

同质异能靶核的中子核反应计算

安海霞 蔡崇海¹⁾

(南开大学物理科学学院 天津 300071)

摘要 基于光学模型和带宽度涨落修正的Hauser-Feshbach理论编写了程序OMHFISO, 该程序适用于计算靶核处于同质异能态并且入射粒子能量小于5MeV的核反应, 入射粒子和出射粒子均可以是n, p, d, t, ³He和⁴He 6种. 迄今还很少有人计算过同质异能靶核的全套核数据. 利用程序UNF, OMHFISO以及DWUCK4计算了不稳定同位素⁹⁰Rb和^{91,93,96,97,98}Y的同质异能靶核在入射粒子能量低于20.0MeV的全套中子反应数据, 并且得到了合理的结果.

关键词 同质异能靶核 非弹性散射 分立能级 截面

1 引言

程序UNF^[1]原来是设计成可以计算靶核处于基态或者同质异能态的中子反应数据的, 但是当用它来计算处在同质异能态的靶核时发现: 如果入射中子能量比较低, 得到的分立能级的弹性和非弹性散射的截面在物理上是不合理的. 我们猜想UNF程序中可能还存在一些问题. 所以基于光学模型和带宽度涨落修正的Hauser-Feshbach理论(WHF)^[2]编写了一个程序OMHFISO^[3], 它适合于计算靶核处于同质异能态(基态也可以)并且入射粒子能量小于5MeV(这时可以忽略予平衡发射)的核反应数据. 基于扭曲波玻恩近似的程序DWUCK4^[4]原本是用来计算靶核处于基态的直接非弹性散射截面以及它们的角分布勒让德展开系数的, 做了一些考虑与变换, 也用DWUCK4来计算靶核处于同质异能态的直接非弹性散射贡献.

由于球形光学模型不考虑靶核的内部状态(它的

角动量、宇称、形状, 处在基态或者同质异能态), 总是把入射粒子看成是在靶核提供的一个球对称复数势场中运动. 所以本工作中所用的光学势参数与以上同位素处于基态时的值^[5, 6]相同. 同质异能态的各个反应道的能级密度和对能修正均与基态时的参数^[7-9]相同. 表1给出⁹⁰Rb和^{91,93,96,97,98}Y的基态和同质异能态的性质, 其中Level No.代表同质异能态的能级编号, 基态的能级编号为1.

2 理论模型和计算公式

对于复合核形成之前的光学模型计算, 无论靶核处在基态或处在某个同质异能态都没有什么区别, 都是求解入射中子在靶核提供的球对称复数势场中运动的问题, 这种问题已有标准的数值求解方法^[10]. 再考虑核内波函数与核外库伦波函数的衔接条件即可得到S矩阵元, 然后用S矩阵元就能算出中子全截面、吸收

表1 ⁹⁰Rb和^{91,93,96,97,98}Y的基态和同质异能态的性质

同位素	基态			同质异能态				
	自旋	宇称	半衰期	level No.	激发能	自旋	宇称	半衰期
⁹⁰ Rb	0.0	-1	158s	2	0.1069MeV	3.0	-1	258s
⁹¹ Y	0.5	-1	58.5d	2	0.5556MeV	4.5	1	49.7min
⁹³ Y	0.5	-1	10.18h	3	0.7587MeV	3.5	1	0.82s
⁹⁶ Y	0.0	-1	5.34s	2	0.0000*MeV	8.0	1	9.6s
⁹⁷ Y	0.5	-1	3.75s	2	0.6675MeV	4.5	1	1.17s
⁹⁸ Y	0.0	-1	0.548s	6	0.4100MeV	4.0	1	2.0s

注: 具体计算中取为0.00001MeV.

2005 - 07 - 11 收稿

1) E-mail: haicai@nankai.edu.cn

截面、形状弹性散射截面及其角分布来. 它们的计算公式是众所周知的, 不用在此给出.

对于复合核的衰变, 在5MeV以下, 用WHF理论进行计算. 这时靶核处在某个同质异能态与处在基态的主要差别是同质异能态具有一定的激发能 $E_{\text{iso}}^{\text{ex}}$, 而基态的 $E_{\text{iso}}^{\text{ex}} = 0$. 所以, 与原来对基态给出的公式相比较, 会有以下变化:

复合核的激发能为 $E = E_0 + B_i + E_{\text{iso}}^{\text{ex}}$, 这里 E_0 为质心系中入射粒子相对于靶核运动的动能, B_i 为入射粒子与靶核的结合能.

复合核发射 ν 粒子的反应 Q 值为 $Q_\nu = B_i + E_{\text{iso}}^{\text{ex}} - B_\nu$, 这里 B_ν 为出射粒子与剩余核的结合能(ν 可以是n, p, d, t, ^3He 或 ^4He).

复合核发射粒子 ν 后, 剩余核处于第 k_ν 条分立能级的反应截面为

$$\sigma_\nu(U_{k_\nu}, E_0) = C_1 \sum_{J,\pi} \frac{2J+1}{T^{J\pi}(E_0)} \sum_{j_i, l_i} \delta_{\pi, (-1)^{l_i} \pi_i} T_{l_i j_i}(E_0) \times \sum_{j_\nu, l_\nu} \delta_{\pi, (-1)^{l_\nu} \pi_{k_\nu}} T_{l_\nu j_\nu}(E_0 + Q_\nu - U_{k_\nu}) F_{\text{iso} l_i j_i, k_\nu l_\nu j_\nu}^{J\pi}(E_0), \quad (1)$$

复合核发射粒子 ν 后, 剩余核处于连续能级的反应截面为

$$\sigma_{\text{p}\nu}(E_0) = C_1 \sum_{J,\pi} \frac{2J+1}{T^{J\pi}(E_0)} \times \sum_{j_i, l_i} \delta_{\pi, (-1)^{l_i} \pi_i} T_{l_i j_i}(E_0) T_{\text{p}\nu}^{J\pi}(E_0) F_{\text{iso} l_i j_i, \text{p}}^{J\pi}(E_0), \quad (2)$$

俘获反应截面为

$$\sigma_{\text{n}\gamma}(E_0) = C_1 \sum_{J,\pi} \frac{2J+1}{T^{J\pi}(E_0)} \times \sum_{j_i, l_i} \delta_{\pi, (-1)^{l_i} \pi_i} T_{l_i j_i}(E_0) T_{\gamma 1}^{J\pi}(E_0) F_{\text{iso} l_i j_i, \text{p}}^{J\pi}(E_0), \quad (3)$$

上面3个截面公式中 $F_{\text{iso} l_i j_i, k_\nu l_\nu j_\nu}^{J\pi}(E_0)$ 和 $F_{\text{iso} l_i j_i, \text{p}}^{J\pi}(E_0)$ 分别是余核处在分立能级和连续能级的宽度涨落修正因子, 此处不再给出它们的计算公式.

$C_1 = \pi/(k_i^2(2s_i + 1)(2I_i + 1))$, 其中 k_i 是入射粒子的波数; J 和 π 分别是复合核的总角动量和宇称.

$T_{l_i j_i}(E_0) = 1 - |S_{l_i j_i}(E_0)|^2$ 是入射道(质心系相对运动动能 E_0)的穿透因子, $T_{l_\nu j_\nu}(E_0 + Q_\nu - U_{k_\nu})$ 是出射 ν 道(质心系相对运动动能 $E_0 + Q_\nu - U_{k_\nu}$)的穿透因子, 它们都由光学模型计算得到; U_{k_ν} 为余核 k_ν 能级的激发能.

$$J_{\text{max}} = l_{i \text{max}} + s_i + I_i,$$

$$J_{\text{min}} = \max(I_i - l_{i \text{max}} - s_i, J_{\text{min}1}),$$

这里 $J_{\text{min}1} = 0$ 当 $s_i + I_i$ 为偶数, 或 $J_{\text{min}1} = 0.5$ 当 $s_i + I_i$

为奇数, s_i , l_i 和 j_i 分别是入射粒子的自旋、轨道角动量和总角动量, I_i 和 π_i 分别是靶核iso能级的自旋和宇称.

$$j_{\nu \text{max}} = J + I_{k_\nu}, \quad j_{\nu \text{min}} = |J - I_{k_\nu}|,$$

$$l_{\nu \text{max}} = j_\nu + s_\nu, \quad l_{\nu \text{min}} = |j_\nu - s_\nu|.$$

s_ν , l_ν 和 j_ν 分别是出射 ν 粒子的自旋、轨道角动量和总角动量, I_{k_ν} 和 π_{k_ν} 分别是余核 k_ν 能级的自旋和宇称.

复合核相应总角动量 J 和宇称 π 的总穿透系数为

$$T^{J\pi}(E_0) = \sum_{\nu} \sum_{k_\nu} \sum_{j_\nu = |J - I_{k_\nu}|}^{J + I_{k_\nu}} \sum_{l_\nu = |j_\nu - s_\nu|}^{j_\nu + s_\nu} \times \delta_{\pi, (-1)^{l_\nu} \pi_{k_\nu}} T_{l_\nu j_\nu}(E_0 + Q_\nu - U_{k_\nu}) + \sum_{\nu} T_{\text{p}\nu}^{J\pi}(E_0) + T_{\gamma}^{J\pi}(E_0), \quad (4)$$

(3), (4)两式中的 $T_{\gamma 1}^{J\pi}(E_0)$ 和 $T_{\gamma}^{J\pi}(E_0)$ 分别为发射 γ 光子的部分和总穿透系数, 这里不给出它们的计算公式, 计算它们用到的巨偶极共振等参数取自中国核数据中心(CNDC)参数库.

$T_{\text{p}\nu}^{J\pi}(E_0)$ 是出射 ν 道处在连续能级的穿透系数

$$T_{\text{p}\nu}^{J\pi}(E_0) = \int_{U_{k_\nu \text{max}}}^{E_0 + Q_\nu} \sum_{l_\nu = 0}^{l_{\nu \text{max}}} \sum_{j_\nu = |l_\nu - s_\nu|}^{l_\nu + s_\nu} \sum_{I_\nu = |J - j_\nu|}^{J + j_\nu} \times \frac{1}{2} R(Z_\nu, A_\nu, I_\nu, U_\nu) \rho(Z_\nu, A_\nu, U_\nu) \times T_{l_\nu j_\nu}(E_0 + Q_\nu - U_\nu) dU_\nu, \quad (5)$$

这里核自旋统计分布函数

$$R(Z, A, I, U) = \frac{2I + 1}{2\sigma^2(Z, A, U)} \exp \left[-\frac{(I + 1/2)^2}{2\sigma^2(Z, A, U)} \right], \quad (6)$$

能级密度

$$\rho(Z, A, U) = \frac{1}{T} \exp \left(\frac{U - U_0}{T} \right) \quad \text{if } U \leq U_x + \Delta, \\ \rho(Z, A, U) = \frac{\exp(2\sqrt{aU_e})}{12\sqrt{2}\sigma U_e (aU_e)^{1/4}} \quad \text{if } U > U_x + \Delta, \quad (7)$$

如果 $U < 0$, 则 $\rho(Z, A, U) = 0$; 其中 $U_e = U - \Delta$, 能级密度及其参数 a , Δ , σ , U_x , U_0 和核温度 T 是利用Gilbert-Cameron公式^[11]和Cook^[12]或苏宗涤^[13]的参数计算得到的.

3 计算及处理方法

3.1 直接非弹性散射的贡献

目前一般用DWUCK4程序来计算靶核处于基态

时的直接非弹性散射贡献. 本工作中靶核处于同质异能态, 通过一定变换也可以用DWUCK4来计算直接非弹性散射的贡献. 只对那些能量高于同质异能态激发能并且和同质异能态有相同宇称和不同角动量的能级计算直接非弹性散射. 把同质异能态看作基态, 此时对直接非弹性散射有贡献能级的激发能应该是相对于同质异能态的, 即原有激发能减去同质异能态激发能之差; 同时, 作为UNF的直接非弹输入数据, 要在入射中子的能量中加上同质异能态的激发能. DWUCK4与UNF, OMHFISO 3个程序计算中所用的光参是一致的. 对直接非弹有贡献的能级的激发能、自旋、宇称和形变参数 β_2 见表2.

表2 直接非弹性散射中使用的能级及形变参数 β_2

⁹⁰ Rb				⁹¹ Y			
能级/MeV	自旋	宇称	β_2	能级/MeV	自旋	宇称	β_2
0.1218	1.0	-1	0.03	1.30539	2.5	1	0.03
0.2278	1.0	-1	0.03				
⁹³ Y				⁹⁶ Y			
能级/MeV	自旋	宇称	β_2	能级/MeV	自旋	宇称	β_2
1.1360	1.5	1	0.04	0.71870	1.0	1	0.085
				0.93170	1.0	1	0.085
⁹⁷ Y				⁹⁸ Y			
能级/MeV	自旋	宇称	β_2	能级/MeV	自旋	宇称	β_2
0.6973	1.5	1	0.085	0.4460	1.0	1	0.027
1.3195	2.5	1	0.02	0.5477	1.0	1	0.027
1.3366	5.5	1	0.017				
1.4281	2.5	1	0.02				

3.2 非弹性散射和复合核弹性散射

不同于靶核处于基态的情况, 当靶核处于同质异能态时, 复合核弹性散射是同质异能态的贡献, 同时非弹性散射是各分立能级(同质异能态除外)和连续能级的贡献之和. 因为复合核退激到同质异能态以下的能级也属于非弹性散射, 所以同质异能态靶核的非弹性散射是无阈的, 这与靶核处于基态的情况不同(其非弹是有阈的). 俘获截面、复合核弹性散射、全部分立能级以及连续能级的非弹性散射以及各分立能级角分布的勒让德展开系数在5.0MeV以下都是用程序OMHFISO计算的; 在3.0—20.0MeV是由程序UNF计算的, 并且在3.0MeV处, 将由UNF计算的截面值归一到由OMHFISO计算的截面值; 然后让截面从3.0MeV的OMHFISO计算值光滑过渡到5.0MeV的UNF计算值. 对于⁹⁰Rb和^{91,93,96,97,98}Y的分立能级的非弹性散射, 当分立能级的激发能低于相应核的同质异能态的激发能时, 用入射能量为同质异能态激发能的5%或10%处的截面值代替了该能点以下的所有截面值. 因为这些能级对非弹性散射是无阈的, 所以

我们认为入射能量为同质异能态激发能的5%或10%与零能量入射对非弹性散射的贡献是基本相同的(由于能量分辨率的关系, 截面是入射能量的缓慢变化函数).

3.3 弹性散射

由于光学模型不适用于入射能量很低的情况, 对于同质异能态, 这里又无任何实验数据可参考, 所以假定在 1.0^{-11} —0.0002MeV能量范围内, 弹性散射截面取 $4\pi R^2$, 该常数 $4\pi R^2$ 与靶核处于基态时的值是一致的; 利用log-log插值计算在0.0002—0.002MeV能量范围内的截面值; 在5%或10%的同质异能态激发能至5.0MeV范围内, 弹性散射截面是复合核弹性散射截面(由OMHFISO计算)与形状弹性散射截面(由光学模型计算)之和; 在3.0—20.0MeV能区是由程序UNF计算得到的, 在3.0MeV处, 将由UNF计算的截面值归一到由OMHFISO计算的截面值; 然后截面从3.0MeV的OMHFISO计算值光滑过渡到5.0MeV的UNF计算值. 对于⁹⁰Rb和^{91,93,97,98}Y, 在0.002MeV到5%或10%的同质异能态激发能的范围内取为常数, 该常数是入射能量为同质异能态激发能的5%或10%处的截面值. 对于⁹⁶Y, 由于同质异能态的激发能近似为0, 所以就没有0.002MeV到5%或10%的同质异能态激发能的区间存在.

3.4 俘获截面

对于⁹⁶Y, 由于其同质异能态激发能与基态近似相同(取0值), 所以在 1.0^{-11} —0.0002MeV能量范围内使用了 $1/v$ 率, 并在热点处归一到与靶核处于基态时俘获截面在热点处的值. 在0.0002—0.002MeV能量范围内使用了log-log插值; 利用程序OMHFISO计算了在0.002—5.0能量范围内的俘获截面; 3.0—20.0MeV区间是由程序UNF计算得到的, 在3.0MeV处, 将由UNF计算的截面值归一到由OMHFISO计算的截面值, 然后截面从3.0MeV的OMHFISO计算值光滑过渡到5.0MeV的UNF计算值.

对于⁹⁰Rb和^{91,93,97,98}Y, 在 1.0^{-11} MeV到5%或10%的同质异能态激发能的范围内使用了常数, 该常数等于利用程序UNF计算的靶核处于基态且入射粒子能量为同质异能态激发能的俘获截面值; 利用程序OMHFISO计算在5%或10%的同质异能态激发能到5.0MeV能区的俘获截面, 调参数CE1使得在5%或10%的同质异能态激发能处的值与前述该点的俘获截面一致; 用UNF计算在3.0—20MeV能区的俘获截面, 调参数CE1使得在3.0MeV处与OMHFISO计

算值一致, 然后截面从 3.0MeV 的 OMHFISO 计算值光滑过渡到 5.0MeV 的 UNF 计算值.

4 部分计算结果及讨论

基于以上提到的程序及计算方法计算了同质异能靶核 ^{90}Rb 和 $^{91,93,96,97,98}\text{Y}$ 的入射能量低于 20.0MeV 的全套中子数据. 全截面和弹性散射截面分别见图 1 和图 2. 全截面是各分截面的贡献之和. 在 3.0—20.0MeV 能量范围内, $^{91,93,96,97,98}\text{Y}$ 的全截面和弹性散射截面在不同核之间相差很少, 这是因为它们的光参相同, 并且在该能量范围内二者基本上仅由光学模型决定.

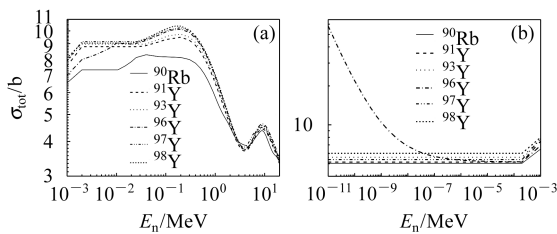


图 1 (a) 0.001—20MeV 能区的全截面;
(b) 10^{-11} —0.001MeV 能区的全截面

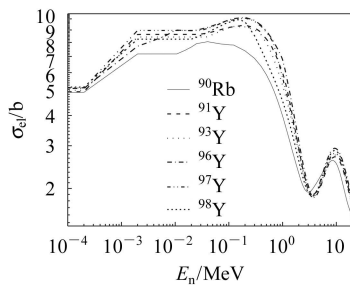


图 2 弹性散射截面

非弹性散射截面见图 3. 从图中可以看到 ^{96}Y 的曲线形状完全不同于其他核的形状. 参见表 2 得知 ^{96}Y 的同质异能态的能级次序是 2 且激发能与基态相同 (近似为 0), 所以在入射粒子能量低于第三条能级的激发能 (0.1229MeV) 时仅弹性散射和俘获反应开放, 只有入射粒子能量高于 0.1229MeV 时非弹性散射道才开放, 这与图中 ^{96}Y 的曲线走向是一致的. 对于 ^{90}Rb 和 $^{91,93,97,98}\text{Y}$, 由于靶核处于同质异能态且激发能大于 0MeV, 所以这 5 个核的非弹性散射均是无阈能的, 这也是与靶核处于基态时的显著不同之处. 图 4 给出了俘获截面, 对于 ^{90}Rb 和 $^{91,93,97,98}\text{Y}$, 在 0.01MeV 以下, 靶核处于同质异能态的俘获截面与基态的值 (参见文献 [7—9]) 相差很大. ^{90}Rb 和 $^{93,96}\text{Y}$ 各分立能级和连续能级的分非弹性散射截面分别见图 5 和图 6, 7.

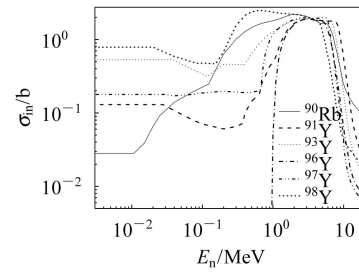


图 3 非弹性散射截面

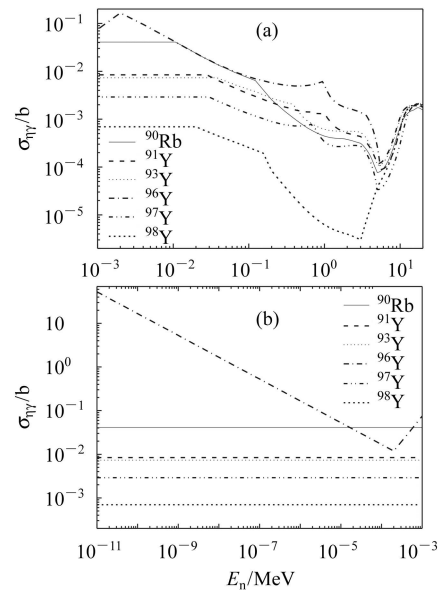


图 4 (a) 0.001—20MeV 能区的俘获截面; (b) 10^{-11} —0.001MeV 能区的俘获截面

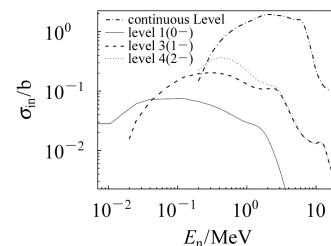


图 5 ^{90}Rb 各分立能级和连续能级的非弹截面

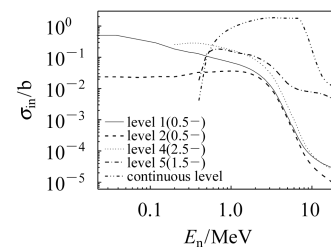


图 6 ^{93}Y 各分立能级和连续能级的非弹截面

从图中可以看到, 分立能级的角动量与同质异能态的角动量的差值越大, 该分立能级的贡献就越小. 由于

其他核的分非弹性散射截面与这3个核相类似, 此处不再绘出其图形。

(n, p), (n, α), (n, d), (n, t), (n, 2n), (n, 3n), (n, np) 和 (n, n α) 等反应截面是由程序 UNF 计算得到的, 由于它们的曲线趋势与靶核处于基态时的曲线(参见文献[7—9])趋势非常相似, 本文不再给出它们的图形。

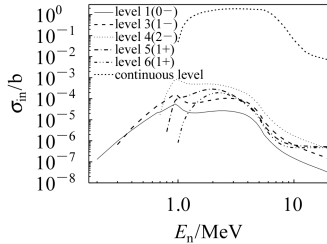


图7 ^{96}Y 各分立能级和连续能级的非弹截面

5 小结

为了在能区 1.0^{-11} — 5.0MeV 得到物理上合理的核数据, 基于光学模型和 WHF 统计理论, 编写了程序 MHFISO, 该程序用于计算弹性散射截面、分立能级和连续能级的非弹性散射截面以及俘获截面。对于不同的反应道, 计算结果在总的趋势上是符合物理概念的。使用 UNF, OMHFISO, DWUCK4 等程序, 计算了不稳定同位素 ^{90}Rb 和 $^{91,93,96,97,98}\text{Y}$ 的同质异能靶核在入射中子能量低于 20.0MeV 的全套中子反应数据, 并且生成了 B6 格式的库文件。库文件中的 (n, p), (n, α), (n, d), (n, t), (n, 2n), (n, 3n), (n, np) 和 (n, n α) 等反应截面以及次级中子的角分布及能谱均由程序 UNF 计算得到。

参考文献(References)

- 1 ZHANG Jing-Shang. User Manual of UNF Code: CNDC-0032, CNIC-01616; Commu. Nucl. Data Progress (INDC(CRP)-053/L), 2001, **25**: 22
- 2 Hauser W, Feshbach H. Phys. Rev., 1952, **87**: 366
- 3 CAI Chong-Hai. A Code OMHFISO for Calculating the Nuclear Data of Isomeric State below 5.0MeV . Nankai University, Tianjin, China, 2005(unpublished)
- 4 Kunz P D. A DWBA Code DWUCK4. University of Colorado, USA (unpublished)
- 5 CAI Chong-Hai. Nucl. Sci. Eng., 2003, **143**(3): 301
- 6 CAI Chong-Hai. Commu. Nucl. Data Progress (INDC(CRP)-059/L), 2002, **28**: 46
- 7 AN Hai-Xia, CAI Chong-Hai. Calculation and Evaluation of Nuclear Data for $n+^{84,86,88,90,92,94,96}\text{Rb}$ below 20MeV . Commu. Nucl. Data Progress, to be published
- 8 LIANG Chun-Tian, CAI Chong-Hai. Calculations of Nuclear Data for $n+^{87,91,93,95,97,99,101}\text{Y}$ below 20MeV . Commu. Nucl. Data Progress, to be published
- 9 FENG Zhong-Su, CAI Chong-Hai. Neutron Nuclear Data Calculations of $^{88,90,92,94,96,98,100}\text{Y}$ in $E_n \leq 20\text{MeV}$ Energy Region. Commu. Nucl. Data Progress, to be published
- 10 CAI Chong-Hai, LI Lei. HEP & NP, 2003, **27**(11): 1005—1008 (in Chinese)
(蔡崇海, 李磊. 高能物理与核物理, 2003, **27**(11): 1005—1008)
- 11 Gilbert A, Cameron A G W. Can. J. Phys., 1965, **43**: 1446
- 12 Cook J L. Aust. J. Phys., 1967, **20**: 477
- 13 SU Zong-Di et al. A New Set of Level Density Parameters for Fermi Gas Model. CNDC Parameters Library, 1983

Calculation of Neutron Reactions of Isomer Target

AN Hai-Xia CAI Chong-Hai¹⁾

(Institute of Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China)

Abstract A computer code OMHFISO, based on optical model and Hauser-Feshbach theory with width fluctuation correction (WHF), is made for calculating neutron reactions of isomer target below 5MeV , in which both the incoming and outgoing particles can be n, p, d, t, ^3He and ^4He . Up to now, there are only few people to calculate the complete set of neutron nuclear data of isomer target. In this work, neutron nuclear data of six isomer targets of unstable isotopes ^{90}Rb and $^{91,93,96,97,98}\text{Y}$ are calculated, and reasonable results in physics are obtained.

Key words isomer target, inelastic scattering, discrete level, cross section

Received 11 July 2005

1) E-mail: haicai@nankai.edu.cn