

^{181}Ta 中子反应数据的理论计算*

姚立山
(兰州大学, 730001)

摘 要

本文用光学模型 (OPM), 带宽度涨落修正的豪泽-费许巴哈理论 (WHF) 以及包括平衡前发射在内的蒸发模型 (PEM), 计算了入射能量在 1—20MeV 的中子与 ^{181}Ta 核相互作用的反应数据。计算结果与评价的实验值进行了比较, 符合较好。

一、引 言

^{181}Ta 是裂变、聚变反应堆系统中重要的结构材料核之一, 其中子反应数据对核工程的建设 and 核能开发都具有重要的意义。但是目前实验测量的数据尚不能满足实际的需求, 尤其是一些出气(氢, 氦等)反应的数据更是研究材料辐射损伤的重要依据。对 ^{181}Ta 除全截面 (σ_{tot}), ($n, 2n$), (n, γ) 和 (n, p) 反应截面外, 其余反应道或者数据分歧较大, 或者缺乏实验数据。因此有必要进行理论计算为核工程设计提供必需的全套中子反应数据; 同时, 与现有的实验值进行比较, 进一步验证理论模型的适用性和可靠性, 促进核反应基础理论研究的发展。

天然钽(Ta)的两个稳定同位素 ^{180}Ta 、 ^{181}Ta 的丰度分别为 0.012% 和 99.988%。因此对 ^{181}Ta 的计算实际上与天然钽的结果无甚大差别。 ^{181}Ta 与中子 ($E_n \leq 20\text{MeV}$) 相互作用可能产生的反应及其阈能如表 1 所示。此外, 计算还包括全截面, 弹性散射截面 (σ_{nn}), 去弹性散射截面 ($\sigma_{n\alpha n}$) 以及非弹性散射分立能级和连续态的激发函数, 弹性和非弹性散射的角分布, 发射次级中子的能谱等。

表 1 ^{181}Ta 中子反应类型及阈能

反应道	nn'	$n, 2n$	$n, 3n$	np	nt	$n^3\text{He}$	nd	$n\alpha$ ($Q=$)	$n, n'p$	$n, n't$	$n, n'^3\text{H}$	$n, n'd$	$n, n'\alpha$ ($Q=$)	$n\gamma$ ($Q=$)
阈能 (MeV)	0.006255	7.687	14.30	0.2476	4.867	6.207	3.732	7.405	5.969	11.00	13.24	11.16	1.534	6.063

计算采用的理论模型由光学模型 (OPM), 带宽度涨落修正的豪泽-费许巴哈理论 (WHF) 和包括平衡前发射在内的蒸发模型 (PEM) 三部分组成。计算使用的“OPM

本文 1990 年 9 月 24 日收到。
* 本工作系中国核数据中心资助课题。

参数自动调节程序”——AUJP^[1]和“中重核快中子数据理论计算统一程序”-MUP2^[2]由中国核数据中心(CNDC)提供。 ^{181}Ta 评价的实验数据取自作者的工作^[3]。

二、理论计算公式

在 ^{181}Ta 的理论计算中,用 OPM 计算整个能区的全截面、形状弹性散射截面和角分布; WHF 理论计算复核弹性散射截面和角分布,非弹性散射分立能级激发函数和角分布,辐射俘获截面; PEM 计算包括多次过程在内的各分截面和 $(n, 2n)$, $(n, 3n)$ 反应截面,以及次级中子能谱。有关 WHF 和 PEM 理论公式的详细描述可参见 [2]。

从核反应蒸发模型理论出发,复合系统达到平衡后,可以发射 γ 退激,也可以通过发射其它粒子退激。发射一个 x 粒子的宽度为:

$$\Gamma_x = \frac{1}{2\pi\rho_c(U)} \int_0^{U-B_x} \frac{4\mu_x}{\pi\hbar^2} E_x \sigma(E_x) \rho_{R_x}(U') dE_x, \quad (1)$$

其中, $\rho_c(U)$ 和 $\rho_{R_x}(U')$ 分别是复合系统和发射 x 粒子后余核的能级密度。

发射 γ 的宽度按照巨偶极双区共振理论^[4]为:

$$\Gamma_\gamma = \frac{1}{2\pi\rho_c(U)} \int_0^U \frac{2k_\gamma^2}{\pi} \sigma(E_\gamma) \rho_c(U - E_\gamma) dE_\gamma, \quad (2)$$

其中,

$$\sigma(E_\gamma) = \sum_i \sigma_{0G}^i \frac{E_\gamma^2 \Gamma_{Gi}^2}{(E_\gamma^2 - \Gamma_{Gi}^2) + E_\gamma^2 \Gamma_{Gi}^2}, \quad (3)$$

这里, σ_{0G}^i , E_{Gi} 和 Γ_{Gi} 分别为巨偶极共振峰的强度,位置和半宽度。对球形核有一个巨偶极共振峰,而对变形核则为双峰。

上述公式中,需要计算的复合系统和余核的能级密度,本工作均采用 Gilbert-Cameron 能级密度公式^[5],它在低能段为常温型,在高能段为费米型,其形式为:

$$\rho(Z, A, U) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{T} \exp \left[\frac{U - U_0}{T} \right], U \leq U_x + \Delta \\ \frac{\exp [2\sqrt{aU_x}]}{12\sqrt{2} \sigma_0 U_x (aU_x)^{1/4}}, U \geq U_x + \Delta \end{array} \right\}, \quad (4)$$

其中,能级密度参数, $a = (0.00917S + Q_B)A$

$$U_x = 2.5 + 150/A,$$

$$U_e = U - \Delta,$$

$$T = [\sqrt{a/U_x} - 1.5/U_x]^{-1},$$

$$\sigma^2 = \begin{cases} 0.0888(aU_x)^{1/2} A^{2/3} & U \geq U_x + \Delta \\ \sigma_0^2 = 0.0888(aU_x)^{1/2} A^{2/3} & U \leq U_x + \Delta \end{cases}$$

$$U_0 = U_x + \Delta + T \left[\ln \left(\frac{12\sqrt{2} \sigma_0 U_x (aU_x)^{1/4}}{T} \right) - 2\sqrt{aU_x} \right], \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{这里, 形变参数: } Q_B &= \begin{cases} 0.142 & \text{球形核} \\ 0.12 & \text{变形核,} \end{cases} \\ \text{对修正: } \Delta &= P(Z) + P(N), \\ \text{壳修正: } S &= S(Z) + S(N). \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

OPM 的计算选用球形光学势, 其一般形式为:

$$\begin{aligned} V(r) = & V_C(r) - V_R f(x_R) - i \left[U_V f(x_V) - 4W_S \frac{d}{dx_S} f(x_S) \right] \\ & + 2V_{SO}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(x_{SO}), \end{aligned} \quad (7)$$

上式右边各项分别为库仑作用势, 中心势实部和虚部(体吸收和面吸收)及自旋轨道耦合势. 式中,

$$V_C(r) = \begin{cases} (0.720488ZZ'/R_C)(3 - r^2/R_C^2) & r \leq R_C \\ 1.440975ZZ'/r & r \geq R_C \end{cases} \quad (8)$$

在(7,8)式中, $R_C = r_C A^{1/3}$, $f(x_i) = (1 + e^{x_i})^{-1}$ 和 $x_i = (r - r_i A^{1/3})/a_i$ 其中, $f(x_i)$ 是 Woods-Saxon 势形状因子.

在公式(7)中, 参数 V_{SO} 取为常数和 $r_R = r_{SO}$, $r_S = r_V$, $a_R = a_{SO}$, $a_S = a_V$. 并假定 V_R , W_S 和 U_V 随能量变化并具有如下形式:

$$V_R = V_0 + V_1 E + V_2 E^2 + V_3 \frac{N-Z}{A} + V_4 Z/A^{1/3}, \quad (9)$$

$$W_S = W_0 + W_1 E + W_2 \frac{N-Z}{A}, \quad (10)$$

$$U_V = U_0 + U_1 E, \quad (11)$$

因此, 实际上可调参数只有 11 个: $V_0, V_1, V_2, W_0, W_1, r_R, r_S, a_R, a_S, U_0$ 和 U_1 .

在公式(1,2,3)中, MUP2 选取的输入量为: $\sigma_{iG}^i, E_{Gi}, \Gamma_{Gi}$ 和 $Q_B, P(Z), P(N), S(Z), S(N)$ 以及已调好的 OPM 11 个光学势参数.

三、参数的选取和调试

^{181}Ta 属变形核, 因此取 $Q_B = 0.12$. 巨偶极共振峰和能级密度参数的初值均取自文献 [6]. 实际计算时使用了修改后的能级密度参数 $a = (0.00880S + Q_B)A$ 和两能段变化处的激发能 $U_x = 1.4 + 263/A$.

计算时用到的 ^{181}Ta 发射 α 粒子后各余核的能级参数列于表 2. 发射 α 粒子($\alpha = \text{P}, \text{t}, {}^3\text{He}, \text{d}, \alpha$) 反应道的 20 个初始 OPM 势参数选自文献 [7].

^{181}Ta 的 OPM 计算是用 AUJP^[3] 自动调节光学势参数使之与评价的实验值有较好的符合. 调试中, 采用的评价数据 σ_{tot} 18 个, σ_{non} 5 个和弹性散射角分布 9 个^[3]. 程序的目标函数形式如下:

$$\chi^2 = \left\{ \frac{W_{\text{tot}}}{N_1} \sum_{j=1}^{N_1} \left[\frac{\sigma_{\text{tot}}^T(E_j) - \sigma_{\text{tot}}^E(E_j)}{\Delta\sigma_{\text{tot}}^E(E_j)} \right]^2 + \frac{W_{\text{non}}}{N_2} \sum_{j=1}^{N_2} \left[\frac{\sigma_{\text{non}}^T(E_j) - \sigma_{\text{non}}^E(E_j)}{\Delta\sigma_{\text{non}}^E(E_j)} \right]^2 \right\}$$

表 2 发射 α 粒子后各余核的能级参数

α 粒子	n		p		t		^3He		d		α	
余核	^{181}Ta		^{181}Hf		^{179}Hf		^{177}Lu		^{180}Hf		^{178}Lu	
能级	$U(\text{MeV})$	J^π	$U(\text{MeV})$	J^π	$U(\text{MeV})$	J^π	$U(\text{MeV})$	J^π	$U(\text{MeV})$	J^π	$U(\text{MeV})$	J^π
参数	0.0	7/2 ⁺	0.0	1/2 ⁻	0.0	9/2 ⁺	0.0	7/2 ⁺	0.0	0 ⁺	0.0	1 ⁺
	0.00622	9/2 ⁻	0.0458	3/2 ⁻	0.1227	11/2 ⁺			0.0933	2 ⁺	0.0424	2 ⁺
	0.1363	9/2 ⁺	0.0680	7/2 ⁺	0.2143	7/2 ⁻			0.3068	4 ⁺	0.3908	1 ⁺
	0.1585	11/2 ⁻	0.0968	5/2 ⁻	0.2688	11/2 ⁺			0.6408	6 ⁺		
	0.3016	11/2 ⁺	0.3294	5/2 ⁻	0.3377	9/2 ⁻			1.084	8 ⁺		
	0.3375	13/2 ⁻	0.9043	5/2 ⁺	0.3748	1/2 ⁻			1.1416	8 ⁻		
	0.4822	5/2 ⁺			0.4207	3/2 ⁻			1.1988	2 ⁺		
	0.4952	13/2 ⁺										
	0.5425	15/2 ⁻										
	0.6152	1/2 ⁺										
	0.6191	3/2 ⁺										
	0.7167	15/2 ⁺										
	0.9650	19/2 ⁺										

$$+ \frac{W_{nn}}{N_3} \sum_{j=1}^{N_3} \left[\frac{\sigma_{nn}^T(E_j, \theta_j) - \sigma_{nn}^E(E_j, \theta_j)}{\Delta\sigma_{nn}(E_j, \theta_j)} \right]^2 \Big/ (W_{tot} + W_{non} + W_{nn}).$$

式中, E_j 表示入射中子能量; σ_{tot}^T , σ_{non}^T 和 σ_{nn}^T 分别表示各反应道理论计算值; σ_{tot}^E ,

表 3 各反应道 OPM 势参数 (MeV, fm)

反应道	n	p	t	^3He	d	α
$A_R = A_{SO}$	0.5207	0.68	0.98	0.98	0.86	0.85
$A_S = A_V$	0.4175	0.51	0.84	0.88	0.92	0.76
$r_R = r_{SO}$	1.2704	1.01	1.35	1.35	1.25	1.87
$r_S = r_V$	1.3448	1.32	1.40	1.40	1.43	1.57
r_C	1.25	1.25	1.3	1.3	1.3	1.4
U_0	2.1139	0.0	0.0	0.0	0.0	21.0
U_1	-0.0211	0.0	0.0	0.0	0.0	0.25
V_0	49.2677	54.0	165.0	151.9	91.13	193.0
V_1	-0.2012	-0.32	-0.17	-0.17	0.0	-0.15
V_2	0.0112	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
V_3	-24.0	24.0	-6.4	50.0	0.0	0.0
V_4	0.0	0.4	0.0	0.0	2.2	0.0
V_{SO}	7.0	6.2	2.5	2.5	7.0	0.0
W_0	12.4553	11.8	46.0	41.7	6.813	0.0
W_1	-0.132	-0.25	-0.33	-0.33	0.0	0.0
W_2	-12.0	12.0	-110.0	44.0	0.0	0.0

$\sigma_{n\alpha}^E$, σ_{nn}^E 和 $\Delta\sigma_{tot}^E$, $\Delta\sigma_{n\alpha}^E$, $\Delta\sigma_{nn}^E$ 分别表示各反应道实验值和相应的误差; W_{tot} , $W_{n\alpha}$ 和 W_{nn} 为相应反应道的权重因子, 计算中取为 1.0, 3.5 和 1.0. 经过反复调试与比较, 直到满足要求为止, 这时 χ^2 有极小值为 2.9003. 最后得到的中子道最佳光学势参数如表 3 所示. 然后利用 MUP2 程序^[2], 把已调好的最佳光学势参数作为输入数据再进行 ^{181}Ta 的全套中子反应数据的理论计算. 为使 $\sigma_{nn'}$, σ_{nr} , $\sigma_{n,2n}$, $\sigma_{n,3n}$ 以及 $\sigma_{n,x}$ ($x = p, t, ^3\text{He}, d, \alpha$) 也与实验值相一致, 程序运行时还需调节其余 5 组出射 x 粒子的光学势参数以及预平衡发射理论中激子态跃迁参数 DK, 双区巨共振峰参数, 能级密度参数等. 计算中取 $\text{DK} = 290$, 其余已调好的参数分别见表 3, 4, 5.

表 4 巨偶极共振峰参数

参数 核素	$\sigma_{eG}(\text{b})$		$E_G(\text{MeV})$		$\Gamma_G(\text{MeV})$	
	1	2	1	2	1	2
$^{180-182}\text{Ta}$	0.341	0.421	12.3	15.23	2.43	4.48
$^{179-181}\text{Hf}$	0.263	0.416	12.59	14.88	2.29	5.18
$^{178-179}\text{Lu}$	0.325	0.431	12.32	15.47	2.57	4.70

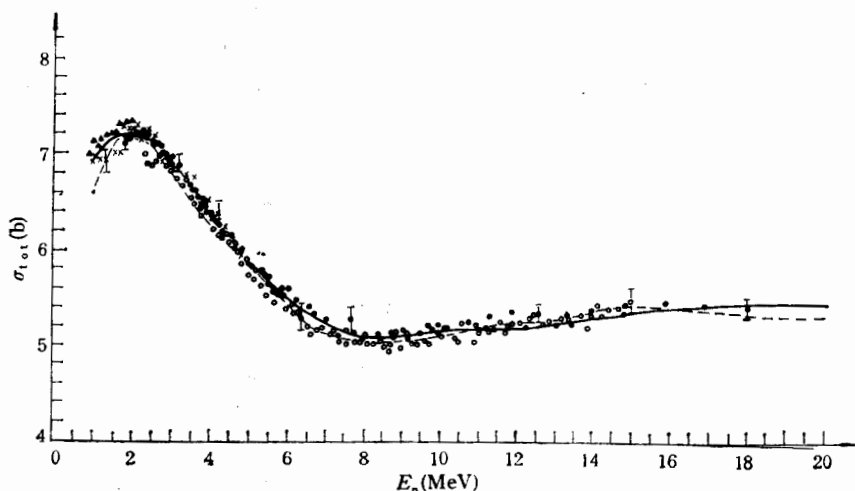
表 5 能级密度参数

参数 Z	P(Z)	S(Z)	参数 N	P(N)	S(N)
72	0.68	-7.45	108	0.75	6.96
71	0.0	-7.90	107	0.0	7.15
70	0.68	-8.13	106	0.5	7.35
69	0.0	-8.91	105	0.0	7.40

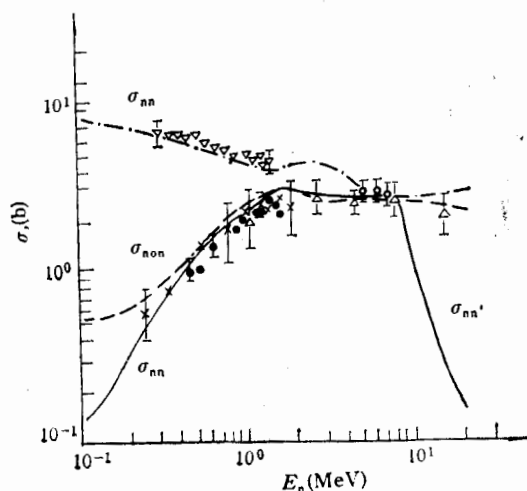
四、计算结果和讨论

利用上节表 3, 4 和 5 中已调好的参数计算了 1—20 MeV ^{181}Ta 的全套中子反应数据, 其结果如图 1—5 所示. 为便于比较, 图中还画出了部分实验测量值和国外核数据库的评价结果^[8].

σ_{tot} 的计算结果与实验值 [9—12] 的比较见图 1, 由图可见, 二者符合较好. 尤其是 Poenitz^[9,10] 等人的两次测量不仅精度高 (约 1%) 而且测量范围扩展到整个能区 (1—18 MeV), 这为理论计算提供了可靠的依据. 另外同 ENDF/B-VI^[8] 比较也有了明显的改进.

图 1 ^{181}Ta 全截面理论计算与实验值的比较

●[9] ×[10] △[11] ○[12] ——[8] ——本工作

图 2 σ_{nn} , σ_{non} , $\sigma_{nn'}$ 计算结果与实验值的比较

△实验推荐值 ▽[13] ●[13] ×[14] ○[15]

图 2 示出了 σ_{nn} , σ_{non} 和 $\sigma_{nn'}$ 的计算结果。从图可以看出,在 $E_n \leq 2\text{MeV}$, σ_{nn} 的理论计算低于实验值^[13],这很可能是因为在弹性散射截面的测量中没有区分第一激发态 (0.00622MeV) 的贡献引起的。同样的理由,而 $\sigma_{nn'}$ 的计算结果仍与由分立能级求和得到的总的非弹性散射截面^[13,14]比较,有偏高的趋向。 σ_{non} 仅有 5 个实验点,但理论计算曲线落在实验值的误差范围之内^[15]。

$\sigma_{n,2n}$ 的计算主要通过调节 PEM 中激子态跃迁参数 DK 使之和 $\sigma_{nn'}$ 有合适的分配比。由于在平衡前发射中,高能中子占主要成份,因此,余核处于低激发态通过发射 γ

而退激的几率增大,即增大了 $\sigma_{nn'}$,使发射二个或三个中子的几率减小.可见调节 DK 可以调整各反应道的分配比,从而影响激发函数的大小和形状.本工作通过调试后,取 $DK = 290$ 时, $\sigma_{nn'}$, $\sigma_{n,2n}$ 和 $\sigma_{n,3n}$ 得到了令人满意的结果.由图 3 可以看出,计算的 $\sigma_{n,2n}$, $\sigma_{n,3n}$ 与 Frehaut^[16] 和 Vesser^[17] 的测量值符合很好.另外本工作的结果也明显地好于 ENDF/B-VI^[8] 的评价结果.

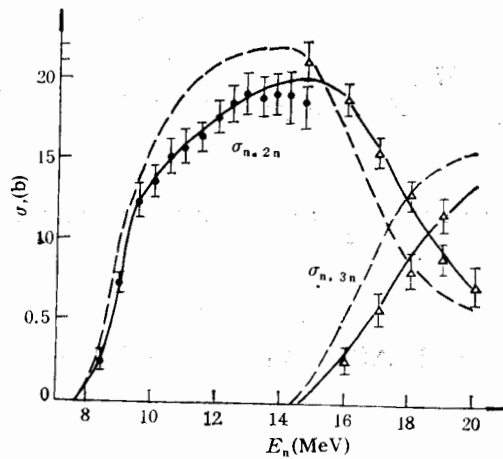


图 3 $\sigma_{n,2n}$, $\sigma_{n,3n}$ 的理论计算结果与实验值的比较

●[16] △[17] ——[8] ——本工作

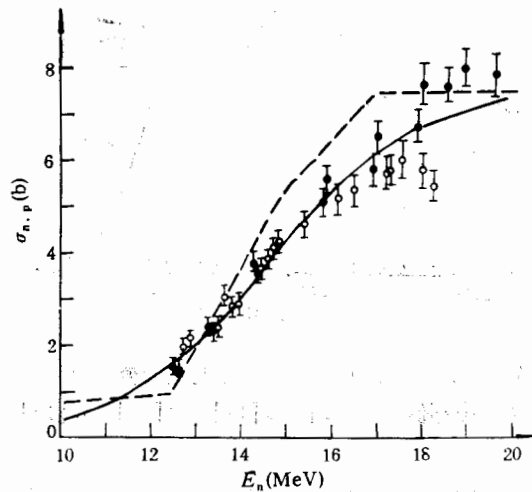


图 4 $\sigma_{n,p}$ 的理论计算结果与实验值比较

●[18] ○[19] ——[8] ——本工作

$\sigma_{n,p}$ 的计算结果示于图 4. 可以看出在 $E_n \leq 17\text{MeV}$ 时,计算结果与 Woelfle^[18] 等人的测量值符合很好,但是在 17MeV 以上,理论曲线系统地偏低.这可能是由于受到 MUP2 程序的限制,平衡前发射分量考虑不够所致.因为在调节 DK 时,还必须考虑到 $\sigma_{n,x}$ 对 $\sigma_{n,0n}$ 的贡献,可见参数 DK 的制约性很大.改进激子模型,增加平衡前发射带电

粒子的几率,可以改善高能端 $\sigma_{n,x}$ 激发函数的形状。文献 [19] 的测量值在高速时下降过快,而 ENDF/B-VI^[6] 限于当时条件,所给结果的任意性也较大。

通过调节巨偶极共振峰参数可以调节辐射俘获截面的大小和形状以达到与实验值相一致的结果。本工作计算的 $\sigma_{n,r}$ 在 $E_n \leq 3\text{MeV}$ 时与实验值^[20-22]符合较好;但当 $E_n > 3\text{MeV}$ 时,由于缺乏实验数据,理论计算的不确定性稍大些。不过在较低能区 $\sigma_{n,r}$ 的值很小,仅为几个 mb 左右。

弹性散射角分布计算结果与实验值^[23,24]的比较见图 5 所示。如前所述,计算是通过自动调节光学势参数来实现的。对于低能中子两者符合是好的。入射中子能量较高时,由图可以看出理论曲线明显地出现深谷,8.05 和 14.6MeV 的曲线尤为突出。原因可能是,在实验上直接非弹和弹性散射没有区分开来。因此,利用球形光学势进行计算时就容易产生“深谷”现象。如果应用耦合道光学势计算,这些深谷或许会被直接非弹性散射填平。

对于其它包括 $\sigma_{n,x}, \sigma_{n,n'}(x = p, t, {}^3\text{He}, d, \alpha)$ 反应在内的截面,角分布和能谱的计算,由于缺乏实验数据,其结果直接由上述的理论计算给出。

综上所述,本工作的理论计算结果与实验值符合较好,这表明:OPM,WHF 和 PEM 理论模型有一定的适用性和可靠性。同时,配合 AUJP 和 MUP2 程序的计算,基本上可以满足核能工程对核数据的需求。进一步的工作是采用改进的激子模型和耦合道光学势,可以期望对 (n, x) 反应截面及弹性散射角分布的计算将会有明显的改善。

作者对南开大学蔡崇海等同志在计算中给予的大力支持和热忱帮助表示诚挚的感谢。

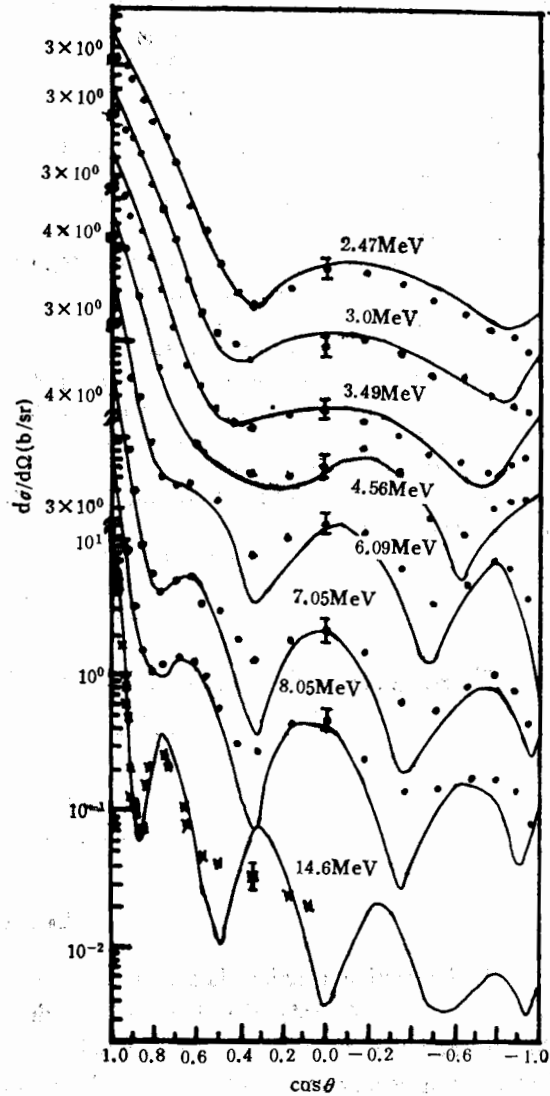


图 5 ^{181}Ta 弹性散射角分布计算结果与实验值的比较

● [23] × [24] — 本工作

参 考 文 献

[1] 周宏模等, AUJP (内部资料, CNDC0011, 1989).

- [2] 蔡崇海等, MUP2 (内部资料, CNDC0013, 1989).
- [3] 姚立山, 中国核数据库第二版, (CENDL-2, MAT = 2730, 1989).
- [4] B. Berman et al., *Rev. Mod. Phys.*, **47**(1975), 713.
- [5] A. Gilbert et al., *Can. J. Phys.*, **43**(1965), 1446.
- [6] Su Zongdi et al., INDC(CPR)-2/Distr: G, (1985).
- [7] C. Perey et al., *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **17**(1976)1.
- [8] R. J. Howerton et al., ENDF/B-VI, MAT=7328, (1990).
- [9] W. P. Poenitz et al., ANL-NDM-80, (1983).
- [10] W. P. Poenitz et al., *Nucl. Sci. and Eng.*, **78**(1981), 333.
- [11] E. Islam et al., *Nucl. Phys.*, **A-209**(1973), 189.
- [12] D. G. Foster et al., *Phys. Rev.*, **C-3**(1971), 576.
- [13] A. B. Smith et al., ANL-7363, (1967).
- [14] V. C. Rogers et al., *Nucl. Sci. and Eng.*, **45**(1971), 297.
- [15] R. O. Owens et al., *Phys. Rev.*, **112**(1968), 337.
- [16] J. Frehaut et al., 80BNL., (1980) 399.
- [17] L. R. Veesser et al., *Phys. Rev.* **C-16**(1977), 1792.
- [18] R. Woelfle et al., *Appl. Radiat. Isot.*, **39**(1988), 407.
- [19] Lu Hanlin et al., *Chinese Nucl. Phys.*, **4**(1982), 272.
- [20] J. Voignier et al., *Nucl. Sci and Eng.*, **93**(1986), 43.
- [21] R. L. Macklin, *Nucl. Sci and Eng.*, **86**(1984), 362.
- [22] Xu Haishan et al., INDC(CPR)-011/G1, (1988), 141.
- [23] B. Holmqvist et al., AE-430, (1971).
- [24] W. G. Cross et al., *Phys. Rev.*, **15**(1960), 155.

Theoretical Calculation of a Complete Set of the Neutron Reaction Data for Ta-181

YAO LISHAN

(Lanzhou University, 730001)

ABSTRACT

The interaction reaction data of neutron with Tantalum have been calculated by means of the optical model (OPM), the Hauser-Feshbach theory with width fluctuation correction (WHF) and the evaporation model including the pre-equilibrium emission (PEM) in the incident neutron energy range between 1 to 20 MeV. The calculated results compared with the experimental values, and a good agreement has been obtained.