπολογισμών για την εύκολη διαχείριση του όγκου των υπολογιζόμενων φυσικών ποσοτήτων (ενεργές διατομές,

ενεργειακά φάσματα, γωνιακές κατανομές κ.α. Ο κώδικας EMPIRE επίσης υπολογίζει τις ενεργές διατομές για τη δημιουργία μετασταθών σταθμών, τις αναγνωρίζει κι έπειτα τις αποθηκεύει σε αρχείο ENDF.

Για ENDF=0

- καμία μορφοποίηση τύπου ENDF (προεπιλογή)
- >0
- θα δημιουργηθεί αρχείο εξόδου σε ENDF μορφή, περιλαμβάνοντας διπλή διαφορική MF=6, με τον τρόπο που περιγράφουν τα παραδείγματα
- =2, σημαίνει ότι όλες οι αντιδράσεις που εκπέμπουν 2 ή λιγότερα σωματίδια είναι αποκλειστικές, ενώ οι υπόλοιπες είναι μη αποκλειστικές
- =3, σημαίνει ότι όλες οι αντιδράσεις που εκπέμπουν 3 ή λιγότερα σωματίδια είναι αποκλειστικές, ενώ οι υπόλοιπες είναι μη αποκλειστικές

Η εντολή RECOIL έχει να κάνει με τον υπολογισμό των ανακρούσεων. Για κάθε εντολή, σε γενικές γραμμές, το 0 σημαίνει απενεργοποίηση και το 1 ενεργοποίηση της συγκεκριμένης εντολής. Σε περίπτωση που έχουμε απενεργοποιημένο το ENDF δε είναι δυνατός ο υπολογισμός των ανακρούσεων.

```
* HAUSER-FESHBACH INPUT
*
FITLEV      0.          FITLEV>0 is recommended for
1st run to compare vs NLD exp.data
LEV DEN     0.          EMPIRE NLD (EGSM RIPL-3) as
default
HRTW       3.          Width fluctuations
considered up to 3 MeV (for neutron induced)
GSTRFN     1.          Default gamma ray strength
function (Plujko MLO RIPL-2)
```

Σχήμα 3.2.3. Προαιρετικό Τμήμα αρχείου εισόδου (2/4)

Για κάθε υπολογισμό προτείνεται μια δοκιμαστική λειτουργία του κώδικα (test run) με θετική τιμή στην εντολή FITLEV, προκειμένου να ελεγχθεί η πληρότητα των σχεδιασμών των διακριτών καταστάσεων και η συνοχή τους με τις πυκνότητες καταστάσεων.

Αν ο πρώτος χαρακτήρας της γραμμής είναι *,# ή !, τότε η γραμμή αυτή περιέχει σχόλια και αγνοείται από τον κώδικα.

Η εντολή LEVDEN λαμβάνει τιμές από 0 ως 4 για πυκνότητες καταστάσεων:

=0

- του βελτιωμένου προτύπου γενικευμένου υπερρευστού (EGSM) [46]

=1

- του προτύπου γενικευμένου υπερρευστού (GSM) με την προσέγγιση Ignatyuk [44,45]

=2

- του προτύπου Gilbert-Cameron εφαρμοσμένο στα νέα πειραματικά δεδομένα (refitted GCM) με την προσέγγιση Ijimon [43]

=3

- του μικροσκοπικού προτύπου των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47]

=4

- της προσέγγισης Gilbert-Cameron (έκδοσης EMPIRE 2.18) [43] εφαρμοσμένης στα πειραματικά δεδομένα παλαιότερης βιβλιοθήκης RIPL-2

Για να υπολογίσουμε τη συσχέτιση μεταξύ πρόσπτωσης και καναλιών εξόδου στην ελαστική σκέδαση (διόρθωση πλάτους διακύμανσης-width fluctuation correction), προτάθηκε από τους Hofmann, Richert, Tepel και Weidenmueller [39,40] το μοντέλο HRTW. Σε αυτό δίνεται ιδιαίτερη προσοχή στον προσδιορισμό των πυκνοτήτων καταστάσεων, οι οποίες μπορούν να υπολογιστούν με τη μη αδιαβατική προσέγγιση που επιτρέπει της βελτιώσεις δόνησης και περιστροφής Δίπλα στην αντίστοιχη εντολή HRTW γράφεται η τιμή της διόρθωσης του πλάτους διακύμανσης σε MeV.

Με την εντολή GSTRFN γίνεται χειρισμός προτύπου της συνάρτησης ισχύος ακτινοβολίας-γ,

=0

- Επιλέγεται το EGLO, το Βελτιωμένο Γενικευμένο Πρότυπο συνάρτησης λορεντζιανού σχήματος (Enhanced Generalized Lorentzian) από τον Kopecky [53], εξίσωση (2.3.1.4), χρησιμοποιείται στην έκδοση EMPIRE 2.18 και νωρίτερα

=1

- Επιλέγεται το MLO1 (Modified Lorentzian 1), η Τροποποιημένη Λορεντζιανή τύπου 1 [54]

=2

- Επιλέγεται το MLO2 (Modified Lorentzian 2), η Τροποποιημένη Λορεντζιανή τύπου 2 [55]

=3

- Επιλέγεται το MLO3 (Modified Lorentzian 3), η Τροποποιημένη Λορεντζιανή τύπου 3 [56]

=4

- Επιλέγεται το EGLO, το Βελτιωμένο Γενικευμένο Πρότυπο συνάρτησης λορεντζιανού σχήματος (Enhanced Generalized Lorentzian) από τον Kopecky [53,17]

=5

- Επιλέγεται το GFL, το Γενικευμένο μοντέλο υγρού Φέρμι (Generalized Fermi Liquid Model), του Mughabghab [57]

=6

- Επιλέγεται το SLO, το πρότυπο κλασικής λορεντζιανής (Standard Lorentzian) [58]

Στο επόμενο τμήμα του Προαιρετικού μέρους του αρχείου εισόδου, έχουμε την επιλογή του προτύπου οπτικού δυναμικού, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.2.4.

```
* OPTICAL MODEL INPUT
*
* for A <= 220
OMPOT   -100.      1          OMP for the inverse neutron
channel
*OMPOT   5405.     2          OMP for the inverse proton
channel   - Koning & Delaroche
* for A > 220
*OMPOT   2408.     1          OMP for the inverse neutron
channel   - Actinides
*OMPOT   5408.     2          OMP for the inverse neutron
channel   - Actinides
* Other particles
*OMPOT   9600.     3          OMP for the inverse alpha
channel   - Avrigeanu et al
*OMPOT   6200.     4          OMP for the inverse
deuteron channel - Haixia et al
*OMPOT   7100.     5          OMP for the inverse triton
channel   - Becchetti & Greenless
*OMPOT   8100.     6          OMP for the inverse He-3
channel   - Becchetti & Greenless
*
* for A <= 220
DIRECT   0.          Spherical optical model by
default for A>220
* for A > 220
*DIRECT   1.          CC TLs for the incident
channel + DWBA (uncoupled)
*
*DIRECT   2.          CC TLs for the incident and
outgoing channel + DWBA (uncoupled)
*DIRECT   3.          DWBA calculation for all
collective levels
*DIRPOT  2408.       OMP for the scattering on
collective levels if DIRECT>0 (CC/DWBA)
```

Σχήμα 3.2.4. Προαιρετικό Τμήμα αρχείου εισόδου, (3/4)

Η εντολή OMPOT δέχεται δύο τιμές. Η πρώτη τιμή είναι ο αριθμός καταλόγου OMP, η οποία μπορεί να γραφεί με αρνητικό πρόσημο δηλώνοντας αντίθετη συμβατότητα (backwards compatibility), όπως έχει καταχωρηθεί στη RIPL. Η δεύτερη τιμή καθορίζει τον τύπο του εξερχόμενου σωματιδίου, 1,2,3,4,5,6 για νετρόνια, πρωτόνια, α, δευτέρια, τρίτια και He-3 αντίστοιχα. Στο παράδειγμα χρησιμοποιήθηκε το OMP του F.D.Becchetti [59] με αριθμό καταλόγου RIPL 100.

Με την εντολή DIRECT χειριζόμαστε τους υπολογισμούς συζευγμένων καναλιών (από τις υπορουτίνες ECIS και OPTMAN). Για DIRECT

=0

- Χρήση σφαιρικού οπτικού δυναμικού (προεπιλογή)

=1

- Χρήση μεθόδου συζευγμένων καναλιών (coupled channel method CC) για τον υπολογισμό ανελαστικής σκέδασης στις συλλογικές καταστάσεις (of inelastic scattering to collective levels). Σε περίπτωση που επιλεγθεί οπτικό δυναμικό τύπου CC, οι ενεργές διατομές της ελαστικής σκέδασης και της αντίδρασης λαμβάνονται από τους υπολογισμούς ECIS/OPTMAN. Σε διαφορετική περίπτωση χρησιμοποιούνται τα αποτελέσματα σφαιρικού μοντέλου οπτικού δυναμικού. Οι συντελεστές διάδοσης για όλα τα εξερχόμενα κανάλια υπολογίζονται με σφαιρικό οπτικό μοντέλο δυναμικού.

=2

- Ίδια λειτουργία με την τιμή 1, μόνο που εδώ οι συντελεστές διάδοσης για τα ανελαστικά εξερχόμενα κανάλια υπολογίζονται μέσα στα πλαίσια της προσέγγισης των συζευγμένων καναλιών CC (περισσότερος χρόνος υπολογισμού)

=3

- Ίδια λειτουργία με την τιμή 1, μόνο που αντί για την προσέγγιση CC στον υπολογισμό ανελαστικής σκέδασης στις συλλογικές καταστάσεις χρησιμοποιείται η DWBA. Όλοι οι συντελεστές διάδοσης υπολογίζονται με σφαιρικό μοντέλο οπτικού δυναμικού.

Το OMP που χρησιμοποιείται από τα ECIS/OPTMAN μπορεί να είναι διαφορετικό από αυτό που χρησιμοποιείται για τους υπόλοιπους υπολογισμούς και μπορεί να καθοριστεί με την εντολή DIRPOT.

Στο τελευταίο του Προαιρετικού τμήματος (Σχήμα 3.2.5) έχουμε την επιλογή των προτύπων πρώιμης αποδιέγερσης. Για το πρότυπο άμεσων αντιδράσεων πολλαπλών βημάτων MSD (Multistep Direct Reactions) των Tamura, Udagawa και Lenske [48] είναι,

=0

- Δε γίνονται MSD υπολογισμοί (προεπιλογή).

=1

- Επιλογή υπολογισμών MSD, εκτέλεση ORION και TRISTAN.

=2

- Επιλογή MSD υπολογισμών περιλαμβανομένης και της MSD συνεισφοράς στις διακριτές καταστάσεις. Η επιλογή αυτή γίνεται όταν χρησιμοποιείται πρότυπο οπτικού δυναμικού συζευγμένων καναλιών (CC OMP). Το MSD δίνει το στοιχείο δόνησης στην ενεργό διατομή άμεσης αντίδρασης κι ενδεχομένως να αθροιστεί με τη

συνεισφορά περιστροφής συζευγμένων καναλιών (rotational CC contribution), αλλά αθροίζοντάς το με τα συζευγμένα κανάλια δόνησης (vibrational CC) θα ήταν σα να καταμετρώνται δύο φορές.

Για το πρότυπο του Nishioka (NVWY theory) [42] στις διαδικασίες πολλαπλών βημάτων Σύνθετου πυρήνα MSC (Multistep Compound) έχουμε την τιμή ενεργοποίησης των υπολογισμών , MSC=1, και την τιμή απενεργοποίησης 0. Αντίστοιχα, το ίδιο ισχύει και για τη χρήση προσομοιώσεων Monte Carlo, κώδικας DDHMS, για την εκπομπή νουκλεονίων στην πρώιμη αποδιέγερση, του M.Blann [52] Ο κώδικας PCROSS αντιστοιχεί στο φαινομενολογικό Κλασικό Πρότυπο Εξιτονίων [34], απενεργοποιείται με την τιμή 0, ενώ για την ενεργοποίησή του παίρνει τιμές από 0.5 ως 2.9 (1.5 ως προεπιλογή). Για την συμβατότητα αυτών των προτύπων πρώιμης αποδιέγερσης γίνεται αναφορά στην επόμενη ενότητα.

```
* Preequilibrium models
*
MSD          1.          Quantum statistical Multi-
Step-Direct model
MSC          1.          Quantum statistical Multi-
Step-Compound model
PCROSS       0.          Exciton model with default
1.5 MFP parameter
HMS          0.          Monte Carlo Hybrid (DDHMS)
preequilibrium model
GO
@ Running title may be given in any line starting with @
9.
10.
11.
12.
13.
14.
15.
16.
17.
18.
19.
20.
21.
22.
23.
24.
25.
-1.
*
```

Σχήμα 3.2.5. Προαιρετικό Τμήμα αρχείου εισόδου, (4/4)

Η εντολή GO τερματίζει το αρχείο εισόδου, ενώ στη συνέχεια εισάγονται από το χρήστη οι τιμές της ενέργειας (MeV) για τις οποίες θα λάβουν χώρα οι υπολογισμοί των αντιδράσεων.

3.3 Συμβατότητα MSC, MSD και PCROSS στον κώδικα

EMPIRE 3.2.2

Στην περίπτωση που έχουν επιλεγεί ταυτόχρονα, διάφορα πρότυπα πρώιμης αποδιέγερσης, σε μία εκτέλεση υπολογισμών του κώδικα, προκύπτει πρόβλημα διπλής μέτρησης. Η έκδοση κώδικα EMPIRE 3.2.2 έχει 4 δομοστοιχεία λογισμικού για την πρώιμη αποδιέγερση: MSD, MSC, HMS και PCROSS. Παρόλο που τα MSC και MSD περιγράφουν διαφορετικούς μηχανισμούς αντίδρασης, είναι συμβατά και μάλιστα συμπληρωματικά, ενώ κανένα δεν είναι συμβατό με την ταυτόχρονη χρήση των HMS και PCROSS. Αυτό σημαίνει ότι τα MSC, MSD δε μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα με το PCROSS (οι προσομοιώσεις Monte Carlo –HMS δε χρησιμοποιήθηκαν) στο ίδιο κανάλι εξόδου. Τα πρότυπα αυτά μπορούν όμως να συνδυαστούν για διαφορετικά κανάλια εξόδου, π.χ. η ανελαστική σκέδαση νετρονίων μπορεί να υπολογιστεί με τη χρήση των MSC, MSD ενώ η εκπομπή των πρωτονίων να αντιμετωπίζεται στα πλαίσια του προτύπου εξιτονίων με το PCROSS. Για την αποφυγή διπλής μέτρησης κατά το συνδυασμό διάφορων προτύπων, ο κώδικας EMPIRE εφαρμόζει τις εξής προτεραιότητες:

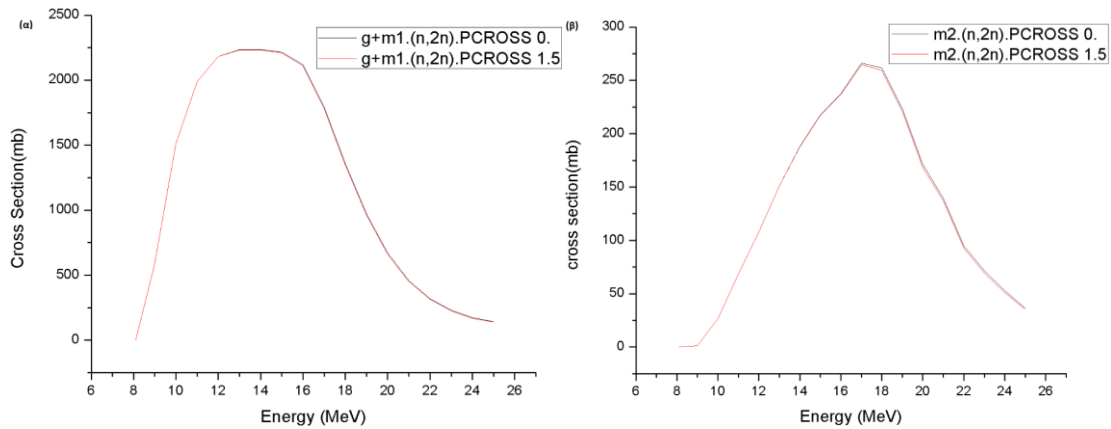
- I. Οι υπορουτίνες ECIS06 ή OPTMAN παρέχουν ανελαστική σκέδαση στις συλλογικές καταστάσεις (*provides inelastic scattering to collective levels*) ανεξάρτητα από τις υπόλοιπες ρυθμίσεις.
- II. Η υπορουτίνα MSD παρέχει ανελαστική σκέδαση στο συνεχές (*provides inelastic continuum*) ανεξάρτητα από τις υπόλοιπες ρυθμίσεις. Η ανελαστική στις διακριτές καταστάσεις περιορίζεται όταν το ECIS06 είναι ενεργοποιημένο.
- III. Η MSC παρέχει αποτελέσματα για την ανελαστική στο συνεχές (*for the inelastic to the continuum*). Η ανταλλαγή φορτίου (*charge exchange*) αποκόπτεται όταν μαζί του είναι ταυτόχρονα ενεργοποιημένο το PCROSS ή το HMS.
- IV. Η HMS παρέχει ανελαστική και ανταλλαγή φορτίου στο συνεχές και τις διακριτές καταστάσεις αν τα MSD και MSC είναι απενεργοποιημένα.
- V. Η υπορουτίνα PCROSS παρέχει αποτελέσματα για ανελαστική και ανταλλαγή φορτίου στο συνεχές αν αυτά δεν παρέχονται από μία από τις παραπάνω υπορουτίνες.

Use of direct and preequilibrium models

Exit channel	ECIS	MSD	MSC	HMS	PCROSS
neut. disc.	0	1	0	0	0
neut. cont.	0	1	1	0	0
prot. disc.	0	0	0	0	0
prot. cont.	0	0	0	0	1
gammas	0	0	0	0	1
alpha cont.	0	0	0	0	1

Σχήμα 3.3.1. Η χρήση και η συμβατότητα των κβαντομηχανικών και των φαινομενολογικών προτύπων στον κώδικα EMPIRE 3.2.2

Πρακτικά, η συνεισφορά του PCROSS στους θεωρητικούς υπολογισμούς των ενεργών διατομών των μετασταθών και της βασικής κατάστασης είναι αμελητέα, κατά την ταυτόχρονη επιλογή του στην τιμή 1.5 (Προεπιλογή) με τα MSD, MSC. Λόγω προτεραιότητας το PCROSS αποκόπτεται και δεν συνεισφέρει στα αποτελέσματα των υπολογισμών. Σε δοκιμαστικά runs με το OMP του F.D.Becchetti [59], αριθμού καταλόγου 100, για τον υπολογισμό της ενεργού διατομής σχηματισμού της $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και της $^{190}\text{Ir}^{m2}$ στο κανάλι (n,2n) της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ συγκρίνεται η ενεργοποίηση προτύπου εξιτονίων (PCROSS 1.5) και η απενεργοποίησή του (PCROSS 0.) με την ταυτόχρονη ενεργοποίηση των MSC και MSD (Σχήμα 3.3.2).

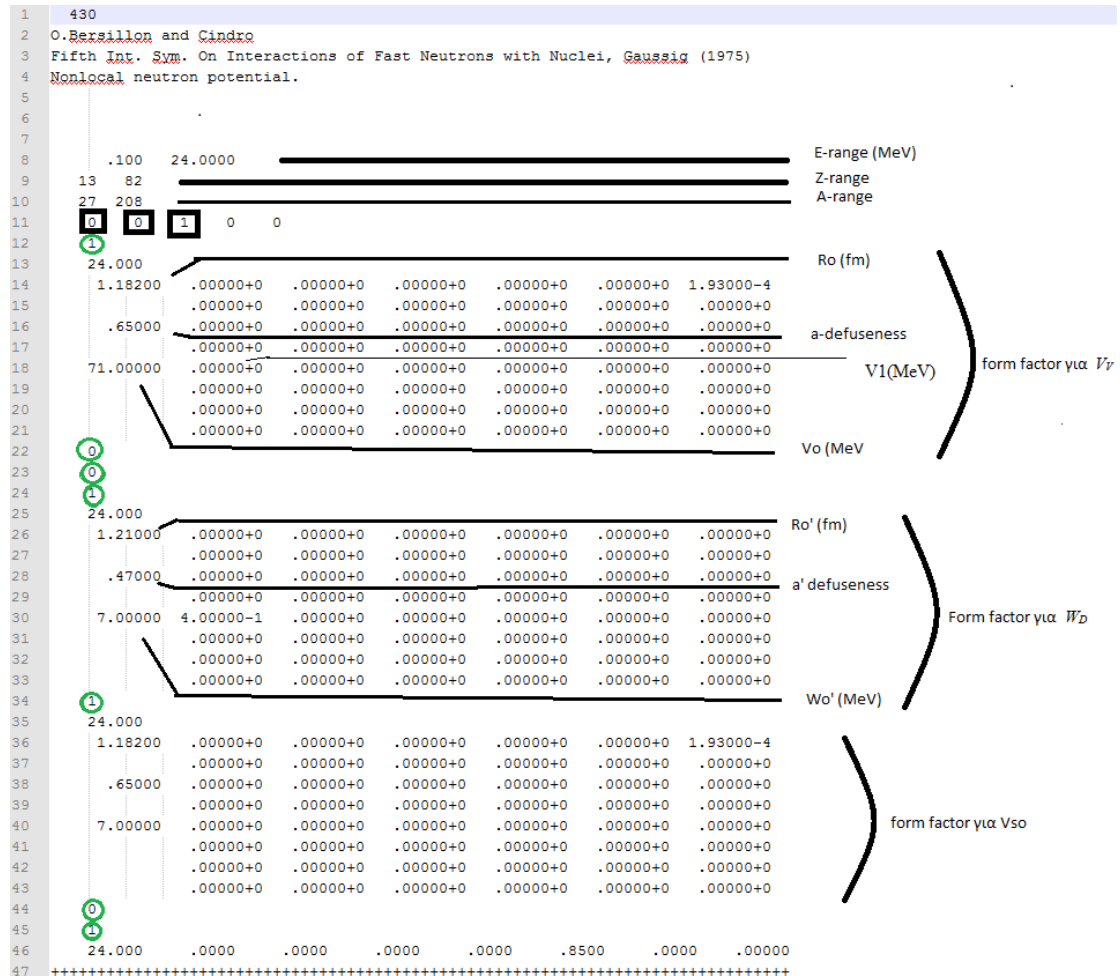


Σχήμα 3.3.2. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και (β) $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ με χρήση τυχαίου προτύπου οπτικού δυναμικού. Η συνεισφορά του PCROSS με ενεργοποιημένα τα πρότυπα MSD και MSC αποκόπτεται και είναι αμελητέα.





3.4 Ανάλυση αρχείου προτύπου Οπτικού δυναμικού

Διερευνώντας τη δομή των αρχείων της RIPL για τα πρότυπα οπτικού δυναμικού, μπορεί κάποιος να διερωτηθεί με ποιόν τρόπο εισάγονται οι παράμετροι των εξισώσεων (2.1.1.1) και (2.1.1.2) μέσα στον κώδικα. Με τη βοήθεια του εγχειριδίου της RIPL (RIPL-handbook)[61],

ανοίγοντας οποιοδήποτε από τα αρχεία των OMP (*empire-3.2.2/ripl/optical/.../om-parameter-dir*) μπορούμε να εντοπίσουμε τη θέση κάθε παραμέτρου.



Σχήμα 3.4.1. Παράδειγμα αρχείου οπτικού μοντέλου δυναμικού, Bersillon [61], με την επεξήγηση της δομής του. Διευκρινήσεις στο Σχήμα 4.2.2.

-   Από αριστερά προς τα δεξιά
 -Μοντέλο Δυναμικού: 0 Σφαιρικό Δυναμικό, 1 Συζευγμένο Κανάλι, Περιστρεφόμενο πρότυπο Δυναμικού
 -Ατομικός Αριθμός βλήματος
 -Μαζικός Αριθμός βλήματος
-   Κατάλογος 7 παραγόντων μορφής κατά σειρά εμφάνισης
 1. Πραγματικό μέρος όγκου δυναμικού V_0 (*real volume potential*)
 2. Φανταστικό μέρος όγκου δυναμικού W_0 (*imaginary volume potential*)
 3. Πραγματικό μέρος δευτερογενούς επιφανειακού δυναμικού (*real surface derivative potential*)
 4. Φανταστικό μέρος δευτερογενούς επιφανειακού δυναμικού (*imaginary surface derivative potential*)
 5. Πραγματικό μέρος δυναμικού σπιν-τροχιάς V_{so} (*real s-o potential*)
 6. Φανταστικό μέρος δυναμικού σπιν-τροχιάς (*imaginary s-o potential*)
 7. Δυναμικό Coulomb (*Coulomb potential*)

Σχήμα 3.4.2. Διευκρινήσεις του Σχήματος 4.2.1

Στο Σχήμα 3.4.1, παρουσιάζεται ως παράδειγμα ένα τυχαίο από τα αρχεία OMP, του Bersillon και Cindro [61] αριθμού καταλόγου 430, καθώς και η επεξήγηση των δεδομένων σε αυτό.

Στην πρώτη γραμμή είναι ο αριθμός καταλόγου. Στη δεύτερη και τρίτη, ο δημιουργός του OMP με τη σχετική βιβλιογραφία. Στην τέταρτη, μια σύντομη περιγραφή του δυναμικού. Στην όγδοη ενεργειακό εύρος. Στην ένατη και δέκατη, εύρος ατομικού και μαζικού αριθμού πυρήνα αντίστοιχα. Τα ψηφία της ενδέκατης γραμμής διευκρινίζονται στο Σχήμα 3.4.2. Τα επτά κυκλωμένα ψηφία αναφέρονται σε επτά παράγοντες μορφής της εξίσωσης (2.1.1.1) για το δυναμικό, με τη σειρά που αναφέρονται στο Σχήμα 3.4.2. Για τιμή 0, ο παράγοντας μορφής είναι μηδενικός, ενώ για τιμή 1 λαμβάνει την επιθυμητή από το δημιουργό παραμετροποίηση. Στο Σχήμα 3.4.1 π.χ. έχουν ένδειξη 1 οι παράγοντες μορφής V_V , W_D , V_{SO} , και οι αντίστοιχοι παράμετροί τους r ακτίνα και a παράμετρο διάχυσης λαμβάνουν τιμές, ενώ οι υπόλοιποι παράγοντες μορφής έχουν τιμή μηδέν.

Φυσικά, στο εγχειρίδιο του κώδικα EMPIRE δε συστήνεται η τροποποίηση κάποιου υπάρχοντος αρχείου προτύπου οπτικού δυναμικού της βιβλιοθήκης RIPL. Μας δίνεται όμως η δυνατότητα παραμετροποίησης δικής μας επιλογής καθώς και ο έλεγχός της μέσω σχετικών θεωρητικών υπολογισμών.

4

Θεωρητικοί Υπολογισμοί αντιδράσεων

$^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$, μελέτη

προτύπων Οπτικού δυναμικού και πυκνότητας

καταστάσεων

Για τη βέλτιστη αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων από τις θεωρητικές καμπύλες ενεργών διατομών σχηματισμού του $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, του $^{190}\text{Ir}^{m2}$ και του $^{192}\text{Ir}^{g+m1}$ στον κώδικα EMPIRE 3.2.2, έγιναν δοκιμαστικοί υπολογισμοί έκαστος για όλα τα διαθέσιμα σφαιρικά πρότυπα οπτικού δυναμικού OMP στον κατάλογο της RIPL, σε όλους τους συνδυασμούς προτύπων πυκνότητας καταστάσεων, με τα πρότυπα πρώιμης αποδιέγερσης πολλαπλών βημάτων MSD, MSC ενεργοποιημένα, για ενέργειες από 8 ως 25 MeV.

4.1 Πρότυπο Οπτικού Δυναμικού και Πυκνότητα

καταστάσεων

Στο ερευνητικό κομμάτι της εργασίας, αρχικά, έγινε ο εντοπισμός όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού της RIPL, για προσπίπτοντα νετρόνια με τα χαρακτηριστικά

του ατομικού και μαζικού αριθμού του ^{191}Ir και ^{193}Ir . Τα μοντέλα οπτικού δυναμικού που δοκιμάστηκαν στους θεωρητικούς υπολογισμούς των ενεργών διατομών ήταν,

- Του F.D.Becchetti, αριθμός καταλόγου RIPL 100 [59]
- Του D.Wilmore, αριθμός καταλόγου RIPL 401 [62].
- Του O.Bersillon, α.κ. RIPL 430 [60]
- Του M.B.Chadwick, α.κ. RIPL 2011 και 2012 για κάθε ισότοπο του ιριδίου αντίστοιχα [63].
- Του R.L.Varner, α.κ. RIPL 2100 [64].
- Του R.L.Walter, α.κ. RIPL 2101 [65]
- Του A.J.Koning, α.κ. RIPL 2405 [66]
- Του B.Morillon, α.κ RIPL 2407 [67]

Έπειτα, για όλους τους δυνατούς συνδυασμούς προτύπων πυκνότητας καταστάσεων έγιναν θεωρητικοί υπολογισμοί με το καθένα από τα πρότυπα οπτικού δυναμικού και στα δύο ισότοπα του ιριδίου. Το πρότυπο Gilbert-Cameron εφαρμοσμένο στα νέα πειραματικά δεδομένα (refitted GCM) με την προσέγγιση Ijino [43] (LEVDEN 2) δεν έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα και δεν παρουσιάζεται.

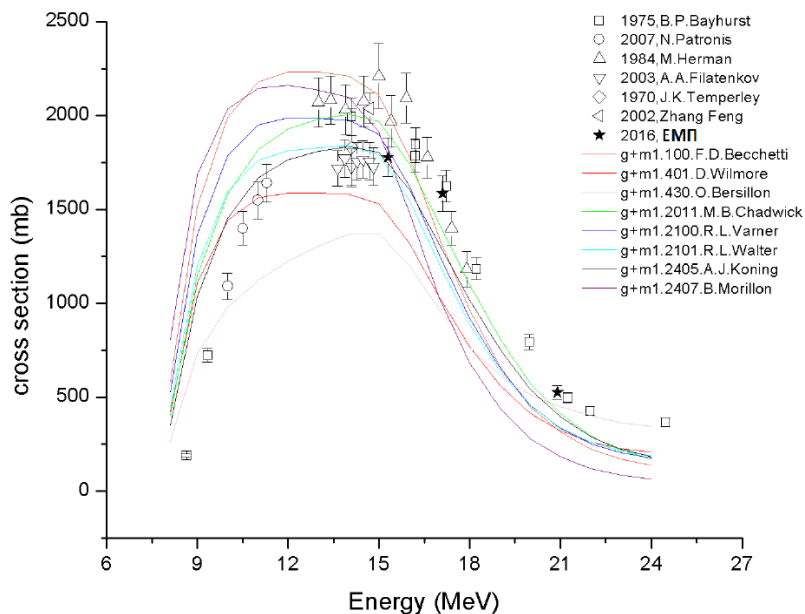
4.1.1 Μελέτη κατάλληλου συνδυασμού προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον θεωρητικό υπολογισμό ενεργού διατομής της $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$

Για τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ χρησιμοποιήθηκαν όλα τα διαθέσιμα, από τη RIPL, local και global πρότυπα οπτικού δυναμικού για το ^{191}Ir , σε συνδυασμό με τα πρότυπα πυκνότητας καταστάσεων και τη χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 [54] για τη συνάρτηση Ισχύος ακτίνων-γ (GSTRFN 1) Από όλους τους συνδυασμούς προτύπων δόθηκε προτεραιότητα σε αυτούς που αναπαράγουν με μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα της ομάδας του Ε.Μ.Π. [68] και της βάσης δεδομένων EXFOR για την ενεργό διατομή σχηματισμού των $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και $^{190}\text{Ir}^{m2}$ στο κανάλι (n,2n).

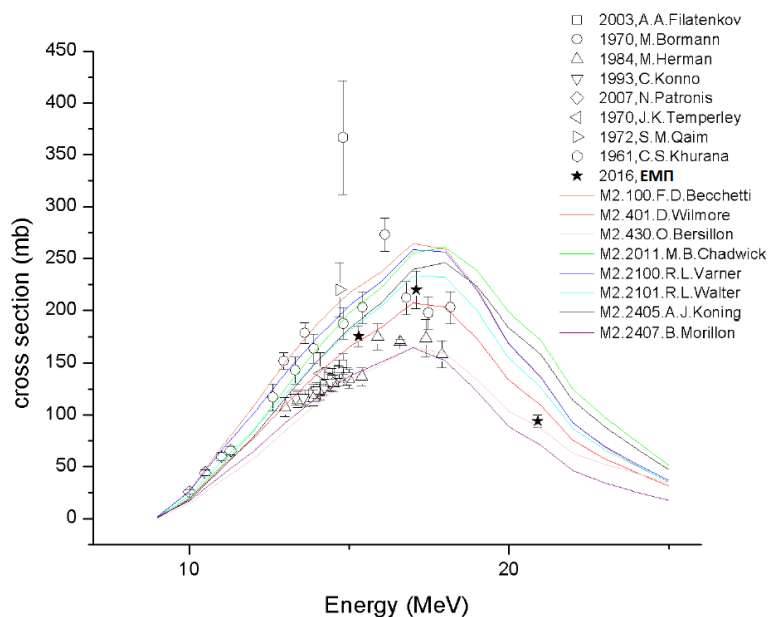
Α. Μελέτη Προτύπων Οπτικού Δυναμικού

Αρχικά, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής για τις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, για όλα τα διαθέσιμα οπτικά μοντέλα δυναμικού και με πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού, ως προεπιλογή στον κώδικα EMPIRE (LEVDEN 0). Στο Σχήμα 4.1.1 περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για τις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ προς σύγκριση με τα πειραματικά σημεία της EXFOR και της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής ΕΜΠ [68], της οποίας οι πειραματικές μετρήσεις έγιναν με τη μέθοδο της ενεργοποίησης, σε σχέση με αυτήν της αντίδρασης $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$, για ενέργειες δέσμης νετρονίων 17.1 και 20.9 MeV. Οι μονοενεργειακές δέσμες νετρονίων παράχθηκαν στον επιταχυντή Tandem T11/25 των 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, μέσω της αντίδρασης $^3\text{H}(d,n)^4\text{He}$, χρησιμοποιώντας στόχο τριτιωμένου Τιτανίου σε υπόστρωμα χαλκού.

Παρατηρούμε ότι με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM) [46] (LEVDEN 0), η θεωρητική καμπύλη που αναπαράγει με μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα για το σχηματισμό του $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και του $^{190}\text{Ir}^{m2}$ στο κανάλι (n,2n) είναι εκείνη του προτύπου οπτικού δυναμικού του Chadwick (αρ.κατ. RIPL 2011). Όπως φαίνεται, στην αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, υπερεκτιμά τις χαμηλές ενέργειες και υποεκτιμά τις υψηλές. Ταυτόχρονα, στην $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, Σχήμα 4.1.2, παρατηρούμε ότι η θεωρητική



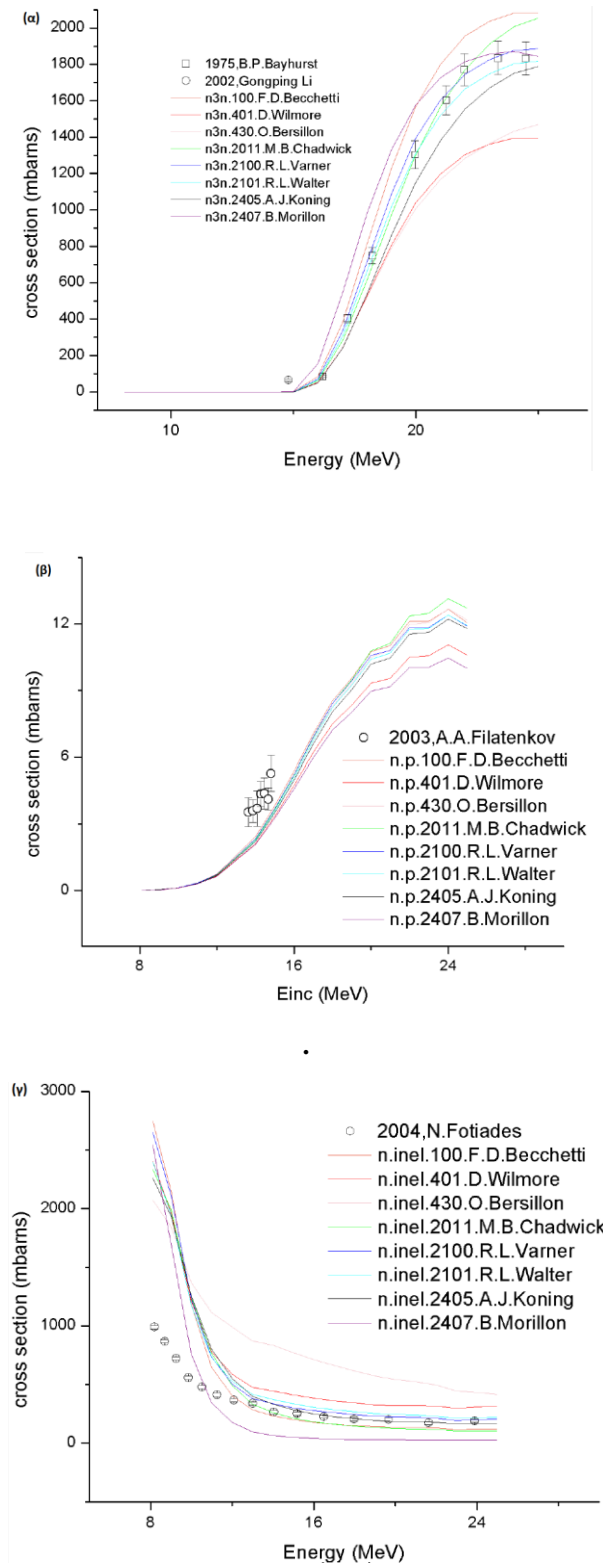
Σχήμα 4.1.1 Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ σταθμών, στο κανάλι (n,2n) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM) (LEV DEN 0)



Σχήμα 4.1.2. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM) (LEV DEN 0)

καμπύλη του Chadwick (2011) αποκλίνει πολύ των πειραματικών δεδομένων. Επομένως, ο συνδυασμός αυτός των προτύπων δεν είναι η καλύτερη επιλογή, καθώς δεν αναπαράγει με ακρίβεια τα πειραματικά σημεία των αντιδράσεων. Στη συνέχεια υπολογίστηκαν οι ενεργές

διατομές για τα κανάλια (n,3n), (n,inel) και (n,p), όπως παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.1.3 (α)(β)(γ) με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα που βρέθηκαν στην EXFOR.



Σχήμα 4.1.3. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$ (α), $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ (β) $^{191}\text{Ir}(n,inel)^{191}\text{Ir}$ (γ) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM) (LEV DEN 0).

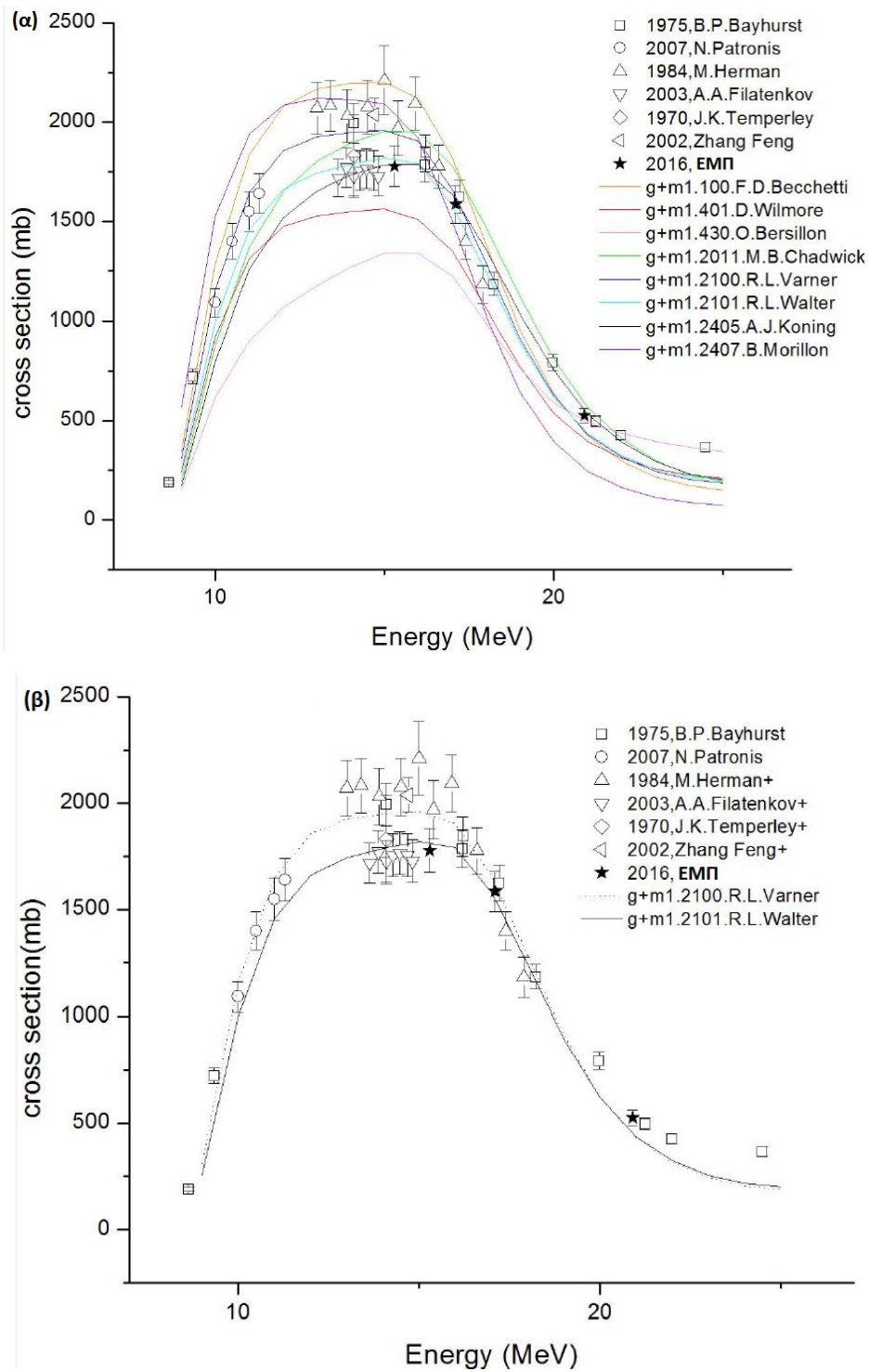
Συγκεντρωτικά, τα διαθέσιμα πρότυπα οπτικού δυναμικού στον κώδικα EMPIRE, σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού, κατά πλειοψηφία υπερεκτιμούν, στις χαμηλές ενέργειες, την τιμή της ενεργού διατομής της $g+m1$ στο κανάλι $(n,2n)$ ενώ την υποεκτιμούν στις υψηλές. Αντίθετα, οι θεωρητικές καμπύλες των OMP των Wilmore (401) και Walter (2101) για την ενεργό διατομή της $m2$ μετασταθούς, στο $(n,2n)$ κανάλι φαίνεται να αναπαράγουν με ιδιαίτερη επιτυχία όλα τα πειραματικά δεδομένα. Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι δοκιμές των άνω οπτικών δυναμικών στον κώδικα για τη διερεύνηση του κατάλληλου προτύπου πυκνότητας καταστάσεων

B. Μελέτη Προτύπων Πυκνότητας Καταστάσεων

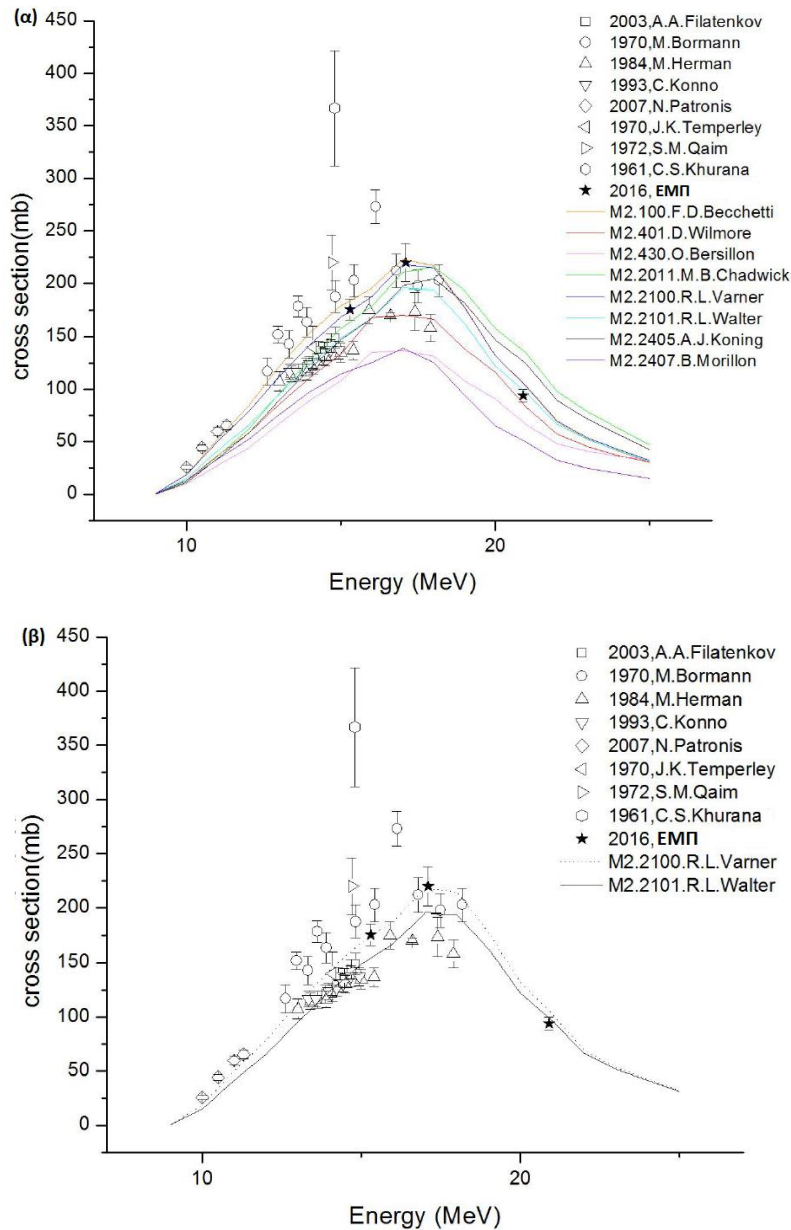
Μέσα στα πλαίσια της μελέτης αυτής, δοκιμάστηκαν στον κώδικα EMPIRE τα, διαθέσιμα από τη RIPL, OMP σε συνδυασμό με το πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού, το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) και την προσέγγιση Gilbert-Cameron.

Αρχικά, στο Σχήμα 4.1.5 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για τις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP, μαζί με τα πειραματικά σημεία της ομάδας EMΠ και της EXFOR. Στο Σχήμα 4.1.5 (β) παρατηρούμε ότι με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk [44,45] (LEV DEN 1) οι θεωρητικές καμπύλες των OMP του Varner (2100) και Walter (2101) αναπαράγουν με τη μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα για το σχηματισμό του $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ στο κανάλι $(n,2n)$. Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk, υπερεκτιμά την ενεργό διατομή στις χαμηλές ενέργειες, ενώ από τα 15 MeV κι έπειτα, συγκλίνει με τη θεωρητική καμπύλη του Walter αναπαράγοντας με επιτυχία τα πειραματικά δεδομένα.

Για την ενεργό διατομή της $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk, στο Σχήμα 4.1.6 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP, μαζί με τα πειραματικά σημεία της ομάδας EMΠ και της EXFOR. Στο Σχήμα 4.1.6 (β) παρατηρούμε ότι η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) αναπαράγει επιτυχώς τα πειραματικά δεδομένα ενώ εκείνη του Walter (2101) υποεκτιμά την τιμή της ενεργού διατομής στις χαμηλές ενέργειες.

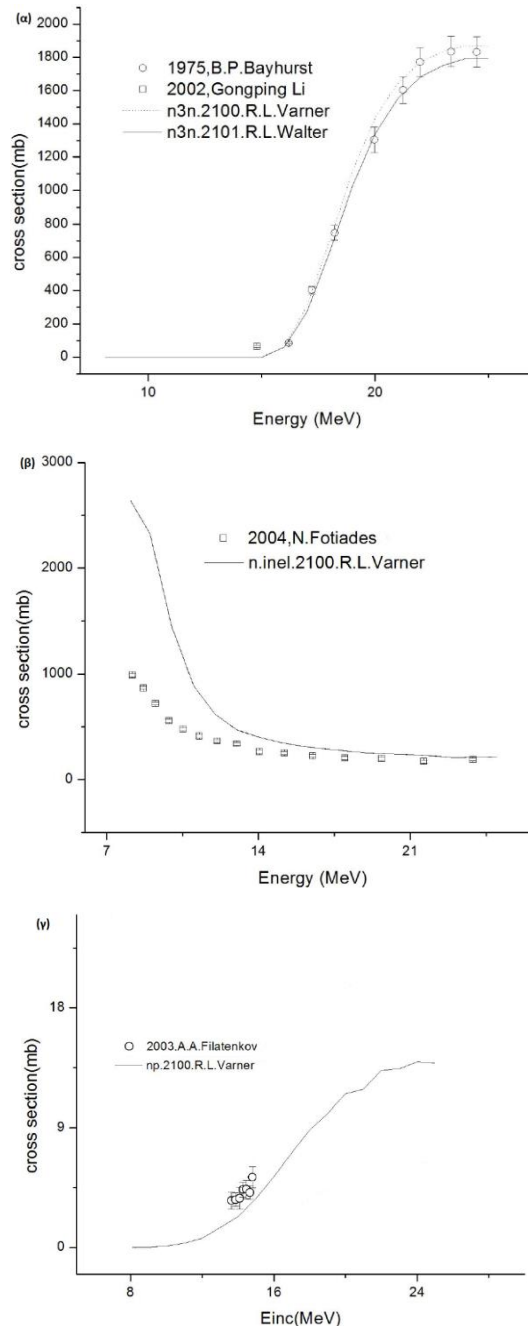


Σχήμα 4.1.5. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk (LEV DEN 1).



Σχήμα 4.1.6. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk (LEV DEN 1).

Εκτός της βασικής και των δύο μετασταθών σταθμών στο κανάλι (n,2n), υπολογίζονται οι ενεργές διατομές στα ανοικτά κανάλια αντίδρασης για τα οποία υπήρχαν διαθέσιμα προς σύγκριση πειραματικά δεδομένα στη βιβλιοθήκη EXFOR. Στο Σχήμα 4.1.7 (α)(β)(γ) περιέχονται οι θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω κώδικα EMPIRE των ενεργών διατομών των καναλιών (n,3n), (n,inel) και (n,p), με χρήση των OMP των Varner (2100) και Walter (2101), προς σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα που βρέθηκαν στην EXFOR.

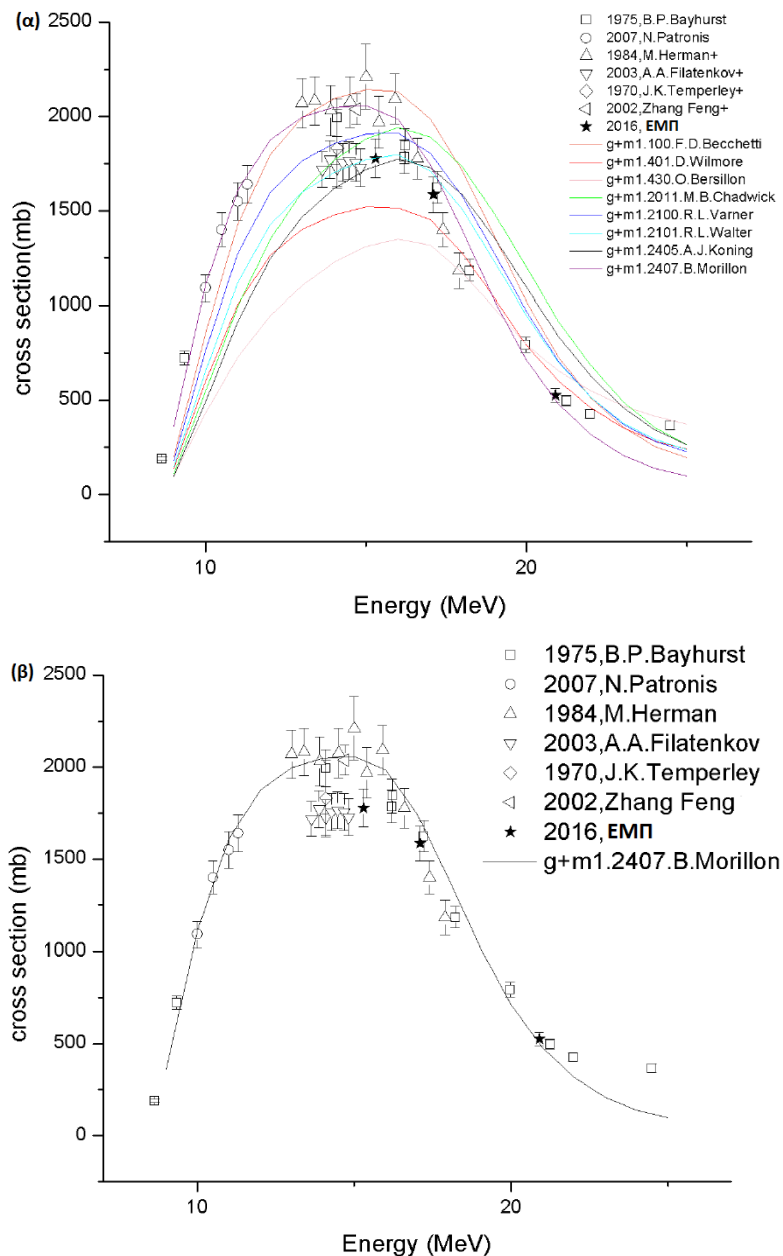


Σχήμα 4.1.7. Θεωρητικοί υπολογισμοί ενεργού διατομής των αντιδράσεων (α) $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, (β) $^{191}\text{Ir}(n,\text{inel})^{191}\text{Ir}$ και (γ) $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk (LEV DEN 1).

Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk, αναπαράγει ικανοποιητικά τα πειραματικά σημεία του καναλιού (n,3n), ενώ αποκλίνει από αυτά στα κανάλια (n,inel) και (n,p).

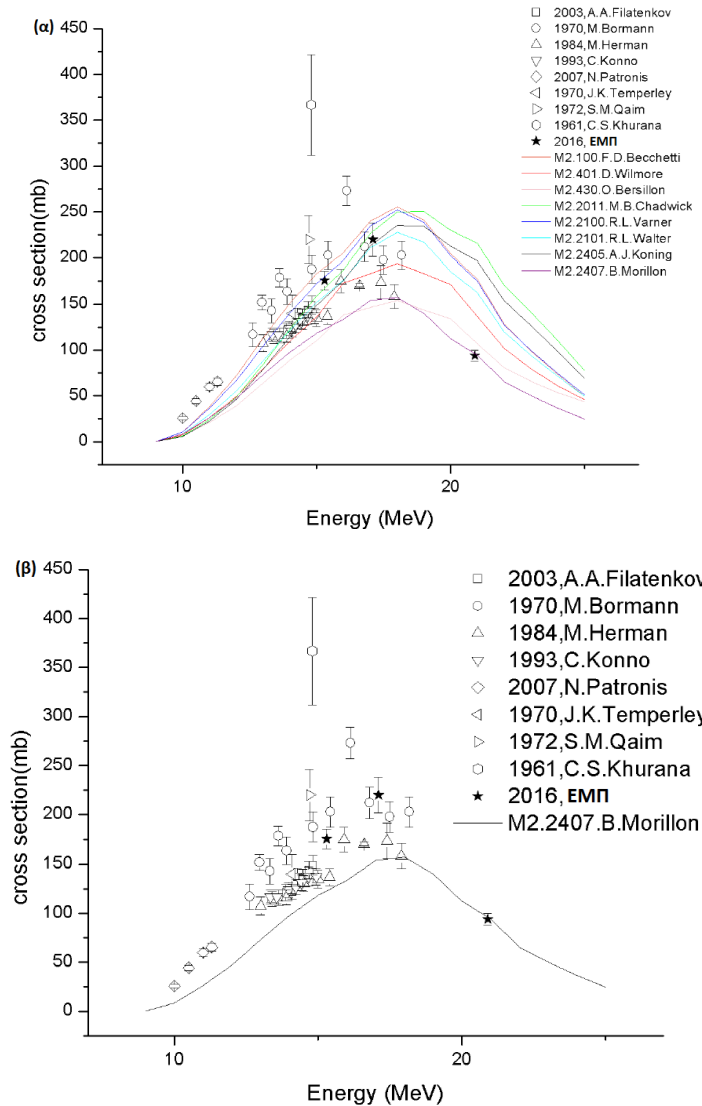
Έπειτα, έγιναν δοκιμές θεωρητικών υπολογισμών στον κώδικα, για όλα τα διαθέσιμα οπτικά δυναμικά σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEV DEN 3). Στο Σχήμα 4.1.8 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της

ενεργού διατομής για τις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, των διαθέσιμων OMP σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων HFBM, μαζί με τα πειραματικά σημεία της ομάδας EMI και της EXFOR. Παρατηρούμε στο Σχήμα 4.1.8 (β), ότι με το πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) η θεωρητική καμπύλη του OMP του Morillon (2407) αναπαράγει με τη μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα για το σχηματισμό της $^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ στάθμης στο κανάλι (n,2n), υπερεκτιμώντας όμως την ενεργό διατομή στις υψηλές ενέργειες.



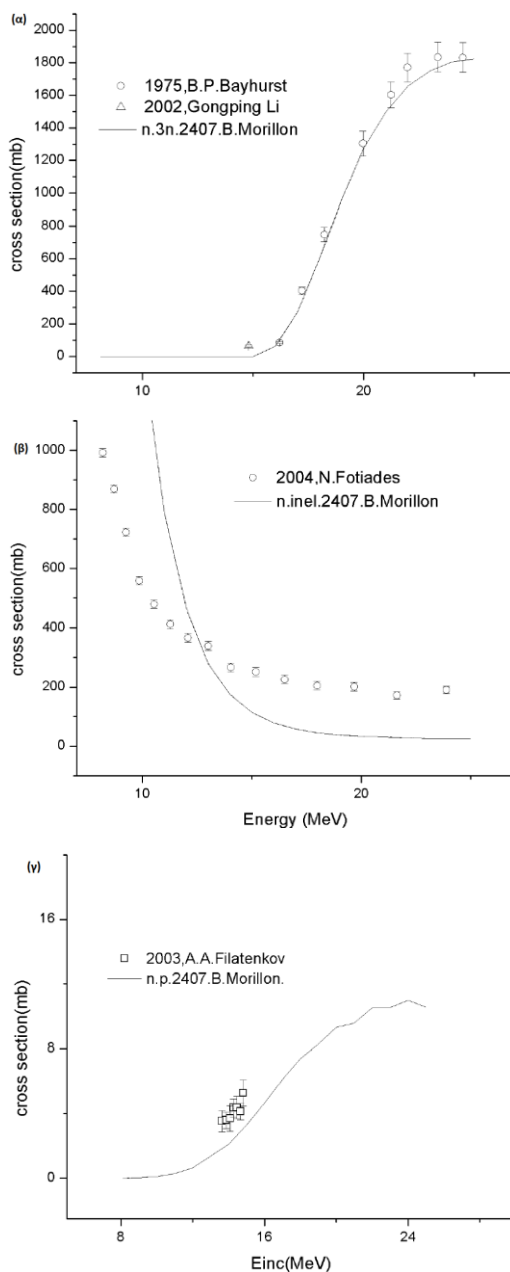
Σχήμα 4.1.8. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Morillon (2407) σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEV DEN 3).

Στη συνέχεια, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί για τη δεύτερη μετασταθή στάθμη για το κανάλι (n,2n), για τα διαθέσιμα OMP σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο HFBM. Στο Σχήμα 4.1.9 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP, με το μικροσκοπικό πρότυπο των HFBM, σε σύγκριση με τα πειραματικά σημεία της ομάδας EMΠ και της EXFOR. Για την ενεργό διατομή της $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, Σχήμα 4.1.9 (β), παρατηρούμε πως η θεωρητική καμπύλη του Morillon (2407) αποκλίνει των πειραματικών σημείων στις χαμηλές και υψηλές ενέργειες.



Σχήμα 4.1.9. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Morillon (2407) σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEVDEN 3).

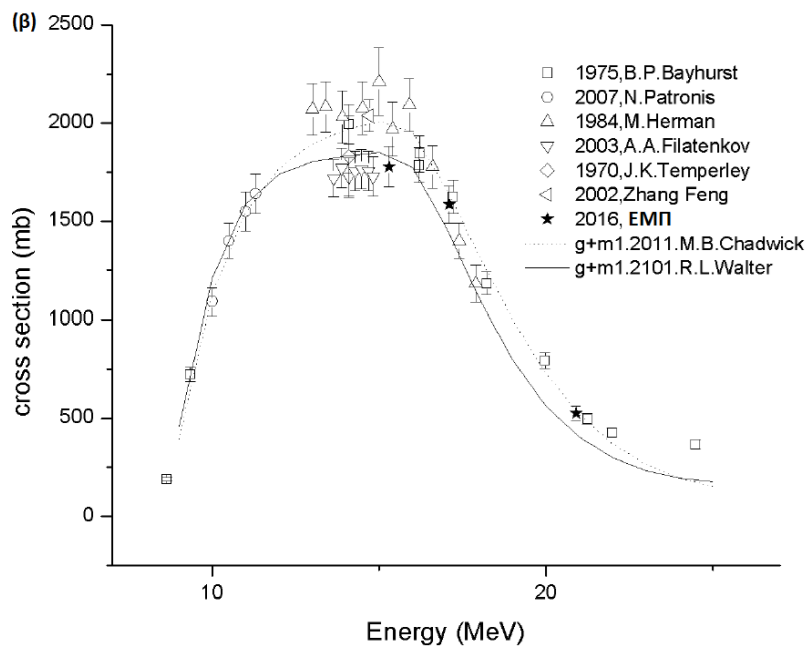
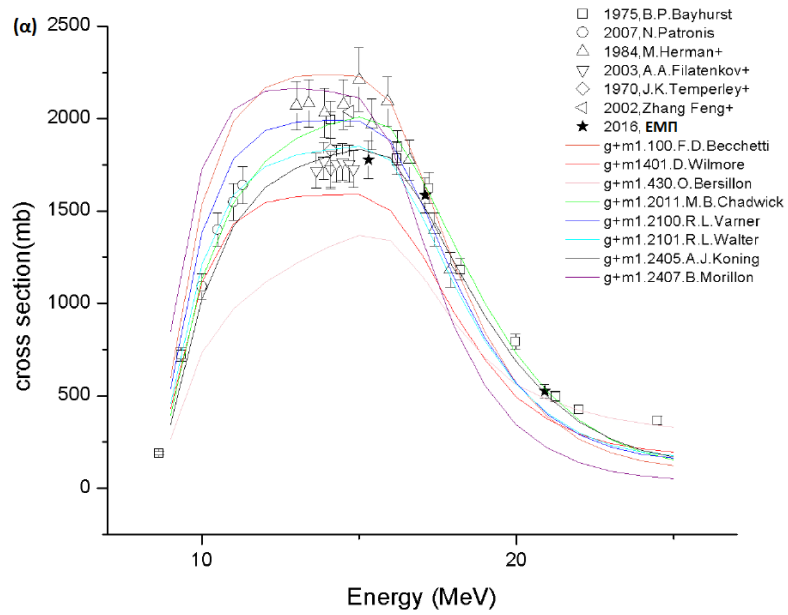
Οι θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE των ενεργών διατομών των καναλιών (n,3n), (n,inel) και (n,p), με χρήση του OMP του Morillon (2407), παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.1.10 (α)(β)(γ), προς σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα που βρέθηκαν στην EXFOR. Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Morillon (2407) με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov, αναπαράγει ικανοποιητικά τα πειραματικά σημεία του καναλιού (n,3n), ενώ αποκλίνει από αυτά στα κανάλια (n,inel) και (n,p).



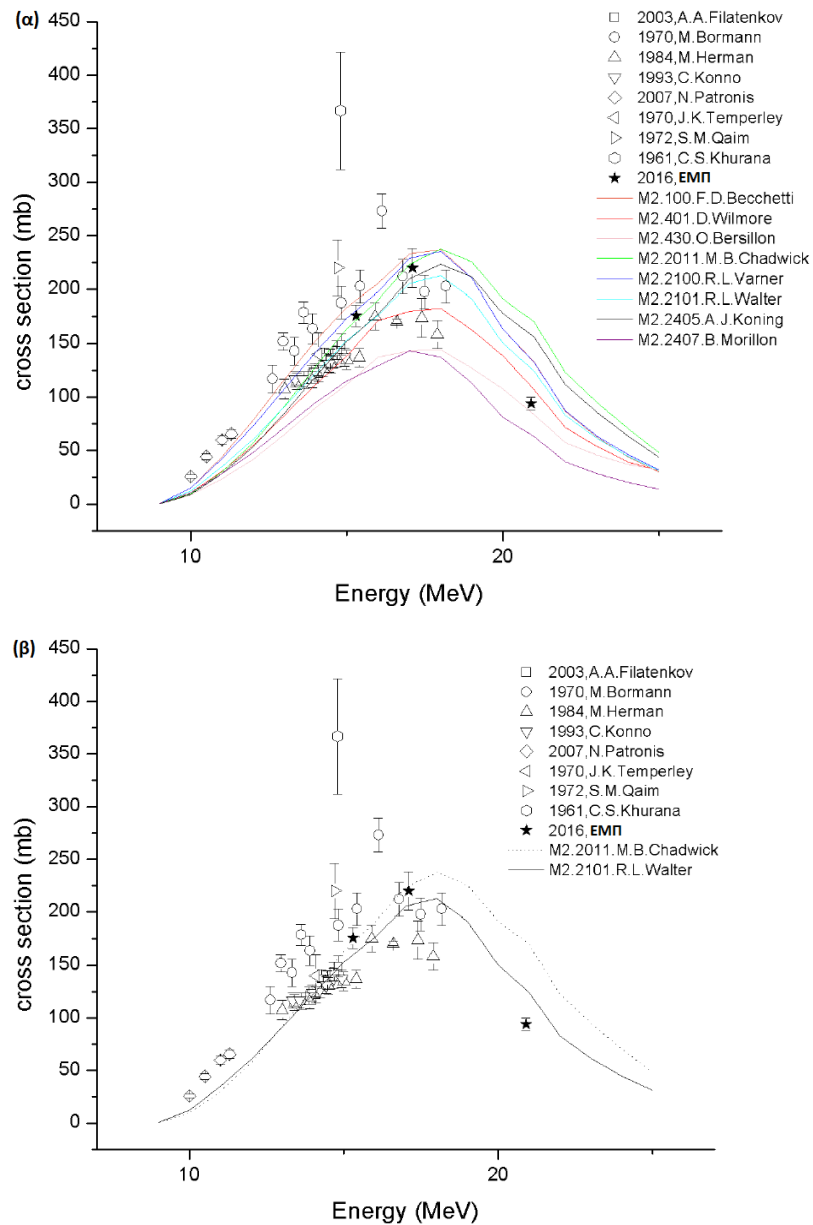
Σχήμα 4.1.10. . Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής των αντιδράσεων (α) $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, (β) $^{191}\text{Ir}(n,\text{inel})^{191}\text{Ir}$ και (γ) $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Morillon (2407) σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HF-BM) (LEV2EN 3), για ενέργειες 8 ως 25 MeV.

Έπειτα, για πυκνότητες καταστάσεων με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18) [43,17], οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για τις αντιδράσεις $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.1.11 (α), προς σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ και της EXFOR. Στο Σχήμα 4.1.11 (β), παρατηρούμε ότι οι θεωρητικές καμπύλες των OMP των Walter (2101) και Chadwick (2011) συμπίπτουν με την πειραματική καμπύλη, ενώ εκείνη του Chadwick υπερεκτιμά την ενεργό διατομή στις υψηλές ενέργειες. Στο Σχήμα 4.1.12 παρουσιάζονται οι υπολογισμοί για την ενεργό διατομή της $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).

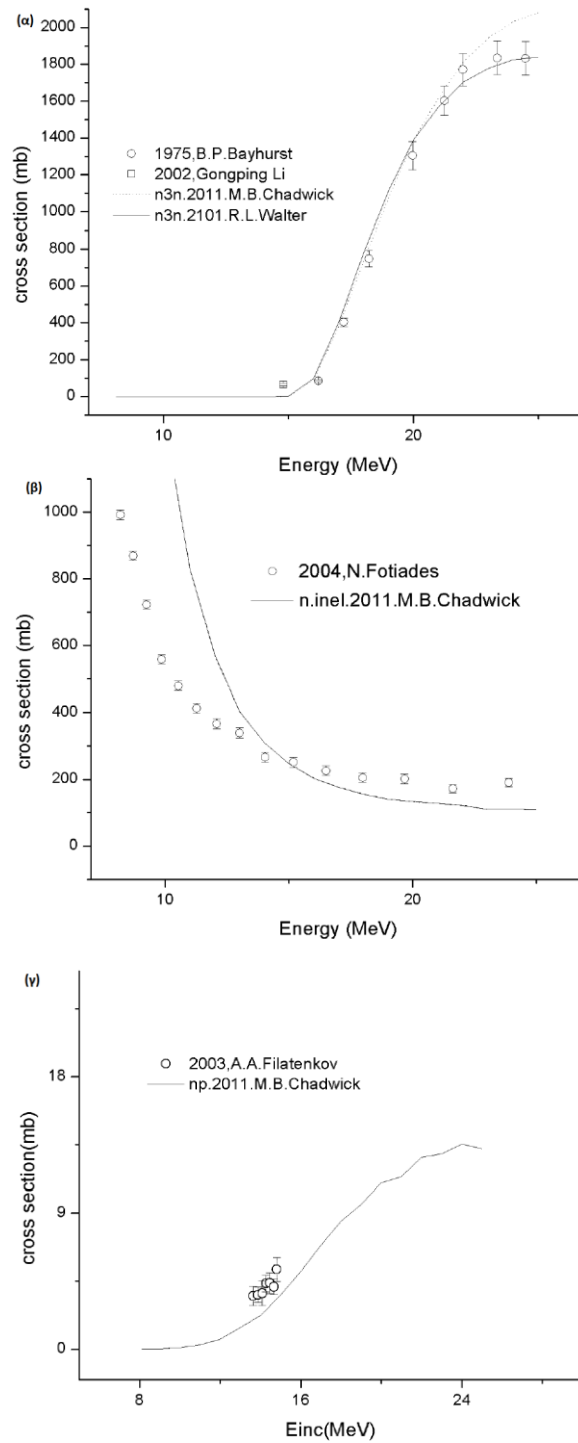
Κατόπιν, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί για τη δεύτερη μετασταθή στάθμη για το κανάλι (n,2n), με χρήση όλων των διαθέσιμων OMP σε συνδυασμό με το πρότυπο των Gilbert-Cameron (έκδοσης EMPIRE 2.18). Στο Σχήμα 4.1.12 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (έκδοσης EMPIRE 2.18). Στο Σχήμα 4.1.12 (β), παρατηρούμε ότι και τα δύο OMP των Walter (2101) και Chadwick (2011), υπερεκτιμούν τις πολύ υψηλές ενέργειες. Στη συνέχεια, για το κανάλι της αντίδρασης (n,3n) για τα δύο συγκεκριμένα OMP παρατηρούμε, στο Σχήμα 4.1.13 (α), την πολύ καλή αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων.



Σχήμα 4.1.11. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των Chadwick (2011) και Walter (2101) σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEVDEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).



Σχήμα 4.1.12. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα **EMPIRE** της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ (α) με χρήση όλων των προτύπων οπτικού δυναμικού, και (β) με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των Chadwick (2011) και Walter (2101) σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).



Σχήμα 4.1.13. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, (β) $^{191}\text{Ir}(n,\text{inel})^{191}\text{Ir}$ και (γ) $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Chadwick (2011) σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).

Για τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ενεργού διατομής των αντιδράσεων (n,inel) και (n,p), η καμπύλη του OMP των Walter (2101) αποκλίνει των πειραματικών σημείων της EXFOR, όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στο Σχήμα 4.1.13 (α)(β).

4.1.2 Μελέτη κατάλληλου συνδυασμού προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον θεωρητικό υπολογισμό ενεργού διατομής της $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$

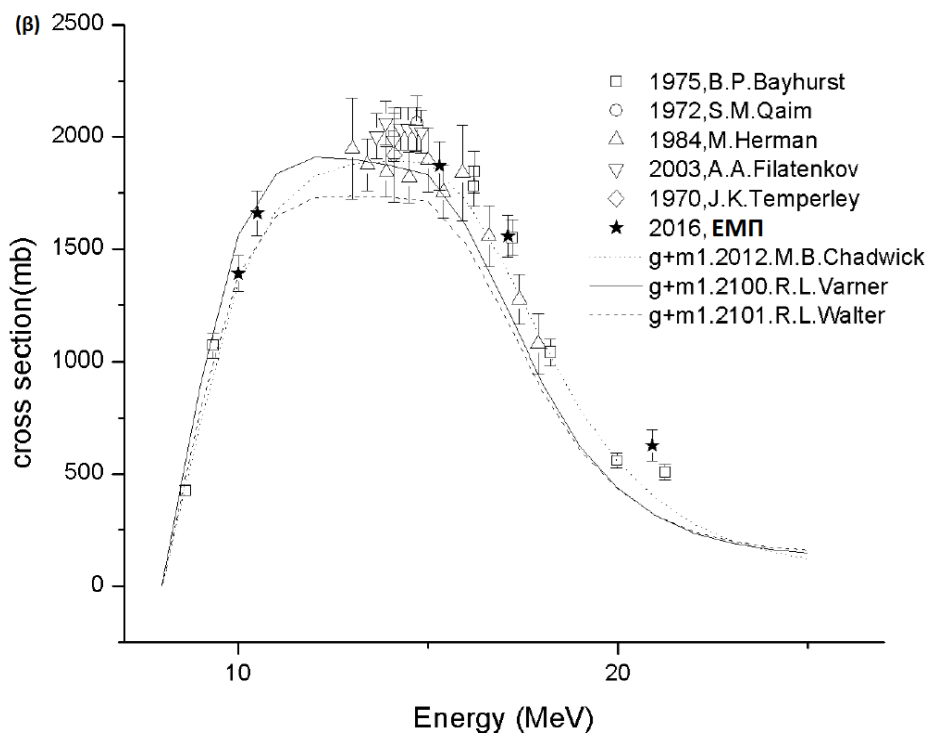
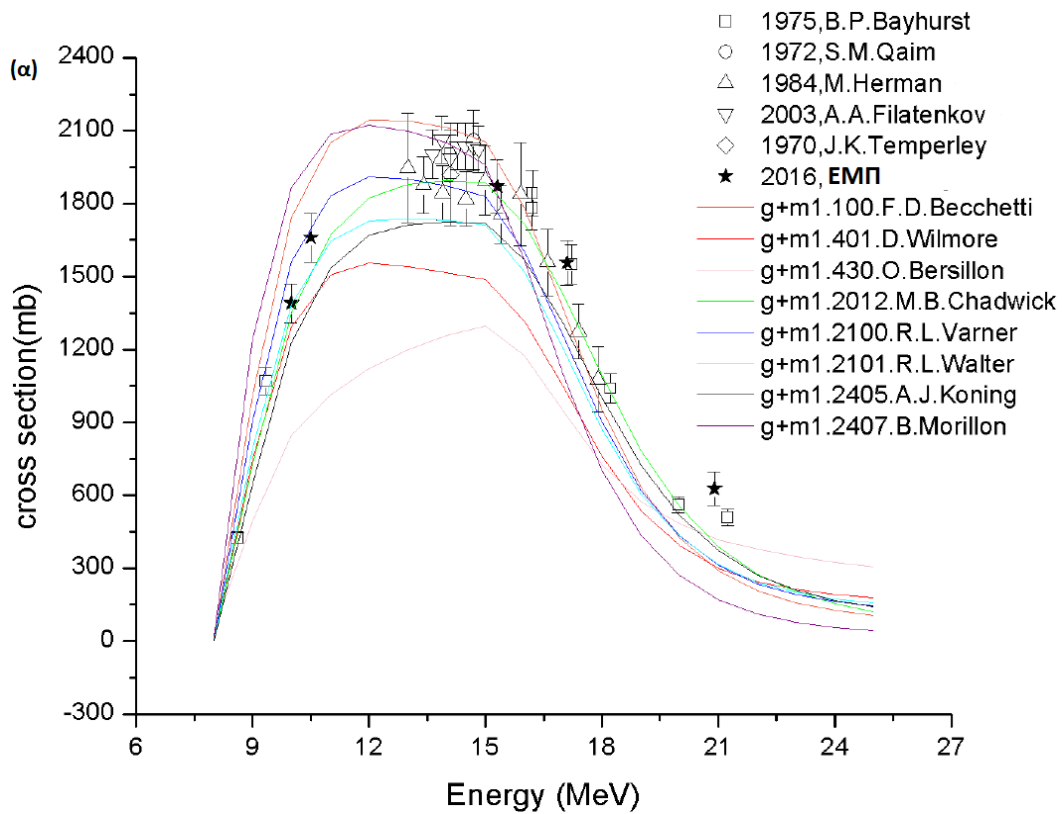
Για τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$, με το EMPIRE, χρησιμοποιήθηκαν όλα τα διαθέσιμα, από τη RIPL, local και global πρότυπα οπτικού δυναμικού για το ^{193}Ir , σε συνδυασμό με τα διάφορα πρότυπα πυκνότητας καταστάσεων και τη χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 [54] για τη συνάρτησης Ισχύος ακτίνων-γ (GSTRFN 1), στο ενεργειακό εύρος 8-25 MeV.

A. Μελέτη Προτύπων Οπτικού Δυναμικού

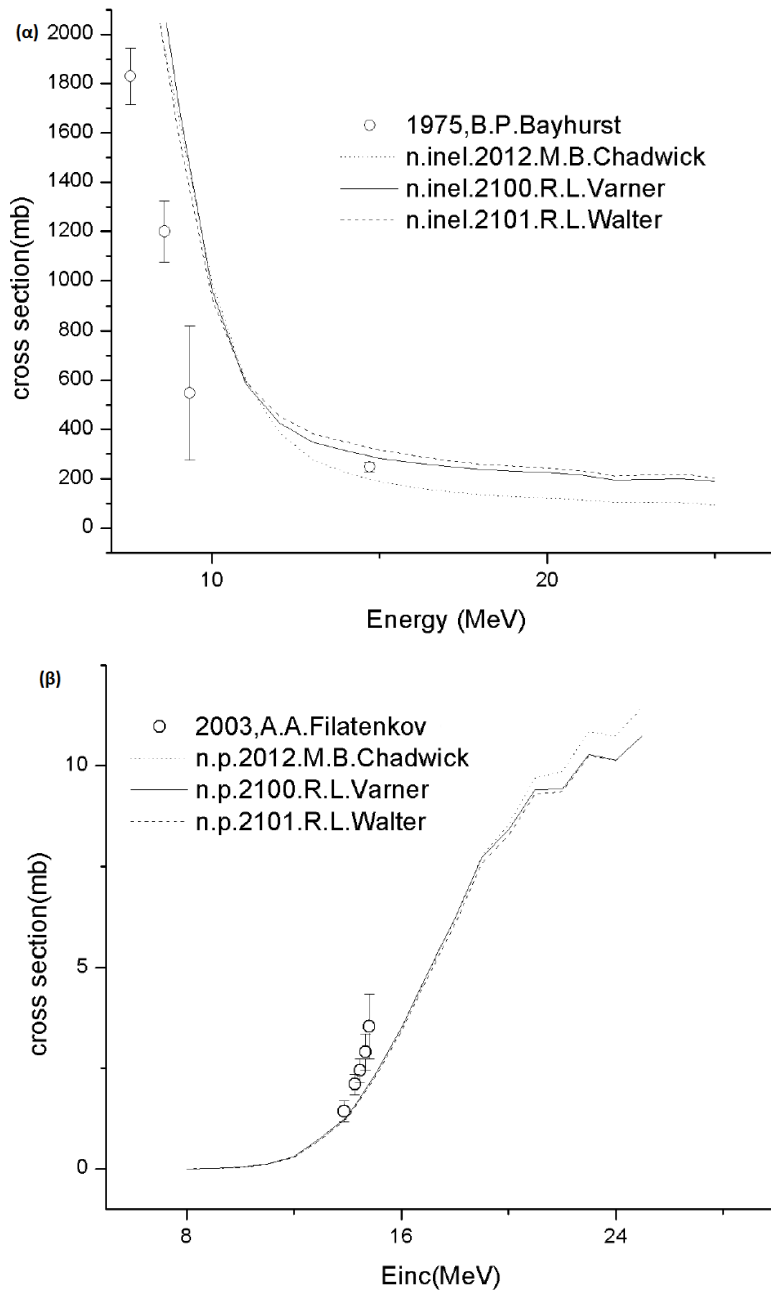
Αρχικά, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, για όλα τα διαθέσιμα οπτικά μοντέλα δυναμικού και με πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού, ως προεπιλογή στον κώδικα EMPIRE (LEV DEN 0). Στο Σχήμα 4.1.14 (α) περιέχονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP, ως προς σύγκριση με τα πειραματικά σημεία της EXFOR και της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής ΕΜΠ [68], της οποίας οι πειραματικές μετρήσεις έγιναν με τη μέθοδο της ενεργοποίησης, σε σχέση με αυτήν της αντίδρασης $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$, για ενέργειες δέσμης νετρονίων 17.1 και 20.9 MeV. Οι μονοενεργειακές δέσμες νετρονίων παράχθηκαν στον επιταχυντή Tandem T11/25 των 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, μέσω της αντίδρασης $^3\text{H}(d,n)^4\text{He}$, χρησιμοποιώντας στόχο τριτίου.

Όπως παρατηρούμε στο Σχήμα 4.1.14 (β) με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM), οι θεωρητικές καμπύλες των OMP του Varner (2100), Walter (2101) και Chadwick (2012) παρουσιάζουν σχετικά μικρή απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα. Μάλιστα, ενώ εκτιμούν σωστά την ενεργό διατομή στις χαμηλές ενέργειες, αποκλίνουν από τα πειραματικά σημεία στις υψηλές ενέργειες.

Επιπλέον, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί ενεργού διατομής των αντιδράσεων $^{193}\text{Ir}(n,inel)^{193}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$, όπως παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.1.15 (α) και (β) αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι οι θεωρητικές καμπύλες των OMP του Varner (2100), Walter (2101) και Chadwick (2012) στα κανάλια (n,inel) και (n,p) αποκλίνουν των πειραματικών δεδομένων.

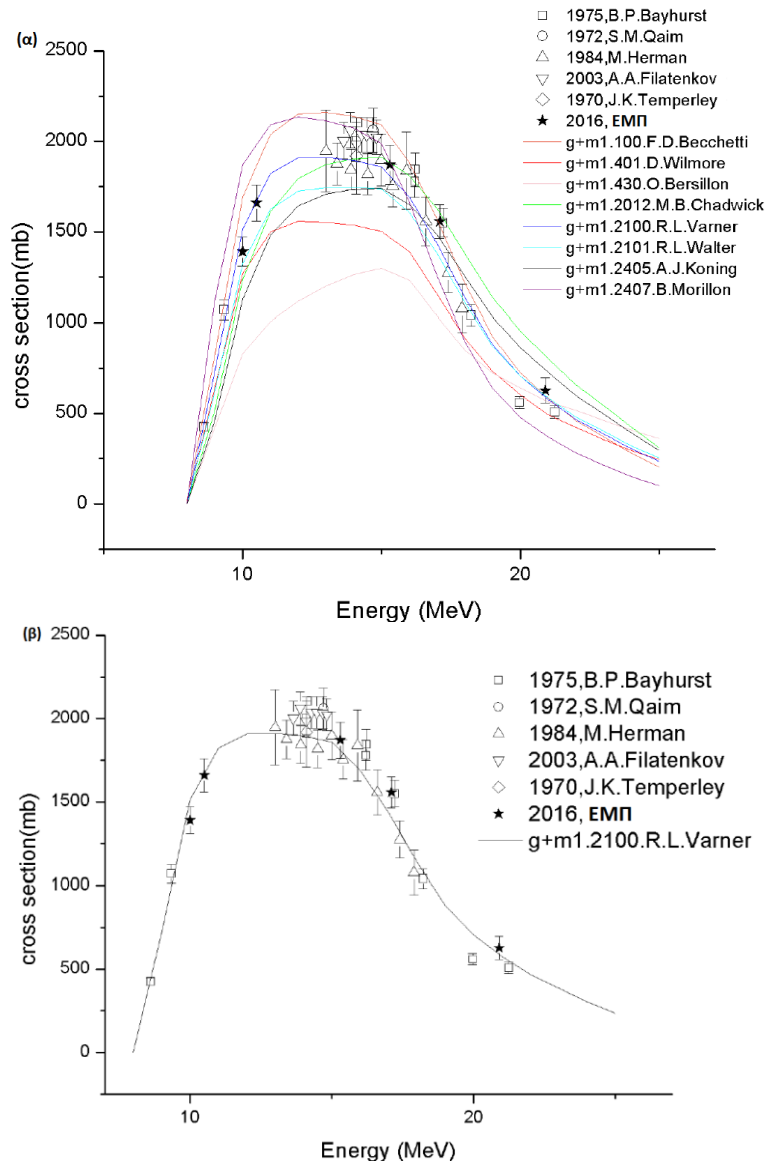


Σχήμα 4.1.14. Θεωρητικοί υπολογισμοί, μέσω του κώδικα EMPIRE, της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, (α) με χρήση όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Chadwick (2012), Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM) [46] (LEVDEN 0).



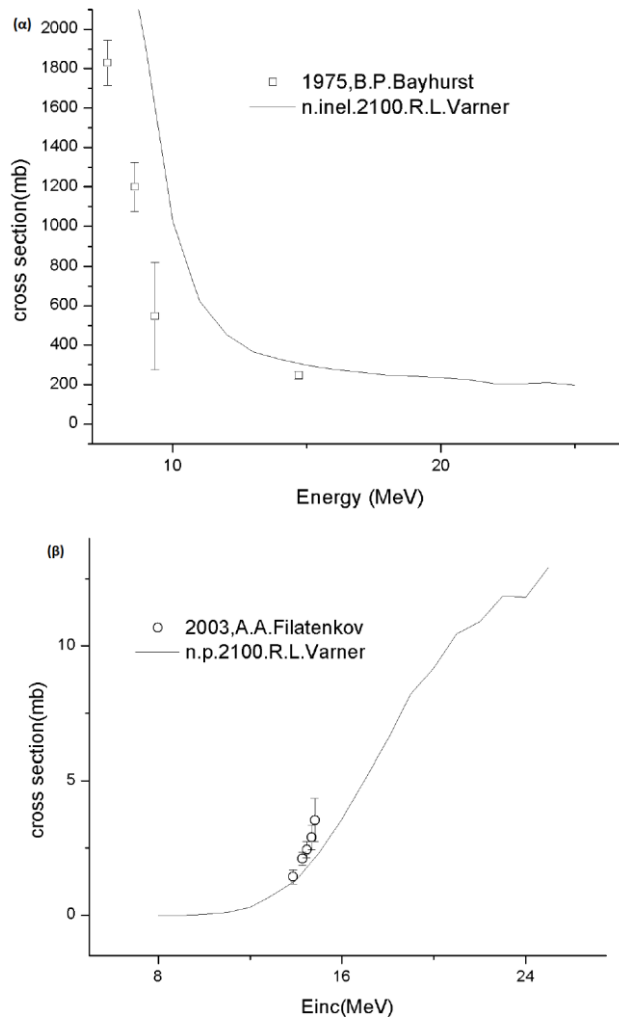
Σχήμα 4.1.15. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$ με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού του Chadwick (2012), Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM)(LEVDEN 0).

Στη συνέχεια, έγιναν δοκιμές για τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, για όλα τα διαθέσιμα OMP σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk [44,45] (LEVDEN 1). Στο Σχήμα 4.1.16 (α), παρουσιάζονται οι θεωρητικοί καμπύλες, των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού, της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$. Στο ίδιο Σχήμα (β) παρουσιάζεται η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) η οποία συγκλίνει περισσότερο με τα πειραματικά δεδομένα.



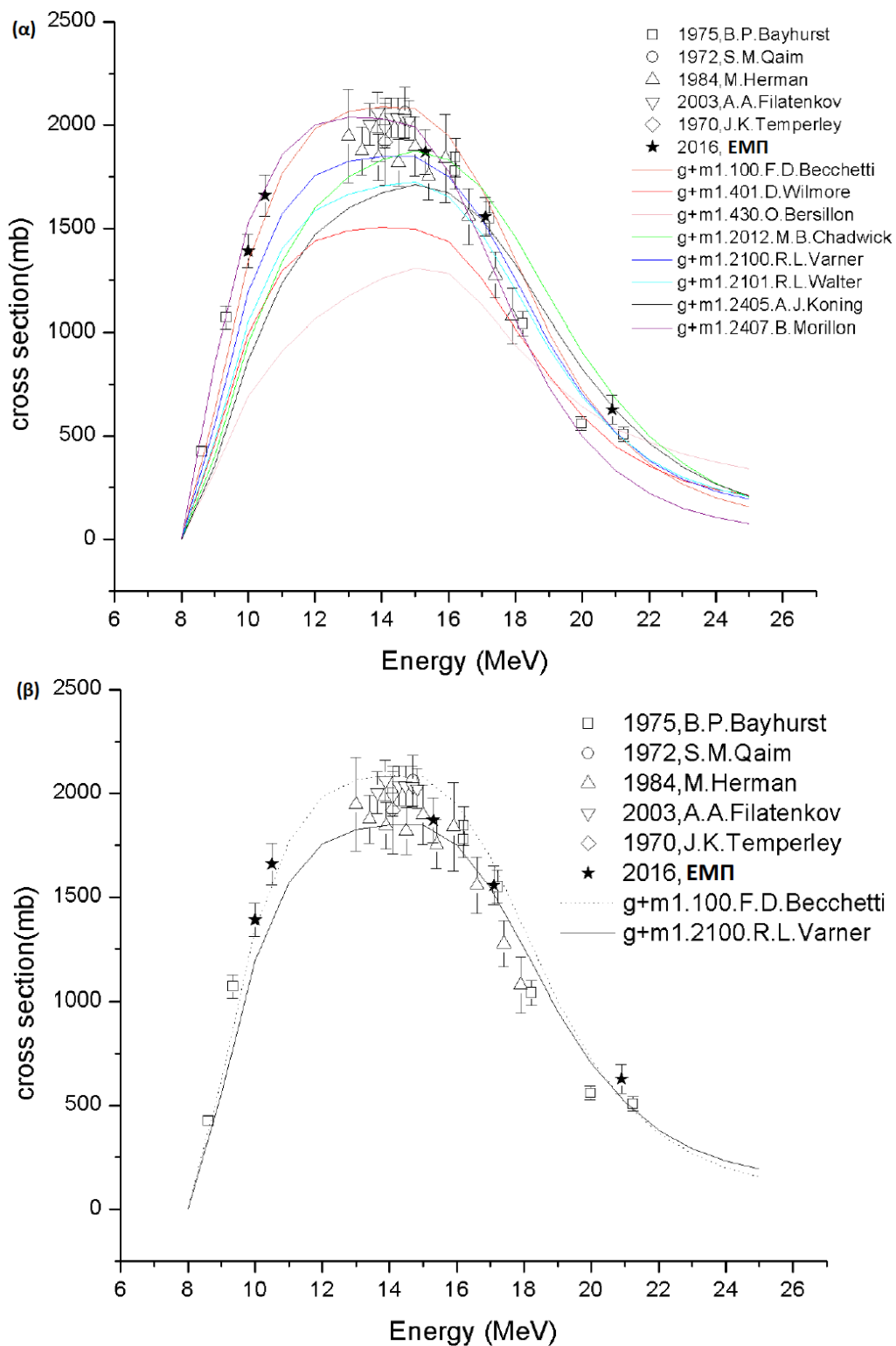
Σχήμα 4.1.16. Θεωρητικοί υπολογισμοί, μέσω του κώδικα EMPIRE, της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, (α) με χρήση όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100), σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk [44,45] (LEV DEN 1).

Επίσης, έγιναν οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής των αντιδράσεων $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$, με τη χρήση όλων των διαθέσιμων από τη RIPL OMP, για πυκνότητα καταστάσεων το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk, όπως παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.1.17 (α) και (β). Όπως παρατηρούμε, η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100), στα κανάλια (n,inel) και (n,p) αποκλίνει των πειραματικών δεδομένων

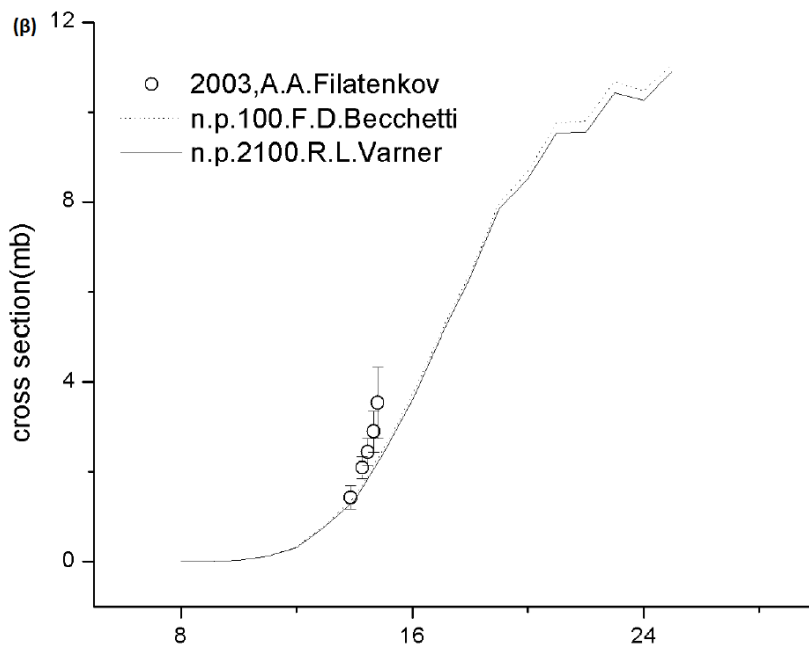
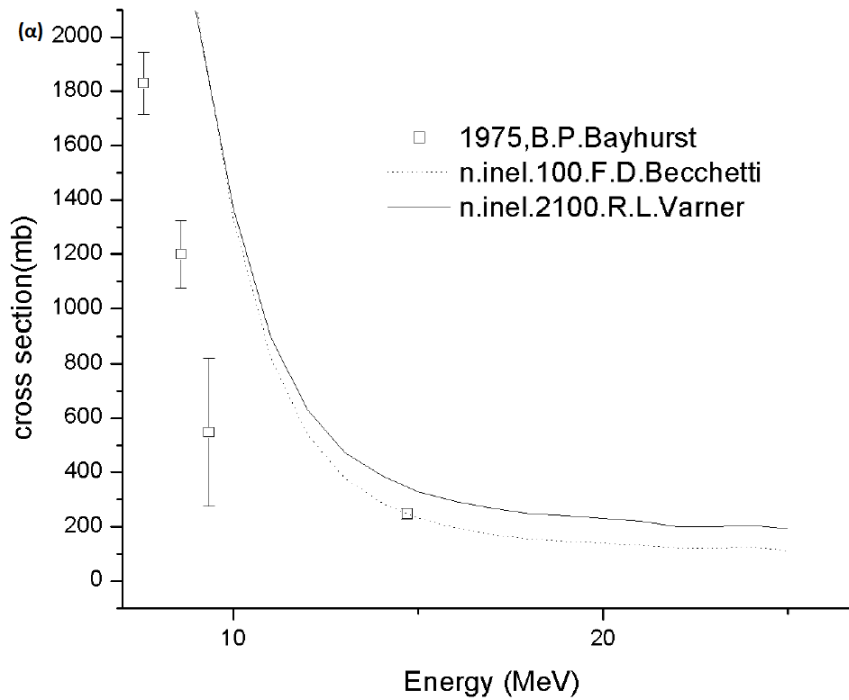


Σχήμα 4.1.17. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{193}\text{Ir}(n, \text{inel})^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n, p)^{193}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk (LEVDEN 1).

Στη συνέχεια, οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής της $^{193}\text{Ir}(n, 2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, με χρήση όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEVDEN 3), παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.1.18 (α). Όπως παρατηρούμε στο Σχήμα 4.1.18 (β), η θεωρητική καμπύλη του OMP του Becchetti (100) αναπαράγει με επιτυχία τα πειραματικά δεδομένα της αντίδρασης, υπερεκτιμώντας όμως την τιμή της ενεργού διατομής στις υψηλές ενέργειες. Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) υποεκτιμά την τιμή της ενεργού διατομής στις χαμηλές ενέργειες ενώ στο υπόλοιπο ενεργειακό εύρος αναπαράγει ικανοποιητικά τα πειραματικά σημεία. Επιπροσθέτως, οι θεωρητικές καμπύλες των OMP του Varner (2100) και Becchetti (100), στα κανάλια (n,inel) και (n,p), αποκλίνουν των πειραματικών δεδομένων της EXFOR, όπως φαίνεται στα Σχήματα 4.1.19 (α) και (β) αντίστοιχα.



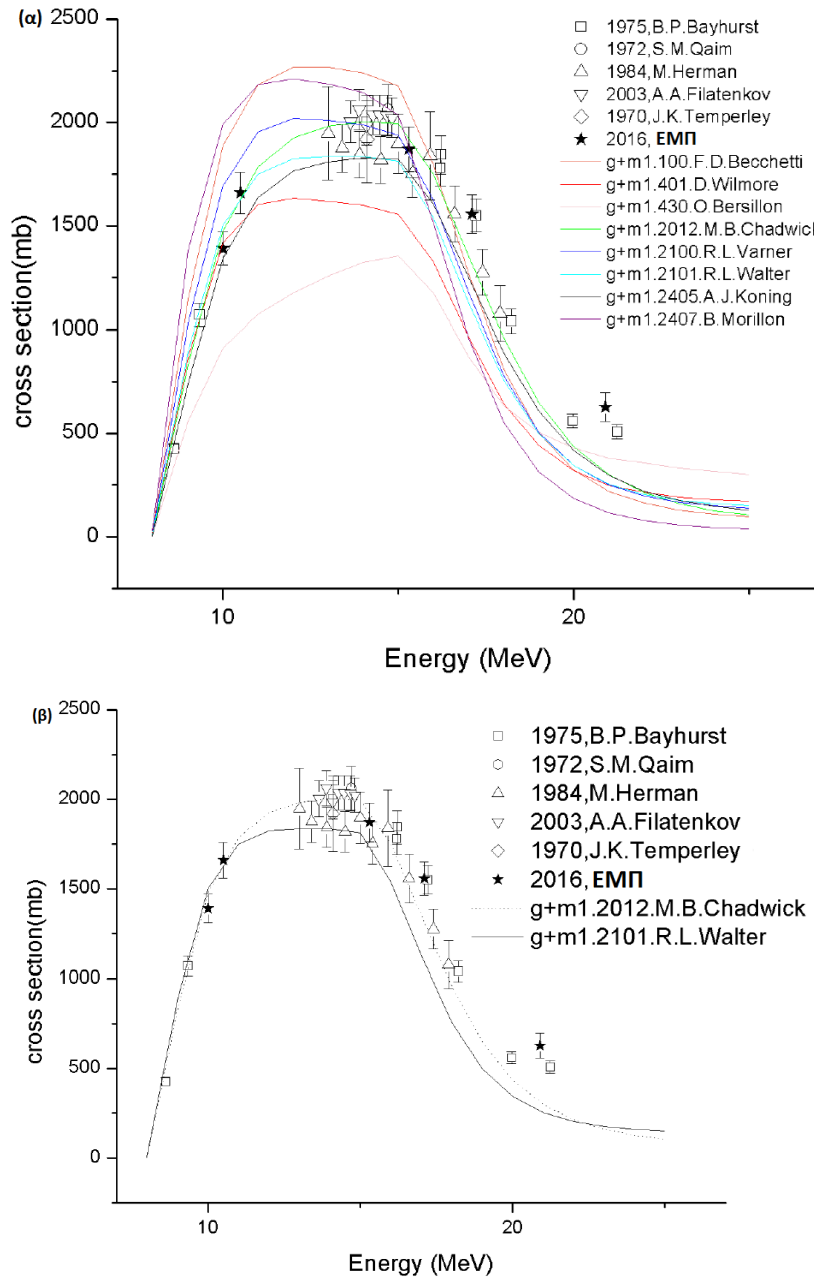
Σχήμα 4.1.18. Θεωρητικοί υπολογισμοί, μέσω του κώδικα EMPIRE, της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, (α) με χρήση όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού Becchetti (100) και Varner (2100), σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEV DEN 3).



Σχήμα 4.1.19. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$ με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού του Becchetti (100) και Varner (2100) σε συνδυασμό με το μικροσκοπικό πρότυπο των Hartree-Fock-Bogoliubov (HFBM) [47] (LEV DEN 3), για ενέργειες από 8 ως 25 MeV.

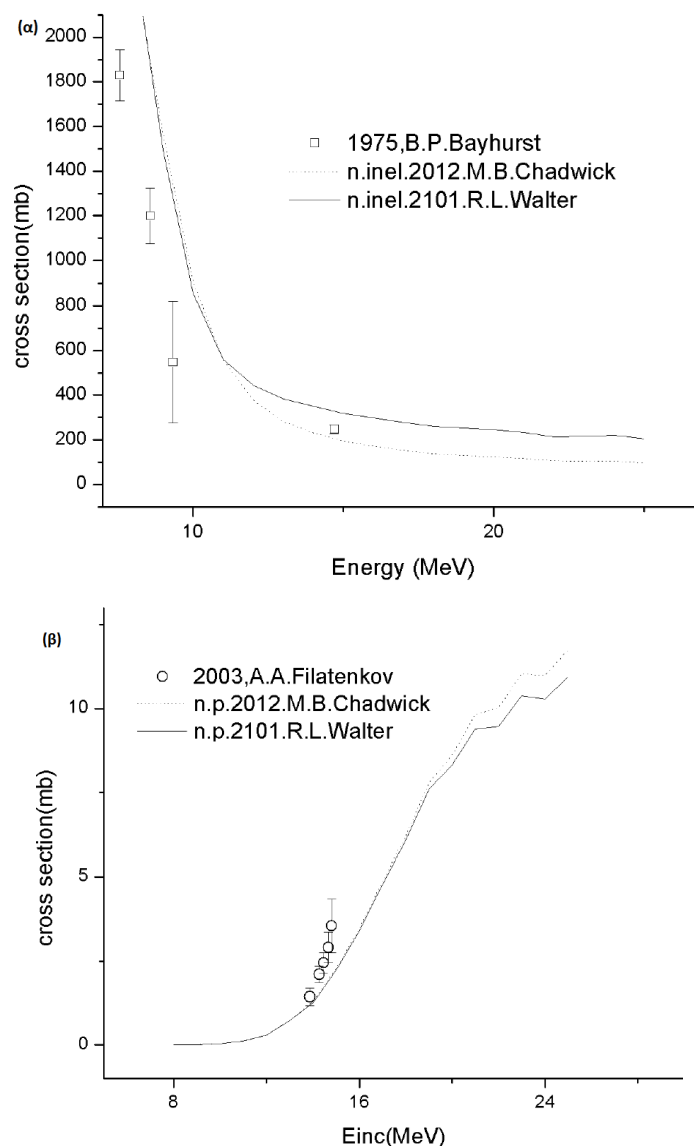
Επιπλέον, οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής για την αντίδραση $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, όλων των διαθέσιμων OMP, σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18) [43,17], και σε σύγκριση με τα πειραματικά σημεία της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής ΕΜΠ και της EXFOR, παρουσιάζονται στο Σχήμα

4.1.20 (α). Επιλέγοντας τα οπτικά δυναμικά, των οποίων οι καμπύλες αναπαράγουν με μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα, Σχήμα 4.1.20 (β), παρατηρούμε ότι η θεωρητική καμπύλη του Chadwick (2012) υποεκτιμά την τιμή της ενεργού διατομής στις υψηλές ενέργειες (άνω των 15 MeV) ενώ η θεωρητική καμπύλη του Walter (2101) αποκλίνει σημαντικά των πειραματικών σημείων, για ενέργειες μεγαλύτερες των 12 MeV



Σχήμα 4.1.20. Θεωρητικοί υπολογισμοί, μέσω του κώδικα EMPIRE, της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, (α) με χρήση όλων των διαθέσιμων προτύπων οπτικού δυναμικού (β) με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Chadwick (2012) και Walter (2101) σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).

Τέλος, οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής στα κανάλια (n,inel) και (n,p), για τα οπτικά δυναμικά των Walter (2101) και Chadwick (2012), σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων των Gilbert-Cameron, παρουσιάζονται στα σχήματα 4.1.21 (α) και (β). Παρατηρούμε ότι οι θεωρητικές καμπύλες των OMP του Walter (2101) και Chadwick (2012), στα κανάλια (n,inel) και (n,p), αποκλίνουν των πειραματικών δεδομένων της EXFOR.



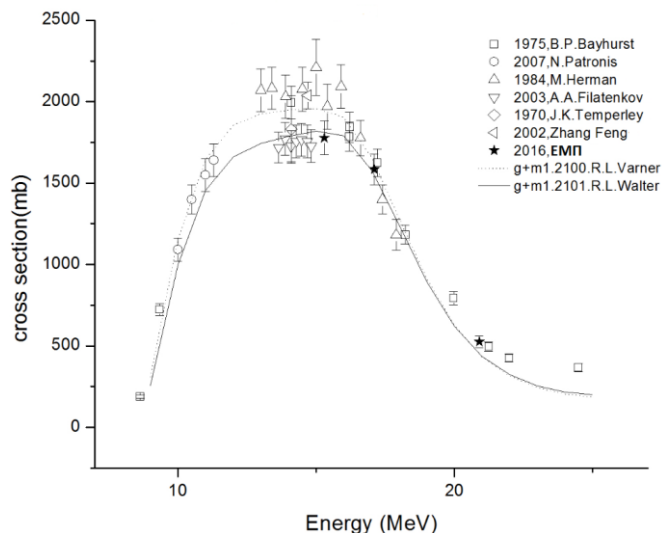
Σχήμα 4.1.21. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα Empire της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$ με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού του Chadwick (2012) και Walter(2101), σε συνδυασμό με την προσέγγιση Gilbert-Cameron (LEV DEN 4) (έκδοσης EMPIRE 2.18).

4.2 Τελικά αποτελέσματα θεωρητικών υπολογισμών

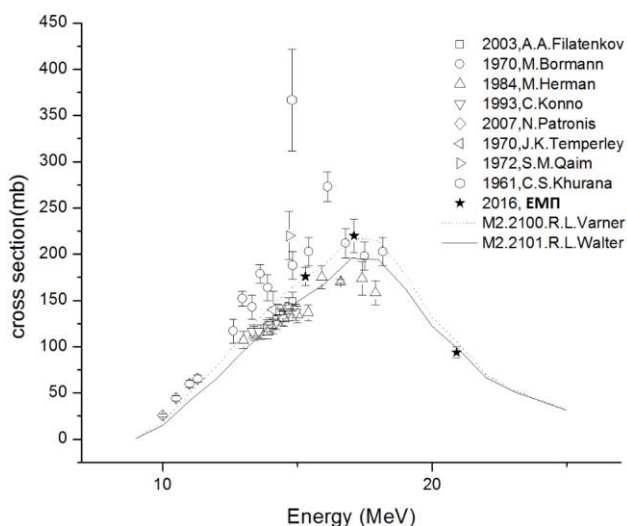
Λαμβάνοντας υπόψη τα αποτελέσματα της διερεύνησης της προηγούμενης ενότητας, επιλέγουμε το συνδυασμό προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων για τον οποίο η θεωρητική καμπύλη της ενεργού διατομής των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, αναπαράγει με τον καλύτερο τρόπο τα πειραματικά δεδομένα στα πλαίσια της πειραματικής και θεωρητικής μελέτης των αντιδράσεων αυτών, καθώς και αυτών που έχουν καταχωρηθεί στη βιβλιοθήκη πειραματικών δεδομένων EXFOR. Έπειτα, ελέγχουμε με ποιόν τρόπο ο ίδιος συνδυασμός προτύπων αναπαράγει την ενεργό διατομή των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$, $^{191}\text{Ir}(n,inel)^{191}\text{Ir}$. Αντίστοιχα για το ισότοπο ^{193}Ir , επιλέγουμε το συνδυασμό προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον οποίο η θεωρητική καμπύλη της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$ αναπαράγει με επιτυχία τα πειραματικά δεδομένα της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ [68], καθώς κι εκείνων που βρέθηκαν στη βιβλιοθήκη EXFOR. Έπειτα, ελέγχουμε με ποιόν τρόπο ο συνδυασμός αυτός των προτύπων, αναπαράγει την ενεργό διατομή των αντιδράσεων $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$, $^{193}\text{Ir}(n,inel)^{193}\text{Ir}$.

4.2.1 Ισότοπο ^{191}Ir

Στο ισότοπο ^{191}Ir , για την ακριβέστερη αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων στο κανάλι $(n,2n)$, για τη βασική στάθμη $(g+m1)$ και τη δεύτερη μετασταθή $(m2)$, επιλέχθηκαν το πρότυπο οπτικού δυναμικού OMP του Walter (αριθμός καταλόγου RIPL 2101) [65] καθώς επίσης το OMP του Varner (2100) [64], σε συνδυασμό με την πυκνότητα καταστάσεων του προτύπου του γενικευμένου υπερρευστού (GSM) (LEV DEN 1) με την προσέγγιση Ignatyuk [44,45], με MSD και MSC τα πρότυπα για την πρώιμη αποδιέγερση και χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 [54] για τη συνάρτηση Ισχύος ακτίνων- γ (GSTRFN 1). Για την ενεργό διατομή, σ_{g+m1} , στο κανάλι $(n,2n)$, Σχήμα 4.2.1, η θεωρητική καμπύλη του OMP του Walter (2101) αναπαράγει επιτυχώς τα πειραματικά δεδομένα της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ [68] και της EXFOR, παρουσιάζοντας μια ελάχιστη απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα, σε αντίθεση με τη θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) που υπερεκτιμά την τιμή της ενεργού διατομής στις ενέργειες 12 με 17 MeV. Από τα 16 MeV οι θεωρητικές καμπύλες των δύο προτύπων οπτικού δυναμικού συγκλίνουν και ταυτίζονται. Ενδιαφέρον όμως παρουσιάζει το Σχήμα 4.2.2, για την σ_{m2} του $(n,2n)$ καναλιού.



Σχήμα 4.2.1. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα **EMPIRE** της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των **Varner (2100)** και **Walter (2101)** σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων **GSM**.

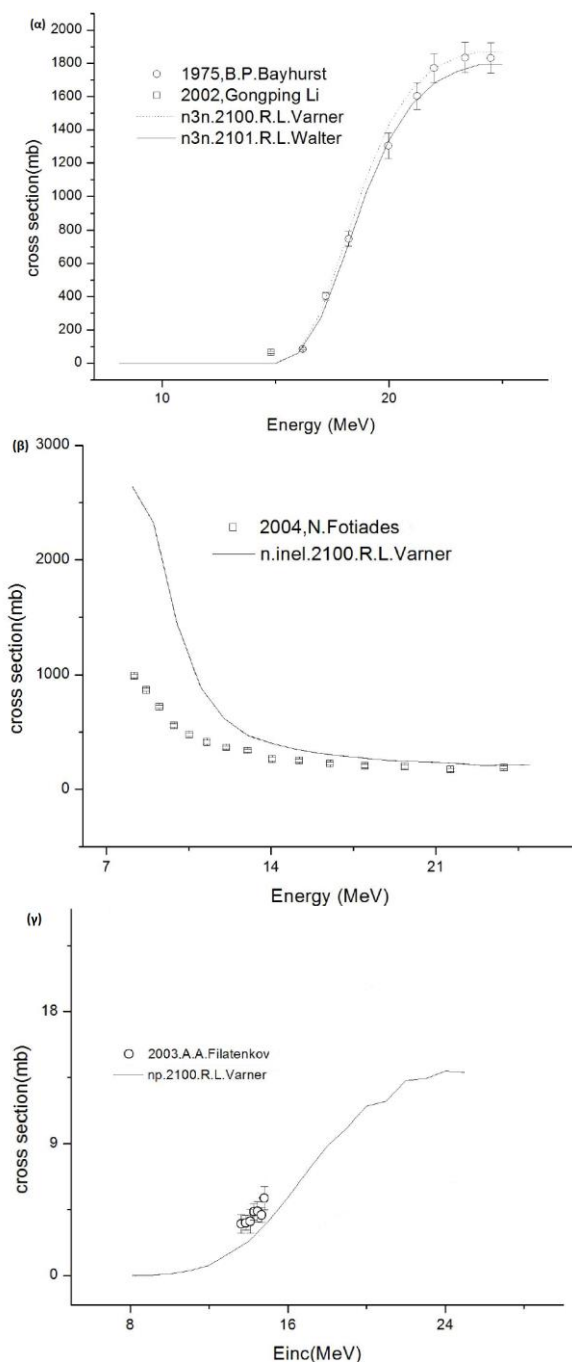


Σχήμα 4.2.2. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα **EMPIRE** της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ με χρήση των προτύπων οπτικού δυναμικού των **Varner (2100)** και **Walter (2101)** σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων **GSM**.

Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Walter (2101), παρουσιάζει μεγάλη απόκλιση από τις πειραματικές μετρήσεις της σ_{m2} , υποεκτιμώντας την τιμή της ενεργού διατομής στις ενέργειες 10 με 20 MeV. Αντιθέτως, το OMP του Varner (2100) αναπαράγει με επιτυχία τα πειραματικά δεδομένα (Σχήμα 4.2.2).

Το κανάλι $(n,3n)$ γίνεται σημαντικό από τα 15MeV, το οποίο δρώντας ανταγωνιστικά ως προς τη $(n,2n)$, αφαιρεί ενεργό διατομή από την τελευταία.. Στο Σχήμα 4.2.3, η πειραματική καμπύλη της ενεργού διατομής της $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$ αναπαράγεται με επιτυχία από τα OMP των Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με τα υπόλοιπα θεωρητικά πρότυπα της

πυκνότητας καταστάσεων και της πρώιμης αποδιέγερσης. Στο Σχήμα 4.2.4, παρουσιάζεται η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) στο κανάλι (n,inel), η οποία αποκλίνει πολύ από τα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα στην EXFOR, υπερεκτιμώντας την τιμή της ενεργού διατομής σε όλο το ενεργειακό εύρος. Στο Σχήμα 4.2.5, η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) στο κανάλι (n,p) αποκλίνει των πειραματικών δεδομένων της EXFOR, υποεκτιμώντας την τιμή της ενεργού διατομής κατά σχεδόν 2 mbarns.

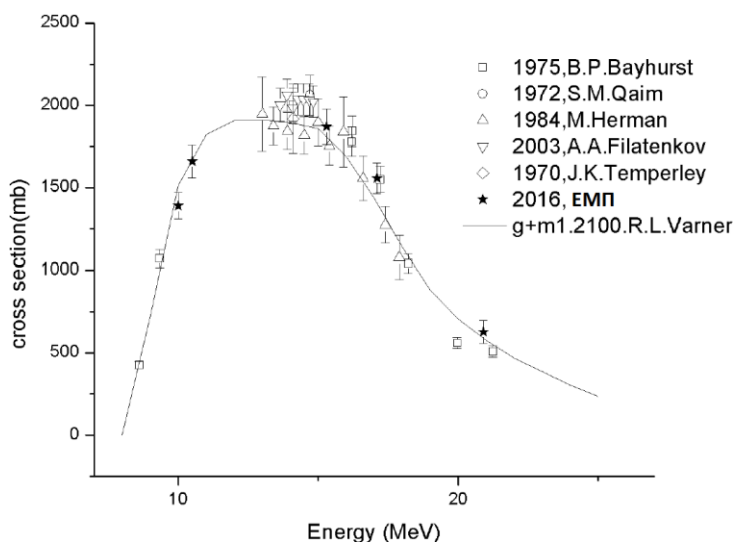


Σχήμα 4.1.7. Θεωρητικοί υπολογισμοί ενεργού διατομής των αντιδράσεων (α) $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, (β) $^{191}\text{Ir}(n,\text{inel})^{191}\text{Ir}$ και (γ) $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) και Walter (2101) σε συνδυασμό με το Πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) της προσέγγισης Ignatyuk (LEV DEN 1).

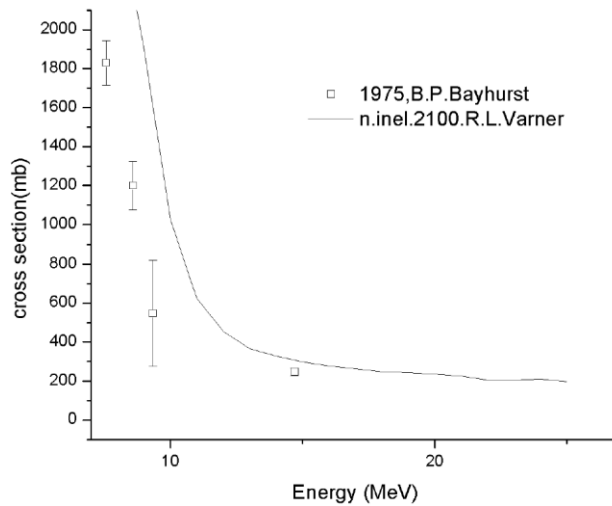
4.2.2 Ισότοπο ^{193}Ir

Στο ισότοπο ^{193}Ir , για την ακριβέστερη αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων, της ομάδας του ΕΜΠ [68] και των διαθέσιμων στο EXFOR, στο κανάλι (n,2n) της ενεργού διατομής της βασικής κατάστασης και της πρώτης μετασταθούς, επιλέχθηκε στο αρχείο εισόδου του κώδικα το πρότυπο οπτικού δυναμικού OMP του Varner (2100) [64], με πυκνότητα καταστάσεων του προτύπου Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM) με την προσέγγιση Ignatyuk [44,45], με χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 [54] για τη συνάρτηση Ισχύος ακτίνων-γ (GSTRFN 1) και τα πρότυπα MSD και MSC για την πρόιμη αποδιέγερση.

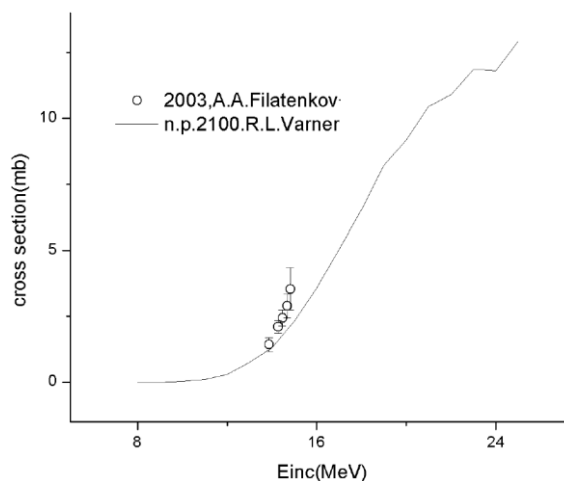
Η θεωρητική καμπύλη της σ_{g+m1} του OMP του Varner (2100), Σχήμα 4.2.6, παρατηρούμε ότι αναπαράγει με επιτυχία τα πειραματικά σημεία της EXFOR και της ομάδας του ΕΜΠ, σε όλο το ενεργειακό εύρος 8-25 MeV, με μια μικρή απόκλιση από αυτά στην περιοχή γύρω στα 17 MeV όπου γίνεται υποεκτίμηση της τιμής της ενεργού διατομής. Επίσης, στο Σχήμα 4.2.7 παρουσιάζονται οι θεωρητικοί υπολογισμοί της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$. Η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) υπερεκτιμά την τιμή της ενεργού διατομής σε όλο το εύρος ενέργειας, 8-25 MeV. Τέλος, στο Σχήμα 4.2.8, παρουσιάζεται η θεωρητική καμπύλη του OMP του Varner (2100) της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$. Παρατηρούμε ότι αποκλίνει από τα πειραματικά σημεία που μας δίνει η EXFOR, υποεκτιμώντας την τιμή της ενεργού διατομής κατά 1-2 mbarns.



Σχήμα 4.2.6. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων GSM.



Σχήμα 4.2.7. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,\text{inel})^{193}\text{Ir}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων GSM.



Σχήμα 4.2.8. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού του Varner (2100) σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων GSM.

4.3 Δοκιμή Οπτικού Δυναμικού των Yong Deok Lee και Young

Ouk Lee

Στη δημοσίευσή τους για την ενεργό διατομή μετασταθών σταθμών των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$, οι Yong Deok Lee και Young Ouk Lee [11] παρουσιάζουν την παραμετροποίηση του ενεργειακά εξαρτημένου προτύπου οπτικού δυναμικού, με 1keV-20MeV ενεργειακό εύρος προσπίπτοντος νετρονίου. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας,

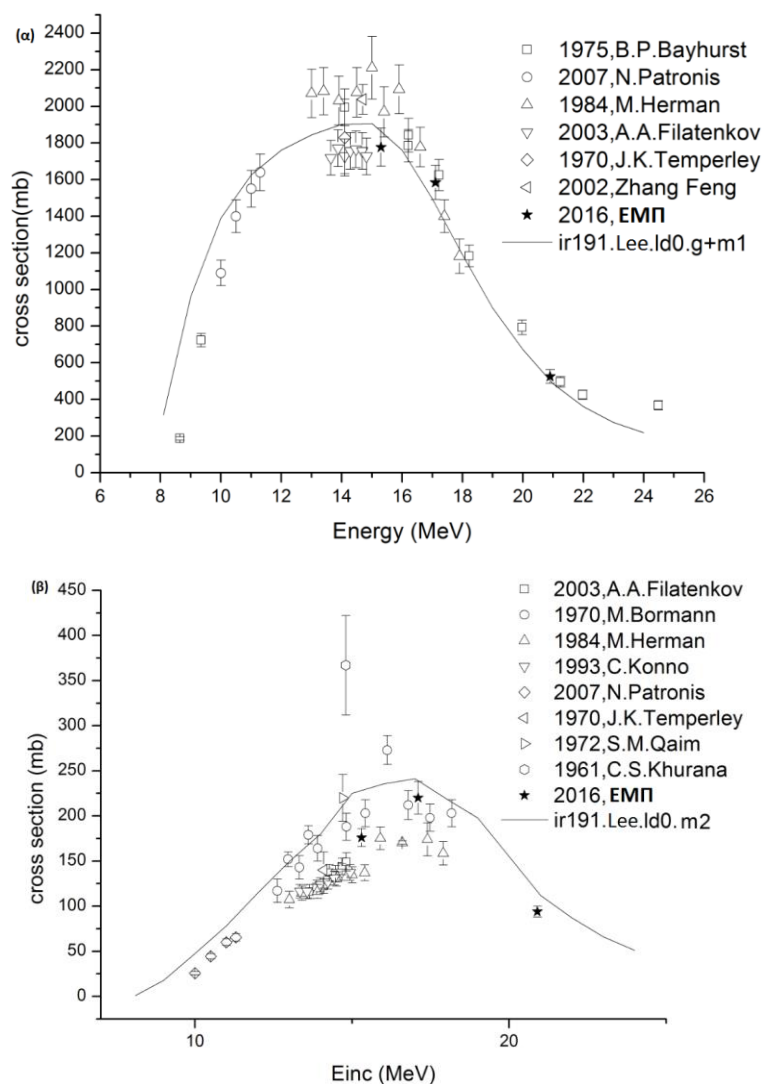
κατασκευάστηκε, σύμφωνα με τις οδηγίες της παραγράφου 3.3 και τον Πίνακα 4.3.1, και δοκιμάστηκε το δυναμικό αυτό στους θεωρητικούς υπολογισμούς της ενεργού διατομής των $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}$.

Παράμετρος	Ir
$V_0(\text{MeV})$	47.0100
$V_1(\text{MeV})$	-0.267
$r_{v0}(\text{fm})$	1.2668
$a_v(\text{fm})$	0.66
$W_0(\text{MeV})$	9.520
$r_{w0}(\text{fm})$	1.2403
$a_w(\text{fm})$	0.480
$V_{so}(\text{MeV})$	7.000
$r_{so}(\text{fm})$	1.2668
$a_{so}(\text{fm})$	0.660
$W_1(\text{MeV})$	-0.053
$r_{w1}(\text{fm})$	0.000
$a_{v1}(\text{fm})$	0.000

Πίνακας 4.3.1. Παραμετροποίηση του προτύπου οπτικού δυναμικού που χρησιμοποίησαν οι Lee και Lee στους υπολογισμούς τους.

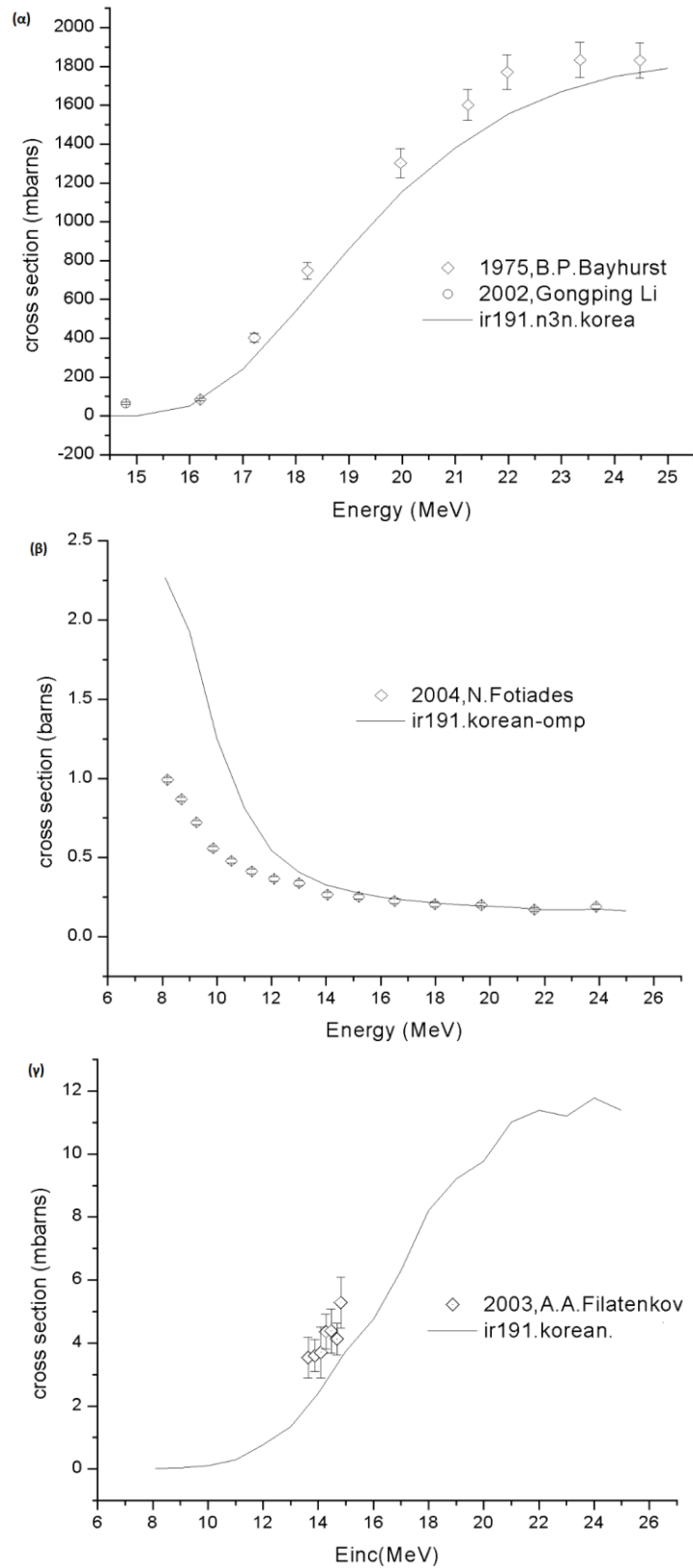
Ισότοπο ^{191}Ir

Με ρυθμισμένο το οπτικό μοντέλο δυναμικού στην άνω παραμετροποίηση, με πυκνότητες καταστάσεων προτύπου Γενικευμένου Υπερρευστού (GSM), χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 [54] για τη συνάρτηση Ισχύος ακτίνων-γ (GSTRFN 1) και ενεργοποιημένα τα πρότυπα πρώιμης αποδιέγερσης MSD, MSC, υπολογίζονται οι θεωρητικές καμπύλες της ενεργού διατομής της βασικής και πρώτης μετασταθούς αλλά και της δεύτερης μετασταθούς στην αντίδραση $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}$, ελέγχοντας την ορθότητα των αποτελεσμάτων τους συγκρίνοντας με τα πειραματικά σημεία της EXFOR και της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ. Στο Σχήμα 4.3.1(α) παρατηρούμε ότι στις χαμηλές ενέργειες η θεωρητική καμπύλη της ενεργού διατομής της βασικής και της πρώτης μετασταθούς αποκλίνει των πειραματικών δεδομένων, ενώ από 14 MeV βλέπουμε ότι συγκλίνει με αυτά και τα αναπαράγει με επιτυχία. Στο Σχήμα 4.3.1 (β) για τη δεύτερη μετασταθή στάθμη, το πρότυπο των Lee υπερεκτιμά την ενεργό διατομή και η θεωρητική καμπύλη διέρχεται ελαφρώς πιο ψηλά από τα πειραματικά σημεία.



Σχήμα 4.3.1. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ και (β) $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee [12] σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων EGSM.

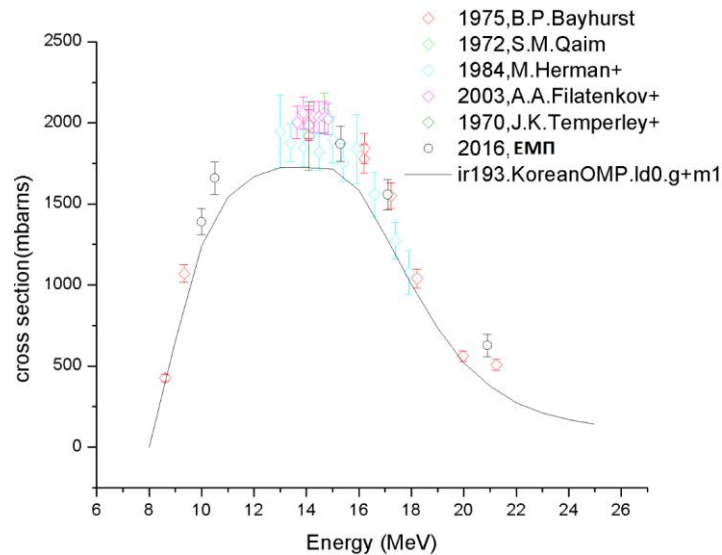
Επίσης, τα αποτελέσματα των θεωρητικών υπολογισμών των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, $^{191}\text{Ir}(n,\text{inel})^{191}\text{Ir}$ και $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με τη χρήση του OMP των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee, παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.3.2, (α) (β) και (γ) αντίστοιχα.



Σχήμα 4.3.2. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{191}\text{Ir}(n,3n)^{189}\text{Ir}$, (β) $^{191}\text{Ir}(n,\text{incl})^{191}\text{Ir}$ και (γ) $^{191}\text{Ir}(n,p)^{191}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee [11], σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM).

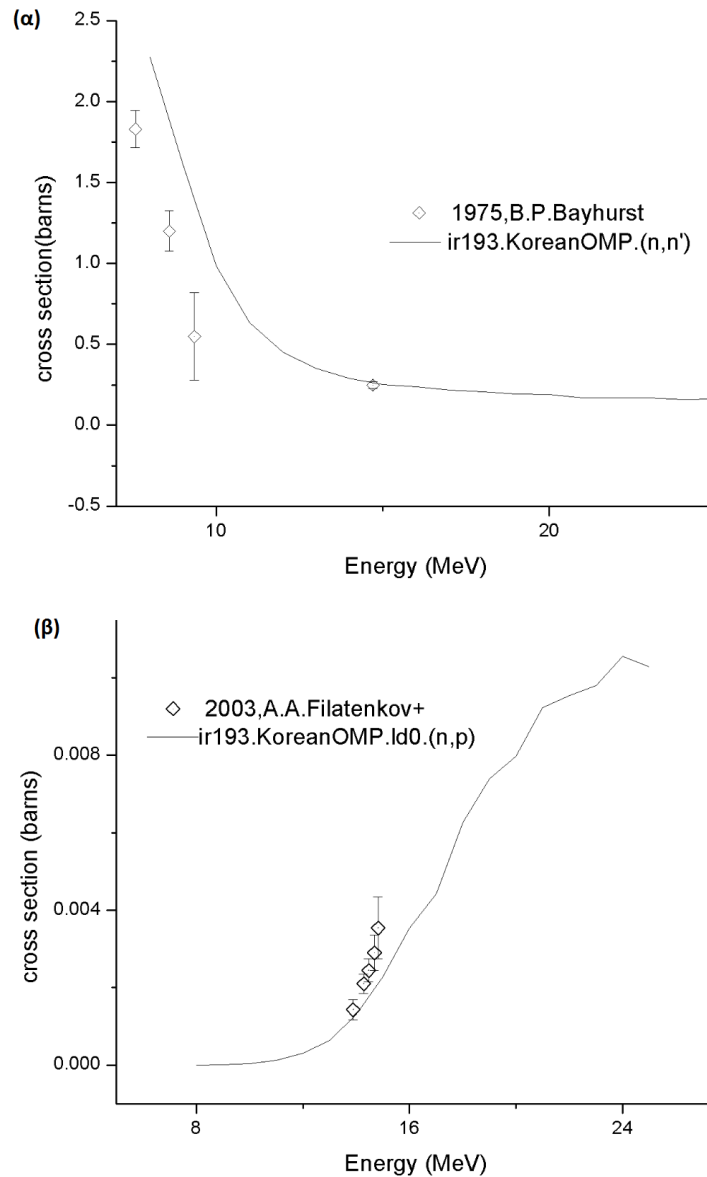
Ισότοπο ^{193}Ir

Με τον ίδιο τρόπο, ελέγχουμε το OMP των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee στο θεωρητικό υπολογισμό της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού για την πυκνότητα καταστάσεων. Παρατηρούμε, στο Σχήμα 4.3.3, ότι ο συνδυασμός αυτός προτύπων υποεκτιμά την ενεργό διατομή της συγκεκριμένης αντίδρασης, σε όλο ενεργειακό εύρος.



Σχήμα 4.3.3. Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω EMPIRE της ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee [11] σε συνδυασμό με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων EGSM.

Τέλος, έγιναν θεωρητικοί υπολογισμοί ενεργών διατομών στα κανάλια (n,inel) και (n,p), για τα οποία υπήρχαν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα στη βιβλιοθήκη EXFOR. Στο Σχήμα 4.3.4, παρουσιάζεται η θεωρητική καμπύλη των ενεργών διατομών των αντιδράσεων (α) $^{193}\text{Ir}(n,inel)^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n,p)^{193}\text{Os}$, με χρήση του OMP των Lee και Lee, σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού, σε σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα της EXFOR.



Σχήμα 4.3.4 Θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα **EMPIRE** της ενεργού διατομής της αντίδρασης (α) $^{193}\text{Ir}(n, \text{inel})^{193}\text{Ir}$ και (β) $^{193}\text{Ir}(n, p)^{193}\text{Os}$ με χρήση του προτύπου οπτικού δυναμικού των Yong Deok Lee και Young Ouk Lee, σε συνδυασμό με το βελτιωμένο πρότυπο Γενικευμένου Υπερρευστού (EGSM).

Συγκεντρωτικά, για το ισότοπο ^{191}Ir , το οπτικό δυναμικό των Lee και Lee αναπαράγει με επιτυχία τα πειραματικά δεδομένα της αντίδρασης $^{191}\text{Ir}(n, 2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$ αλλά αποτυγχάνει στην εκτίμηση της ενεργού διατομής της $^{191}\text{Ir}(n, 2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$, καθώς την υπερεκτιμά σε όλο το ενεργειακό εύρος. Επίσης, για το ισότοπο ^{193}Ir , η θεωρητική καμπύλη του δυναμικού των Lee και Lee για την ενεργό διατομή της $^{193}\text{Ir}(n, 2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, παρουσιάζει μεγάλη απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα της EXFOR, καθώς υποεκτιμά την τιμή της σε όλες τις ενέργειες. Συγκριτικά λοιπόν με τα αποτελέσματα των θεωρητικών μας υπολογισμών (ενότητα 4.2) για τα δύο ισότοπα του ιριδίου, προκύπτει ότι ο συνδυασμός αυτός θεωρητικών προτύπων δεν αναπαράγει ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα.

4.4 Συμπεράσματα και Προοπτικές

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας μελετήθηκε θεωρητικά, μέσω του κώδικα EMPIRE, η ενεργός διατομή των αντιδράσεων $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{g+m1}$, $^{191}\text{Ir}(n,2n)^{190}\text{Ir}^{m2}$ και $^{193}\text{Ir}(n,2n)^{192}\text{Ir}^{g+m1}$, στο ενεργειακό εύρος 8 ως 25 MeV, με χρήση όλων των διαθέσιμων από τη RIPL προτύπων οπτικού δυναμικού, σε συνδυασμό με όλα τα διαθέσιμα πρότυπα πυκνότητας καταστάσεων. Επιλέγοντας το συνδυασμό των προτύπων οπτικού δυναμικού και πυκνότητας καταστάσεων, για τον οποίο η θεωρητική καμπύλη της ενεργού διατομής των άνω αντιδράσεων αναπαράγει με τον καλύτερο τρόπο τα πειραματικά δεδομένα της ομάδας Πυρηνικής Φυσικής του ΕΜΠ και των πειραματικών δεδομένων της βιβλιοθήκης EXFOR, καταλήξαμε στο ελπιδοφόρο συμπέρασμα ότι ένας και μόνο συνδυασμός προτύπων αναπαράγει τα επιθυμητά αποτελέσματα.

Ο συνδυασμός αυτός είναι το πρότυπο οπτικού δυναμικού του Varner, με το πρότυπο πυκνότητας καταστάσεων του Αερίου Φέρμι (Fermi Gas Model), με MSD και MSC τα φαινομενολογικά πρότυπα για την πρόιμη αποδιέγερση και χρήση της Τροποποιημένης Λορεντζιανής τύπου 1 για τη συνάρτηση Ισχύος ακτίνων-γ (GSTRFN 1). Τονίζεται ότι με αυτόν το συνδυασμό παραμέτρων αναπαράγονται με επιτυχία όχι μόνο τα πειραματικά δεδομένα των αντιδράσεων (n,2n) στα δύο φυσικά ισότοπα του ιριδίου, ^{191}Ir και ^{193}Ir , αλλά και των αντιδράσεων (n,3n), (n,p) και (n,inel) που υπάρχουν πειραματικά δεδομένα στη βιβλιογραφία για τα ισότοπα αυτά.

Το γεγονός ότι τα ισότοπα του Ιριδίου ανήκουν σε μια ευρύτερη περιοχή πυρήνων, $_{76}\text{Os}$ - $_{82}\text{Pb}$, με κοινές ιδιότητες, εύλογα δημιουργείται η ανάγκη διερεύνησης για το αν με τις ίδιες παραμέτρους μπορεί να προβλεφθεί με επιτυχία η ενεργός διατομή της αντίδρασης (n,2n) και σε γειτονικά ισότοπα αυτής της περιοχής. Οι κοινές αυτές ιδιότητες, αφορούν κυρίως στη μεταβολή του σχήματός τους από ωοειδές σε σφαιρικό, λόγω περιστροφής ή δόνησης, που οφείλεται σε κατανομές νουκλεονίων που καταλαμβάνουν στάθμες-εισβολείς (intruder states) με υψηλό σπιν και οι οποίες οδηγούν σε ισομερείς καταστάσεις που εμφανίζουν αύξηση της ενέργειας διέγερσης καθώς μειώνεται ο μαζικός αριθμός του πυρήνα. Η θεωρητική αναπαραγωγή της ενεργού διατομής αυτών των ισομερών καταστάσεων, παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον και θα αποτελέσει μελλοντική δραστηριότητα της ομάδας πυρηνικής φυσικής του ΕΜΠ.

Επιπλέον, προτείνεται για το μέλλον η επέκταση της πειραματικής μελέτης ισομερών και βασικών σταθμών, σε περισσότερες ενέργειες στην ενεργειακή περιοχή 15 ως 21 MeV, ώστε να ολοκληρωθεί η πειραματική πληροφορία για την ενεργό διατομή τους σε όλο το ενεργειακό εύρος. Επίσης, προτείνεται η αντίστοιχη θεωρητική μελέτη των ενεργών διατομών από τον κώδικα Talys και για τα δύο ισότοπα του Ιριδίου, ώστε να γίνει σύγκριση

μεταξύ των αποτελεσμάτων των δύο κωδίκων και να διερευνηθεί αν με τις ίδιες παραμέτρους επιτυγχάνεται καλή αναπαραγωγή των πειραματικών δεδομένων και με τους δύο κώδικες.

5

Βιβλιογραφία

- [1] Bodansky, D. (2004). *Nuclear energy, principles, practices and prospects*. New York: Springer.
- [2] Περδικάκης, Γ.-Ε. (2006). *Μελέτη αντιδράσεων νετρονίων ($n,2n$) σε πυρήνες της περιοχής των Ακτινίδων* [Διδακτορική διατριβή]. [Αθήνα]: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (ΕΜΠ). Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών.
- [3] Αλεξόπουλος, Κ. Δ. (1963). *Ατομική και πυρηνική φυσική*. Αθήνα: Παπαζήσης.
- [4] Krane, K. S. (1988). *Introductory nuclear physics*. New York: Wiley.
- [5] Feshbach, H. (1992). *Theoretical nuclear physics: nuclear reactions*. New York: Wiley.
- [6] Song, L.-T., Zhou, X.-H., Zhang, Y.-H., Guo, Y.-X., Sun, Z.-Y., Oshima, M., Toh T., Osa, A., Koizumi, M., Katakura, J., Hatsukawa, Y., Matsuda, M., Sugawara, M. (2004). “Systematic properties of the $1/2^- [660]i_{13/2}$ Bands in Odd-A Au Nuclei”, *Chinese Physical Letters*, 21(7), pp.1243-1246.
- [7] Ansari A. (1986). “Shape transition in Os and Pt isotopes”, *Physical Review C*, 33(1), pp. 321.
- [8] Hagn, E., Zech, E. (1982). “Nuclear magnetic moment of the 9.7 h 12- isomer ^{196m}Au ”, *Nuclear Physics A*, 373(2), pp. 256-266.

- [9] Patronis, N., Papadopoulos, C.T., Galanopoulos, S., Kokkoris, M., Perdikakis, G., Vlastou, R., Lagoyannis, A., Harissopoulos, S. (2007). “Activation cross section and isomeric cross-section ratio for the (n, 2n) reaction on ^{191}Ir ”, *Physical Review C*, 75(3), pp.034607-
- [10] Qaim, S. M., Mushtaq, A., Uhl, M. (1988). “Isomeric cross-section ratio for the formation of $^{73\text{m}}\text{gSe}$ in various nuclear processes”, *Physical Review C*, 38(2), pp. 645.
- [11] Lee, Y.D. & Young O.L. (2006). “Neutron induced cross section data for Ir-191 and Ir-193”, *Nuclear Engineering and Technology*, 38(8), pp.803-808.
- [12] Arblaster, J. W. (2003). “The discoverers of the iridium isotopes: the thirty-six known iridium isotopes found between 1934 and 2001”, *Platinum Metals Review*, 47(4), pp.167-174.
- [13] Cowell, S., Talou, P., Kawano, T., Chadwick, M.B. (2007). “Evaluation of iridium (n,xn) reactions” in *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology 2007*.
- [14] Bayhurst, B.P., Gilmore, J.S., Prestwood, R.J., Wilhelmy, J.B., Jarmie, N., Erkkila, B.H., Hardekopf, R.A. (1975). “Cross section for (n, xn) reactions between 7.5 and 28 MeV”, *Physical Review C*, 12(2), pp.451.
- [15] Koning, A.J. & Rochman, D. (2012). “Modern nuclear data evaluation with the Talys code system”, *Nuclear Data Sheets*, 113(12), pp.2841-2934.
- [16] Koning, A.J. & Delaroche, J.P (2003). “Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV”, *Nuclear Physics A*, 713(3-4), pp.231-310.
- [17] 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. (2009). “RIPL: Reference Input Parameter Library for Calculations of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations”, *Nuclear Data Sheets* 110(12), pp.3107-3214.
- [18] Raynal, J. (1994). “Notes on ECIS94” in *Code ECIS*.
- [19] Satchler, G.R. (1983). *Direct nuclear reactions*. New York: Oxford University Press.
- [20] Koning, A., Hilaire, S. & Goriely, S. (2008). “Global and local level density models”, *Nuclear Physics A*, 810 (1-4), pp.13-76.
- [21] Goriely, S., Hilaire, S. & Koning, A.J. (2008). “Improved microscopic nuclear level densities within the Hartree-Fock-Bogoliubov plus combinatorial method”, *Physical Review C*, 78(), pp.064307.
- [22] Myers, W. & Swiatecki, W. (1966). “Nuclear masses and deformations”, *Nuclear Physics*, 81(1), pp. 1-60.
- [23] Belgya, T., Bersillon, O., Capote, R., Fukahori, T., Zhigang, G., Goriely, S., Herman, M., Ignatyuk, A.V., Kailas, S., Koning, A., Obložinský, P., Plujko, V., Young, P. (2006).

Handbook for calculations of nuclear reaction data, RIPL-2, IAEA-TECDOC-1506, Vienna: IAEA. [Διαθέσιμο στον ιστότοπο: <http://www.nds.iaea.org/RIPL-2/>].

[24] Ignatyuk, A.V., Istekov, K.K. & Smirenkin, G.N. (1979). “The Role of Collective Effects in the Systematics of Nuclear Level Densities”, *Soviet Journal Nuclear Physics*, 29, pp.450-.

[25] Ignatyuk, A.V., Weil, J.L., Raman, S. & Kahane, S. (1993). “Density of discrete levels in ^{116}Sn ”, *Physical Review C*, 47(4), pp.1504-1513.

[26] Junghans, A.R., Jong, M. de, Clerc, H.-G., Ignatyuk, A.V., Kudyaev, G.A. & Schmidt, K.-H. (1998). “Projectile-fragment yields as a probe for the collective enhancement in the nuclear level density”, *Nuclear Physics A*, 629(3-4), pp.635-655.

[27] Goriely, S., Tondeur, F., Pearson, J.M. (2001). “A Hartree-Fock Nuclear Mass Table”, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 77(2), pp.311-381.

[28] Goriely, S., Hilaire, S. & Koning, A.J. (2008). “Improved microscopic nuclear level densities within the Hartree-Fock-Bogoliubov plus combinatorial method”, *Physical Review C*, 78, pp.064307.

[29] Brink, D.M. (1957). “Individual particle and collective aspects of the nuclear photoeffect”, *Nuclear Physics*, 4, pp.215-220; Axel, P. (1962). “Electric Dipole Ground-State Transition Width Strength Function and 7-Mev Photon Interactions”, *Physical Review*, 126, pp.671-

[30] Kopecky, J. & Uhl, M. (1990). “Test of Gamma-Ray Strength Functions in Nuclear Reaction Model Calculations”, *Physical Review C*, 41(5), pp.1941-1955.

[31] Gardner, D.G (1984). “Neutron Radiative Capture” **in** *OECD/NEA Series on Neutron Physics and Nuclear Data in Science and Technology*, p. 62.

[32] Chadwick, M.B., Obložinský, P., Hodgson, P.E., & Reffo, G. (1991). “Pauli-blocking in the quasideuteron model of photoabsorption”, *Physical Review C*, 44(2), pp.814-823 ; *Handbook on Photoneuclear data for applications: Cross sections and spectra*, IAEA-TECDOC-1178 (2000).

[33] Cole, A.J. (2000). *Statistical models for nuclear decay: from evaporation to vaporization*. Bristol and Philadelphia: Institute of Physics Publishing.

[34] Griffin, J.J. (1966). “Statistical model of intermediate structure”, *Physical Review Letters* 17, (9), pp.478-

[35] Dobes, J. & Betak, E. (1983). “Two-Component Exciton Model”, *Zeitschrift fur Physik A Atoms and Nuclei*, 310(4), pp.329-338.

[36] Kalbach, C. (2000). “Surface and collective effects in preequilibrium reactions”, *Physical Review C*, 62(4), pp.044608-

- [37] Kalbach, C. (1985). "Surface effects in the exciton model of preequilibrium nuclear reactions", *Physical Review C*, 32(4), pp.1157-
- [38] Akkermans, J.M. & Gruppelaar, H. (1985). "Analysis of continuum gamma-ray emission in precompound-decay reactions", *Physics Letters B*, 157(2-3), pp.95-100.
- [39] Hofmann, H.M, Richert, J., Tepel, J.W. & Weidenmuller, H.A. (1975). "Direct reactions and Hauser-Feshbach theory", *Annals of Physics*, 90(2), pp.403-437.
- [40] Hofmann, H.M., Mertelmeier, T., Herman, M. & Tepel, J.W. (1980). "Hauser-Feshbach calculations in the presence of weakly absorbing channels with special reference to the elastic enhancement factor and the factorization assumption", *Zeitschrift fur Physik A Atoms and Nuclei*, 297(2), pp.153-160.
- [41] Feshbach, H., Kerman, A. & Koonin, S. (1980). "The statistical theory of multi-step compound and direct reactions", *Annals of Physics*, 125(2), pp.429-476.
- [42] Nishioka, H., Verbaarschot, J.J.M., Weidenmuller, H.A & Yoshida, S. (1986). "Statistical theory of precompound reactions: the multistep compound process", *Annals of Physics*, 172 (1), pp.67-
- [43] Gilbert A. & Cameron A.G.W. (1965). "A composite nuclear-level density formula with shell corrections", *Canadian Journal of Physics*, 43, pp.1446-
- [44] Ignatyuk, A.V., Smirenkin, G.N. & Tishin, A.S. (1975). "Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter", *Soviet Journal Nuclear Physics*, 21, pp.255-
- [45] Ignatyuk, A.V., (1983). *Statistical Properties of Excited Atomic Nuclei*. Moscow: Energoatomizdat (in Russian), [translated as IAEA report INDC (CCP)-233/L (1985), Vienna.]
- [46] D'Arrigo, A., Giardina, G., Herman, M., Ignatyuk, A.V. & Taccone, A. (1994). "Semiempirical determination of the shell correction temperature and speed dependence by means of nuclear fission", *Journal of Physics G*, 20, pp.305-
- [47] Goriely, S., Samyn, M. & Pearson, J.M. (2007). "Further explorations of Skvrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. VII. Simultaneous fits to masses and fission barriers", *Physical Review C*, 75(6), pp. 064312-
- [48] Tamura, T., Udagawa, T. & Lenske, H. (1982). "Multistep direct reaction analysis on continuum spectra in reactions induced by light ions", *Physical Review C*, 26(2), pp.379-
- [49] Cline, C.K. & Blann, M. (1971). "The pre-equilibrium statistical model: Description of the nuclear equilibration process and parameterization of the model", *Nuclear Physics A*, 172(2), pp.225-

- [50] Cline, C.K. (1972). “Extensions to the pre-equilibrium statistical model and a study of complex particle emission”, *Nuclear Physics A*, 193(2), pp.417-
- [51] Ribansky, I., Oblozinsky, P. & Betak, E. (1973). “Pre-equilibrium decay and the exciton model”, *Nuclear Physics A*, 205(3), pp.545-
- [52] Blann, M. (1996). “New precompound decay model”, *Physical Review C*, 54, pp.1341-
- [53] Kopecky, J., Uhl, M. & Chrien, R.E. (1993). “Radiative strength in the compound nucleus ^{157}Gd ”, *Physical Review C*, 47, pp. 312-
- [54] Plujko, V.A. (2000). “A New Closed-Form Thermodynamic Approach for Radiative Strength Functions”, *Acta Physica Polonica B*. 31(2), pp.435-
- [55] Plujko, V.A. (2000). [] in *9th International Conference for Nuclear Reaction Mechanisms*, (Universita degli Studi di Milano, Varenna, Italy, 2000), 115, pp.113.
- [56] Plujko, V.A., Ezhov, S.N. & Kavatsyuk, M.O. (2001). [] in *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology* (Atomic Energy Society of Japan, Tsukuba, Japan, 2001), 1, pp.811.
- [57] Mughabghab, S.F. & Dunford, C.L. (2000). “A dipole–quadrupole interaction term in E1 photon transitions”, *Physics Letters B*, 487(1-2), pp. 155-
- [58] Brink, D.M. (1955). *Giant Resonances in Excited Nuclei*. [Ph.D. thesis], Oxford University.
- [59] Becchetti, F.D. Jr. & Greenlees, G.W. (1969). “Nucleon-Nucleus Optical-Model Parameters, $A > 40$, $E < 50$ MeV”, *Physical Review*, 182, pp. 1190-
- [60] Bersillon O. & Cindro (1975). [] in *Fifth International Symposium On Interactions of Fast Neutrons with Nuclei* (Gaussig 1975).
- [61] RIPL handbook [Διαθέσιμο στον ιστότοπο: https://www-nds.iaea.org/ripl/ripl_handbook.htm].
- [62] Wilmore, D. & Hodgson, P.E. (1964). “The calculation of neutron cross-sections from optical potentials”, *Nuclear Physics*, 55, pp.673-
- [63] Chadwick M.B & Hayes, A.C. (entered in current format by Talou, P.), [Ref. Macklin, R. & Young, P.G. (1987). “Neutron Capture Cross Sections of Rhenium from 3 to 1900 keV”, *Nuclear Science Engineering*, 97, pp.239-]
- [64] Varner, R.L., Thompson, W.J., McAbee, T.L., Ludwig, E.J., Clegg, T.B. (1991). “A global nucleon optical model potential”, *Physics Reports*, 201(2), pp.57-
- [65] Walter, R.L. & Guss, P.P. (1986). “A Global Optical Model for Neutron Scattering for $A > 53$ and $10 \text{ MeV} < E < 80 \text{ MeV}$ ”, *Rad. Effects*, 95, pp.73- [1985 Santa Fe Conf. Proc.]

- [66] Koning, A.J. & Delaroche, J.P. (2003). “Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV”, *Nuclear Physics A*, 713, pp.231-
- [67] Morillon, B. & Romain, P. (2004). “Dispersive and global spherical optical model with a local energy approximation for the scattering of neutrons by nuclei from 1keV to 200 MeV *Physical Review C*, 70, pp.014601 ; Morillon, B. & Romain, P. (2006). “Bound single-particle states for neutrons from a global spherical optical model”, *Physical Review C*, 74, pp.014601
- [68] Vlastou, R., Kalamara, A., Kokkoris, M., Patronis, N., Serris, M., Georgoulakis, M., Hassapoglou, S., Kobothisanis, K., Axiotis, M. & Lagoyannis, A. (2017). “Study of (n,2n) reaction on ^{191,193}Ir isotopes and isomeric cross section ratios”, *EPJ Web of Conferences*, 146, pp.11013-