

用球形核光学模型和变形核的 耦合道理论计算铀-235、铀-238 和钚-239 的快中子数据

申庆彪 赵小麟 顾英圻 卞晓云

本文以球形核光学模型采用计算机自动调节势参数的方法对铀、钚同位素在入射中子能量从 1 keV 到 20 MeV 的情况下进行了计算, 对 ^{235}U 、 ^{238}U 和 ^{239}Pu 三个元素分别得到一套能较好地符合实验数据的光学模型势参数。同时用耦合道理论计算了直接非弹性散射的贡献, 并分析了耦合道理论对光学模型的改进。

一、引言

^{235}U 、 ^{238}U 和 ^{239}Pu 的截面数据虽然已经得到较充分的测量, 但是某些反应道在某些能区的实验数据仍然很少, 甚至根本没有。因而通过理论计算来完善、补充和评价实验数据是很需要的。

光学模型^[1]和在它的基础上发展起来的变形核的耦合道理论^[2]是计算原子核反应数据最基本的理论方法之一。在光学模型中假设原子核是球形的, 光学模型势 V 与方位角 θ , φ 无关, 而且还假设靶核角动量等于零。在耦合道理论中研究变形核, 认为光学模型势 V 与方位角 θ , φ 有关, 可以计算低集体激发态的直接非弹性散射的贡献。

我们用光学模型对铀、钚同位素在入射中子能量 $E=1\text{ keV}-20\text{ MeV}$ 的情况下进行了计算, 并采用了用计算机自动调节光学模型参数方法来符合实验数据。对 ^{235}U 、 ^{238}U 和 ^{239}Pu 三个元素我们分别得到一套能较好地符合实验数据的光学模型势参数。

实际上, 铀和钚属于变形核, 它们的低激发态一般是集体转动态, 为此我们用耦合道理论计算了直接非弹性散射的贡献, 并分析了耦合道理论对光学模型的改进。

二、光学模型势参数的调节

在光学模型计算中, 我们采用如下 Woods-Saxon 型的光学模型势:

$$V = U(r) + iW_s(r) + iW_v(r) + U_{so}(r)(\vec{\sigma} \cdot \vec{l}). \quad (2.1)$$

$\vec{\sigma}$ 和 \vec{l} 分别代表入射粒子自旋的 2 倍和轨道角动量。 $U(r)$ 为中心实部势, 其形式为:

$$U(r) = -\frac{U}{1 + \exp[(r - R_1)/a_1]}. \quad (2.2)$$

其中,

$$R_1 = r_1 A^{1/3}. \quad (2.3)$$

A 为靶核的质量数。 $W_s(r)$ 为面吸收势,其形式为:

$$W_s(r) = -4W_s \frac{\exp[(r-R_2)/a_2]}{\{1 + \exp[(r-R_2)/a_2]\}^2} \quad (2.4)$$

其中,

$$R_2 = r_2 A^{1/3} \quad (2.5)$$

$W_v(r)$ 为体吸收势,其形式为:

$$W_v(r) = -\frac{W_v}{1 + \exp[(r-R_2)/a_2]} \quad (2.6)$$

$U_{so}(r)$ 为自旋-轨道耦合势,其形式为:

$$U_{so}(r) = -U_{so} \frac{\lambda_\pi^2}{a_1 r} \frac{\exp[(r-R_1)/a_1]}{\{1 + \exp[(r-R_1)/a_1]\}^2} \quad (2.7)$$

λ_π 为 π 介子康普顿波长,并且有 $\lambda_\pi^2 \approx 2.00 \text{ fm}^2$ 。

我们的目的是对单个原子核调节出适用于1 keV到20 MeV范围的统一光学模型势参数,为此我们假设 U, W_s, W_v 和入射中子能量 E 有关,并取如下形式:

$$\begin{aligned} U &= U_0 + U_1 E + U_2 E^2, \\ W_s &= S_0 + S_1 E, \\ W_v &= V_0 + V_1 E. \end{aligned} \quad (2.8)$$

我们选了11个可调参数,它们是 $U_0, U_1, U_2, S_0, S_1, V_0, V_1, r_1, a_1, r_2$ 和 a_2 ,而取 $U_{so} = 6.2$,不参加调节。我们用 χ^2 来标志理论值和实验值的偏差,其定义为:

$$\begin{aligned} \chi^2 &= \sum_{j=1}^{N_1} \left(\frac{\sigma_T^T(j) - \sigma_T^E(j)}{\Delta\sigma_T^E(j)} \right)^2 + \sum_{j=1}^{N_2} \left(\frac{\sigma_{CN}^T(j) - \sigma_{ce}^T(j) - \sigma_{non}^E(j)}{\Delta\sigma_{non}^E(j)} \right)^2 + \\ &+ \sum_{j=1}^{N_3} \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} \left(\frac{\sigma_{se}^T(\theta_i^j) + \frac{1}{4\pi} \sigma_{ce}^T(j) - \sigma_e^E(\theta_i^j)}{\Delta\sigma_e^E(\theta_i^j)} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中三项分别代表全截面 σ_T ,去弹截面 σ_{non} 和“弹性”散射角分布 $\sigma_e(\theta)$ 对 χ^2 的贡献。 σ_{CN} 代表复合核形成截面; σ_{se} 和 σ_{ce} 分别代表形状弹性散射截面和复合核弹性散射截面; T 和 E 分别代表理论值和实验值; j 代表能点标号。在调试过程中,把 χ^2 看成是可调参数的函数,通过计算机自动沿着使 χ^2 下降最快的方向改变势参数,最后找到 χ^2 的极小值^[3]。用这种方法解不唯一,也就是 χ^2 存在着多极值问题,因而势参数的初值选取非常重要。我们的初值是在通过系统学分析所给出的普适的光学模型势^[4]的基础上,通过分析各个势参数对截面的影响,首先试探性地调出一套势参数,用这套势参数可以计算出和实验数据大致符合的结果,然后再通过计算机程序进行细调,从而得到和实验数据符合较好的势参数。其中所用的复合核弹性散射截面 $\sigma_{ce}^T(j)$ 取自统计理论计算结果^[5],由于 σ_{ce} 只在低能段存在,因而调试过程中用了各向同性近似,并且为了选用自洽的 σ_{ce} ,光学模型计算和统计理论计算进行了几次迭代和反复。最后对²³⁵U, ²³⁸U和²³⁹Pu分别得到一套势参数(表1)。用这套势参数所计算的截面和角分布和实验数据符合较好。积分截面的理论曲线大部分落在实验误差范围之内,在图1中给了²³⁹Pu的全截面和实验数据的比较。计算的角分布形状和数值与实验数据一般都比较相近,然而当能量较高时,由于角分布的实验数据中包含

表 1 光学模型势参数调试结果

	²³⁵ U	²³⁸ U	²³⁹ Pu
U_0	43.6594	44.2784	43.7937
U_1	-0.4650	-0.4387	-0.3983
U_2	0.02349	0.01424	0.01925
S_0	3.7839	3.7833	3.3998
S_1	0.1283	0.1521	0.1161
V_1	0.2911	1.4504	0.8459
V_2	0.005886	-0.03514	0.01029
r_1	1.2647	1.2684	1.2601
a_1	0.5666	0.6020	0.5628
r_2	1.3501	1.3509	1.3736
a_2	0.6415	0.5047	0.6025

了低激发态直接非弹性散射的贡献，因而理论结果中出现了低于实验数据的深谷（图 2）。

三、耦合道计算

我们知道铀、钚同位素属于变形核，一般来说低激发态属于集体转动态。为了计算低激发态的直接非弹性散射对截面和角分布的贡献，我们还用集体转动核的耦合道理论进行了计算。

在耦合道理论中，系统的哈密顿量可以写成：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + H_i + V(r, \theta, \varphi). \quad (3.1)$$

其中 $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$ 是相对运动动能； H_i 是靶核内部运动的哈密顿量，假设它只能改变靶核的集体运动状态 Φ_{iM_i} ，于是有：

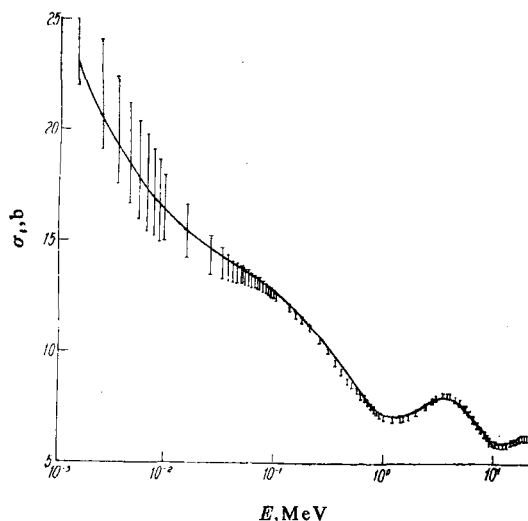


图 1 ²³⁹Pu 全截面值
I 实验值；——理论计算。

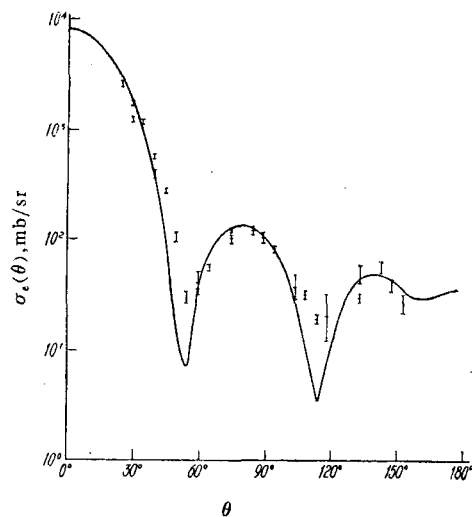


图 2 ²³⁵U 的“弹性”散射角分布
 $E=4$ MeV；I 实验值；——理论计算。

$$H_i \Phi_{l M_i} = \omega_n \Phi_{l M_i}. \quad (3.2)$$

ω_n 是第 n 个集体激发态的激发能。对于轴对称的转动核来说, 假设核半径 R_i 和角度 θ' 有如下关系:

$$R_i(\theta') = R_{i0} [1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta')]. \quad i=1, 2. \quad (3.3)$$

θ' 是相对固定在靶核上的对称轴而言的。在我们的计算中对 λ 求和只取了 $\lambda=2$ 的项。在靶核坐标系中, 相互作用势 $V(r, \theta')$ 可做如下展开:

$$V(r, \theta') = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(r) Y_{\lambda 0}(\theta'), \quad (3.4)$$

其中

$$V_{\lambda}(r) = 2\pi \int_{-1}^1 V(r, \theta') Y_{\lambda 0}(\theta') d(\cos \theta'). \quad (3.5)$$

$V(r, \theta')$ 的形式与(2.1)式相同, 但其中 R_i 要用(3.3)式的 $R_i(\theta')$ 代替。利用以下关系式:

$$Y_{\lambda 0}(\theta') = \sum_{\mu} D_{\mu 0}^{\lambda} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi). \quad (3.6)$$

其中 $D_{\mu 0}^{\lambda}$ 是转动矩阵; θ, φ 是空间坐标系的极角。于是在空间坐标系中相互作用势 $V(r, \theta, \varphi)$ 可写成:

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_{\lambda \mu} V_{\lambda}(r) D_{\mu 0}^{\lambda} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi). \quad (3.7)$$

由于上式 $\lambda=0$ 的项与 θ, φ 无关, 于是(3.7)式可分成两部分:

$$V(r, \theta, \varphi) = V_D(r) + V_c(r, \theta, \varphi). \quad (3.8)$$

做了以上考虑以后, 可以求得径向波函数 $R_{n l j}^J(r)$ 所满足的方程为:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V_D(r) + E_n \right] R_{n l j}^J(r) = \sum_{n' l' j'} V_{n l j, n' l' j'}^J R_{n' l' j'}^J(r), \quad (3.9)$$

其中

$$V_{n l j, n' l' j'}^J(r) = \sum_{\substack{\lambda=2 \\ (\Delta \lambda=2)}}^{l+l'} B_{\lambda}(I, I') A_{\lambda} V_{\lambda}(r) \quad (3.10)$$

$$B_{\lambda}(I, I') = \sqrt{2I'+1} C_{I' l' \lambda 0}^{I l \lambda 0}, \quad (3.11)$$

$$A_{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j-\frac{1}{2}-I'+i+j'+\frac{1}{2}(l'-l)} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \times C_{j-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l 0 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} W(j I j' I'; J \lambda), \quad (3.12)$$

其中 n, l, j, I, J 分别代表能级标号, 轨道角动量, 粒子总角动量, 原子核角动量和系统总角动量。 $C_{I' l' \lambda 0}^{I l \lambda 0}$ 和 $C_{j-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l 0 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$ 是克来布希-高登系数, $W(j I j' I'; J \lambda)$ 是拉卡系数。在求解耦合道方程(3.9)过程中, 利用边界条件可以定出 S 矩阵元, 从而求得所需要的截面和角分布。

在耦合道计算中我们选用了 Ch. Lagrange^[6] 所给出的势参数对 ^{238}U 进行了计算, 这套势参数是:

$$U = 47.5 - 0.3 E,$$

$$W_s = \begin{cases} 2.7 + 0.4E, & E \leq 10 \text{ MeV}, \\ 6.7, & E > 10 \text{ MeV}, \end{cases}$$

$$W_v = 0,$$

$$U_{s0} = 7.5,$$

$$r_1 = 1.24, \quad a_1 = 0.62,$$

$$r_2 = 1.26, \quad a_2 = 0.58,$$

$$\beta_2 = 0.216,$$

靶核能级取了 $0^+(0)$, $2^+(0.0447 \text{ MeV})$ 和 $4^+(0.148 \text{ MeV})$ 三条。

在图 3 和图 4 中给出了用耦合道理论计算的 ^{238}U 第一和第二激发态的直接非弹性散射的截面 $\sigma_{D_s}^{(1)}$ 和 $\sigma_{D_s}^{(2)}$, 再和由统计理论计算的^[6]复合核非弹性散截面 $\sigma_{CS}^{(1)}$ 和 $\sigma_{CS}^{(2)}$ 相迭加, 得到了和实验数据基本符合的理论结果。可以看出, 当入射中子能量大于 $1\sim 2 \text{ MeV}$ 时, 主要是直接相互作用的贡献。把用耦合道理论计算的头两个激发态的角分布和基态的弹性散射角分布相迭加去和包含低激发态贡献的“弹性”散射角分布实验数据进行比较, 可以看出理论曲线的深谷现象不存在了, 和实验符合的状况得到明显改善(图 5)。

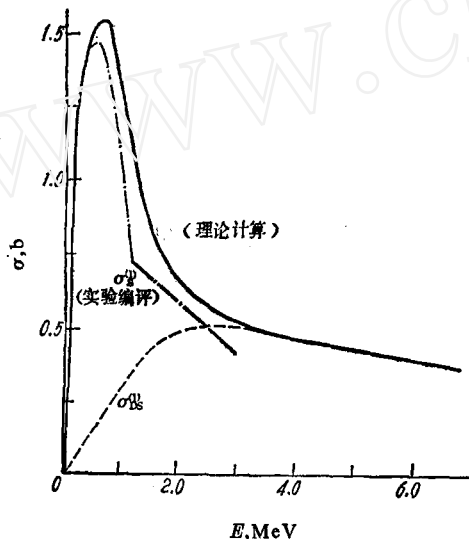


图 3 ^{238}U 第一激发态的激发函数

$\sigma_{D_s}^{(1)}$ 和 $\sigma_{D_s}^{(2)}$ 为耦合道理论计算结果。

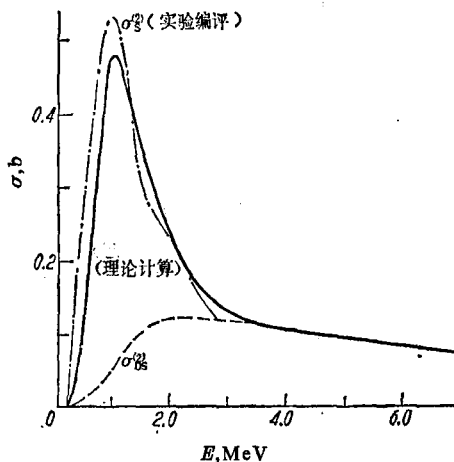


图 4 ^{238}U 第二激发态的激发函数

四、讨 论

通过计算表明, 虽然光学模型是在假设原子核是球形的前提下建立起来的, 但是把它用于变形核通过调节势参数也能得到和实验符合较好的结果。同时还可以看出, 在假设势参数和能量只有简单关系的前提下, 便能在很宽的能量范围内得到和实验符合较好的计算结果, 这就说明光学模型是一种很有效的模型理论。从耦合道理论的计算结果又可以看出, 它对光学模型有明显的改进, 但是由于计算量过大, 势参数的研究受到了计算条件的限制。

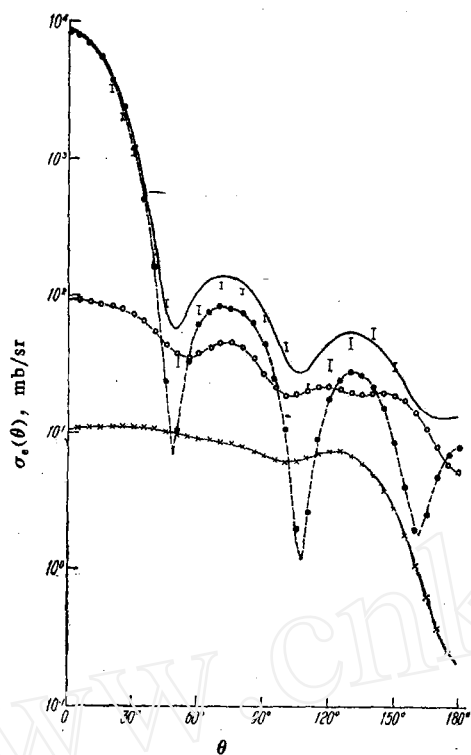


图 5 ^{238}U 的“弹性”散射角分布
 $E=5\text{ MeV}$; I 实验值; ● 基态; ○ 第一激发态; × 第二激发态; —— 基态+第一激发态+
 第二激发态。

参 考 文 献

[1] P. E. Hodgson, *The Optical Model of Elastic Scattering*, Clarendon, Oxford, 1963.
 [2] T. Tamura, *Rev. Mod. Phys.*, **37**, 679 (1965).
 [3] 赵小麟等, 自动调节光学模型势参数的一种方法, 内部资料, 1978.
 [4] F. D. Becchetti & G. W. Greenlees, *Phys. Rev.*, **182**, 1190(1969).
 [5] 苏宗洙等, 铀、钚同位素中子反应的统计理论计算, hsj-78226, 1978.
 [6] Ch. Lagrange, JAERI-M 5984, 1975, p. 58.