



Nr. ieșire ^{7304/07.12.2022} /...

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: 01.06.2022 – 31.12.2022

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

Director de proiect: Dr. Marilena Avrigeanu

Etapa 1: Perfectionarea modelului de rupere ('breakup', BU) al deuteronilor si analiza consistenta a rolului interactiilor directe in reactii induse de deuteroni pe izotopii stabili 98,100Mo la energii de pana la 50 MeV

Obiectivele si activitățile etapei:

1.1 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

Analiza datelor de reactii nucleare recente, obtinute cu o precizie mult superioara decadei anterioare, prezinta 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). Utilitatea clarificarii aspectelor respective este determinata atat de interesul stiintific propriu-zis al cunoasterii acestor mecanisme de reactie, cat si

de cerintele evaluărilor actuale de date nucleare pentru programe de cercetare internaționale majore (ITER, IFMIF, NFS, e.g.^{1,2,3}). Acestea din urmă sunt impuse la rândul lor atât de analizele de securitate ale instalațiilor nucleare cât și de studiile de fezabilitate ale instalațiilor de transmutație a deșeurilor radioactive, aflate la originea dezvoltării mai recente a domeniului „cercetărilor nucleare teoretice aplicate” (*applied nuclear theory*).

Astfel, în contextul proiectului de față, sunt continuate analize ale unor parametri ai modelelor de mecanisme de reacție care sunt implicate în studiul reacțiilor induse de deuteroni la energii joase precum ‘ruperea’ deuteronului (*breakup*, BU) și reacțiile directe (DR) de tip ‘stripping’ și ‘pick-up’, suplimentar proceselor de emisie la echilibru (PE) și ‘nucleu compus’ (NC). În particular, un obiectiv principal îl reprezintă continuarea analizei unitare a modului în care cele mai recente date experimentale sunt descrise de modelele corespunzătoare dezvoltate până în prezent, fiind stabiliți și parametrii adoptați pentru o descriere cât mai precisă. În același timp se impune a fi prezentate/discutate și semnele de întrebare care mai există încă la nivel internațional asupra descrierii corespunzătoare a procesului de „rupere” a deuteronilor în reacții induse la energii joase.

1.2 Rezultatele etapei anuale

1.2.1 Extinderea analizei de modele nucleare considerată necesară în vederea evaluării avansate a secțiunilor eficace ale reacțiilor induse de deuteroni pe izotopii stabili ^{98,100}Mo, având obiectivul final al acestei activități realizate în următorii doi ani pentru Mo, a format obiectivul etapei de față a acestui proiect. Luarea în considerare a analizei tuturor datelor experimentale disponibile pentru izotopii stabili vizati, pentru energiile incidente de până la 50 MeV, a fost realizată în acest sens dând atenție contribuțiilor tuturor mecanismelor de reacție implicate menționate mai sus. precum și analiza sistematică a distribuțiilor unghiulare folosind o versiune actualizată a codului SCAT2 incluzând modelul DF, modelul BU inclus recent² în TALYS⁴, și codul FRESCO⁵, asociat analizei microscopice a reacțiilor directe (DR) ‘stripping’ și ‘pick-up’, analiza spectrelor energetice ale emisieii de neutroni/protoni, și a distribuțiilor unghiulare ale particulelor emise, și considerarea consistenței a BU, DR, PE, și CN, și a seturilor de parametri de modele nucleare. Rezultatele acestei

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)

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 imbunatatite a evaluarilor de uz international extins TENDL-2021⁶ in prezentarea⁷ orala cu urmatorul 'Abstract':

“Improvements of the nuclear model analysis to extend the evaluated deuteron-induced reaction cross sections of Mo stable isotopes, in view of a final work concerning natural Mo, have been considered including the analysis of all available data for these Mo stable isotopes, up to 50 MeV. The apparent discrepancies between experimental data and the corresponding evaluated ones, 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 ^{90-92,94,96}Zr (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 FRESCO and the available data for establishment of the needed spectroscopic factors.”

Aceste rezultate formeaza si obiectul unei lucrari in curs de redactare, in vederea publicarii in jurnalul Phys. Rev. C.

1.2.2 Un segment al rezultatelor mentionate mai sus, privind in particular reactiile (d,p) si (d,2p), a format si obiectul unei prezentari⁸ orale la editia din 2022 a conferintei de referinta in domeniul datelor nucleare (in curs de evaluare pentru publicarea in revista EPJ Web of Conf.) cu urmatorul 'Abstract':

“Enlarged deuteron-data needs follow the demands of on-going strategic research programs (ITER, IFMIF, SPIRAL2-NFS) using deuteron beams. Among these requested deuteron-data, the (d,p) and (d,2p) cross sections leading to hydrogen gas-bubble accumulation in the structural materials are very important for radiation damage studies. In opposition to the situation for neutrons, the systematics of deuteron activation cross sections, including those

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 and V. Avrigeanu, *Progress report on analysis of deuteron-induced reactions on structural materials*, Report EFFDOC-1487, OECD/NEA JEFF Meeting, Nov. 24, 2022, https://www.oecd-neo.org/dbdata/nds_effdoc/effdoc-1487.pdf

⁸M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Role of direct interactions in (d,p) and (d,2p) reactions*, Int. Conf. on Nucl. Data for Sci. and Tech. (ND2022), July 25-29, 2022, Sacramento, California, US (https://indico.frib.msu.edu/event/52/contributions/971/attachments/441/1931/ND2022_382_Theory-Codes_MAvrigeanu.pdf), submitted to EPJ Web of Conf. (14.10.2022).

leading to hydrogen, triton, helium gas accumulation is modest, while even the newest evaluations show apparent discrepancies. Therefore, the present work is devoted to the completion of the theoretical frame associated to the analysis of (d,p) and (d,2p) interaction processes in order to improve the description of the existing data and thus to provide trustful predictions where the measurements are missing.”

1.2.3 Elementul introdus pentru prima data in evaluarile actuale ale datelor nucleare pentru reactii induse de deuteroni, determinand si includerea sa in ultima versiune a codului de calcul TALYS-1.96 de larg uz international, il reprezinta luarea in considerare suplimentara (“*enhancement*”) a sectiunilor eficace ale reactiilor initiate de neutronii si protonii proveniti din ‘ruperea’ (BU) deuteronului⁹. 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. O analiza a reactiilor induse si de neutroni pe izotopii stabili ai elementului Mo a devenit astfel necesara si s-a realizat in contextul unei lucrari¹⁰ orientata si pe problematica potentialului de model optic pentru particule alfa, in curs de evaluare pentru publicare in jurnalul Phys. Rev. C. cu urmatorul ‘*Abstract*’:

“**Background:** The reliability of a previous alpha-particle optical-model potential (OMP) on nuclei with mass number $45 < A < 209$ was proved for emitted alpha particles as well, for proton-induced reactions on Zn isotopes [Phys. Rev. C **91**, 064611 (2015), Paper I] but not for neutrons on Zr stable isotopes [Phys. Rev. C **96**, 044610 (2017), Paper II]. **Purpose:** Recent assessment of this potential also for nucleon-induced alpha-emission on $A \sim 60$ nuclei, including pickup direct reaction and eventual Giant Quadrupole Resonance (GQR) alpha-emission, is completed for neutrons incident on Zr, Nb, and Mo stable isotopes. **Methods:** A consistent parameter set, established or validated by independent analysis of various distinct data, is involved at variance with use of either empirical rescaling factors of the gamma and/or neutron widths or even combinations of all options of a computer code for main input parameters. **Results:** Suitable account of all competitive reaction channels is confirmed by careful uncertainty analysis, to avoid parameter ambiguities and/or error compensation. Additional validation of this potential is also supported by recently measured (α, γ) and (α, n) cross sections of Zr and Mo nuclei. **Conclusions:** An increase of the alpha-emission beyond the statistical predictions, through consideration of additional reaction

⁹ M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, Phys. Rev. C **92**, 021601(R) (2015); *ibid.* C **95**, 024607 (2017)

¹⁰ M. 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*, submitted to Phys. Rev. C (21 Oct. 2022)

channels of the pickup direct interaction and *like*-GQR decay, makes possible description of both absorption and emission of alpha particles by the same potential.”

1.3 Gradul de realizare a obiectivelor

Realizarea analizelor care au constituit obiectivele etapei de fata a acestui proiect a fost integrala, urmand insa ca publicarea acestor rezultate^{7,8,10} sa fie finalizata, daca nu pana la data limita a prezentei etape (31.12.2022), in cursul etapei urmatoare.

Un obiectiv major nerealizat inca il reprezinta angajarea provizorie pe pozitia vacanta din lista de personal (‘*Member 4*’, cu ‘*Salary costs*’ de 151583 lei pe durata proiectului de 31 luni) a unui singur masterand cu incepere din 15.10.2022 si pana in 31.12.2022, fara capacitate de a contribui la cresterea valorica a activitatii proiectului datorita nivelului atins dupa parcurgerea primilor 4 ani ai Facultatii de Fizica (Universitatea Bucuresti). In acest sens se impune precizarea ca disponibilitatea acestei pozitii 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.euraxess.gov.ro/jobs/814605>
- <https://jobs.research.gov.ro/anunt.php?id=5137>
- 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
- întâlnire ‘*online*’ a Scolii Doctorale de Fizica (UB), 4 iulie 2022, 12:00-14:00, Meeting ID: 892 2638 5569 , Passcode: 502677

Un aspect aparte il reprezinta in acest caz faptul ca pentru aceasta pozitie vacanta au fost primite aplicatii din partea unor doctoranzi/postdoc numai din afara Romaniei (3 din India), care insa nu au mai continuat dupa comunicarea bugetului disponibil.

2. Sumar al progresului

2.1 Livrabilele realizate sunt reprezentate de lucrarile^{7,8,10}, cu directorul proiectului de fata fiind autor correspondent^{7,8} sau co-autor correspondent¹⁰ (ultima lucrarea fiind insa raportata ca livrabil numai al proiectului de fata ca urmare a volumului mai mare de analize DR implicat).

2.2 Indicatori de rezultat, ca articole publicate, sau acceptate spre publicare în reviste indexate ISI, sunt de asemea lucrarile^{7,8,10}, cu 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 - pentru o perioada contractuala cu putin mai mare decat ½ ani - o reprezinta lucrarile⁷⁻⁸ prezentate oral, certificand o pozitie nu numai asumata dar si validata la nivel

international. Aceasta validare cat si utilitatea participarii la ‘*workshop*’-urile respective 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/>) cu urmatorul ‘*Overview*’ in care este precizata si importanta proiectului de fata precumsi rolul sau in ansamblul cercetarilor actuale de importanta atat fundamnetala cat si pentru energetica nucleara de viitor:

„The development of fusion technology is a worldwide R&D effort aiming at a future viable and environmentally friendly energy source. A crucial role in the development of fusion reactors belongs to neutronics, i.e. analysis related to radiation transport simulations and activation calculations for nuclear responses including heating, dose fields, material irradiation damage, gas production, tritium breeding, etc. Neutronics design analyses need to provide fundamental data for the nuclear design, optimization and performance evaluation comprising safety, licensing, waste management, and decommissioning issues. The availability of suitable and well-qualified computational tools and nuclear data for fusion technology applications is a pre-requisite to ensure sufficient prediction accuracy of the related analyses with provision of realistic uncertainties. Nuclear loads and shielding-related requirements could pose severe demands on design and operation of many systems, structures and components in fusion reactors. This is of major importance for radiation protection and shielding applications, relevant for the respective safety cases. High-quality fusion nuclear data development and its experimental validation covers, amongst others:

- Fundamental research in nuclear reaction theory and modelling
- High-accuracy nuclear cross section measurements
- Evaluation of cross section data libraries with the corresponding covariances
- Full-scale processing with verification and validation
- Computational benchmarking
- Integral experimental validation up to the irradiation of instrumented mock-up components

The interaction of neutrons, gamma-rays, and charged particles with matter and subsequent phenomena in irradiated materials involve several complex processes falling into the domains of nuclear reaction theory, physics of radiation effects, and material science.

This Research Topic addresses open issues in the area of nuclear data for fusion technology, specifically for its application to neutronics design analyses for the ITER fusion device, the European DEMO fusion reactor, and the IFMIF-DONES irradiation facility which require high-quality cross-section data for reactions induced by neutrons and deuterons in the

energy range up to ~50 MeV. Despite the TENDL evaluated nuclear data library, based on the output of the TALYS nuclear model code system, has gained a world-wide use in both basic research and applications including nuclear fusion technology, a need of its further improvement has recently been pointed out. Furthermore, in comparison to fission applications, both the energy range and the diversity of nuclear data for fusion technologies are by far broader. Specific nuclear data evaluations are requested to improve the TENDL files based to a large extent on automated calculations with the TALYS code using default nuclear models and parameters. So far, theoretical models are not (yet) capable of accurately predicting unmeasured cross sections for an arbitrary nucleus and in a broad energy range. Instead, the models still rely on high-quality experimental data, in particular for making proper choices of the models' free parameters. Work on evaluation pipelines incorporating the treatment of model defects and relying on reproducible workflows with automatized processing and related verification and validation benchmarks is instrumental for the generation, maintenance, and quality-assurance of large-scale nuclear data libraries. Those general-purpose libraries are utilized to derive application-specific libraries, in particular for activation, damage and dosimetry applications with tailored verification and validation efforts.

We welcome all article types, including Original Research and Review.”

In perioada imediat urmatoarea directorul acestui proiect, la solicitarea directa a ***Frontiers-in-Physics***, va transmite pentru publicare in acest cadru si o lucrare proprie, cu rolul de orientare a altor posibili autori potential contribuali.

2.4 Justificarea diferentelor dintre rezultatele preconizate pentru primul an al acestui proiect, conform propunerii finantate, si realizările prezentate in acest raport deriva din perioada contractuala cu putin mai mare decat ½ ani de la inceperea activitatii acestui proiect. Sunt insa indeplinite toate conditiile pentru recuperarea acestor diferente si derularea proiectului conform planificarii initiale.

3. Rezumat executiv al activitatilor realizate în perioada de implementare

In proiectul de fata sunt continuate analize ale unor parametri ai modelelor de mecanisme de reactie care sunt implicate in studiul reactiilor induse de deuteroni la energii joase precum ‘ruperea’ deuterionului (*breakup*, BU) si reactiile directe (DR) de tip ‘stripping’ si ‘pick-up’, suplimentar proceselor de emisie la prechilibru (PE) si ‘nucleu compus’ (NC). In particular, un obiectiv principal il reprezenta 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..

Extinderea analizei de modele nucleare considerata necesara in vederea evaluarii avansate a sectiunilor eficace ale reactiilor induse de deuteroni pe izotopii stabili $^{98,100}\text{Mo}$, avand obiectivul final al realizarii acestei activitati pentru elementul Mo in urmatoorii doi ani, a format obiectul etapei de fata a acestui proiect. Luarea in considerare a analizei 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. Analiza consistenta a tuturor modelelor de mecanisme de reactie implicate in interactia complexa a deuteronilor cu izotopii naturali ai molibdenului implica 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 insa ca publicarea acestor rezultate sa fie finalizata, daca nu pana la data limita a prezentei etape (31.12.2022), in cursul etapei urmatoare. Pentru moment aceste rezultate au format obiectul a 2 prezentari orale la conferinte si 'workshop'-uri internationale si a 3 lucrari in curs de evaluare (2) si redactare (1) pentru publicare in jurnale ISI. 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.

In acelasi timp directorul (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 in curs de consolidare inclusiv cu contributi imediat viitoare ale proiectului de fata.

Ne asumăm răspunderea pentru corectitudinea datelor prezentate.

Director de proiect


Marilena AVRIGEANU