

质子与裂变核 ^{238}U 反应的理论计算*

于洪伟^{1,1)} 蔡崇海² 赵志祥¹

1(中国原子能科学研究院 北京 102413)

2(南开大学物理科学学院 天津 300071)

摘要 利用球型光学模型、耦合道理论、核内级联、激子模型、蒸发模型、带宽度涨落修正的 Hauser-Feshbach 模型, Bohr-Wheeler 裂变理论, 对入射能量从阈能到 200MeV 的 $p + ^{238}\text{U}$ 各种反应进行了计算, 计算结果和实验符合较好.

关键词 ADS 裂变 $p + ^{238}\text{U}$ 模型理论 核数据

1 引言

由于加速器技术的发展, 使加速器驱动的次临界系统(ADS)的实现成为可能. ADS 系统用强流质子加速器获得的中能质子去轰击重金属靶, 产生大量的散裂中子, 次临界反应堆在散裂中子的驱动下在次临界状态下发生核反应, 进行能量倍增, 废物嬗变. 由于 ADS 能够有效地解决长寿命核废料的最终处理与资源的有效利用问题, 作为核能可持续发展的创新技术路线, ADS 近年来在国际上形成了一个研究热点^[1-5].

与核动力堆(PWR)相比, ADS 系统对核数据有更多的要求, 特别是中高能核数据^[6]和与散裂中子靶有关的核反应数据, 结构材料与堆内中高能粒子相互作用的核数据, 加速器屏蔽以及次临界堆屏蔽需要的核数据等. 这些数据包括靶的中子产额, 泄漏中子的能谱和空间分布, 靶和靶窗的辐照损伤以及散裂碎片在靶内的分布和累计, 次临界反应堆内中高能粒子与结构材料的反应截面, 辐照损伤等.

^{238}U 作为重要的裂变核, 其与质子反应的数据被列为研究 ADS 系统最高优先级的核数据需求中^[7]. 因为其计算难度比较大, 已有的中高能核数据库如美国的 LA150 库、日本的中高能核数据库均

没有 $p + ^{238}\text{U}$ 的数据, 在现有的理论计算中, 光学模型采用了分能段的光学势, 提供的数据也不全, 远不能满足 ADS 的需要.

本文作者之一蔡崇海研制了适用于裂变核的中能区核数据计算程序 MENDF, 其理论框架为球型光学模型、基于经验公式的核内级联、以激子模型为基础的预平衡理论、蒸发模型、带宽度涨落修正的 Hauser-Feshbach(HF)理论, 裂变计算用 Bohr-Wheeler 理论. 用 MENDF 计算了入射质子能量直到 200MeV 的 $p + ^{238}\text{U}$ 各种反应数据.

2 理论模型和参数

2.1 光学模型参数的确定

质子入射的总反应截面、弹性散射角分布、预平衡理论中的“逆截面”、HF 理论中的“穿透因子”都由球型光学模型计算得到. 在本工作中, 采用唯象的 Koning-Delaroche 型光学势^[8], 用光学模型调参程序 APMN 让计算的总反应截面和弹性散射角分布与相应的实验数据达到最佳符合来确定光学势参数. 由于 $p + ^{238}\text{U}$ 的总反应截面的实验数据较少, 还参考了 $p +$ 天然 U, ^{232}Th , ^{208}Pb 的总反应截面的实验数

2004-07-27 收稿

* 国家重点基础研究发展规划项目(G1999022603)资助

1) E-mail: hongwei@iris.ciae.ac.cn

据.得到的一套最佳光学势参数为(下面各符号的意义参见文献[8]):

$$\begin{aligned}
 V_1 &= 56.45085 + 21.0(N - Z)/A - 0.024A, \\
 V_2 &= 0.0084901 + 4.23 \times 10^{-6}A, \\
 V_3 &= 5.33865 \times 10^{-5} + 1.1360 \times 10^{-8}A, \\
 V_4 &= -8.0 \times 10^{-9}, \\
 W_1 &= 8.300455 + 0.009629A, \\
 W_2 &= 109.3994 + 0.0795A, \\
 d_1 &= 25.456455 + 16.0(N - Z)/A, \\
 d_2 &= 0.0184418 + 0.003802/(1 + \exp[(A - 156.0)/8.0]), \\
 d_3 &= 10.389516, \\
 V_{so1} &= 9.75558 + 0.0030A, \\
 V_{so2} &= 0.0070639, \\
 W_{so1} &= -0.0000002, \\
 W_{so2} &= 280.0000, \\
 E_f &= -8.4075 + 0.01378A, \\
 r_c &= 0.70 + 0.697A^{-2/3} + 12.994A^{-5/3}, \\
 r_v &= 1.2550577 - 0.4054A^{-1/3}, \\
 a_v &= 0.7926494 - 1.487 \times 10^{-4}A, \\
 r_w &= 1.4368911 - 0.4054A^{-1/3}, \\
 a_w &= 0.7440530 - 1.487 \times 10^{-4}A, \\
 r_d &= 1.2388047 - 0.01585A^{1/3}, \\
 a_d &= 0.4804756 + 5.205 \times 10^{-4}A, \\
 r_{so} &= 1.2692896 - 0.647A^{-1/3}, \\
 a_{so} &= 0.6680794.
 \end{aligned}$$

图 1、图 2 给出了利用这组光学势参数得到的计算结果与实验数据的比较.可以看到理论结果很好地再现了实验数据.

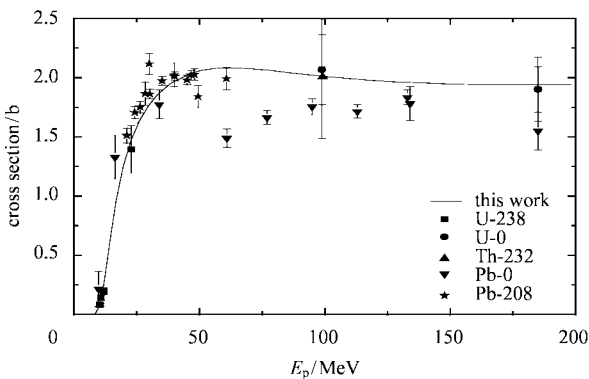


图 1 p + ²³⁸U 的总反应截面

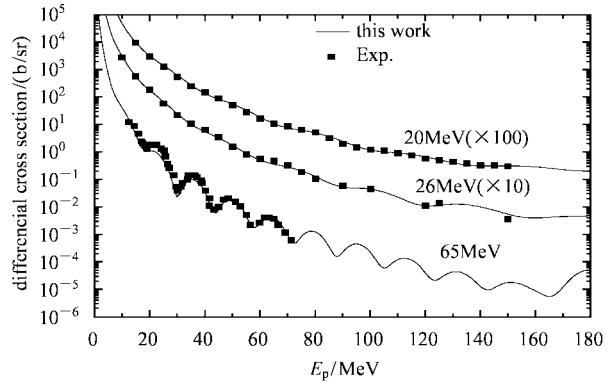


图 2 p + ²³⁸U 弹性散射角分布

2.2 直接非弹散射截面

MENDF 程序不能计算直接非弹散射截面,采用 P.G. Young 的变形光学模型参数^[9],通过耦合道理论程序 ECIS97 计算得到,然后将 ECIS97 算出的结果作为输入数据送给 MENDF 程序处理.直接非弹计算中所用能级的激发能,自旋,宇称,形变参数见表 1.

表 1 直接非弹计算中所用能级的激发能,自旋,宇称,形变参数

level/MeV	J	π	β ₂	β ₄
0.044910	2.0	+1	0.1980	0.057
0.148410	4.0	+1	0.1980	0.057

2.3 裂变理论和裂变参数

虽然关于裂变计算已有许多模型理论及微观理论,但是对于核数据计算及评价而言,它们并不能得到令人满意的结果.为了能较好地符合实验数据,我们采用成熟的 Bohr-Wheeler 理论^[10],再通过调节若干“裂变参数”来获得满意的计算结果.

对于一次发射和裂变,低能(3—5.5MeV 以下)用 Hauser-Feshback (HF) 统计理论计算,较高能量(3—5.5MeV 以上)用预平衡(PE)统计理论计算,由于两种理论不同,为符合实验数据,不要求所有参数都取相同的值;在 HF 和 PE 理论中各有 7 个可调参数,其中两个取相同的值.对于 2,3 次粒子发射和裂变过程,PE 理论也各有 7 个可调参数.对于 4 次及以上过程,裂变截面实验值中的“台阶”现象已不明

显,不再分“台阶”调参数,而是统一取一组参数: $\Delta a, \Delta \Delta f, Vf_{01}, Vf_{02}, E_{ph}, K_{ph0}, K_{ph1}, K_{ph2}, K_{ph3}$,对 4 次及以上的高次过程, a 和 Δ 由 GCCI(Gilbert-Cameron-Cook-Ignatyuk)公式和参数计算, $a_f = a + \Delta a, \Delta_f = \Delta + \Delta \Delta f, Vf_{01}$ 用于计算 $\sigma_{4nf}, \sigma_{6nf}, \dots$ 等, Vf_{02} 用于计算 $\sigma_{3nf}, \sigma_{5nf}$ 等,对于 $\sigma_{4nf}, \sigma_{6nf}, \dots$ 等, hw 用与 σ_f 和 σ_{2nf} 相应的 hw 的算术平均值,对于 $\sigma_{3nf}, \sigma_{5nf}, \dots$ 等, hw 用与 σ_{nf} 相应的 hw 值,如果粒子能量 $E_L \leq E_{ph}$,则 $K_1 = E_{ph0}$.

如果粒子能量 $E_L > E_{ph}$,则

$$K_1 = K_{ph0} [1.0 + K_{ph1} \sqrt{E_L < E_{ph}} + K_{ph2} (E_L < E_{ph}) + K_{ph3} (E_L < E_{ph})^2],$$

因此对于 PE 理论的截面计算而言,共有 $5 + 7 + 7 +$

$7 + 9 = 28$ 个可调参数,再加上激子模型的 Kulbach 参数 DK ,共计 29 个可调参数,通过调整这些参数(程序自动或手动)可使 $\sigma_f, \sigma_n, \sigma_{2n}, \sigma_{3n}$ 等截面的计算值和实验值相符合.在实际计算中,对于质子入射情况由于库仑位垒的作用,6.5MeV 以下的总反应截面非常小,也就不必用 HF 理论了.6.5MeV 以上用预平衡统计理论计算,也就只需调整预平衡统计理论中的“裂变参数”了.

通过 EXFOR 检索,发现对于 $p + ^{238}\text{U}$ 反应, $\sigma_f, \sigma_n, \sigma_{3n}$ 有实验数据, σ_{2n} 没有实验数据,通过调整裂变参数使 $\sigma_f, \sigma_n, \sigma_{3n}$ 等截面的计算值和实验值相符合,得到了一组适用于 $p + ^{238}\text{U}$ 反应的裂变参数,见表 2.

表 2 1,2,3 次粒子发射和裂变过程中的裂变参数

process		a	Δ	a_f	Δ_f	V_{f0}	$h\omega$	K_1
PE	1st	25.000	2.750	28.12	2.3991	7.4544	0.550	1.00148
	2nd	30.835	-0.233	33.90	0.6019	4.7753	0.787	9.23789
	3rd	30.938	-1.434	29.76	0.4744	5.0796	0.480	8.39549

3 计算结果和分析

把得到的光学模型参数、“裂变参数”和直接非弹散射截面作为输入数据,用 MENDF 程序计算得到 $p + ^{238}\text{U}$ 反应的各种数据.

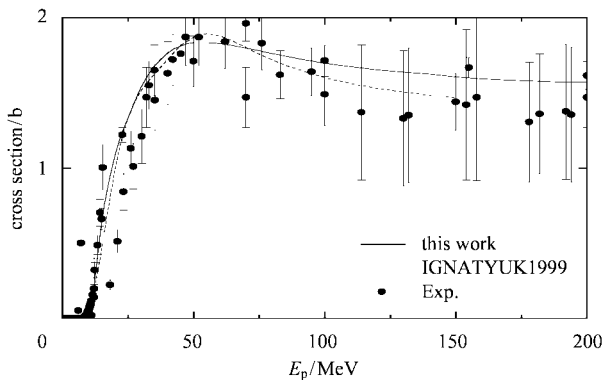


图 3 $p + ^{238}\text{U}$ 裂变截面

图 3 是理论计算的裂变截面和实验数据及 Ignatyuk^[11] 计算结果的比较.从图中可以看到,在入射能量小于 50MeV 时,计算结果和对实验数据的判断与 Ignatyuk 一致,入射能量大于 50MeV 时,计算结果与 Ignatyuk 出现差别.分析实验数据,裂变截面高能

端偏低的裂变截面实验数据误差比较大,年代比较早.通过文献[11]我们发现,Ignatyuk 裂变截面较低的原因还在于其光学模型计算的反应截面较低,而光学模型计算的反应截面与 100MeV 和 190MeV 附近的²³⁸U, ^{nat}U 的实验数据符合得较好(见图 1).图 4、图 5 分别是 σ_n 和 σ_{3n} 截面的计算结果和实验值的比较.通过以上分析和比较,可以看出我们的计算结果比较合理.

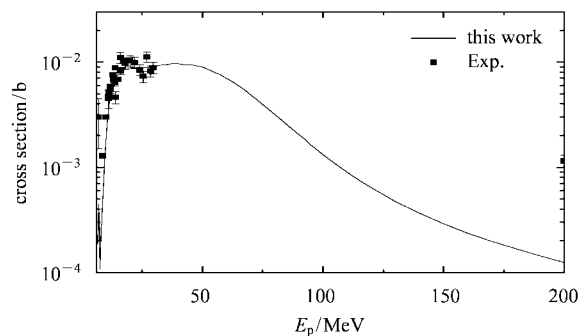


图 4 $^{238}\text{U}(p, n)$ 反应截面

在 ADS 设计中,除了 n 和 p 的产生截面数据非常重要外,d, t, α 的产生截面,虽然对重靶来说这些截面一般小于中子和质子的产生截面,但它们对于损伤、热工和气体产生来说仍然很重要.由于实验数

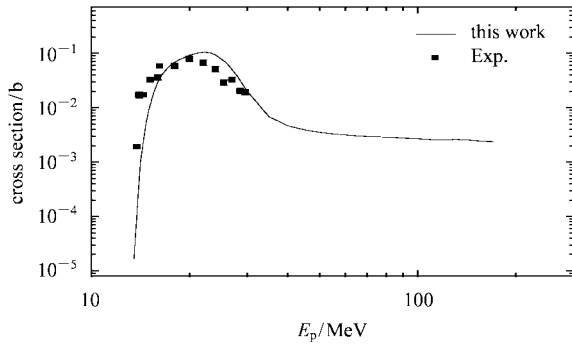


图 5 $^{238}\text{U}(p,3n)$ 反应截面

据非常缺乏,需要从理论上正确预言这些数据,图 6、图 7 是计算的产生截面,需要指出的是,由于程序中技术上的困难,对于较高的入射质子能量(比如 $E_p > 100\text{MeV}$),计算的 d, t, α 产生截面肯定低于实际值,随着能量的增高,可能需要乘以 1 到 2 的因子。

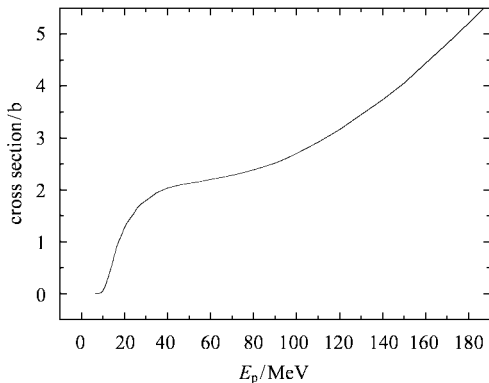


图 6 中子产生截面

俄罗斯镭研究所的 Batenkov^[12] 最近在瑞典的 T. Sveberg 实验室,测量了 50MeV 和 96MeV 入射质子与 ^{238}U 裂变反应,总的发射中子数(包括裂变前发射和裂变中子)的随出射中子能量分布的实验数据.图 8 给出了我们的计算结果和实验数据的比较,从图中可以看出计算结果与实验值大致符合.对于 50MeV,似乎计算的中子总谱比实验值偏硬些;对于 96MeV,计算的低能中子明显低于实验值,高能端计算值也低于实验数据.假设实验测量没有问题,单从理论计算方面寻找原因,很可能在 96MeV 处计算的裂变截面偏低了,因为如果把计算曲线整体向上移动一些就会得到与 50MeV 类似的图形.所以理论计算中的一个问题是中子总谱比实验值偏硬些;另一

个问题是完全没有考虑直接 (p, n) 反应,无法得到出射中子高能端实验数据中的“平台”。

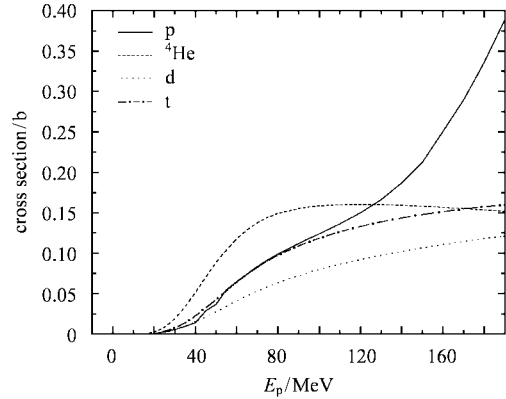


图 7 质子、氦、氘和 ^4He 产生截面

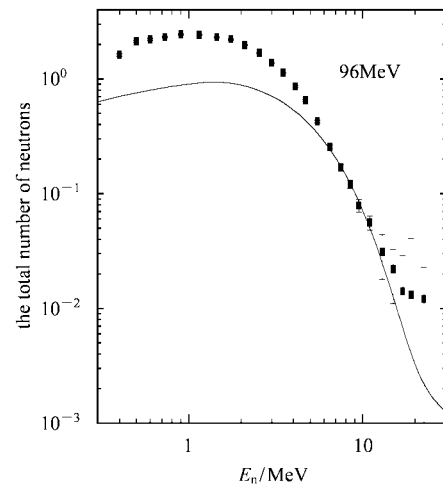
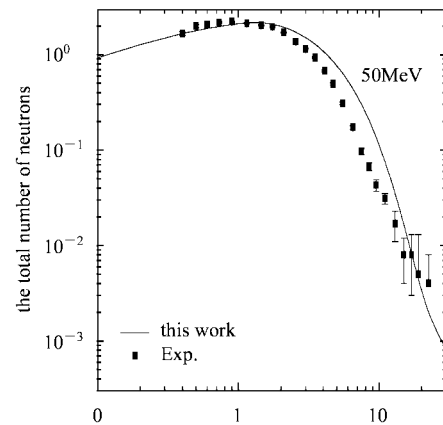


图 8 总的出射中子数随出射中子能量的分布

4 结论

利用球型光学模型、耦合道理论、核内级联、激子模型、蒸发模型、带宽度涨落修正的 Hauser-Feshbach 理论,加上裂变的 Bohr-Wheeler 理论,对入射能量从阈能到 200MeV,质子与 ^{238}U 的各种反应进行了

计算,对部分计算结果,比如总反应截面,裂变截面,中子、质子、氘、氚和 ^4He 的产生截面,总的出射中子数随出射中子能量的分布等,与实验数据进行了比较与分析,得到了 ADS 设计所需要的质子与裂变核 ^{238}U 的各种反应数据,同时也对我们采用的理论和程序系统做了一次检验.

参考文献 (References)

- 1 Bowman C D et al. Nucl. Instrum. Methods, 1992, **A320**: 336
- 2 Carminati R et al. CERN/AT 93-47 (ET), 1993
- 3 Rubbia C et al. Conceptual Design of a Fast Neutron Operated High Power Energy Amplifier. CERN/AT/(% -44(ET)), 1995
- 4 Arodriamonje S et al. Phys. Lett., 1995, **B348**: 697
- 5 DING Da Zhao. Joint IAEA/CNNC Seminar 21st Century Nuclear Energy Development in China. Beijing, China. 1997
- 6 Nishida T, Takada H et al. Nuclear and Nucleon Data needs for Incineration of the Radioactive Waste from Fission Reactors with a Proton Accelerator, in Nuclear Data for Science and Technology. Julich, 1991
- 7 Koning A J, Fukahori T, Hasegawa A. Intermediate Energy Data, NEA/WPEC-13 ECN-RX-98-014
- 8 Koning A J, Delaroche J P. Nucl. Phys., 2003, **A713**: 231
- 9 Young P G. LA-11972-PR, 1990, 9
- 10 Bohr N, Wheeler J A. Phys. Rev., 1939, **56**: 426
- 11 Ignatyuk A V, Lunev V P et al. Nucl. Sci. Eng., 2000, **136**: 340
- 12 Batenkov O. Private Communication, V. G. Khlopin Radium Institute

Theoretical Calculations for $p + ^{238}\text{U}$ Reactions*

YU Hong-Wei^{1;1)} CAI Chong-Hai² ZHAO Zhi-Xiang¹

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

2 (Nankai University, Institute of Physics, Tianjin 300071, China)

Abstract Based on the spherical optical model, the Coupled-Channels theory, the empirical formula based intranuclear cascade mechanism for nucleon emission, the exciton model, the evaporation model and the Hauser-Feshbach statistical theory with width fluctuation correction, the reaction data are calculated for $p + ^{238}\text{U}$ in the energy region from threshold up to 200MeV, the fission widths are calculated with Bohr-Wheeler formula. The calculated results are generally in good agreement with the experimental data.

Key words ADS, fission, $p + ^{238}\text{U}$, model theory, nuclear data

Received 27 July 2004

* Supported by Major State Basic Research Development Programm(G1999022603)

1) E-mail: hongwei@iris.ciae.ac.cn