#### Lời cam đoan

Tôi xin cam đoan đề tài nghiên cứu trong luận văn này là công trình nghiên cứu của tôi dựa trên những tài liệu, số liệu do chính tôi tự tìm hiểu và nghiên cứu. Chính vì vậy, các kết quả nghiên cứu đảm bảo trung thực và khách quan nhất. Đồng thời, kết quả này chưa từng xuất hiện trong bất cứ một nghiên cứu nào. ác số liệu, kết quả nêu trong luận văn là trung thực nếu sai tôi hoàn chịu trách nhiệm.

Tác giả luận

Nguyễn Minh Hiền

#### Lời cám ơn

Trước tiên, tôi xin gửi lời cảm ơn sâu sắc đến TS. Lê Thị Quỳnh Hương đã dành nhiều thời gian, tâm huyết, tận tình hướng dẫn cũng như tạo mọi điều kiện thuận lợi giúp tôi hoàn thành luận văn này.

Tôi xin chân thành cảm ơn quý thầy cô của Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam và Viện Nghiên cứu và Ứng dụng Công nghệ Nha Trang đã tận tình giảng dạy và tạo điều kiện để tôi hoàn thành chương trình thạc sĩ.

Tôi xin cảm ơn Quỹ NAFOSTED mã số 103.04-2019.371 và quỹ nghiên cứu khoa học của Trường Đại học Khánh Hòa mã số KHTN 21.02 đã tài trợ kinh phí cho nghiên cứu của tôi trong thời gian làm luận văn. Sự hỗ trợ tài chính này là vô cùng quý báu đối với tôi, giúp tôi yên tâm tập trung học tập.

Tôi cũng xin cảm ơn Trường Đại học Khánh Hòa cùng các thầy cô trong bộ môn Vật lý. Các thầy cô trong Trường đã luôn quan tâm đến nghiên cứu của tôi và động viên tôi.

Cuối cùng, tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành đến bố mẹ, các anh, chị, em và các bạn đã luôn ủng hộ, động viên tôi về cả tinh thần và vật chất trong suốt thời gian qua.

Trong quá trình làm luận văn, mặc dù tôi đã cố gắng để hoàn thành tốt nhưng không thể tránh khỏi những thiếu sót, hạn chế. Tôi rất mong nhận được những đóng góp quý báu của quý thầy cô và anh chị để luận văn được hoàn thiện hơn.

# Danh mục các ký hiệu và các chữ cái viết tắt

Chữ viết tắt	Tiếng Việt	Tiếng Anh
BCS		Bardeen Cooper Schrieffer
BSFG	Khí Fermi dịch chuyển ngược	Back Shifted Fermi Gas
ÐH	Đại học	
FG	Khí Fermi	Fermi Gas
FTBCS	Lý thuyết BCS tại nhiệt độ hữu hạn	Finite Temperature Bardeen Cooper Schrieffer
HFBC	Phương pháp Hartree – Fock – Bogoliubov tổ hợp	Hartree – Fock – Bogoliubov plus combinatorial method
IAEA	Cơ quan năng lượng nguyên tử Quốc tế	Internatinal Atomic Energy Agency
IPM	Mô hình đơn hạt độc lập	Independent Particle Model
MÐM	Mật độ mức	Nuclear level density

# Danh mục các bảng

Bảng 3.1: Số liệu đầu vào trong tính toán MĐM theo mô hình BSFG cho	)
các hạt nhân	30
Bảng 3.2: Bổ sung số liệu trong RIPL-3 để so sánh	32

# Danh mục các hình vẽ và đồ thị

Hình 3.2: So sánh mật độ mức BSFG theo năng lượng kích  $E^*$  trong khoảng 0-100 MeV cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d)

Hình 3.3: Năng lượng kích thích E\* theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d)...... 37

Hình 3.5: Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân 161Dy  $^{161}$ Dy (a),  $^{162}$ Dy (b),  $^{163}$ Dy (c) và  $^{164}$ Dy (d)...... 40

Hình 3.11: Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân $^{144}$ Nd (a), $^{145}$ Nd (b), $^{146}$ Nd (c), $^{147}$ Nd (d) $^{148}$ Nd (e) và $^{149}$ Nd (f) . 48
Hình 3.12: Năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup> Nd (a), <sup>145</sup> Nd (b), <sup>146</sup> Nd (c), <sup>147</sup> Nd (d) <sup>148</sup> Nd (e) và <sup>149</sup> Nd (f)
Hình 3.13: Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích trong khoảng 0-10 MeV cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b)52
Hình 3.14: Mật độ mức ρ theo hàm của năng lượng kích thích E* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b) 53
Hình 3.15: Năng lượng kích thích E* theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b)
Hình 3.16: Nhiệt dung riêng C theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b)54
Hình 3.17: Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b) 55
Hình 3.18: Năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup> Sm (a) và <sup>149</sup> Sm (b)56

### Lời cam đoan Lời cảm ơn Danh mục các chữ viết tắt Danh mục bảng biểu Danh mục các hình vẽ

# MỤC LỤC

MỞ ĐẦU	T 'H
1.1. MÔ HÌNH KHÍ FERMI5	
1.2. MÔ HÌNH NHIỆT ĐỘ KHÔNG ĐỔI8	
1.3. MÔ HÌNH GILBERT-CAMERON KẾT HỢP9	
1.4. MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỀN NGƯỢC 10 <b>1.4.1. Mô hình khí fermi dịch chuyển ngược với tham số mật độ mức không phụ thuộc vào năng lượng</b>	
<b>1.4.2. Mô hình khí fermi dịch chuyển ngược với tham số mật độ mức phụ thuộc vào năng lượng</b> 11	
CHƯƠNG 2. PHƯƠNG PHÁP KHẢO SÁT CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH	
2.1. CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH14	
2.2. LƯU ĐỒ THUẬT TOÁN KHẢO SÁT CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC THEO MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỀN NGƯỢC16	
2.3. NGÔN NGŨ LẬP TRÌNH TÍNH TOÁN $\dots$ 21	
<b>2.3.1. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân dy</b> 21	
2.3.2. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân nd	
<b>2.3.3. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân sm</b>	

CHƯƠNG 3. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ TÍNH TOÁN VÀ	
THẢO LUẬN	30
3.1. CÁC SỐ LIỆU ĐẦU VÀO CHO TÍNH TOÁN	31
3.2. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT	
ĐỘNG HỌC	33
<b>3.2.1.</b> Hạt nhân Dy	33
3.2.2. Hạt nhân Nd	42
3.2.3. Hạt nhân Sm	52
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ	57
1. KÉT LUẬN	57
2. KIÉN NGHI	58
DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ	59
TÀI LIỆU THAM KHẢO	60

### MỞ ĐẦU

Mât đô mức (MĐM), được đinh nghĩa là số mức năng lượng kích thích trong một đơn vị năng lượng kích thích [1], có vai trò rất quan trọng trong nghiên cứu cấu trúc và phản ứng hạt nhân năng lượng thấp cũng như thiên văn hạt nhân [2, 3]. Đại lượng này cũng giúp cho biết các tính chất trung bình của hạt nhân bị kích thích như các đại lượng nhiệt động học (năng lượng kích thích, năng lượng tự do, entropy, nhiệt dung riêng, v.v.) và chuyển pha lượng tử [4]. Về nguyên tắc, tính chất nhiệt động học của hạt nhân có thể được trích xuất trực tiếp từ dữ liệu MĐM thực nghiệm bằng cách sử dụng hai tập hợp thống kê, cụ thể là tập hợp chính tắc (CE) và tập hợp vi chính tắc (MCE) hạt nhân nguyên tử là một hệ có số hạt cố định [5-7]. Tập hợp thống kê CE thường được dùng để mô tả các tính chất nhiệt động học của hạt nhân thay vì tập hợp MCE. Lý do là MCE tồn tai một số han chế đối với hệ hữu han như hat nhân nguyên tử [8-14]. Trong tập hợp CE, MĐM thực nghiệm đầu tiên sẽ được ngoại suy bằng cách sử dụng mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) [15] để bao phủ toàn dải năng lượng kích thích trên năng lượng tách neutron B<sub>n</sub> và lên đến khoảng 150 MeV. Số liệu MĐM thực nghiệm cùng với MĐM được tính từ mô hình BSFG sau đó sẽ được sử dụng để xây dựng hàm phân chia trong tập hợp chính tắc  $Z_{CE}(T)$ , trên cơ sở đó tất cả các đại lượng nhiệt động học hạt nhân sẽ được tính [16 17]. Mô hình nghiên cứu MĐM lý thuyết đầu tiên, được đề xuất từ năm 1936 bởi nhà Vật lý [1], là mô hình khí Fermi (FG). Mô hình này được xây dựng dựa trên giả định rằng các trạng thái đơn hạt, trạng thái mà từ đó các mức kích thích của hạt nhân được xây dựng, cách đều nhau. Giả định đơn giản này của mô hình FG không đủ để mô tả MĐM của hạt nhân kích thích trong đó một số hiệu ứng như tượng quan kết cặp, hiệu ứng vỏ, biến dang, kích thích tập thể và quay, v.v., được biết là có đóng góp đáng kể. Do đó, một mô hình mở rộng của mô hình FG, được gọi là mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG), được đề xuất [18], trong đó hầu hết các tính chất quan trọng về cấu trúc của hạt nhân bị kích thích đều được tính đến. Tham số quan trọng nhất trong công thức BSFG là tham số mật đô mức a, có vai trò xác đinh đô dốc của đường cong MĐM. Nói chung, a được giả định là hằng số, mà các giá trị của nó được xác định từ việc làm khóp số liệu lý thuyết với dữ liệu thực nghiệm

khoảng cách mức trung bình  $D_0$  của hat nhân bi kích thích [19]. Tuy nhiên, một số nghiên cứu sau này đã chỉ ra rằng tham số mật đô mức a nên phu thuộc vào năng lượng kích thích [20, 21]. Hơn thế nữa, hiệu ứng vỏ, có ảnh hướng lớn tại năng lượng kích thích thấp và giảm dần ở năng lượng kích thích cao, cũng nên được đưa vào tham số a [22]. Do đó, để mô tả tổng thể dữ liệu MĐM trong toàn bộ vùng năng lượng, việc sử dụng công thức BSFG với a phụ thuộc vào năng lượng luôn tốt hơn với a không phụ thuộc năng lượng. Mô hình BSFG với a phụ thuộc vào năng lượng đã được sử dụng rộng rãi trong quy trình chuẩn hóa trong phương pháp Oslo kể từ năm 2013 (xem ví dụ: tài liệu tham khảo [23, 24]), trong khi BSFG với a không phụ thuộc năng lượng chỉ được sử dụng trước đó (xem ví dụ: tài liệu tham khảo [25, 26]). Trong một nghiên cứu gần đây, MĐM lý thuyết từ mô hình BSFG với tham số a phu thuộc vào năng lượng cho các hat nhân nóng <sup>93-98</sup>Mo đã được thực hiên và so sánh với MĐM được tính toán trước đó sử dung a không phu thuộc vào năng lượng [27, 28]. Kết quả cho thấy công thức với a phụ thuộc vào năng lượng giúp việc khảo sát các đại lượng nhiệt động học của hạt nhân kích thích chính xác hơn.

Mục tiêu của luận văn này là nghiên cứu mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) để mô tả mật độ mức toàn phần của một số hạt nhân nặng kích thích, từ đó so sánh với kết quả lý thuyết khác với số liệu thực nghiệm để đánh giá tính đúng đắn của mô hình. Sau đó tiến hành khảo sát, tổng hợp, đưa ra đánh giá, phân tích các đại lượng nhiệt động học của hạt nhân kích thích có khối lượng nặng.

Luận văn gồm có phần mở đầu, ba chương và phần kết luận cùng kiến nghị. Trong các chương, chúng tôi sẽ lần lượt giới thiệu tổng quan các mô hình lý thuyết hiện tượng luận mô tả mật độ mức của các hạt nhân kích thích; phương pháp khảo sát các đại lượng nhiệt động học của các hạt nhân kích thích và phân tích kết quả các đại lượng nhiệt động học.

# CHƯƠNG 1. GIỚI THIỆU TỔNG QUAN CÁC MÔ HÌNH LÝ THUYẾT HIỆN TƯỢNG LUẬN MÔ TẢ MẬT ĐỘ MỨC HẠT NHÂN KÍCH THÍCH

Các mô hình được sử dụng để mô tả MĐM được chia thành hai loại là mô hình hiện tượng luận [15,29–32] và mô hình vi mô [33–41]. Mỗi loại mô hình có ưu điểm và nhược điểm riêng. Trong mô hình vi mô, các hiệu ứng kết cặp, hiệu ứng lớp, hiệu ứng dao động được đưa vào một cách vi mô hoặc bán vi mô, cho phép tính toán MĐM ở năng lượng kích thích bất kỳ. Tuy nhiên các mô hình này có nhược điểm là tính toán phức tạp và tốn rất nhiều thời gian tính toán khi áp dụng cho các hạt nhân nặng. Đối với các mô hình hiện tượng luận, kết quả phụ thuộc rất nhiều vào độ chính xác của số liêu thực nghiêm được sử dụng để tìm giá trị của tham số làm khớp. Dó đó, nếu số liêu thực nghiêm không tốt hoặc không có số liêu thực nghiêm thì kết quả tính toán từ các mô hình hiên tương luân không còn đáng tin cậy, đây là hạn chế lớn nhất của các mô hình này. Bên cạnh đó, mô hình hiện tượng luận có ưu điểm là đơn giản và dễ tính toán nên vẫn được sử dụng để mô tả MĐM của hạt nhân. Các mô hình hiện tượng luận được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu MĐM là: Mô hình khí Fermi, mô hình nhiệt độ không đổi, mô hình Gilbert-Cameron kết hợp, mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược. Các mô hình hiện tượng luận sẽ lần lượt được trình bày trong chương này [42].

### 1.1. MÔ HÌNH KHÍ FERMI

Mô hình hiện tượng luận đầu tiên được dùng để mô tả MĐM tên là mô hình khí Fermi (Fermi-gas model) [1]. Mô hình khí Fermi chính là dạng đơn giản nhất của mô hình đơn hạt độc lập. Mô hình này giả thiết rằng các mức năng lượng đơn hạt là cách đều nhau và chưa tính đến thành phần tương tác spin–quỹ đạo (spin–orbital interaction). Do đó sơ đồ các mức năng lượng trong mô hình khí Fermi khác xa so với phổ năng lượng xác định từ thực nghiệm. Theo mô hình khí Fermi, MĐM tại năng lượng kích thích E có dạng như sau [1, 15, 43]

$$\rho(E) \propto \exp\left(2\sqrt{aE}\right)$$
(1.1)

với a là tham số mật độ mức, có giá trị bằng hằng số đối với mỗi hạt nhân (phụ thuộc vào số khối A và không phụ thuộc vào năng lượng kích thích E), và giá trị của nó được xác định thông qua quá trình làm khớp với số liệu thực nghiệm.

Trong mô hình khí Fermi, các nucleon được xem là không tương tác với nhau nhưng được liên kết với nhau bởi một thế đơn hạt (single–particle potential), các nucleon chuyển động trong một giếng thế vuông cạnh là b có dạng [44]

$$\begin{cases} U_{s.p}(0 < x < b) = 0\\ U_{s.p}(x = 0) = \infty\\ U_{s.p}(x = b) = \infty \end{cases} \tag{1.2}$$

với Us.p là thế đơn hạt, x là tọa độ. Thế đơn hạt này tương tự cho các tọa độ y và z.

Trong tính toán MĐM, hai loại số liệu thực nghiệm thường được sử dụng là số tích lũy các mức năng lượng (cumulative numbers of levels) trong vùng năng lượng kích thích thấp và khoảng cách mức trung bình  $D_0$ tại năng lượng kích thích bằng đúng năng lượng liên kết của neutron  $B_n$ . Mô hình khí Fermi với các dạng thế hiện tượng luận đơn giản có nhược điểm là không tính đến một số đặc trưng như: hiệu ứng kết cặp, hiệu chỉnh lớp,. . .. Do đó các hiệu ứng này được đưa vào thông qua các tham số mà biểu thức và giá trị của chúng được rút ra từ việc làm khớp với số liệu thực nghiệm. Có hai tham số phổ biến thường được sử dụng trong các mô hình hiện tượng luận mô tả MĐM là tham số mật độ mức (liên quan đến hiệu ứng lớp) và tham số năng lượng kết cặp (liên quan tới hiệu ứng kết cặp). Cụ thể, năng lượng kết cặp của các nucleon được đưa vào biểu thức tính MĐM thông qua đại lượng năng lượng kích thích hiệu dụng U có dạng [15]

$$\mathbf{U} = \mathbf{E} - \Delta \tag{1.3}$$

$$\Delta = \begin{cases} \delta_{N} + \delta_{Z} (a) \\ \delta_{z} (b) \\ \delta_{N} (c) \\ 0 (d) \end{cases}$$
(1.4)

với  $\Delta$  là năng lượng kết cặp,  $\delta$ N và  $\delta$ Z lần lượt là năng lượng kết cặp của neutron và proton (giá trị của các tham số này được tính đơn giản dựa trên sự chênh lệch khối lượng thực nghiệm giữa hạt nhân chẵn và lẻ). Trong công thức (1.4), các biểu thức (a), (b), (c), và (d) áp dụng tương ứng cho các trường hợp mà số neutron và proton trong hệ là chẵn-chẵn, lẻ-chẵn, chẵn-lẻ, và lẻ-lẻ.

Hiệu chỉnh lớp được đưa vào biểu thức tính MĐM thông qua tham số mật độ mức a dưới dạng biểu thức toán học đơn giản có dạng [15]

$$\frac{a}{A} = 0,00917(S_N + S_Z) + 0,142$$
 (1.5)

cho các hạt nhân không biến dạng và

$$\frac{a}{A} = 0,00917(S_N + S_Z) + 0,120$$
 (1.6)

cho các hạt nhân biến dạng, với A là tổng số nucleon trong hạt nhân, SN và SZ lần lượt là đại lượng đặc trưng cho hiệu chỉnh lớp của neutron và proton. Biểu thức tính MĐM tại năng lượng E có tính đến các hiệu ứng lớp và kết cặp có dạng [15]

$$\rho_{FG}(E) = \frac{1}{12\sqrt{2}\sigma} \frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{\frac{1}{4}}(U)^{\frac{5}{4}}}$$
(1.7)

với  $\sigma$  là hệ số cắt spin, có thể tính từ công thức:

$$\sigma^2 = 0,0194 A^{\frac{5}{3}} \sqrt{\frac{U}{a}}$$
(1.8)

Trong mô hình khí Fermi, giá trị của các tham số a,  $S_N$  và  $S_Z$  đều được hiệu chỉnh sao cho giá trị MĐM tính theo công thức (1.7) trùng với số liệu thực nghiệm. Dữ liệu thực nghiệm được dùng để làm khớp trong

vùng này là khoảng cách mức trung bình (average level spacing) tại năng lượng kích thích bằng với năng lượng liên kết của neutron [15,45,46].

Trong vùng năng lượng kích thích cao, nhiệt độ hạt nhân T phụ thuộc vào năng lượng kích thích theo biểu thức:

$$U = aT^2 \tag{1.9}$$

# 1.2. MÔ HÌNH NHIỆT ĐỘ KHÔNG ĐỔI

Mô hình nhiệt độ không đổi là mô hình lý thuyết hiện tượng luận thường được sử dụng trong vùng năng lượng kích thích thấp là mô hình nhiệt độ không đổi. Trong mô hình này, biểu thức tính MĐM tại năng lượng kích thích E có dạng

$$\rho_{\rm CT}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{1}{T} \exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right) \tag{1.10}$$

với T đặc trưng cho nhiệt độ của hạt nhân,  $E_0$  đặc trưng cho năng lượng của hạt nhân tại T = 0 và N là số tích lũy các mức năng lượng. Cả T và  $E_0$  đều là tham số, có giá trị được xác định bằng cách làm khớp với số liệu thực nghiệm. Theo mô hình này, T được giả thiết là không đổi trong vùng năng lượng kích thích thấp được xét.

Các nhà khoa học phát hiện rằng trong vùng năng lượng kích thích thấp, số tích lũy các mức năng lượng phụ thuộc vào năng lượng kích thích E và có thể được mô tả khá tốt bằng một hàm e mũ có dạng [15]

$$N(E) = \exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right)$$
(1.11)

Đối với rất nhiều hạt nhân, mô hình nhiệt độ không đổi có thể được sử dụng để khớp số liệu MĐM thực nghiệm cho vùng năng lượng kích thích thấp dưới Bn, vùng mà nhiệt độ của hạt nhân được xem gần như là không đổi. Một số nghiên cứu gần đây đã chỉ ra rằng mô hình nhiệt độ không đổi có thể áp dụng để mô tả MĐM hạt nhân lên tới vùng năng lượng kích thích có giá trị cỡ 20 MeV như trong các hạt nhân <sup>60</sup>Ni và <sup>60</sup>Co [47]. Trong bài báo công bố [48], tác giả đã khẳng định lại được kết quả trên, tuy nhiên kết quả này chỉ đúng cho các hạt nhân nhẹ và trung bình. Với

các hạt nhân nặng thì mô hình nhiệt độ không đổi vẫn chỉ giới hạn trong vùng năng lượng kích thích dưới  $B_n$  [48].

#### 1.3. MÔ HÌNH GILBERT-CAMERON KẾT HỢP

Một mô hình hiện tượng luận khác thường được sử dụng là mô hìnhh Gilbert-Cameron kết hợp do Gilbert và Cameron [15] đề xuất dựa trên ý tưởng kết hợp hai mô hình khí Fermi và mô hình nhiệt độ không đổi. Lý do là mô hình nhiệt độ không đổi chỉ có thể mô tả tốt MĐM trong vùng năng lượng kích thích thấp (dưới Bn), còn mô hình khí Fermi chỉ mô tả tốt MĐM vùng năng lượng kích thích cao (trên Bn). Do đó, mô hình GilbertCameron kết hợp có thể mô tả được MĐM trong toàn dải năng lượng. Theo mô hình Gilbert-Cameron kết hợp, mô hình khí Fermi (1.18) sẽ được sử dụng để mô tả MĐM khi năng lượng kích thích lớn hơn giá trị năng lượng Ex được ước lượng như sau [15]

$$E_x = 2,5 + \frac{150}{A} + \delta_N + \delta_Z$$
 (1.12)

Trong khi đó, nếu năng lượng kích thích nhỏ hơn giá trị năng lượng Ex thì MĐM sẽ được tính theo mô hình nhiệt độ không đổi (1.10). Sự kết hợp các thông số của cả hai mô hình dựa trên điều kiện liên tục của MĐM và đạo hàm bậc nhất của nó tại năng lượng Ex [15]

$$\rho_{FG}(E = E_x) = \rho_{CT}(E = E_x)$$

$$\left. \frac{\partial \rho_{FG}}{\partial E} \right|_{E = E_x} = \left. \frac{\partial \rho_{CT}}{\partial E} \right|_{E = E_x}$$
(1.13)
(1.14)

Sự kết hợp hai mô hình này cho kết quả MĐM lý thuyết khá tốt khi so sánh với dữ liệu thực nghiệm. Tuy nhiên cũng có nhiều trường hợp không thể khớp được đường cong MĐM cho vùng năng lượng kích thích thấp  $\rho_{CT}$  và vùng năng lượng kích thích cao  $\rho_{FG}$ . Nguyên nhân là do thiếu hoặc không xác định được các dữ liệu thực nghiệm như số mức tích lũy

trong vùng năng lượng kích thích thấp hay khoảng cách mức trung bình trong vùng năng lượng kích thích cao.

## 1.4. MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỀN NGƯỢC

Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) là mô hình được phát triển dựa trên mô hình khí Fermi trong đó khắc phục những nhược điểm của mô hình cũ để có thể xác định được đồng thời MĐM trong vùng năng lượng kích thích thấp và cao. Điểm khác biệt giữa mô hình này với mô hình trước liên quan tới hai tham số tự do là tham số mật độ mức a và năng lượng kết cặp.

# 1.4.1. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với tham số mật độ mức không phụ thuộc vào năng lượng

Mật độ mức hạt nhân tính theo mô hình BSFG với tham số MĐM a không phụ thuộc vào năng lượng có dạng là

$$\rho_{BSFG}(E) = \eta \frac{\exp[2\sqrt{a(E-E_1)}]}{12\sqrt{2}\sigma a^{\frac{1}{4}}(E-E_1)^{\frac{5}{4}}}$$
(1.15)

với η là tham số để làm khớp số liệu lý thuyết với số liệu thực nghiệm tính ra từ công thức (1.15), E là năng lượng kích thích, và  $E_1 = C_1 + E_{pair}$  là phần dịch chuyển năng lượng kích thích (excitation energy shift),  $C_1 = -6.6A^{-0.32}$  với A là số nuclon của hạt nhân và  $E_{pair}$  là năng lượng kết cặp.

Như vậy năng lượng kích thích sẽ được trừ đi cho một lượng là  $E_1$ .

Trong công thức (1.15),  $\sigma$  được tính từ công thức

 $\sigma^2 = 0.0888A^{\frac{2}{3}}\sqrt{a(E - E_1)}$  với  $a = 0.21A^{0.87}$ . Như vậy tham số MĐM a là hằng số. Công thức BSFG sử dụng kết nối dữ liệu trong vùng năng lượng trung gian từ khoảng 4 đến (B<sub>n</sub> - 1) MeV tại  $E = B_n$ .

Như ta đã biết tham số MĐM a được đưa vào trong công thức tính MĐM để bổ chính hiệu ứng lớp. Kết quả của các tính toán vi mô về MĐM đều cho thấy sự suy giảm của hiệu ứng lớp ở năng lượng cao. Trong khi đó, biểu thức tính mật độ mức có dạng (1.15) nghĩa là không phụ thuộc vào năng lượng. Do đó một mô hình mới với biểu thức tham số MĐM a phụ thuộc vào năng lượng đã được đề xuất và chúng tôi sẽ trình bày ở phần tiếp theo.

# 1.4.2. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với tham số mật độ mức phụ thuộc vào năng lượng

Trong mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với tham số mật độ mức phụ thuộc vào năng lượng, biểu thức của a đã được thay đổi dưới dạng một biểu thức phụ thuộc vào năng lượng như sau

$$a \equiv (Z, A, E) = \tilde{a}(A) \left\{ 1 + \frac{\delta W(Z, A)}{(E - E_1)} \left[ 1 - e^{-\gamma(E - E_1)} \right] \right\}$$
(1.16)

trong đó  $\tilde{a}(A)$  là tham số mật độ mức tiệm cận với a ở năng lượng kích thích cao,  $\gamma$  là tham số suy giảm,  $\delta W(Z, A)$  là năng lượng hiệu chỉnh lớp có dạng

$$\delta W(Z,A) = M_{exp} - M_{LD}, \qquad (1.17)$$

với  $M_{exp}$  và  $M_{LD}$  là khối lượng hạt nhân được xác định từ thực nghiệm và khối lượng hạt nhân được tính bằng cách sử dụng công thức mẫu giọt (the macroscopic liquid-drop formula). Biểu thức tính MĐM tại năng lượng kích thích E của mô hình này cho hệ có A nucleon gồm Z proton và N neutron có dạng như sau

$$\rho_{BSFG}(E) = \frac{\exp[2\sqrt{a(E-E_1)}]}{12\sqrt{2}\sigma a^{\frac{1}{4}}(E-E_1)^{\frac{5}{4}}}$$
(1.18)

Việc sử dụng mô hình a phụ thuộc vào năng lượng tốt hơn với a không phụ thuộc vào năng lượng. Mô hình BSFG với a phụ thuộc vào năng lượng đã được sử dụng rộng rãi trong quy trình chuẩn hóa trong phương pháp Oslo từ năm 2013, trong khi BSFG với a không phụ thuộc vào năng lượng chỉ sử dụng trước đó.

Nếu mô hình khí nhiệt độ không đổi chỉ tính MĐM trong vùng năng lượng kích thích thấp, còn mô hình khí Fermi có thể tính MĐM trong vùng năng lượng cao thì mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược có thể tính được MĐM trong toàn dải năng lượng kích thích. Ưu điểm của mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược là các hiệu ứng lớp và hiệu ứng kết cặp được tính đến một cách tốt hơn và do đó MĐM thu được khá gần với số liệu thực nghiệm. Tuy nhiên, nhược điểm cơ bản của mô hình này cũng như các mô hình hiện tượng luận khác là các tham số của nó chỉ được xác định trong trường hợp có đầy đủ số liệu thực nghiệm.

Như vậy, trong các mô hình hiện tượng luận nêu trên, hai mô hình nhiệt độ không đổi và khí Fermi đều không mô tả chính xác số liệu MĐM trong khoảng năng lượng rộng từ trạng thái cơ bản đến các mức năng lượng cao hơn năng lượng liên kết của neutron. Do đó, chúng đã được kết hợp với nhau. Tuy nhiên việc kết hợp này không phải lúc nào cũng thực hiện được do chúng phụ thuộc vào độ chính xác của các số liệu thực nghiệm được sử dụng để tìm giá trị của các tham số làm khớp. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược có thể mô tả được mật độ mức trong toàn dải năng lượng. Hạn chế của các mô hình lý thuyết hiện tượng luận này là không sử dụng được để dự đoán cho các trường hợp mà thực nghiệm chưa có. Nếu số liệu thực nghiệm không tốt hoặc không có số liệu thực nghiệm thì kết quả tính toán từ các mô hình này rõ ràng cũng không còn đáng tin cậy. Tuy nhiên, chúng cũng có ưu điểm rất lớn là đơn giản và dễ tính toán.

# CHƯƠNG 2. PHƯƠNG PHÁP KHẢO SÁT CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH

Trong giới hạn của luận văn này, chúng tôi sử dụng mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với tham số MĐM a phụ thuộc vào năng lượng. Mô hình này được phát triển từ mô hình khí Fermi với việc tính đến các hiệu ứng như tương quan kết cặp, hiệu ứng vỏ, biến dạng, kích thích tập thể và quay, v.v..., được biết là có đóng góp đáng kể, để mô tả tốt hơn MĐM của hạt nhân kích thích [18]. Công thức tính mật độ mức theo mô hình BSFG có biểu thức (1.18) như đã trình bày ở Chương 1 mục 4.2 có dạng:

$$\rho_{BSFG}(E) = \frac{\exp[2\sqrt{a(E-E_1)}]}{12\sqrt{2}\sigma a^{\frac{1}{4}}(E-E_1)^{\frac{5}{4}}}$$
(2.1)

trong đó E là năng lượng kích thích;  $E_1$  là năng lượng dịch chuyển ngược, là tham số tự do được xác định giá trị bằng cách làm khớp với giá trị thực nghiệm của từng hạt nhân; a là tham số mật độ mức. Tham số spin trong biểu thức tính MĐM có dạng

$$\sigma^2 = 0.0888 A^{2/3} \sqrt{\frac{(E - E_1)}{a}}$$

với A là số khối của hạt nhân.

Tham số quan trọng nhất trong công thức BSFG (2.1) là tham số mật độ mức a, có vai trò xác định độ dốc của đường cong MĐM. Trong một số nghiên cứu, a được giả định là hằng số, mà các giá trị của nó được xác định từ việc làm khớp số liệu lý thuyết với dữ liệu thực nghiệm khoảng cách mức trung bình D0 của hạt nhân bị kích thích [49, 50]. Tuy nhiên, MĐM vi mô tính toán đã chỉ ra rằng tham số mật độ mức a nên phụ thuộc vào năng lượng kích thích [20, 21, 51, 52]. Hơn thế nữa, hiệu ứng vỏ cũng nên được đưa vào tham số a do hiệu ứng này có ảnh hướng lớn tại năng lượng kích thích thấp và giảm dần ở năng lượng kích thích cao [22,53,54]. Do đó chúng tôi thấy rằng tham số mật độ mức a có phụ thuộc năng lượng,

có tính đến sự giảm dần của hiệu ứng vỏ khi tăng năng lượng là tối ưu hơn, tham số này được mô tả bằng một công thức hiện tượng luận như sau [20, 51]

$$a \equiv (Z, A, E) = \tilde{a}(A) \left\{ 1 + \frac{\delta W(Z, A)}{(E - E_1)} [1 - e^{-\gamma(E - E_1)}] \right\}$$

trong đó ã(A) là tham số mật độ mức tiệm cận đạt được khi tất cả các hiệu ứng vỏ đều bị giảm.

Trong luận văn này, chúng tôi sử dụng mô hình BSFG với tham số MĐM a phụ thuộc vào năng lượng để khảo sát các đại lượng nhiệt động học của hạt nhân nặng kích thích.

# 2.1. CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH

MĐM có mối quan hệ trực tiếp với hàm phân chia nhiệt động học, đặc trưng cho các đặc tính thống kê của một hệ thống trong trạng thái cân bằng nhiệt động học. Nguyên nhân là do một hạt nhân nguyên tử có thể được mô tả tốt bằng một tập hợp thống kê ngay cả khi ở mức năng lượng kích thích thấp với mật độ trạng thái dày đặc [5, 6]. Như đã thảo luận trong phần Mở đầu, tập hợp thống kê chính tắc CE thường được sử dụng để mô tả các tính chất nhiệt động học của hạt nhân. Trong tập hợp CE này, hàm phân chia Z(T) có thể được tính toán từ MĐM bằng cách sử dụng phép biến đổi nghịch đảo Laplace của MĐM, có biểu thức dạng [54]

$$Z^{CE}(T) = \sum_{E_i=0}^{\infty} \rho(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i$$
(2.2)

trong đó  $\rho(E_i)$  là MĐM tổng cộng tại năng lượng kích thích  $E_i$ ,  $\delta E_i$  là bước nhảy của năng lượng, và T là nhiệt độ hạt nhân. Trong công thức (2.2), năng lượng kích thích có giá trị từ 0 đến  $\infty$ , nghĩa là MĐM phải được mở rộng đến năng lượng mức kích thích rất cao. Tuy nhiên, dữ liệu MĐM thực nghiệm thường bị giới hạn dưới năng lượng liên kết neutron  $B_n$ . Do đó, mô hình BSFG (2.1) được sử dụng để mở rộng tính toán MĐM theo năng lượng kích thích có giá trị từ Bn đến 100 MeV. Giá trị tối đa  $E_i = 120$  MeV là đủ để nghiên cứu nhiệt động học hạt nhân trong một phạm vi nhiệt độ từ 0 đến 4 MeV [55, 56]. Do đó, phương trình (2.2) được chia thành hai phần, phần đầu tiên liên quan đến số liệu MĐM thực nghiệm, phần thứ 2 là tập hợp MĐM được tính từ mô hình BSFG, cụ thể:

$$Z^{CE}(T) = \sum_{E_i=0}^{E < B_n} \rho_{exp}(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i + \sum_{E_i=B}^{E_i=100 MeV} \rho_{BSFG}(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i$$
(2.3)

Các đại lượng nhiệt động học như entropy, nhiệt dung riêng, ... được tính từ hàm phân chia (2.3) được gọi là số liệu bán thực nghiệm, được sử dụng để so sánh với các tính toán lý thuyết (xem ví dụ, tài liệu tham khảo [25, 26, 55–57]).

Như vậy, khi biết hàm phân chia chúng ta có thể dễ dàng tính được các đại lượng nhiệt động học như năng lượng tự do  $F_T$ , năng lượng tổng  $E_T$ , entropy  $S_T$ , nhiệt dung riêng  $C_T$  bằng công thức [6]

$$E_T = -\frac{\partial ln Z^{CE}(\beta)}{\partial \beta}$$
(2.4)

$$C_T = \beta^2 \frac{\partial \ln Z^{CE}(\beta)}{\partial x} = \frac{\partial E_T}{\partial T}$$
(2.5)

$$S_T = \beta E_T + \ln Z(\beta) \tag{2.6}$$

$$F_T = E_T - TS \tag{2.7}$$

Với  $\beta = \frac{1}{T}$ .

# 2.2. LƯU ĐỒ THUẬT TOÁN KHẢO SÁT CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG HỌC THEO MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỀN NGƯỢC

Chương trình tính toán đại lượng nhiệt động học theo mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng, được viết trên ngôn ngữ Fortran chạy trên nền giả lập Linux (Cygwin) của hệ điều hành Windows. Lưu đồ thuật toán có dạng như sau:









Trong các lưu đồ thuật toán 1, 2, 3 ta có:

Z: số proton của hạt nhân.

N: số neutron của hạt nhân.

*E*<sub>exp</sub>: năng lượng kích thích thực nghiệm.

E: năng lượng kích thích.

 $E_{exp}(1)$ : năng lượng kích thích thực nghiệm đầu tiên.

 $\rho_{exp}$ : mật độ mức thực nghiệm.

 $\delta W$ : năng lượng hiệu chỉnh lớp.

*T* : nhiệt độ hạt nhân.

 $\tilde{a}$ : tham số mật độ mức tiệm cận.

 $E_1$ : năng lượng dịch chuyển ngược.

*γ*: tham số suy giảm.

 $a(E)_{BSFG}$ : tham số mật độ mức tại năng lượng kích thích được tính theo mô hình BSFG.

 $\sigma(E)_{BSFG}$ : hệ số cắt spin tại năng lượng kích thích được tính theo mô hình BSFG.

 $\rho(E)_{BSFG}$ : mật độ mức tại năng lượng kích thích được tính theo mô hình BSFG.

 $\rho(E)_{exp}$ : mật độ mức thực nghiệm.

 $\rho(Bn)$ : mật độ mức tại năng lượng tách neutron Bn được tính từ giá trị thực nghiệm khoảng cách mức D0.

Z(T): hàm phân chia theo nhiệt độ T.

E(T): năng lượng tổng hợp theo nhiệt độ T.

S(T): entropy theo nhiệt độ T.

F(T): năng lượng tự do theo nhiệt độ T.

C(T): nhiệt dung riêng theo nhiệt độ T.

Chương trình tính toán được viết trên ngôn ngữ lập trình Fortran chạy trên Cygwin của hệ điều hành Windows. Máy tính cá nhân được sử dụng để chạy chương trình có các thông số kỹ thuật như sau: bộ xử lý Intel Core i7 8750H, bộ nhớ 8GB, tốc độ xử lý dữ liệu 2,2GHz. 2.3. NGÔN NGŨ LẬP TRÌNH TÍNH TOÁN

# 2.3.1. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân Dy (Dysprosi)

IMPLICIT REAL\*8(A-H,O-Z) PARAMETER (NIT=410,DT=0.01D0,NE=1000, DE=0.1D0,NEX=49.0D0) DIMENSION RHO\_FG(NE),RHO\_EXP(NEX), EEX(NEX),ID(NEX),EFG(NE), & RA(NE),SIGMA(NE), & RHO\_EXFG(NE),EI(NE),ET(NIT),RT(NIT),RC(NIT), & ST(NIT),FT(NIT),E0T(NIT) 10 FORMAT(20(F10.4,1X)) 11 FORMAT(20(E10.4,1X))

OPEN(UNIT=101,FILE='NLD\_Exp\_2018.txt',STATUS='UNKNOWN') OPEN(UNIT=110,FILE='RHOFG.txt',STATUS='UNKNOWN') OPEN(UNIT=120,FILE='ET.txt',STATUS='UNKNOWN')

DO I=1,NEX READ(101,\*)J,EEX(I),RHO\_EXP(I) ENDDO AA=161.0D0 NETA=0.0D0 RS=2.76808D0 RGAMMA=0.06842D0 RAA=15.2309D0 REE1=-0.53358D0 RE1=NETA\*(12.0D0/(DSQRT(AA)))+REE1 RE2=RE1 T=0.01D0 cCalculating a (energy dependence of a) EE = EEX(2)

c ETA calculation

```
c U=EE_ETA-E1
```

DO I=1,NE

EFG(I)=EE

 $RA(I) = RAA^{*}(1.0D0 + ((RS)/(EE-RE2)))$ 

& \*(1.0D0-DEXP((-RGAMMA)\*(EE-RE2))))

```
SIGMA(I)=DSQRT(0.0888D0*AA**(2.0D0/3.0D0)
```

\*DSQRT(RA(I)\*(EERE1)))

```
RHO_FG(I) = (DEXP(2.0D0*DSQRT(RA(I)*(EE-RE1))))
```

```
& /(12.0D0*DSQRT(2.0D0)*RA(I)**0.25D0 *(EE-
```

RE1)\*\*1.25D0\*SIGMA(I))

```
c WRITE(*,10)EE,RHO_FG(I),RA(I)
```

```
WRITE(110,11)EE,RHO_FG(I)
```

```
EE=EE+DE
```

ENDDO

```
DO I=1,NE
```

```
IF (I.LE.NEX) THEN
```

```
EI(I)=EEX(I)
```

```
RHO_EXFG(I)=RHO_EXP(I)
```

ELSE

```
EI(I)=EFG(I-NEX)
```

```
RHO_EXFG(I)=RHO_FG(I-NEX)
```

```
ENDIF
```

```
c WRITE(*,*)I,EI(I),RHO_EXFG(I)
```

```
ENDDO
```

```
DO IT=1,NIT
```

```
RT(IT)=T
```

SE=0.0D0

Z=0.0D0

DO I=1,NE-1

DEE=EI(I+1)-EI(I)Z=Z+RHO EXFG(I)\*DEXP(-EI(I)/T)\*DEE SE=SE+EI(I)\*RHO\_EXFG(I)\*DEXP(-EI(I)/T)\*DEE c WRITE(120,\*)RT(IT),I,Z,SE **ENDDO** ET(IT)=SE/ZST(IT)=(SE)/(T\*Z)+DLOG(Z)FT(IT) = ET(IT) - (T\*ST(IT))E0T(IT)=ET(IT)-ET(1)T=T+DT**ENDDO** DO I=1,NIT-1 RC(I) = (ET(I+1)-ET(I))/DTc WRITE(\*,10)RT(I),ET(I),RC(I) WRITE(120,10)RT(I),ET(I),RC(I),ST(I),FT(I),E0T(I) **ENDDO** 

#### \*

#### END

#### c FIRST DERIVATIVE USING THREE POINTS

SUBROUTINE DERI(A,N,B,DT) IMPLICIT REAL\*8(A-H,O-Z) DIMENSION A(N),B(N) DO I=1,N-2 B(I)=-0.5D0\*(A(I+2)-4\*A(I+1)+3\*A(I))/DT ENDDO RETURN END

### 2.3.3. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân Nd (Neodimi)

IMPLICIT REAL\*8(A-H,O-Z) PARAMETER (NIT=410,DT=0.01D0,NE=1000, DE=0.1D0,NEX=65.0D0) DIMENSION RHO\_FG(NE),RHO\_EXP(NEX), EEX(NEX),ID(NEX),EFG(NE), & RA(NE),SIGMA(NE), & RHO\_EXFG(NE),EI(NE),ET(NIT),RT(NIT),RC(NIT), & ST(NIT),FT(NIT),E0T(NIT) 10 FORMAT(20(F10.4,1X))

11 FORMAT(20(E10.4,1X))

OPEN(UNIT=101,FILE='NLD\_Exp\_2021.txt',STATUS='UNKNOWN') OPEN(UNIT=110,FILE='RHOFG.txt',STATUS='UNKNOWN') OPEN(UNIT=120,FILE='ET.txt',STATUS='UNKNOWN')

DO I=1,NEX READ(101,\*)J,EEX(I),RHO\_EXP(I) ENDDO AA=144.0D0 NETA=0.0D0 RS=0.34170D0 RGAMMA=0.00608D0 RAA=14.62918D0 REE1=14.62918D0 RE1=NETA\*(12.0D0/(DSQRT(AA)))+REE1 RE2=RE1 T=0.01D0 cCalculating a (energy dependence of a) EE=EEX(12) c ETA calculation

c U=EE\_ETA-E1

DO I=1,NE

EFG(I)=EE

RA(I)= RAA\*(1.0D0+((RS)/(EE-RE2)) & \*(1.0D0-DEXP((-RGAMMA)\*(EE-RE2))))

SIGMA(I)=DSQRT(0.0888D0\*AA\*\*(2.0D0/3.0D0)

SIGMA(I)-DSQR1(0.0000D0 AA (2.0)

\*DSQRT(RA(I)\*(EERE1)))

RHO\_FG(I)=(DEXP(2.0D0\*DSQRT(RA(I)\*(EE-RE1))))

& /(12.0D0\*DSQRT(2.0D0)\*RA(I)\*\*0.25D0 \*(EE-

RE1)\*\*1.25D0\*SIGMA(I))

c WRITE(\*,10)EE,RHO\_FG(I),RA(I)

WRITE(110,11)EE,RHO\_FG(I)

EE=EE+DE

ENDDO

DO I=1,NE

IF (I.LE.NEX) THEN

EI(I)=EEX(I)

```
RHO_EXFG(I)=RHO_EXP(I)
```

ELSE

```
EI(I)=EFG(I-NEX)
```

```
RHO_EXFG(I)=RHO_FG(I-NEX)
```

ENDIF

```
c WRITE(*,*)I,EI(I),RHO_EXFG(I)
```

ENDDO

DO IT=1,NIT

RT(IT)=T

SE=0.0D0

Z=0.0D0

DO I=1,NE-1

DEE=EI(I+1)-EI(I) Z=Z+RHO\_EXFG(I)\*DEXP(-EI(I)/T)\*DEE SE=SE+EI(I)\*RHO\_EXFG(I)\*DEXP(-EI(I)/T)\*DEE c WRITE(120,\*)RT(IT),I,Z,SE ENDDO ET(IT)=SE/Z

```
ST(IT)=(SE)/(T*Z)+DLOG(Z)

FT(IT)=ET(IT)-(T*ST(IT))

E0T(IT)=ET(IT)-ET(1)

T=T+DT

ENDDO

DO I=1,NIT-1

RC(I)=(ET(I+1)-ET(I))/DT

c WRITE(*,10)RT(I),ET(I),RC(I)

WRITE(120,10)RT(I),ET(I),RC(I),ST(I),FT(I),E0T(I)

ENDDO
```

```
******
```

### END

### c FIRST DERIVATIVE USING THREE POINTS

SUBROUTINE DERI(A,N,B,DT) IMPLICIT REAL\*8(A-H,O-Z) DIMENSION A(N),B(N) DO I=1,N-2 B(I)=-0.5D0\*(A(I+2)-4\*A(I+1)+3\*A(I))/DT ENDDO RETURN END

### 2.3.3. Ngôn ngữ lập trình tính toán hạt nhân Sm (Samari)

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
PARAMETER (NIT=410,DT=0.01D0,NE=1000,
DE=0.1D0,NEX=52.0D0)
DIMENSION RHO_FG(NE),RHO_EXP(NEX),
EEX(NEX),ID(NEX),EFG(NE),
& RA(NE),SIGMA(NE),
& RHO_EXFG(NE),EI(NE),ET(NIT),RT(NIT),RC(NIT),
```

& ST(NIT),FT(NIT),E0T(NIT) 10 FORMAT(20(F10.4,1X)) 11 FORMAT(20(E10.4,1X))

\*\*\*\*\*\*\*

```
OPEN(UNIT=101,FILE='NLD_Exp_2002.txt',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=110,FILE='RHOFG.txt',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=120,FILE='ET.txt',STATUS='UNKNOWN')
*****
```

```
DO I=1,NEX
READ(101,*)J,EEX(I),RHO_EXP(I)
ENDDO
AA=149.0D0
NETA=0.0D0
RS=3.51912D0
RGAMMA=0.06839D0
RAA=15.21703D0
REE1=-0.35891D0
RE1=NETA*(12.0D0/(DSQRT(AA)))+REE1
RE2=RE1
T=0.01D0
cCalculating a (energy dependence of a)
EE=EEX(10)
```

c ETA calculation

c U=EE\_ETA-E1

DO I=1,NE

EFG(I)=EE

RA(I) = RAA\*(1.0D0+((RS)/(EE-RE2)))

& \*(1.0D0-DEXP((-RGAMMA)\*(EE-RE2))))

SIGMA(I)=DSQRT(0.0888D0\*AA\*\*(2.0D0/3.0D0)

\*DSQRT(RA(I)\*(EERE1)))

RHO\_FG(I)=(DEXP(2.0D0\*DSQRT(RA(I)\*(EE-RE1))))

```
& /(12.0D0*DSQRT(2.0D0)*RA(I)**0.25D0 *(EE-
```

```
RE1)**1.25D0*SIGMA(I))
```

```
c WRITE(*,10)EE,RHO_FG(I),RA(I)
```

WRITE(110,11)EE,RHO\_FG(I)

```
EE=EE+DE
ENDDO
DO I=1,NE
IF (I.LE.NEX) THEN
EI(I)=EEX(I)
RHO_EXFG(I)=RHO_EXP(I)
ELSE
EI(I)=EFG(I-NEX)
RHO_EXFG(I)=RHO_FG(I-NEX)
ENDIF
c WRITE(*,*)I,EI(I),RHO_EXFG(I)
ENDDO
DO IT=1,NIT
RT(IT)=T
SE=0.0D0
Z=0.0D0
DO I=1,NE-1
```

DEE=EI(I+1)-EI(I)  $Z=Z+RHO\_EXFG(I)*DEXP(-EI(I)/T)*DEE$   $SE=SE+EI(I)*RHO\_EXFG(I)*DEXP(-EI(I)/T)*DEE$  c WRITE(120,\*)RT(IT),I,Z,SE ENDDO ET(IT)=SE/Z ST(IT)=(SE)/(T\*Z)+DLOG(Z) FT(IT)=ET(IT)-(T\*ST(IT)) E0T(IT)=ET(IT)-ET(1) T=T+DT ENDDO DO I=1,NIT-1 RC(I)=(ET(I+1)-ET(I))/DT c WRITE(\*,10)RT(I),ET(I),RC(I),ST(I),FT(I),E0T(I)

#### ENDDO

\*\*\*\*\*\*

#### END

### c FIRST DERIVATIVE USING THREE POINTS

SUBROUTINE DERI(A,N,B,DT) IMPLICIT REAL\*8(A-H,O-Z) DIMENSION A(N),B(N) DO I=1,N-2 B(I)=-0.5D0\*(A(I+2)-4\*A(I+1)+3\*A(I))/DT ENDDO RETURN END

# CHƯƠNG 3. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ TÍNH TOÁN VÀ THẢO LUẬN

# 3.1. CÁC SỐ LIỆU ĐẦU VÀO CHO TÍNH TOÁN

Phương pháp BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng đã được áp dụng để tính MĐM cho 12 hạt nhân <sup>161-164</sup>Dy, <sup>144-149</sup>Nd, và <sup>148-149</sup>Sm và so sánh với các số liệu thực nghiệm của hai nhóm thực nghiệm nhóm Oslo và nhóm Ohio. Các thông số đầu vào cho tính toán đã được liệt kê trong Bảng 3.1.

Bảng 3.1. Số liệu đầu vào trong tính toán MĐM theo mô hình BSFG cho các hạt nhân

Hạt	Ζ	Ν	$\mathbf{I}_{t}$	δW	$\mathbf{B}_{\mathbf{n}}$	$D_0$	Derr
nhân				(MeV)	(MeV)	(eV)	(eV)
<sup>144</sup> Nd	60	84	-3.5	0.34170	7.817	35	5
<sup>145</sup> Nd	60	85	0	1.10949	5.755	450	50
<sup>146</sup> Nd	60	86	-3.5	1.67836	7.565	17	3
<sup>147</sup> Nd	60	87	0	2.48818	5.292	290	50
<sup>148</sup> Nd	60	88	-2.5	2.86341	7.333	3.5	1.7
<sup>149</sup> Nd	60	89	0	3.51912	5.039	155	20
<sup>148</sup> Sm	62	86	-3.5	2.03332	8.141	5.1	0.5
<sup>149</sup> Sm	62	87	0	2.90239	5.871	100	20
<sup>161</sup> Dy	66	95	0	2.76808	6.454	27	5
<sup>162</sup> Dy	66	96	2.5	2.46351	8.197	2.4	0.2

<sup>163</sup> Dy	66	97	0	2.16632	6.271	62	5
<sup>164</sup> Dy	66	98	-2.5	2.01707	7.658	6.8	0.6

Trong đó:

Z: số proton của hạt nhân.

N: số neutron của hạt nhân.

 $I_t$ : spin trạng thái cơ bản của hạt nhân bia.

 $\delta W$  (MeV ): năng lượng hiệu chỉnh lớp.

 $\rho(B_n)$ : mật độ mức tại năng lượng tách neutron Bn được tính từ giá trị thực nghiệm khoảng cách mức  $D_0$ .

Derr: sai số D<sub>0</sub>.

Trong Bảng 3.1, các thông số đầu vào của hạt nhân  $^{161-164}$ Dy được lấy từ Bảng I trong tài liệu [61], đối với hạt nhân  $^{144-149}$ Nd được tham khảo từ Bảng I trong tài liệu [62], còn hạt nhân  $^{148-149}$ Sm được lấy từ Bảng I trong tài liệu [63]. Riêng số liệu I<sub>t</sub> cho các hạt nhân, chúng tôi tham khảo ở tài liệu [19].

Hạt nhân	γ (MeV -1)	ã (MeV -1)	E1(MeV)
<sup>144</sup> Nd	0.00608	14.62918	1.05980
<sup>145</sup> Nd	0.02710	15.06000	-0.00250
<sup>146</sup> Nd	0.04792	15.22825	0.92186
<sup>147</sup> Nd	0.02574	16.85108	0.15523
<sup>148</sup> Nd	0.03757	17.07689	0.79140
<sup>149</sup> Nd	0.06839	15.21703	-0.35891
<sup>148</sup> Sm	0.08070	15.97661	1.28499
<sup>149</sup> Sm	0.09739	15.42410	0.25562
<sup>161</sup> Dy	0.06842	15.23090	-0.53358
<sup>162</sup> Dy	0.01526	16.26649	0.36851
<sup>163</sup> Dy	0.11511	15.27796	-0.09472
<sup>164</sup> Dy	0.05396	15.16655	0.49798

Bảng 3.2. Bổ sung số liệu trong RIPL-3 để so sánh

Trong đó:

γ: tham số suy giảm.

ã: tham số mật độ mức tiệm cận.

E<sub>1</sub>: năng lượng dịch chuyển ngược.

Các tham số tự do trong Bảng 3.2 nhận được bằng cách làm khớp giá trị MĐM tính từ mô hình BSFG có tham số MĐM phụ thuộc năng lượng với số liệu MĐM thực nghiệm cho các hạt nhân. Các tham số này sẽ được dùng để tính toán số liệu ở phần sau.



#### 3.2.1. Hạt nhân Dy

Hình 3.1. So sánh số liệu mật độ mức thực nghiệm của năm 2003/2012 và năm 2018 với số liệu được tính từ mô hình BSFG. Mật độ mức tại năng lượng tách  $\rho(B_n)$  được tính toán từ số liệu D<sub>0</sub> thực nghiệm đưa ra trong RIPL-3 cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Các kết quả mật độ mức được trích từ công trình [58].

Trong Hình 3.1, các nét liền là MĐM thu được bằng cách sử dụng công thức BSFG (1.18) với các tham số được liệt kê trong Bảng 3.1. Các dấu tam giác đặc (với sai số) và hình tròn rỗng (với sai số) là dữ liệu MĐM được lấy từ tài liệu [59–61] cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Hình 3.1, ta có thể dễ dàng nhận thấy giá trị MĐM của mô hình BSFG (đường liền nét) thu được bằng cách sử dụng các tham số trong rất phù hợp với tập dữ liệu thực nghiệm mới nhất năm 2018. Mô hình BSFG mô tả tốt dữ liệu thực

nghiêm MĐM trong khoảng năng lượng kích thích trên 2 MeV tất cả các hat Trong nhân được khảo sát. khoảng năng lương kích dưới 2 MeV, BSFG không tái hiện được số liệu MĐM thử nghiệm. Điều này là do mô hình BSFG giả đinh rằng MĐM là liên tục trong vùng năng lương thấp nhưng dữ liêu MĐM thực nghiêm trong vùng năng lượng này thường thể hiên cấu trúc giống như bâc thang, tức là có sư thay đổi đột ngột về độ dốc của MĐM tại một năng lượng nhất định, đây có thể là kết quả của sư phá vỡ căp nucleon đầu tiên. Điều này thể hiên rõ hơn ở sự khác biệt giữa hạt nhân chẵn – chẵn (162,164Dy) với hạt nhân chẵn – lẻ (<sup>161,163</sup>Dy) vì hạt nhân chẵn – lẻ đã có một nucleon chưa ghép cặp ở trạng thái ổn định, trong khi hạt nhân chẵn – chẵn phải được kích thích bằng một năng lượng riêng để phá vỡ cặp nucleon thứ nhất. Khi năng lượng kích thích tăng lên, sự phá vỡ các cặp nucleon liên tiếp xảy ra, dẫn đến một số lượng lớn các nucleon không ghép cặp. Do đó, cấu trúc bậc thang bị làm nhẵn và không còn được quan sát thấy nữa. Hình 3.1 cũng chỉ ra rằng BSFG trong công trình của chúng tôi tái hiện tốt dữ liệu D0 thực nghiệm được lấy từ cơ sở dữ liệu RIPL-3 [19] vì tất cả các đường BSFG đều đi qua các điểm dữ liệu  $\rho(B_n)$  tương ứng của chúng. Các giá trị phù hợp nhất của các tham số tự do thu được trong mô hình BSFG hiện tại được liệt kê trong Bång 3.2.



Hình 3.2. So sánh mật độ mức BSFG theo năng lượng kích trong khoảng 0-100 MeV cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Kết quả được trích từ công trình [58].

Hình 3.2 biểu diễn so sánh mật độ mức được tính toán từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích cho hạt nhân <sup>161-164</sup>Dy trong khoảng từ 0 MeV đến 100 MeV. Kết quả này được trích từ công trình [58]. Trong Hình 3.2, mật độ mức BSFG được tính bằng cách sử dụng công thức với tham số mật độ mức có phụ thuộc vào năng lượng và số liệu thực nghiệm năm 2018 (các đường nét liền), còn mật độ mức BSFG được lấy từ tài liệu [59, 60] được tính từ công thức với tham số mật độ mức là hằng số và số hiệu thực nghiệm

năm 2003/2012 (các đường nét đứt). Từ Hình 3.2 có thể thấy rõ ràng trong rằng các mật độ mức BSFG năm 2018 (ký hiệu là BSFG 2018) thấp hơn so với giá trị mật độ mức BSFG (ký hiệu là BSFG 2003 và BSFG 2012) ở vùng năng lượng cao, trong khi chúng gần như giống nhau ở vùng năng lượng thấp. Sự khác biệt giữa mật độ mức BSFG 2003 và BSFG 2018 của <sup>162</sup>Dy (3.2b) là nhỏ nhất, dẫn đến sự khác biệt nhỏ về nhiệt dung riêng của hạt nhân này (sẽ được trình bày ở Chương 3). Đối với các đồng vị Dy còn lại, sự khác biệt giữa các giá trị mật độ mức BSFG 2018 và 2003/2012 là rất đáng kể (3.2a, c và d), dẫn đến sự khác biệt lớn giữa nhiệt dung riêng cập nhật năm 2018 và không cập nhật năm 2003/2012 của chúng (sẽ được trình bày ở mục sau).



Hình 3.3. Năng lượng kích thích  $E^*$  theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d).

Hình 3.3 biểu diễn năng lượng kích thích toàn phần E\* theo hàm của nhiệt độ T cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Năng lượng kích thích toàn phần được định nghĩa là năng lượng tổng E(T) trừ đi năng lượng trạng thái cơ bản E (T = 0). Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng năng lượng kích thích luôn tăng theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ thấp T < 0,4MeV E\* có giá trị nhỏ, tăng chậm theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ T > 0,4MeV thì E\* tăng nhanh.



Hình 3.4. So sánh nhiệt dung riêng C được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2018 (This work) và năm 2003/2012 cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Các đường nét đứt là kết quả được trích xuất trực tiếp từ số liệu trình bày trong Tài liệu [59, 60]. Các đường nét liền là các kết quả thu được trong nghiên cứu hiện tại bằng cách sử dụng công thức tính MĐM exp + BSFG. Kết quả được trích từ công trình [58].

Nhiệt dung riêng chưa cập nhật (đường nét đứt) được tính bằng cách sử dụng dữ liệu MĐM cũ năm 2003/2012 và mô hình BSFG với các tham số không phụ thuộc vào năng lượng. Giá trị nhiệt dung riêng chưa cập nhật của <sup>161,163,164</sup>Dy được trích xuất trực tiếp từ các số liệu trình bày trong

tài liệu [58, 60], trong khi nhiệt dung riêng của <sup>162</sup>Dy được tính bằng đữ liệu MĐM thực nghiệm và BSFG với tham số không phụ thuộc vào năng lượng được đưa ra trong tài liệu [60]. Có thể thấy từ Hình 3.2 rằng nhiệt dung cập nhật và chưa cập nhật hầu như giống nhau ở các vùng nhiệt độ dưới 0,5 MeV cho <sup>161-163</sup>Dy và 0,3 MeV đối với <sup>164</sup>Dy. Kết quả này có thể do dữ liệu thực nghiệm MĐM trong vùng năng lượng thấp, thường thu được bằng cách đếm số mức rời rạc trong sơ đồ mức từ thí nghiệm, ở năng lượng thấp gần như giống hệt nhau (Ví dụ Hình 3.1, số liệu MĐM thực nghiệm ở vùng năng lượng thấp gần như giống hệt nhau cho tất cả các năm 2003, 2012 và 2018). Sự khác biệt giữa nhiệt dung riêng trong nghiên cứu của chúng tôi (đường nét liền) và nhiệt độ cao. Cụ thể, nhiệt dung riêng cập nhật của bốn hạt nhân được nghiên cứu nhỏ hơn và ít dốc hơn những giá trị chưa được cập nhật. Sự khác biệt này xuất phát từ sự khác biệt giữa các giá trị MĐM thu được từ mô hình BSFG.



Hình 3.5. Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân  $^{161}$ Dy (a),  $^{162}$ Dy (b),  $^{163}$ Dy (c) và  $^{164}$ Dy (d).

Entropy tổng cộng S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG được biểu diễn trong Hình 3.5 (a), (b), (c) và (d) lần lượt cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy, <sup>162</sup>Dy, <sup>163</sup>Dy và <sup>164</sup>Dy. Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng entropy luôn tăng theo sự tăng của nhiệt độ giống như năng lượng kích thích hay nhiệt dung riêng. Trong vùng T > 0,3 MeV entropy tăng nhanh hơn so với vùng T < 0,3 MeV. Entropy là đại lượng đặc trưng cho sự hỗn độn của hệ. Khi T < 0,3 MeV do số lượng kết cặp còn lớn nên sự hỗn độn của hệ là nhỏ hay entropy nhỏ, hệ ở trạng thái cân bằng tốt.

Khi T > 0,3 MeV các kết cặp bị phá vỡ làm hệ mất trạng thái cân bằng, entropy tăng nhanh theo hàm nhiệt độ.



Hình 3.6. Năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân  ${}^{161}$ Dy (a),  ${}^{162}$ Dy (b),  ${}^{163}$ Dy (c) và  ${}^{164}$ Dy (d).

Hình 3.6 biểu diễn năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>161</sup>Dy (a), <sup>162</sup>Dy (b), <sup>163</sup>Dy (c) và <sup>164</sup>Dy (d). Năng lượng tự do F giảm theo sự tăng của nhiệt độ, ngược lại với E\*, C và F. Khi T < 0,5 MeV thì năng lượng tự do F giảm rất nhanh theo nhiệt độ.



Hình 3.7. Mật độ mức toàn phần  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E<sup>\*</sup> thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d), <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f).

3.2.2. Hạt nhân Nd

Hình 3.7 (a-f) biểu diễn mật độ mức toàn phần  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d), <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f) thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM có phụ thuộc vào năng lượng (đường nét liền) và so sánh với số liệu thực nghiệm của nhóm Oslo [62].  $\rho_{BSFG}$  rất phù hợp với các số liệu thực nghiệm cho tất cả các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d), <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f). Điều này đã góp phần khẳng định độ tin cậy của phương pháp BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng.



Hình 3.8. Mật độ mức toàn phần  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f).



Hình 3.9. Năng lượng kích thích  $E^*$  theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f).

Hình 3.9 biểu diễn năng lượng kích thích toàn phần của <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f). Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng năng lượng kích thích luôn tăng theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ thấp T < 0,4 MeV E\* có giá trị nhỏ, tăng chậm theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ T > 0,4 MeV thì E\* tăng nhanh.



Hình 3.10. Nhiệt dung riêng C theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f).

Hình 3.10 biểu diễn nhiệt dung riêng tổng cộng C theo hàm của nhiệt độ T  $^{144}$ Nd (a),  $^{145}$ Nd (b),  $^{146}$ Nd (c),  $^{147}$ Nd (d)  $^{148}$ Nd (e) và  $^{149}$ Nd (f). Trong vùng nhiệt độ trung bình 0,4 MeV < T < 0,8 MeV, đồ thị nhiệt dung riêng C thu được từ mô hình BSFG thể hiện 1 đỉnh (peak) nhỏ, định này xuất hiện rõ rệt trong các hạt nhân có số proton và neutron đều là chẵn như  $^{144}$ Nd,  $^{146}$ Nd và  $^{148}$ Nd. Nguyên nhân là do sự chuyển pha kết cặp của các hạt nhân chẵn - chẵn luôn mạnh hơn các hạt nhân có số proton lẻ.



Hình 3.11. Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân  $^{144}$ Nd (a),  $^{145}$ Nd (b),  $^{146}$ Nd (c),  $^{147}$ Nd (d)  $^{148}$ Nd (e) và  $^{149}$ Nd (f).

Entropy tổng cộng S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG được biểu diễn trong Hình 3.11 (a), (b), (c) và (d) lần lượt cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f). Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng entropy luôn tăng theo sự tăng của nhiệt độ giống như năng lượng kích thích hay nhiệt dung riêng. Trong vùng T > 0,3 MeV entropy tăng nhanh hơn so với vùng T < 0,3 MeV. Entropy là đại lượng đặc trưng cho sự hỗn độn của hệ. Khi T < 0,3 MeV do số lượng kết cặp còn lớn nên sự hỗn độn của hệ là nhỏ hay entropy nhỏ, hệ ở trạng thái cân bằng tốt. Khi T > 0,3 MeV các kết cặp bị phá vỡ làm hệ



Hình 3.12. Năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân  $^{144}$ Nd (a),  $^{145}$ Nd (b),  $^{146}$ Nd (c),  $^{147}$ Nd (d)  $^{148}$ Nd (e) và  $^{149}$ Nd (f).

Hình 3.12 biểu diễn năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>144</sup>Nd (a), <sup>145</sup>Nd (b), <sup>146</sup>Nd (c), <sup>147</sup>Nd (d) <sup>148</sup>Nd (e) và <sup>149</sup>Nd (f). Năng lượng tự do F giảm theo sự tăng của nhiệt độ, ngược lại với E\*, C và F. Khi T < 0,5 MeV thì năng lượng tự do F gần như bằng không. Khi T > 0,5 MeV thì năng lượng tự do F giảm rất nhanh theo nhiệt độ.



Hình 3.13. Mật độ mức toàn phần  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích trong khoảng 0-10 MeV cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Hình 3.13 (a), (b) biểu diễn mật độ mức toàn phần  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b) thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM có phụ thuộc vào năng lượng (đường nét liền) và so sánh với số liệu thực nghiệm của nhóm Oslo [63].  $\rho_{BSFG}$  rất phù hợp với các số liệu thực nghiệm cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b). Điều này đã góp phần khẳng định độ tin cậy của phương pháp BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng.



Hình 3.14. Mật độ mức  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Hình 3.14 biểu diễn mật độ mức  $\rho$  theo hàm của năng lượng kích thích E\* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng cho hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).



Hình 3.15. Năng lượng kích thích  $E^*$  theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Hình 3.15 biểu diễn năng lượng kích thích toàn phần <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b). Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng năng lượng kích thích luôn tăng theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ thấp T < 0,2 MeV E\* có giá trị nhỏ, tăng chậm theo nhiệt độ. Trong vùng nhiệt độ T > 0,2 MeV thì E\* tăng nhanh.



Hình 3.16. Nhiệt dung riêng C theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Hình 3.16 biểu diễn nhiệt dung riêng C theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b). Trong hình vẽ nhiệt dung riêng được tính từ mô hình BSFG của chúng tôi được so sánh với nhiệt dung riêng trích từ công trình của nhóm [63]. Từ hình vẽ ta thấy nhiệt dung riêng của hạt nhân chẵn - chẵn <sup>148</sup>Sm, có hình dạng chữ S mạnh hơn nhiều so với hạt nhân chẵn - lẻ <sup>149</sup>Sm. Sự khác biệt rõ ràng giữa 2 nhiệt dung riêng này là hợp lí bởi vì hạt nhân chẵn - lẻ.



Hình 3.17. Entropy S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Entropy tổng cộng S theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG trong Hình 3.17 (a) và (b) lần lượt cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b). Từ các hình này chúng ta có thể thấy rằng entropy luôn tăng theo sự tăng của nhiệt độ giống như năng lượng kích thích hay nhiệt dung riêng. Trong vùng T > 0,2 MeV entropy tăng nhanh hơn so với vùng T < 0,2 MeV. Entropy là đại lượng đặc trưng cho sự hỗn độn của hệ. Khi T < 0,2 MeV do số lượng kết cặp còn lớn nên sự hỗn độn của hệ là nhỏ hay entropy nhỏ, hệ ở trạng thái cân bằng tốt. Khi T > 0,2 MeV các kết cặp bị phá vỡ làm hệ mất trạng thái cân bằng, entropy tăng nhanh theo nhiệt độ.



Hình 3.18. Năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b).

Hình 3.18 biểu diễn năng lượng tự do F theo hàm của nhiệt độ T thu được từmô hình BSFG cho các hạt nhân <sup>148</sup>Sm (a) và <sup>149</sup>Sm (b). Năng lượng tự do F giảm theo sự tăng của nhiệt độ, ngược lại với E\*, C và F. Khi T < 0,5 MeV thì năng lượng tự do F gần như bằng không. Khi T > 0,5 MeV thì năng lượng tự do F giảm rất nhanh theo nhiệt độ.

### KÉT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

1. KẾT LUẬN

Trong luận văn này, chúng tôi đã nghiên cứu mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) để mô tả mật độ mức toàn phần của một số hạt nhân nặng kích thích, từ đó so sánh với số liệu thực nghiệm để đánh giá tính đúng đắn của mô hình. Sau đó chúng tôi tiến hành khảo sát, tổng hợp, đưa ra đánh giá, phân tích các đại lượng nhiệt động học của hạt nhân kích thích có khối lượng nặng. Áp dụng mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng vào mô tả mật độ mức toàn phần của một số hạt nhân mà hai nhóm thực nghiệm gần đây đã xác định được (nhóm Oslo và nhóm Ohio) như <sup>161-164</sup>Dy, <sup>144-149</sup>Nd, và <sup>148-149</sup>Sm, chúng tôi đã thu được một số kết quả như sau:

1. Nghiên cứu mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) để mô tả mật độ mức toàn phần của hạt nhân kích thích.

2. Sử dụng mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng kích thích tính toán mật độ mức toàn phần của một số hạt nhân nặng kích thích.

3. So sánh kết quả tính toán mật độ mức từ mô hình BSFG với số liệu thực nghiệm, đánh giá tính đúng đắn của mô hình.

4. Khảo sát các đại lượng nhiệt động học (nhiệt dung riêng C, năng lượng kích thích E\*, năng lượng tự do F, entropy S) của một số hạt nhân nặng kích thích.

5. Tổng hợp, đánh giá, phân tích kết quả nghiên cứu về các đại lượng nhiệt động học của một số hạt nhân nặng kích thích.

Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng kích thích có ưu điểm là tính toán khá đơn giản, thời gian tính toán theo phương pháp này cũng rất nhanh bằng máy tính cá nhân và đồng thời cho kết quả đáng tin cậy.

2. KIÉN NGHỊ

Trong luận văn này, chúng tôi mới chỉ giới thiệu kết quả tính toán mật độ mức và các đại lượng nhiệt động học cho 12 hạt nhân là <sup>161-164</sup>Dy, <sup>144-149</sup>Nd, và <sup>148-149</sup>Sm. Trong thời gian tới, chúng tôi sẽ mở rộng tính toán cho các hạt nhân khác, đặc biệt là các hạt nhân đã có và đã được cập nhật số liệu MĐM thực nghiệm.

## DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

# 1. CÔNG TRÌNH CÔNG BỐ

Le Thi Quynh Huong, Tran Dong Xuan, Nguyen Ngoc Anh, Nguyen Minh Hien, Tran Cong Duy and Nguyen Quang Hung, Updated heat capacities of 161-164*Dy* nuclei, *Communications in Physics*, đã gửi tòa soạn ngày 13/10/2022, đã được chấp nhận đăng ngày 01/02/2023.

# 2. BÁO CÁO HỘI NGHỊ

Le Thi Quynh Huong, Nguyen Minh Hien, Tran Cong Duy, Nguyen Quang Hung, 2021, Investigation of thermodynamic quantities in some excited nuclei, *Hội nghị Vật Lý Lý thuyết toàn quốc lần thứ 46*, (NCTP-46).

# TÀI LIỆU THAM KHẢO

- 1. Bethe H.A., 1936, An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus, *Physical Review*, 50(4), pp. 332-341.
- Rauscher T., Thielemann F.K. and Kratz K.L., 1997, Nuclear Level Density and the Determination of Thermonuclear Rates for Astrophysics, *Physical Review C*, 56(3), pp. 1613-1625.
- 3. Rauscher T. and Thielemann F.K., 2000, Astrophysical reaction rates from statistical model calculations, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 75(1-2), pp. 1-351.
- 4. N. Quang Hung, N. Dinh, L.G. Moretto, 2019, Pairing in excited nuclei: a review, *Reports on Progress in Physics*, 82, 056301.
- 5. Sumaryada T. and Volya A., 2007, Thermodynamics of pairing in mesoscopic systems, *Physical Review C*, 76(2), pp. 024319 (1-18).
- Hung N.Q. and Dang N.D., 2009, Exact and approximate ensemble treatments of thermal pairing in a multilevel model, *Physical Review C*, 79(5), pp. 054328 (1-10).
- N. Quang Hung, N. Dinh Dang, L.T. Quynh Huong, 2017, Simultaneous microscopic description of nuclear level density and radiative strength function, *Physical Review Letters*, 118, 022502.
- L.Henden et al., 1995, On the relation between the statistical γ -decay and the level density in <sup>162</sup>Dy, *Elsevier logoJournals & Books Go to journal home page - Nuclear Physics A Nuclear Physics A*, 589, 249.
- 9. T.S. Tveter et al., 1996, Observation of fine structure in nuclear level densities and  $\gamma$  -ray strength functions, *Physical Review Letters*, 77,2404.
- 10. A. Voinov et al., 2001,  $\gamma$  -ray strength function and pygmy resonance in rare earth nuclei, *Physical Review C*, 63, 044313.
- U. Agvaanluvsan et al., 2004, Level densities and γ -ray strengthfunctions in <sup>170,171,172</sup>Yb, Physical Review C, 70, 054611.
- 12. M. Guttormsen et al., 2015, Experimental level densities of atomic nuclei, *The European Physical Journal A*, 51, 170.

- 13. E. Melby et al., 2001, Thermal and electromagnetic properties of <sup>166</sup>*Er* and <sup>167</sup>*Er*, *Physical Review C*, 63, 044309.
- 14. M. Guttormsen et al., 2013, Constant-temperature level densities in the quasicontinuum of Th and U isotopes, *Physical Review C*, 88, 024307.
- Gilbert A. and Cameron A.G.W., 1965, A composite nuclear-level density formula with shell corrections, *Canadian Journal of Physics*, 43(8), pp. 1446-1496.
- E. Melby et al., 1999, Observation of thermodynamical properties in the <sup>162</sup>Dy, <sup>166</sup>Er, and <sup>172</sup>Yb nuclei, *Physical Review Letters*, 83, 3150.
- 17. M. Guttormsen et al., 2000, Entropy in hot 161,162*Dy* and <sup>171,172</sup>*Yb* nuclei. *Physical Review C*, 62, 024306.
- 18. H. Utsunomiya et al., 2013, Photoneutron cross sections for Mo isotopes: A step toward a unified understanding of  $(\gamma, \eta)$  and  $(\eta, \gamma)$  reactions, *Physical Review C*, 88, 01580.
- Belgya T., et al. (2020), Reference Input Parameter Library (RIPL-3), [online] Available at: https://www-nds.iaea.org/RIPL-3/ [Accessed September 2020].
- A.V. Ignatyuk, G.N. Smirenkin, A.S. Tishin, 1975, Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter, *Yad. Fiz*, 21, 485.
- 21. A.V. Ignatyuk, K.K. Istekov, G.N. Smirenkin, 1979, Role of the collective effects in a systematics of nuclear level density, *Yad. Fiz*, 29, 875.
- 22. T.V. Egidy, D. Bucurescu, 2005, Systematics of nuclear level density parameters, *Physical Review C*, 72, 044311.
- A.C. Larsen et al., 2013, Transitional γ strength in Cd isotopes, *Physical Review C*, 87, 014319.
- 24. T.G. Tornyi et al., 2014, Level density and  $\gamma$  -ray strength function in the odd-odd <sup>238</sup>Np nucleus, *Physical Review C*, 89, 044323.
- 25. A. Schiller et al., 2001, Critical temperature for quenching of pair correlations, *Physical Review C*, 63, 021306.

- R. Chankova et al., 2006, Level densities and thermodynamical quantities of heated <sup>93-98</sup>*Mo* isotopes, *Physical Review C*, 73, 034311.
- 27. Le Thi Quynh Huong, Nguyen Minh Hien, Tran Cong Duy, Nguyen Quang Hung, 2021, Investigation of thermodynamic quantities in some excited nuclei, *Hội nghị Vật Lý Lý thuyết toàn quốc lần thứ 46*, (NCTP-6).
- Thi Quynh Huong Le, Dong Xuan Tran, Ngoc Anh Nguyen, and Quang Hung Nguyen, 2021, Re-investigation of heat capacity and pairing phase transition in hot <sup>93-98</sup>Mo nuclei, *The European Physical Journal A*, 57, 109.
- Dilg W., Schantl W., Vonach H. and Uhl M., 1973, Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range 40 < A < 250, *Nuclear Physics A*, 217(2), pp. 269-298.
- 30. Ericson T., 1960, The statistical model and nuclear level densities, *Advances in Physics*, 9(36), pp. 425-511.
- Kadmenskij S.G., Markushev V.P. and Furman V.I, 1983, Radiative widths of neutron resonances and giant dipole resonances, *Soviet Journal* of Nuclear Physics, 37(2), pp. 277-283.
- 32. Kopecky J. and Chrien R.E., 1987, Observation of the M1 giant resonance by resonance averaging in 196*P d*, *Nuclear Physics A*,468(2), pp.285-300.
- Alhassid Y., Liu S. and Nakada H., 1999, Particle-number reprojectionin the shell model Monte Carlo method: Application to nuclear level densities, *Physical Review Letters*, 83(21), pp. 4265-4268.
- Alhassid Y., Liu S. and Nakada H., 2007, Spin projection in the shell model Monte Carlo method and the spin distribution of nuclear level densities, *Physical Review Letters*, 99(16), pp. 162504 (1-4).
- 35. Alhassid Y., Bonett-Matiz M., Liu S. and Nakada H., 2015, Direct microscopic calculation of nuclear level densities in the shell model Monte Carlo approach, *Physical Review C*, 92(2), pp. 024307 (1-5).
- Bonett-Matiz M., Mukherjee A. and Alhassid Y., 2013, Level densities of nickel isotopes: Microscopic theory versus experiment, *Physical Review C*, 88(1), pp. 011302 (1-5).

- 37. Demetriou P. and Goriely S., 2001, Microscopic nuclear level densities for practical applications, *Nuclear Physics A*, 695(1-4), pp. 95-108.
- Goriely S., Hilaire S. and Koning A.J., 2008, Improved microscopic nuclear level densities within the Hartree-Fock-Bogoliubov plus combinatorial method, *Physical Review C*, 78(6), pp. 064307 (1-14).
- 39. Goriely S. and Khan E., 2002, Large-scale QRPA calculation of E1strength and its impact on the neutron capture cross section, *Nuclear Physics A*, 706(1-2), pp. 217-232.
- Hilaire S. and Goriely S., 2006, Global microscopic nuclear level densities within the HFB plus combinatorial method for practical applications, *Nuclear Physics A*, 779, pp. 63-81.
- 41. Ozen C., Alhassid Y. and Nakada H., 2015, Nuclear state densities of odd-mass heavy nuclei in the shell model Monte Carlo approach, *Physical Review C*, 91(3), pp. 034329 (1-4).
- 42. Lê Thị Quỳnh Hương, 2019, Nghiên cứu vi mô mật độ mức toàn phần của các hạt nhân <sup>60-63</sup>Ni, <sup>160-163</sup>Dy và <sup>170-172</sup>Yb sử dụng lời giải chính xác bài toán kết cặp kết hợp với mẫu đơn hạt độc lập tại nhiệt độ hữu hạn, Luận án Tiến sĩ, Trường ĐH Khoa Học Tự Nhiên – ĐHQG TP Hồ Chí Minh.
- Capote R., et al., 2009, RIPL Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations, *Nuclear Data Sheets*, 110(12), pp. 3107-3214.
- 44. Griffiths D.J., 2005, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education, United State of America.
- 45. Lynn J.E., 1968, *The Theory of Neutron Resonance Reactions*, Clarendon Press, Oxford.
- 46. Malyshev A.V., 1969, *Level Density and Structure of Atomic Nuclei*, Atomizdat, Moscow, USSR.
- 47. Voinov A.V., Oginni B.M., Grimes S.M., Brune C.R., Guttormsen M., Larsen A.C., Massey T.N., Schiller A., and Siem S., 2009, Nuclear

excitations at constant temperature, *Physical Review C*, 79, pp. 031301(R) (1-4).

- Dang N.D., Hung N.Q. and Huong L.T.Q., 2017, Testing the constant emperature approach for the nuclear level density, *Physical Review C*, 96(5), pp. 054321 (1-10).
- Belgya T., et al. (1998), Reference Input Parameter Library (RIPL-1), [online] Available at: https://www-nds.iaea.org/RIPL-1/ [Release date 15 May 1998].
- Belgya T., et al. (2003), Reference Input Parameter Library (RIPL-2), [online] Available at: https://www-nds.iaea.org/RIPL-2/ [Release date April 20 2003].
- 51. A.V. Ignatyuk, G.N. Smirenkin, A.S. Tishin, 1979, Role of collective effects in the systematics of nuclear level densities, *Soviet journal of nuclear physics*, 21, 255.
- 52. A.V. Ignatyuk, K.K. Istekov, G.N. Smirenkin, 2019, Soviet journal of nuclear physics, 29, 450.
- 53. T.V. Egidy, D. Bucurescu, ibid. 2006, *Physical Review C*, 73, 049901.
- 54. A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nuclear Structure: Volume 1*, 471, 1969, Benjamin, New York.
- 55. N. Quang Hung, N. Dinh Dang, 2010, Canonical and microcanonical ensemble descriptions of thermal pairing within BCS and quasiparticle random-phase approximation, *Physical Review C*, 81, 057302.
- 56. N. Quang Hung, N. Dinh Dang, 2010, Thermodynamic properties of hot nuclei within the self-consistent quasiparticle random-phase approximation, *Physical Review C*, 82, 044316.
- 57. K. Kaneko et al., 2006, Breaking of nucleon Cooper pairs at finite temperature in 93-98*Mo*, *Physical Review C*, 74, 024325.
- 58. Le Thi Quynh Huong, Tran Dong Xuan, Nguyen Ngoc Anh, Nguyen Minh Hien, Tran Cong Duy and Nguyen Quang Hung, Updated heat capacities of <sup>161-164</sup>Dy nuclei, *Communications in Physics*, đã gửi tòa soạn ngày 13/10/2022, đã chấp nhận đăng ngày 01/02/2023.

- M. Guttormsen, A. Bagheri, R. Chankova, J. Rekstad, S. Siem,
   A. Schiller et al., Thermal properties and radiative strengths in <sup>160,161,162</sup>Dy, *Physical Review C*, 68, pp. 064306, 2003.
- H. T. Nyhus, S. Siem, M. Guttormsen, A. C. Larsen, A. Burger, N. U. H. Syed et al., Level density and thermodynamic properties of dysprosium isotopes, *Physical Review C*, 85, 014323, 2012.
- T. Renstrom, H. Utsunomiya, H. T. Nyhus, A. C. Larsen, M. Guttormsen, et al., Verification of detailed balance for γ absorption and emission in Dy isotopes, *Physical Review C*, 98, 054310, 2018.
- 62. M. Guttormsen, Y. Alhassid, W. Ryssens, K.O. Ay et al., Strong enhancement of level densities in the crossover from spherical to deformedneodymium isotopes, *Physics Letters B*, 816, pp. 136206 (1-5), 2021.
- S. Siem, M. Guttormsen, K. Ingeberg, E. Melby, J. Rekstad, and A. Schiller, Level densities and g-strength functions in <sup>148,149</sup>Sm, *Physical Review C*, 65, pp. 044318 (1-10), 2002.