

frescoPRC

Juan Manuel Franco Patiño

Diciembre 2018

La herramienta frescoPRC se ha creado para generar de forma sencilla los inputs para el programa de reacciones nucleares FRESKO¹ [3] que describen la dispersión de neutrones por actínidos par-par a través del modelo óptico dispersivo con acoplamiento efectivo entre bandas planteado en [1]. En dicho artículo, los cálculos fueron hechos con el programa de reacciones nucleares OPTMAN [2], cuyo uso es muy limitado comparado con otros programas más populares como FRESKO, por lo que resultaba de interés para la comunidad de física nuclear poder realizar este tipo de cálculos en un programa de uso más extendido. La herramienta frescoPRC utiliza como input los parámetros que describen el potencial óptico dispersivo dados en la tabla I de [1], además de los distintos parámetros efectivos de un determinado blanco, como los dados en la tabla IV de [1] para el ²³⁸U. Además de esto, también se puede especificar el rango de energías para el cual se quiere generar los distintos inputs para FRESKO y distintos parámetros de integración utilizados por FRESKO, como el paso de integración o el radio máximo hasta el cual hay interacción nuclear entre el proyectil y el blanco.

A continuación, se va a dar una breve descripción de las subrutinas incluidas en este paquete que forman el núcleo del programa frescoPRC escrito en FORTRAN:

- *dispers2.f* : Esta subrutina obtiene como input todos los parámetros que caracterizan el potencial óptico dispersivo descrito en profundidad en la sección V. de [1] y en ella se calcula numéricamente todas las componentes del potencial óptico dispersivo haciendo uso de las funciones analíticas definidas en *dispersp.f*.
- *form.f95* : Esta subrutina calcula numéricamente los factores de forma definidos en la ecuación A4 de [1] que luego formarán parte del input que usará FRESKO, por lo que generará un archivo con extensión .form para cada energía en el que se incluyen los factores de forma necesarios para el cálculo en el formato requerido por FRESKO.
- *steps.f95* : Esta subrutina genera los acoplamientos entre las cuatro bandas excitadas- banda octupolar, banda β , banda γ y banda anómala- y la banda fundamental consistentes con la expresión B.12 de [1]. Recibe como inputs los distintos parámetros efectivos que son una medida de la intensidad del acoplamiento de las distintas bandas excitadas con la banda fundamental y se obtiene como output la parte del input de FRESKO correspondiente al acoplamiento entre bandas.
- *clebsch.f95* : Subrutina para el cálculo numérico de cualquier coeficiente de Clebsch-Gordan utilizada en *steps.f95* para calcular los elementos de matriz de las matrices de Wigner que aparecen en la ecuación B.12 de [1] y cuya expresión en función de los coeficientes de Clebsch-Gordan viene dada por la ecuación B14 de [1].

Todas las anteriores subrutinas son llamadas desde el programa principal *frescoPRC.f90* que se encarga de leer los parámetros necesarios del archivo *input.INP* y escribir los inputs que usará FRESKO en archivos individuales que tendrán la extensión .in. Además de esto, también se generará un archivo con extensión .txt que contiene todas las componentes del potencial óptico dispersivo para cada energía. A continuación, se muestran en dos tablas los parámetros del modelo que fueron ajustados en [1]:

¹Más concretamente, se ha creado para que sea compatible con la versión *frxy6j* de FRESKO.

Volumen	Superficie	Espín-órbita	Coulomb
$V_0 = 50.47 + 0.0292 (A - 238) \text{ MeV}$		$V_{\text{spo}} = 6.1 \text{ MeV}$	$C_{\text{coul}} = 1.36 \text{ MeV}$
$\lambda_{\text{HF}} = 0.00977 \text{ MeV}^{-1}$	-	$\lambda_{\text{so}} = 0.005 \text{ MeV}^{-1}$	
$C_{\text{viso}} = 17.3 \text{ MeV}$			
$A_v = 11.81 \text{ MeV}$	$W_0 = 17.43 \text{ MeV}$	$W_{\text{spo}} = -3.1 \text{ MeV}$	
$B_v = 81.81 \text{ MeV}$	$B_s = 10.57 \text{ MeV}$	$B_{\text{so}} = 160 \text{ MeV}$	
$E_a = 55 \text{ MeV}$	$C_s = 0.01331 \text{ MeV}^{-1}$		
$\alpha_v = 0.355 \text{ MeV}^{1/2}$	$C_{\text{wiso}} = 28.9 \text{ MeV}$		
$r_{\text{HF}} = 1.2468 - 0.00183 (A - 238) \text{ fm}$	$r_s = 1.1717 + 0.0041 (A - 238) \text{ fm}$	$r_{\text{so}} = 1.1214 \text{ fm}$	
$a_{\text{HF}} = 0.638 + 0.002134 (A - 238) \text{ fm}$	$a_s = 0.618 \text{ fm}$	$a_{\text{so}} = 0.59 \text{ fm}$	
$r_v = 1.2657 \text{ fm}$			$r_c = 1.12849 \text{ fm}$
$a_v = 0.6960 - 0.00021 (A - 238) \text{ fm}$			$a_c = 0.547 \text{ fm}$

Tabla. 1: Parámetros ajustados del potencial óptico dispersivo válido para distintos actínidos de número másico A .

Bandas	Parámetros de deformación
	$\beta_{20} = 0.230$
Banda Fundamental	$\beta_{40} = 0.062$
	$\beta_{60} = -0.0096$
Banda β	$[\beta_2]_{\text{eff}} = 0.1044$
Banda γ	$[\gamma_{20}]_{\text{eff}} = 0.048$
Banda octupolar	$[\beta_{30}]_{\text{eff}} = 0.2696$
Banda γ anómala	$[\gamma_{22}]_{\text{eff}} = 0.3044$

Tabla. 2: Parámetros de deformación estáticos y efectivos para el ^{238}U . Los valores numéricos presentados en la tabla IV de [1] para los parámetros efectivos no coinciden con los de esta tabla debido a un errata en el artículo original, ya que estos primeros están multiplicados por β_{20} a priori para adaptarse al criterio utilizado en el input de OPTMAN.

La estructura del archivo *input.INP* que contiene la información necesaria para generar los inputs que usará FRESCO es:

A	Z	E_f					
n_{gs}	n_{β_3}	n_{β_2}	$n_{\gamma_{20}}$	$n_{\gamma_{22}}$			
J_{max}	hcm	rmatch	NG				
E_{min}	E_{max}	NE					
V_0^a	V_0^b	λ_{HF}	C_{viso}	V_{spo}	λ_{so}	C_{coul}	
A_v	B_v	W_0	B_s	C_s	C_{wiso}	W_{spo}	B_{so}
E_a	α_v	A_d					
r_{HF}^a	r_{HF}^b	a_{HF}^a	a_{HF}^b	r_v	a_v^a	a_v^b	
r_s^a	r_s^b	a_s					
r_{so}	a_{so}	r_c	a_c				
β_{20}	β_{40}	β_{60}					
$\beta_{20}[\beta_2]_{\text{eff}}$	$\beta_{20}[\gamma_2]_{\text{eff}}$	$\beta_{20}[\gamma_{22}]_{\text{eff}}$	$\beta_{20}[\beta_{30}]_{\text{eff}}$				

Tabla. 3: Estructura por filas del archivo *input.INP*

Todos los parámetros del archivo *input.INP* deben ser números reales salvo A (número másico del blanco), Z (número atómico del blanco), la segunda fila entera (número de estados de cada banda que se van a considerar), NG (número de puntos que tiene la malla sobre la que se calculan los factores de forma) y NE (número de

energías distintas entre E_{min} y E_{max} para las cuales se quieren generar los inputs) que son números enteros. El resto de parámetros son:

- E_f : Energía de fermi característica del núcleo blanco.
- J_{max} : Momento angular total máximo que puede llegar a tener el conjunto de canales acoplados.
- hcm y $rmatch$: Paso de integración de las ecuaciones acopladas y radio máximo para el cual hay interacción nuclear (para valores mayores únicamente hay interacción coulombiana).

Los parámetros de las líneas de la 5 a la 10 son los mostrados en la tabla 1, donde aquellos que dependen linealmente de $A - A_d$ tienen dos componentes: la ordenada en el origen, caracterizada por el superíndice a , y la pendiente, caracterizada por el superíndice b . Por último, los parámetros de las líneas 11 y 12 son aquellos presentados en la tabla 2 (los parámetros efectivos que van en la última línea están multiplicados todos por β_{20}). Para facilitar la identificación de los parámetros, se incluye en el paquete del programa un input de ejemplo construido con los parámetros de las tablas 1 y 2.

Referencias

- [1] E. Sh. Soukhovitskiĭ, R. Capote, J. M. Quesada, S. Chiba y D. S. Martyanov. “Nucleon scattering on actinides using a dispersive optical model with extended couplings”. *Phys. Rev. C* 94 (6 2016), 064605. DOI: 10.1103/PhysRevC.94.064605.
- [2] E.Sh. Soukhovitskiĭ, G.B. Morogovskii, R. Capote Noy, S. Chiba y J. M Quesada. *Program OPTMAN Version 14 (2013), User’s Guide Coupled-Channel Optical Model Code Based on Rigid- or Soft-Rotator Models, Compatible with the Empire Nuclear Data Evaluation System*. International Atomic Energy Agency (IAEA), 2013.
- [3] Ian J. Thompson. *FRESCO, coupled reaction channels calculations*. <http://www.fresco.org.uk/> consultada el 14-10-2018.