

# A NAÜs termikus neutron befogási hatáskeresztmetszet adatbázis felújítása

Belgya Tamás, Maróti Boglárka, Nukleáris Analitikai és Radiográfiai Laboratórium (NAL)  
HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest

Révay Zsolt, Technische Universität München (TUM) · Forschungs-Neutronenquelle  
Heinz Maier-Leibnitz (FRM II)

*... a hatáskeresztmetszetek kezében vagyunk ...*

## A nukleáris adatok fontossága:


A termikus neutron befogási hatáskeresztmetszetek kiemelkedően fontosak a nukleáris reaktorok működése és tervezése szempontjából:

- Hasadási termékek, aktanidák, szerkezeti és könnyű elemek aktiválásának meghatározása és nyilvántartása
- A termikus és rezonancia neutron befogás számítása a rezonancia paraméterek ismeretében, összevetése a kísérleti értékekkel pl. differenciális és integrális hatáskeresztmetszetekkel, hasadási hozamokkal
- Az  $(n_{th}, \gamma)$  értékelése nem rezonancia paramétereken alapul
- Nem mérhető hatáskeresztmetszetek (instabil magok) szükségesek a kiégett fűtőelemek aktivitásának meghatározásához, vagy más pl. asztrofizikai számítások elvégzéséhez
- Mit tehetünk? Modellek paramétereinek szisztematikája?

## Adatforrások:

The screenshot shows the IAEA Nuclear Data Services website. At the top, it says 'International Atomic Energy Agency Nuclear Data Services Provided by the Nuclear Data Section'. There's a search bar and navigation tabs for 'Main', 'All', 'Reaction Data', 'Structure & Decay', 'by Applications', 'Doc & Codes', 'Index', 'Events', 'Links', and 'News'. A 'NEW' section highlights 'Data Explorer - Nuclear Reaction Data Explorer', 'TALYS-2.0 - Nuclear reaction model code and related packages', 'IDB - An International Database of Reference Gamma Spectra', 'Stopping Power - Electronic Stopping Power of Matter for Ions', and 'Web-API for EXFOR/ENDF/IBANDL'. Below this, there are sections for 'Reactor Physics (particle transport, fuel cycle, transmutation, shielding)', 'Atomic and molecular data for fusion research', 'Ion Beam and Thin Layer Activation Analysis', 'Dosimetry reactions', 'Neutron Activation Analysis', 'Nuclear Medicine', 'Activation Related Libraries', and 'Neutron Source Reactions'. A footer contains copyright information (2007-2024) and contact details for the Vienna International Centre.

[EXFOR](#), Holden 1991-1993 (compilation) + RIPL, [k0 neutron activation](#), Atlas of Neutron resonances BNL-325, 2006, 2018, EAF-2010, JUKO Research reports 2000-2017, Sukhoruchkin2009 and 2015, Standard, [EGAF](#), Systematics, ENDF/B, JEF(F), JENDL...

 **Live Chart of Nuclides**  
nuclear structure and decay data ms: \*329\*

## Minden elérhető publikált adat felhasználása

### Példa táblázat:

62 151 0	1.51400E+04	3.00000E+02	Mugh18	Sm151
ripl	1.52000E+04	3.00000E+02	JUKO	
mugh06	1.51700E+04	3.00000E+02	Mugh06	
mugh18	1.51400E+04	3.00000E+02	Mugh18	
sukhoruchkin	1.51700E+04	2.99000E+02	Sukhoruchkin	
exfor	1.20000E+04	0.00000E+00	Melaika_1955_12086003	
exfor	1.51700E+04	3.00000E+02	Mughabghab_2006_V10022001	
exfor	1.50200E+04	5.25000E+02	Marrone_2006_22893007	
cendl3.1	1.51239E+04	CE=	9.98937E-01	
endfb8.0	1.51379E+04	CE=	9.99861E-01	
jeff3.3	1.51294E+04	CE=	9.99300E-01	
jendl4.0	1.51598E+04	CE=	1.00131E+00	
tendl.2019	1.51334E+04	CE=	9.99564E-01	

Library values obtained from point wise files (PREPRO's RECENT module)

62 152 0	2.06000E+02	3.00000E+00	Mugh18	Sm152
ripl	2.06000E+02	1.50000E+01	JUKO	
mugh06	2.06000E+02	6.00000E+00	Mugh06	
mugh18	2.06000E+02	3.00000E+00	Mugh18	
sukhoruchkin	2.06000E+02	6.00000E+00	Sukhoruchkin	
exfor	1.38000E+02	2.76000E+01	Seren_1947_11447096	
exfor	2.00000E+02	6.00000E+00	Pattenden_1958_21325012	
exfor	2.24000E+02	7.00000E+00	Tattersall_1960_20638048	
exfor	2.15000E+02	1.00000E+01	Fehr_1960_12023006	
exfor	2.09000E+02	9.00000E+00	Cabell_1962_20627002	
exfor	2.09100E+02	2.07000E+01	Bernabei_1962_12099002	
exfor	2.06000E+02	6.00000E+00	Mughabghab_2006_V10022041	
exfor	2.04800E+02	6.32832E+00	Karadag_2007_22964002	
exfor	2.38930E+02	1.91100E+01	Nyarko_2010_31698006	
exfor	2.07300E+02	9.40000E+00	Agbemava_2011_31717003	
exfor	2.07000E+02	1.00000E+00	FarinaArbocco_2013_23266134	
exfor	2.12000E+02	8.00000E+00	Nguyen_2017_30843002	
cendl3.1	2.06640E+02	CE=	1.00311E+00	
endfb8.0	2.05946E+02	CE=	9.99738E-01	
jeff3.3	2.05974E+02	CE=	9.99874E-01	
jendl4.0	2.05842E+02	CE=	9.99233E-01	
tendl.2019	2.05971E+02	CE=	9.99859E-01	

## Sorrendben a következő forrásadatok elfogadása

1. Kayzero adatbázis
2. Mughabghab 2018 Atlasz
3. Sukhoruchkin 2015 Atlasz
4. Mughabghab 2006 Atlasz
5. RIPL vagy Kopecky adatbázis
6. EXFOR (a legújabb értékek)

### MACS esetében a sorrend

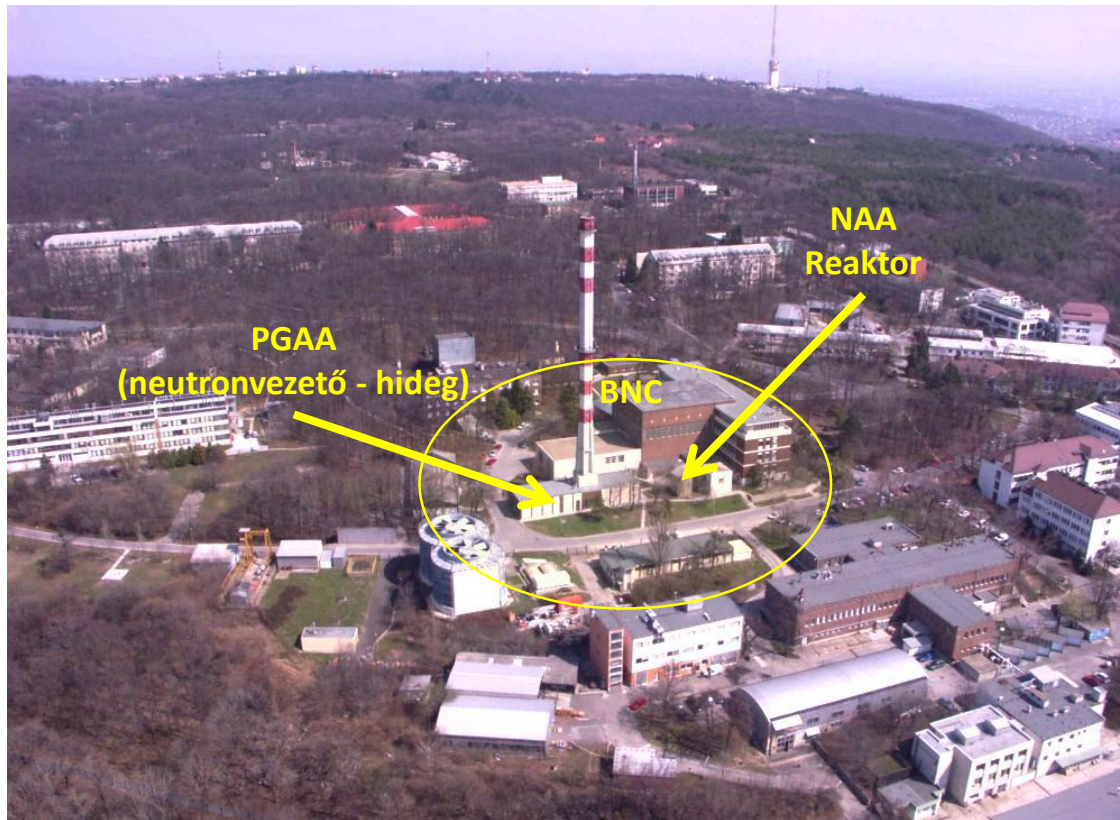
1. Mughabghab 2018 Atlasz
2. Sukhoruchkin 2015 Atlasz
3. KADONIS adatbázis
4. EXFOR (a legújabb értékek)

Módszer. Ha 1 nem léteik, akkor 2, ha ez sem létezik a 3, és így tovább

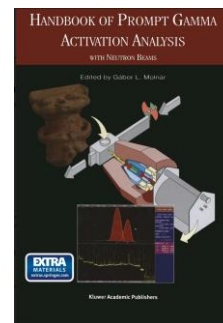
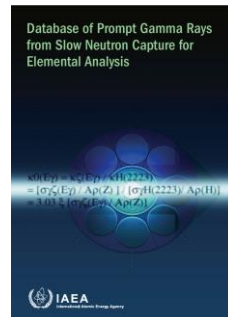
**Szükséges a nemzetközi ajánlás, világos szabályok, nyomon követhetőség és az adatok elérhetősége**

**Komputer formátum, riportok / cikkek**

## Mérőberendezéseink az adatokhoz



PGAA és NAA könyvtár  
(adatbázis) mérése és validálása  
 $\sigma_\gamma$  és  $k_\alpha$  táblázatok valamennyi  
mérhető elemre



## Sorrendben a következő forrásadatok elfogadása

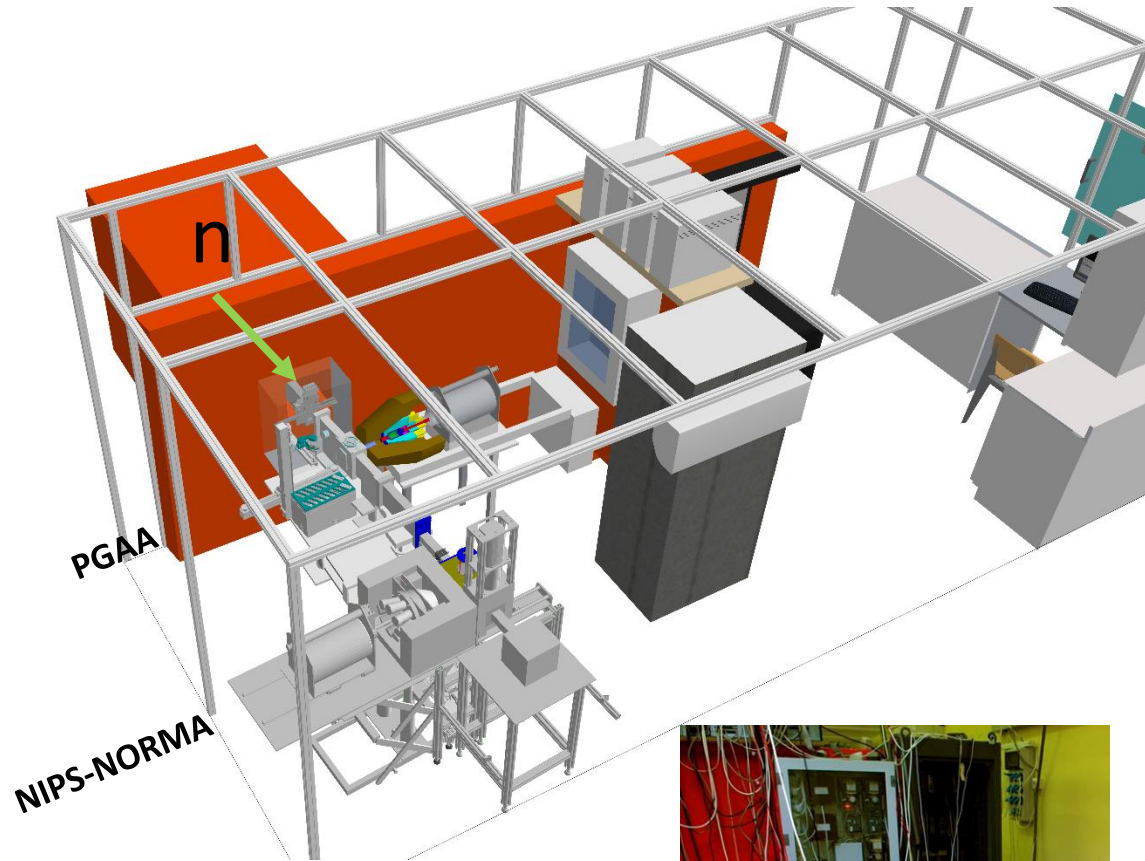
1. Kayzero adatbázis (BNC az egyik fő hozzájáruló)
2. Mughabghab 2018 Atlasz
3. Sukhoruchkin 2015 Atlasz
4. Mughabghab 2006 Atlasz
5. RIPL vagy Kopecky adatbázis
6. EXFOR (a legújabb értékek)

MACS esetében a sorrend

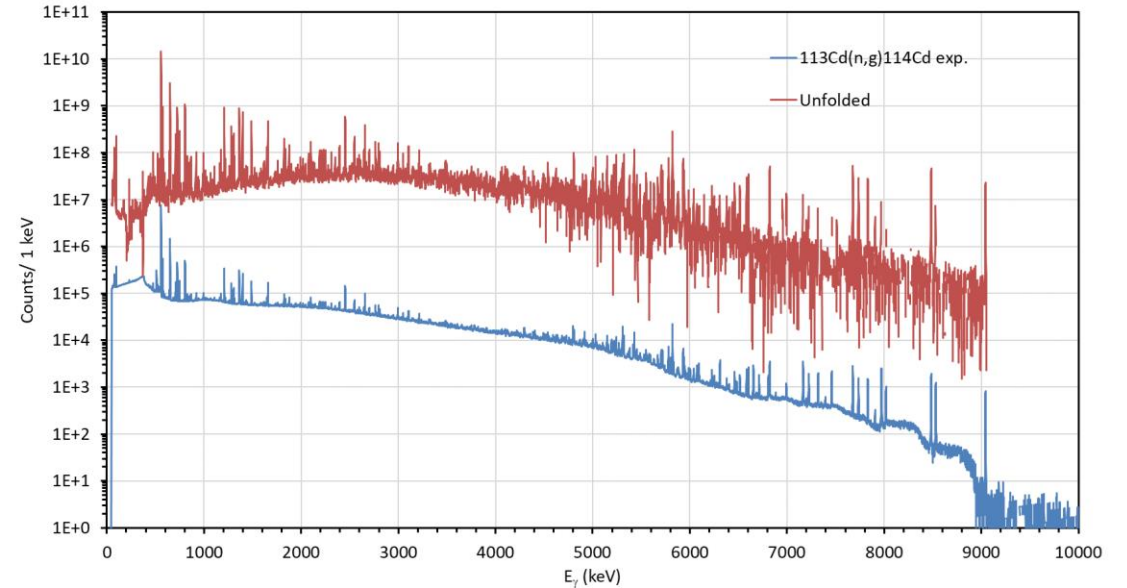
1. Mughabghab 2018 Atlasz
2. Sukhoruchkin 2015 Atlasz
3. KADONIS adatbázis
4. EXFOR (a legújabb értékek)

Módszer. Ha 1 nem léteik, akkor 2, ha ez sem létezik a 3, és így tovább

**Szükséges a nemzetközi ajánlás, világos szabályok,  
nyomon követhetőség és az adatok elérhetősége  
Komputer formátum, riportok / cikkek**



A NIPS-NORMA és a PGAA CAD rajza



A PGAA berendezéssel mért  $^{113}\text{Cd}(n,\gamma)^{114}\text{Cd}$  normál spektrum és a detektor válaszfüggvény és hatásfokkal korrigált spektrum

## NAA



Ortec DSPEC 502



D5



D4



new D5 setup

Egy homogén, vékony mintát (szignifikánsan nem abszorbeáló) homogén neutronnyalábbal besugározva a neutron befogása során keletkező gerjesztett közbenső mag leggyakrabban gamma kaszkád kibocsátásával szabadul meg a gerjesztési energiájától. Merve a  $\gamma$ -k energiáját és intenzitását

$$A_\gamma/t = n \sigma_\gamma \varphi \epsilon$$

információt kapunk a  $\sigma_\gamma$  parciális neutron befogási hatáskeresztmetszetéről.

Ahol a  $\sigma_\gamma = \sigma_0 \theta P_\gamma$

Komparálásnál két izotóp vegyületét vagy homogén keverékét besugározva kiszámolható a egyismert  $\sigma_{\gamma c}$  hatáskeresztmetszetből az ismeretlen  $\sigma_{\gamma x}$  hatáskeresztmetszet

$$\frac{A_{\gamma x}}{A_{\gamma c}} = \frac{n_x \sigma_{\gamma x} \epsilon(E_{\gamma x})}{n_c \sigma_{\gamma c} \epsilon(E_{\gamma c})}; \sigma_{\gamma x} = \sigma_{\gamma c} \frac{A_{\gamma x} n_c \epsilon(E_{\gamma c})}{A_{\gamma c} n_x \epsilon(E_{\gamma x})}$$

A számítás különösen pontos lehet sztöchiometrikus nagytisztaságú vegyületekre, de a bizonytalanság nem lehet kevesebb a hatáskeresztmetszetek hányadosának bizonytalanságánál.

Problémák: inhomogén és/vagy vastag minta, nem 1/v hatáskeresztmetszetű anyagok

A  $k_0$  definíciója:  $k_0 = \frac{\sigma_{\gamma x}/M_x}{\sigma_{\gamma c}/M_c}$ , ami világosan mutatja PGAA és az NAA közötti szoros

összefüggést

- $A_\gamma$  beütésszám
- $t$  mérési idő
- $n$  izotóp darabszám
- $\varphi$  neutron fluxus
- $\epsilon$  detektor hatásfok
- $\sigma_0$  a 2200 m/s hat. ker.
- $\theta$  izotópgyakoriság
- $P_\gamma$  bomlási valószínűség
- $M_x$  x elem atomtömege

Módszer	Egyenlet	Megjegyzés
1	$\sigma_0 = \frac{\sigma_\gamma}{\theta P_\gamma}$	$P_\gamma$ ismernünk kell, például a béta-bomlásból, ha a neutron befogó atommag instabil.
2	$\sigma_0 = \sum_{f=1}^{n-1} \sigma_\gamma c \rightarrow f (1 + \alpha_f + PCC_f)$	A befogási állapotból származó összes elsődleges átmenet összege viszonylag egyszerű bomlási sémájú magokra használható. A módszerekhez ismerni kell a ICC konverziós és a párkonverziós PCC együtthatókat a 2-5 esetekben
3	$\sigma_0 = \sum_{i=2}^n \sigma_\gamma i \rightarrow g.s. (1 + \alpha_i + PCC_i)$	Az összes alapállapotú átmenet összege viszonylag egyszerű sémájú magokra használható.
4	$Q = \min \left( \sum_{\substack{1 \leq f \leq n-1 \\ 1 \leq s \leq n-1}} (T_f - \sigma_0) w_{f,s} (T_s - \sigma_0) \right)$	Jól kiegyensúlyozott és viszonylag egyszerű bomlási séma. Lásd Ref. T és w meghatározásához.
5	$\sigma_0 = \sum_i E_i \sigma_{\gamma i} (1 + \alpha_i + PCC_i) / B_n$	Az energiával súlyozott összeget bármely bonyolult gamma-spektrumú atommagra használhatjuk, $B_n$ a kötési energia.

Belgya, T., Improved accuracy of gamma-ray intensities from basic principles for the calibration reaction  $^{14}\text{N}(n,\gamma)^{15}\text{N}$ . Physical Review C, 74, 024603-1-8(2006)





## Mughabghab értékelése

Izotóp	gyakoriság %	$\sigma_0$ (b)	bizonytalanság
Fe-00		$2.56 \pm 0.03$	1%
Fe-54	5.845	$2.25 \pm 0.18$	8%
Fe-56	91.754	$2.59 \pm 0.14$	5%
Fe-57	2.119	$2.48 \pm 0.3$	12%
Fe-58	0.282	$1.28 \pm 0.05$	4%

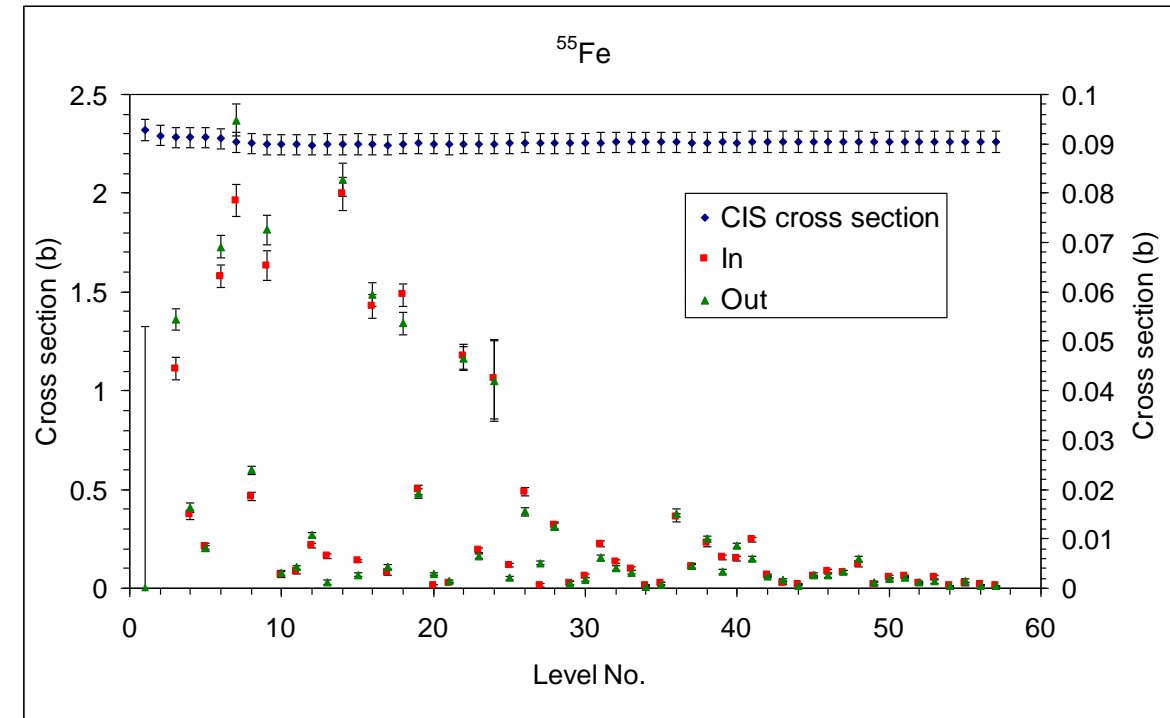
Ennek az alapvető szerkezeti anyagnak az hatáskeresztmetszet bizonytalansága meglepő

Új mérést végeztek erősen dúsított izotópokon ( $^{54,56,57}\text{Fe}$ ) az EFNUTAT projektben (F. Gunsing) Budapesten, a BNC PGAA létesítményében.

A vékony fémmintát a CERN-től kaptuk a tisztaság ellenőrzésére

Azonban ezekből a kísérletekből a  $\sigma_0$  neutron hatáskeresztmetszete is meghatározható

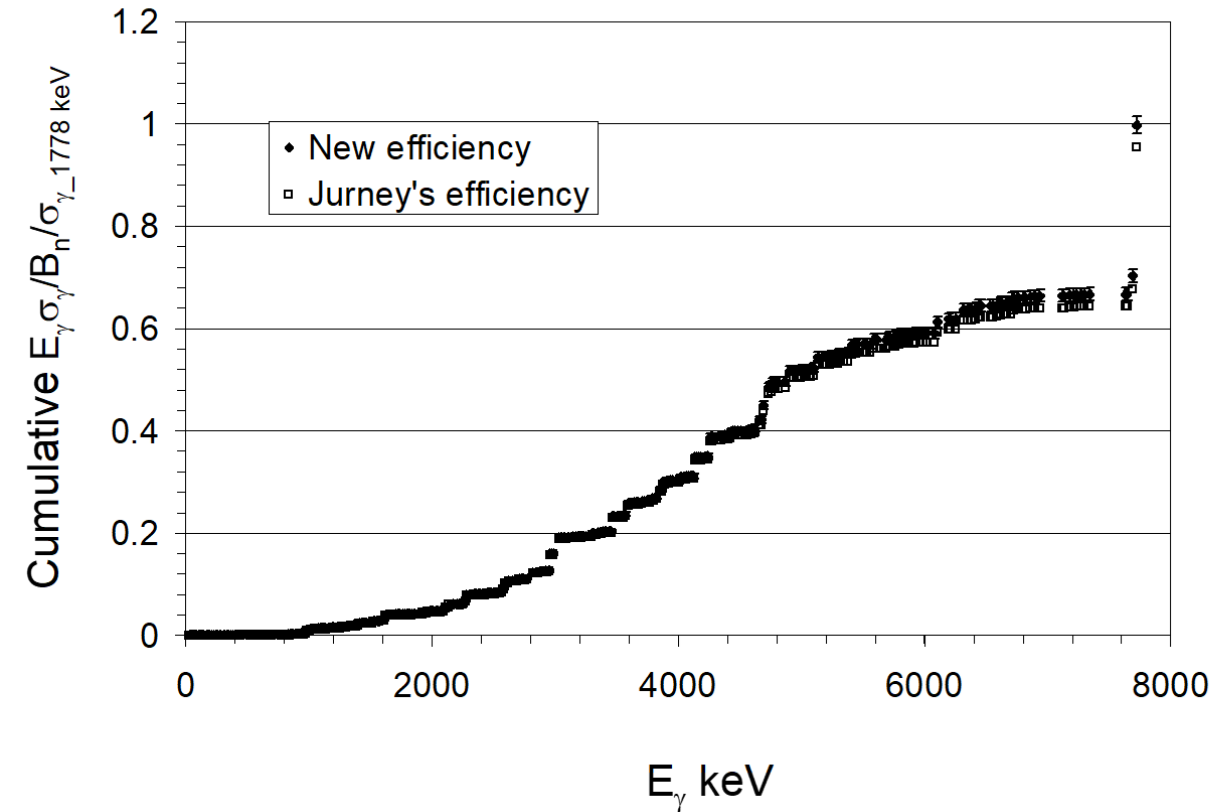
Az adatok kiértékelése Richard B, Firestone (LBNL) közreműködésével történt.



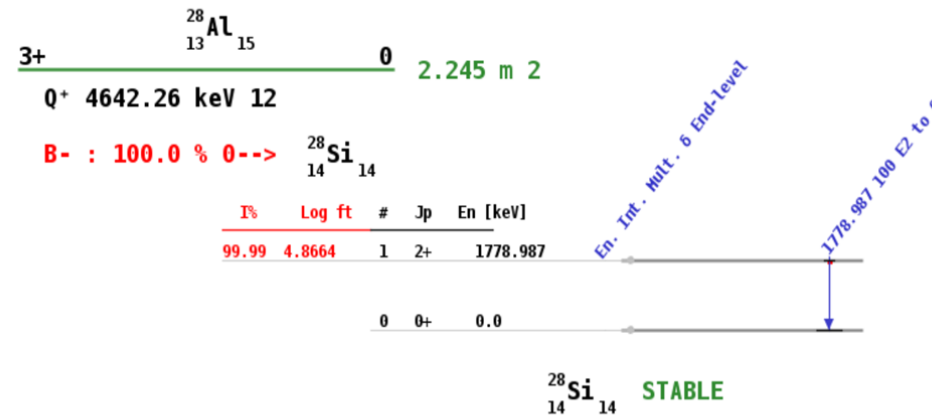
**Elsődlegések összege** 2.26(5) b  
**Alapállapotra menők összege** 2.32(5) b  
**Energiával súlyozott összeg** 2.26(4) b  
**Mughabghab** 2.25(18) b

-Az új értékek egyeznek Mughabghab értékével.  
 - A bizonytalanság 2%-ra csökkent

Kumulatív energia súlyozott összeg alkalmazása a  $^{27}\text{Al}(n,\gamma)$  illetett csúcsaira különböző Nitrogén hatásfokokkal



A 100%-os bétabomlási 1778 keV csúcs hatáskeresztmetszetét komparátor mérésből kaptam. Ez igazolja a nitrogén mérésünk helyességét

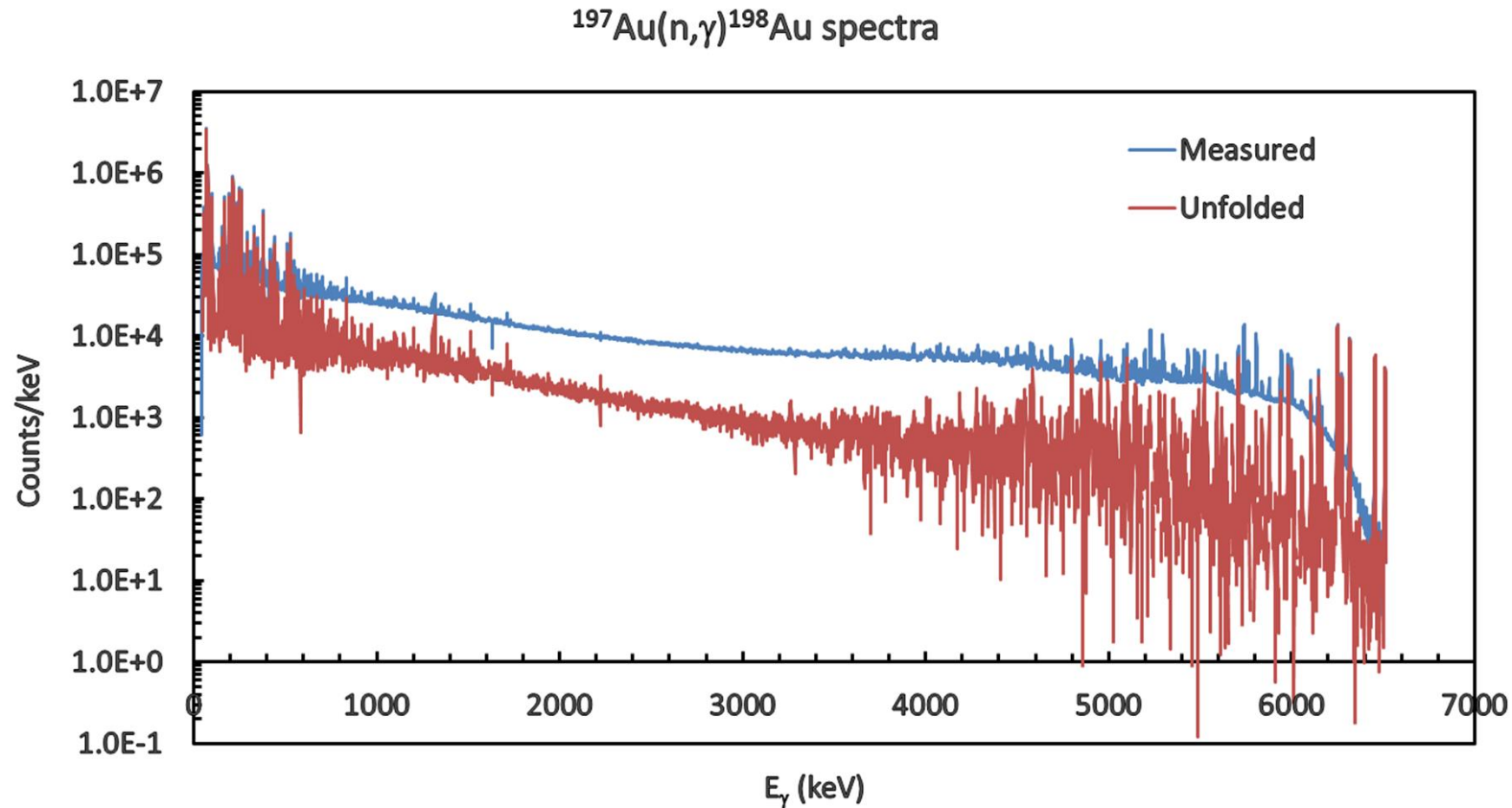


A LiveChart of nuclei adatbázisból

<https://www.iaea.org/resources/databases/livechart-of-nuclides-advanced-version>

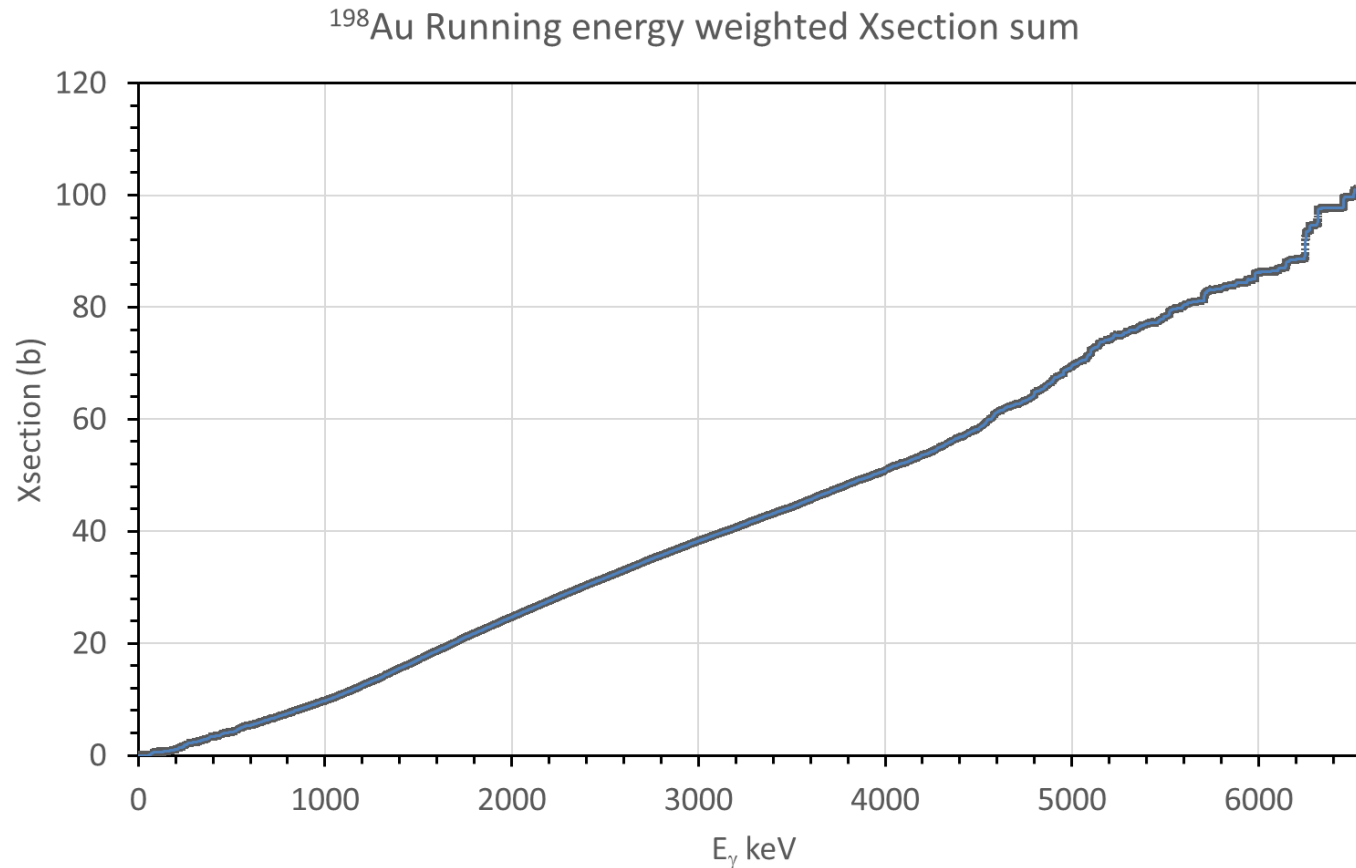
Belgya, T. (2008). New gamma-ray intensities for the  $^{14}\text{N}(n,\gamma)^{15}\text{N}$  high energy standard and its influence on PGAA and on nuclear quantities. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 276(3). <https://doi.org/10.1007/s10967-008-0607-9>

A Kumulatív energia súlyozott összeg alkalmazása a  $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$  detektor átviteli függvénnyel korrigált (unfolded) spektrumra



Belgya, T., & Szentmiklósi, L. (2021). Monte-Carlo calculated detector response functions to unfold radiative neutron capture spectra. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 991(December 2020), 165018. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.165018>

A Kumulatív energia súlyozott összeg alkalmazása a  $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$  detektor átviteli függvénnel korrigált (unfolded) spektrumra



$$\sigma_{\gamma,tot} = 101.05 (37) \text{ b}$$

A kis energiájú átmentekre az elektron konverzió figyelembe vételével:

$$\sigma_{tot} = 101.55 (50) \text{ b}$$

$$\sigma_{lit} = 98.65 (9) \text{ b}$$

5. Módszer  $\sigma_{\gamma,i} = \sum_{m=1}^i \frac{E_m \sigma_{\gamma,m}}{B_n}$ ;  $B_n$  a neutron kötési energiája

## Összefoglalás:

A BNC mérései jelentősen hozzájárultak a meglévő termikus neutron befogási hatáskeresztmetszet adatbázishoz

Szükség van az meglévő adatok újbóli áttekintésére és annak meghatározására, hogy hol van szükség további mérésekre, illetve az adatok validálására

Sikeres részvétel az IAEA NAA roundrobin mérésekben, igazolja a k0 módszer helyességét

## Tervek:

- További  $(n, \gamma)$  spektrumok visszabontásával teljes befogási hatáskeresztmetszetek kiszámítása
  - $^{73,74}\text{Ge}$ ,  $^{233}\text{Th}$ ,  $^{243}\text{Pu}$ ...
- $^{14}\text{N}(n, \gamma)^{15}\text{N}$  parciális hatáskeresztmetszeteinek tesztelése a nagy energiás hatások meghatározásához
- $(n, \gamma)$  spektrumok szimulációja extrém statisztikus modellel
- Parciális hatáskeresztmetszet adatbázis felújítása PGAA analízishez Révay Zsolt és Maróti Boglárka méréseivel és értékelésével

**Köszönöm a figyelmet!**