



Nr. ieșire /...

Nr. intrare /...

RAPORT STIINTIFIC

Către,

**Unitatea Executivă pentru Finanțarea Învățământului Superior, a Cercetării, Dezvoltării și Inovării
(UEFISCDI)**

Program 4 - Cercetare fundamentală și de frontieră

Tip proiect: Proiecte de cercetare exploratorie

Proiect: De la o metoda promitatoare la o intelegere deplina a reactiilor induse de deuteroni

(Acronim: Protodeep), <https://www.nipne.ro/proiecte/pn3/60-proiecte.html>

Contract nr: PCE 14 /2022 (PN-III-P4-PCE-2021-0642)

Perioada de raportare: 01.01.2023 – 31.12.2023

Coordonator: Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica si Inginerie Nucleara „Horia Hulubei” (IFIN-HH)

Director de proiect: Dr. Marilena Avrigeanu

Etapa 2: Perfectionarea modelului de rupere ('breakup', BU) al deuteronilor si analiza consistenta a rolului interactiilor directe in reactii induse de deuteroni pe izotopii stabili ⁹⁵⁻⁹⁷Mo la energii de pana la 50 MeV

Obiectivele si activitățile etapei:

2.1 Analiza descrierii (a) distributiilor unghiulare ale imprastierii elastice, folosind o versiune actualizata a codului SCAT2 incluzand modelul DF, (b) modelului BU imbunatatit/sistematic folosind modelul BU inclus recent in TALYS, si codul FRESCO, (c) microscopic pentru reactiile 'stripping' si 'pick-up' folosind FRESCO, (d) analizei spectrelor energetice ale emisiei de neutroni/protoni, si a distributiilor unghiulare ale particulelor emise, pentru stabilirea mecanismelor implicate, folosind codurile TALYS-1.95 si STAPRE-H, si (e) considerarea consistenta a BU, DR, PE, si CN, si a seturilor de parametri de modele nucleare.

1. Descrierea stiintifica

1.1. Introducere

Obtinerea datelor de reactii nucleare recente cu o precizie mult superioara decadei anterioare, au determinat si o analiza de o importanta particulara datorita numeroaselor semne de intrebare inca existente asupra ipotezelor si parametrilor de modele ale mecanismelor de reactii induse de deuteroni la energii joase (<50-60 MeV). Clarificarea aspectelor respective este impusa atat de interesul stiintific propriu-zis al cunoasterii acestor mecanisme de reactie, cat si de cerintele evaluarilor actuale de date nucleare pentru programe de cercetare internationale majore

(ITER, IFMIF, NFS, e.g.^{1,2,3}). Acestea din urma rezulta la randul lor atat din analizele de securitate ale instalatiilor nucleare cat si din studiile de fezabilitate ale instalatiilor de transmutatie a deseurilor radioactive care a condus la dezvoltarea a domeniului „cercetarilor nucleare teoretice aplicate” (*applied nuclear theory*).

In contextul proiectului de fata sunt continuate in acest sens analize ale unor parametri ai modelelor de mecanisme de reactie care sunt implicate in studiul reactiilor induse de deuteroni la energii joase. Astfel, ‘ruperea’ deuteronului (*breakup*, BU) si reactiile directe (DR) de tip ‘stripping’ si ‘pick-up’, sunt procese nucleare semnificative, suplimentar proceselor de emisie la prechilibru (PE) si ‘nucleu compus’ (NC). Un obiectiv principal il reprezinta, in particular, continuarea analizei unitare a modului in care cele mai recente date experimentale sunt descrise de modelele corespunzatoare dezvoltate pana in prezent, fiind stabiliti si parametrii adoptati pentru o descriere cat mai precisa. In acelasi timp se impune a fi prezentate/discutate si semnele de intrebare care mai exista inca la nivel international asupra descrierii corespunzatoare a procesului de „rupere” a deuteronilor in reactii induse in primul rand la energii joase.

1.2 Rezultatele etapei anuale

1.2.1 Analiza de modele nucleare considerata necesara in vederea evaluarii avansate a sectiunilor eficace ale reactiilor induse de deuteroni pe izotopii stabili ⁹⁵⁻⁹⁷Mo, avand obiectivul final al acestei activitati realizate in urmatorul an pentru elementul Mo, a format obiectivul etapei de fata a acestui proiect. Luarea in considerare a tuturor datelor experimentale disponibile pentru izotopii stabili vizati, pentru energiile incidente de pana la 50 MeV, a fost realizata in acest sens dand atentie contributiilor tuturor mecanismelor de reactie implicate mentionate mai sus. precum si analiza sistematica a distributiilor unghiulare folosind o versiune actualizata a codului SCAT2. Similar, au fost implicate modelul BU inclus recent² in codul de calcul de larg uz international TALYS⁴, si codul FRESKO⁵ asociat analizei microscopice a reactiilor directe (DR) ‘stripping’ si ‘pick-up’, analiza spectrelor energetice ale emisiei de neutroni/protoni, si a distributiilor unghiulare ale particulelor emise. In final s-a realizat astfel si considerarea consistenta a BU, DR, PE, si CN, si a seturilor de parametri de modele nucleare.

Rezultatele acestei analize de ipoteze si parametri de model, in cadrul proiectului de fata, au fost prezentate odata cu sectiunile eficace ale reactiilor respective obtinute in vederea actualizarii

¹M. Avrigeanu, D. Rochman, A.J. Koning, U. Fischer, D. Leichtle, C. Costache, V. Avrigeanu, *Advanced breakup nucleon enhancement of deuteron-induced reaction cross sections*. Eur. Phys. J. A **58**, 3 (2022)

²E. Simeckova, M. Avrigeanu, J. Mrazek, J. Novak, M. Stefanik, C. Costache, and V. Avrigeanu, *Deuteron-induced reactions on natZr up to 60 MeV*, Phys. Rev. C **104**, 044615 (2021)

³M. Avrigeanu, I. Kodeli, D. Leichtle, A. Prokofiev, and U. Fischer (Eds.), *Frontiers-in-Physics Research Topic on Nuclear Data for Fusion Technology from Basic Research to Full-Scale Applications*, <https://www.frontiersin.org/research-topics/39045/nuclear-data-for-fusion-technology-from-basic-research-to-full-scale-application>

⁴A. J. Koning, S. Hilaire, and S. Goriely, *TALYS-1.96 - A nuclear reaction program*; <http://www.talys.eu/>

⁵I.J. Thompson, *Comput. Phys. Rep.* **7**, 167 (1988); computer code v. FRES 2.9 (2011)

imbunatatite a evaluarilor de uz international extins TENDL-2021⁶ in sectiunile I-II ale lucrarii⁷ transmisa spre publicare cu urmatorul 'Abstract':

"The weak binding energy of the deuteron is responsible for the high complexity of its interaction with nuclei, involving also a variety of reactions initiated by the nucleons following the deuteron breakup. The extended analysis in this work, on the basis of available data for deuteron interactions with natural Mo and its isotopes up to 50 MeV, includes every process from elastic scattering until pre-equilibrium and compound--nucleus decay. A particular attention has been paid to the breakup, stripping, and pick-up direct interactions which account overall for around half of the deuteron total-reaction cross section. The due account of most experimental data has thoroughly validated the present approach and highlighted some prevalent features. This analysis has emphasized the weak points and consequently the need for modeling/evaluation upgrade. Most of them were related to overlooking the deuteron inelastic-breakup enhancement and appropriate treatment of stripping and pick-up processes. New data as well as complementary measurements of (d,px) and (n,x) as well as (d,nx) and (p,x) reaction cross sections, so scarce for the stable isotopes, are also essential for the improvement of the deuteron breakup account and feasible evaluation predictions so important for advanced engineering design projects."

1.2.2 O contributie rezumativa a principalelor aspecte specifice reactiilor induse de deuteroni, privind in particular reactiile (d,p), (d,2p), (d,xn2p) si (d,xn), a format si obiectul unei prezentari⁸ orale principale la editia din 2023 a "16th Varenna Conference on Nuclear Reaction Mechanisms"⁹ de referinta in domeniul mecanismelor de reactii nucleare, in deschiderea sesiunii 'Deuteron and nucleon induced reactions', cu urmatorul 'Abstract':

"Suitable account of available excitation-function of deuterons interaction with target nuclei components of candidate materials for the ITER fusion reactor, the European DEMO fusion reactor, and the IFMIF-DONES Irradiation Facility has been proved by consistent analysis of the reaction mechanisms involved in the complex deuteron-nucleus interaction. In this work the attention has been focused on the analysis of the deuteron activation cross sections related to the gas accumulation, (d,p), (d,2p), (d,xn2p), and to the strong neutron emission, (d,xn), interaction processes of interest for the radiation damage and shielding design studies devoted to the structural materials selection. The key role of direct interactions, i.e.,

⁶A. J. Koning and D. Rochman, TENDL-2021: TALYS-based evaluated nuclear data library, https://tendl.web.psi.ch/tendl_2021/tendl2021.html

⁷M. Avrigeanu, E. Simeckova, J. Mrazek, C. Costache, and V. Avrigeanu, *Modeling of deuteron-induced reactions on molybdenum at low energies* (submitted for publication in Phys. Rev. C, Nov. 1st, 2023)

⁸M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Due consideration of the breakup and direct reaction mechanisms within (d,p), (d,2p), (d,xn2p), and (d,xn) reactions*, <https://indico.cern.ch/event/1132769/sessions/493017/#20230613> , https://indico.cern.ch/event/1132769/contributions/5395293/attachments/2666429/4620698/M_Avrigeanu_Varenna_2023.pdf

⁹F. Cerutti and T. Kawano (Eds.), *Proc. 16th Varenna Conference on Nuclear Reaction Mechanisms (NRM2023)*, Varenna, Italy, June 11-16, 2023, <https://indico.cern.ch/event/1132769/>, EPJ Web of Conf. (in press)

breakup, stripping and pick-up processes is stressed out by the comparison of data with theoretical and evaluation predictions.”

1.2.3 Principalul aspect nou al evaluarilor actuale avansate ale datelor nucleare pentru reactii induse de deuteroni, determinand si includerea sa in ultima versiune a codului de calcul TALYS-1.96, il reprezinta luarea in considerare suplimentara a sectiunilor eficace ale reactiilor initiate de neutronii si protonii proveniti din ‘ruperea’ deuterionului (“*breakup enhancement*”) ¹⁰. Problema majora in acest caz consta intr-o adaugare a incertitudinilor privind valorile sectiunilor eficace ale acestor reactii suplimentare la cele ale reactiilor initiate de insasi deuteronii. Importanta acestei contributii suplimentare pentru evaluarea consistenta a sectiunilor eficace de reactie ale deuteronilor incidenti pe materiale structurale a fost evidentiata si in cadrul unei prezentarii orale ¹¹ cu urmatorul ‘*Abstract*’:

“Improvements of the nuclear model analysis to extend the evaluation of deuteron-induced reaction cross sections to the stable isotopes 92,94Mo and finally the natural Mo, have been considered including the analysis of all available data for these Mo stable isotopes and Mo, up to 50 MeV. There have been taken into account also recent measured data in Prague (Rez) for the incident energies up to 20 MeV, while in the near future will become available similar data measured at Ganil up to 40 MeV. The apparent discrepancies between experimental data and the corresponding calculated results, are shown to follow the incomplete theoretical frame of the deuteron interaction process requesting, besides pre-equilibrium emission (PE) and fully equilibrated compound nucleus (CN) decay, the consistent inclusion of breakup mechanism (BU) as well as of stripping and pickup direct reactions (DR) contributions within deuteron activation analysis. Proper account of these contributions has been carried out with results that could be also provided in TALYS code format, within a similar way to previous analyses for 93Nb (Phys. Rev. C **88**, 014612, 2013) and 90-92,94,96Zr (Phys. Rev. C **104**, 044615, 2021). The assessment of (d,p) and other direct-reactions, otherwise not taken into account within TALYS, has made use of the code FRESKO and the available data for establishment of the needed spectroscopic factors. A similar analysis of the coming data to be reported at GANIL for deuterons on Mo up to 40 MeV will make possible an additional check of the nuclear moment of inertia needed for the suitable account of the many isomeric cross-section ratios concerned in the case of Mo.”

1.3 Gradul de realizare a obiectivelor

Realizarea lucrarilor ^{7,8,11}, care au constituit obiectivele etapei de fata a acestui proiect, este integrala. Un obiectiv major nerealizat il reprezinta angajarea unui masterand/doctorand/post-doc desi disponibilitatea pozitiei vacante a fost anuntata public la adresele din interior/exterior IFIN-HH, inclusiv pe pagina proiectului (<https://www.nipne.ro/proiecte/pn3/60-proiecte.html>, din 26.05.2022):

- https://www.nipne.ro/jobs/01082022/asistent_cercetare_PCE-2021-0642.doc
- https://www.nipne.ro/proiecte/pn3/20220510_protodeep_avrigeanu/OpenPosition_MSc-PhD_ASC_PCE-2021-0642.pdf
- oferta tematica in cadrul Scolii Doctorale de Fizica (UB, 2023), disponibila pe pagina <https://www.fizica.unibuc.ro/Doctorat/Prezentare/Conducatori/>, cu includerea ‘link’-

¹⁰ M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, Phys. Rev. C **92**, 021601(R) (2015); *ibid.* C **95**, 024607 (2017)

¹¹ M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Progress report on analysis of deuteron-induced reactions on structural materials*, Report EFFDOC-1519, OECD/NEA JEFF Meeting, Nov. 27, 2023, https://www.oecd-nea.org/dbdata/nds_effdoc/effdoc-1519.pdf

urilor publicatiilor din ultimii 3 ani, din zona 'rosie/galbena' ISI/WoS, avand directorul proiectului de fata ca autor corespondent si reprezentand exemple de lucrari realizabile in cursul unui stagiu doctoral/post-doctoral.

2. Sumar al progresului

2.1 Livrabilele realizate sunt reprezentate de lucrarile^{7,8,11}, cu directorul proiectului de fata fiind autor corespondent, in timp ce lucrarile^{12,13} corespund livrabilelor realizate in cursul etapei 1 a proiectului de fata dar transmise si aflate in curs de publicare la data raportarii pentru etapa respectiva.

2.2 Indicatori de rezultat, ca articole publicate, sau acceptate spre publicare în reviste indexate ISI, sunt lucrarile^{7,8}, prima dintre ele urmand a fi finalizata in perioada imediat urmatoare.

2.3 Diseminarea rezultatelor: Participări la conferințe, 'workshopuri' si seminarii internaționale

O prima mentiune in acest sens o reprezinta lucrarile^{8,11} prezentate oral, certificand o pozitie nu numai asumata dar si validata la nivel international. Aceasta validare este confirmata si de convenirea – in urma primirii a 4 invitatii in acest sens intre 8.11.2021-14.03.2022 din partea **Frontiers-in-Physics** – impreuna cu alti patru colegi din Germania (2), Anglia si Suedia - a unui 'ResearchTopic' aprobat³ de editorii **Frontiers-in-Physics** (<https://www.frontiersin.org/>), prezentat conform in cursul raportarii pentru etapa 1 a acestui proiect.

Ulterior, directorul acestui proiect, la solicitarea directa a **Frontiers-in-Physics**, a transmis pentru publicare in acest cadru si o lucrare¹⁴ proprie, cu rol rezumativ pentru activitatea grupului IFIN-HH in ultimii 3 ani (2020-2022), si pentru eventuala orientare a altor posibili autori potential contribuali, cu urmatorul 'Abstract':

"The nuclear data evaluation for deuteron-induced reactions and α -particle emission by neutron interactions is addressed within "Nuclear data for fusion technology, from basic research to full-scale applications." The status and open questions related to these subjects in the area of nuclear data for fusion technology, specifically for the nuclear design of the ITER fusion device, the European DEMO fusion reactor, and the IFMIF-DONES Irradiation Facility, are briefly reviewed. A firm demand for accurate cross-sections of reactions induced by neutrons and deuterons exists, in this respect, within a more enlarged energy range up to 50 MeV than for fission applications. The current requirements are closely met by the TENDL Evaluated Nuclear Data Library, settled using the TALYS nuclear model code, which is one of the most widely used codes in basic research and applications including nuclear fusion

¹²M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Optical potential for incident and emitted low-energy α particles. III. Non-statistical processes induced by neutrons on Zr, Nb, and Mo nuclei*, Phys. Rev. C **107**, 034613 (2023), <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.107.034613>

¹³M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Role of direct interactions in (d,p) and (d,2p) reactions*, EPJ Web of Conf. **284**, 03006 (2023), <https://doi.org/10.1051/epjconf/202328403006>

¹⁴M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Structural material nuclear data basic research*, Front. Phys. **11**, 1172697 (2023), <https://doi.org/10.3389/fphy.2023.1172697> (part of the *Research Topic on Nuclear Data for Fusion Technology from Basic Research to Full-Scale Applications*, <https://www.frontiersin.org/research-topics/39045/nuclear-data-for-fusion-technology-from-basic-research-to-full-scale-application>)

technology. However, further improvement of this data library has recently been suggested, while, with respect to fission applications, not only the aforementioned energy range but also the diversity of nuclear data for fusion technologies is plainly stretched. Consequently, the progress of nuclear data activities conducted more recently on deuteron-induced reactions and α -emission by neutron interactions, throughout the European Fusion Program and subsequent to previous achievements within F4E and EUROfusion programs, is wholly summarized.”

2.4 Justificarea unor diferente dintre rezultatele preconizate pentru al doilea an al acestui proiect, conform propunerii finantate, si realizările prezentate in raportul de fata nu este de actualitate pentru obiectivele planificate. Aspecte suplimentare s-au datorat unor initiative ale directorului de proiect ca urmare a unor propuneri conforme ale editorilor *Frontiers-in-Physics* (<https://www.frontiersin.org/>)

3. Rezumat executiv al activitatilor realizate în perioada de implementare

Continuarea analizei unor parametri ai modelelor de mecanisme de reactie care sunt implicate in studiul reactiilor induse de deuteroni la energii joase precum ‘ruperea’ deuteronului (*‘breakup’*, BU) si reactiile directe (DR) de tip ‘striping’ si ‘pick-up’, suplimentar proceselor de emisie la prechilibru (PE) si ‘nucleu compus’ (NC), a reprezentat obiectivul principal al proiectului de fata. In particular, a fost urmarita continuarea analizei unitare a modului in care cele mai recente date experimentale sunt descrise de modelele corespunzatoare dezvoltate pana in prezent, fiind stabiliti si parametrii adoptati pentru o descriere cat mai precisa.

Analiza de modele nucleare considerata necesara in vederea evaluarii avansate a sectiunilor eficace ale reactiilor induse de deuteroni pe izotopii stabili 95-97Mo, avand obiectivul final al realizarii acestei activitati pentru elementul Mo in urmatorul an, a format obiectul etapei de fata a acestui proiect. Luarea in considerare a tuturor datelor experimentale disponibile pentru izotopii stabili vizati si pentru energiile incidente de pana la 50 MeV a fost realizata dand atentie contributiilor tuturor mecanismelor de reactie implicate, BU, DR, PE, si CN, precum si analizei sistematice a distributiilor unghiulare, a spectrelor energetice ale emisiei de neutroni/protoni, si a sectiunilor eficace de populare a nucleelor reziduale folosind codurile TALYS si FRESCO. O analiza consistenta a tuturor modelelor de mecanisme de reactie implicate in interactia complexa a deuteronilor cu izotopii naturali ai molibdenului a presupus si folosirea in mod unitar a parametrilor de model, de exemplu a acelasii seturi de parametri de model optic in calculele efectuate cu ambele coduri, TALYS si FRESCO, precum si a modelului de densitati de nivele ales in vederea estimarii contributiilor mecanismelor PE si CN.

Realizarea analizelor care au constituit obiectivele etapei de fata a acestui proiect a fost integrala, urmand inasa ca publicarea acestor rezultate sa fie finalizata, daca nu pana la data limita a prezentei etape (31.12.2023), in cursul etapei urmatoare. Pentru moment aceste rezultate au format obiectul a 1 lucrare in curs de evaluare si 1 lucrare acceptata pentru publicare in reviste cotate/indexate ISI, si 2 prezentari orale la conferinte si ‘workshop’-uri internationale,. Pagina proiectului (<https://www.nipne.ro/proiecte/pn3/60-proiecte.html>) a devenit functionala inca din 26.05.2022 in vederea anuntului public cat mai rapid al disponibilitatii unei pozitii vacante, include deliverabilele mentionate.

In acelasi timp directorul de proiect (impreuna cu alti patru colegi din laboratoare si universitati de prima marime din Germania, Anglia si Suedia) si tematica acestui proiect au devenit

parti ale unui **'ResearchTopic'** aprobat de editorii *Frontiers-in-Physics* (<https://www.frontiersin.org/>)
si consolidat inclusiv cu contributia directorului acestui proiect.

Ne asumăm răspunderea pentru corectitudinea datelor prezentate.

Director de proiect

Marilena Avrigeanu