

文章编号: 1007-4627(2017)02-0258-05

## 中子与 $^{56}\text{Fe}$ 反应的理论计算

苏新武<sup>1</sup>, 韩银录<sup>2,†</sup>, 蔡崇海<sup>3</sup>

- (1. 山西大同大学物理与电子科学学院, 山西 大同 037009;  
2. 中国原子能科学研究院国家核数据重点实验室, 北京 102413;  
3. 南开大学物理系, 天津 300071)

**摘要:** 应用光学模型、核内级联模型、激子模型(含改进的 Iwamoto-Harada 模型)、统一的 Hauser-Feshbach 理论以及扭曲波玻恩近似理论, 对入射能量在 20 MeV 以下中子与  $^{56}\text{Fe}$  非弹性散射反应的  $\gamma$  产生截面、分立能级截面和总的非弹性散射截面进行计算, 并与最新实验数据以及来自 ENDF/B-VII、JEFF-3.1 和 JENDL-4 库的评价数据进行比较和分析。结果显示, 理论计算结果与实验数据符合较好, 并且对于有些激发态的非弹性散射截面我们的计算结果优于 ENDF/B-VII, JEFF-3.1 和 JENDL-4 库的评价结果。

**关键词:** 非弹性散射截面;  $\gamma$  产生截面; 分立能级截面

**中图分类号:** O571.42      **文献标志码:** A      **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.34.02.258

### 1 引言

中子诱发原子核反应数据在核反应的许多领域中起到了关键性的作用。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, 对核数据的可靠程度提出了更高的要求, 因此, 需要我们采用自洽的核反应理论提高核数据的精度, 特别是结构材料核数据的精度, 为核物理研究、核能利用、核工程建设和各种核技术应用提供基础数据。

铁作为一种非常重要的核材料, 在核能开发与利用方面有着很广泛的应用, 例如: ADS 的设计。另外, 铁也是核物理实验中常用的屏蔽材料。铁在自然界中有四种稳定的同位素, 丰度分别是  $^{54}\text{Fe}$  占 5.85%,  $^{56}\text{Fe}$  占 91.75%,  $^{57}\text{Fe}$  占 2.12% 和  $^{58}\text{Fe}$  占 0.28%, 其中  $^{56}\text{Fe}$  是 ADS 设计中非常重要的结构材料核。

中子与  $^{56}\text{Fe}$  的非弹性散射反应在核反应过程中是非常重要的, 通过分析中子和  $^{56}\text{Fe}$  反应的非弹性散射截面实验数据, 并应用相关的理论模型, 可以得到有关原子核结构的一些信息, 如低激发态能级和核的形变等。非弹性散射包括直接非弹性散射、预平衡过程的非弹性散射和平衡过程的非弹性散射。当入射粒子能量较低时, 平衡过程的非弹性散射的贡献占主要地位, 随着入射粒子能量的增加, 直接非弹性散射占的比重就越

大。对于中子与  $^{56}\text{Fe}$  的非弹性散射反应在理论和实验方面已经进行了大量的研究, 最近也报道了一些新的实验数据<sup>[1]</sup>, 包括  $(n, n'\gamma)$  截面、 $(n, 2n\gamma)$  截面、分立能级截面和总的非弹性散射截面。新的实验数据不仅为中子诱发  $^{56}\text{Fe}$  反应提供了信息, 而且为检验理论模型提供了基础。另外, 由于来自不同实验室的入射能量在 20 MeV 以下中子与  $^{56}\text{Fe}$  反应的非弹性散射截面实验数据存在一些差异, 因此在此范围内应用理论模型对其进行自洽的理论计算是非常重要的且有意义。

目前, 国际上已经有一些数据库包含了 20 MeV 以下中子与  $^{56}\text{Fe}$  非弹性散射反应的理论计算结果, 大多数评价库给出的数据是基于旧的评价结果。美国 ENDF/B-VII.1 数据库的评价数据是在 ENDF/B-VI.1<sup>[2]</sup>评价数据的基础上给出的, 欧洲 JEFF-3.1 数据库给出的评价数据是基于 JEFF-3.0<sup>[3]</sup>数据库的结果, 日本的 JENDL-4.0 数据库的评价数据是在 JENDL-3 数据库的基础上考虑了耦合道计算后给出的评价结果。这些数据库所采用的核反应模型程序主要有 TALYS 和 GNASH, 这些程序在 Hauser-Feshbach 理论中未考虑宽度涨落修正, 在激子模型中未考虑角动量-宇称相关性和改进的 Iwamoto-Harada 模型, 以及对于复杂粒子没有考虑预平衡发射的 pick-up 机制。国内方面, 韩银录等<sup>[4]</sup>在 2009 年对中子与  $^{54,56,57,58,\text{nat}}\text{Fe}$  的反应进行

收稿日期: 2016-08-28; 修改日期: 2016-11-02

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

作者简介: 苏新武(1976-), 男, 山西朔州人, 副教授, 硕士, 从事粒子物理与原子核理论研究; E-mail: sxw189@126.com

† 通信作者: 韩银录, E-mail: hanyl@ciae.ac.cn.

了理論計算和分析, 並和相應的實驗數據進行了比較。

本工作將應用光學模型, 扭曲波玻恩近似 (DWBA), 帶寬度漲落修正的 Hauser-Feshbach 理論, 蒸發模型, 角動量-宇稱相關的激子模型理論以及核內級聯模型等核反應理論模型, 計算中子與 $^{56}\text{Fe}$ 非彈性散射反應的 $\gamma$ 產生截面、分立能級截面和總的非彈性散射截面, 計算結果與實驗數據以及來自 ENDF/B-VII.1、JENDL-4.0 和 JEFF-3.1 庫的評價結果進行比較和分析。

## 2 理論模型

光學模型是用來描述中子誘發總截面、彈性和非彈性截面、彈性散射角分布, 計算複合核和預平衡發射過程的透射係數。本文所採用的光學模型勢<sup>[5]</sup>實部是 Woods-Saxon 形式, 體吸收虛部勢和面吸收虛部勢分別是 Woods-Saxon 形式和 Woods-Saxon 的導數形式, 自旋軌道耦合勢是 Thomas 形式。

統一的 Hauser-Feshbach 理論<sup>[6]</sup>和激子模型是用來描述核反應平衡和預平衡衰變過程。帶寬度漲落修正的 Hauser-Feshbach 理論描述平衡發射過程中從複合核到剩餘核分立能級和連續態, 預平衡過程是採用角動量相關的激子模型來描述。對所有開道的多粒子發射過程包括分立能級和連續態的發射。當入射中子能量低於 20 MeV 時, 二次粒子發射用多步 Hauser-Feshbach 理論來描述。改進的 Iwamoto-Harada 模型<sup>[7]</sup>用來描述複合核內複雜粒子 (d, t,  $^3\text{He}$ ,  $\alpha$ ) 的出射, 該模型考慮了出射粒子的內部結構並引進核子形成複雜粒子的幾種可能。對於輕的複雜粒子出射, 改進的 Iwamoto-Harada 模型包括在激子模型中。

基於光學模型的 APMN 程序<sup>[8]</sup>用來得到光學模型勢, 基於 DWBA 方法的 DWUCK4 程序<sup>[9]</sup>用來計算非

彈性散射截面和角分布。UNF 程序<sup>[10]</sup>計算在入射中子能量 20 MeV 以下的全套中子核數據, 其理論基礎包括光學模型、統一的 Hauser-Feshbach 理論和激子模型。為了保持能量平衡, 在每個反應道考慮了反沖效應。在兩體剩餘相互作用中應用 Kalbach 系統參數  $K$ , 它在核反應中起重要作用, 並決定著預平衡和平衡衰變過程的貢獻。

中子、質子和氦核的唯象光學模型勢採用韓銀錄等<sup>[4, 11, 12]</sup>獲得的光學模型勢參數, 氦-3 和氦核的光學模型勢採用徐永麗等<sup>[13, 14]</sup>獲得的光學模型勢參數,  $\alpha$  粒子的光學模型勢採用蘇新武等<sup>[15]</sup>獲得的光學勢參數。

## 3 理論結果與分析

應用中子與 $^{56}\text{Fe}$ 反應的光學模型勢參數, 以及基於 DWBA 理論, 統一的 Hauser-Feshbach 理論和激子模型的核反應理論模型程序 UNF, 自洽地對入射能量在 20 MeV 以下中子與 $^{56}\text{Fe}$ 的反應進行了理論計算。這裡給出非彈性散射反應的 $\gamma$ 產生截面、分立能級截面和總的非彈性散射截面的理論計算結果和實驗數據的比較。非彈性散射截面從閾能開始時複合核反應起主要作用, 隨著入射中子能量的增加, 不同非彈性散射道的打開, 直接反應和預平衡反應起主要作用。非彈性散射道的閾能是 0.8619 MeV。在入射中子能量為 11.4 MeV 時 (n, 2n) 道打開。

在中子與 $^{56}\text{Fe}$ 的非彈性散射反應中, 第一次轉移反應 ( $E_\gamma = 0.8468$  MeV) 對於 $\gamma$ 產生截面的準確性起到很重要的作用。我們計算了 $^{56}\text{Fe}$ 不同激發態到基態轉移反應的 $\gamma$ 產生截面, 並將理論計算結果與實驗數據<sup>[1, 16, 17]</sup>進行了比較, 不同實驗數據之間有分歧。圖 1 分別給出了 $\gamma$ 射線能量為 0.8468 和 1.2383 MeV 產生截

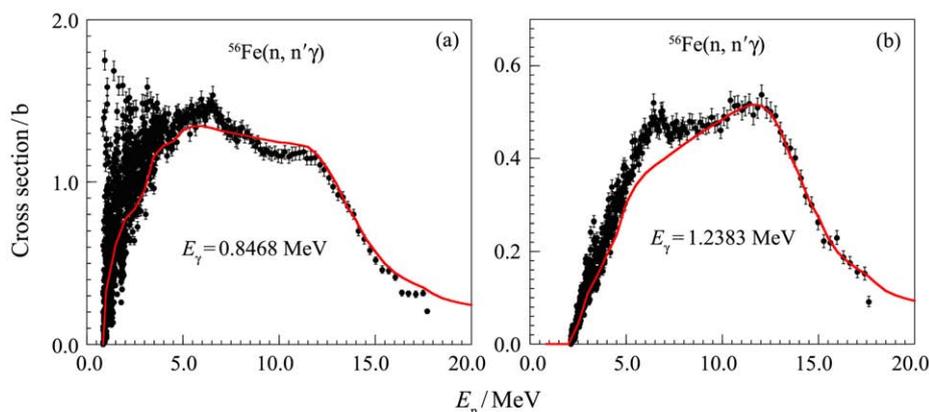


圖 1 (在線彩圖) (n, n' $\gamma$ ) 截面計算結果與實驗數據<sup>[1]</sup>比較

面的理论计算结果与最新实验数据<sup>[1]</sup>的比较。入射能量在 5.0 MeV 以下是共振区，理论计算结果只能给出其平均值。从图中可以看出， $\gamma$  射线能量为 0.846 8 MeV 的产生截面理论计算结果与实验数据符合得比较好。对于能量为 1.238 3 MeV 的  $\gamma$  产生截面，入射中子能量在 5.0~7.0 MeV 之间理论计算结果比实验数据低。

对于  $^{56}\text{Fe}(n, 2n\gamma)^{55}\text{Fe}$  反应不同能量  $\gamma$  产生截面也进行了计算。图 2 分别给出第一激发态到基态转移反应 ( $E_\gamma = 0.4119$  MeV) 和第二激发态到基态转移反应 ( $E_\gamma = 0.9313$  MeV) 的  $\gamma$  产生截面理论计算结果和实验数据的比较，两者之间符合得比较好。

基于前面计算的  $\gamma$  产生截面，我们对分立能级截面

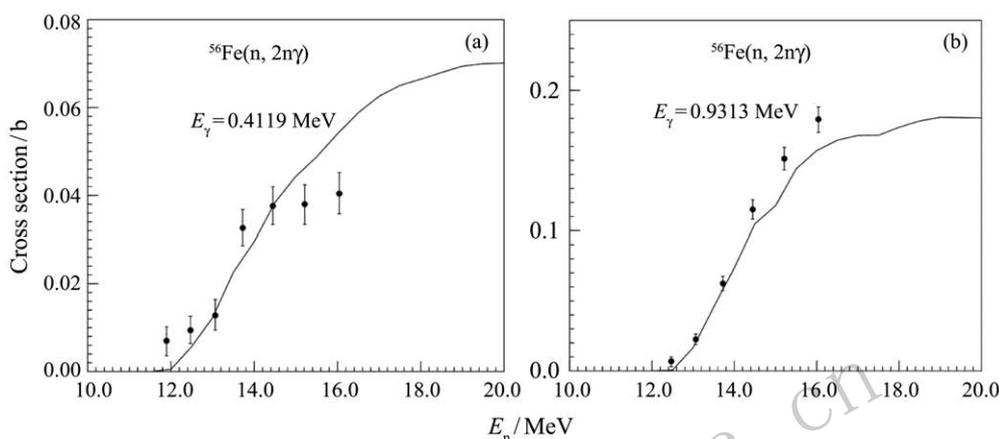


图 2 (n, 2n $\gamma$ )截面计算结果与实验数据<sup>[1]</sup>比较

和总的非弹性散射截面也进行了计算，其中能级顺序、 $\gamma$  转移位置和衰变分支比取自 Exfor 库对于  $^{56}\text{Fe}$  的核结构评价结果。

图 3 分别给出第一和第二激发态非弹性散射截面理论计算结果与最新实验数据<sup>[1]</sup>比较，其中圆点表示实验

数据，实线表示本工作的计算结果。从图中可以看出，理论计算结果和实验数据符合得很好。另外，理论计算结果进一步与其它评价库进行了比较，2 条虚线分别表示 ENDF/B-VII.1 和 JENDL-4.0 库的评价结果。从图中也可以看出，理论计算结果与其他库评价结果一致。

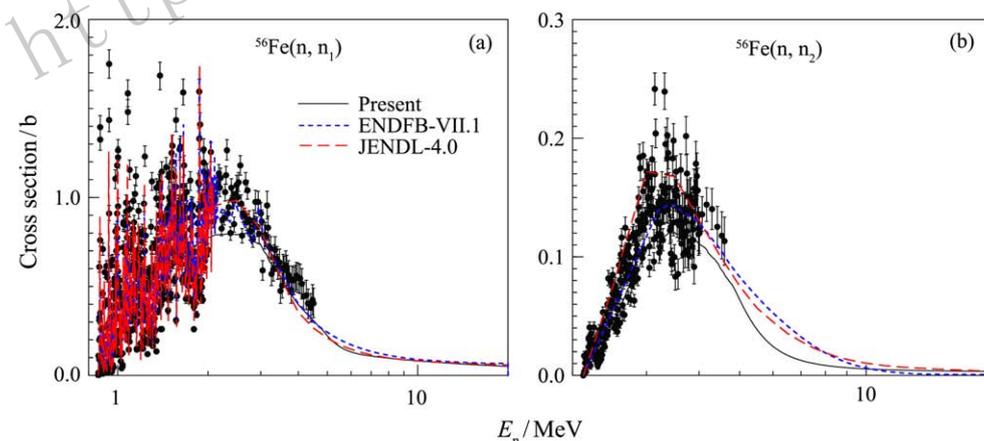


图 3 (在线彩图) 中子与  $^{56}\text{Fe}$  反应第一和第二激发态非弹性散射截面计算结果与实验数据<sup>[1]</sup>的比较

我们也计算了其它激发态的非弹性散射截面并与 ENDF/B-VII.1, JENDL-4.0 和 JEFF-3.1 库的评价结果进行了比较，我们的理论计算结果更符合最新实验数据<sup>[1]</sup>。图 4 分别给出第七和第八激发态非弹性散射截面与实验数据和评价数据的比较结果。

总的非弹性散射截面主要来源于第一激发能级和

基态之间的  $\gamma$  转移 ( $E_\gamma = 0.8468$  MeV)，其理论计算结果与实验数据<sup>[1]</sup>的比较如图 5 所示。理论计算结果进一步与来自 ENDF/B-VII.1 和 JENDL-4.0 库的评价结果进行了比较。从图中可以看出，入射中子能量在阈能 (0.862 MeV) 和 7 MeV 之间是共振区，总的非弹性散射截面的理论计算结果只能给出其平均值。入射能量

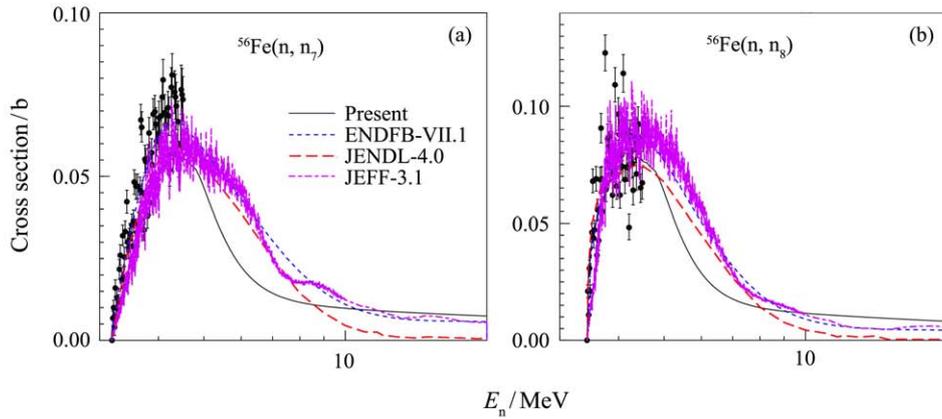


图 4 (在线彩图) 中子与<sup>56</sup>Fe反应第七和第八激发态非弹性散射截面计算结果与实验数据<sup>[1]</sup>的比较

在 8.5 ~ 11.5 MeV 之间我们的理论计算结果比实验数据略高, 在其余能点理论计算结果和实验数据符合得很好。另外, 我们的计算结果在入射能量 8.5 ~ 11.5 MeV 与 ENDF/B-VII.1 库的评价结果一致, 而 JENDL-4.0 库的评价结果比我们的计算结果和实验数据都高。

在中子与<sup>56</sup>Fe 反应所有非弹散射截面计算结果与实验数据符合较好的基础上, 我们进一步计算了入射中子能量为 8.17 MeV 出射中子双微分截面在不同角度的理论计算结果与实验数据<sup>[18]</sup>的比较, 双微分截面来自不同反应道的贡献, 如图 6 所示, 实验数据测量的角度覆盖了几乎整个散射区域, 从图中可以看出, 对于所有角度和所有峰, 理论计算结果和实验数据符合得很好, 也验证了我们计算的非弹散射截面结果的合理性。

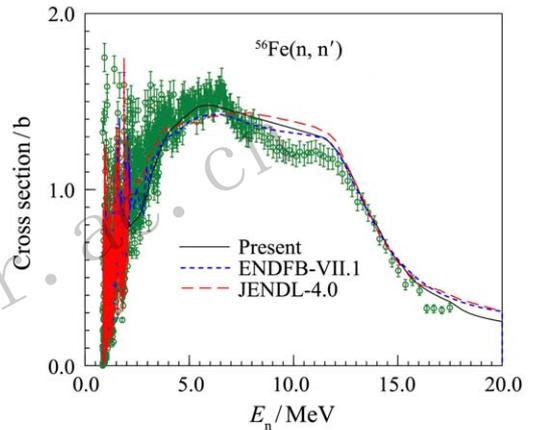


图 5 (在线彩图) 中子与<sup>56</sup>Fe反应总的非弹性散射截面计算结果与实验数据<sup>[1]</sup>的比较

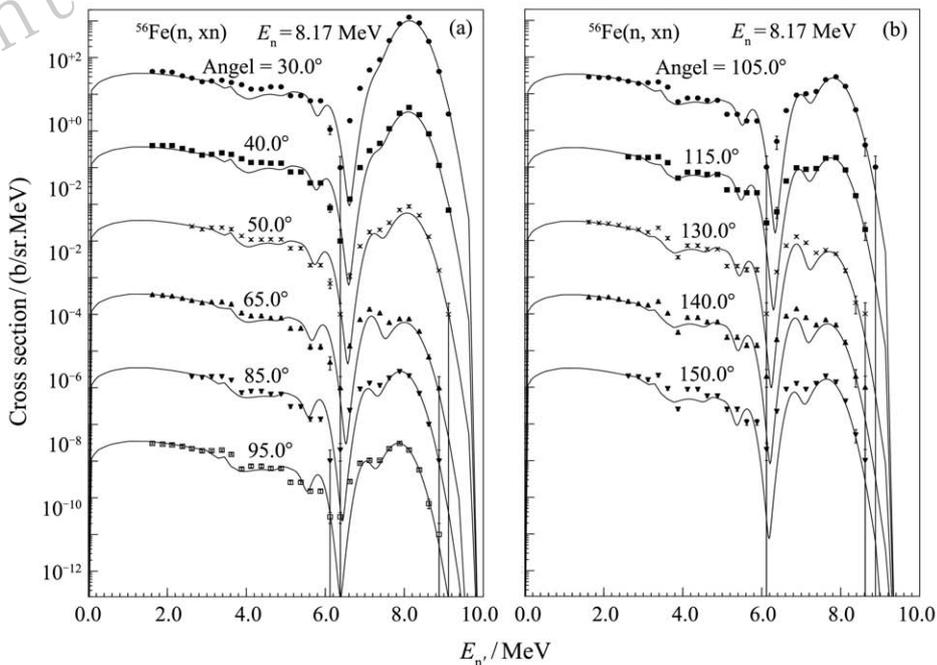


图 6 入射中子能量为 8.17 MeV 出射中子双微分截面计算结果与实验数据<sup>[18]</sup>的比较

## 4 结论

应用光学模型、DWBA方法、统一的Hauser-Feshbach模型和激子模型核反应理论,对20 MeV以下中子与 $^{56}\text{Fe}$ 非弹性散射反应的 $\gamma$ 产生截面,分立能级截面和总的非弹性散射截面进行了理论计算和分析,并进一步与最新实验数据进行了比较,计算结果和实验数据符合得很好。另外,我们的计算结果也与ENDF/B-VII、JEFF-3.1和JENDL-4库的评价数据进行了比较,发现目前计算的截面曲线形状与这些库的评价数据相似,对于有些激发态的非弹性散射截面我们的计算结果更符合其实验数据。所有理论计算结果都以ENDF/B格式给出,并将通过临界屏蔽基准对其进行检验。这些计算结果可以应用于加速器驱动系统的辐射传输模拟计算中。

### 参考文献:

- [1] NEGRET A, BORCEA C, DESSAGNE Ph, *et al.* Phys Rev C, 2014, **90**(3): 034602.
- [2] FU C Y, PEREY C M, HETRICK D M, *et al.* ENDF/B-VI.1 Evaluation of  $n+^{56}\text{Fe}$ , Personal Comm, 1991.
- [3] PRONVAEV V, TAGESEN S, VONACH H, *et al.* Physics Data, 1995.
- [4] HAN Y L, ZHANG Y, GUO H R. Nucl Sci and Eng, 2009, **161**(1): 90.
- [5] BECCHETTI F D, GREENLEES G W. Phys Rev, 1969, **182**(6): 1190.
- [6] HAUSER W, FESHACH H. Phys Rev, 1952, **87**(2): 366.
- [7] IWAMOTO A, HARADA K. Phys Rev C, 1982, **26**(5): 1821.
- [8] SHEN Qingbiao. Nucl Sci and Eng, 2002, **141**(1): 78.
- [9] KUNZ P D. Distorted Wave Code DWUCK4. University of Colorado, Boulder, Colorado, 1994.
- [10] ZHANG J. Nucl Sci and Eng, 2002, **142**(2): 207.
- [11] HAN Y L, ZHANG Y, GUO H R. Nucl Instr and Meth B, 2007, **265**(2): 461.
- [12] HAN Y L, SHI Y Y, GUO H R. Phys Rev C, 2006, **74**(4): 520.
- [13] XU Y L, GUO H R, HAN Y L, *et al.* Sci China Phys, Mechanics & Astronomy, 2011, **54**(11): 2005.
- [14] XU Y L, GUO H R, HAN Y L, *et al.* Int J Mod Phys E, 2015, **24**(1): 1550005.
- [15] SU X W, HAN Y L. Int J Mod Phys E, 2015, **24**(12): 1550092.
- [16] DICKENS J K, FU C Y, HETRICK D M, *et al.* ORNL-TM-11671, Oak Ridge National Laboratory, 1990.
- [17] VOSS F, CIERJACKS S, KROPP L. The 3rd Conf. Neutron Cross-Sections+Tech., Knoxville, 1971, **1**: 218.
- [18] RUAN Xichao, HUANG Hanxiong, CHEN Guochang, *et al.* Atomic Energy Science and Technology, 2009, **43**(9): 793. (in Chinese).  
(阮锡超, 黄翰雄, 陈国长. 原子能科学技术, 2009, **43**(9): 793.)

## Theoretical Calculations of $n+^{56}\text{Fe}$ Reaction

SU Xinwu<sup>1</sup>, HAN Yinlu<sup>2,†</sup>, CAI Chonghai<sup>3</sup>

(1. School of Physics and Electronic Science, Shanxi Datong University, Datong 037009, Shanxi, China;

2. Key Laboratory of Nuclear Data, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China ;

3. Department of Physics, Nankai University, Tianjin 300071, China)

**Abstract:** The gamma production, level production and total inelastic scattering cross sections are calculated at incident neutron energy below 20 MeV. The optical model, the intra-nuclear cascade model, the exciton model (including improved Iwamoto-Harada model), the unified Hauser-Feshbach theory and the distorted wave Born approximation theory are used. Theoretical calculated results are compared with the recent experimental data and other evaluated data from ENDF/B-VII, JEFF-3.1, and JENDL-4. It is found that our calculated results agree with the experimental data and the calculated results for some level cross sections are more consistent with the related experimental data than the results from ENDF/B-VII, JEFF-3.1, and JENDL-4 data base.

**Key words:** inelastic scattering cross section; gamma production cross section; level production cross section

Received date: 28 Aug. 2016; Revised date: 2 Nov. 2016

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

† Corresponding author: HAN Yinlu, E-mail: hanyl@ciae.ac.cn.