

综合型能级密度公式

陆海涛 刁浩 张茂林

(贵州大学, 贵阳)

摘 要

本文在费米气体模型推荐公式的基础上, 考虑低能修正, 给出了一个综合型能级密度公式。它包含6个可调参数, 由248个核素的平均中子共振间隔 \bar{D}_{exp} 及529个核素的能级累计数 $N(E)$, 确定了一组最佳参数。这个公式的普适性较好, 适当调整参数, 可拟合上述全部 \bar{D}_{exp} 值及 $N(E)$ 值。

一、引 言

原子核能级密度在核反应的理论计算中是很重要的。用统计模型计算各种反应截面、宽度、出射中子能谱和角分布等物理量, 都需要能级密度的知识。计算裂变问题也要用到能级密度^[1]。

1936年 H. A. Bethe^[2] 首先提出了一个费米气体能级密度公式。他从费米气体模型出发, 在单粒子能级等间隔假设下, 得到一个具有简单解析形式的能级密度公式。半个世纪以来, 对这个公式作了不少改进。其中主要的有常温费米气型公式^[3], 返移费米气型公式^[4], 能级密度参数 a 随激发能变化的费米气型公式^[5], Lang 的费米气型公式^[6] 以及能级密度推荐公式^[7]。以上这些公式及所用参数, 或多或少存在一些缺点和问题, 不能令人满意。因此, 原子核能级密度问题, 仍是当今研究的重要课题之一。

到目前为止, 关于能级密度的实验数据仍然很少, 而且误差较大。在这种情况下, 不但要积累实验数据, 理论工作也要不断发展。对于以费米气体模型为基础的半经验公式, 也还有必要进一步研究, 寻找更合适的公式形式, 调整和修正其中的参量, 以更好地符合实验数据。

本文提出的综合型能级密度公式, 就是上面提及的各种唯象能级密度公式的综合和发展。在低能端给出了一个合适的修正形式, 较大地改善了能级累计数的计算结果。

二、能级密度公式

一个包含有 Z 个质子和 N 个中子的原子核是一个复杂的费米子系统。它的状态可以由一组量子数 (E, J, M, π) 表征。系统的总能量 E 与每一个中子和质子的单粒子态能量

有关,在最简单的独立粒子近似下

$$E = \sum_n n_n \epsilon_n + \sum_p n_p \epsilon_p, \quad (1)$$

ϵ_n 、 ϵ_p 分别为中子、质子的单粒子态能量. 显然:

$$N = \sum_n n_n, \quad (2)$$

$$Z = \sum_p n_p, \quad (3)$$

在这种组态下,体系总角动量 J 的投影量子数 M 可以写为

$$M = \sum_n n_n m_n + \sum_p n_p m_p. \quad (4)$$

我们假定,原子核中各个核子的单粒子态耦合,是完全无规的,原子核的两种宇称分布几率相同. 于是原子核的能级密度可以表示为

$$\rho(E, J, M, \pi) = \rho(\pi) \rho(E, J, M), \quad (5)$$

其中

$$\rho(\pi) = \frac{1}{2}. \quad (6)$$

每一条具有确定量子数 J 的能级,简并度为 $(2J + 1)$, 原子核能级密度随 J 的分布规律,可以表示为高斯函数^[2,6]:

$$\rho(J) = \frac{2J + 1}{2\sigma^2} \exp\left[-\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 / 2\sigma^2\right], \quad (7)$$

显然,它对角动量积分是归一的. 其中 σ^2 叫做自旋切割因子 (Spin cut-off factor). σ 与能量有关.

原子核能级密度随能量 E 的分布 $\rho(E)$, 问题较为复杂. 在独立粒子近似下,使用单粒子能级等间隔假定,用统计物理的方法,作鞍点近似, $\rho(E)$ 有下述解析形式的解^[1]:

$$\rho(E) = \frac{1}{12\sqrt{2\sigma^2} U^{5/4} a^{1/4}} e^{2\sqrt{aU}}, \quad (8)$$

其中 U 为有效激发能, a 为能级密度参数.

如要进一步考虑原子核中核子间的残余相互作用,可以把它们归结为某些物理效应,如对应效应、壳效应等,引入相应的参数,修正上面的公式.

在能量较高时,费米气型公式(8),经过一些修正,和实验结果是符合得比较好的. 但在低能端,一般认为费米气体模型不适用. 上面公式即令作了修正,推广到低能端,也难以与实验符合.

在考查实验数据的基础上, Gilbert 和 Cameron 假定^[3],能级累计数 $N(E)$ 的对数随 E 的变化成线性关系:

$$\ln N(E) = \frac{1}{T} (E - E_0), \quad (9)$$

于是能级密度为

$$\rho(E) = \frac{1}{T} \exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right), \quad (10)$$

其中 T 和 E_0 为两个自由参数. 通常把这种公式称为常温型的公式.

他们这样做的问题在于: 低能段与高能段使用了不同的公式. 两能区的连接和接点, 都要逐核具体考虑. 这样作, 不仅导致参数多, 而且缺乏普适性.

事实上, 把 $\ln N(E)$ 作为 E 的线性函数, 是过于简化了. 如果把 $\ln N(E)$ 作为 E 的二次函数, 令

$$\ln N(E) = gE - \beta E^2, \quad (11)$$

于是

$$\rho(E) = (g - 2\beta E) \exp(gE - \beta E^2), \quad (12)$$

其中 β 和 g 作为可调参数. 由(12)式可以清楚看出: 因子

$$(g - 2\beta E) \exp(-\beta E^2) \quad (13)$$

是对“常温型”因子 $\exp(gE)$ 的修正. 考虑到高斯函数是随 E 变化很快的函数, (13)式所示函数只会对低能端进行修正, 不会影响到高能段.

王顺金等人在费米气体模型理论框架内, 考虑了对修正与壳修正, 给出了一个推荐公式^[7]. 这个公式, 在高能段与实验符合是较好的. 在低能段, 这个公式不理想. 这是由于费米气体模型理论本身不太适用于低能段情况造成的. 因此, 在低能段, 应当有更多的修正.

为了使低能段与高能段用统一的公式描述. 我们使用(13)式所示的修正因子, 修正推荐公式, 代之以修正常温型公式. 把能级密度公式综合地写成如下形式:

$$\rho(E) = [1 + (g - cE) \exp(-\beta E^2)] \rho_R(E), \quad (14)$$

其中, $c = 2\beta$, 为了调节参数的便利, 我们固定参数 β , 调节 c 和 g , 拟合实验结果. $\rho_R(E)$ 采用王顺金等人给出的推荐公式形式^[7]:

$$\rho_R(E) = \frac{t^{3/2} \cdot a^{1/2}}{12\sqrt{2}\sigma^3 (U + t)^2} \exp(2\sqrt{aU} + 1/8\sigma^2), \quad (15)$$

其中, 能级密度参数 a 采取了与能量 E 有关的形式:

$$a = (\alpha_1 A + \alpha_2 A^2) [1 + r_1 \delta e^{-\tau_1 E} + r_2 s e^{-\tau_2 E}] \quad (16)$$

其中 $\alpha_1, \alpha_2, r_1, r_2$ 为四个可调参数. 激发能 U 表示为:

$$U = \frac{E + \delta(1 - e^{-\tau_1 E}) + s(1 - e^{-\tau_2 E})}{1 + r_1 \delta e^{-\tau_1 E} + r_2 s e^{-\tau_2 E}}, \quad (17)$$

$$t = (1 + \sqrt{1 + 4aU})/2a, \quad (18)$$

$$\sigma^2 = \mu t A^{5/3}, \quad (19)$$

其中 μ 的值他们取为 0.0137. 壳修正值 s 为

$$S = M_{\text{exp}} - M_0, \quad (20)$$

M_0 由 Myers-Swiatecki^[89] 半经验质量公式计算. M_{exp} 为核素质量, 我们取自文献^[10]. 对修正值 δ 他们采用该公式中的对修正 P 值

$$P = \begin{cases} 11/\sqrt{A} & \text{奇-奇核} \\ 0 & \text{奇}A\text{核} \\ -11/\sqrt{A} & \text{偶-偶核} \end{cases} \quad (21)$$

对

是
文
的
参能
的邻
参其
中A核
对
于
间
值P
兴
负
值两
个若
作
若

对能级密度计算来说,这种选择不好,导致负数开方问题. 我们却有所改变.

三、参数及其调节

调节能级密度参数的基础是实验数据,和能级密度有直接关系的有两个数据:一个是中子分离能处的平均能级间隔 \bar{D} ; 另一个是低激发能区的能级累计数 $N(E)$. 我们从文献[3、4、11、12、13、14]中,共收集了 248 个核素的 860 个 \bar{D} 实验数据. 有些核素,几家的实验数据是相同的,不少核素,几家的实验数据不相同,甚至误差棒不能重合. 我们调参数时,承认了所有这些实验数据.

关于能级累计数 $N(E)$,我们是根据 Nuclear Data Sheets 上公布的核素能级图及能级数据,逐条能级数出来的. 这样得到的数据,应当说是可靠的. 但是,由于他们给出的能级图本身有能级丢失,实际上,误差也是相当大的.

原子核能级结构的个性较强,不同核素间 \bar{D} 值可以相差五、六个数量级. 即使是相邻的核素的 \bar{D} 值也会有很大差别. 因此,我们使用逐个核素计算的方法,调节能级密度参数. 我们要求 \bar{D} 的计算值应在实验误差之内.

中子分离能处的能级间隔 \bar{D} 可由下式计算,

$$\bar{D}_{\text{cal.}} = 2 \times 10^6 / \left[\rho \left(S_n, I - \frac{1}{2} \right) + \rho \left(S_n, I + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (22)$$

其中 S_n 为中子分离能, I 为靶核基态自旋.

在 高能段,虽然我们使用了王顺金等人的公式形式,但对参数选择有所不同:

1. 关于自旋切割因子. 在(19)式中, μ 的值他们取为 0.0137. 我们分别对偶偶核、奇 A 核和奇奇核选用不同参数. 对于偶偶核我们用了文献[4]中的刚体参数, $\mu = 0.0150$; 对于奇奇核我们用文献[4]中的半刚体参数, $\mu = 0.0075$; 对于奇 A 核我们取两者的中间值, $\mu = 0.0115$.

2. 关于对修正能 δ . 他们把对修正能 δ 取为 P [见(21)式]. 对于偶偶核,对修正能 P 为负值. 对于 A 较小的核素来说, P 值影响较大. 当 E 较小时,会使有效激发能 U 变为负值,从而,出现负数开方问题. 为了避免出现这种不合理的现象,我们令 δ 的取值为

$$\delta = \begin{cases} 11/\sqrt{A} & \text{奇奇核} \\ 5.5/\sqrt{A} & \text{奇}A\text{核} \\ 0 & \text{偶偶核} \end{cases} \quad (23)$$

3. 关于可调参数 α_1 、 α_2 、 γ_1 、 γ_2 、 g 、 c 这六个参数可由拟合实验数据给出. 其中 g 、 c 两个参数只影响低能段的能级密度. 可以先令它们为 0, 利用 \bar{D} 的实验值, 调节 α_1 、 α_2 、

表 1 能级密度参数表 (I)

	α_1	α_2	γ_1	γ_2	g	c
奇 A 核	0.1221	-0.0000385	0.49	0.058	4.5	4.5
偶偶核	0.121	-0.0000380	—	0.050	0.9	1.54
奇奇核	0.120	-0.0000388	0.85	0.585	2.12	2.5

γ_1 、 γ_2 四个参数。调定后,再利用 $N(E)$ 的实验值调节 g 、 c 。我们调得一组普适性好的参数,如表 1 所示。

四、计算结果及分析

利用上面给出的一组普适性较好的参数,可以使大部分核素的中子分离能处平均能级间隔的计算值 $\bar{D}_{cal.}$ 与实验值 $\bar{D}_{exp.}$ 符合。由表 2 可以看出,对于有实验数据的 248 个核素, $\bar{D}_{cal.}$ 值与 $\bar{D}_{exp.}$ 值符合(在实验误差范围之内)的占 84.7%。而且,我们的计算表

表 2 $\bar{D}_{cal.}$ 结果统计表

	核素数	$\bar{D}_{cal.}$ 与 $\bar{D}_{exp.}$ 符合数	百分率(%)
奇 A 核	131	108	82.4
偶偶核	63	55	87.3
奇奇核	54	47	87.0
合计	248	210	84.7

明,只要适当调节 α_1 、 α_2 、 γ_1 、 γ_2 四个参数,可以使所有核素的 $\bar{D}_{cal.}$ 值与实验值符合。事实上,我们用了不多的几组参数,对所有 248 个核素,给出了与实验符合的结果,见表 3。

表 3 能级密度参数表 (II) 及 $\bar{D}_{cal.}$ 结果统计

	α_1	α_2	γ_1	γ_2	$\bar{D}_{cal.}$ 与 $\bar{D}_{exp.}$ 的核素个数
奇 A 核	0.115	-0.0000385	0.49	0.058	13*
	0.1314	-0.0000385	0.49	0.058	6
	0.125	-0.0000385	0.8	0.058	2
	0.155	-0.0000385	0.8	0.058	1
	0.130	-0.0000385	0.8	0.058	1
偶偶核	0.114	-0.000038	—	0.05	3
	0.1264	-0.000038	—	0.05	2
	0.096	-0.000038	—	0.05	2
	0.118	-0.000038	—	0.05	1
奇奇核	0.112	-0.000035	0.85	0.051	6
	0.10	-0.000035	0.85	0.051	1

*不含已计算符合的核素。下同。

对能级累计数的计算结果,也得到了很大改善。我们使用 529 个核素,进行了大面积的计算。靠调节 g 和 c 两个参数(β 固定为 0.4),仅仅使用一组就可以使得大约一半核素(258 个)的能级累计数 $N(E)$ 的计算值,基本符合实验数据。如果针对某一个核素,只要实验数据本身精确可靠,调节 g 、 β 和 c ,总可以使得它的 $N(E)$ 计算值与实验值符合。

应当指出,对于奇 A 核、偶偶核和奇奇核,三组 α_1 、 α_2 、 γ_1 、 γ_2 参数,差别是不大的。而 g 和 c 的三组参数,差别就比较大。这正说明,对修正和壳修正在低能端是影响较大的因素。在(14)式所示的低能修正中,没有包括这些因素。它们的差别由参数 g 和 c 反映了。

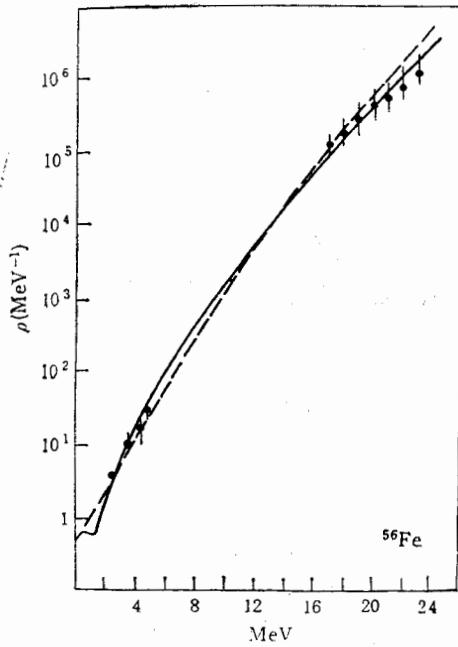


图 1 ^{56}Fe 的能级密度
虚线为 Gilbert-Cameron 公式的计算结果^[4]

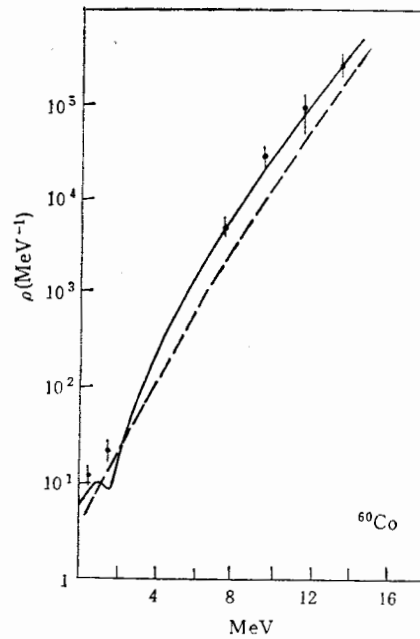


图 2 ^{60}Co 的能级密度
虚线为 Gilbert-Cameron 公式的计算结果^[4]

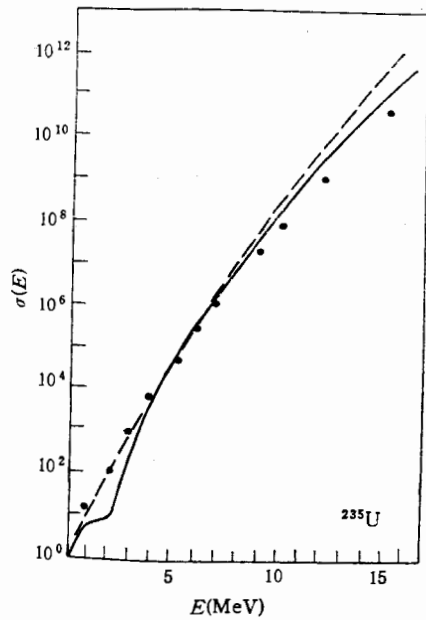


图 3 ^{235}U 的能级密度
虚线为 Gilbert-Cameron 公式的计算结果, 点为 Dilg 公式的计算结果

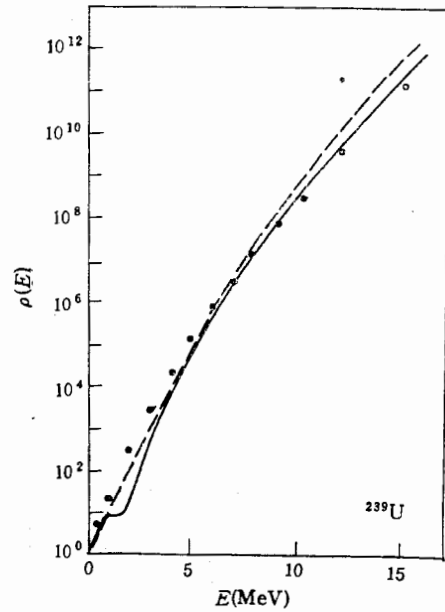


图 4 ^{239}U 的能级密度
虚线为 Gilbert-Cameron 公式的计算结果, 点为 Dilg 公式的计算结果^[12]

出来, g 和 c 的差别, 只能包含奇偶效应。看来, 在低能修正项中, 如何包括对修正与壳修正, 是需要进一步探索的问题。

积累只符

而因了

图1和图2分别给出了 Fe-56 和 Co-60 的能级密度计算结果。可以看出,在很宽的能量范围内,与实验是很好符合的。图3、图4、图5分别给出了 U-235、U-239 和 Pu-240 的能级密度计算结果。所有这五个核素的计算结果都表明与 Dilg 公式的计算结果非常一致,比 Gilbert-Cameron 公式的计算结果(如图中虚线所示)略有改善(见文献[4]及[15])。由图可以看出,在1—2MeV 范围内,出现了起伏结构。这是我们公式出现的典型情况。

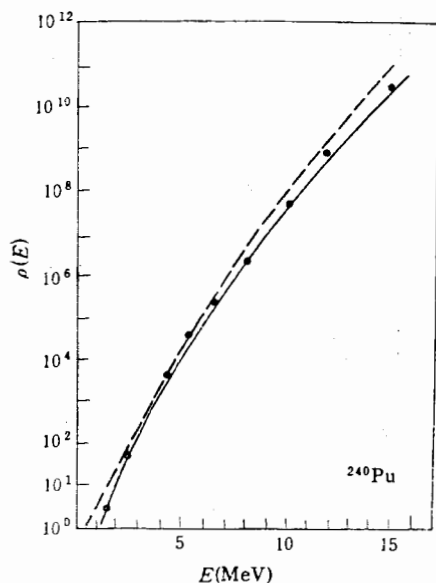


图5 ^{240}Pu 的能级密度

虚线为 Gilbert-Cameron 公式的计算结果,点为 Dilg 公式的计算结果^[15]

五、小 结

从我们的计算结果可以得到如下几点认识:

1. 能级密度公式(15)的形式,具有普适性,但它的低能行为需要作修正。

2. 在低能段对能级密度公式修正,采用(14)式所表示的形式,是可行的。它保持了公式的光滑连续性。

3. 把核素分为奇 A 核、偶-偶核和奇-奇核,分别使用不同的自旋切割因子及其它参数,可以改善计算结果。然而这并不一定是最好的分群方式。如何更合理的分群,但参数分类规范化,需要作细致工作。

本工作是在核工业部数据中心及贵州科学院科学基金资助下完成的。在工作中得到了卓益忠研究员的热情帮助。徐躬耦教授、王顺金教授曾提出过有益意见,在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 卓益忠、苏宗淦, hsj-78239(11js).
- [2] H. A. Bethe, *Phys. Rev.*, **50**(1936), 332.
- [3] A. Gilbert and A. G. W. Cameron, *Can. J. Phys.*, **43**(1965), 1446.
- [4] W. Dilg, W. Schantl and H. Vonach, *Nucl. Phys.*, **A217**(1973), 269.
- [5] A. Б. Игнатюк И др., *Я. Ф.* **21**(1975), 485.
- [6] D. W. Lang, *Nucl. Phys.*, **77**(1966), 545.
- [7] 王顺金等, *高能物理与核物理*, **4**(1980年), 236.
- [8] W. D. Meyers et al., *Ark. Fys.*, **36**(1967), 343.
- [9] W. D. Myers and W. J. Swiatecki, *Nucl. Phys.*, **81**(1966), 1.
- [10] 核素常用数据表, 原子能出版社(1977).
- [11] 陆中道、卓益忠, 原成 [80]—009 (内部).
- [12] J. L. Cook and E. K. Rose, National Library of Australia Card number and ISBN 0 642, 59730. 8
- [13] T. Dossing and A. S. Jensen, *Nucl. Phys.*, **A222**(1974), 493—511.
- [14] V. Benzi, G. Maino and E. Menapace, *il Nuovo Cimento* **66A**(1981), 1.
- [15] 张竞上, 苏宗淦, hsj-78229 (11js).

A SYNTHESIS LEVEL DENSITY FORMULA

LU HAITAO DIAO HAO ZHANG MAOLIN

(Guizhou University, Guiyang)

ABSTRACT

Based on the recommended level density formula of the Fermi gas model and considering the modifications at low excitation energy, a synthesis level density formula is proposed. From the mean neutron resonance spacing \bar{D}_{exp} for 248 nuclei and the cumulative numbers of levels for 529 nuclei, a set of parameters is determined.