

## مطالعه اثرات افزایش اسپین محاسبه شده با کد CNS بر اساس شبیه‌سازی با کد MCNPX

برای ایزوتوپ‌های Pu<sup>۲۴۰،۲۴۲،۲۴۴</sup>، Cm<sup>۲۴۸،۲۴۶،۲۴۴،۲۴۲</sup> و Cf<sup>۲۵۲،۲۵۴</sup>

هادی زنگنه و مهدی نصری نصرآبادی\*

دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران.

\*اصفهان، دانشگاه اصفهان، دانشکده فیزیک، کدپستی: ۸۱۷۴۶-۷۳۴۴۱

پست الکترونیکی: mnnasrabadi@ast.ui.ac.ir

### چکیده

در پژوهش حاضر اثرات افزایش اسپین بر روی سد شکافت هسته‌ای در انرژی انباشته شده در واحد جرم سلول، ناشی از شکافت هسته‌ای برای هسته‌های مختلف با نتایج حاصل از شبیه‌سازی با کد MCNPX، مورد مطالعه قرار گرفته است. با استفاده از تالی FV، میزان انباشت انرژی ناشی از شکافت در سلول مورد نظر و همچنین آهنگ تولید نوترون توسط ایزوتوپ‌های Pu<sup>۲۴۰،۲۴۲،۲۴۴</sup>، Cm<sup>۲۴۸،۲۴۶،۲۴۴،۲۴۲</sup> و Cf<sup>۲۵۲،۲۵۴</sup> اندازه‌گیری شد. در انرژی‌های نزدیک به اسپین‌های حالت پایه یعنی ۴<sup>+</sup> و اسپین‌های بالاتر ۱۲<sup>+</sup> و انرژی‌های نزدیک به اسپین‌های بازه سد شکافت یعنی محدوده اسپینی ۱۲<sup>+</sup> تا ۱۸<sup>+</sup> و از این محدوده تا اسپین‌های بالاتر، انرژی به‌جا گذاشته شده در سلول‌های حاوی ایزوتوپ‌های مختلف، افزایش یافت. میزان تولید نوترون در سلول‌های حاوی ایزوتوپ‌های مختلف نیز افزایش یافت. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که افزایش انرژی نوترون‌های فرودی، متناسب با افزایش اسپین هسته هدف است. سپس اثر تغییرات شکل هسته‌ای بر این نتایج و تقابل آن با افزایش اسپین، مورد بررسی قرار گرفت که به خوبی با نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها همخوانی دارد. یکی از نتایج مهم این تحقیق این است که نوترون با هر انرژی که به هسته برخورد کند، اگر هیچ واکنش هسته‌ای نیز برای آن رخ ندهد، حتماً سبب افزایش اسپین آن هسته خواهد شد. سرانجام بر اساس مقایسه بین نتایج، معلوم گردید که نتایج شبیه‌سازی به‌وسیله کد MCNPX، نتایج حاصل از کد CNS (Cranked Nilsson-Strutinsky) را به خوبی تأیید می‌کند.

کلیدواژه‌گان: CNS، MCNPX، اسپین، سد شکافت، نوترون، تغییرات شکل هسته.

### ۱. مقدمه

ماکروسکوپیکی است که کد CNS بر اساس آن نوشته شده است. در این مدل در ابتدا به صورت ماکروسکوپیکی همه محاسبات مانند محاسبات انرژی برای هسته انجام شد. سپس اثرات پوسته‌ای و تصحیحاتی که استرویتینسکی برای محاسبه انرژی هسته‌های سنگین مختلف انجام داد، نیز به آن اضافه گردید و این امر باعث بهبود در صحت پیش‌بینی رفتار هسته شد

مدل‌های هسته‌ای به مرور زمان تکامل یافته و پیش‌بینی‌های دقیق‌تری از رفتار هسته‌ها در حالات مختلف را ارائه کرده‌اند. مدل‌های قطره-مایع، پوسته‌ای و دورانی از جمله مدل‌های مهمی هستند [۲،۱] که پارامترهای هسته‌ای در شکافت هسته‌ای را بررسی نموده [۳] و بخشی از رفتارهای هسته را پیش‌بینی می‌کنند. مدل نیلسون - استرویتینسکی یک روش میکرو -

غیر محوری و شانزده قطبی می‌باشند. در رابطه (۲)، جملات اول و سوم به ترتیب بیانگر انرژی جنبشی و هامیلتونی شانزده قطبی هستند و  $m$  جرم تک‌ذره است. هامیلتونی دورانی در رابطه (۱) برابر است با [۱۰]:

$$H_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} J_C^2, \quad (۴)$$

که در آن  $J_C$  تکانه زاویه‌ای تجمعی هسته و  $J_C$  برابر است با:

$$J_C^2 = J(J+1) - K^2, \quad (۵)$$

$J(J+1)$  و  $K^2$  به ترتیب مربوط به دوران و ارتعاش هسته هستند. البته در این‌جا با فرض دوران خالص هسته،  $K^2$  برابر صفر و  $J_C = I$  در نظر گرفته شده‌اند و خواهیم داشت [10]:

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} I(I+1), \quad (۶)$$

و برای تابع موج کل داریم [۸]:

$$\psi = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^{\frac{1}{2}} [D_{MK}\varphi_v + (-1)^{l-K} D_{M-K}\varphi_v], \quad (۷)$$

که در آن  $D$  ماتریس حرکت دورانی تجمعی هسته و  $\varphi_v$  تابع پتانسیل تک‌ذره و  $M$  عدد کوانتومی وابسته به اسپین است. با استفاده از رابطه (۶)، انرژی دورانی در اسپین‌های مشخص، محاسبه و تغییرات مقادیر اسپین هسته به صورت افزایشی انتخاب شدند. سپس انرژی نوترون‌های تولیدی در چشمه نوترونی شبیه‌سازی شده با کد MCNPX با مقادیر انرژی دورانی محاسبه شده، تنظیم گردید. مطابق با انرژی دورانی اضافه شده با افزایش اسپین، در هر مرحله انرژی نوترون‌های فرودی را افزایش دادیم تا نتایج روند افزایش اسپین هسته‌ها را در دو کد CNS و MCNPX با یکدیگر مقایسه کنیم.

### ۳. بحث و نتایج

#### ۳.۱. شبیه‌سازی

با به‌کارگیری کد MCNPX یک چشمه نوترونی با تابشی همسان‌گرد و همگن بر کره‌ای با ضخامت پوسته ۱ cm، شبیه‌سازی شد. ایزوتوپ‌های مورد نظر مطابق جدول (۱) انتخاب شدند. محاسبات در هر دو کد CNS و MCNPX بر مبنای

[۵،۴]. محاسبه ارتفاع سد شکافت هسته‌های مختلف و تغییرات شکل آن‌ها در مطالعات نظری مختلفی انجام شده است [۷،۶]. در این پژوهش در بخش مطالعات نظری از مدل دورانی [۸] استفاده و با افزایش اسپین هسته‌های مختلف، نتایج حاصل از آن بر روی انرژی هسته‌ها محاسبه شد. سپس این افزایش اسپین در مدل دورانی به منظور بررسی اثرات کاربردی آن، در کد MCNPX، معادلسازی گردید. در این راستا، اثرات افزایش اسپین بر میزان انباشت انرژی ناشی از شکافت و میزان تولید نوترون ناشی از آن با به‌کارگیری تالی FV، محاسبه شد. سپس نتایج حاصل با کد CNS مقایسه و مشخص گردید که این دو کد در توافق بسیار خوبی با هم هستند. بررسی اثرات کاربردی برخی مباحث فیزیک هسته‌ای نظری مانند افزایش اسپین هسته‌ها از دیگر انگیزه‌ها در انجام این پژوهش بوده است.

#### ۲. روش محاسباتی

در بخش محاسبات نظری از مدل دورانی استفاده شده است. در این مدل، هسته به‌عنوان یک جسم واحد در نظر گرفته می‌شود که لختی دورانی آن بین یک جسم صلب و یک شاره است. در این مدل، هسته‌های سبک لختی دورانی بیش‌تری دارند و به جسم صلب نزدیک‌تر هستند و هر چه هسته سنگین‌تر می‌شود با کاهش لختی دورانی، ماهیت هسته از صلب بودن به شاره‌ای نزدیک‌تر می‌شود. هامیلتونین کل برابر است با [۸]:

$$H_{tot} = H_{sp} + H_{rot}, \quad (۱)$$

که در آن  $H_{sp}$  بیانگر هامیلتونی تک‌ذره است:

$$H_{sp} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + V_\epsilon \epsilon_\epsilon, \quad (۲)$$

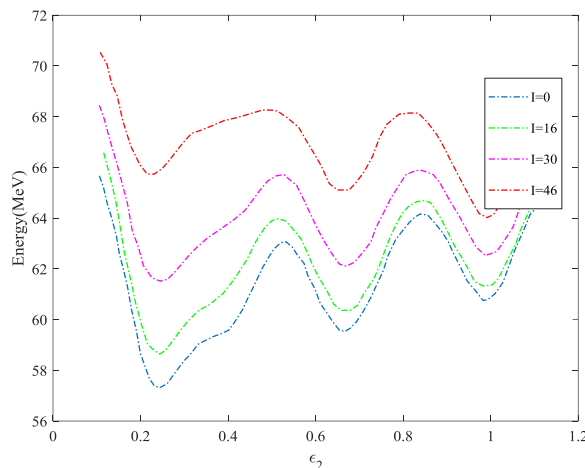
$\omega_x$ ،  $\omega_y$  و  $\omega_z$  بسامدهای نوسان در سه راستای  $x$ ،  $y$  و  $z$  در حالت کلی با رابطه زیر محاسبه می‌شوند:

$$\omega_j = \omega_j(\epsilon_\nu, \gamma) \left[ 1 - \frac{2}{3} \epsilon_\nu \cos\left(\gamma + \frac{\pi\nu_j}{3}\right) \right], \quad (۳)$$

$\nu_x$ ،  $\nu_y$  و  $\nu_z$  به ترتیب برابر ۱، -۱ و ۰ هستند و محاسبات در سیستم مختصات کشیده انجام می‌شود [۹]. در روابط بالا،  $\epsilon_\nu$ ،  $\gamma$  و  $\epsilon_\epsilon$  به ترتیب پارامترهای تغییر شکل چارقطبی‌های محوری،

همچنان که در شکل ۱ مشاهده می شود، تغییر ارتفاع سد شکافت هسته ای با افزایش اسپین توسط کد CNS برای هسته  $^{242}\text{Cm}$  محاسبه شده است. با توجه به شکل ۱ و مرجع [۹]، در شبیه سازی تغییرات ارتفاع سد شکافت با استفاده از کد CNS، با افزایش اسپین، ارتفاع سد شکافت هسته ای، کاهش یافته است که این مطلب نتایج حاصل از مطالعه ما بر روی تالی FV در کد MCNPX را تأیید می کند. در جدول ۱ نتایج این مطالعه بر روی تالی FV، به منظور بررسی اثرات تغییرات اسپین بر روی انرژی انباشته شده در سلول های حاوی مواد مختلف ناشی از شکافت، برای ایزوتوپ های مختلف آورده شده است.

تغییرات یکسان اسپین انجام شد. در مجموع برای این ایزوتوپ ها، شبیه سازی های لازم صورت پذیرفت. سپس تالی FV برای محاسبه میزان انباشت انرژی ناشی از شکافت در سلول مورد نظر به کار گرفته شد. مطابق جدول ۱، با بررسی نتایج، مشاهده شد که افزایش انرژی نوترون های فرودی بر هسته های مورد مطالعه، سبب افزایش اسپین آن ها به مقادیر جدول ۱ می شود و مقدار انرژی انباشته شده ناشی از شکافت در سلول مورد اندازه گیری، افزایش می یابد. افزایش انرژی انباشته شده در سلول های مواد مختلف، بیان گر یکی از جنبه های کاربردی اثرات تغییرات اسپین در هسته است.

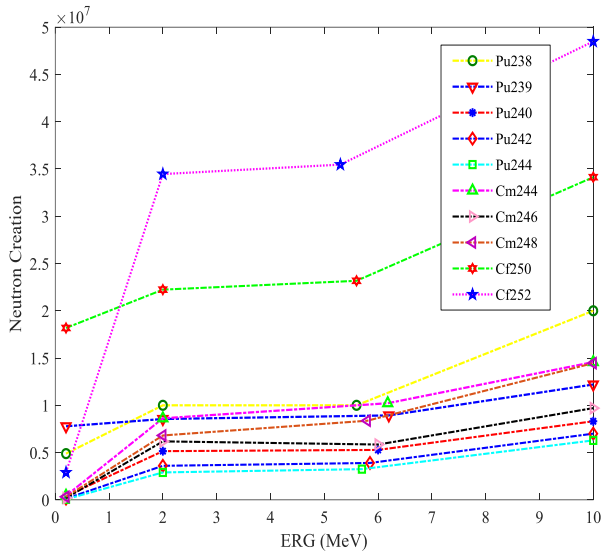


شکل (۱): محاسبه کاهش ارتفاع سد شکافت هسته  $^{242}\text{Cm}$  با افزایش اسپین با استفاده از کد CNS.

جدول (۱): نتایج میزان انباشت انرژی ناشی از شکافت (تالی FV) برای ایزوتوپ های  $^{238,240,242,244}\text{Pu}$ ،  $^{242,244,246,248}\text{Cm}$  و  $^{242,244}\text{Cf}$  با افزایش اسپین.

Percentage Error	FV Tally for ERG=10 MeV, $\approx I = 16^+$	FV Tally for ERG= fission barrier, $\approx I = 16^+ - 18^+$	FV Tally for ERG=2 MeV, $\approx I = 12^+$	FV Tally for ERG=0.2 MeV, $\approx I = 4^+$	Nuclei
0.001	81.46	56.73	55.41	25.84	$^{238}_{94}\text{Pu}$
0.001	29.60	28.23	20.08	22.46	$^{240}_{94}\text{Pu}$
0.001	29.72	20.59	20.81	0.07	$^{242}_{94}\text{Pu}$
0.001	22.73	15.75	15.92	0.03	$^{244}_{94}\text{Pu}$
0.003	28.99	21.81	21.04	0.13	$^{242}_{96}\text{Pu}$
0.002	62.28	46.70	40.53	20.59	$^{244}_{96}\text{Pu}$
0.002	27.37	22.84	27.48	0.09	$^{246}_{96}\text{Pu}$
0.002	52.94	34.68	30.91	14.79	$^{248}_{96}\text{Pu}$
0.002	129.72	92.72	91.17	75.12	$^{250}_{98}\text{Pu}$
0.003	169.92	128.51	128.23	10.48	$^{252}_{98}\text{Pu}$

نتایج آن برای ایزوتوپ‌های جدول ۱، در شکل ۲ نمایانده شده است.



شکل (۲): میزان نوترون تولیدی در سلول برای ایزوتوپ‌های مختلف با افزایش اسپین با استفاده از کد MCNPX.

مطابق شکل ۲، با افزایش اسپین، میزان تولید نوترون در سلول‌های حاوی ایزوتوپ‌های مختلف، افزایش می‌یابد. مقادیر نوترون تولیدی برای ایزوتوپ‌های Cf به میزان بسیار بیشتری از سایر ایزوتوپ‌ها است. در بازه اسپینی  $4^+$  تا  $12^+$  یعنی اولین بازه انرژی در شکل ۲، مشخص می‌شود که کدام یک از ایزوتوپ‌های مورد اندازه‌گیری، پتانسیل تولید نوترون بیشتری را در این بازه اسپینی دارند. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، در این بازه شیب نمودار تولید نوترون ایزوتوپ‌ها، افزایشی است و از ابتدا تا انتهای این بازه، همه ایزوتوپ‌ها شیب تولید نوترونی خود را حفظ کرده‌اند. در بازه اسپینی دوم یعنی از  $12^+$  تا  $18^+$ ، شیب نمودار تولید اغلب ثابت و یا کاهشی شده است و در بازه اسپینی سوم یعنی از  $18^+$  تا  $26^+$  با شیب بسیار کم‌تری نسبت به بازه اسپینی اول، دوباره نمودار تولید نوترون برای مواد مختلف افزایشی شده است. بنابراین، یکی از نتایج مهم حاصل از این نمودار این است که بازه اسپینی مناسب جهت تشخیص توان تفکیک به منظور تعیین قدرت ایزوتوپ‌های مختلف در تولید نوترون، بازه اسپینی  $4^+$  تا  $12^+$  است که این

با کاهش ارتفاع سد شکافت با افزایش اسپین، در نتایج حاصل از کد CNS مطابق شکل ۱، احتمال تونل‌زنی کوانتومی در انرژی‌هایی کم‌تر از نقطه بیشینه انرژی در سد شکافت، برای انجام واکنش شکافت، بیش‌تر می‌شود. هر چه ارتفاع سد شکافت کم‌تر شود، احتمال انجام فرآیند شکافت بیش‌تر می‌شود. با افزایش احتمال فرآیند شکافت، آهنگ واکنش (Fission rate =  $\Sigma_f \Phi$ ) نیز افزایش می‌یابد و انرژی انباشته شده در سلول‌های حاوی ایزوتوپ‌های جدول ۱، براساس محاسبات کد MCNPX نیز باید افزایش یابد.

مطابق جدول ۱، با افزایش اسپین هسته‌ها در نتیجه افزایش انرژی نوترون‌های فرودی (ERG)، میزان انباشت انرژی از شکافت (که توسط تالی Fv محاسبه شده) در مواد انتخاب شده برای سلول هدف، افزایش یافته است. برای مثال، وقتی لایه هدف از جنس  $^{238}\text{Pu}$  باشد، با افزایش اسپین در هر مرحله، انباشت انرژی در ماده در نتیجه شکافت، افزایش یافته است. این افزایش در نزدیکی اسپین‌های معادل با سد شکافت یعنی اسپین‌های در محدوده  $16^+$  تا  $18^+$  برای ایزوتوپ‌های مختلف، پایدار نبود، ولی در روند کلی افزایش انباشت انرژی ناشی از شکافت با افزایش اسپین، خللی ایجاد نمی‌کند. بنابراین، در اسپین‌های نزدیک به حالت پایه تا اسپین نزدیک به محدوده سد شکافت و از این محدوده تا اسپین‌های بالاتر، بدون هیچ گونه استثنایی در ایزوتوپ‌های مورد نظر، مطابق جدول ۱ شاهد افزایش انرژی به‌جا گذاشته شده در ماده هستیم. اگر نوترون فرودی انرژی جنبشی قابل توجهی نیز نداشته باشد، متناسب با جرم نوترون فرودی، مقداری انرژی که آن هم بر اساس مطالب بالا بر اسپین مؤثر است، خواهیم داشت. بنابراین با برخورد نوترون با کم‌ترین انرژی جنبشی ممکن، حداقل خود جرم نوترون در این برخورد سبب تغییرات اسپین هسته هدف خواهد شد. در این مطالعه میزان نوترون تولیدی در سلول با افزایش اسپین، به جز نوترون‌های تولیدی از چشمه نوترونی، محاسبه و

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش برقراری ارتباط بین مفاهیم فیزیک هسته‌ای نظری با فیزیک هسته‌ای کاربردی به‌منظور کمک به کارآمدی هر چه بیش‌تر مطالعات نظری، با موفقیت در نظر گرفته شد. مقایسه نتایج حاصل از کد MCNPX و کد نظری CNS نشان داد که نتایج حاصل از آن‌ها در توافق خوبی با یکدیگر هستند، هر چند یکی در شاخه فیزیک نظری (CNS) و دیگری (MCNPX) در شبیه‌سازی‌ها و محاسبات کاربردی فیزیک، استفاده بیش‌تری دارد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که با افزایش اسپین هسته هدف، انباشت انرژی در سلول‌های حاوی ایزوتوپ‌های مختلف، افزایش می‌یابد. اثرات افزایش اسپین بر تغییر شکل هسته و میزان تولید نوترونی ایزوتوپ‌های مختلف از دیگر نتایج این مطالعه بود. مطابق با نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها در بخش سه، با افزایش اسپین، تولید نوترون توسط ایزوتوپ‌های مختلف مورد محاسبه، افزایش یافت. آخرین نتیجه حاصل از این مطالعه این است که هرگاه نوترونی با هر انرژی‌ای حتی نوترون سرد با اسپینی به اندازه اسپین ذاتی به یک هسته برخورد کند، حتی اگر هیچکدام از واکنش‌های هسته‌ای نوترون با ماده رخ ندهد، افزایش اسپین و تغییر شکل برای هسته مرکب رخ خواهد داد. به‌علاوه ممکن است تولید انرژی و تولید نوترون نیز برای آن هسته رخ دهد.

موضوع بیان‌گر یکی دیگر از موارد نتایج کاربردی و مهم تغییرات اسپین است.

پارامتر  $\beta$  در معادله (۶)، ارتباط مستقیمی با میزان تغییرات شکل هسته‌ها دارد و بیان می‌کند که با افزایش اسپین (افزایش انرژی نوترون‌های فرودی)، تغییرات شکل هسته، غالباً افزایش است. این موضوع سبب افزایش پارامتر  $\beta$  و در نتیجه کاهش انرژی  $E_{rot}$  و  $E_{tot}$  می‌شود. بنابراین، افزایش اسپین هسته، سبب افزایش میزان تغییرات شکل هسته می‌شود (برخورد نوترون‌های با انرژی بالاتر). با کاهش انرژی، هسته در تلاش است که به سمت پایداری بیش‌تر و عدم انجام شکافت پیش برود. اما، چون تأثیر اسپین از مرتبه بالاتری است، در نهایت افزایش اسپین بر افزایش تغییر شکل هسته‌ها غلبه می‌کند و شکافت رخ می‌دهد. محاسبات حاصل از شبیه‌سازی‌ها بر اساس روش مونت کارلو، پیش‌بینی می‌کند که با افزایش انرژی نوترون‌های فرودی یا همان افزایش اسپین، تعداد نوترون‌های گسیل شده از هسته افزایش می‌یابد. محاسبات شبیه‌سازی با کد CNS نیز میزان تغییر شکل هسته با افزایش اسپین را پیش‌بینی می‌کند. این موضوع اثر تغییر شکل هسته با تغییر اسپین بر روی میزان نوترون تولیدی و میزان انباشت انرژی اندازه‌گیری شده توسط کد MCNPX را نشان می‌دهد.

#### ۵. مراجع

1. S. R. Stroberg, H. Hergert, S. K. Bogner, J. D. Holt. Nonempirical interactions for the nuclear shell model: an update. *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* 69 (2019) 307-362.
2. F. Q. Chen, J. Meng, S. Q. Zhang. Chiral geometry and rotational structure for  $^{130}\text{C}$ s in the projected shell model. *Phys. Letters B* 785 (2018) 211-216.
3. A. N. Andreyev, K. Nishio, K. H. Schmidt. Nuclear fission: a review of experimental advances and phenomenology. *Rep. Prog. Phys.* 81 (1) (2018) 016301.
4. T. Bengtsson, I. Ragnarsson. Rotational bands and particle-hole excitations at very high spin. *Nucl. Phys. A* 436 (1) (1985) 14-82.
5. B. G. Carlsson, I. Ragnarsson. Calculating the nuclear mass in the very high angular momentum regime. *Phys. Rev. C* 74 (1) (2006) 011302.
6. G. Giacalone. Constraining the quadrupole deformation of atomic nuclei with relativistic nuclear collisions. *Phys. Rev. C* 102 (2) (2020) 024901.

7. P. Moller, A. J. Sierk, A. Iwamoto, R. Bengtsson, H. Uhrenholt, S. Åberg. Heavy-element fission barriers. *Phys. Rev. C* 79 (6) (2009) 064304.
8. I. Ragnarsson, S. Gvsta Nilsson. *Shapes and Shells in Nuclear Structure*. Sha. She. Nuc. Structure. Cambridge University Press, New York, 2005.
9. H. Zanganeh, A. Kardan, M. H. Yazdi. Fission–Barrier properties at the ground and high-spin states in the actinides. *Nucl. Phys. A* 997 (2020) 121716.
10. K. S. Krane. *Introductory Nuclear Physics*. Vol. 2, John Wiley and Sons, New York, 1988.