

DOI:10.22144/ctujos.2025.050

TÍNH TOÁN TIẾT DIỆN PHẢN ỨNG $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$

Phạm Ngọc Sơn

Viện Nghiên cứu hạt nhân, 01 Nguyễn Tử Lực, Đà Lạt, Việt Nam

*Tác giả liên hệ (Corresponding author): pnson.nri@gmail.com

Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 09/09/2024

Sửa bài (Revised): 28/10/2024

Duyệt đăng (Accepted): 30/12/2024

Title: Calculation of the $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ reaction cross-section**Author(s):** Pham Ngoc Son**Affiliation(s):** Dalat Nuclear Research Institute, Viet Nam

TÓM TẮT

Số liệu tiết diện phản ứng hạt nhân $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ đã được tính toán cập nhật trên cơ sở các tham số cộng hưởng phân giải được trong vùng năng lượng từ 100 eV đến 9 keV. Một chương trình máy tính được gọi là CrossCom đã được nhóm nghiên cứu phát triển để sử dụng trong tính toán tiết diện phản ứng (n,γ) trong miền năng lượng cộng hưởng phân giải được. Chương trình này cũng có thể sử dụng để phân tích tham số cộng hưởng, phục vụ công tác nghiên cứu và đào tạo. Trong bài viết này, kết quả tính toán tiết diện phản ứng bắt neutron-bức xạ gamma đối với hạt nhân ^{139}La được trình bày. Trong đó, công thức gần đúng Breit-Wigner đã được sử dụng để tính toán tiết diện phản ứng và mô hình Free Gas Model được sử dụng để tính toán hiệu ứng mở rộng đỉnh Doppler tại nhiệt độ 300°K. Các kết quả tính toán có sự phù hợp tốt khi so sánh với số liệu trích dẫn từ cơ sở dữ liệu phản ứng hạt nhân.

Từ khóa: La-139, neutron, tiết diện phản ứng

ABSTRACT

The $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ nuclear reaction cross-sections were calculated on the basis of resolvable resonance parameters in the energy range from 100 eV to 9 keV. A computer program called CrossCom has been developed to perform a detailed computational model for the (n,γ) reaction in the energy region of resolved resonances and resonant parameter analysis for research and educational purposes. In this report, the Breit-Wigner approximation model was used to calculate the reaction cross-sections. The Free Gas Model was used to calculate the Doppler peak broadening effect at an ambient temperature of 300°K. The calculated results are in good agreement in comparison with the reference data extracted from the nuclear reaction database.

Keywords: La-139, neutron, reaction cross-section

1. GIỚI THIỆU

Phản ứng bắt neutron bức xạ gamma (n,γ) diễn ra khi một hạt nhân bia $^A\text{X}_Z$ hấp thụ một neutron tạo thành hạt nhân hợp phần $^{A+1}\text{X}_Z$ ở trạng thái kích thích, năng lượng kích thích này bằng tổng động năng của hạt neutron tới và năng lượng hạt khối của

hệ trước và sau khi phản ứng hay còn được gọi là năng lượng liên kết của hạt nhân hợp phần với neutron. Khi năng lượng của hệ hạt nhân hợp phần bằng mức năng lượng của trạng thái kích thích trong hạt nhân $^{A+1}\text{X}_Z$ thì một cộng hưởng phản ứng sẽ được quan sát trong hàm tiết diện phản ứng bắt neutron bức xạ gamma của hạt nhân bia.

Hạt nhân La-139 có số neutron magic $n = 82$ và độ phổ biến chiếm 99,91%, số liệu tiết diện phản ứng bắt bức xạ neutron của hạt nhân này đặc biệt có ý nghĩa trong các lĩnh vực nghiên cứu cấu trúc hạt nhân, nghiên cứu cơ chế phản ứng hạt nhân, nghiên cứu sự hình thành độ phổ biến của các đồng vị nặng trong tự nhiên. Trong thời gian gần đây, số liệu hạt nhân của đồng vị này đã và đang được nhiều nhà khoa học quan tâm nghiên cứu và nhiều công trình về số liệu thực nghiệm mới đã được công bố như: Terlizzi et al. (2007) đã sử dụng thiết bị n-TOF đo số liệu tiết diện bắt neutron bức xạ gamma trong khoảng năng lượng cộng hưởng từ 100 eV đến 9 keV. O'Brien et al. (2003) đã đo số liệu tiết diện bắt bức xạ neutron tại phân bố phổ neutron Maxwell ở nhiệt độ tương đương 25 keV bằng phương pháp kích hoạt. Tan et al. (2003) đã đo tiết diện bắt bức xạ neutron tại năng lượng 54 keV và 148 keV sử dụng dòng neutron phân lọc từ lò phản ứng hạt nhân Đà Lạt.

Trên cơ sở lý thuyết ma trận-R (Vogt, 2005), một chương trình máy tính gọi là chương trình CrossComp đã được phát triển và áp dụng để tính toán số liệu tiết diện bắt bức xạ neutron trong vùng năng lượng cộng hưởng phân giải được và có thể áp dụng để phân tích tham số cộng hưởng từ số liệu thực nghiệm bằng thuật toán vòng lặp khớp bình phương tối thiểu phi tuyến (Madsen et al., 2004). Trong nghiên cứu này, chương trình CrossCom được sử dụng để tính toán tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng cộng hưởng từ 100 eV đến 9 keV. Các kết quả tính toán đã được hiệu chỉnh đối với hiệu ứng mở rộng đỉnh Doppler ở nhiệt độ 300°K và so sánh với số liệu trích dẫn từ cơ sở dữ liệu JENDL3.3 (Shibata et al., 2002) và ENDF/B-VII (Chadwick et al., 2006). Số liệu input là các tham số cộng hưởng và các số lượng tử spin trích dẫn từ tài liệu tham khảo đối với hạt nhân bia La-139 và hạt nhân hợp phần La-140.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Thành phần đóng góp của một đơn cộng hưởng tại năng lượng cộng hưởng E_0 vào tiết diện vi phân $\sigma_{(n,\gamma)}(E)$ của phản ứng bắt neutron (n,γ) được tính toán bằng công thức Breit-Wigner (Herman et al., 2008):

$$\sigma_{(n,\gamma)}(E) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{\sqrt{EE_0}} \left[\frac{g\Gamma_n\Gamma_\gamma}{4(E-E_0)^2 + \Gamma^2} \right] \quad (1)$$

$$g = \frac{2J+1}{2(2I+1)}; \quad m = \frac{A}{1+A}$$

Trong thực tế thường có nhiều đỉnh cộng hưởng trong một khoảng năng lượng nhất định, trong đó tại

mỗi đỉnh có năng lượng cộng hưởng E_r và các tham số cộng hưởng Γ_{nr} , $\Gamma_{\gamma r}$ và Γ_r , công thức (1) được tổng quát hóa thành biểu thức (Herman et al., 2008):

$$\sigma_{(n,\gamma)}(E) = \frac{2\pi\hbar}{m} \sum_r \left(\frac{1}{\sqrt{EE_r}} \right) \left[\frac{g_r\Gamma_{nr}\Gamma_{\gamma r}}{4(E-E_r)^2 + \Gamma_r^2} \right] \quad (2)$$

$$g_r = \frac{2J_r+1}{2(2I+1)}.$$

trong đó: I là spin của hạt nhân bia và J_r là spin của trạng thái cộng hưởng r ; Γ_n và Γ_γ là độ rộng cộng hưởng của kênh phản ứng neutron và bức xạ gamma tại năng lượng cộng hưởng E_r ; m là trọng số khối lượng của neutron và $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma$.

Các công thức (1) và (2) mô tả tiết diện phản ứng bắt neutron trong điều kiện nhiệt độ không tuyệt đối, tuy nhiên trong điều kiện nhiệt độ thực của môi trường khi xảy ra tương tác thì có sự mở rộng ở các đỉnh cộng hưởng trong hàm tiết diện phản ứng $\sigma_{(n,\gamma)}(E)$ nhưng diện tích của đỉnh cộng hưởng thì không đổi và được gọi là hiệu ứng mở rộng đỉnh Doppler. Nguyên nhân của hiệu ứng này là do sự chuyển động nhiệt của các hạt nhân trong bia mẫu. Để mô tả đúng thông tin về tiết diện phản ứng trong vùng cộng hưởng tại một điều kiện nhiệt độ trong thực tế, hoặc phân tích các tham số thực nghiệm đo tại một điều kiện nhiệt độ thực tế của môi trường thí nghiệm, bắt buộc chúng ta phải bổ sung các hàm tính toán hiệu chỉnh cho hiệu ứng này. Mô hình tính toán được sử dụng phổ biến hiện nay là mô hình mẫu khí tự do (Free-Gas Model of Doppler Broadening), được mô tả theo công thức sau (Larson et al., 1998):

$$\sigma_D(E) = \frac{1}{\Delta_D\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\frac{4(E-\sqrt{EE'})^2}{\Delta_D^2}} - e^{-\frac{4(E-\sqrt{EE'})^2}{\Delta_D^2}} \left[\sigma(E') \sqrt{\frac{E'}{E}} dE' \right] \quad (3)$$

$\Delta_D = \sqrt{\frac{4mEkT}{M}}$; m và M là số khối của neutron và hạt nhân bia; k là hằng số Boltzman, σ và σ_D là giá trị tiết diện trước và sau khi hiệu chỉnh hiệu ứng Doppler tại nhiệt độ T (°K).

Như vậy, vấn đề còn lại cần thiết trong bài toán là tập số liệu các tham số E_r , Γ_n , Γ_γ tương ứng với các trạng thái cộng hưởng. Các tham số này có thể tham khảo từ cơ sở dữ liệu (Mughabghab, 2006), bài báo quốc tế hoặc xác định được thông qua khớp số liệu đo thực nghiệm neutron truyền qua $T(E)$ (neutron transmission coefficients) hoặc suất lượng phản ứng bắt neutron $Y(E)$ (neutron capture yield),

điền hình như trong thực nghiệm bởi Macklin et al. (1991).

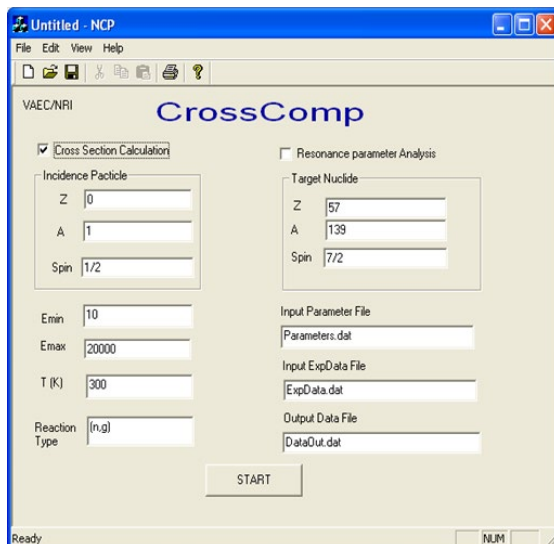
Mặc dù trong nghiên cứu này chưa có điều kiện đo thực nghiệm nhưng cũng đã phát triển chức năng khớp các tham số cộng hưởng trong chương trình CrossCom và có thể áp dụng để tính toán tiết diện phản ứng cũng như hướng đến việc phân tích tham số cộng hưởng neutron trong thời gian tới khi thiết lập được thực nghiệm sử dụng neutron-beam của lò phản ứng hạt nhân, hoặc tham gia hợp tác nghiên cứu với cơ sở thực nghiệm có liên quan khác.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Một input-file đã được chuẩn bị, trong đó, thông tin về các tham số cộng hưởng thực nghiệm của hạt nhân La-139 được sử dụng trong tính toán này (Terlizzi 2007). Ngoài ra, các giá trị khả dĩ của spin kênh vào s và spin các kênh ra J được xác định theo quy tắc tổ hợp vector spin:

$$|i - I| \leq s \leq i + I ; |s - I| \leq J \leq s + I \quad (4)$$

trong đó: s là các giá trị lượng tử của vector spin toàn phần của kênh vào ($\vec{S} = \vec{i} + \vec{I}$); J là các giá trị lượng tử của vector momen góc toàn phần ($\vec{J} = \vec{s} + \vec{I}$); $i = 1/2$ là giá trị spin của neutron; $I = 7/2$ là spin của hạt nhân bìa La-139; l là mômen góc quỹ đạo của cặp hạt neutron và hạt nhân bìa ($l = 0$ tương ứng với neutron sóng s và $l = 2$ tương ứng với neutron sóng p). Như vậy, các giá trị khả dĩ là $s = 3, 4$ và $J = 2, 3, 4, 5$.

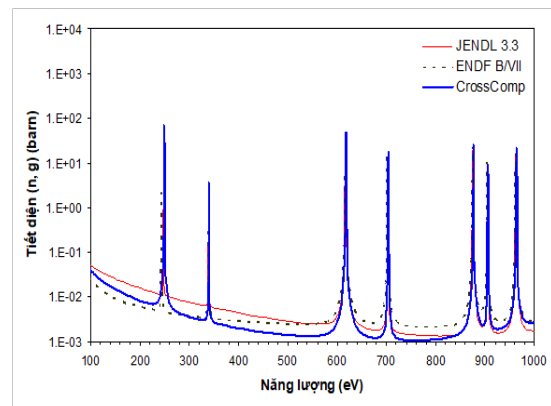


Hình 1. Giao diện nhập số liệu của chương trình CrossComp

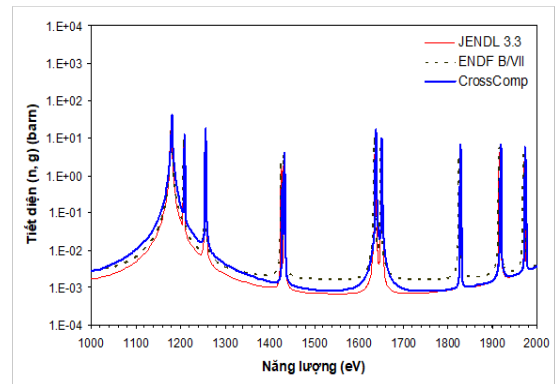
Các thông số đầu vào cơ bản như: số Z , A , spin ở trạng thái cơ bản của hạt tới (incident particle) và

hạt nhân bìa (target nuclid); khoảng năng lượng $E_{\min}$, $E_{\max}$; loại phản ứng (n, γ) để điều hướng chương trình tính toán đối với trường hợp của phản ứng bắt neutron (n, γ), ngoài ra cũng có thể chọn (n, n) hoặc (n, tot) đối với trường hợp tán xạ đàn hồi hoặc hấp thụ neutron toàn phần; chọn tên file số liệu input và output để cung cấp thông tin cho chương trình tính toán thông qua một giao diện như Hình 1.

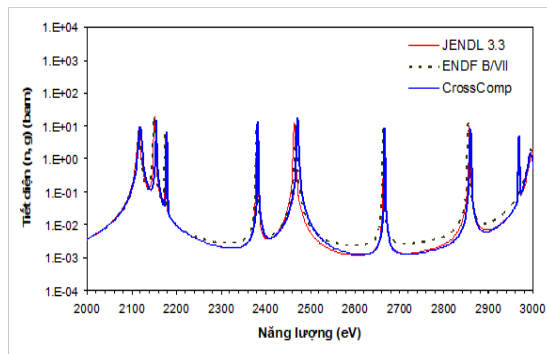
Các kết quả tính toán đã thực hiện trong khoảng năng lượng cộng hưởng từ $E_{\min} = 100$ eV đến $E_{\max} = 9$ keV, nhiệt độ $T = 300$ °K. Các kết quả so sánh với số liệu trích dẫn từ các cơ sở dữ liệu về số liệu tiết diện phản ứng hạt nhân có độ tin cậy cao như ENDF/B-7 (Chadwick et al., 2006) và JENDL3.3 (Shibata et al., 2002) được mô tả từ Hình 2 đến Hình 5.



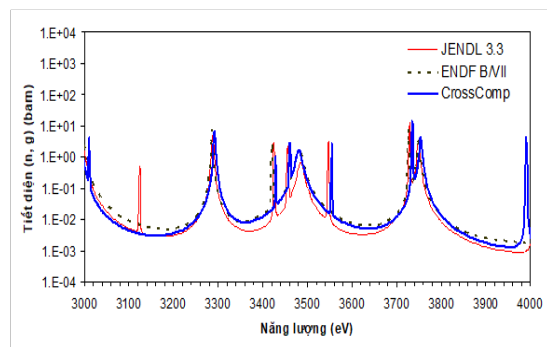
Hình 2. Kết quả tính toán và so sánh tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n, \gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng từ 100 eV đến 1 keV



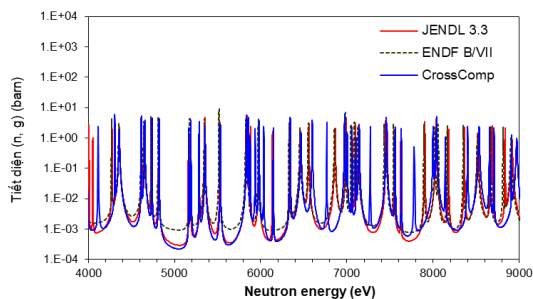
Hình 3. Kết quả tính toán và so sánh tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n, \gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng từ 1 keV đến 2 keV



Hình 4. Kết quả tính toán và so sánh tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng từ 2 keV đến 3 keV



Hình 5. Kết quả tính toán và so sánh tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng từ 3 keV đến 4 keV



Hình 6. Kết quả tính toán và so sánh tiết diện phản ứng $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ trong khoảng năng lượng từ 4 keV đến 9 keV

Kết quả tính toán cho thấy nhóm các đỉnh có độ rộng cộng hưởng lớn tương ứng với neutron sóng s (momen góc quỹ đạo $l = 0$) hiện diện chủ yếu trong vùng năng lượng thấp; cụ thể như các đỉnh 1178 eV trong Hình 3; 2116 eV và 2458 eV trong Hình 4; 3284 eV, 3484 eV và 3747 eV trong Hình 5. Nhóm các đỉnh có độ rộng cộng hưởng hẹp tương ứng với neutron sóng p (momen góc quỹ đạo $l = 1$) hiện diện chủ yếu trong vùng năng lượng cao hơn, như trong

Hình 6. Từ Hình 2 đến Hình 6 cho thấy các kết quả tính toán tiết diện phản ứng trong báo cáo này có sự phù hợp tốt khi so sánh với số liệu quốc tế tại đa phần các đỉnh cộng hưởng và nền liên tục trong toàn khoảng năng lượng từ $E_{\min} = 100$ eV đến $E_{\max} = 9$ keV. Điều này cho thấy rằng chương trình CrossComp và các số liệu input là phù hợp cho việc giải quyết vấn đề xác định tiết diện phản ứng bắt neutron-bức xạ gamma $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$. Một số sai khác về đỉnh năng lượng cộng hưởng giữa kết quả tính toán và số liệu so sánh chủ yếu là do có sự khác nhau về giá trị năng lượng E_r tại một số đỉnh cộng hưởng được cung cấp trong file số liệu input trên cơ sở các quan sát thực nghiệm khác nhau; chẳng hạn như trong hai tập số liệu tham khảo được sử dụng để so sánh là JENDL 3.3 và ENDF B/VII cũng có một số khác nhau về đỉnh năng lượng cộng hưởng, như trong Hình 5 và Hình 6. Điều này có thể khác phục khi có số liệu thực nghiệm mới với độ phân giải năng lượng cao hơn và có cập nhật trong những phiên bản mới của cơ sở dữ liệu về số liệu phản ứng hạt nhân.

4. KẾT LUẬN

Số liệu tiết diện phản ứng hạt nhân bắt neutron – bức xạ gamma có tính cần thiết cao trong nghiên cứu khoa học, ứng dụng và đào tạo. Tuy nhiên, để xác định được chính xác số liệu tiết diện phản ứng này trong khoảng năng lượng cộng hưởng neutron (từ eV đến hàng chục keV), ta cần thực hiện một quá trình nghiên cứu tính toán và đánh giá trên cơ sở áp dụng đồng bộ các phương pháp bao gồm mô hình tính toán lý thuyết, chương trình máy tính và thực nghiệm xác định các tham số cộng hưởng.

Kết quả tính toán và so sánh với số liệu trích dẫn từ cơ sở dữ liệu quốc tế cho thấy rằng chương trình CrossComp có thể được áp dụng để cung cấp số liệu tiết diện phản ứng (n, γ) trong khoảng năng lượng cộng hưởng phân giải được, đối với các hạt nhân bia khác nhau, tại các điều kiện nhiệt độ khác nhau theo yêu cầu của áp dụng thực tiễn; cụ thể như cung cấp số liệu tiết diện phản ứng cho thực nghiệm sản xuất đồng vị phóng xạ, phân tích kích hoạt neutron và thực hành trong công tác đào tạo có sử dụng nguồn neutron của lò phản ứng hạt nhân. Chương trình này cũng có khả năng tiếp tục phát triển để thực hiện tính toán đối với phản ứng tán xạ neutron đàn hồi (n, n) và hấp thụ neutron toàn phần (n, t).

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được hỗ trợ bởi Viện Nghiên cứu hạt nhân, (đề tài cấp viện mã số: CV01-2022; đề tài cấp cơ sở mã số: CS/08/01-04).

TÀI LIỆU THAM KHẢO (REFERENCES)

- Chadwick, M.B., Oblozinsky, P., Herman, M. (2006). *ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology*. Nuclear Data Sheets, Volume 107.
<https://doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001>.
- Herman, M., Mughabghab, S. F., Oblozinsky, P., Pigni M.T., and Rochman, D. (2008). *Neutron cross-section covariances in the resolved resonance region*. National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Report BNL-80173-2008.
- Larson, N. M., Moxon, M. C., Leal, L. C. & Derrien, H. (1998). *Doppler Broadening Revisited*, ORNL/TM-13525, Oak Ridge National Laboratory.
- Madsen, K., Nielsen, H. B., & Tingleff, O. (2004). *Methods for Non-Linear Least Squares Problems (2nd ed.)*. Technical University of Denmark.
- Mughabghab, S. F. (2006). *Atlas of Neutron Resonances: Resonance Parameters and Thermal Cross Sections, Z = 1-100*. 5th Edition, Elsevier.
- Macklin, R. L., Perez R., De Saussure G., & Ingle R. W. (1991). High energy resolution measurement of the ^{238}U neutron capture yield from 1 to 100 keV. *Annals of Nuclear Energy*, 18(10), 567-583.
[https://doi.org/10.1016/0306-4549\(91\)90056-4](https://doi.org/10.1016/0306-4549(91)90056-4)
- O'Brien, S., Dababneh, S., Heil, M., Käppeler, F., Plag, R., Reifarh, R., Gallino, R., & Pignatari, M. (2003). Neutron capture cross section of ^{139}La . *Phys. Rev. C* 68, 035801.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.68.035801>
- Shibata, K., Kawano, T., Nakagawa, T., Iwamoto, O., Katakura, J. Ichi, Fukahori, T., Chiba, S., Hasegawa, A., Murata, T., Matsunobu, H., Ohsawa, T., Nakajima, Y., Yoshida, T., Zukeran, A., Kawai, M., Baba, M., Ishikawa, M., Asami, T., Watanabe, T., Watanabe, Y., Igashira, M., Yamamuro, N., Kitazawa, H., Yamano, N., & Takano, H. (2002). Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-3: JENDL-3.3. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 39(11), 1125–1136.
<https://doi.org/10.1080/18811248.2002.9715303>
- Terlizzi, R., Abbondanno, U., Aerts, G., 'Alvarez, H., Alvarez-Velarde, F., Andriamonje, S., Andrzejewski, J., Assimakopoulos, P., Audouin, L., & n_TOF Collaboration. (2007). The $^{139}\text{La}(n,\gamma)$ Cross Section: Key for the Onset of the s-Process. *Physical Review C* 75, 035807.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.75.035807>
- Tan, V. H., Anh, T. T., Hai, N. C., Son, P. N., & Fukahori, T. (2007). *Measurement of Neutron Capture Cross Section of ^{139}La , ^{152}Sm and $^{191,193}\text{Ir}$ at 55keV and 44keV*. In Proc. of 2006 Symposium on Nuclear Data, SND2006-V.02-1, Jan. 25-26, 2007, RICOTTI, Tokai, Ibaraki, Japan.
- Vogt, E. W. (2005). *R-matrix Theory. Lectures at the R-Matrix School of the Joint Institute for Nuclear Astrophysics (JINA) at Notre Dame University*.
<https://archive.jinaweb.org/events/matrix/05-R-matrix.pdf>