

能量到250MeV质子入射Pb, Bi, Hg反应 出射粒子能谱的理论研究*

张正军^{1,2;1)} 韩银录³ 申庆彪³ 蔡崇海⁴

1 (西北大学物理系 西安 710069)

2 (中国科学院西安光学精密研究所 西安 710068)

3 (中国原子能科学研究院 北京 102413)

4 (南开大学物理系 天津 300071)

摘要 在光学模型、预平衡激子模型、蒸发模型、核内级连、PICK-UP机制等理论的基础上,对入射能到250MeV质子入射中重核²⁰⁴Pb, ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb, ²⁰⁹Bi, ¹⁹⁶Hg, ¹⁹⁸Hg, ¹⁹⁹Hg, ²⁰⁰Hg, ²⁰¹Hg, ²⁰²Hg和²⁰⁴Hg反应进行了系统的计算,重点对出射粒子能谱进行了仔细的研究.结果表明,能量较高时预平衡反应机制占主导地位,出射粒子的能谱形状在很大程度上决定于激子模型参数DK和激子态密度,本文给出了能量相关的单粒子态密度修正经验公式;考虑了PICK-UP机制后复杂粒子(α , D, T, ³He)的能谱有很大改善.

关键词 能谱 中高能核反应 核数据 理论计算 洁净核能

1 引言

加速器驱动的洁净核能源系统ADS (Accelerator-Driven clean nuclear energy System)是被当今核物理学科广泛关注的领域.围绕该课题不同的国家及地区都在进行着广泛的研究,中国从1995年开始概念性预研以来也取得了不少进展^[1].洁净核能系统是一个次临界反应系统,它需要连续的外中子源来驱动反应堆,所以外中子源在ADS中是一个重要的部分.该部分是通过中高能强流质子轰击Pb, Bi, W, Hg等重金属靶而产生大量中子来驱动次临界反应堆.因此中高能核反应微观理论显得特别重要,因为微观反应数据是反应堆设计,防护设计以及材料损伤研究的基础,只有微观反应数据合理可信,以蒙卡模拟为核心的设计程序结果才是可信的.

当前中高能微观核反应理论及计算还不能满足核装置设计需要.由于宽能区纯理论计算的困难,国外在评价中高能核数据时往往采用系统学或经验公式,或分段用不同的理论和程序进行预言,或直接拟合实

验数据.美国加速器驱动核能系统数据库LA150库就具有这种特点^[2, 3].我国以加速器驱动的洁净核能系统为中心的中高能反应理论数据主要采用比较严格的系统理论计算,并取得了一些很好的结果^[1, 4-6].这些工作利用光学模型、激子模型、蒸发模型及扭曲波玻恩近似等理论模型进行理论计算,给出中子反应道截面、剩余核产生截面、出射粒子的多重数及长寿命产物产生截面等.

在光学模型、预平衡激子模型、蒸发模型、核内级连、PICK-UP机制等理论的基础上,对入射能到250MeV质子入射中重核²⁰⁴Pb, ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb, ²⁰⁹Bi, ¹⁹⁶Hg, ¹⁹⁸Hg, ¹⁹⁹Hg, ²⁰⁰Hg, ²⁰¹Hg, ²⁰²Hg和²⁰⁴Hg反应进行了系统的计算,重点对出射粒子能谱进行了仔细的研究.La150评价库中能量上限到150MeV,该库给出的是评价结果,且复杂粒子的能谱高能段明显偏低.本工作在理论计算中考虑了复杂粒子发射的PICK-UP机制^[7],使得带电粒子能谱有了极大的改善.本工作另一个特点是对多个核的同时研究,同时理论和参数适应于上限到250MeV的整个能区,

2006-09-15 收稿, 2006-11-24 收修改稿

* 国家重点基础研究发展规划项目(G1999022603),中国博士后基金和国家自然科学基金(10347140)资助

1) E-mail: zhangzj@nwu.edu.cn

系统的得到上限到250MeV的全套自恰的微观数据.

2 相关理论模型及参数

本工作主要利用以光学模型、预平衡激子模型、蒸发模型、Hauser-Feshbach平衡态统计理论、核内级连级、复杂粒子发射的PICK-UP机制等理论为框架的MEND程序全套反应数据进行具体理论计算^[8].

光学模型中用复数势来描述入射粒子与靶核相互作用, 入射粒子在靶核形成的平均势场中被散射和吸收. 由光学模型理论计算是一个包含有许多成分的位势, 如实部、虚部、自旋轨道耦合势和库仑势等. 通过薛定谔方程加边界条件解出出射波函数, 给出反应截面, 弹性散射角分布, 以及各次发射计算中的逆截面.

本工作中总的光学模型势为

$$V = V_r + i[W_s + W_v] + V_{so} + V_c, \quad (1)$$

其中实部光学势:

$$V_r = - \left(V_0 + V_1 E_p + V_2 E_p^2 + \frac{V_3(N-Z)}{A} + \frac{V_4 Z}{A^{1/3}} \right) f_r(r), \quad (2)$$

虚部体吸收势:

$$W_v(r) = -(U_0 + U_1 E_p + U_2 E_p^2) f_v(r), \quad (3)$$

虚部表面吸收势:

$$W_s(r) = \left(4W_0 + W_1 E_p + W_2 \frac{(N-Z)}{A} \right) \frac{df_s(r)}{dr}, \quad (4)$$

自旋轨道耦合势:

$$V_{so}(r) = \frac{2U_{so}}{r} \frac{df_{so}(r)}{dr} [j(j+1) - l(l+1) - s_b(s_b+1)], \quad (5)$$

库仑势:

$$V_c(r) = \begin{cases} 0.720448 \frac{Z_b Z}{R_c} \left(3 - \frac{r^2}{R_c^2} \right), & r < R_c, \\ 1.440975 \frac{Z_b Z}{r}, & r \geq R_c, \end{cases} \quad (6)$$

其中 A 和 Z 为靶核的质量数和电荷数, j 和 l 分别是靶核的总角动量和轨道角动量, s_b 和 Z_b 为入射粒子的自旋和电荷, E_p 为质子入射能量. 其中形状因子:

$$f_i(r) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{(r - R_i)}{a_i} \right]}, \quad i = r, s, v, so, \quad (7)$$

r, s, v, so 分别代表实部、面吸收、体吸收和自旋轨道耦合. 所有的光学势半径参数及 R_c 为

$$R_i = r_i A^{1/3}, \quad i = r, s, v, so, c, \quad (8)$$

r_r, r_s, r_v, r_{so} , 库仑半径 r_c , 光学势扩散宽度 $\alpha_r, \alpha_v, \alpha_s, \alpha_{so}$ 和能量相关项系数 $V_0, V_1, V_2, V_3, V_4, W_0, W_1, W_2, U_0, U_1, U_2$ 在理论上都是常数, 对不同的核可在物理意义允许的范围内调节. 由(3), (4)式给出的体吸收势和面吸收势如是正值则令其为零. 本文中能量的单位为MeV, 长度的单位为fm.

利用APMN调光参程序^[9], 系统的对质子入射核的光学模型势参数进行了研究, 得到了质子入射Pb, Bi, Hg, Au, W, Ta等重荷入射能量到500MeV的质子光学模型势参数. 质子入射Bi, Pb, Hg各同位素的质子光学势参数如下:

$$\begin{aligned} V_0 &= 49.50929, & V_1 &= -0.28002, & V_2 &= 0.00050, \\ V_3 &= 30.62548, & V_4 &= 0.27311, \\ U_0 &= 0.45100, & U_1 &= 0.00002, & U_2 &= -0.00049, \\ W_0 &= 6.68560, & W_1 &= 0.01370, & W_2 &= 6.47295, \\ U_{so} &= 6.20000, \\ r_r &= 1.21017, & r_v &= 1.59043, & r_s &= 1.09763, \\ r_{so} &= 1.21017, & r_c &= 1.22317, \\ a_r &= 0.78807, & a_v &= 0.30259, & a_s &= 0.71224, \\ a_{so} &= 0.78807. \end{aligned}$$

图1给出了光学模型计算的 $p+^{209}\text{Bi}$, $p+^{208}\text{Pb}$, $p+^{202}\text{Hg}$ 的反应截面理论曲线与 $p+^{208}\text{Pb}$, $p+^{\text{Nat}}\text{Pb}$ 反应的实验数据的比较^[6]. 在60MeV以下主要是质子打 $^{\text{Nat}}\text{Pb}$ 的实验数据, 从图可看到理论结果很好地再现了这部分实验数据. 在60—500MeV能区主要是 $p+^{208}\text{Pb}$ 的实验数据. 这些实验数据比较分散. 对 ^{208}Pb 的实验数据分布趋势及 $^{\text{Nat}}\text{Pb}$ 的实验误差方面综合分析, 可以看出理论计算结果是可靠的. 同时在图1中也给出了 $p+^{209}\text{Bi}$, ^{202}Hg 反应截面的理论预言, 结果表明质子入射铅、铋、汞的反应截面是很相近的.

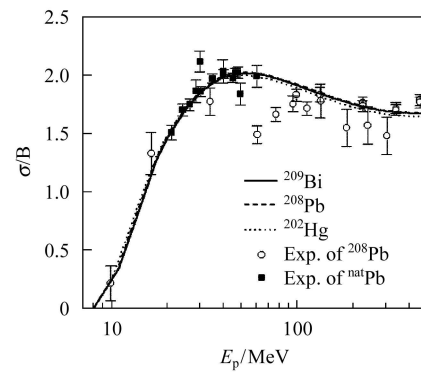


图1 $p+^{209}\text{Bi}$, $p+^{208}\text{Pb}$, $p+^{202}\text{Hg}$ 的反应截面理论曲线实验数据的比较

图2是质子入射能在 $E_p = 30.8^{[10]}$, $61.4^{[11]}$, $156^{[12]}$, $201^{[13]}$, $300^{[14]}$, $400^{[14]}$ MeV 的弹性散射角分

布的理论结果与实验数据的比较. 实验数据在 EXFOR 实验数据库中也可以找到. 弹性角分布数据比较多, 有些数据之间还有一些分歧, 使用这些数据时需要系统地分析评价并加以排除.

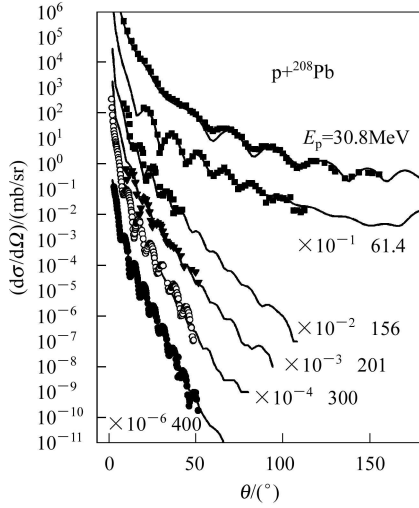


图 2 弹性散射角分布的理论结果与实验数据的比较

直接非弹散射截面用基于扭曲波玻恩近似理论的 DWUCK4 程序进行计算. 裂变截面有较多的实验数据, 但由于还没有较实用的模型理论再现实验数据, 本文用系统学公式拟合实验数据得到裂变截面. 预平衡反应用激子模型处理, 平衡态发射用蒸发模型处理, 粒子发射最多考虑到 18 次发射. 在一次、二次和三次粒子发射过程中, 如果发射的是复杂粒子 (D, T, He, α), PICK-UP 机制被包括在计算中.

计算中发现中高能反应中预平衡机制占主要贡献, 很大程度上决定了各次粒子发射截面及能谱的软硬. 目前中高能反应的理论模型计算还很不成熟, 我们对激子模型理论中的重要参数激子模型参数 DK 和单粒子态密度 g 进行了研究, 基本上能解决能谱偏软的问题. 由 p 个粒子, h 个空穴, 质子数位 Z , 质量数位 A , 激发能为 U 的复合核系统 ($Z, A, U, n = p + h$) 的 n 激子态跃迁到 $n+2$ 激子态的几率为

$$\lambda_+(Z, A, U_e, n) = \frac{2\pi}{h} \frac{|M|^2}{2(n+1)} \frac{g(gU_e - A(p, h))^2}{4.772868} \frac{DK}{n+1} \frac{g(gU_e - A(p, h))^2}{A^3 U_e}, \quad (9)$$

其中 DK 为激子模型参数, 在一定程度上决定的预平衡和平衡发射的份额分配, 在不同的能量应选取不同的值. 能量高时应减小 DK 值以增大预平衡贡献, 使得出射粒子能谱更硬. 我们的经验值为 $E_p=20\text{MeV}$ 时, $DK=900\text{MeV}^{-3}$, $E_p=250\text{MeV}$ 时, $DK=200\text{MeV}^{-3}$.

同时, 激子态密度取以下形式:

$$\omega(Z, A, U_e, p, h) = \frac{g(gU_e)^{h'} (gU_e - A(p, h))^{p'-1}}{p!h!(p+h-1)!} f(U_e), \quad (10)$$

当阶乘变数为负或 $gU_e \leq A(p, h)$ 时, 令 $\omega(Z, A, U_e; p, h)=0$. 这里 g 是单粒子态密度, 低能反应中取 $g = A/13$, 为了解决宽能区能谱问题, 本工作中单能级密度公式取为激发能 U_e 相关. 具体形式为:

$$g(U_e) = \frac{g_0(1 - e^{-U_e \times ccg1})}{U_e \times ccg1}, \quad (11)$$

$g = A/13$, $ccg1 = 0.005$. 通过选取适当的 DK 和 $ccg1$ 可以得到入射能从阈能到 250 MeV 能量段里系统合理的中子和质子能谱结果. 式中能量单位为 MeV. 如果只计算单个能点或很窄的能量范围出射粒子能谱, 通过调整这两个参数可以得到和实验数据符合的结果.

复杂粒子能谱的理论计算很不成熟, 最新的结果是美国 La150 库, 是由美国 Los Alamos 国家实验室完成^[2], 其中复杂粒子的能谱在高端段太低, 存在数量级程度的差异. 我们考虑了复杂粒子发射的 PICK-UP 机制, 使得能谱有了明显改善, 在形状和数量级上达到可以和实验数据进行比较.

3 (p, kpn) 反应道的截面规律

图 3 是质子入射 ^{202}Pb 反应 (p, kn) 反应道的反应截面, $k=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. 所有 (p, kn) 之间竞争很明显, 当 (p, kn) 反应道开后, ($p, (k-1)n$) 反应道立即减小, 并且在质子入射能高于 50 MeV 后, 所有 (p, kn) 截面之和也减小, 这是因为 (p, pkn) 反应道在质子入射能高于 50 MeV 后, 竞争处于主要地位.

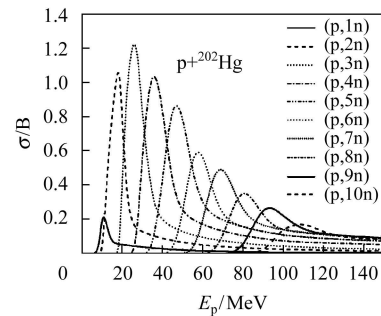


图 3 ^{202}Hg (p, kn) 反应道的反应截面

图 4 是质子入射 ^{202}Hg 反应 (p, pkn) 反应道的反应截面, $k=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. 图中给出的曲线, 实际上是剩余核的产生截面. 例如, ($p, p2n$) 的截面曲线实际还包含着 (p, dn) 和 (p, t) 反应道的截面. 但是从理论计算结果看, 复杂粒子发射截面远远小于中子

和质子的发射截面. 所以我们在分析中子发射截面曲线规律时, 将其看作为发射一个质子和 k 个中子的截面曲线. 从图中可以看到, 所有 (p, pkn) 之间竞争规律十分明显, 当 (p, pkn) 反应道开后, $(p, p(k-1)n)$ 反应道立即减小. 这在理论上是很合理的.

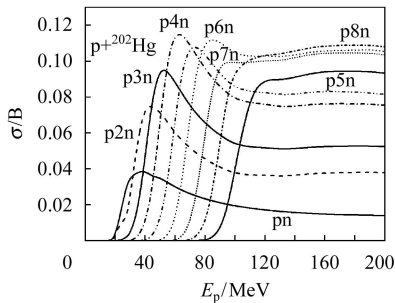


图4 ^{202}Hg (p, pkn) 反应道的反应截面

对质子入射 ^{204}Pb , ^{206}Pb , ^{207}Pb , ^{208}Pb , ^{209}Bi , ^{196}Hg , ^{198}Hg , ^{199}Hg , ^{200}Hg , ^{201}Hg , ^{202}Hg 和 ^{204}Hg 等靶核的反应, 同样体现出这些规律. 并且在质子入射能大于100MeV后, $(p, 2pkn)$ 反应道截面将随入射能增大, (p, kn) (p, pkn) 反应道截面明显减小. 这是因为入射能量越高, 由预平衡态到稳定态过程中发射次数越多、发射粒子的数目也越多, 同时剩余核不可能偏离稳定线太远. 对 (p, kn) 和 (p, pkn) 反应道, 随着 k 的增大, 开道后的最大峰减小, 截面曲线逐渐平缓, 这是因为随着激发能的增大, 很多反应道同时打开, 不同道之间的竞争相对均衡所产生的结果.

4 次级粒子发射能谱

ADS靶设计, 不但需要发射中子的截面, 还必须了解出射粒子的能谱, 特别是中子谱. 只有明确了中子出射能谱后, 才能研究靶的形状、能量沉积、散热以及次临界堆中的中子慢化等一系列重要问题. 本工作对粒子出射谱进行了计算.

对所计算的反应实验数据检索发现质子入射重金属核的出射粒子能谱实验数据相对较少. $p+^{208}\text{Pb}$ 反应的中子出射谱只找到了入射能在45MeV以下的几组实验数据, 计算结果和实验数据符合很好, 由于低能处能谱计算相对容易, 这里不做太多讨论. 能量较高时, 在 $E_p=90\text{MeV}$ 处找到一家 $p+^{209}\text{Bi}$ 反应的实验数据. 由此也可见理论计算是十分必要的.

图5给出了质子打 ^{202}Hg 反应在质子入射能 $E_p=150\text{MeV}$ 的各种粒子出射总谱理论曲线, 图中 x 坐标是出射粒子的能量. 质子与Pb, Bi和Hg的其他核素反应粒子发射谱曲线相近. 中子谱在低能处的峰

对应蒸发模型描述的平衡发射, 在这个衰变过程主要是通过发射能量较低的中子退激. 能量较高且范围很宽(图中 $10\text{MeV} < E_n < 150\text{MeV}$)的区域主要是预平衡发射机制, 理论上是因为在到达平衡态的过程中, 能量集中在部分粒子上容易发射高能量粒子. 具体计算中得到的数据也证明这样的结论. 图中质子能谱曲线表明, 平衡态发射质子的几率要远小于发射中子, 而预平衡发射区和中子很相近. 图中质子谱曲线在 $E_p=150\text{MeV}$ 处很高的峰是直接反应的贡献, 这个峰的积分大小就是直接非弹散射截面(用DWUCK4进行计算), 峰的展宽可根据实验数据进行调解. 复杂粒子(α , D, T, ^3He)在考虑PICK-UP机制后, 能谱比简单的预平衡发射明显变硬.

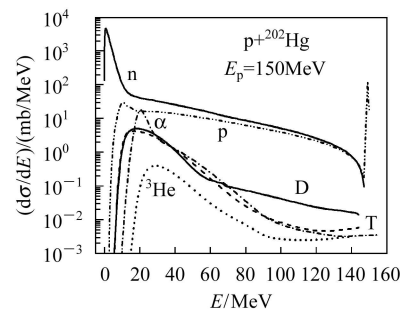


图5 $p+^{202}\text{Hg}$ 反应的粒子出射总谱理论曲线

中子出射能谱对核设计是个重要的物理量. 图6给出质子打 ^{209}Bi 反应的中子出射总谱, 实验数据取自EXFOR实验数据库. 图中 x 坐标是中子出射能. 通过对计算的分析发现, 复合核平衡发射机制发射的中子能量较低, 出射能15MeV以下主要是平衡态蒸发机制的贡献, 15MeV以上主要是预平衡机制的贡献.

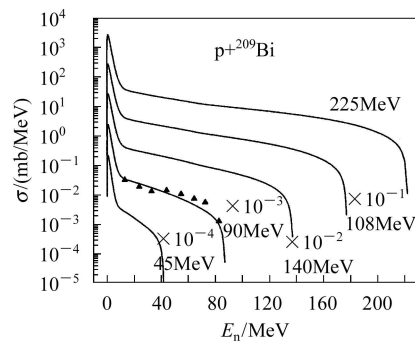


图6 $p+^{209}\text{Bi}$ 反应的出射中子能谱

入射能量从几个MeV到250MeV很宽的范围要得到截面和能谱都同时自恰比较困难, 将单能级密度公式做成如(11)式能量相关在理论上是合理的, 同时对大范围能区数据的计算带来很大的方便. 通过选取适当的激子模型参数 DK 和单粒子能级密度参数 $cqg1$

可以得到入射能从阈能到 250MeV 能量段里系统基本合理的中子和质子能谱结果. 如果只计算单个能点或较窄的能量范围出射粒子能谱, 通过调整这两个参数可以得到和实验数据符合很好的结果. 这两个参数有以下规律: DK 越大向平衡态过渡越快, 谱越软; $ccg1$ 越大, 低激发能态密度相对越大, 谱越硬. 通过计算 $ccg1$ 取值在 0 到 0.01 比较合理, 当 $ccg1=0$ 时, 回到等间隔单粒子模型.

5 小结

本文对质子能量由阈能到 250MeV 入射 ^{204}Pb , ^{206}Pb , ^{207}Pb , ^{208}Pb , ^{209}Bi , ^{196}Hg , ^{198}Hg , ^{199}Hg , ^{200}Hg , ^{201}Hg , ^{202}Hg 和 ^{204}Hg 反应全套数据进行了系统计算, 尤其是计算了各种粒子发射谱. 在入射能量比较高时

主要是与平衡机制的贡献, 各次粒子发射截面和粒子发射能谱主要由表征预平衡机制的激子模型给出. 在激子模型中激子态密度决定了各次粒子发射几率. 计算较宽的能区里等间隔单能级密度模型很难给出满意的结果, 将等间隔单能级密度修改为能量相关在理论上是合理的, 同时可以得到相对较好的结果. 复杂粒子的能谱需要考虑 PICK-UP 机制.

在较宽能量范围内计算全套数据比低能和个别能点的计算要复杂, 需要考虑整个能区数据的自恰和理论参数的合理. 进一步的研究还很有必要, 特别是复杂粒子的能谱和出射粒子的双微分截面的理论计算还需进一步改进.

感谢王宽城博士后基金支持.

参考文献(References)

- DING Da-Zhao. A New Option for Exploitation of Future Nuclear Energy—Accelerator Driven Radioactive Clean Nuclear Power System. In: ZHAO Zhi-Xiang ed. A Corpus on Conceptual Research on Accelerator Driven Radioactive Clean Nuclear Power System. Beijing: Nuclear Energy Press, 2000.3(in Chinese)
(丁大钊. 未来核能利用的方案探讨——加速器驱动放射性洁净核能系统. 见: 赵志祥. 加速器驱动放射性洁净核能系统概念研究论文集. 北京: 原子能出版社, 2000.3)
- Chadwick M B, Young P G, Chiba S et al. Nucl. Sci. and Eng., 1999, **131**: 293
- YONG P G, Chadwick M B. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Trieste, 1997, **59**: 1468
- ZHANG Zheng-Jun, SEHN Qing-Biao, HAN Yin-Lu et al. HEP & NP, 2002, **26**(6): 600—606 (in Chinese)
(张正军, 申庆彪, 韩银录等. 高能物理与核物理, 2002, **26**(6): 600—606)
- ZHANG Zheng-Jun, SUN Xiu-Quan, CAI Chong-Hai et al. Nuclear Science and Engineering, 2003, **143**(1): 90—98
- HAN Yin-Lu, ZHANG Zheng-Jun. Nucl. Phys., 2005, **A753**: 53—82
- Iwamoto A, Harada K. Phys. Rev., 1982, **C26**: 1821; ZHANG J, YAN S, WANG S et al. Commun. Theor. Phys., 1988, **10**: 33; SHEN Qing-Biao. Nucl. Sci. and Eng., 1994, **117**: 99
- CAI Chong-Hai. Nucl. Sci. and Eng., 2006, **153**(1): 93—97
- SHEN Qing-Biao. Nucl. Sci. and Eng., 2002, **141**: 78—81
- Ridley W D, Forster H H, Gigas G G. Nucl. Phys., 1962, **35**(4): 617—624
- Fulmer C B, Ball J B, Scott A et al. Phys. Rev., 1969, **181**(4): 1565—1579
- Comparat V, Frascartria R, Marty N et al. Nucl. Phys., 1974, **A221**(2): 403—413
- Djalali C, Marty N, Morlet M et al. Nucl. Phys., 1982, **A380**: 42—60
- Hutcheon A D, Cameron J M, Liljestrang R P. C 80santa Fe, 1980, 454

Studies on Energy Spectra of Outgoing Particles in (p,Pb), (p,Bi), (p,Hg) Reactions in Energy Range up to 250MeV^{*}

ZHANG Zheng-Jun^{1,2;1)} HAN Yin-Lu³ SHEN Qing-Biao³ CAI Chong-Hai⁴

1 (Department of Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China)

2 (Xi'an Institute of Optics and Precisions Mechanics, Xi'an 710068, China)

3 (China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

4 (Department of Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China)

Abstract Reactions of bombarding important target materials in the Accelerator Driven System (ADS), such as ²⁰⁴Pb, ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb, ²⁰⁹Bi, ¹⁹⁶Hg, ¹⁹⁸Hg, ¹⁹⁹Hg, ²⁰⁰Hg, ²⁰¹Hg, ²⁰²Hg and ²⁰⁴Hg etc., with protons are calculated in terms of the optical model, the intra-nuclear cascade mechanism for nucleon emission, the pre-equilibrium theory based on exciton model, the evaporation model, the pick-up mechanism and the direct reaction theory in the energy range up to 250MeV. In particular, the cross sections of the (p, kn), and (p, kpkn) reactions and the spectra of particle emissions are studied. The calculations show that the pre-equilibrium (including cascade) mechanism is much stronger than the other mechanisms in the higher energy region. The parameter *DK* of the exciton model and *ccg1* in the single particle energy density dominate the shapes of the cross section curves of the (p, kn) and (p, kpkn) reactions and the energy spectra of emitting protons and neutrons. The pick-up mechanism plays an important role in emitting composite particles (α , D, T, ³He).

Key words energy spectrum, medium-high energy nuclear reaction, microscopic nuclear data, theoretical calculation, clean nuclear energy system

Received 15 September 2006, Revised 24 November 2006

^{*} Supported by China Ministry of Science and Technology(G1999022603), China Postdoctoral Science Foundation and NSFC (10347140)

1) E-mail: zhangzj@nwu.edu.cn