

# ĐÁNH GIÁ CÁC MÔ HÌNH MẬT ĐỘ MỨC CỦA HẠT NHÂN $^{56}\text{Mn}$ DỰA TRÊN TIẾT DIỆN THỰC NGHIỆM CỦA PHẢN ỨNG $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$

Nguyễn Ngọc Anh<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Viện nghiên cứu Tiên tiến Phenikaa (PIAS), Trường Đại học Phenikaa, Hà Nội

<sup>2</sup>Khoa Khoa học Cơ bản, Trường Đại học Phenikaa, Yên Nghĩa, Hà Đông, Hà Nội

## Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 24/04/2024

Ngày phân biện: 24/04/2024

Ngày duyệt đăng: 07/05/2024

\*Tác giả chính:

anh.nguyennhoc1@phenikaa-uni.edu.vn

## Title:

Evaluation nuclear level density models for  $^{56}\text{Mn}$  nucleus based on experimental  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$  cross section.

## Từ khóa:

mật độ mức,  $^{56}\text{Mn}$ , tiết diện phản ứng  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$ .

## Keywords:

nuclear level density,  $^{56}\text{Mn}$ ,  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$  cross section.

**TÓM TẮT:** Trong nghiên cứu này chúng tôi tiến hành đánh giá các mô hình mật độ mức hạt nhân của hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$ . Các mô hình được đánh giá bao gồm ba mô hình hiện tượng luận và ba mô hình vi mô. Cụ thể, ba mô hình hiện tượng luận là Gilbert Cameron, khí Fermi dịch chuyển ngược và siêu chảy tổng quát. Ba mô hình vi mô là Hartree-Fock-BCS, Hartree-Fock-Bogolyubov kết hợp phương pháp tổ hợp (HFBC) và mô hình HFBC phụ thuộc nhiệt độ. Mật độ mức từ các mô hình trên được đưa vào chương trình Talys phiên bản 1.95 để tính toán tiết diện của phản ứng  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$ . Tiết diện mô phỏng sau đó được so sánh với tiết diện thực nghiệm. Kết quả thu được chỉ ra rằng không có bất cứ mô hình nào trong số sáu mô hình được đánh giá cho phép mô tả tốt dữ liệu thực nghiệm trên toàn bộ dải năng lượng của neutron tới, đặc biệt là vùng  $E_n = 2.7$  đến  $10$  MeV.

**ABSTRACT:** In this work, we have evaluated several nuclear level density (NLD) models of  $^{56}\text{Mn}$  nucleus. Three phenomenological and three microscopic models are involved. In detail, they are the Gilbert-Cameron, back-shifted Fermi gas, and generalized superfluid for the phenomenological group, and Hartree-Fock-BCS, Hartree-Fock-Bogolyubov plus combinatorial method (HFBC), and the temperature-dependent HFBC for the microscopic one. NLDs computed using these models have been used as inputs for Talys 1.95 code to calculate the  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$  reaction cross-sections. These calculated cross-sections were then compared with experimental data. The obtained results indicate that none of the involved NLD models are able to appropriately describe the experimental data throughout the whole energy range of incident neutrons ( $E_n$ ), particularly when  $E_n = 2.7$  to  $10$  MeV.

## 1. Giới thiệu vấn đề nghiên cứu

Cấu trúc của hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  được quan tâm nghiên cứu bởi hạt nhân này đóng vai trò quan trọng trong nhiều nghiên cứu cơ bản và ứng dụng. Hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  là một mắt xích trong chuỗi các phản ứng bắt neutron để hình thành nên các hạt nhân nặng trong vũ trụ. Để có được các tính toán chính xác, từ đó tìm ra bản chất và nguồn gốc của quá trình hình thành các nguyên tố nặng, ta cần có các

thông tin tin cậy về cấu trúc của các hạt nhân tham gia trong quá trình, mà  $^{56}\text{Mn}$  là một trong số đó. Các hiểu biết về cấu trúc của hạt nhân nói chung và  $^{56}\text{Mn}$  nói riêng là những thông tin vô cùng cần thiết để có thể chính xác hóa các hiểu biết về tương tác giữa các nucleon trong hạt nhân. Trên phương diện ứng dụng,  $^{56}\text{Mn}$  là một sản phẩm của phản ứng  $^{56}\text{Fe}(n,p)^{56}\text{Mn}$ . Phản ứng này xảy ra trong các lò phản ứng hạt nhân và là một trong các tác

nhân gây biến tính các vật liệu xây dựng lò phản ứng. Chính vì vậy, hiểu biết về cấu trúc của hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  sẽ cho phép ta đưa ra các thiết kế lò phản ứng an toàn và hiệu quả hơn. Những vấn đề nêu ra ở trên chỉ là một trong số rất nhiều các minh chứng cho sự cần thiết phải nghiên cứu cấu trúc hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$ .

Các thông tin về các mức kích thích gián đoạn của hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  đã được nghiên cứu thông qua rất nhiều các phản ứng và phương pháp khác nhau. Các thông tin này có thể được tìm thấy trong tài liệu [1] và các tài liệu tham khảo bên trong. Bên cạnh các trạng thái gián đoạn, mật độ mức hạt nhân cũng là một thông tin hết sức quan trọng. Khi năng lượng kích thích tăng cao, số lượng các mức kích thích gián đoạn dày đặc, khi đó trạng thái kích thích của hạt nhân cần phải được xem xét bằng công cụ thống kê. Mật độ mức cho phép ta xác định được số mức kích thích trung bình trong một khoảng năng lượng kích thích xác định, do đó là một đại lượng có ý nghĩa quan trọng. Mật độ mức cũng là một thông số quan trọng trong các tính toán tiết diện phản ứng hạt nhân [2].

Mặc dù vậy, số lượng dữ liệu về mật độ mức hạt nhân của các hạt nhân còn rất hạn chế. Với đa số các hạt nhân, người ta thường chỉ xác định được mật độ mức trong một số vùng năng lượng nhất định, thường là vùng năng lượng kích thích thấp (dưới 20 MeV). Trong khi đó, các tính toán đa số yêu cầu phải cung cấp mật độ mức hạt nhân cho một dải năng lượng kích thích rộng. Chính vì vậy, mật độ mức của các hạt nhân thường được xác định dựa trên các mô hình lý thuyết. Trong thực tế, có rất nhiều mô hình lý thuyết về mật độ mức hạt nhân, tuy nhiên chưa có mô hình nào có thể mô tả tốt cho tất cả các hạt nhân. Do đó, đối với mỗi hạt nhân cụ thể, ta nên tiến hành đánh giá để lựa chọn mô hình tốt nhất, trước khi sử dụng mật độ mức tính từ mô hình đó cho các tính toán khác.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sẽ tiến hành đánh giá một số mô hình mật độ mức hạt nhân cho hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  dựa trên dữ liệu thực nghiệm về tiết diện của phản ứng  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$ . Trong phần tiếp theo, chúng

tôi sẽ mô tả ngắn gọn các mô hình mật độ mức được đánh giá và phương pháp đánh giá.

## 2. Cơ sở lý thuyết và phương pháp nghiên cứu

### 2.1. Các mô hình mật độ mức tham gia đánh giá

Các mô hình mật độ mức được lựa chọn để tham gia đánh giá trong nghiên cứu này là các mô hình được sử dụng phổ biến nhất. Danh sách của các mô hình được đưa ra trong bảng danh sách các mô hình tham gia đánh giá.

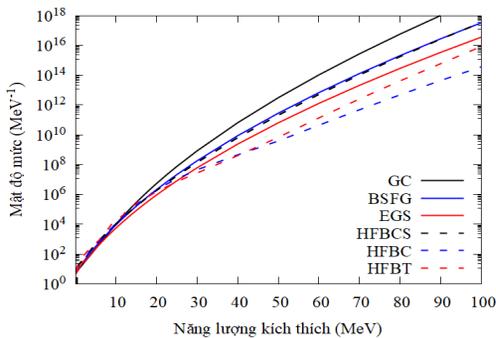
#### Danh sách các mô hình tham gia đánh giá

Mô hình	Tài liệu tham khảo
Khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG)	[3]
Gilbert Cameron (GC)	[3]
Siêu chảy tổng quát (EGS)	[4]
Hartree-Fock-BCS (HFBCS)	[5]
Hartree-Fock-Bogolyubov kết hợp phương pháp tổ hợp (HFBC)	[6]
HFBC phụ thuộc nhiệt độ (HFBT)	[7]

Thông tin chi tiết của các mô hình đã được trình bày trong các tài liệu tham khảo tương ứng, do đó sẽ không được lặp lại ở đây. Dưới đây, chúng tôi chỉ nêu ra một số đặc điểm chính các mô hình này. Mô hình đầu tiên phải kể tới là mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược. Mô hình này giả thiết rằng các trạng thái đơn hạt của các nucleon trong hạt nhân nằm cách đều nhau và hạt nhân được coi là một hệ hai fermion (phân biệt neutron và proton), đồng thời năng lượng kết cặp được xử lý như một tham số có thể thay đổi được. Mặc dù các giả thiết này khá đơn giản nhưng mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược lại là một mô hình có khả năng mô tả mật độ mức hạt nhân rất hiệu quả. Bảng

chúng là mô hình này đã được sử dụng trong rất nhiều các nghiên cứu hệ thống, ví dụ như [8]. Mô hình Gilbert Cameron kết hợp mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với mô hình nhiệt độ không đổi để có thể mô tả tốt hơn dữ liệu mật độ mức thực nghiệm ở vùng năng lượng kích thích thấp. Mô hình siêu chảy tổng quát đưa các tương quan kết cặp siêu dẫn để mô tả mật độ mức ở vùng năng lượng thấp. Nói cách khác, mô hình này được đặc trưng bởi sự chuyển pha từ trạng thái siêu chảy ở năng lượng thấp lên trạng thái khí ở năng lượng cao.

Đối với các mô hình vi mô, vốn dựa trên các tính toán sử dụng trường trung bình kết hợp với các hiệu chỉnh cho hiệu ứng tập thể, chúng tôi sử dụng hai mô hình tiêu biểu nhất, đó là mô hình HFBCS và HFBC. Hai mô hình này đã được sử dụng để xác định mật độ mức hạt nhân cho hơn 6000 hạt nhân. Các dữ liệu tính toán này được lưu trữ trong các thư viện tham số hạt nhân RIPL-2 [9] và RIPL-3 [10] được xây dựng và quản lý bởi cơ quan nguyên tử năng thế giới (IAEA). Mô hình còn lại là HFBT là một phiên bản nâng cấp của HFBC trong đó các tính toán Hartree-Fock-Bogolyubov phụ thuộc nhiệt độ được thực hiện bằng cách sử dụng lực Gogny DIM.



**Hình 1.** Mật độ mức hạt nhân trong vùng năng lượng từ 0 đến 100 MeV tính từ các mô hình tham gia đánh giá.

Hình 1 trình bày mật độ mức tính từ các sáu mô hình tham gia đánh giá cho dải năng lượng từ 0 đến 100 MeV. Ta có thể thấy rằng, từ trên 20 MeV, mật độ mức có sự khác biệt rất lớn giữa các mô hình. Do đó, sự cần

thiết phải đánh giá để lựa chọn một mô hình phù hợp nhất là rất cần thiết.

## 2.2. Phương pháp đánh giá

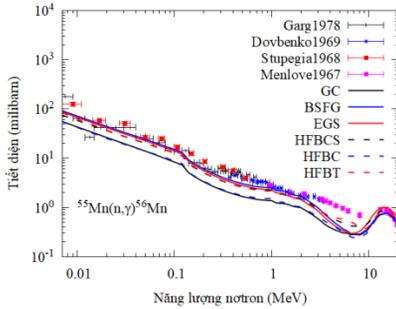
Để nhận định mô hình mật độ mức nào phù hợp với hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$ , chúng tôi đưa các mật độ mức xác định từ các mô hình vào chương trình Talys phiên bản 1.95 để tính toán tiết diện của phản ứng  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$ . Số liệu này sau đó được so sánh với dữ liệu thực nghiệm. Talys [11] là chương trình tính toán tiết diện phản ứng được sử dụng phổ biến và rộng rãi nhất trong cộng đồng vật lý hạt nhân thế giới. Trong các tính toán Talys của chúng tôi, tất cả các thông số tham gia khác, ngoại trừ mật độ mức, được sử dụng ở chế độ mặc định để đảm bảo tính nhất quán. Trong thực tế, tính toán tiết diện của phản ứng bắt neutron không chỉ phụ thuộc vào mật độ mức, mà còn phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác như hàm lực bức xạ, sơ đồ mức gián đoạn ở vùng năng lượng thấp, khối lượng của các hạt nhân bia và hạt nhân hợp phân, v.v. Tuy nhiên, không giống như mật độ mức, các thông số liên quan khác có tầm ảnh hưởng nhỏ hơn và có các khuyến cáo sử dụng được đưa ra trong thư viện số liệu hạt nhân RIPL-2 và RIPL-3 [10], [11]. Ngoài ra, việc cố định tất cả các thông số sẽ giúp ta nhận diện rõ được vai trò ảnh hưởng của mật độ mức tới tiết diện tính toán được.

## 3. Kết quả và thảo luận

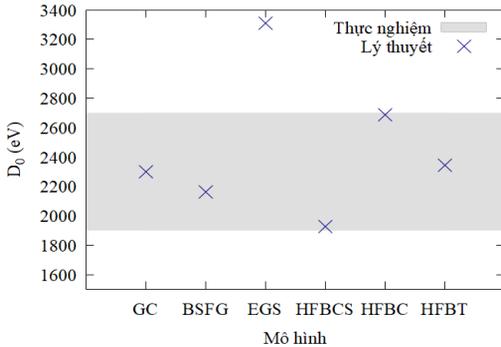
Tiết diện tính toán dựa trên sáu mô hình mật độ mức được so sánh với các dữ liệu thực nghiệm Garg1978 [12], Dovbenko1969 [13], Stuepial1968 [14] và Menlove1967 [15] trong Hình 2.

Hình 2 cho thấy, mô hình GC và HFBC không thể mô tả dữ liệu thực nghiệm trong toàn bộ dải năng lượng neutron. Hai mô hình hiện tượng luận là BSFG và EGS mô tả tốt dữ liệu thực nghiệm trong vùng năng lượng nhỏ hơn 0.1 MeV. Hai mô hình này cũng đưa ra dự đoán khá gần với dữ liệu thực nghiệm trong vùng năng lượng từ 0.1 đến 1 MeV. Tuy nhiên trong cả hai mô hình này, chúng ta

có thể thấy sự xuất hiện của một điểm gãy ở khoảng 2.7 MeV, khiến chúng hoàn toàn thất bại trong việc mô tả dữ liệu thực nghiệm trong vùng từ 2.7 đến 10 MeV. Hai mô hình vi mô là HFBCS và HFBT mô tả dữ liệu thực nghiệm kém hơn một chút so với các mô hình BSFG và EGS trong vùng năng lượng nhỏ hơn 2.7 MeV, tuy nhiên 2 mô hình này lại gần với dữ liệu thực nghiệm hơn trong vùng từ 2.7 đến 10 MeV.



**Hình 2.** So sánh tiết diện mô phỏng tương ứng với các mô hình mật độ mức khác nhau với số liệu thực nghiệm.

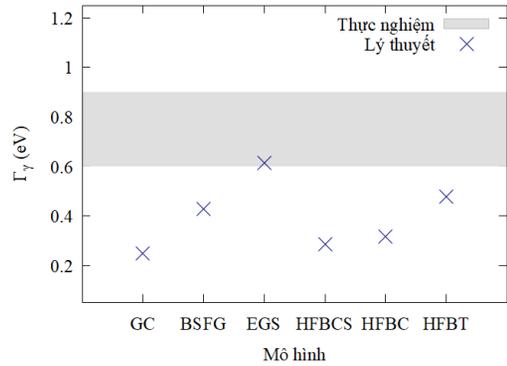


**Hình 3.** So sánh tiên đoán  $D_0$  lý thuyết với giá trị thực nghiệm.

Nhìn chung trong tất cả các kết quả tiết diện mô phỏng, ta đều quan sát thấy hai điểm gãy (nơi thay đổi độ dốc của dữ liệu thay đổi) ở khoảng 0.1 MeV và 2.7 MeV. Các điểm gãy này hoàn toàn không phù hợp với các quan sát trong dữ liệu thực nghiệm. Nhìn chung, cả sáu mô hình đều không thành công trong việc mô tả dữ liệu thực nghiệm khi xét tới toàn bộ dải năng lượng neutron tới từ 0 đến 20 MeV.

Hình 3 và Hình 4 lần lượt so sánh tiên đoán lý thuyết về giá trị khoảng cách mức

trung bình ở năng lượng liên kết neutron  $D_0$  và độ rộng bức xạ toàn phần  $\Gamma_\gamma$  với số liệu thực nghiệm. Đây là hai đại lượng thực nghiệm quan trọng, thường được sử dụng để chuẩn hóa nhiều mô hình lý thuyết hạt nhân khác nhau.



**Hình 4.** So sánh tiên đoán  $\Gamma_\gamma$  lý thuyết với giá trị thực nghiệm.

Hình 3 cho thấy tất cả các mô hình ngoại trừ EGS đều cho tiên đoán  $D_0$  phù hợp với thực nghiệm. Tuy nhiên, Hình 4 lại cho thấy điều ngược lại, tất cả các mô hình ngoại trừ EGS đều không thể tiên đoán  $\Gamma_\gamma$  phù hợp với thực nghiệm. Ngoài ra, có thể thấy tiên đoán  $\Gamma_\gamma$  của mô hình HFBT lệch không nhiều so với dữ liệu thực nghiệm.

Nhìn chung, trong số các mô hình được khảo sát, mô hình vi mô HFBT cho khả năng mô tả gần nhất các dữ liệu thực nghiệm. Mô hình HFBT là mô hình vi mô cập nhật nhất trong số các mô hình được khảo sát, mô hình này đã đưa vào nhiều hiệu chỉnh quan trọng, trong đó có cả ảnh hưởng của phân bố độ chắn lẻ trong mật độ mức. Đây có thể là một nguyên nhân giải thích vì sao mô hình này có khả năng mô tả dữ liệu thực nghiệm tốt hơn các mô hình còn lại. Kết quả này cho thấy, các mô hình mật độ mức hiện tại vẫn chưa hoàn chỉnh. Tuy nhiên, các hiệu chỉnh mới đã cho thấy những hiệu quả nhất định. Các nghiên cứu phát triển, cải tiến, hoàn thiện các mô hình mật độ mức do đó là rất cần thiết. Một số mô hình vi mô mới được phát triển gần đây như mô hình “exact pairing plus independent particle” (EP+IPM) [16] đã mô tả rất tốt số liệu mật độ mức thực nghiệm.

Hình 1 của tài liệu [16] hay Hình 7 và 8 của tài liệu [17] là một số trường hợp minh chứng tiêu biểu. Chính vì vậy, trong tương lai, ta cần tiến hành nghiên cứu đánh giá tương tự cho các mô hình vi mô hiện đại như mô hình EP+IPM.

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu đã tiến hành đánh giá mật độ mức lý thuyết của hạt nhân  $^{56}\text{Mn}$  bằng sáu mô hình BSFG, GC, EGS, HFBCS, HFBC, và HFBT. Đánh giá được thực hiện dựa trên việc so sánh tiết diện phản ứng  $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$  thực nghiệm với các tiết diện tương ứng được mô phỏng bằng chương trình Talys với mật độ mức đầu vào được xác định từ các mô hình nói trên. Kết quả thu được chỉ ra rằng, mô hình hiện đại nhất, HFBT, đưa ra các tiên đoán gần nhất với dữ liệu thực nghiệm. Mặc dù vậy, vẫn có một số vùng thực nghiệm mà mô hình này không đưa ra được các tiên đoán chính xác, vì vậy có thể nói rằng không có mô hình nào trong số các mô hình được đánh giá có thể mô tả tốt dữ liệu thực nghiệm trong toàn bộ dải năng lượng của neutron tới từ 0 đến 20 MeV.

#### Tài liệu tham khảo

- Huo Junde và các cộng sự, (2011), “*Nuclear data sheets for A = 56*”, Nuclear Data Sheets 112 (6), 1513-1645.
- Voinov, A.V., Grimes, S.M., Brune, C.R., Hornish, M.J., Massey, T.N. and Salas, A., (2007), “*Test of nuclear level density inputs for Hauser-Feshbach model calculations*”, Physical Review C, 76(4), p.044602.
- A. Gilbert, A.G.W. Cameron, (1965), “*A composite nuclear-level density formula with shell corrections*”, Canadian Journal of Physics 43, 1446.
- A.V. Ignatyuk, K.K. Istekov, G.N. Smirenkin, (1979), “*Role of collective effects in the systematics of nuclear level densities*”, Sov. J. Nucl. Phys. 29, 450.
- S. Goriely, F. Tondeur, J.M. Pearson, (2001), “*A Hartree-Fock nuclear mass table*”, Atomic Data Nuclear Data Tables 77, 311.
- S. Goriely, S. Hilaire and A.J. Koning, (2008), “*Improved microscopic nuclear level densities within the HFB plus combinatorial method*”, Phys. Rev. C 78, 064307.
- S. Hilaire, M. Girod, S. Goriely and A.J. Koning, (2012), “*Temperature dependent combinatorial level densities with the DIM Gogny force*”, Physical Review C 86, 064317.
- <https://www-nds.iaea.org/RIPL-2/>
- <https://www-nds.iaea.org/RIPL-3/>
- Arjan J. Koning, Stephane Hilaire, Marieke C. Duijvestijn, Talys-1.0, (2007), in: *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, EDP Sciences, pp. 211–214.
- Garg, J.B., Macklin, R.L. and Halperin, (1978), J., “*Neutron capture cross section of manganese*”, Physical Review C, 18(5), 2079.
- Dovbenko, A.G., Kolesov, V.E., Koroleva, V.P. and Tolstikov, V.A., (1969), “*Cross sections of  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{69}\text{Ga}$ ,  $^{71}\text{Ga}$ , and  $^{98}\text{Mo}$  for radiative capture of fast neutrons*”. Soviet Atomic Energy, 26(1), 82-85.
- Stupegia, D.C., Schmidt, M., Keedy, C.R. and Madson, A.A., (1968), “*Neutron capture between 5 keV and 3 MeV*”, Journal of Nuclear Energy, 22(5), 267-281.
- H.O.Menlove, K.L.Coop, H.A.Grench, R.Sher, (1967), “*Neutron radiative capture cross sections for  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{115}\text{In}$ , and  $^{165}\text{Ho}$  in the energy region*

- 1.0 to 19.4 MeV". *Physical Review* 163, 1299.
16. Hung, N. Q., Dang, N. D., Huong, L. Q., (2017), "*Simultaneous microscopic description of nuclear level density and radiative strength function*", *Physical Review Letters*, 118(2), 022502.
17. Anh, N. N., Hung, N. Q., Hai, N. X., Khang, P. D., Sukhovej, A. M., Mitsyna, L. V., Thang, H. H., (2019), "*Level scheme of  $^{153}\text{Sm}$  obtained from the  $^{152}\text{Sm}(n_{th},\gamma)$  reaction using a  $\gamma-\gamma$  coincidence spectrometer*". *Physical Review C*, 100(2), 024324.