

中子共振理论和共振参数

二机部核数据中心编



原 子 能 出 版 社

中子共振理论和共振参数

二机部核数据中心编

原子能出版社
一九八一年七月

中子共振理论和共振参数

二机部核数据中心编

原子能出版社出版

(北京2108信箱)

国防科委印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·新华书店经售



开本787×1092 1/16 · 印张32 $\frac{1}{2}$ · 字数 771千字

1982年3月 第一版 · 1982年3月 第一次印刷

印数001—1,250 统一书号: 15175·391

定价: 3.95 元

前　　言

本汇编收集了中山大学、广西大学、北京师范大学低能核物理研究所、清华大学核能技术研究所和北京原子能研究所等单位有关同志近年来在中子共振理论、共振参数分析、用共振参数计算中子微观截面的方法和程序以及中子共振参数编评等方面的文章共 43 篇。在共振理论部分，作者从 R 矩阵理论出发，系统地介绍了各种常见共振理论公式的推导并作了评述。为便于从事反应堆物理和实验核物理工作者及大专院校有关专业的学生阅读，作者对理论的叙述和公式的推导都力求详尽。在共振参数分析及截面计算部分，包括了中子共振参数分析中常见的一些分析计算方法，编制了程序并给出了试算结果。在共振参数编评方面，本汇编给出了 72 个核素的中子共振参数推荐数据，包括热中子数据、可分辨能区共振参数和平均共振参数数据。特别是对于可分辨共振能区，作者们力求从所收集到的全部实验数据出发，在分析、评价的基础上，尽可能地给出评价核的全套共振参数，这些推荐数据和过去已有的评价数据比较，大多有所更新或有显著更新。

为了查阅及使用上的方便，全部共振参数的推荐数据都集中在本书的最后。

参加本汇编编辑工作的有周德林，庄友祥，赵志祥；丘国春，苏宗涤，王书暖；王焕昕，汪晋忠等同志。在本汇编有关工作的进行和文稿的审定中，侯德彭、颜一鸣、张卓良等同志曾给予宝贵支持和帮助；在本汇编的编辑过程中还曾得到二机部情报所、原子能出版社、原子能所情报室等单位有关领导及同志们的支持和帮助，谨致深切的谢意。我们还感谢周渝斌同志在本汇编的编辑过程中给予的支持和帮助。

由于我们的水平和条件的限制，本汇编所涉及的不少方面都还存在一些缺点和有待改进之处，错误也在所难免，欢迎读者批评指正。

者

1981.7.

目 录

中子共振反应理论	丘国春 呂國雄	(1)
中子共振单能级参数的分析方法	李冕丰 何錦昌	(38)
单能级中子共振参数的数值分析	何錦昌 李冕丰	(50)
用单能级 B-W 公式的多能级修正对共振截面的分析	呂國雄 丘国春 沈舜鶯	(63)
共振截面的 Doppler 展宽及其计算	丘国春 呂國雄 何錦昌 李冕丰 劉德順 鍾文發	(72)
利用多能级 B-W 参数计算中子截面	劉德順	(87)
利用 Reich-Moore 参数计算中子微观截面	李介平	(98)
利用 Adler-Adler 参数计算中子截面	鍾文發	(104)
不可分辨共振区平均截面的计算	蘇宗涤 邱成	(116)
平均共振参数的统计估算	趙志祥	(120)
$^{10,11}\text{B}$ 中子共振参数评价	庄友祥	(131)
$^{12,13}\text{C}$ 中子共振参数评价	趙志祥	(135)
^{16}O 中子共振参数评价	張卓良	(140)
^{23}Na 中子共振参数评价	周春梅	(148)
^{27}Al 中子共振参数评价	李向程	(152)
铬中子共振参数评价	劉伊犁	(157)
^{55}Mn 中子共振参数评价	李向程	(164)
^{56}Fe 中子共振参数评价	周德林	(168)
$^{54,57,58}\text{Fe}$ 中子共振参数的评价	周德林	(177)
镍中子共振参数评价	顏一鳴	(184)
铜中子共振参数评价	顏一鳴	(194)
$^{107,109}\text{Ag}$ 中子共振参数评价	何錦昌	(199)
^{113}Cd 中子共振参数评价	趙志祥	(209)
镉同位素中子共振参数评价	趙志祥	(214)
$^{113,115}\text{In}$ 中子共振参数评价	張卓良	(220)
一些裂变产物核中子共振参数评价	趙志祥	(226)
$^{151,153}\text{Eu}$ 中子共振参数评价	李冕丰	(234)
$^{155,157}\text{Gd}$ 中子共振参数评价	周恩臣	(240)
镝中子共振参数评价	張卓良	(247)
^{232}Th 中子共振参数评价	于保生	(254)
^{233}U 中子共振参数评价	庄友祥	(258)
^{235}U 中子共振参数评价	趙志祥	(262)
^{236}U 中子共振参数评价	于保生	(271)
^{238}U 中子共振参数评价	于保生	(275)

^{239}Pu 中子共振参数评价	庄友祥 (284)
^{240}Pu 中子共振参数评价	庄友祥 (291)
^{241}Pu 中子共振参数评价	庄友祥 (296)
^{242}Pu 中子共振参数评价	庄友祥 (300)
^{241}Am 中子共振参数评价	顾复华 (304)
$^{242m},^{243}\text{Am}$ 中子共振参数评价	顾复华 (307)
$^{243},^{245}-^{248}\text{Cm}$ 中子共振参数评价	顾复华 (310)
^{244}Cm 中子共振参数评价	刘继才 (313)
Z>96各核素的中子共振参数现况概述	顾复华 (317)
中子共振参数推荐数据表	(321)

中子共振反应理论

丘国春 吕国雄

(广西大学)

中子共振反应现象，是核物理和核工程应用研究中的重要课题之一。本文分三部分介绍中子共振反应理论。第一部分简介中子共振反应的基本实验事实。第二部分系统而扼要地介绍了 R 矩阵理论。第三部分应用 R 矩阵理论，导出中子共振截面的各种理论公式：单能级和多能级的Breit-Wigner公式、Vogt公式、Reich-Moore公式、Adler-Adler公式及对单能级公式作多能级修正的公式。文中着重说明这些公式导出的近似条件，并对各公式作了一定的评价。

一、前 言

当能量较低的中子轰击靶核时，截面呈现强烈的起伏，这就是中子核反应的共振现象。1935年发现这一现象后，大量的实验表明，几乎所有核素的中子反应都存在这一现象，但不同核素的中子共振截面曲线的特征各不相同。由于中子共振反应在核理论和核工程应用中的重要性，中子共振反应的研究已成为核物理的重要组成部分。这一研究加深了人们对核力和核结构的认识，并为核工程应用提供了大量的数据。

大量的实验事实，要求人们用理论进行分析和解释。最初，人们试图用单粒子在势阱中的运动来说明共振现象，但这一简单的图象与实验并不相符。1936年Bohr提出的复核假说使核反应的研究前进了一大步^[1]。同年，Breit和Wigner基于复核假说建立了能量与截面相关的公式，即著名的Breit-Wigner公式^[2]。这一公式与大量实验数据很好地符合，特别是对孤立窄共振的描述相当成功。此后，发展了多种核反应的形式理论，致力于更一般的导出精确描述截面的理论公式，从形式上处理截面和核内性质的联系。1938年Kapur和Peierls提出的形式理论（简称K-P理论）是核反应研究的一个很好的框架^[3]。Wigner和Eisenbud建立的 R 矩阵理论本质上与K-P理论是一致的^[4,5]，只是它们的着重点有所不同。K-P理论用复边界条件下薛定谔方程的复数解集来描述散射波，截面公式中使用的参数与能量相关但没有明显的物理意义。 R 矩阵理论则选用与能量无关的实数边界条件，选用与能量无关的且有明显物理意义的参数来描述截面，将物理信息引入形式理论的截面公式中。正是由于这个原因，使 R 矩阵理论更为人们所重视。目前实用的中子共振反应截面理论公式大都是从 R 矩阵理论导出的。 R 矩阵理论已有大量文章作讨论，其中包括有不少总结性文章和简短评论^[6,7,8]。本文仅给出推导常用的中子共振反应截面公式所需的 R 矩阵理论的最基本内容，其它核反应的形式理论不作介绍。

随着实验精度的提高，许多核素的中子共振截面已不能用单能级Breit-Wigner公式很

好地描述。特别是对裂变元素，由于裂变道能级之间的强烈相干，共振峰的两翼很不对称，用单能级公式描述裂变元素的非对称共振曲线就显得粗糙了。为精确地描述裂变元素的中子共振截面，1958年以来，已发展了多种实用的多能级公式，主要的有 Vogt 公式^[9]、Reich-Moore 公式^[10]、Adler-Adler 公式^[11]等。最近又有在单能级公式基础上作多能级修正的公式^[12]以及其它改进公式^[13]。这些公式可以从 R 矩阵理论统一导出。本文着重介绍这些公式推导的近似条件，并对它们作一定的评价。

描述中子共振反应截面的理论公式是用一组参数表示的，这组参数描述了中子共振反应的特征，称为中子共振参数（简称共振参数）。利用截面的理论公式对截面的实验数据进行分析拟合，即可求得共振参数。在核理论研究和核工程设计中一般不直接应用截面的实验数据，而是应用共振参数。这是因为：

1. 截面的实验数据是在某一温度下用有一定分辨率的仪器测量的。数据中不可避免地包含了温度的 Doppler 展宽和仪器分辨率展宽的影响。此外还包含有多重散射的影响（除了透射数据之外）。在利用理论公式分析这些实验数据提取共振参数时，可以从理论上消除这些因素的影响，使共振参数能正确地反映共振截面的特征，为核理论的研究提供正确的信息，并使在工程设计的计算中有普适性。

2. 利用共振参数可以方便地计算不同温度下的 Doppler 展宽截面。

3. 可分辨共振区的 R 矩阵参数，服从一定的统计分布规律。可以假定，在不可分辨共振区，共振参数也服从同一统计分布规律。这样，就可将可分辨共振区的共振参数平均值外推用于计算不可分辨共振区（或未测量能区）的截面。

4. 利用共振参数可使描述中子共振截面结构的数据相对地减少，使数据的存贮经济方便。例如， ^{235}U 在 $10\text{--}30\text{eV}$ 能区有 50 个共振能级，若用点截面值（即各能点对应的截面实验值）来描述某一类反应截面的结构，至少需要 1500 个数据，但若用 Adler-Adler 参数描述同一结构，仅需要 4×50 个数据。此外，若再考虑角分布和不同温度下的数据，用原始实验值数量就更大了。

由此可见，不论从理论研究，还是从核工程计算的需要，都要求利用从截面实验值制作的共振参数。为了正确地应用由各种不同的截面理论公式拟合实验数据所得的各种不同的共振参数，我们必须对各种截面理论公式有一定的了解。

二、中子共振反应截面

1. 截面的基本概念

原子核相互碰撞过程中可能发生的各种变化现象称为核反应。由核子 a 与核 A 碰撞形成核 B 和核子 b 的核反应可以写为： $A + a \rightarrow B + b$ ，或者简记为： $A(a, b)B$ 。对仅有两个核反应产物的核反应而言，有多种可能：

$$A + a \rightarrow \begin{cases} A + a, \\ A^* + a, \\ C + \hbar\omega, \\ B + b, \\ \dots \end{cases} \quad (2.1)$$

只改变碰撞核的运动方向，而不改变碰撞核的组成和内部状态的反应 $A(a,a)A$ 称为弹性散射。反应 $A(a,a)A^*$ 引起了核内状态的变化，但不改变核的成份，这种反应称为非弹性散射。反应 $A(a,\hbar\omega)C$ 是入射粒子被俘获并辐射光子，这一过程称为辐射俘获。此外，还可能有裂变等过程发生。通常，把弹性散射之外的其它过程通称为反应。

核反应理论的任务在于计算碰撞体系的一个始态到一个终态的跃迁几率。描述核反应过程发生几率大小的物理量是截面。由入射粒子在单个核上所引起的某一类反应过程的截面用下述比率定义：

$$\text{截面} = \frac{\text{单位时间发生某一类反应的反应数}}{\text{单位时间的入射粒子数} \times \text{单位面积的靶核数}}. \quad (2.2)$$

截面的量纲是 $[L]^2$ ，单位是巴，1 巴(b) = 10^{-24} 厘米 2 。总截面定义为各过程的分截面之和。

对于中子核反应，我们用 $\sigma_{n,n}$ 表示弹性散射截面， $\sigma_{n,\gamma}$ 表示辐射俘获截面， $\sigma_{n,f}$ 表示裂变截面， σ_t 表示总截面。

截面是入射粒子能量的函数：

$$\sigma = \sigma(E), \quad (2.3)$$

$\sigma(E)$ 称为激发函数。

2：中子共振反应截面

大量实验事实表明，能量较低的中子与靶核作用的中子核反应呈现强烈的共振现象，即在共振能量附近截面有急剧的变化。对于几乎所有的核素，这一现象均存在，但对不同的核素，截面的结构如共振能级密度和共振能级宽度等各不相同。

对于轻核，共振能级间距和共振能级宽度都较大。共振能级间距一般有数百 keV。共振能级宽度是数十或上百 keV。图 1 是 ^{19}F 的总截面，典型地表示了轻核中子共振反应的特点。由于轻核中子共振反应的能级间距较大，共振较为孤立，各能级间的相干程度较弱。

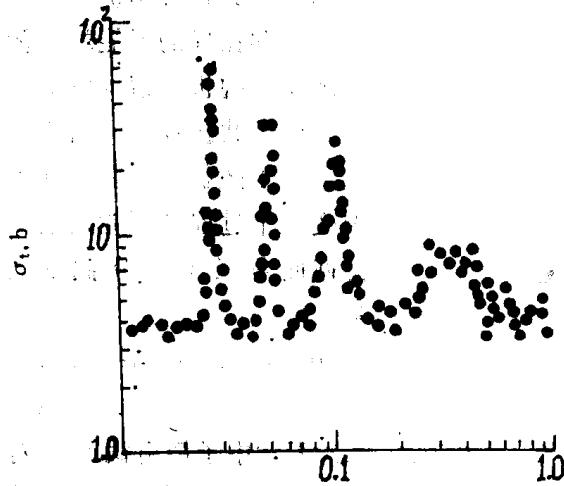


图 1 ^{19}F 的总截面

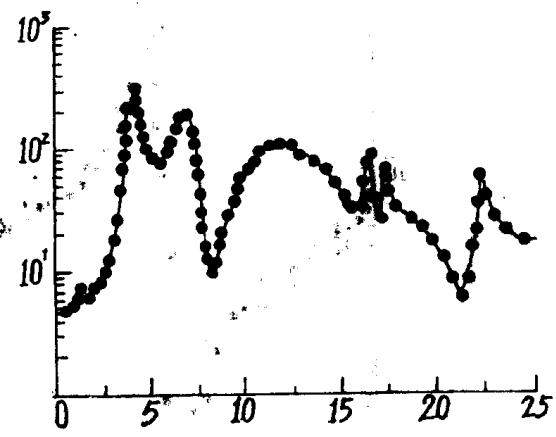


图 2 ^{51}V 的总截面

对于中重核（大致地说，质量数从 40 到 100 的核素），能级间距和共振能级宽度均随着质量数的增加而减少。例如 ^{51}V 的共振间距约为 4 keV（图 2），而较重的中重核能级间距减

少至约 100 eV，共振能级宽度为数 eV。图 3 是 Br(50.5% 的 ^{79}Br 和 49.5% 的 ^{81}Br) 的总截面，显示了中重核的中子共振截面的特点。随着能级间距的逐渐减少，共振趋于密集，各能级的相干程度逐渐加强。

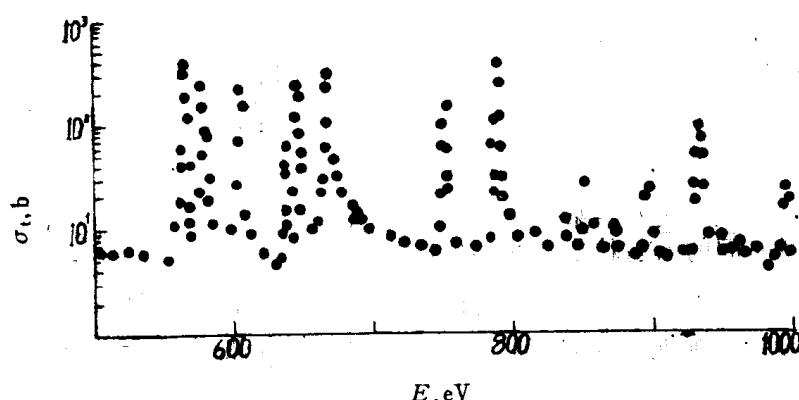


图 3 Br 的总截面

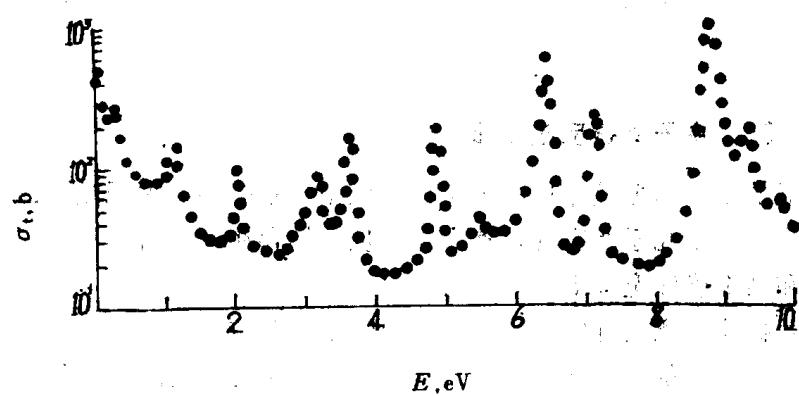


图 4 ^{235}U 的总截面

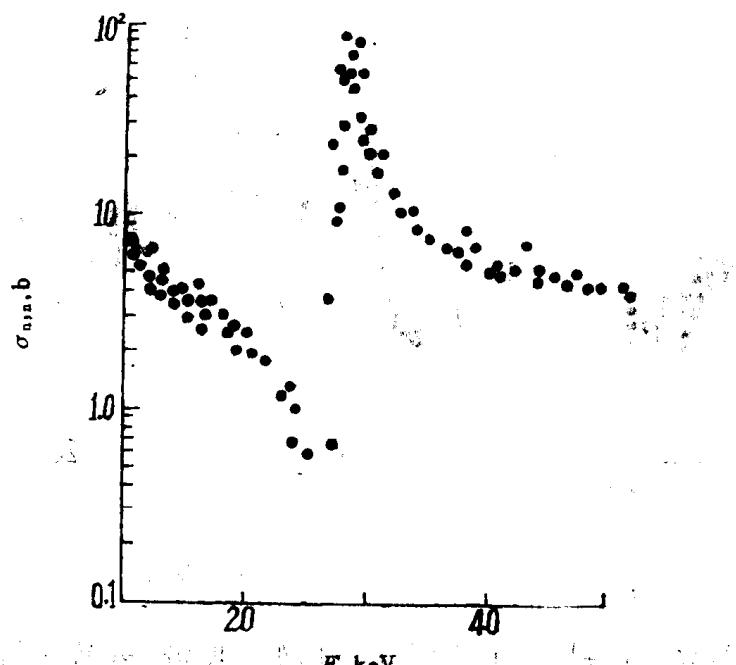


图 5 ^{40}Fe 的弹性散射截面

对于重核，共振峰更加密集，能级间距和能级宽度都较小。以 ^{235}U 在 0—10 eV 能区的总截面为例（图 4），在这能区内密集了 15 个共振峰，曲线形状较为复杂，共振峰的两侧很不对称，显示了各能级间的强烈相干。

一般地说，能级间距和能级宽度随着质量数的增大而减少，但对于幻数核，情况较为特殊。例如， ^{209}Bi 能级间距仍在 keV 数量级。

从实验结果中还可看到，弹性散射截面曲线的形状和反应截面曲线的形状有所不同。对于后者，只要是充分孤立的窄共振，共振峰的两侧几乎是对称的。但对前者的，共振峰两侧却不对称，在共振峰的低能端一侧出现明显的极小值（图 5）。

中子共振反应，对于重核，中子散射、辐射俘获和裂变三个过程都可能发生。总截面是三个部分截面之和：

$$\sigma_t = \sigma_{n,n} + \sigma_{n,r} + \sigma_{n,f}, \quad (2.4)$$

$\sigma_{n,n}$ 表示中子散射截面。对于中重核和幻数核，它们的能级间距较大，当入射中子能量小于靶核第一激发能级的能量时，只可能有弹性散射。所以在中重核范围内的

中子共振主要是弹性散射的共振。由吸收慢中子所引起的放出带电粒子的过程，仅在最轻的一些核中不同程度地发生，这一过程，在中子共振反应理论中一般不予考虑。

中子共振反应中，在中子能量较低的区域，具有可以明显分开的分立共振峰，这一能区称为可分辨共振区。在可分辨共振能区之上，共振特性并没有消失，只是由于测量仪器的分辨率不够高或由于共振能级宽度与能级间距已是同一数量级，共振峰的密集重迭使每一个共振难于分辨，这个能区称为不可分辨共振区。图 6 给出了中子反应各个能区截面特点的一个示例。有关不可分辨共振区的截面特点及其描述方法，本文不作介绍。

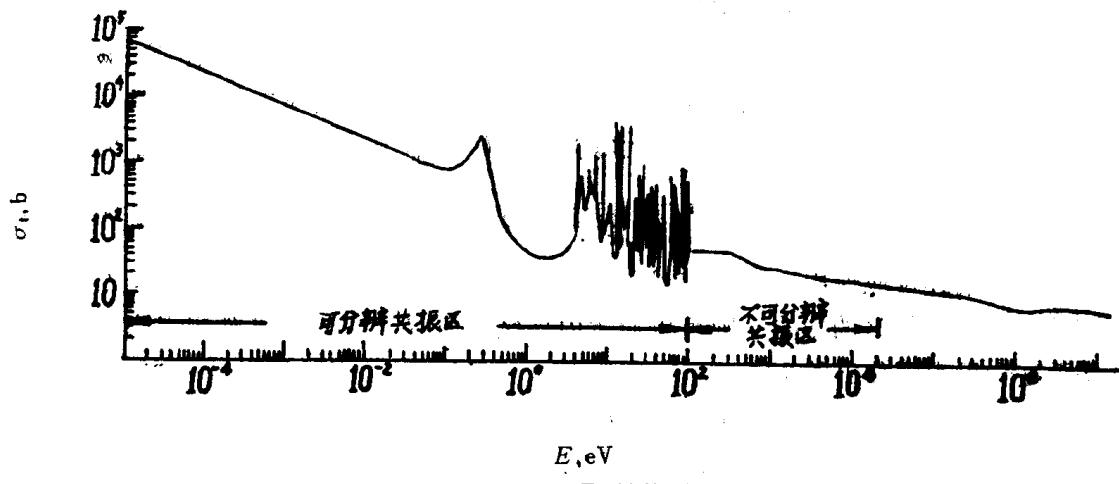


图 6 ^{241}Pu 总截面

三、 R 矩阵理论

1. 核组态空间和波函数形式

(1) 组态空间和道 核反应是核子相互作用的一个复杂的物理过程。从(2.1)式看到，两核碰撞的产物有多种可能的结果。二核反应事实上是 A 个核子参与的物理过程， A 个核子分成包括 A_1 和 A_2 个核子的两个群，这两群核子分别束缚成碎片 α_1 和 α_2 ，碰撞后的各种可能产物就是 A 个核子组成的不同的碎片对 α_1 和 α_2 。我们把碰撞过程中 A 个核子所处的空间称为核的组态空间。

为了确切地描述反应过程中的 $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ 所处的状态，需要知道：

- i. $\sigma = \{\alpha_1, \alpha_2\}$ 是什么核，处于什么能态（基态还是激发态）；
- ii. α_1 和 α_2 的自旋之和 $\vec{S} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2$ ，其中 \vec{l}_1 和 \vec{l}_2 分别为 α_1 和 α_2 的自旋；
- iii. α_1 和 α_2 之间的相对运动轨道角动量 l ；
- iv. 体系的总角动量 $J(\vec{J} = \vec{S} + \vec{l})$ 及其磁量子数 M 。

即为确切地描述碎片对 $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ 的态，需要知道 $\{\alpha, S, l, J, M\}$ 等量子数（更一般的说，还有字称）。如果 \vec{S} 和 \vec{l} 的投影分别为 v 和 m ，那么也可用 $\{\alpha, S, v, l, m\}$ 五个量子数来描述。碰撞过程中的某一确定的 $\{\alpha, S, l, J, M\}$ 组合称为道，用 c 标记为 $c \equiv \{\alpha, S, l, J, M\}$ 。这样，我们说由 c 道入射（或出射），这就指明了入射（或出射）的 $\sigma = \{\alpha_1, \alpha_2\}$ 是什么物质及其处的能态、道自旋 S 、相对运动的 l 和总角动量 J 及投影量子数 M 。反应过程中能量上容许

发生的道称为开道。

道 c 中的 α_1 和 α_2 有一核力相互作用半径 a_c , 即当 α_1 和 α_2 的距离 $r_c \geq a_c$ 时它们之间没有短程核力的相互作用, a_c 称为道半径。对于中子反应, 道半径之值取为:

$$a_c = \left[1.23 \left(\frac{M}{m} \right)^{1/3} + 0.8 \right] (\text{fm}), \quad (3.1)$$

式中 M 和 m 分别为靶核质量和中子质量, $1\text{fm} = 10^{-13}\text{cm}$ 。

为了研究问题方便, Wigner 和 Eisenbud 将核的组态空间分为内区和外区。 α_1 和 α_2 处于核力作用的空间称为内区, 其余空间称为外区。当 α_1 和 α_2 的距离 $r_c \geq a_c$ 时, 它们所占据的空间称为道区。我们可以把道区想象为一根从内区伸出的管道, α_1 和 α_2 在这一管道中运动。不同道的道区是从内区伸出的不同管道。由于各反应道是相互独立的物理事件, 因而各道区互不相交 (或相交处的物理事件几率为零)。由道半径 a_c 决定的道表面 S_c 的组合 $S (= \sum_c S_c)$ 构成了划分内外两区的界面。这样划分组态空间之后, 碰撞体系在外区 (无核力) 的行为就由描述反应道内产物的相对运动的哈密顿量来决定, 而体系在内区 (有核力) 的复杂物理过程对于外区的影响, 则可以通过内外区界面 S 上的边界条件来考虑。 R 矩阵理论正是基于这一思想而作出的。

(2) 外区波函数 在组态空间中, A 个核子体系运动的波函数 Ψ 满足薛定谔方程:

$$H\Psi = E\Psi. \quad (3.2)$$

式中 E 为体系的总能量, H 为体系的哈密顿算符。在外区, 道 c 的碎片 α_1 和 α_2 组成的体系在质心系中的总能量是两碎片的内能 E_{α_1} 和 E_{α_2} , 以及它们之间的相对运动能量 E_r 之和。用 H_c 表示 α_1 和 α_2 相对运动的哈密顿量, H_{α_1} 和 H_{α_2} 分别表示 α_1 和 α_2 内部运动的哈密顿量, 则有:

$$H_c \chi_c = E_c \chi_c, \quad (3.3a)$$

$$H_{\alpha_1} \psi_{\alpha_1 I_1 v_1} = E_{\alpha_1} \psi_{\alpha_1 I_1 v_1}, \quad (3.3b)$$

$$H_{\alpha_2} \psi_{\alpha_2 I_2 v_2} = E_{\alpha_2} \psi_{\alpha_2 I_2 v_2}. \quad (3.3c)$$

式中 χ_c 为两碎片相对运动波函数, $\psi_{\alpha_1 I_1 v_1}$ 和 $\psi_{\alpha_2 I_2 v_2}$ 分别为 α_1 和 α_2 的内部运动波函数, I_i 和 v_i 为 α_i 的自旋及其投影。

道 c 的总波函数则为:

$$\Psi_c = \chi_c \psi_{\alpha_1 I_1 v_1} \psi_{\alpha_2 I_2 v_2}. \quad (3.4)$$

若体系的道自旋为 $S(\vec{S} = \vec{I}_1 + \vec{I}_2)$, 投影为 v , 则描述 $\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2\}$ 的自旋态及内部运动的波函数可由 $\psi_{\alpha_1 I_1 v_1}$ 和 $\psi_{\alpha_2 I_2 v_2}$ 耦合而成:

$$\psi_{\alpha S v} = \sum \langle I_1 I_2 v_1 v_2 | S v \rangle \psi_{\alpha_1 I_1 v_1} \psi_{\alpha_2 I_2 v_2}. \quad (3.5)$$

式中 $\langle I_1 I_2 v_1 v_2 | S v \rangle$ 为矢耦系数。 $\psi_{\alpha S v}$ 称为道自旋波函数。

从量子力学知道相对运动波函数 χ_c 的形式为:

$$\chi_c \sim r_a^{-1} u_{as}(r_a) i^l Y_l^m(\Omega_a). \quad (3.6)$$

式中 r_a 和 Ω_a 分别为 α_1 和 α_2 之间的矢径长度和方向; $Y_l^m(\Omega_a)$ 是球谐函数; $u_{as}(r_a)$ 是径向波函数, 它满足径向薛定谔方程:

$$\left[\frac{d^2}{dr_a^2} - \frac{l(l+1)}{r_a^2} - \frac{2\mu_a}{\hbar^2} (V_{as1} - E_e) \right] u_{as1}(r_a) = 0. \quad (3.7)$$

式中 μ_a 为道约化质量: $\mu_a = \frac{M_{a_1}M_{a_2}}{M_{a_1} + M_{a_2}}$, V_{as1} 为库仑位能。

从(3.4),(3.5),(3.6)式可见, 外区波函数形式为

$$\Psi_c \sim u_{as1} \varphi_c. \quad (3.8)$$

式中

$$\varphi_c \equiv i^l r_a^{-1} Y_l^m(\Omega_a) \psi_{as}, \quad (3.9)$$

称为表面函数。当沿内区表面积分时, 表面函数具有正交性:

$$\int_S \varphi_c^* \varphi_{c'} ds = \delta_{cc'}. \quad (3.10)$$

方程 (3.7) 有两个线性独立的解^[6], 一个是在原点为零值的正则解 $F(\rho)$, 一个是在原点的奇异解 $G(\rho)$, 这里 $\rho = kr, k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ 。

对于相对运动轨道角动量为 l 的中子反应, 当不考虑出射带电粒子时, 正能道之解为:

$$F_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi \rho}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho), \quad (3.11a)$$

$$G_l(\rho) = -\sqrt{\frac{\pi \rho}{2}} N_{l+\frac{1}{2}}(\rho). \quad (3.11b)$$

式中 $J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ 和 $N_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ 分别为 $l + \frac{1}{2}$ 阶的贝塞尔函数和诺尔曼函数。

$l=0,1,2$ 的 $F_l(\rho), G_l(\rho)$ 之值分别为:

$$F_0 = \sin \rho, \quad (3.12a)$$

$$F_1 = -\frac{\sin \rho}{\rho} - \cos \rho, \quad (3.12b)$$

$$F_2 = \frac{3 \sin \rho}{\rho^2} - \frac{3 \cos \rho}{\rho} - \sin \rho; \quad (3.12c)$$

$$G_0 = \cos \rho, \quad (3.12d)$$

$$G_1 = \frac{\cos \rho}{\rho} + \sin \rho, \quad (3.12e)$$

$$G_2 = \frac{3 \cos \rho}{\rho^2} + \frac{3 \sin \rho}{\rho} - \cos \rho. \quad (3.12f)$$

当 $\rho \rightarrow \infty$ 时, 这两个线性独立解的渐近形式是

$$F_l(\rho) \sim \sin\left(\rho - \frac{l}{2}\pi\right), \quad (3.13a)$$

$$G_l(\rho) \sim \cos\left(\rho - \frac{l}{2}\pi\right). \quad (3.13b)$$

这对函数还满足 Wronskian 关系:

$$F' G - G' F = \text{常数}. \quad (3.14)$$

这里 F' 和 G' 是 F 和 G 对 ρ 的微分, 通常使 F, G 归一化为上式的常数等于1。Wronskian 关系式说明, 描述外区径向运动的波函数及其导数, 仅有三个是独立变量。

坐标原点在球心的单位通量入射波和出射波的总波函数可写为:

$$\mathcal{I}_c = v_c^{-\frac{1}{2}} \varphi_c I_c, \quad (3.15a)$$

$$\mathcal{O}_c = v_c^{-\frac{1}{2}} \varphi_c O_c. \quad (3.15b)$$

式中 φ_c 是(3.9)式定义的表面函数; $v_c^{-\frac{1}{2}}$ 是归一化因子; v_c 为相对运动速度; I_c 和 O_c 是入射波和出射波的径向函数; 它们可由 G, F 线性组合而成:

$$I(\rho) = G(\rho) - iF(\rho). \quad (3.16a)$$

$$O(\rho) = G(\rho) + iF(\rho). \quad (3.16b)$$

即 $I = O^*, O^*$ 为 O 的复数共轭。

为了研究碰撞问题的物理内容, 常用与 G_l, F_l 及其导数等价的另外三个独立量 S_l, P_l, Ω_l 来描述外区波函数的性质, 为此定义:

$$L_l \equiv S_l(\rho) + iP_l(\rho) \equiv \left(\frac{\rho}{O_l} \frac{dO_l}{d\rho} \right)_{r_c=a_c}. \quad (3.17a)$$

$$\Omega_l \equiv e^{-i\phi_l} \equiv \left(\frac{I_l}{O_l} \right)_{r_c=a_c}^{1/2}. \quad (3.17b)$$

从(3.16)式易知:

$$S_l(\rho) = \frac{\rho(F_l F'_l + G_l G'_l)}{F_l^2 + G_l^2} \Big|_{r_c=a_c}, \quad (3.18a)$$

$$P_l(\rho) = \rho(F_l^2 + G_l^2)^{-1} \Big|_{r_c=a_c}, \quad (3.18b)$$

$$\phi_l = \operatorname{tg}^{-1} \frac{F_l}{G_l} \Big|_{r_c=a_c}. \quad (3.18c)$$

S_l 称为位移因子; P_l 称为穿透因子; 它们将分别出现在能移因子和能级宽度等物理量中。 ϕ_l 称为硬球相移, 是描述硬球散射的量。

相应于 $l=0, 1, 2$ 的 s, p, d 波中子, S_l, P_l, ϕ_l 之值分别为:

$$S_0 = 0, \quad (3.19a)$$

$$S_1 = \frac{-1}{1+\rho^2}, \quad (3.19b)$$

$$S_2 = \frac{-3(6+\rho^2)}{9+3\rho^2+\rho^4}; \quad (3.19c)$$

$$P_0 = \rho, \quad (3.20a)$$

$$P_1 = \frac{\rho^3}{1+\rho^2}, \quad (3.20b)$$

$$P_2 = \frac{\rho^5}{9+3\rho^2+\rho^4}; \quad (3.20c)$$

$$\phi_0 = \rho, \quad (3.21a)$$

$$\phi_1 = \rho - \tan^{-1} \rho, \quad (3.21b)$$

$$\phi_2 = \rho - \tan^{-1} \frac{3\rho}{3-\rho^2}. \quad (3.21c)$$

(3) 内区波函数 由于内区核反应性质极为复杂, 求解内区薛定谔方程是困难的。为了得到内区解的一般形式, 我们先作出内区波方程的定态驻波解。

设 X_λ 是内区薛定谔方程在一定边界条件下的解:

$$\left\{ \begin{array}{l} H X_\lambda = E_\lambda X_\lambda, \quad r < a_e \\ \int_s (X_\lambda^* \nabla_n X_\lambda - X_\lambda \nabla_n X_\lambda^*) dS = 0 \end{array} \right. \quad (3.22)$$

$$\int_s (X_\lambda^* \nabla_n X_\lambda - X_\lambda \nabla_n X_\lambda^*) dS = 0. \quad (3.23)$$

作

$$H X_1 = E_1 X_1,$$

$$H X_2 = E_2 X_2.$$

将第一个方程左乘 X_2^* , 第二个方程的复共轭右乘 X_1 , 然后两式相减, 并对内区体积积分:

$$(E_2 - E_1) \int_r X_2^* X_1 d\tau = \int_r \{(H X_2)^* X_1 - X_2^* H X_1\} d\tau. \quad (3.24)$$

在 H 中的势 V 假定是自共轭的, 即,

$$\int_r [(V X_2)^* X_1 - X_2^* V X_1] d\tau = 0.$$

利用 Green 定理将(3.24)化为沿边界表面的积分:

$$(E_2 - E_1) \int_r X_2^* X_1 d\tau = \int_s \frac{\hbar^2}{2\mu_e} (X_2^* \nabla_n X_1 - X_1 \nabla_n X_2^*) dS. \quad (3.25)$$

由于条件(3.23)及 $E_1 \neq E_2$ 故有:

$$\int_r X_2^* X_1 d\tau = 0. \quad (3.26)$$

即边界条件(3.23)使 $\{X_\lambda\}$ 构成正交本征函数系。可以证明 $\{X_\lambda\}$ 也是完备的。

在内区, 描述沿 c 道发生反应的任意能量下的波函数 $\Psi_c(E)$ 可用完备的正交本征函数系 $\{X_\lambda\}$ 展开为:

$$\Psi_c(E) = \sum_\lambda A_{\lambda c} X_\lambda. \quad (3.27)$$

即借助于定态驻波解来描述核反应内区的性质。

显然, 满足边界条件(3.23)的内区定态驻波解并不代表核反应过程中复合核的实际状态, 因为复合核是一个亚稳状态, 处于这个状态的原子核不是一个完全稳定的定态, 而是要衰变的, $\{X_\lambda\}$ 不能描述复合核的衰变过程。但是在实际的核反应中, 有一些较窄的共振能级, 能量在 E_λ 附近的复合核的寿命可达 10^{-15} 秒, 即寿命比核子在核内穿行时间 10^{-22} 秒要长百万倍以上, 因此, 可视复合核状态接近于稳定, 此时, 定态驻波解 $\{X_\lambda\}$ 粗糙地反映了实际状态的性质。

(4) 波函数在边界表面上的投影值和导数值 组态空间中的道表面是核反应形式理论中重要的边界表面。在道表面上, 内外区波函数光滑连接, 这就可以建立内外区性质之间的联系。内区十分复杂的物理过程对外区的影响就可通过边界上的一定条件加以研究。 R 矩阵这个量就是通过在边界上的量来定义的。

为了研究内外区波函数在界面上的光滑连接，引入与径向波函数在 S 上的值及其导数值相关的下列两个量：

$$V_c = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} u_c(a_c), \quad (3.28a)$$

$$D_c = \left(\frac{a_c \hbar^2}{2\mu_c} \right)^{1/2} \left(\frac{du_c}{dr_c} \right)_{r_c=a_c}. \quad (3.28b)$$

这两个量可利用总波函数 Ψ 及表面波函数 φ 展开为：

$$V_c = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \varphi_c^* \Psi dS, \quad (3.28c)$$

$$\begin{aligned} D_c &= \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \varphi_c^* \nabla_n (\varphi_c \Psi) dS \\ &= V_c + \left(\frac{a_c \hbar^2}{2\mu_c} \right)^{1/2} \int \varphi_c^* \nabla_n \Psi dS. \end{aligned} \quad (3.28d)$$

我们称 V_c 和 D_c 分别为波函数 Ψ 在道表面上的“投影值”和“导数值”。

利用表面函数的正交性可知：

$$\Psi = \sum_c \left(\frac{2\mu_c a_c}{\hbar^2} \right) V_c \varphi_c, \quad (3.29a)$$

$$\nabla_n \Psi = \sum_c \left(\frac{2\mu_c}{a_c \hbar^2} \right)^{1/2} (D_c - V_c) \varphi_c. \quad (3.29b)$$

由于内区满足条件(3.23)的正交本征函数集 $\{X_\lambda\}$ 在道表面上的“投影值”和“导数值”是 R 矩阵理论中重要的量，特记为：

$$\gamma_{\lambda c} = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \varphi_c^* X_\lambda dS, \quad (3.30a)$$

$$\delta_{\lambda c} = \gamma_{\lambda c} + \left(\frac{a_c \hbar^2}{2\mu_c} \right)^{1/2} \int \varphi_c^* \nabla_n X_\lambda dS. \quad (3.30b)$$

后面将知道， $\gamma_{\lambda c}$ 和穿透因子一起决定了共振宽度，因此 $\gamma_{\lambda c}$ 称为约化宽度振幅。

对比(3.28)可知，若令：

$$\frac{D_c}{V_c} = \frac{\delta_c}{\gamma_c} = B_c. \quad (3.31)$$

式中 B_c 为常数，则条件(3.23)可以成立。可见 $\frac{D_c}{V_c}$ 是个重要的量，称为对数导数。当 B_c 取为与能量无关的实数时，内区定态驻波解的径向部分是与能量无关的实函数，约化宽度振幅 $\gamma_{\lambda c}$ 是与能量无关的实数^[5,6]，因而 $\gamma_{\lambda c}$ 是表征复核状态的一个特征参数。

2. 碰撞矩阵和截面

(1) 碰撞矩阵 外区的总波函数可由(3.15)式表示的各道的入射波 \mathcal{I}_c 和出射波 \mathcal{O}_c 迭加而得：

$$\Psi = \sum_c (x_c \mathcal{O}_c + y_c \mathcal{I}_c), \quad (3.32)$$

式中 x_c 和 y_c 分别为出射波和入射波的振幅。对于给定的反应体系，入射波的 y_c 是给定的，而出射波的 x_c 由入射波及反应的性质所决定。我们用 y_c 将 x_c 表示为：

$$x_c' = - \sum_c U_{cc'} y_c, \quad (3.33a)$$

矩阵形式是

$$X = -Uy, \quad (3.33b)$$

$U = [U_{cc'}]$ 称为碰撞矩阵。 U 和入射波一起描述了经过反应以后的出射波。可见，碰撞矩阵反映了反应体系的性质。对于仅一个道入射的反应体系，碰撞矩阵元 $U_{cc'}$ 就是道 c' 的出射波振幅与道 c 的入射波振幅之比。

利用(3.33)可将(3.32)改写为：

$$\Psi = \sum_{cc'} (\delta_{cc'} \mathcal{I}_c - U_{cc'} \mathcal{O}_{c'}) y_c. \quad (3.34)$$

若入射道仅有一个开道，令入射波振幅为 $y_c = 1$ ，则外区波函数可简写成为：

$$\Psi = \mathcal{I}_c - \sum_{c'} U_{cc'} \mathcal{O}_{c'}. \quad (3.35)$$

即总波函数是入射波 \mathcal{I}_c 和散射波 $-\sum_c U_{cc'} \mathcal{O}_{c'}$ 的迭加。

可以证明，碰撞矩阵是么正和对称的^[6]：

$$\sum_c U_{cc'}^* U_{cc''} = \delta_{c'c''}. \quad (3.36a)$$

$$U_{cc'} = U_{c'c}. \quad (3.36b)$$

这些性质的证明不依赖于特别的核反应理论，而是由核反应的一般性质所决定的。么正性反映了几率流守恒，对称性反映了时间反演不变性。

(2) 碰撞矩阵和截面的关系 利用碰撞矩阵将截面与波函数的渐近部分联系起来，是计算截面的第一步。这一步与核问题的特性无关，只是处理粒子束与探测器的几何问题。这问题在一般散射理论中有详细讨论，这里不再赘述。

从入射道 c 到出射道 c' 的反应过程截面是

$$\sigma_{cc'} = \frac{\pi}{k^2} \sum_J g^J |\delta_{cc'} - U_{cc'}^J|^2. \quad (3.37)$$

式中 $g^J = \frac{2J+1}{(2I+1)(2i+1)}$. (3.38)

g^J 称为自旋权重因子； I 和 i 分别为靶核和入射粒子的自旋； J 为体系的总角动量； k 是入射粒子和靶核的相对运动波数； $U_{cc'}^J$ 是给定 J 的从道 c 到 c' 的碰撞矩阵元。

由于总截面是所有分截面之和，从碰撞矩阵的么正性可推得：

$$\sigma_{ct} = \sum_{c'} \sigma_{cc'} = \frac{\pi}{k^2} \sum_J 2g^J \operatorname{Re}(1 - U_{cc'}^J), \quad (3.39)$$