

文章编号: 1007-4627(2014)02-0242-06

质子与 ^{52}Cr 反应数据理论计算与分析

潘 晖^{1, 2}, 赵耀林¹, 韩银录²

(1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049;

2. 中国原子能科学研究院国家核数据重点实验室, 北京 102413)

摘要: 在质子与 ^{48}Ti , ^{51}V 和 ^{52}Cr 反应的去弹截面、弹性散射角分布实验数据的基础上, 获得了一组入射质子能量在 150 MeV 以下的质子与 ^{52}Cr 反应的光学势参数。应用光学模型、扭曲波玻恩近似理论、核内级联模型、蒸发模型、带宽度涨落修正的 Hauser-Feshbach 理论以及激子模型(含改进的 Iwamoto-Harada 模型)计算得到了质子与 ^{52}Cr 反应的所有截面、角分布、能谱和双微分截面。对理论计算结果与实验数据以及 TENDL 中的数据进行了比较分析, 结果显示, 理论计算结果与实验数据符合较好, 且反应道截面优于 TENDL 的结果。

关键词: 光学模型; 截面; 角分布; 能谱; 双微分截面

中图分类号: O571.42+2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.31.02.242

1 引言

核反应数据是核工程和核技术应用的基础数据, 在核反应堆的燃料循环、堆芯设计、反应堆检测和退役等诸多领域的科学计算与设计都有着广泛的应用。近年来, 随着 ADS(加速器驱动次临界清洁能源系统)技术的发展, 对核数据提出了更高的要求, 主要表现在核数据的可靠程度以及所涉及的能区(需要中高能核反应的核数据)。不锈钢是核反应堆、加速器和 ADS 等系统的重要结构材料, 铬在其中的含量一般超过 13%, 而 ^{52}Cr 在天然铬中的丰度为 83.789%, 因此研究中高能区质子与 ^{52}Cr 的反应具有重要意义和应用价值。

目前国际上已经有一些数据库包含了中高能区质子与 ^{52}Cr 反应的理论计算结果, 包括欧洲的 TENDL 数据库^[1]、德国的 PADF-2007 数据库^[2]、美国的 ENDF/B-7 数据库^[3]、日本的 JENDL/HE-2007 数据库^[4]以及俄罗斯的 MENDL-2 数据库^[5]。这些数据库并不能完全满足实际的科研或工程需要, 与实验数据符合较差。其次, 这些数据库所采

用的核反应模型程序主要有 3 个, 分别是: TALYS、GNASH 及 ALICE, 而随着核反应理论的不断发展和完善, 这 3 个核反应程序都存在着不完善的地方(详见表 1)。国内方面, 韩银录^[6]于 2004 年对入射能量从 1~250 MeV 中子与铬的反应进行了理论计算和分析, 而对于质子入射与铬反应的理论计算, 国内暂时还没有。

本文通过质子与 ^{52}Cr 及其邻近核 ^{48}Ti 和 ^{51}V 反应的去弹截面和弹性散射角分布实验数据, 通过 APMN 程序^[7]获得 150 MeV 以下质子与铬反应的光学势参数。p+ ^{52}Cr 反应的直接反应部分利用基于扭曲波玻恩近似(DWBA)理论的 DWUCK4 程序^[8]进行计算。MEND 程序^[9]包含了核内级联模型、光学模型、蒸发模型、带宽度涨落修正的 Hauser-Feshbach 理论^[10]和激子模型, 反应道截面和出射中子的能谱使用该核反应程序计算。其中在激子模型中, 对于复杂粒子(d, t, ^3He 和 α 粒子)的发射考虑了改进的 Iwamoto-Harada^[11]模型, 激子态密度公式考虑了 Pauli 原理。本文将理论计算得到的结果和现有的实验数据以及 TENDL 评价库的数据进行对比与分析。

收稿日期: 2013-06-27; 修改日期: 2013-07-06

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973计划)(2007CB209903)

作者简介: 潘晖(1986-), 男, 湖北仙桃人, 硕士研究生, 从事核科学与技术研究; E-mail: phxjtu@163.com

通信作者: 赵耀林, E-mail: zhaoyaolin@mail.xjtu.edu.cn.

表 1 质子与铬反应理论计算数据研究概况

核反应程序名	核数据库名	能量范围	数据内容	程序不足点
TALYS	TENDL(欧洲)	200 MeV 以下	反应道截面、弹性散射角分布、非弹散射角分布, 出射六种粒子的双微分截面	1. 激子模型中未考虑改进的 Iwamoto-Harada 模型; 2. 能谱和双微分截面采用系统学公式; 3. 光学势采用普适光学势。
	PADF-2007 (德国)	150 MeV 以下	去弹截面和出射中子双微分截面	
GNASH	ENDF/BII (美国)	150 MeV 以下	反应道截面、弹性散射角分布, 出射六种粒子双微分截面	1. Hauser-Feshbach 理论未考虑宽度涨落修正; 2. 激子模型未考虑角动量-宇称相关性和改进的 Iwamoto-Harada 模型; 3. 双微分截面采用系统学公式
	JENDL/HE-2007 (日本)	3000 MeV 以下	反应道截面、弹散射角分布和出射六种粒子双微分截面	
ALICE	MENDL-2 (俄罗斯)	20 MeV 以下	反应道截面和非弹散射角分布	低能区仅考虑蒸发模型。

2 核反应基本理论及模型参数

本文所采用的光学模型势为 Becchetti-Greenlees 光学势, 一般形式表示如下:

$$V(r) = V_r(r) + i[W_s(r) + W_v(r)] + [V_{so}(r) + iW_{so}(r)](\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}) + V_c(r) \quad (1)$$

式中: $V_r(r)$ 为实部中心势; $W_s(r)$ 和 $W_v(r)$ 分别为虚部面吸收势和体吸收势; $V_{so}(r)$ 和 $W_{so}(r)$ 分别为自旋-轨道耦合势实部和虚部; $V_c(r)$ 为库仑势; \mathbf{s} 为入射粒子自旋角动量; \mathbf{l} 为轨道角动量。

Woods-Saxon 形状因子 $f_i(r)$ [12] 形式为

$$f_i(r) = \left[1 + \exp \frac{r - R_i}{a_i} \right]^{-1} \quad (i = r, v, s, so) \quad (2)$$

光学势表达式(1)中各项如下:

实部中心势的形式为

$$V_r(r) = -V_r(E)f_r(r) \quad (3)$$

虚部面吸收势为

$$W_s(r) = -4a_s W_s(E) \frac{df_s(r)}{dr} \quad (4)$$

虚部体吸收势为

$$W_v(r) = -W_v(E)f_v(r) \quad (5)$$

自旋-轨道耦合势实部为

$$V_{so}(r) = \frac{2V_{so}}{a_{so}r} \frac{df_{so}(r)}{dr} \quad (6)$$

自旋-轨道耦合势虚部为

$$W_{so}(r) = \frac{2W_{so}}{a_{so}r} \frac{df_{so}(r)}{dr} \quad (7)$$

库仑势是具有均匀电荷密度半径为 R_c 的圆球的电势场, 其形式为

$$V_c(r) = \begin{cases} 0.720448 \frac{Z}{R_c} (3 - \frac{r^2}{R_c^2}) & r < R_c \\ \frac{1.440975Z}{r} & r \geq R_c \end{cases} \quad (8)$$

式(2)和(8)中几何半径参数为 $R_i = r_i A^{1/3}$, $i = r, s, v, so, c$, 其中 $r_r, r_s, r_v, r_{so}, r_c$ 分别是光学势中各作用势的半径。相应地, a_r, a_s, a_v, a_{so} 分别为各个势的弥散宽度, 且有 $a_k = a_{k0} + a_{k1}(N - Z)/A$, $k = s, v$ 。式(3), (4)和(5)中, $V_r(E)$, $W_s(E)$ 和 $W_v(E)$ 为能量相关项, 其具体表达式为

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

$$W_s(E) = \max \left\{ 0, W_0 + W_1 E + \frac{W_2(N - Z)}{A} \right\} \quad (10)$$

$$W_v(E) = \max \left\{ 0, U_0 + U_1 E + U_2 E^2 \right\} \quad (11)$$

其中: Z , N 和 A 分别是靶核的质子数, 中子数和质量数; E 是实验室坐标系中入射粒子能量。

通过质子与 ^{48}Ti , ^{51}V 和 ^{52}Cr 反应的去弹截面、弹性散射角分布实验数据, 利用自动调光学势参数 APMN 程序获得了一组适用于 150 MeV 以下质子与 ^{52}Cr 反应的光学势参数(具体见表 2)。中子的光学势参数取自文献[6]; 氘、氚、氦 3 和 α 粒子选用普适唯象光学势 [13-14]。

表 2 质子与 ^{52}Cr 反应的光学势参数

参数名称	参数值	参数名称	参数值	参数名称	参数值	参数名称	参数值
V_0	53.2535	W_1	-0.2426	r_r	1.1852	a_{so}	0.4203
V_1	-0.3724	W_2	10.4859	r_s	1.3087	a_{v0}	0.4946
V_2	0.00006429	U_0	-1.16175	r_v	1.3375	a_{s0}	0.75
V_3	23.1103	U_1	0.2260	r_{so}	1.01	a_{s1}	0.70
V_4	0.4215	U_2	-0.0008091	r_c	1.25	a_{v1}	0.70
W_0	11.9163	V_{so}	6.20	a_r	0.6974		

3 理论计算结果和分析

应用获得的光学势参数、DWBA 理论和核反应理论模型程序 MEND 等，我们计算了入射质子能量从反应阈值到 150 MeV 质子与 ^{52}Cr 反应的截面、角分布、能谱和双微分截面。质子与 ^{52}Cr 的去弹截面理论计算与实验数据的比较如图 1 所示，其中实线表示本次工作的计算结果，两条虚线分别表示 TENDL 和 ENDF/B7 数据库的结果，独立的点表示实验数据。实验数据中 Menet^[15] 的测量为 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的实验数据，只有一个实验点，从图可以看出本文理论计算与此实验数据符合得较好。为了更好地检验计算结果，用到了铬临近核的实验数据。图中实心圆点为 $p+^{nat}\text{Cr}$ 反应的实验数据^[16]，其他均为 $p+^{nat}\text{V}$ 反应的实验数据^[17-22]。可以看到，理论计算结果比 $p+^{nat}\text{Cr}$ 反应的实验数据高(只有一个实验点)，比 $p+^{nat}\text{V}$ 反应的实验数据略高。这种原因主要是由于 ^{52}Cr 比 ^{51}V (丰度为 99.75%) 的质量数略大的缘故，也说明理论计算是合理的。TENDL 库的计算结果与实验数据均符合不好，ENDF/B7 库属于评价后数据，其结果在计算数据基础上经过人为调整，通过了 $p+^{52}\text{Cr}$ 和 $p+^{nat}\text{Cr}$ 反应的实验数据点。

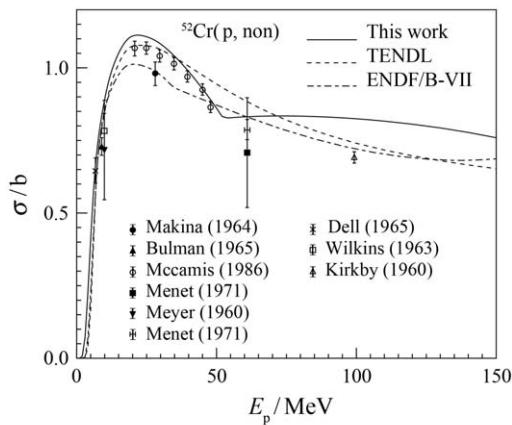


图 1 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的去弹截面

入射质子能量分别为 6.0, 10.77, 15.35, 17.5 和 65.0 MeV 时, $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的弹性散射角分布的理论计算结果与实验数据的比较如图 2 所示。图中理论结果和实验数据从上到下依次乘以 $10^0, 10^1, 10^2, \dots$ ，从图中可以看出计算得到的弹性散射角分布，无论是波峰波谷的位置还是具体数值，都与实验数据^[23-26]符合很好。

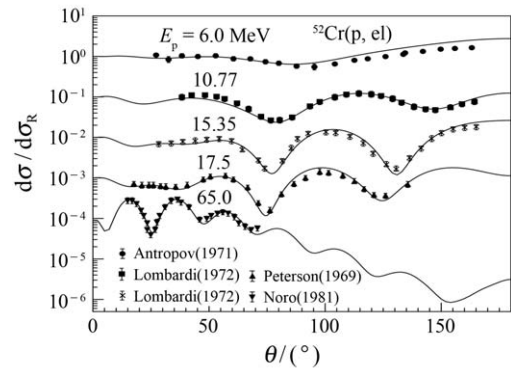


图 2 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的弹性散射角分布

入射质子能量为 65.0 MeV 时, $p+^{52}\text{Cr}$ 反应剩余核分别处于分立能级 (2.3696 MeV, 4^+)、(2.7676 MeV, 4^+)、(3.1617 MeV, 2^+)、(3.7717 MeV, 2^+) 和 (4.0329 MeV, 4^+) 的非弹散射角分布的理论计算结果与实验数据的比较如图 3 所示。用 DWBA

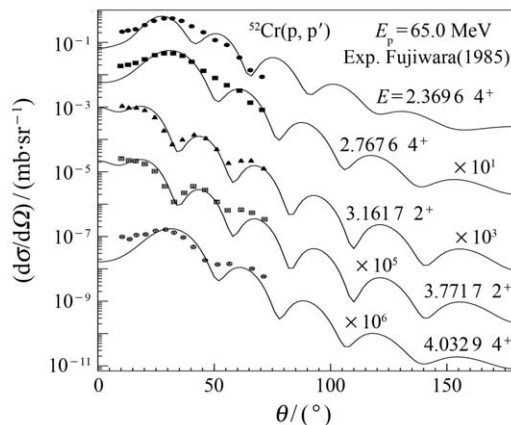


图 3 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的非弹散射角分布

方法对直接反应非弹散射进行计算, 结果与相应的实验数据^[27]一致。从图中也能看到直接反应的非弹散射具有明显的角度前倾特点, 即小角度出射的微分截面明显大于大角度出射微分截面。

利用 MEND 程序对 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应的所有反应道截面进行了计算, 其中直接反应部分由 DWUCK4 程序完成。TENDL 数据库利用 TALYS 程序对相关的反应道截面进行了计算。我们将获得的反应道截面结果与实验数据以及 TENDL 库的结果进行了对比分析。其中 $^{52}\text{Cr}(p, n)^{52}\text{Mn}$ 反应道截面的对比情况如图 4 所示。从图中可看出, 本文的理论计算结果与 Skakun^[28] 和 Levkovskij^[29] 的测量数据符合得较好, 而高于 Tanaka^[30] 测量的实验数据, 这种实验数据之间的不符合还有待进一步研究。同时 TENDL 数据库计算结果与实验数据符合得较差。

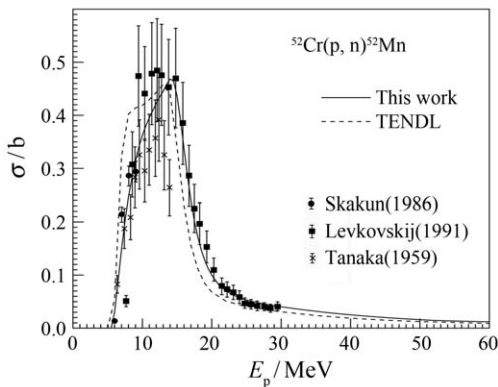


图 4 $^{52}\text{Cr}(p,n)^{52}\text{Mn}$ 反应道截面

$^{52}\text{Cr}(p, n\alpha)^{48}\text{V}$ 反应道截面的理论计算结果与实验数据的比较如图 5 所示。可以看出, 图中的实验数据主要分布在 30 MeV 以下的能区, 在此能区本文计算结果与实验数据^[29]符合得很好, 而 TENDL 数据库的结果明显低于实验数据。在 30 MeV 以上的能区, TENDL 库出现一个峰, 而本文计算结果并没有这样的现象, 这主要是因为 TENDL 库给出的计算结果为剩余核为 ^{48}V 的产物截面, 在 50 MeV 以上该产物截面含有 3 次及以上过程若干反应道的贡献, 由此可以看到图中其对应的虚线在 50 MeV 以上出现峰值。但是 50 MeV 以下, 该产物截面完全由 $^{52}\text{Cr}(p, n\alpha)^{48}\text{V}$ 反应道贡献。因此在 50 MeV 以下该产物截面可以与我们对 $^{52}\text{Cr}(p, n\alpha)^{48}\text{V}$ 反应道的计算结果进行比较。从图 4 和图 5 中, 可看出本文的理论计算结果优于 TENDL 数据库。

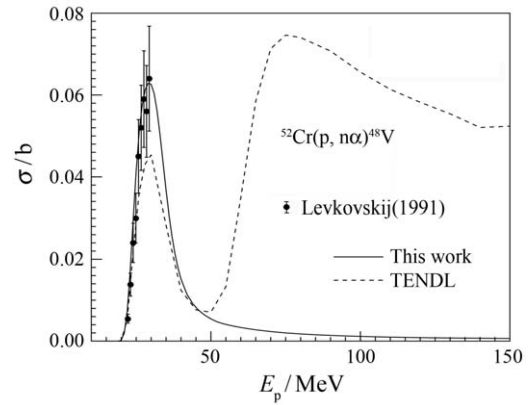


图 5 $^{52}\text{Cr}(p, n\alpha)^{48}\text{V}$ 反应道截面

在对 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应所有反应道截面计算结果与实验数据符合较好的基础上, 我们进一步计算了质子与 ^{52}Cr 反应中子出射的能谱和双微分截面。入射质子能量分别为 11.2 和 25.0 MeV 时中子出射的能谱的计算结果和实验数据的比较如图 6 所示, 计算结果与实验数据从上到下依次乘以 1 和 10。从图可以看出, 理论计算结果与实验数据^[31-33]基本符合。理论计算结果在低能发射区符合麦克斯韦分布, 属于平衡发射部分的贡献, 后面的相对平滑的“硬尾”部分, 则为预平衡反应的贡献。从图中可以看出, 入射粒子能量越大时, 预平衡反应贡献所占比例越大。

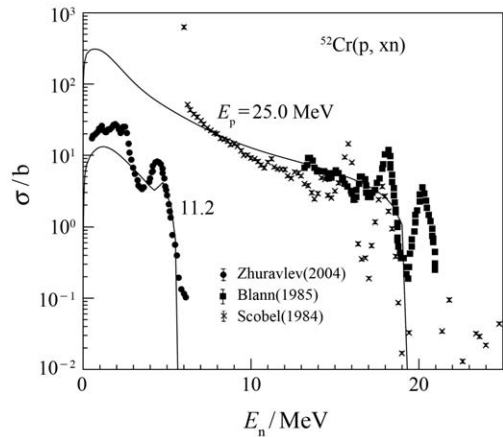
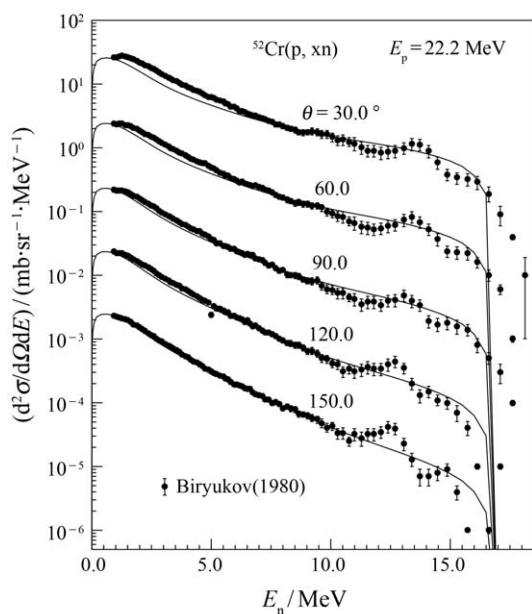


图 6 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应出射中子能谱

当入射质子能量为 22.2 MeV 时, $p+^{52}\text{Cr}$ 反应出射中子的双微分截面的理论计算结果和实验数据的比较, 如图 7 所示, 计算结果和实验数据从上到下依次乘以 $10^0, 10^1, 10^2, \dots$ 。可以看出理论计算结果与实验数据^[34]符合非常好。双微分截面来自不同反应道的贡献, 与实验数据的相符, 也验证了我们相应反应道截面计算结果的合理性。

图 7 $p+^{52}\text{Cr}$ 反应出射中子双微分截面

4 结论

基于质子与 ^{52}Cr 及其邻近核 ^{48}Ti 和 ^{51}V 反应的去弹截面和弹性散射角分布实验数据,获得了一组光学势参数。在此基础上,应用光学模型、核内级联模型、蒸发模型、带宽度涨落修正的Hauser-Feshbach理论、激子模型和DWBA理论进一步计算了质子与 ^{52}Cr 的所有反应道截面、散射角分布、出射中子的能谱和双微分截面,理论计算结果与实验数据符合较好。这说明应用这一组光学势参数,采用的核反应理论模型程序(包括:MEND和DWUCK4程序)可以合理地计算入射质子能量在150 MeV以下质子与 ^{52}Cr 的反应,从而对实验数据进行合理的内插和外推。本文理论计算结果优于TENDL数据库,可能是由于MEND程序相对TALYS程序而言,在激子模型中考虑改进的Iwamoto-Harada模型,以及本文所用的质子与 ^{52}Cr 反应的光学势参数更合理。

参考文献:

- [1] ROCHMAN D, KONING A, SUBLET J. TENDL: TALYS-Based Evaluated Nuclear Data Library [EB/OL]. [2014-05-18]. <http://www.talys.eu/tendl-2012/>.
- [2] KONOBEYEV A Y, BROEDERS C, FISCHER U, *et al.* The Proton Activation Data File PADF-2007[C]//International Conference on Nuclear Data for Science and Technology. France: EDP Science, 2007: 709.
- [3] CHADWICK M B. Nuclear Science and Engineering, 1999, **131**: 293.
- [4] WATANABE Y, FUKAHORI T, KOSAKO K, *et al.* Nuclear Data Evaluations for JENDL High Energy File[C]//Haight, Robert C. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology. Germany: Springer Verlag, 2005: 326.
- [5] SHUBIN Y N, LUNEV V, KONOBEYEV A Y, *et al.* MENDL-2P Proton reaction data library for nuclear activation (Medium Energy Nuclear Data Library) [EB/OL]. [2014-05-18]. <http://www-nds.iaea.org>.
- [6] HAN Y L. Nuclear Physics A, 2005, **748**: 75.
- [7] SHEN Q B. Nuclear Science and Engineering, 2002, **141**(1): 78.
- [8] KUNZ P D. Distorted Wave Code Wuck4. University of Colorado, 1994.
- [9] CAI C H. Nuclear Science and Engineering, 2006, **153**(1): 93.
- [10] HAUSER W, FESHBACH H. Physical Review, 1952, **87**(2): 366.
- [11] IWAMOTO A, HARADA K. Physical Review C, 1982, **26**(5): 1821.
- [12] MELKANOFF M A, NODVIK J S, SAXON D S, *et al.* Physical Review, 1957, **106**(4): 793.
- [13] HAN Y L, SHI Y Y, SHEN Q B. Physical Review C, 2006, **74**: 044615.
- [14] XU Y L, GUO H R, HAN Y L, *et al.* SCIENCE CHINA Physics, Mechanics & Astronomy, 2011, **54**(11): 2005.
- [15] MENET J, GROSS E, MALANIFY J, *et al.* Physical Review C, 1971, **4**(4): 1114.
- [16] MAKINO M, WADDELL C, EISBERG R, *et al.* Physics Letters, 1964, **9**: 178.
- [17] WILKINS B D, IGO G. Physical Review, 1963, **129**(5): 2198.
- [18] MEYER V, HINTZ N M. Physical Review Letters, 1960, **5**(5): 207.
- [19] MCCAMIS R, DAVISON N, VAN O W, *et al.* Canadian Journal of Physics, 1986, **64**(6): 685.
- [20] KIRKBY P, LINK W. Canadian Journal of Physics, 1966, **44**(8): 1847.
- [21] BULMAN P, GREENLEES G, SAMETBAND M. Nuclear Physics, 1965, **69**(3): 536.
- [22] DELL G F, PLOUGHE W D, HAUSMAN H J. Nuclear Physics, 1965, **64**(3): 513.
- [23] PETERSON R. Annals of Physics, 1969, **53**(1): 40.
- [24] NORO T, SAKAGUCHI H, NAKAMURA M, *et al.* Nuclear Physics A, 1981, **366**(2): 189.
- [25] LOMBARDI J, BOYD R, ARKING R, *et al.* Nuclear

- Physics A, 1972, **192**(3): 641.
- [26] ANTROPOV A, ZARUBIN P, IOANNU P, *et al.* Izv Akad Nauk SSSR, Ser Fiz 35: 1971, **11**, 2355.
- [27] FUJIWARA M, FUJITA Y, IMANISHI S, *et al.* Physical Review C, 1985, **32**(3): 830.
- [28] SKAKUN E A, RAKIVNENKO Y N, RASTREPIN O A. Izv Rossiiskoi Akademii Nauk, Ser Fiz, 1986(12): 2043.
- [29] LEVKOVSKIY V. Activation Cross Section Nuclides of Average Masses ($A = 40 - 100$) by Protons and Alpha-Particles with Average Energies ($E = 10 - 50$ MeV) [M]. Moscow: Activation cross section by protons and alphas, 1991. Exfor: A0510001
- [30] TANAKA S, FURUKAWA M. Journal of the Physical Society of Japan, 1959, **14** (1269): 18.
- [31] ZHURAVLEV B V, KORNILOV N V, LYCHAGIN A A, *et al.* Nuclear Level Densities of Co, Co, Nb, and Nb from Neutron Evaporation Spectra in the (p, n) Reaction[C] //Conf. on Nucl. Data for Sci and Techn, Santa Fe, USA, 2004: 931.
- [32] SCOBEL W, BLANN M, KOMOTO T, *et al.* Physical Review C, 1984, **30**(5): 1480.
- [33] BLANN M, GRIMES S, HANSEN L, *et al.* Physical Review C, 1985, **32**(2): 411.
- [34] BIRYUKOV B V, RUDENKO A P, SALNIKOV O A, *et al.* Yadernaya Fizika, 1980, **31**: 561.

Calculation and Analysis for $p+^{52}\text{Cr}$ Reaction

PAN Hui^{1, 2}, ZHAO Yaolin¹, HAN Yinlu²

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Science and Technology on Nuclear Data Laboratory, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, People's Republic of China)

Abstract: Based on the experimental data of non-elastic and elastic scattering distributions for $p+^{48}\text{V}$, $p+^{51}\text{V}$ and $p+^{52}\text{Cr}$ reactions, a set of optical potential parameters for $p+^{52}\text{Cr}$ reaction with incident proton energies below 150 MeV are obtained. All cross sections, elastic and inelastic scattering angular distributions, energy spectra and double differential cross sections of six outgoing particles (n, p, d, t, helium-3 and α) for $p+^{52}\text{Cr}$ reaction are calculated and analyzed. The optical model, the intra-nuclear cascade model, evaporation model, Hauser-Feshbach theory with width fluctuation correction, exciton model including the improved Iwamoto-Harada model and distorted wave Born approximation theory are involved in the calculation. The calculated results are compared with existing experimental data and the evaluated data from TENDL data base. It is found that our calculated results agree with the experimental data and the calculated cross sections are more consistent with the related experimental data than the results from TENDL data base.

Key words: optical model; cross section; angular distribution; energy spectrum; double differential cross section

Received date: 27 Jun. 2013; Revised date: 6 Jul. 2013

Foundation item: National Basic Research Program of China(973 Program)(2007CB209903)

Corresponding author: ZHAO Yaolin, E-mail: zhaoyaolin@mail.xjtu.edu.cn.

<http://www.npr.ac.cn>