

中子核反应截面实验数据的 参数化理论分析*

刘彤 张紧 赵志祥

(中国原子能科学研究院核物理所, 北京, 102413)

根据蒸发模型和激子模型, 在一定的假设和近似下建立了 $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, (n, x) ($x = p, \alpha, d, t, {}^3\text{He}$), $(n, np + pn)$, $(n, na + an)$, 及 (n, γ) 等十个反应道的中子核反应截面的参数化理论公式。公式中仅含最灵敏的参数, 根据所建立的参数化理论公式, 编制了参数化理论公式拟合分析程序SFF。与实验数据的比较表明: 参数化的理论公式可以很好地描述实验数据。

关键词 参数化理论公式 蒸发模型 激子模型 最小二乘拟合

对实验数据的分析处理可分为数学拟合和理论计算与分析两类。数学拟合是以某种数学公式(如一般多项式;勒让德多项式;样条函数等)来拟合实验数据, 目的是合并多家或光滑单家的实验数据。但由于数学拟合没有理论依据, 故不能进行外推和大范围的内插。因此, 在没有实验数据或实验数据较少或较分散的情况下, 数学拟合显得无能为力。用大的模型理论计算程序, 原则上应该能够进行合理的内插和外推, 但必须输入较多的参数, 并对参数进行仔细的调整, 这是一项很烦琐的工作, 要花费大量的精力和机时, 而且对某一具体的反应道而言, 有时并不能取得较好的结果。对实验数据进行参数化理论分析, 即以参数化理论公式拟合实验数据, 可以克服数学拟合和模型理论计算的上述缺点, 特别是当实验数据比较缺少时, 用参数化理论公式拟合实验数据可以方便、快速地进行预言, 并进行可靠的内插或外推。建立有关的参数化的理论公式, 用较复杂的参数化的理论公式拟合实验中子截面数据, 编制具有广泛用途的程序, 是十分必要的。

1 参数化理论公式

建立参数化理论公式即半经验公式的基本思路是抓住有关核反应现象的基本特点, 对繁杂的理论公式进行简化, 略去次要的因素, 突出主要的特点, 保留尽可能少的可调参数, 使建立的参数化理论公式既保留了理论模型清晰的物理图象, 又具有公式简单的优点

* 中国原子能科学研究院青年科学基金项目

收稿日期: 1993-03-31 收到修改稿日期: 1993-06-05

1.1 (n, 2n)和(n, 3n)反应激发函数(阈能约 25 MeV)

入射中子能量在 25 MeV 时,对于(n, 2n)反应,(n, 3n)反应的竞争及预平衡发射的贡献均不能忽略。若只在第一个中子发射时考虑预平衡发射,在一些假定下可以导出(n, 2n)反应的激发函数的半经验表达式为:

$$\sigma_{n,2n} = \sigma_{ne} \frac{\sigma_{n,M}}{\sigma_{ne}} \left\{ (1 - \delta) \left[\left(\frac{\sigma_{n,2n}}{\sigma_{n,M}} \right)_{EQ} - \left(\frac{\sigma_{n,3n}}{\sigma_{n,M}} \right)_{EQ} \right] + \delta \left[\left(\frac{\sigma_{n,2n}}{\sigma_{n,M}} \right)_{PE} - \left(\frac{\sigma_{n,3n}}{\sigma_{n,M}} \right)_{PE} \right] \right\} \quad (1)$$

式中 δ 表示预平衡发射所占的份额,下标“EQ”和“PE”分别表示平衡过程和预平衡过程的贡献,去弹截面 σ_{ne} 使用 Davey 的经验公式^[1]。

$$\sigma_{n,M} = \sigma_{n,n} + \sigma_{n,2n} + \sigma_{n,3n} + \dots \quad (2)$$

(n, 3n)反应的激发函数可以用类似于(1)的方式得到,推导的细节及式(1)中各量的表达式见文献[2]。

在(n, 2n)和(n, 3n)激发函数的半经验表达式中,有两个待定参数,即比值 $\sigma_{n,M}/\sigma_{ne}$ 和温度 T 。

1.2 (n, x)反应截面(x = p, d, t, ³He, α , n + p, 和 n + α , 阈能约 20 MeV)

用包含了预平衡发射的蒸发模型在一些近似下导出了(n, x)反应激发函数的解析半经验表达式

$$\sigma_{n,x}(E_n) = C_x f(E_c^x, E_n) \quad (3)$$

公式推导中的主要近似有:

1)只是在激子数为 3 的激子态上有预平衡发射;2)与发射带电粒子竞争的主要是发射中子的过程;3)复杂粒子 d, t, ³He, 和 α 被看成是预先在核内以一定的结团几率形成;4)用方位角垒穿透因子描述库仑位垒效应;5)主要的次级粒子发射道是(n, xn)过程,而且只要能量允许,复合系统在发射 x 后必定且只能发射中子;6)常温型能级密度。

式(3)中含有两个可调参数: E_c^x 表征库仑位垒的高度,它决定激发函数的形状; C_x 为与复合系统形成截面有关的参数,它决定激发函数的绝对值。

式(3)的具体形式及推导过程见文献[3, 4]。

1.3 (n, γ)反应激发函数(1 keV—20 MeV)

当入射中子能量小于几个 MeV 时,(n, γ)反应激发函数主要是统计过程的贡献,而在几个 MeV 之上的能区,直接和半直接相互作用的贡献占支配地位。可以将(n, γ)反应截面写为:

$$\sigma_{n\gamma} = \sigma_{n\gamma}(S) + \sigma_{n\gamma}(d) \quad (4)$$

式中, $\sigma_{n\gamma}(S)$ 为来自统计过程的贡献, $\sigma_{n\gamma}(d)$ 为来自直接和半直接相互作用的贡献。

根据蒸发模型,在一定的假设和近似下,可以推得下面的半经验公式:

$$\sigma_{n\gamma}(S) = 640\alpha \cdot \sum_{L=0}^3 (2L+1) \exp(-1.346B_L^{0.42}/E_n) \quad (5)$$

式中, $\sigma_{n\gamma}(S)$ 单位是 10^{-31}m^2 , E_n 单位为 keV。

$$B_L = 0.0158\alpha/\beta V_L E_n \quad (6)$$

V_L 为 L 分波的穿透因子。公式推导的细节见文献[4, 5]。式(6)中有两个待定参数 α 和 β 。

另一方面,假设预平衡 γ 发射仅在激子数为 3 的激子态发生,可以导出

$$\sigma_{n\gamma}(d) = C_\gamma \int_0^{E_n+S_n} \frac{E_\gamma^4}{(E_\gamma^2 - E_R^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_R^2} dE_\gamma / \left\{ E_n^3 \left[1 + 0.035A \left(1 + \frac{S_n}{E_n} \right)^3 \right] \right\} \quad (7)$$

式中 E_n, S_n 分别为入射中子能量和复合系统的中子分离能,以 MeV 计; E_R, Γ_R 分别为巨偶极共振能量及宽度。公式中唯一的待定参数 C_γ , 可以用 14 MeV 附近的 σ_{ny} 测量数据定出。式(7)的推导的细节见文献[6]。

2 程序的编制

在以上工作的基础上,编制了参数化理论公式拟合实验中子截面数据的程序 SFF。在程序设计过程中,特别注意了下面一些问题。

2.1 考虑了实验数据之间的关联

微观数据测量普遍存在着系统误差,这种系统误差在测量数据之间引入关联,即协方差矩阵的非对角项。这种关联必须在数据处理过程中加以考虑。为了节省内存,减少矩阵求逆时的计算量,SFF 程序允许以下述各种简化或近似方式输入实验数据的协方差矩阵。

2.1.1 等相关系数 在等相关系数的情况下,关联系数 ρ 为常数。只要输入协方差矩阵的对角项部分,即实验数据的标准误差。协方差矩阵的 V_Y 可由下式得到:

$$V_Y = EME \quad (8)$$

式中:

$$E(i, j) = \begin{cases} \sigma_i & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad M(i, j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ \rho & i \neq j \end{cases} \quad (9)$$

此时,由于对角的误差矩阵 E 和相关矩阵 M 的逆矩阵元有解析表达式

$$E^{-1}(i, j) = \begin{cases} 1/\sigma_i & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (10)$$

$$M^{-1}(i, j) = \begin{cases} \frac{1 + (N-2)\rho}{1 + (N-2)\rho - (N-1)\rho^2} & i = j \\ -\frac{\rho}{1 + (N-2)\rho - (N-1)\rho^2} & i \neq j \end{cases} \quad (11)$$

因此, V_Y 的逆矩阵 $V_Y^{-1} = E^{-1}M^{-1}E^{-1}$ 可以方便地求出。

对于相互独立的实验数据,可以令 $\rho = 0$, 以等相关系数的方式输入协方差矩阵。

2.1.2 固定关联误差 若只有长程关联是重要的,即短程关联可以忽略不计,可以将协方差矩阵元写成

$$V_Y(i, j) = \begin{cases} S_i^2 + C_i^2 & i = j \\ C_i C_j & i \neq j \end{cases} \quad (12)$$

只须输入 $2N$ 个元素, $C_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 和 $b_i = S_i/C_i (i = 1, 2, \dots, N)$, 协方差矩阵可以用下面方式构造

$$V_Y = CBC \quad (13)$$

式中:

$$C(i, j) = \begin{cases} C_i & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad B(i, j) = \begin{cases} 1 + b_i^2 & i = j \\ 1 & i \neq j \end{cases} \quad (14)$$

类似于相等关联系数的情况, V_Y 的逆矩阵元有解析式,从而大大节省了矩阵求逆计算所需的时间。

2.1.3 输入完整的实验数据的协方差矩阵。

2.2 采用近似方法避免 PPP 现象

当实验数据间的关联比较强时,最小二乘的拟合结果常常极不合理,这称为 PPP 现象^[7],它产生于误差传递过程中的小错误,严格地避免 PPP 现象需要了解实验数据导出关系的细节^[8]。在程序中,采用了近似方法避免 PPP 现象^[9]。

令实验数据 Y_i, Y_j 的报道的标准误差及协方差分别为 σ_i^* , σ_j^* 和 σ_{ij}^* , 则将其修正为:

$$\sigma_i = \sigma_i^* \frac{\hat{Y}_i}{Y_i} \quad \sigma_j = \sigma_j^* \frac{\hat{Y}_j}{Y_j} \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^* \frac{\hat{Y}_i \hat{Y}_j}{Y_i Y_j} \quad (15)$$

式中,符号“ $\hat{}$ ”表示拟合值。由于拟合值事先未知,在 SFF 程序用一个迭代过程使修正后的协方差矩阵和拟合值同时获得。图 1 给出 PPP 现象的典型实例。

2.3 可调数组的使用

在拟合时经常遇到实验数据的家数较多,而且有些家的数据点数也较多,如果对每一家数据定义一个数组,则很可能出现有些数组不够用,同时,大部分的数组只使用了很少的一部分。为避开这个问题,程序中采用了可调数组,即在主程序中定义一个大数组,在读实验数据的过程中,每家数据按其需要确定数组的大小。这样编制了一整套数组管理子程序,可以开数组,也可以删数组,先进后出,最先定义的数组最后删除,大大节省了计算机内存。

2.4 对用户开放的 SFF 程序

用户可以方便地通过加一个子程序用自己的公式拟合实验数据。

3 计算结果与讨论

用参数化理论公式分析程序 SFF 分析了大量的实验数据。结果表明,本工作建立的参数化公式可以很好地描述实验数据。

图 2 给出了 $^{50}\text{Cr}(n, 2n)$; $^{92}\text{Zr}(n, \alpha)$; $^{109}\text{Ag}(n, p)$; $^{59}\text{Co}(n, \gamma)$ 和 $^{63}\text{Cu}(n, d)$ 反应的参数化理论拟合结果与实验数据的比较,同时还给出了其他作者的模型理论预言结果。可以看出,参数化理论的拟合结果对实验数据的描述明显地好于模型理论的预言值。在这些例子中,由于实验点比较少,无物理依据的数学拟合方法显然是无能为力的。

由于对前面给出的参数化理论公式中的可调参数建立了系统学公式^[2-6],因而当无任何实验数据时,SFF 程序可以利用参数的系统学公式计算出必要的参数值,完成对激发函数的预言。另一方面,当实验数据集中在某一入射中子能量附近(如集中在 14 MeV 附近)时,SFF 程序允许减少可调参数的个数,即用系统学公式计算出必要的参数,对实验数据进行类似于归一的处理。图 2(6)对 $^{150}\text{Sm}(n, \alpha)$ 反应给出了典型的例子。

本工作进行过程中与周德邻先生进行过多次有益的讨论,谨致谢意。同时感谢中国原子能科学研究院青年科学基金会对本工作的支持。

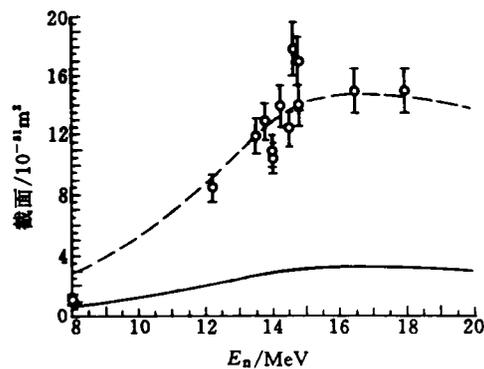


图 1 PPP 现象实例

Fig.1 Example of PPP

——没迭代;----本工作。

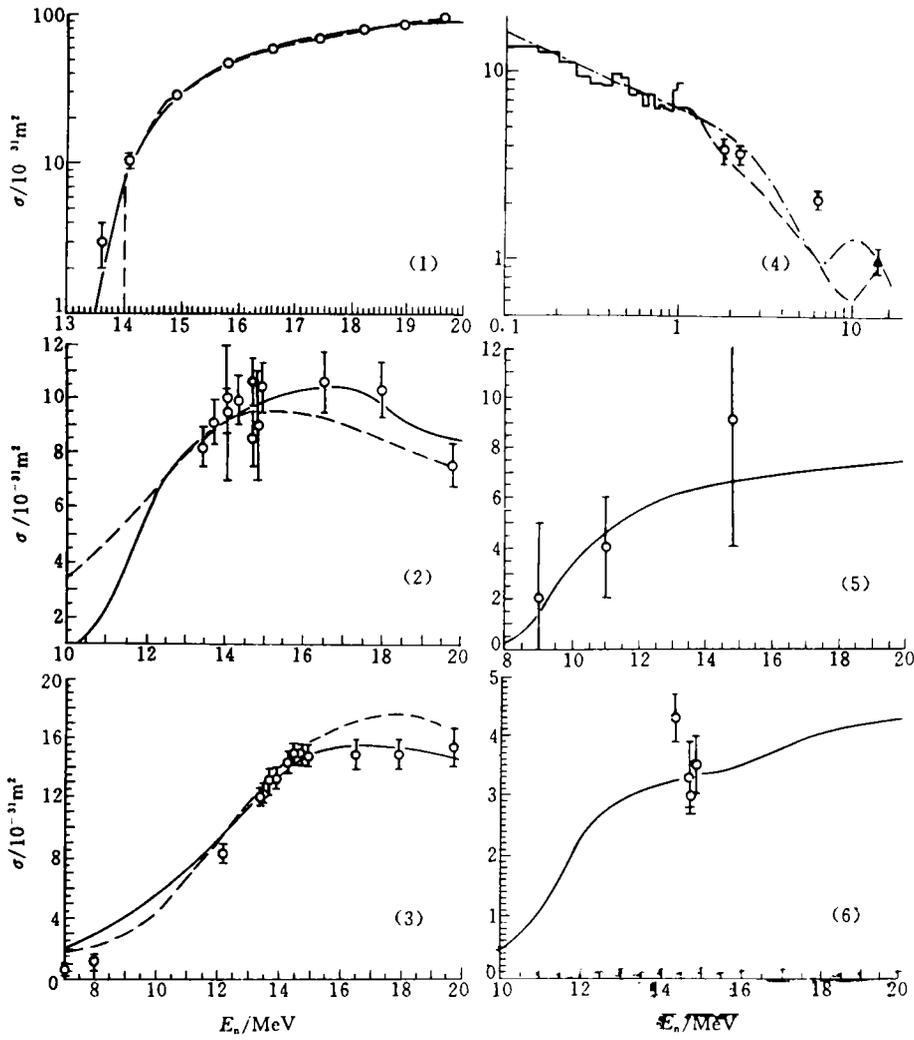


图2 六种反应的参数化理论拟合与实验数据的比较

Fig.2 Comparison of fitted values by parameterized theory with the experimental data for six kinds of reactions

实线为本工作;虚线为预言结果。1— $^{50}\text{Cr}(n, 2n)$; 2— $^{92}\text{Zr}(n, \alpha)$; 3— $^{109}\text{Ag}(n, p)$;
4— $^{59}\text{Co}(n, \gamma)$; 5— $^{63}\text{Cu}(n, d)$; 6— $^{150}\text{Sm}(n, \alpha)$ 。

参 考 文 献

- 1 Davey WG, Goin RW, Ross JR. An Analysis of $(n, 2n)$ Cross-Section Measurements for Nuclei up to Mass 238. ANL-75 34, 1975.
- 2 Zhang Jin, Zhou Delin, Cai DunJiu. The Systematics of $(n, 2n)$ and $(n, 3n)$ Cross Section. Proc of an Advisory Group Meeting Organized by the IAEA and Held in Gaussig, German Democratic Republic, 1 - 5 Dec 1986.

159.

- 3 Zhao Zhixiang, Zhou Delin. Systematics of Excitation Function for (n, charged-particle) Reaction. Nucl Sci Eng, 1988, 99:367.
- 4 Zhao Zhixiang, Zhou Delin. Systematics of Excitation Function for (n, n + p) and (n, n + α) Reaction. Chin J Nucl Phys, 1991, 13(1):37.
- 5 Zhao Zhixiang, Zhou Delin, Cai Dunjiu. Systematics of Average Neutron Capture Cross Section Around 25 keV Conf on Nucl Data for Sci and Tech, Mito, 1988, 513.
- 6 Zhao Zhixiang, Zhou Delin, Cai Dunjiu. Systematics of Excitation Function for (n, γ) Reaction Above 4 MeV. Chin J Nucl Phys 1991, 13(2):139.
- 7 Peelle RW. Peelle's Pertinent Puzzle. Private Communication. 1987.
- 8 Zhao Zhixiang, Perey FG. Covariance Matrix of Derived Quantities and Their Combination. ORNL/TM-12106, 1992.
- 9 Zhou Delin, Zhang Jin, Liu Tong. Simplified Ways to Combine the Correlated Data. Communication of Nucl Data Progress, 1991, No.5, 67.

PARAMETERIZED THEORY ANALYSIS OF THE EXPERIMENTAL DATA OF NEUTRON REACTION CROSS SECTIONS

LIU TONG ZHANG JIN ZHAO ZHIXIANG

(China Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275(41), Beijing, 102413)

ABSTRACT

Based on the evaporation model and exciton model, under some assumptions and approximations, parameterized model theory formulas of excitation functions for ten reactions, including (n, 2n), (n, 3n), (n, x), ($x = p, \alpha, d, t, {}^3\text{He}$), (n, np + pn), (n, n α + α n) and (n, γ), are established. Only the most sensitive parameters are included in the formulas. According to these formulas, a code SFF to analyse the measured data are developed. The comparison of the results with the experimental data demonstrates that the parameterized formulae can describe the experimental data very well.

Key words Parameterized formulae Evaporation model Exciton model Least-squares fitting