BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Trần Công Duy

KHẢO SÁT SỰ CHUYỂN PHA KẾT CẶP CỦA MỘT SỐ HẠT NHÂN KÍCH THÍCH CÓ KHỐI LƯỢNG NHẸ VÀ TRUNG BÌNH

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

Hà Nội - 2023

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Trần Công Duy

KHẢO SÁT SỰ CHUYỂN PHA KẾT CẶP CỦA MỘT SỐ HẠT NHÂN KÍCH THÍCH CÓ KHỐI LƯỢNG NHẸ VÀ TRUNG BÌNH

Chuyên ngành: Vật lí nguyên tử và hạt nhân

Mã số: 8 44 01 06

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC

TS. Lê Thị Quỳnh Hương

Hà Nội - 2023

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đề tài nghiên cứu trong luận văn này là công trình nghiên cứu 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 tính trung thực và khách quan nhất. Đồng thời, các thông tin trích dẫn trong luận văn đều được ghi rõ nguồn gốc. Các số liệu, kết quả nêu trong luận văn là trung thực nếu sai tôi hoàn toàn chịu trách nhiệm.

Hà Nội, ngày 10 tháng 4 năm 2024

Tác giả

Trần Công Duy

LỜI CẢM ƠN

Đầu tiên, tôi xin gửi lời cảm ơn sâu sắc đến TS. Lê Thị Quỳnh Hương đã tin tưởng giao đề tài và dành nhiều thời gian, tận tình, tâm huyết để hướng dẫn tôi nghiên cứu cũng như tạo mọi điều kiện thuận lợi giúp tôi hoàn thành bản 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, 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.

Nhân đây, tôi cũng xin gửi lời cảm ơn Ban giám hiệu và các thầy cô bộ môn Vật lý của trường Đại học Khánh Hòa đã tạo điều kiện thuận lợi để tôi hoàn thành tốt bản luận văn.

Cuối cùng, tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành đến bố mẹ, ông bà, các anh chị em và bạn bè đã luôn đồng hành cùng tôi, ủng hộ động viên tinh thần cũng như vật chất để tôi hoàn thành tốt luận văn và khóa học này.

Trong quá trình làm luận văn, tôi đã cố gắng để hoàn thành tốt luận văn của mình. Tuy nhiên, luận văn chắc chắn không tránh khỏi những hạn chế, nội dung còn nhiều thiếu sót. Tôi rất mong nhận được sự góp ý, chỉ dẫn quý báu của quý thầy cô, anh chị và bạn bè để luận văn được hoàn thiện nhất.

Hà Nội, ngày 10 tháng 4 năm 2024

Tác giả

Trần Công Duy

DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

Chữ viết tắt	Tiếng Anh	Tiếng Việt
BCS	**B**ardeen-**C**ooper-**S**chrieffer	
BSFG	**B**ack-**S**hifted-**F**ermi-**G**as	Khí Fermi dịch chuyển ngược
CE	**C**anonical **E**nsembles	Tổ hợp thống kê chính tắc
ĐH		**Đ**ại **H**ọc
FG	**F**ermi **G**as	Khí Fermi
GCE	**G**rand **C**anonical **E**nsembles	Tổ hợp thống kê đại chính tắc
HFBCS	**H**artree-**F**ock plus **B**ardeen-**C**ooper-**S**chrieffer method	Phương pháp Hartree-Fock kết hợp với Bardeen-Cooper-Schirieffer
HFBC	**H**atree-**F**ock-**B**ogoliubov plus **C**ombinatorial method	Phương pháp Hartree- Fock-Bogoliubov tổ hợp
IAEA	**I**nternational **A**tomic **E**nergy **A**gency	Cơ quan Năng lượng Nguyên tử Quốc tế
IPM	**I**ndependent **P**article **M**odel	Mô hình đơn hạt độc lập
MCE	**M**icrocanonical **E**nsembles	Tổ hợp thống kê vi chính tắc
NDR	Heat capacity	**N**hiệt **D**ung **R**iêng
MĐM	Nuclear level density	**M**ật **Đ**ộ **M**ức

SMMC	**S**hell **M**odel **M**onte **C**arlo	Phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp

DANH MỤC CÁC BẢNG

Bảng 3.1. Số liệu đầu vào trong tính toán MĐM theo mô hình BSFG cho các hạt nhân 33

Bảng 3.2. Bổ sung số liệu trong RIP-3 để so sánh 34

Bảng 3.3. Bảng số liệu tính từ đề tài của luận văn 35

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ

Hình 3.1. So sánh số liệu mật độ mức thực nghiệm của năm 2003/2008 và năm 2017 với số liệu được tính từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0 - 12 MeV cho các hạt nhân ^{56}Fe (a), ^{57}Fe (b).. 36

Hình 3.2. So sánh mật độ mức BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0-100 MeV cho các hạt nhân ^{56}Fe(a), ^{57}Fe(b) 38

Hình 3.3. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân ^{56}Fe. 38

Hình 3.4. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân ^{57}Fe. 39

Hình 3.5. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 trong nghiên cứu hiện tại (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe. 40

Hình 3.6. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm năm 2008 và được trích từ nghiên cứu của Algin cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe. 41

Hình 3.7. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2017(1) (This work) cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe. 42

Hình 3.8. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-12 MeV thu được từ mô hình BSFG và so sánh với số liệu thực nghiệm năm 2014 cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d). 43

Hình 3.9. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG và so sánh với số liệu thực nghiệm năm 2014 cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d). 44

Hình 3.10. Nhiệt dung riêng theo hàm của nhiệt độ thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d)..... 45

Hình 3.11. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0 – 12 MeV cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b)..... 46

Hình 3.12. Mật độ mức ρ theo hàm năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0 – 100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b)..... 47

Hình 3.13. Nhiệt dung riêng C theo hàm nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b). 48

Hình 3.14. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0-12 MeV cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d). 49

Hình 3.15. Mật độ mức ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d)..... 50

Hình 3.16. Nhiệt dung riêng C theo hàm nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d). 51

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN

LỜI CẢM ƠN

DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

DANH MỤC CÁC BẢNG

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ

MỞ ĐẦU 3

CHƯƠNG 1. GIỚI THIỆU TỔNG QUAN CÁC MÔ HÌNH LÝ THUYẾT MÔ TẢ MẬT ĐỘ MỨC HẠT NHÂN KÍCH THÍCH 6

1.1. CÁC MÔ HÌNH VI MÔ 6

1.1.1. Mô hình Hartree-Fock kết hợp với lý thuyết siêu dẫn của Bardeen – Cooper – Schrieffer (HFBCS) 6

1.1.2. Mô hình Hartree-Fock-Bogoliubov tổ hợp (HFBC) 8

1.1.3. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp (SMMC) 11

1.2. CÁC MÔ HÌNH HIỆN TƯỢNG LUẬN 13

1.2.1. Mô hình nhiệt độ không đổi 13

1.2.2. Mô hình khí Fermi 14

1.2.3. Mô hình Gilbert-Cameron kết hợp 17

1.2.4. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược 18

CHƯƠNG 2. PHƯƠNG PHÁP KHẢO SÁT SỰ CHUYỂN PHA KẾT CẶP CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH 21

2.1. NHIỆT DUNG RIÊNG CỦA HẠT NHÂN KÍCH THÍCH 22

2.2. LƯU ĐỒ THUẬT TOÁN KHẢO SÁT NHIỆT DUNG RIÊNG THEO MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỂN NGƯỢC 23

2.3 CHƯƠNG TRÌNH LẬP TRÌNH TÍNH TOÁN 29

CHƯƠNG 3. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ TÍNH TOÁN VÀ THẢO LUẬN 33

3.1. CÁC SỐ LIỆU ĐẦU VÀO CHO TÍNH TOÁN 33

3.2. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ CÁC NHIỆT DUNG RIÊNG 36

3.2.1. Hạt nhân Fe 36

3.2.2. Hạt nhân Pd 42
3.2.3. Hạt nhân Cd 46
3.2.4. Hạt nhân Sn 49
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ 52
DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ 54
TÀI LIỆU THAM KHẢO 55

MỞ ĐẦU

Nhiệt dung riêng là đại lượng đặc trưng cho sự biến thiên của năng lượng E theo nhiệt độ T, chứa thông tin về sự chuyển pha từ pha có sự kết đôi mạnh sang pha có sự kết đôi yếu với hình chữ S của đường nhiệt dung riêng [1, 2].

Nhiệt dung riêng của các hệ Fermi hữu hạn, chẳng hạn như hạt nhân đã thu hút được nhiều sự chú ý do mối liên hệ giữa hình dạng của nó và sự tắt dần của các tương quan kết cặp [3, 4].

Dữ liệu thực nghiệm hoặc bán thực nghiệm và số liệu của nhiệt dung riêng rất quan trọng để kiểm tra các mô hình lí thuyết khác nhau về hạt nhân bao gồm mô hình vỏ Monte-Carlo [5] và nhiệt độ hữu hạn Hartree Fock-Bogoliubov [6],v.v. Trong các hệ vĩ mô như ngôi sao neutron, tương quan kết cặp đột ngột biến mất ở nhiệt độ tới hạn T_C, dẫn đến sự gián đoạn của nhiệt dung riêng [7]. Tuy nhiên, trong các hệ hạt nhân hữu hạn, các tương quan kết cặp không biến mất ở T_C mà giảm dần khi tăng $T>T_C$, do dao động nhiệt và thống kê trong trường trung bình [8]. Hiện tượng này có thể được biểu thị là sự thay đổi đột ngột về độ dốc của đường cong nhiệt dung riêng, thường được gọi là hình chữ S của nhiệt dung riêng [2, 4, 6, 9, 10].

Thực tế, nhiệt dung riêng của một hạt nhân cố định là một đại lượng nhiệt động học có thể được xác định trong cả hai phương pháp tập hợp chính tắc (CE) và tập hợp vi chính tắc (MCE), với điều kiện là phải có số liệu hạt nhân thực nghiệm của mật độ mức (MĐM) hạt nhân, trong một số vùng năng lượng kích thích. Phương pháp MCE dường như không phù hợp cho các hệ có số lượng hữu hạn các hạt vì nó thường cung cấp các giá trị phi vật lý, chẳng hạn như nhiệt độ âm (xem ví dụ Hình 8 của tài liệu tham khảo [11] và Hình 9 của tài liệu tham khảo [12]), khi được áp dụng để tính toán các đại lượng nhiệt động học của hạt nhân. Điều này không bao giờ xảy ra trong phương pháp (CE). Do đó tập hợp chính tắc CE là một cách tiếp cận hợp lý hơn để nghiên cứu các đại lượng nhiệt động học của hật nhân.

Việc tính toán nhiệt dung riêng thông qua phương pháp CE vẫn chưa hoàn hảo vì nó đòi hỏi phải biết MĐM hạt nhân thực nghiệm trên toàn bộ dải

năng lượng kích thích, cụ thể là từ 0 đến vài trăm MeV. Tuy nhiên, dữ liệu MĐM hạt nhân thực nghiệm chỉ có sẵn ở vùng năng lượng kích thích thấp, là vùng năng lượng dưới năng lượng liên kết neutron B_n, do giới hạn của công nghệ thực nghiệm. Để khắc phục nhược điểm này, người ta phải sử dụng MĐM hạt nhân lý thuyết ở vùng năng lượng thiếu dữ liệu MĐM hạt nhân thực nghiệm. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG) là mô hình hiện tượng luận được sử dụng rộng rãi để xác định mật độ mức hạt nhân [11, 13]. Việc làm khớp dữ liệu MĐM xác định từ công thức BSFG với dữ liệu MĐM hạt nhân thực nghiệm giúp đưa ra các tham số tự do đáng tin cậy.

Bên cạnh đó, khi dữ liệu MĐM hạt nhân thực nghiệm được cập nhật sẽ dẫn đến thay đổi giá trị của các tham số tự do trong mô hình mô tả mật độ mức BSFG. Điều này làm thay đổi giá trị nhiệt dung riêng được tính toán. Ví dụ, NDR của các đồng vị $^{93-98}$Mo đã được nghiên cứu lại bằng cách sử dụng phương pháp mới được cập nhật dữ liệu MĐM khuyến nghị của các hạt nhân $^{93-98}$Mo được thu thập vào năm 2013 [13]. Người ta nhận thấy rằng bản cập nhật nhiệt dung riêng khác biệt đáng kể so với nhiệt dung riêng được tính toán bằng dữ liệu MĐM hạt nhân cũ được đo vào năm 2003 và 2006. Kết quả là, tài liệu [13] khuyến nghị rằng: để có được giá trị nhiệt dung riêng chính xác và mô tả tốt quá trình chuyển pha kết cặp trong các hạt nhân bị kích thích, chúng ta nên sử dụng dữ liệu của MĐM thực nghiệm hạt nhân được cập nhật mới nhất và các giá trị MĐM được làm khớp từ mô hình của BSFG tốt nhất trong vùng năng lượng kích thích có sẵn dữ liệu thực nghiệm của MĐM.

Vào năm 2003 và 2012, nhóm Oslo đã thực hiện các thí nghiệm sử dụng phản ứng (^{3}He, ^{3}He') và suy ra các giá trị MĐM hạt nhân thực nghiệm trong vùng năng lượng kích thích bên dưới B_n cho $^{161-162}$Dy [14] và hạt nhân $^{163-164}$Dy [15]. Bằng cách sử dụng mô hình BSFG kết hợp với các dữ liệu được đo lường này, họ đã kiểm tra các đại lượng nhiệt động học bao gồm nhiệt dung riêng của các đồng vị $^{161-164}$Dy. Tuy nhiên, họ đã quyết định sử dụng phiên bản tham số không phụ thuộc vào năng lượng của mô hình BSFG, không tính đến sự giảm dần của các hiệu ứng vỏ ở vùng năng lượng kích thích cao. Nhóm Oslo cũng đã tiến hành xác định MĐM thực nghiệm cho hạt nhân $^{56-57}$Fe vào các năm

2003, 2008 và 2017 [16–18]. Trong bài báo năm 2008, nhiệt dung riêng cũng đã được khảo sát từ mô hình BSFG với tham số MĐM không phụ thuộc năng lượng [16].

Nhiều công trình gần đây sử dụng mô hình BSFG đã khuyến nghị sử dụng phiên bản BSFG với các tham số phụ thuộc vào năng lượng cho vùng năng lượng kích thích cao vì nó bao gồm sự thay đổi của hiệu ứng vỏ với việc tăng năng lượng kích thích [19].

Ngoài ra, trong mô hình BSFG với tham số MĐM không phụ thuộc năng lượng có bổ sung tham số η. Tham số này được giới thiệu là để thay đổi kích thước của MĐM hạt nhân BSFG phù hợp với khoảng cách mức trung bình thực nghiệm của cộng hưởng neutron (dữ liệu D_0). Các tham số này kém tin cậy hơn so với các tham số thu được từ việc làm khớp MĐM từ mô hình lý thuyết với dữ liệu MĐM thực nghiệm cụ thể của từng đồng vị hạt nhân.

Mục tiêu của đề tài này là tiến hành khảo sát nhiệt dung riêng của bốn hạt nhân kích thích có khối lượng từ nhẹ đến trung bình vì bốn hạt nhân Fe-Pd-Cd và Sn có thể lấy đầy đủ số liệu thực nghiệm được từ RIPL-3 và trong Level density (còn các hạt nhân nhẹ và trung bình khác các số liệu vẫn chưa có đủ và chưa đáng tin cậy nên tác không đưa vào đề tài này), từ đó mô tả chính xác về sự chuyển pha kết cặp trong các hạt nhân. Tiếp đó, chúng tôi so sánh kết quả thu được với kết quả lý thuyết khác và 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 kết quả nghiên cứu về sự chuyển pha kết cặp của một số hạt nhân kích thích.

Luận văn gồm có phần mở đầu, ba chương chính và chương kết luận - kiến nghị. Trong nội dung các chương, chúng tôi sẽ lần lượt giới thiệu tổng quan các mô hình lý thuyết hiện tượng luận và vi mô mô tả mật độ mức của các hạt nhân kích thích; phương pháp khảo sát sự chuyển pha kết cặp của các hạt nhân kích thích và phân tích kết quả nghiên cứu về sự chuyển pha kết cặp của một số hạt nhân kích thích.

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

Về lý thuyết, mô hình để mô tả MĐM được chia thành hai loại gồm: mô hình hiện tượng luận [20-23] và mô hình vi mô [24–32]. Mỗi mô hình sẽ có những nhược điểm và ưu điểm riêng. Sau đây, chúng tôi sẽ lần lượt trình bày các mô hình phổ biến được sử dụng để mô tả MĐM hạt nhân [33,60].

1.1. CÁC MÔ HÌNH VI MÔ

Ở các mô hình vi mô, các hiệu ứng kết cặp, hiệu ứng dao động và hiệu ứng lớp được tính đến và được đưa vào một cách vi mô hoặc bán vi mô. Vì vậy các phương pháp này cho phép tính toán MĐM ở năng lượng kích thích bất kì. Tuy nhiên các mô hình vi mô có nhược điểm lớn là tính toán rất phức tạp và tốn rất nhiều thời gian khi tính toán cho các hạt nhân nặng. Trong phạm vi luận văn này, chúng tôi xin trình bày các mô hình vi mô gồm: mô hình Hartree-Fock kết hợp với lý thuyết siêu dẫn của Bardeen-Cooper-Schrieffer, mô hình Hartree-Fock-Bogoliubov tổ hợp và phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp.

1.1.1. Mô hình Hartree-Fock kết hợp với lý thuyết siêu dẫn của Bardeen – Cooper – Schrieffer (HFBCS)

Như chúng ta đã biết, phương pháp Hartree-Fock (HF) được dùng để nghiên cứu vi mô thế trường trung bình của hệ trong hạt nhân, còn lý thuyết siêu dẫn của Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) được dùng để tính toán các hiệu ứng kết cặp giữa các nucleon trong trường trung bình. Khi kết hợp lý thuyết siêu dẫn (BCS) và phương pháp (HF) tạo nên mô hình HFBCS, đây là mô hình tương tác mạnh giữa các nucleon thể hiện thông qua thế trường trung bình được tính toán từ vi mô của các bậc tự do nucleon [33].

Ở các mô hình vi mô, cấu trúc hạt nhân trong một trạng thái Vật lý được mô tả thông qua việc giải phương trình Hamiltonian của hệ, biểu diễn phương trình này trong lượng tử hóa thứ cấp gồm hai phần: phần mô tả trường trung bình H_0 và phần mô tả kết cặp H_{pair} [34] có dạng:

$$H = H_0 + H_{pair}$$

$$= \sum_{jm,m>0} \varepsilon_j \left(a_{jm}^{\dagger} a_{jm} + \tilde{a}_{jm}^{\dagger} \tilde{a}_{jm}\right) - G \sum_{jj'} \sum_{mm'>0} a_{jm}^{\dagger} \tilde{a}_{jm}^{\dagger} \tilde{a}_{j'm} a_{j'm} \qquad (1.1)$$

với $a_{jm}^{\dagger}(a_{jm})$ là toán tử sinh (hủy) của một nucleon có moment góc *j*, hình chiếu moment góc trên trục đối xứng *m* và năng lượng ε_j. $a_{jm}^{\dagger}\left(a_{jm}\right)$ cũng là các toán tử sinh (hủy) một nucleon với moment góc *j* nhưng hình chiếu *–m*. Hệ số *G* đặc trưng cho cường độ tương tác cặp và các tương tác cặp này thường xét cho một cặp hai nucleon cùng loại.

Trong mô hình vi mô HFBCS, MĐM tại spin *J* được tính theo mật độ trạng thái cho hạt nhân cầu có dạng [29]:

$$\rho_{sph}(E^*, J) = \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-\frac{J(J+1)}{(2\sigma^2)}} \omega(E^*), \qquad (1.2)$$

trong đó hệ số cắt spin (spin cut-off parameter) kí hiệu là σ và có giá trị tính từ công thức [29, 35]:

$$\sigma^2(\beta) = \frac{1}{2} \sum_j m_j^2 sech^2 \frac{1}{2} \beta E_j. \qquad (1.3)$$

MĐM của hạt nhân biến dạng được tính thông qua biểu thức [29]:

$$\rho_{def}(E^*, J) = \frac{1}{2} \sum_{K=-J}^{J} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\left[J(J+1)/\left(2\sigma_{\perp}^2\right) + K^2\left(1/\sigma^2 - 1/\sigma_{\perp}^2\right)/2\right]} \omega(E^*), \qquad (1.4)$$

với $\sigma_{\perp}$ gọi là hệ số cắt spin vuông góc. Lúc này MĐM hạt nhân tổng cộng được tính theo công thức [36]:

$$\rho(E^*) = \sum_J \rho(E^*, J). \qquad (1.5)$$

Theo lý thuyết HFBCS, thì giá trị MĐM thu được từ công thức trên sẽ được chuẩn hóa với số liệu thực nghiệm thông qua δ và α như sau [29]:

$$E^*_{eff}(T) = E^*(T) - \delta, \tag{1.6}$$

$$S_{eff}(T) = \alpha S(T), \tag{1.7}$$

trong đó đại lượng δ làm khớp số tích lũy các mức năng lượng của lý thuyết $N(E^*)$ với thực nghiệm trong vùng năng lượng thấp, α có giá trị sao cho số liệu về khoảng cách mức trung bình lý thuyết tại năng lượng liên kết neutron $D_{theory}(B_n)$ trùng với số liệu thực nghiệm tương ứng.

Mô hình vi mô HFBCS đã được sử dụng tính toán MĐM cho khoảng 8000 hạt nhân. Mặc dù HFBCS là mô hình vi mô được sử dụng rộng rãi, nó vẫn dùng các thông số làm khớp như trình bày ở trên để thu được các giá trị MĐM lý thuyết phù hợp với số liệu thực nghiệm. Bên cạnh đó, phương pháp HFBCS chưa tính đến các thăng giáng nhiệt xuất hiện do sự hữu hạn của hệ hạt nhân nguyên tử. Do đó mô hình này vẫn chưa hoàn toàn vi mô và còn tồn tại một số hạn chế [37, 38].

1.1.2. Mô hình Hartree-Fock-Bogoliubov tổ hợp (HFBC)

Một mô hình vi mô khác đã được đề xuất bởi Goriely và các cộng sự có tên là Hartree-Fock-Bogoliubov tổ hợp (HFBC). Nhằm khắc phục những nhược điểm của mô hình HFBCS trong việc mô tả hiệu ứng kết cặp. Mô hình này vẫn dựa trên phương pháp của Hartree-Fock nghiên cứu vi mô trong thế trường trung bình của hệ hạt nhân. Điểm mạnh của mô hình là hiệu ứng kết cặp đã được mô tả một cách tốt hơn dựa trên lý thuyết giả hạt và kết hợp với phương pháp tổ hợp.

Ở phương pháp HFBC này, các toán tử sinh và hủy của Bogoliubov vẫn xác định dựa trên các toán tử sinh hạt $a^\dagger_{jm}$ và hủy hạt a_{jm} trên quỹ đạo thứ *j* [39]:

$$\alpha^\dagger_{jm} = u_{jm}a^\dagger_{jm} - v_{jm}\tilde{a}_{jm}, \alpha_{jm} = u_{jm}a_{jm} - v_{jm}\tilde{a}^\dagger_{jm}, \tag{1.8}$$

$$\tilde{\alpha}^\dagger_{jm} = u_{jm}\tilde{a}^\dagger_{jm} + v_{jm}a_{jm}, \tilde{\alpha}_{jm} = u_{jm}\tilde{a}_{jm} + v_{jm}\tilde{a}^\dagger_{jm}, \tag{1.9}$$

từ các toán tử sinh hạt và hủy hạt trên ta có kí hiệu ~ chỉ toán tử nghịch đảo thời gian, còn *m* là hình chiếu spin trạng thái *j* lên trục đối xứng *z*. Từ hai biểu

thức (1.20) và (1.21), thì toán tử $\tilde{\alpha}_{jm}^{\dagger}$ là sự kết hợp đồng bộ giữa một trạng thái $|jm\rangle$ có biên độ u_{jm} với một trạng thái $|j-m\rangle$ có biên độ v_{jm}, nên ta gọi toán tử này là toán tử sinh giả hạt, còn toán tử α_{jm} là toán tử hủy giả hạt [39].

Các trạng thái đơn hạt và lỗ được lần lượt định nghĩa [40-44]:

$$\begin{cases} \varepsilon_i^1 = \varepsilon_{Z+1}^{\pi} - \varepsilon_Z^{\pi} \\ m_i^1 = m_{Z+i}^{\pi} \\ p_i^1 = p_{Z+i}^{\pi} \\ \Delta_i^1 = \Delta_{Z+i}^{\pi} \end{cases}, i = 1, \dots, I_1, \tag{1.10}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_i^2 = \varepsilon_Z^{\pi} - \varepsilon_{Z-i+1}^{\pi} \\ m_i^2 = -m_{Z-i+1}^{\pi} \\ p_i^2 = p_{Z-i+1}^{\pi} \\ \Delta_i^2 = \Delta_{Z-i+1}^{\pi} \end{cases}, i = 1, \dots, I_2, \tag{1.11}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_i^3 = \varepsilon_{N+i}^{v} - \varepsilon_N^{v} \\ m_i^3 = m_{N+i}^{v} \\ p_i^3 = p_{N+i}^{v} \\ \Delta_i^1 = \Delta_{Z+i}^{\pi} \end{cases}, i = 1, \dots, I_3, \tag{1.12}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_i^4 = \varepsilon_N^{v} - \varepsilon_{N-i+1}^{v} \\ m_i^4 = -m_{N-i+1}^{v} \\ p_i^4 = p_{N-i+1}^{v} \\ \Delta_i^4 = \Delta_{N-i+1}^{v} \end{cases}, i = 1, \dots, I_4, \tag{1.13}$$

trình bày lần lượt cho trạng thái của các hạt proton, trạng thái lỗ của proton, trạng thái hạt và trạng thái lỗ của hạt neutron. Với các kí hiệu $\varepsilon, m, p, \Delta$ là năng lượng các mức kích thích, hình chiếu moment góc, chẵn lẻ và khe năng lượng kết cặp. Còn các chỉ số I_1,$I_{2,}I_3, I_4$ là số các trạng thái rời rạc cho từng loại hạt-lỗ. Trong các biểu thức trên thì dấu "-" biểu thị hình chiếu moment góc của các trạng thái lỗ luôn cùng phương nhưng ngược chiều với hình chiếu moment góc của trạng thái tạo ra trạng thái lỗ đó. Những trạng thái này được sử dụng để tính mật độ trạng thái hạt-lỗ, mật độ trạng thái tổng cộng và xây dựng hàm phân chia [45]. Vậy MĐM tính cho các hạt nhân có hình dạng cầu dựa trên công thức có dạng sau [32]:

$$\rho_{sph}(E^*,J,P) = \omega(E^*,M=J,P) - \omega(E^*,M=J+1,P), \tag{1.14}$$

trong đó ω là mật độ trạng thái tổng cộng. Còn MĐM đối với hạt nhân biến dạng có dạng [32]:

$$\begin{aligned}\rho_{def}(E^*,J,P) = \frac{1}{2}\Bigg[\sum\nolimits_{M=-J,M\neq 0}^{J} \omega\left(E^* - E_{rot}^{J,M}, M, P\right)\Bigg] \\ -\delta_{(J,even)}\delta_{(P=+)}\,\omega\left(E^* - E_{rot}^{J,0}, 0, P\right) \\ +\delta_{(J,odd)}\delta_{(P=-)}\,\omega\left(E^* - E_{rot}^{J,0}, 0, P\right),\end{aligned} \tag{1.15}$$

với $\delta_{(x)}$ nhận giá trị 1 nếu x thỏa mãn điều kiện *J* là chẵn (lẻ) hoặc *P* là dương (âm) và nhận giá trị 0 cho các trường hợp khác. Còn $E_{rot}^{J,M}$ là năng lượng được sinh ra do chuyển động quay của hạt nhân quanh trục vuông góc với trục đối xứng.

Khi có sự kết hợp với các hiệu ứng bên ngoài thì MĐM toàn phần của hạt nhân được tính theo công thức sau [36]:

$$\rho(E^*) = \sum_{J,P} \rho(E^*,J,P). \tag{1.16}$$

Tuy mô hình HFBC mô tả tốt hiệu ứng kết cặp hơn so với HFBCS, nó vẫn còn nhược điểm là bị vi phạm nguyên lý bảo toàn số hạt như đã chỉ ra trong nhiều nghiên cứu [21, 39, 46-48]. Mặt khác, với hàm phân chia tính theo phương pháp tổ hợp chỉ đóng góp cho các trạng thái của một hạt - một lỗ mà không xét đến các trạng thái kích thích bậc cao hơn, những trạng thái này đóng vai trò vô cùng quan trọng khi năng lượng kích thích hạt nhân có giá trị lớn. Từ đó để tạo sự phù hợp với các kết quả thực nghiệm, người ta đã thực hiện thêm yếu tố mới là chuẩn hóa kết quả tính toán lý thuyết với số liệu thực nghiệm thông qua hai hệ số làm khớp. Vì vậy mô hình HFBC cũng không hoàn toàn vi mô.

1.1.3. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp (SMMC)

So với hai mô hình HFBCS và HFBC thì phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp (SMMC) đã thành công trong việc mô tả MĐM thực nghiệm của một loạt các hạt nhân có khối lượng nhẹ tới trung bình như trong tài liệu tham khảo [25-28, 49-51]. Tuy nhiên phương pháp SMMC này vẫn có hai hạn chế cơ bản. Hạn chế đầu tiên là thời gian tính toán khá lớn, đặc biệt đối với các hạt nhân nặng. Hạn chế thứ hai là vẫn sử dụng một hệ số σ_c để làm khớp MĐM lý thuyết với số liệu thực nghiệm.

Ở phương pháp này, Hamiltonian sử dụng trong mẫu lớp có dạng [49, 52]:

$$H = \sum_j \varepsilon_j \hat{\rho}_j + \frac{1}{2}\sum_j v_j \hat{\rho}_j^2 \ , \tag{1.17}$$

trong đó ε_j gọi là năng lượng đơn hạt, v_j là đại lượng đặc trưng cho tương tác, $\hat{\rho}_j$ là toán tử một hạt, $\hat{\rho}_j$ là tổ hợp tuyến tính của toán tử $\hat{\rho}_{jj'} = a_j^{\dagger}.a_{j'}$.

Khi $T \neq 0$ ở nhiệt độ hữu hạn, các tính chất của hệ cũng được mô tả bằng hàm phân chia có dạng [49]:

$$Z = Tr\left(e^{-\beta H}\right), \tag{1.18}$$

với giá trị $\beta = 1/T$. Nếu khoảng $(0, \beta)$ được chia thành N_t đoạn nhỏ, mỗi đoạn có độ lớn $\Delta\beta$ thì $e^{-\beta H} = \left(e^{-\Delta\beta H}\right)^{N_t}$ nên [49, 52]:

$$e^{-\Delta\beta H} \approx \prod_j e^{-\Delta\beta\varepsilon_j\hat{p}_j} \prod_j e^{-\frac{1}{2}\Delta\beta v_j\hat{\rho}_j^2}, \tag{1.19}$$

Khi sử dụng biến phụ $\sigma_j(\tau_n)$ là trường ngoài phụ thuộc vào thời gian ảo τ_n với $\tau_n = n\Delta\beta$ ($0 \leq \tau \leq \beta$), ta có [49, 52]:

$$e^{-\frac{1}{2}\Delta\beta v_j\hat{\rho}_j^2} = \sqrt{\frac{\Delta\beta|v_j|}{2\pi}}\int d\sigma_j e^{-\frac{1}{2}\Delta\beta|v_j|\sigma_j^2} e^{-\Delta\beta|v_j|s_j\sigma_j\hat{p}_j}, \quad (1.20)$$

với $s_j = \pm 1$ cho $v_j < 0$ và $s_j = \pm i$ cho $v_j > 0$.

Khi đó giá trị trung bình của một đại lượng quan sát được có thể tính dựa vào biểu thức sau [25-28, 49, 50]:

$$\langle O\rangle = \frac{Tr\left(Oe^{-\beta H}\right)}{Tr(e^{-\beta H})} = \frac{\int D[\sigma]W_\sigma\Phi_\sigma\langle O\rangle_\sigma}{\int D[\sigma]W_\sigma\Phi_\sigma}, \quad (1.21)$$

trong đó

$$W_\sigma = G_\sigma|TrU_\sigma|, \quad (1.22)$$

$$\langle O\rangle_\sigma = Tr(OU_\sigma)/TrU_\sigma, \quad (1.23)$$

$$\Phi_\sigma = TrU_\sigma/|TrU_\sigma|, \quad (1.24)$$

Kí hiệu Monte Carlo được biểu diễn trong biểu thức (1.35) thông qua tập hợp U_σ của các nucleon không tương tác tính từ mẫu lớp và từ đó phương pháp trên có tên là phương pháp mô phỏng Monte Carlo dựa trên mẫu lớp (SMMC). Tại nhiệt độ hay năng lượng kích thích khác không trong tính chất hạt nhân được mô tả thông qua việc sử dụng các lý thuyết về thống kê tập hợp chính tắc (CE). Khi đó năng lượng nhiệt tại nghịch đảo nhiệt độ β trùng với giá trị trung bình của Hamiltonian $E(\beta) = \langle H\rangle$. Với thông số $T = 1/\beta$ được đưa vào thông qua hàm phân chia ở dạng (1.29). Sử dụng tích phân để lấy hàm phân chia này của $E(\beta)$ [51]:

$$\ln[Z(\beta)/Z(0)] = -\int_0^\beta d\beta' E(\beta'), \quad (1.25)$$

với *Z(0) = Tr (1)* là tổng số các trạng thái trong không gian mẫu. Mật độ trạng thái tại năng lượng kích thích $\omega(E^*)$ là biến đổi Laplace ngược của $Z(\beta)$, và được tính gần đúng theo công thức [51]:

$$\omega(E^*) \approx \left(-2\pi \frac{dE^*}{d\beta}\right)^{-\frac{1}{2}} e^S, \tag{1.26}$$

trong đó $E^* = E(\beta) - E(\beta = \infty)$ là năng lượng kích thích, S là entropy của hệ với $S = \beta E + \ln Z(\beta)$.

Tại năng lượng kích thích thì MĐM cũng được tính thông qua mật độ trạng thái với công thức:

$$\rho(E^*) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_c} \omega(E^*), \tag{1.27}$$

trong đó σ_c gọi là hệ số cắt spin, giá trị hệ số này được xác định thông qua việc làm khớp MĐM thu được từ (1.39) cùng với số liệu thực nghiệm [26].

Từ nội dung trên, ta thấy được cả ba phương pháp HFBCS, HFBC và SMMC đều chưa đưa ra được những dự đoán có kết quả cao đáng tin cậy đối với MĐM của các hạt nhân mà thực nghiệm chưa xác định được.

1.2. CÁC MÔ HÌNH HIỆN TƯỢNG LUẬN

Đối với các mô hình hiện tượng luận dùng để mô tả MĐM hạt nhân, việc thu được các kết quả tốt phụ thuộc rất nhiều vào độ chính xác của số liệu thực nghiệm khi sử dụng để tìm các giá trị của tham số làm khớp. Do đó khi các số liệu thực nghiệm không có hoặc không tốt thì việc tính toán và kết quả của chúng sẽ không khả quan và khó thực hiện hoặc không thể thực hiện được. Tuy nhiên các mô hình hiện tượng luận có ưu điểm là việc tính toán dễ dàng và thực hiện cũng đơn giản hơn các mô hình vi mô nên chúng vẫn được dùng trong nghiên cứu mô tả MĐM của các hạt nhân. Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày một số mô hình hiện tượng luận phổ biến: mô hình nhiệt độ không đổi, mô hình khí Fermi, mô hình Gilbert-Cameron kết hợp, mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược.

1.2.1. Mô hình nhiệt độ không đổi

Mô hình hiện tượng luận đầu tiên chúng tôi trình bày là mẫu mô hình nhiệt độ không đổi. Trong mô hình này, nhiệt độ hạt nhân trong vùng năng

lượng kích thích thấp dưới năng lượng tách neutron (B_n) được xem như không đổi. Một số nghiên cứu đã chỉ ra rằng mô hình này có thể áp dụng để mô tả tốt MĐM hạt nhân trong vùng năng lượng kích thích thấp, lên tới vùng năng lượng kích thích có giá trị khoảng 20 MeV [33, 53].

Ở mô hình nhiệt độ không đổi, số tích lũy các mức năng lượng N đều phụ thuộc vào năng lượng kích thích E nên chúng được mô tả bằng một hàm e mũ có dạng [36]:

$$N(E) = \exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right). \quad (1.28)$$

Trong công thức trên, E_0 là đại lượng đặc trưng cho năng lượng hạt nhân tại $T = 0$, T đặc trưng cho nhiệt độ của hạt nhân. Hai đại lượng T và E_0 đều là tham số, giá trị của chúng được xác định bằng cách làm khớp giá trị lý thuyết tìm được với số liệu thực nghiệm. Trong mô hình này, đại lượng đặc trưng cho nhiệt độ của hạt nhân T được xem là không đổi trong vùng năng lượng kích thích thấp. Biểu thức tính MĐM tại năng lượng kích thích E có dạng [36]:

$$\rho_{CT}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{1}{T}\exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right). \quad (1.29)$$

Bài báo công bố gần đây [54] đã khẳng định lại kết quả trên nhưng các kết quả này vẫn chỉ đúng cho các hạt nhân nhẹ và trung bình. Đối với các hạt nhân nặng, mô hình nhiệt độ không đổi vẫn chỉ giới hạn trong vùng năng lượng kích thích dưới B_n [54].

1.2.2. Mô hình khí Fermi

Để mô tả MĐM hạt nhân người ta sử dụng đến mô hình hiện tượng luận đầu tiên đó là mô hình khí Fermi (Fermi-gas model) [55]. Các nucleon trong mẫu mô hình này xem như không tương tác với nhau nhưng liên kết được với nhau bởi một thế đơn hạt (single–particle potential), các nucleon chuyển động trong một giếng thế vuông cạnh là b có dạng: [56]:

$$\begin{cases} U_{s.p}(0 < x < b) = 0 \\ U_{s.p}(x = 0) \quad\quad = \infty \\ U_{s.p}(x = b) \quad\quad = \infty \end{cases}, \tag{1.30}$$

với $U_{s.p}$ là thế đơn hạt, x là tọa độ. Thế đơn hạt này áp dụng tương tự cho các tọa độ y và z.

Giả thiết rằng trong mẫu mô hình này các mức năng lượng đơn hạt là cách đều nhau và chưa tính đến thành phần tương tác spin – quỹ đạo. Nhận định được rằng sơ đồ các mức năng lượng trong mô hình khí Fermi khác xa so với phổ năng lượng xác định từ thực nghiệm. Mô hình khí Fermi là một dạng đơn giản nhất của mô hình đơn hạt độc lập. MĐM tại năng lượng kích thích *E* trong mẫu mô hình này có dạng [36, 55, 57]:

$$\rho(E) \propto \exp\left(2\sqrt{aE}\right), \tag{1.31}$$

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

Khi tính toán MĐM, có hai loại số liệu thực nghiệm thường được sử dụng là số tích lũy các mức năng lượng 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 ở các dạng thế đơn giản không tính đến một số đặc trưng vi mô như hiệu ứng kết cặp, hiệu chỉnh lớp,. . . Khi đưa các hiệu ứng này 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. Hai tham số được sử dụng và khá phổ biến 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 đến hiệu ứng kết cặp). Năng lượng kết cặp của các nucleon đưa vào biểu thức tính MĐM thông qua đại lượng năng lượng kích thích hiệu dụng *U* có dạng [36]:

$$U = E - \Delta, \tag{1.32}$$

$$\Delta = \begin{cases} \delta_N + \delta_Z(a) \\ \delta_Z(b) \\ \delta_N(c) \\ 0(d) \end{cases}, \quad (1.33)$$

với Δ là năng lượng kết cặp, δ_N và δ_Z lần lượt là năng lượng kết cặp của neutron và proton (giá trị của các tham số được tính đơn giản dựa trên sự chênh lệch khối lượng thực nghiệm giữa hạt nhân chẵn và lẻ). Trong công thức trên, 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.

Với biểu thức tính MĐM cho các hạt nhân không biến dạng, hiệu chỉnh lớp được đưa vào thông qua tham số mật độ mức a dưới dạng biểu thức đơn giản có dạng [36]:

$$\frac{a}{A} = 0{,}00917(S_N + S_Z) + 0{,}142\,, \quad (1.34)$$

còn với các hạt nhân biến dạng thì biểu thức có dạng

$$\frac{a}{A} = 0{,}00917(S_N + S_Z) + 0{,}120, \quad (1.35)$$

trong đó S_N và S_Z lần lượt là các đại lượng đặc trưng cho hiệu chỉnh lớp của netron và proton, A là tổng số các nucleon trong hạt nhân. Biểu thức tính MĐM tại năng lượng E có tính đến các hiệu ứng lớp và kết cặp có dạng [36]:

$$\rho_{FG}(E) = \frac{1}{12\sqrt{2}\sigma}\frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{1/4}(U)^{5/4}}, \quad (1.36)$$

với σ là hệ số cắt spin, tính từ công thức:

$$\sigma^2 = 0{,}0194A^{5/3}\sqrt{\frac{U}{a}}. \quad (1.37)$$

Các giá trị của tham số a, S_N và S_Z đều được hiệu chỉnh sao cho giá trị MĐM tính theo công thức trên khớp với số liệu thực nghiệm. Dữ liệu thực

nghiệm dùng để làm khớp trong vùng này là khoảng cách mức trung bình tại năng lượng kích thích bằng với năng lượng liên kết của neutron [36,58,59]. Nhiệt độ hạt nhân *T* trong vùng năng lượng kích thích cao có sự phụ thuộc vào năng lượng kích thích theo biểu thức:

$$U = aT^2. \tag{1.38}$$

1.2.3. Mô hình Gilbert-Cameron kết hợp

Trong vùng năng lượng kích thích thấp (dưới B_n) chỉ mô tả tốt MĐM ở mô hình nhiệt độ không đổi, còn mô hình khí Fermi chỉ mô tả tốt MĐM trong vùng năng lượng kích thích cao (trên B_n). Từ đó, xuất hiện một mô hình hiện tượng luận mới gọi là mô hìnhh Gilbert-Cameron kết hợp do Gilbert và Cameron [36] đề xuất dựa trên ý tưởng kết hợp hai mô hình khí Fermi và mô hình nhiệt độ không đổi, hai mô hình này khi kết hợp có thể mô tả được MĐM trong toàn dải năng lượng. Về sau này mô hình có tên gọi là mô hình Gilbert-Cameron kết hợp. Theo mô hình Gilbert-Cameron kết hợp, mô hình khí Fermi (1.36) sẽ được sử dụng để mô tả MĐM khi năng lượng kích thích lớn hơn giá trị năng lượng E_x được ước lượng như sau [36]:

$$E_x = 2{,}5 + \frac{150}{A} + \delta_N + \delta_Z \tag{1.39}$$

Nếu năng lượng kích thích có giá trị nhỏ hơn giá trị năng lượng E_x thì MĐM được tính theo mô hình nhiệt độ không đổi. Khi các thông số của hai mô hình trên có sự kết hợp dựa trên điều kiện liên tục của MĐM và đạo hàm bậc nhất của nó tại năng lượng E_x [36]:

$$\rho_{FG}(E = E_x) = \rho_{CT}(E = E_x), \tag{1.40}$$

$$\left.\frac{\partial_{\rho_{FG}}}{\partial E}\right|_{E=E_x} = \left.\frac{\partial_{\rho_{CT}}}{\partial E}\right|_{E=E_x}. \tag{1.41}$$

Hai mô hình này có sự kết hợp với nhau sẽ 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 ρ_{CT} và vùng năng lượng kích thích cao ρ_{FG} [33].

1.2.4. Mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược

Dựa trên những ưu điểm và nhược điểm của mô hình khí Fermi, tuy mô hình này xuất hiện nhưng không thể xác định được MĐM ở vùng năng lượng kích thích thấp và cao. Từ đó, một mô hình hiện tượng luận khác dựa trên mô hình khí Fermi có thể xác định được đồng thời MĐM trong cả hai vùng năng lượng kích thích thấp và cao là mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược (BSFG). Đây là một mô hình mới có sự phát triển dựa trên mô hình cũ. 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.

Theo mô hình BSFG, MĐM hạt nhân được tính với tham số a và không phụ thuộc vào năng lượng có dạng [33, 60]:

$$\rho_{BSFG}(E) = \eta \frac{\exp\left[2\sqrt{a(E-E_1)}\right]}{12\sqrt{2}\sigma a^{1/4}(E-E_1)^{5/4}}, \quad (1.42)$$

trong đó đại lượng η là tham số để làm khớp số liệu lý thuyết với số liệu thực nghiệm tính ra từ công thức trên, E là năng lượng kích thích, và $E_1 = C_1 + E_{pair}$ là phần dịch chuyển năng lượng kích thích, $C_1 = -6.6A^{-0.32}$ 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 [33].

Trong công thức trên, σ được tính từ công thức:

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

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_n − 1) MeV tại $E = B_n$. Với tham số MĐM a được đưa vào trong công thức tính MĐM để bổ chính hiệu ứng lớp.

Ở mô hình BSFG tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng, biểu thức của a được thay đổi dưới dạng một biểu thức phụ thuộc vào năng lượng. Tham

số a có liên quan đến năng lượng hiệu chỉnh lớp của S_Z , xác định dưới dạng [33]:

$$a(Z,A,E) = \tilde{a}(A)\left\{1 + \frac{\delta W(Z,A)}{(E-E_1)}\left[1 - e^{-\gamma(E-E_1)}\right]\right\}, \quad (1.43)$$

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

$$\delta W(Z,A) = M_{exp} - M_{LD}, \quad (1.44)$$

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.

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:

$$\rho_{BSFG}(E) = \frac{1}{12\sqrt{2}\sigma}\frac{\exp\left[2\sqrt{a(E-E_1)}\right]}{a^{1/4}(E-E_1)^{5/4}}, \quad (1.45)$$

Ta nhận thấy rằng việc sử dụng mô hình a phụ thuộc vào năng lượng tốt hơn mô hình 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 từ năm 2013, trong khi BSFG với a không phụ thuộc vào năng lượng chỉ sử dụng trước đó [33].

Ưu điểm của mô hình khí Fermi dịch chuyển ngược là có thể tính được MĐM trong toàn dải năng lượng kích thích. Các hiệu ứng lớp và hiệu ứng kết cặp được tính một cách tốt hơn và do đó MĐM thu được khá gần với số liệu thực nghiệm. Bên cạnh đó, 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 khi có đầy đủ số liệu thực nghiệm. 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 [60].

Như vậy, từ các mô hình hiện tượng luận đã được trình bày ở trên, ta thấy khi có sự kết hợp giữa mô hình khí Fermi và mô hình nhiệt độ không đổi đều không mô tả chính xác được số liệu MĐM hạt nhân trong khoảng năng lượng rộng từ trạng thái cơ bản đến các mức năng lượng cao hơn năng lượng liên kết của neutron. 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. Cuối cùng, chúng vẫn có ưu điểm lớn là dễ tính toán và đơn giản hơn so với các mô hình vi mô.

CHƯƠNG 2. PHƯƠNG PHÁP KHẢO SÁT SỰ CHUYỂN PHA KẾT CẶP 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, kích thích tập thể và quay,v.v..., có đóng góp đáng kể, để mô tả tốt hơn MĐM của hạt nhân kích thích [61]. Công thức tính MĐM theo mô hình BSFG có biểu thức như đã trình bày ở Chương 1 mục 1.2.4 có dạng:

$$\rho_{BSFG}(E) = \frac{1}{12\sqrt{2}\sigma}\frac{\exp\left(2\sqrt{a(E-E_1)}\right)}{a^{1/4}(E-E_1)^{5/4}}, \qquad (2.1)$$

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:

$$\sigma^2 = 0{,}0888A^{2/3}\sqrt{\frac{(E-E_1)}{a}},$$

Với A là số khối của hạt nhân.

Tham số quan trọng nhất trong công thức BSFG (2.1) là tham số MĐM a, có vai trò xác định độ dốc của đường cong MĐM. Trong một số nghiên cứu, a giả định là hằng số, 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 D_0 của hạt nhân bị kích thích [62, 63]. 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 [64–67]. Hơn thế nữa, hiệu ứng vỏ cũng được đưa vào tham số a do hiệu ứng này có ảnh hưởng lớn tại năng lượng kích thích thấp và giảm dần ở năng lượng kích thích cao [19, 68, 69]. Do đó chúng tôi thấy rằng tham số MĐM 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 [64, 66]:

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

trong đó $\tilde{a}(A)$ 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 nhiệt dung riêng của các hạt nhân nhẹ và trung bình kích thích.

2.1. NHIỆT DUNG RIÊNG 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 [70, 71]. 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 [60].

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 [69]:

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

trong đó $\rho(E_i)$ là MĐM tổng cộng tại năng lượng kích thích E_i, δE_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 ∞, 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 B_n 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 [72, 73]. 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 BSBS, cụ thể:

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

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 [10, 72–75]).

Như vậy, khi biết hàm phân chia chúng ta có thể dễ dàng tính được năng lượng tổng cộng E_T, nhiệt dung riêng C_T bằng công thức [71]:

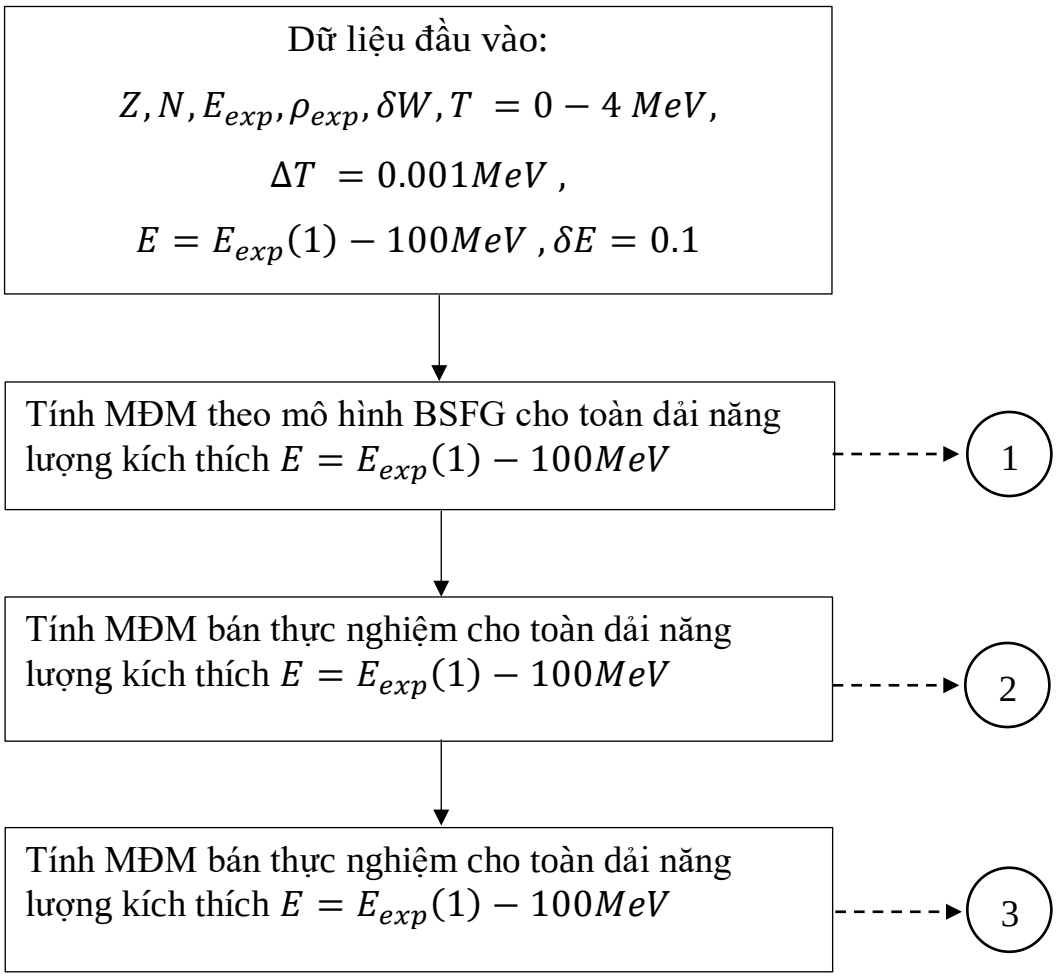
$$E_T = -\frac{\partial \ln Z^{CE}(\beta)}{\partial \beta} \quad (2.4)$$

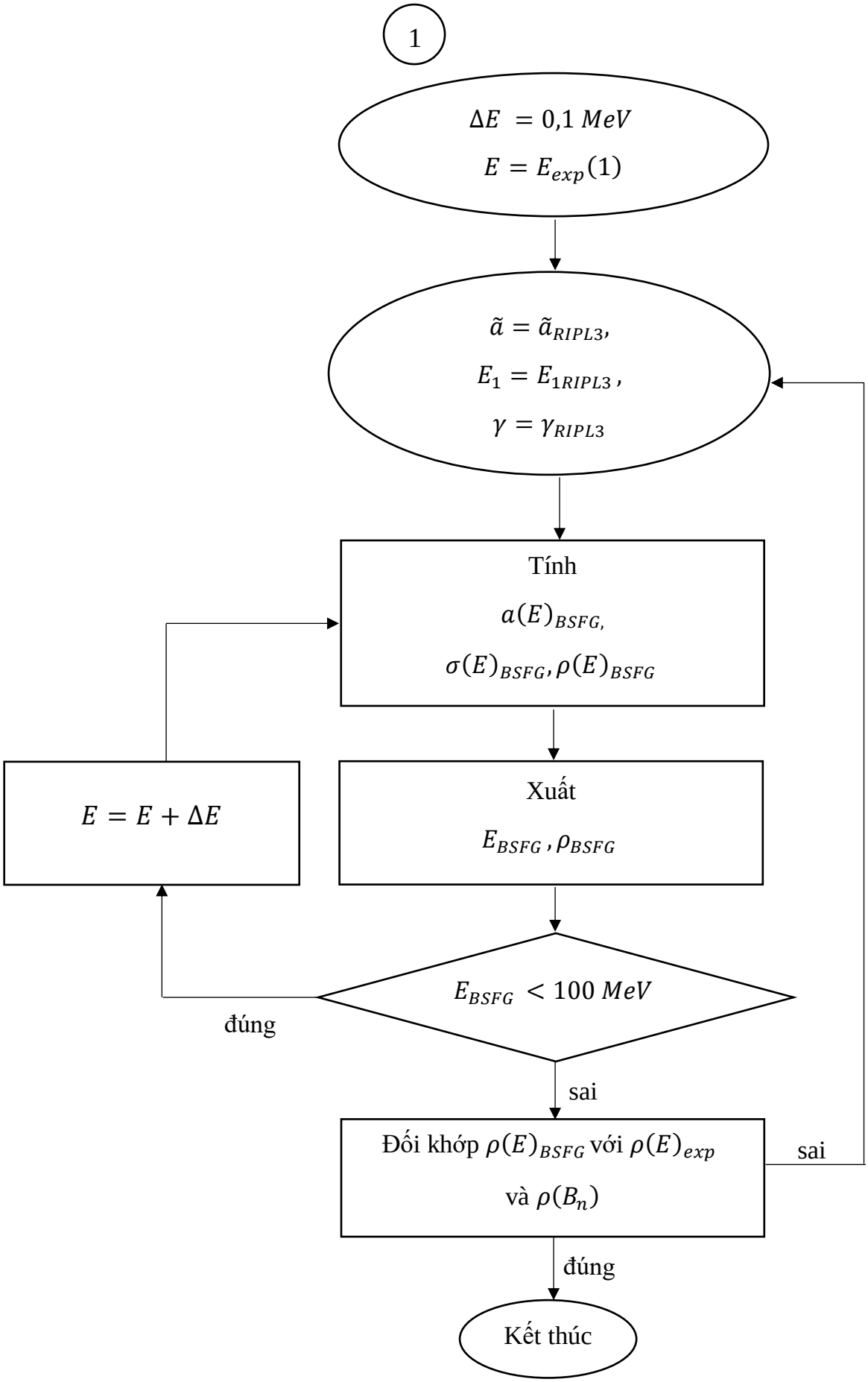
$$C_T = \beta^2 \frac{\partial \ln Z^{CE}(\beta)}{\partial \mathrm{x}} = \frac{\partial E_T}{\partial T}, \quad (2.5)$$

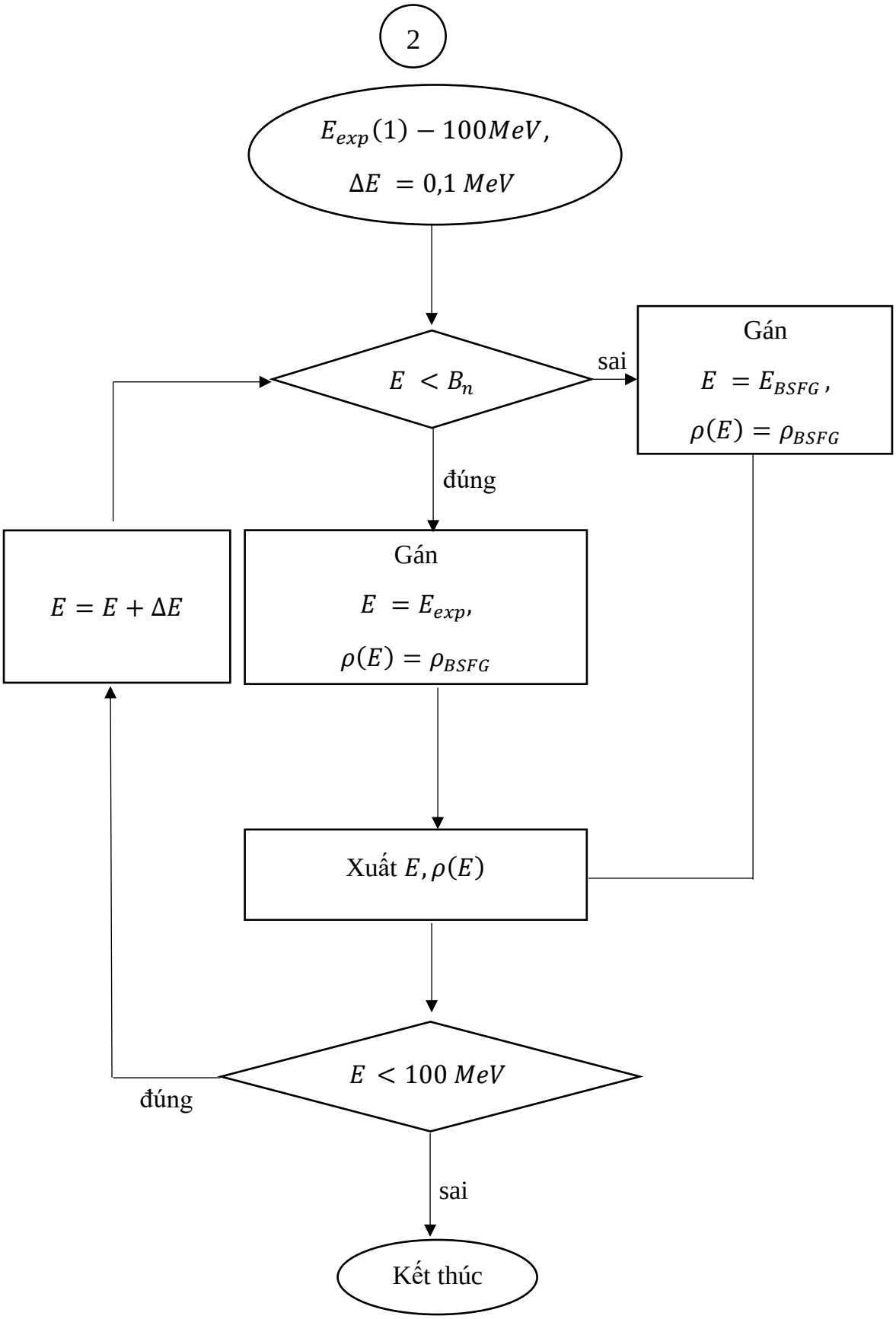
với $\beta = 1/T$.

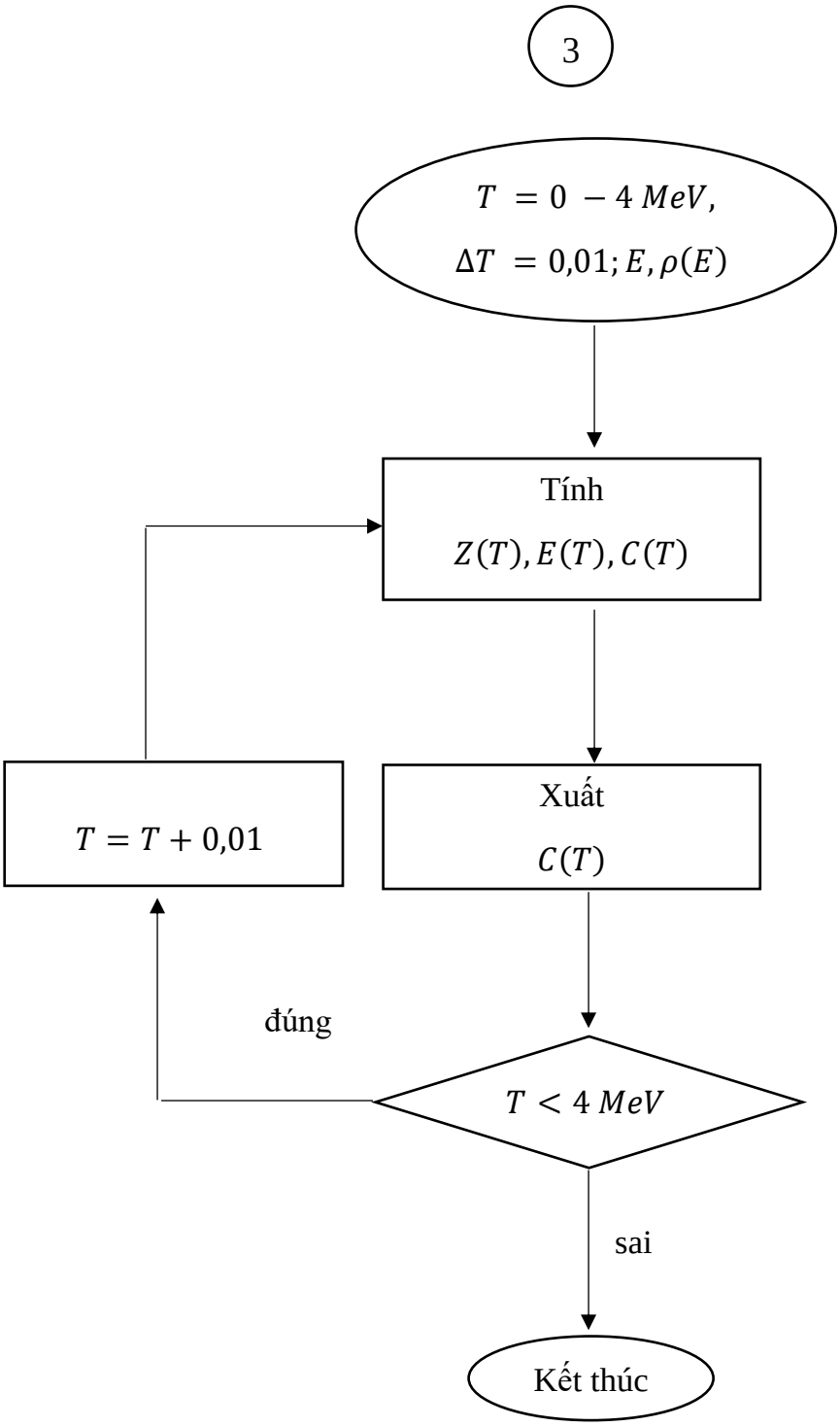
2.2. LƯU ĐỒ THUẬT TOÁN KHẢO SÁT NHIỆT DUNG RIÊNG THEO MÔ HÌNH KHÍ FERMI DỊCH CHUYỂN NGƯỢC

Chương trình tính toán nhiệt dung riêng 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 Window. Lưu đồ thuật toán có dạng như sau [60]:


Dữ liệu đầu vào:
$Z, N, E_{exp}, \rho_{exp}, \delta W, T = 0 - 4\ MeV,$
$\Delta T = 0.001 MeV$,
$E = E_{exp}(1) - 100 MeV$, $\delta E = 0.1$
Tính MĐM theo mô hình BSFG cho toàn dải năng lượng kích thích $E = E_{exp}(1) - 100 MeV$
1
Tính MĐM bán thực nghiệm cho toàn dải năng lượng kích thích $E = E_{exp}(1) - 100 MeV$
2
Tính MĐM bán thực nghiệm cho toàn dải năng lượng kích thích $E = E_{exp}(1) - 100 MeV$
3


1
$\Delta E = 0{,}1\ MeV$
$E = E_{exp}(1)$
$\tilde{a} = \tilde{a}_{RIPL3}$,
$E_1 = E_{1RIPL3}$,
$\gamma = \gamma_{RIPL3}$
Tính
$a(E)_{BSFG,}$
$\sigma(E)_{BSFG}, \rho(E)_{BSFG}$
Xuất
E_{BSFG}, ρ_{BSFG}
$E_{BSFG} < 100\ MeV$
đúng
$E = E + \Delta E$
sai
Đối khớp $\rho(E)_{BSFG}$ với $\rho(E)_{exp}$
và $\rho(B_n)$
sai
đúng
Kết thúc


2
$E_{exp}(1) - 100MeV$,
$\Delta E = 0{,}1\ MeV$
$E < B_n$
sai
Gán
$E = E_{BSFG}$,
$\rho(E) = \rho_{BSFG}$
đúng
$E = E + \Delta E$
Gán
$E = E_{exp}$,
$\rho(E) = \rho_{BSFG}$
Xuất $E, \rho(E)$
$E < 100\ MeV$
đúng
sai
Kết thúc


3
$T = 0 - 4\ MeV,$
$\Delta T = 0{,}01; E, \rho(E)$
Tính
$Z(T), E(T), C(T)$
Xuất
$C(T)$
$T = T + 0{,}01$
đúng
$T < 4\ MeV$
sai
Kết thúc

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

Z: số proton của hạt nhân.

N: số neutron của hạt nhân.

E_{exp}: năng lượng kích thích thực nghiệm.

E: năng lượng kích thích.

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

ρ_{exp}: mật độ mức thực nghiệm.

δW: 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.

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

$Z(T)$: hàm phân chia theo nhiệt độ T

$E(T)$: năng lượng tổng hợp 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 i3 1005G1, bộ nhớ 4GB, tốc độ xử lý dữ liệu 2,4 GHz.

2.3 CHƯƠNG TRÌNH LẬP TRÌNH TÍNH TOÁN

Chương trình tính toán được viết trên lập trình Fortran chạy trên Cygwin của hệ điều hành Windows để tính toán cho các đồng vị của các hạt nhân: Fe, Cd, Pd, Sn.

Dưới đây là chương trình tính toán được viết mẫu cho đồng vị của hạt nhân Fe. Các đồng vị Pd, Cd và Sn tương tự như Fe.

```
        IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
   PARAMETER (NIT=410,DT=0.01D0,NE=1000,
   DE=0.1D0,NEX=40.0D0)
   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_2008.txt',STATUS='UNKNOWN'
   OPEN(UNIT=110,FILE='RHOFG.txt', STATUS='UNKNOWN')
   OPEN(UNIT=120,FILE='ET.txt',STATUS=' 'UNKNOWN')
   OPEN(UNIT=130,FILE='CT.txt',STATUS=' 'UNKNOWN')
   ****************************************
   D0 I=1,NEX
   READ(101,*)J ,EEX(I),RHO_EXP(I)
```

```
END D0
AA=56.0D0
NETA=0.0D0
RS=2.76808D0
RGAMMA=0.06D0
RAA=5.56793834685D0
REE1=0.566777748D0
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
D0 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*Â**(2.0D0/3.0D0)*DSQRT(RA(I)*(EE-
RE1)))
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 (*,10)EE,RHO_FG(I),RA(I)
WRITE(110,11)EE,RHO_FG(I)
```

```
EE=EE+DE
END D0
D0 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)
END IF
c WRITE(*,*)I,EI(I),RHO_EXFG(I)
END D0
D0 IT=1,NIT
RT(IT)=T
SE=0.0D0
Z=0.0D0
D0 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
END D0
ET(IT)=SE/Z
E0T(IT)=ET(IT)-ET(1)
T=T+DT
```

```
END D0
D0 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)
END D0
**************************
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)
D0 I=1, N-2
B(I) = -0.5D0*(A(I+2)-4*A(I+1)+3*A(I))/DT
END D0
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 một số hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe, $^{105\text{-}108}$Pd, $^{111\text{-}112}$Cd, $^{116\text{-}119}$Sn 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 nhân	Z	N	I_t	$\delta W(MeV)$	$B_n(MeV)$	$D_0(eV)$
^{56}Fe	26	30	1,5	-1,28500	11,197	3360
^{57}Fe	26	31	0	-1,31103	9,298	25400
^{105}Pd	46	59	0	2,06640	7,094	240
^{106}Pd	46	60	2,5	2,34052	9,561	10.3
^{107}Pd	46	61	0	3,19274	6,536	270
^{108}Pd	46	62	2,5	3,17786	9,228	11
^{111}Cd	48	63	0	2,37875	6,976	155
^{112}Cd	48	64	0,5	2,41276	9,394	20
^{116}Sn	50	66	0	0,90500	9,563	-
^{117}Sn	50	67	0	1,44119	6,943	380
^{118}Sn	50	68	0,5	1,18009	9,327	55
^{119}Sn	50	69	0	1,46645	6,485	480

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 B_n được tính từ giá trị thực nghiệm khoảng cách mức D_0.

Trong bảng 3.1, các thông số đầu vào của hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe được lấy từ Bảng I trong tài liệu [16], đối với hạt nhân $^{105\text{-}108}$Pd được tham khảo từ Bảng 1 trong tài liệu [76], với hạt nhân $^{111\text{-}112}$Cd được tham khảo trong Bảng 1 của tài liệu [77] và hạt nhân $^{116\text{-}119}$Sn được lấy từ Bảng I trong tài liệu [78]. Riêng số liệu I_t cho các hạt nhân, chúng tôi tham khảo ở tài liệu [79].

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

Hạt nhân	$\gamma(MeV^{-1})$	$\tilde{a}(MeV^{-1})$	$E_1(MeV)$
^{56}Fe	0,06000	5,367938	0,566778
^{57}Fe	0,06000	6,86831	-0,23113
^{105}Pd	0,08697	11,57992	-0,59955
^{106}Pd	0,08669	12,31293	1,15540
^{107}Pd	0,08642	11,77894	-0,40838
^{108}Pd	0,08616	12,23825	1,20474
^{111}Cd	0,08537	12,73994	-0,23220
^{112}Cd	0,08512	13,11778	1,22978
^{116}Sn	0,00189	13,10341	1,50245

^{117}Sn	0,08389	13,60341	0,60245
^{118}Sn	0,08365	12,98584	1,29957
^{119}Sn	0,08341	13,32398	0,16677

Trong đó:

γ: tham số suy giảm

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

E_1: 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 của tài liệu [60].

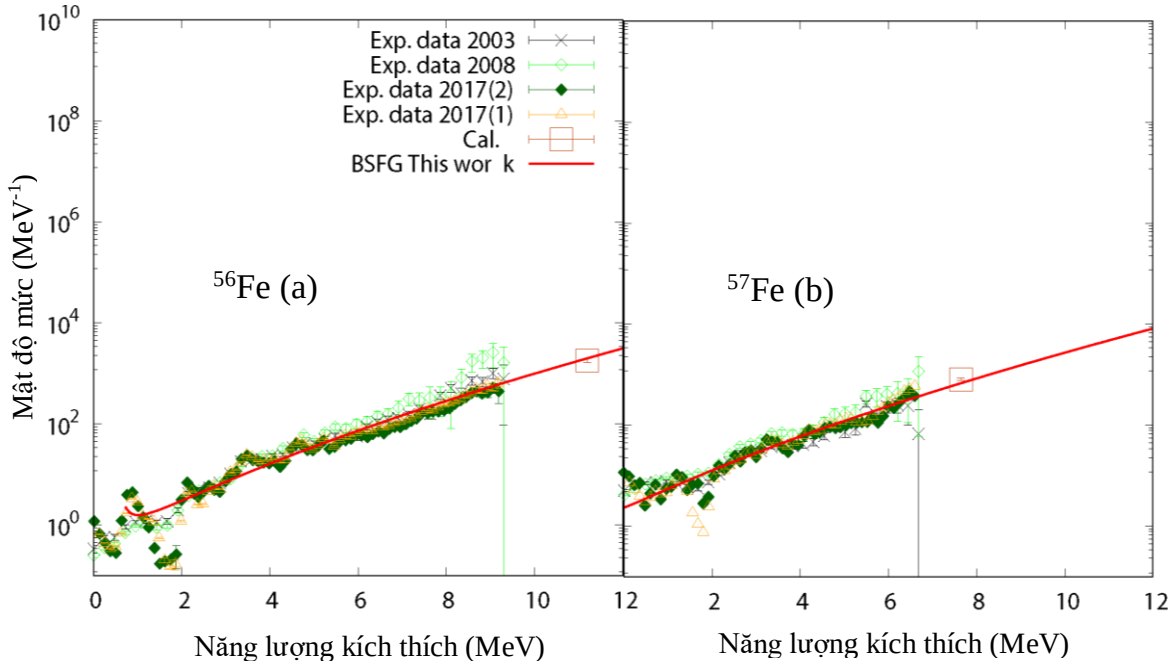
Bảng 3.3. Bảng số liệu tính từ đề tài của luận văn

Hạt nhân	$\gamma(MeV^{-1})$	$\tilde{a}(MeV^{-1})$	$E_1(MeV)$
^{56}Fe	0,06000	5,367938	0,566778
^{57}Fe	0,06000	5,467938	-0,04678
^{105}Pd	0,08697	11,02992	-0,42955
^{106}Pd	0,08669	11,41293	1,05540
^{107}Pd	0,08642	10,79894	-0,50838
^{108}Pd	0,01416	13,03825	1,20475
^{111}Cd	0,06537	12,73994	-0,23220
^{112}Cd	0,05012	12,65778	1,02978
^{116}Sn	0,00189	13,10341	1,50245

^{117}Sn	0,07390	13,60341	0,99545
^{118}Sn	0,01365	12,98584	1,39957
^{119}Sn	0,07341	12,32398	0,12677

3.2. PHÂN TÍCH KẾT QUẢ CÁC NHIỆT DUNG RIÊNG

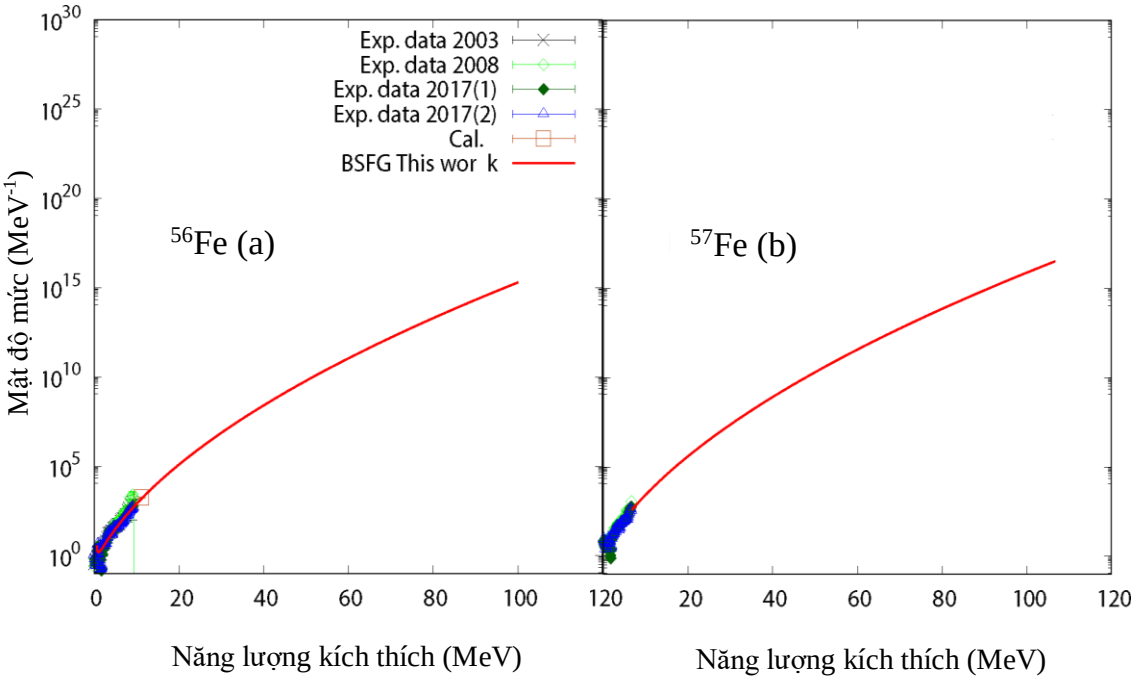
3.2.1. Hạt nhân Fe



Hình 3.1. So sánh số liệu mật độ mức thực nghiệm của năm 2003/2008 và năm 2017 với số liệu được tính từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0 - 12 MeV cho các hạt nhân ^{56}Fe (a), ^{57}Fe (b).

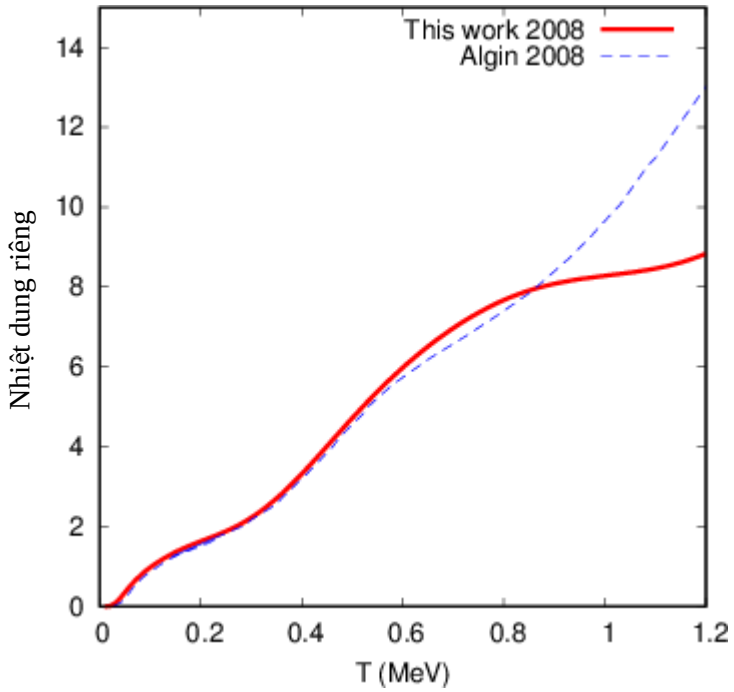
Trong hình 3.1, các nét liền là MĐM thu được bằng cách sử dụng công thức BSFG (1.36) với các tham số được liệt kê trong bảng 3.1. Có hai số liệu thực nghiệm MĐM của năm 2017. Trong nghiên cứu này, chúng tôi tính toán MĐM sao cho tốt nhất với số liệu thực nghiệm năm 2017 đầu tiên (kí hiệu là Exp.data 2017(1)). Các dấu chéo (với sai số), hình thoi rỗng (với sai số), hình thoi đặc (với sai số), hình tam giác rỗng (với sai số) là dữ liệu MĐM được lấy từ tài liệu [16-18] cho các hạt nhân ^{56}Fe (a), ^{57}Fe (b). Từ hình 3.1 , ta có thể dễ dàng nhận thấy giá trị MĐM của mô hình BSFG (đường nét liền) thu được bằng cách sử dụng các tham số trong bảng 3.2 rất phù hợp với tập dữ liệu thực

nghiệm năm 2008 [16]. Mô hình BSFG mô tả tốt dữ liệu thực nghiệm MĐM trong khoảng năng lượng kích thích trên 2 MeV cho tất cả các hạt nhân được khảo sát. Trong khoảng năng lượng kích thích dưới 2 MeV, BSFG không tái hiện được số liệu MĐM thử nghiệm. Điều này là do mô hình BSFG giả định rằng MĐM là liên tục trong vùng năng lượng thấp nhưng dữ liệu MĐM thực nghiệm trong vùng năng lượng này thường thể hiện cấu trúc giống như bậc thang, tức là có sự thay đổi đột ngột về độ dốc của MĐM tại một năng lượng nhất định, đây có thể là kết quả của sự phá vỡ cặp nucleon đầu tiên. Điều này thể hiện rõ hơn ở sự khác biệt giữa hạt nhân chẵn – chẵn (^{56}Fe) với hạt nhân chẵn – lẻ (^{57}Fe) 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 D_0 thực nghiệm được lấy từ cơ sở dữ liệu RIPL – 3 [80] và tài liệu [16] vì tất cả các đường BSFG đều đi qua các điểm dữ liệu 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 bảng 3.2.



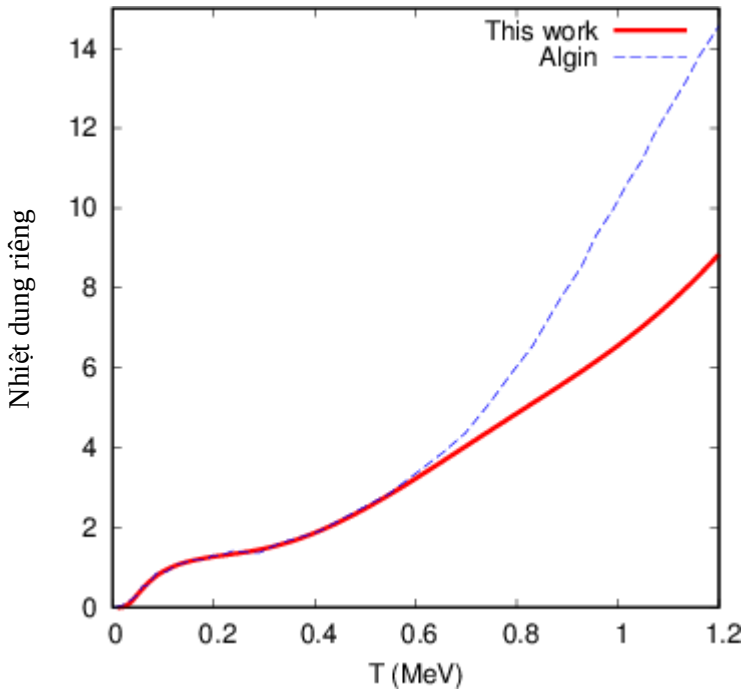
Hình 3.2. So sánh mật độ mức BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0 - 100 MeV cho các hạt nhân ^{56}Fe(a), ^{57}Fe(b).

Hình 3.2 biểu diễn so sánh MĐM được tính toán từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe trong khoảng từ 0 MeV đến 100 MeV. 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 2017(1) (các hình thoi đặc), còn mật độ BSFG được lấy từ tài liệu [16] được tính từ công thức với tham số MĐM là hằng số và số liệu thực nghiệm năm 2008 (các hình thoi rỗng). Từ hình 3.2 có thể thấy rõ ràng các mật độ mức BSFG năm 2017 (ký hiệu là BSFG This work) thấp hơn so với giá trị mật độ mức BSFG (ký hiệu là Exp. data 2008) 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 2008 và BSFG 2017(1) của $^{56-57}$Fe (3.2b) là nhỏ nhất, dẫn đến sự khác biệt nhỏ về nhiệt dung riêng của hạt nhân này.



Hình 3.3. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân ^{56}Fe.

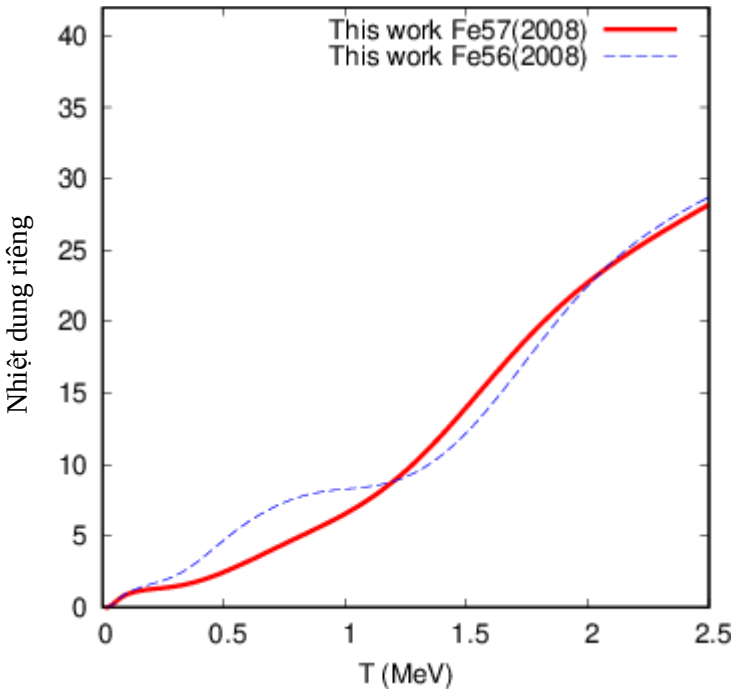
Hình 3.3 so sánh nhiệt dung riêng được tính theo mô hình BSFG có tham số MĐM không phụ thuộc năng lượng do Algin tính năm 2008 (đường nét đứt) với nhiệt dung riêng được tính theo mô hình BSFG có phụ thuộc năng lượng do chúng tôi tính (đường nét liền) ^{56}Fe. Số liệu thực nghiệm của MĐM đều là số liệu của năm 2008. Vì vậy nhiệt dung riêng trong khoảng từ 0 đến 0.5 MeV là giống nhau. Tuy nhiên nhiệt dung riêng trong khoảng từ 0.5 đến 1.2 có sự khác nhau rõ rệt do sự khác nhau trong công thức tính MĐM của hai mô hình BSFG. Từ hình 3.3 thấy rằng nhiệt dung riêng được tính từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng có điểm uốn lớn trong khoảng nhiệt độ từ 0.5 đến 0.7 MeV. Trong khi điều này không thể hiện rõ trong kết quả tính Algin năm 2008 [16].



Hình 3.4. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân ^{57}Fe.

Hình 3.4 so sánh nhiệt dung riêng được tính theo mô hình BSFG có tham số MĐM không phụ thuộc năng lượng do Algin tính năm 2008 (đường nét đứt) với nhiệt dung riêng được tính theo mô hình BSFG có phụ thuộc năng lượng do chúng tôi tính (đường nét liền) cho hạt nhân ^{57}Fe. Số liệu thực nghiệm của MĐM đều là số liệu của năm 2008. Vì vậy nhiệt dung

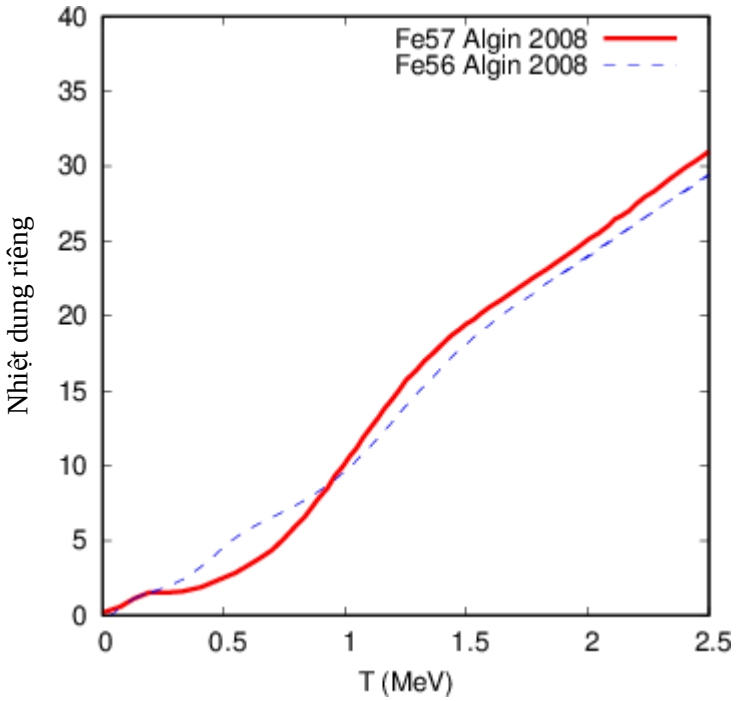
riêng trong khoảng từ 0 đến 0.5 MeV là giống nhau. Tuy nhiên nhiệt dung riêng trong khoảng từ 0.5 đến 1.2 có sự khác nhau rõ rệt do sự khác nhau trong công thức tính MĐM của hai mô hình BSFG. Từ hình 3.4 thấy rằng nhiệt dung riêng của ^{57}Fe được tính từ dữ liệu thực nghiệm MĐM của năm 2008 trong công trình của chúng tôi và của Algin đều không có biểu hiện chữ S đặc trưng cho chuyển pha kết cặp.



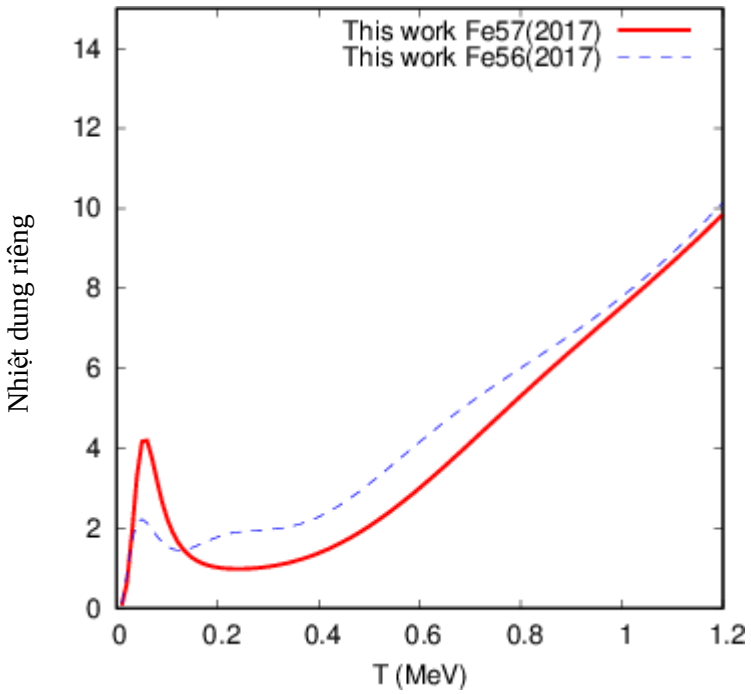
Hình 3.5. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2008 trong nghiên cứu hiện tại (This work) và được trích từ tài liệu Algin năm 2008 cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe.

Trong hình 3.5 chúng tôi thực hiện so sánh nhiệt dung riêng giữa hai hạt nhân ^{56}Fe và ^{57}Fe. Mặc dù đều lấy số liệu MĐM thực nghiệm từ năm 2008, bằng cách sử dụng mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng, kết quả nhiệt dung riêng giữa ^{56}Fe và ^{57}Fe từ tính toán của chúng tôi (This work) có sự khác biệt rất lớn. Hình dạng chữ S ở ^{56}Fe lớn hơn rất nhiều so với ^{57}Fe. Sự khác biệt nhiệt dung riêng giữa ^{56}Fe và ^{57}Fe trong nghiên cứu của Algin cũng có, tuy nhiên không quá rõ nét. Chúng ta có thể thấy điều này ở hình 3.6. Sự khác biệt giữa nhiệt dung riêng trong nghiên cứu của chúng tôi ở hình 3.5 và nhiệt dung riêng trong nghiên cứu của Algin ở hình 3.6 được quan sát thấy rõ ở nhiệt độ cao trên 0.8 MeV đối với cả

^{56}Fe và ^{57}Fe. Riêng đối với ^{56}Fe, sự khác biệt bắt đầu thể hiện từ nhiệt độ 0.6 MeV. Cụ thể, nhiệt dung riêng trong nghiên cứu của chúng tôi nhỏ hơn và ít dốc hơn những giá trị trong nghiên cứu của Algin [16]. Sự khác biệt này xuất phát từ sự khác biệt giữa các giá trị MĐM thu được từ mô hình BSFG thể hiện trong hình 3.2.



Hình 3.6. So sánh nhiệt dung riêng *C* được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm năm 2008 và được trích từ nghiên cứu của Algin cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe.



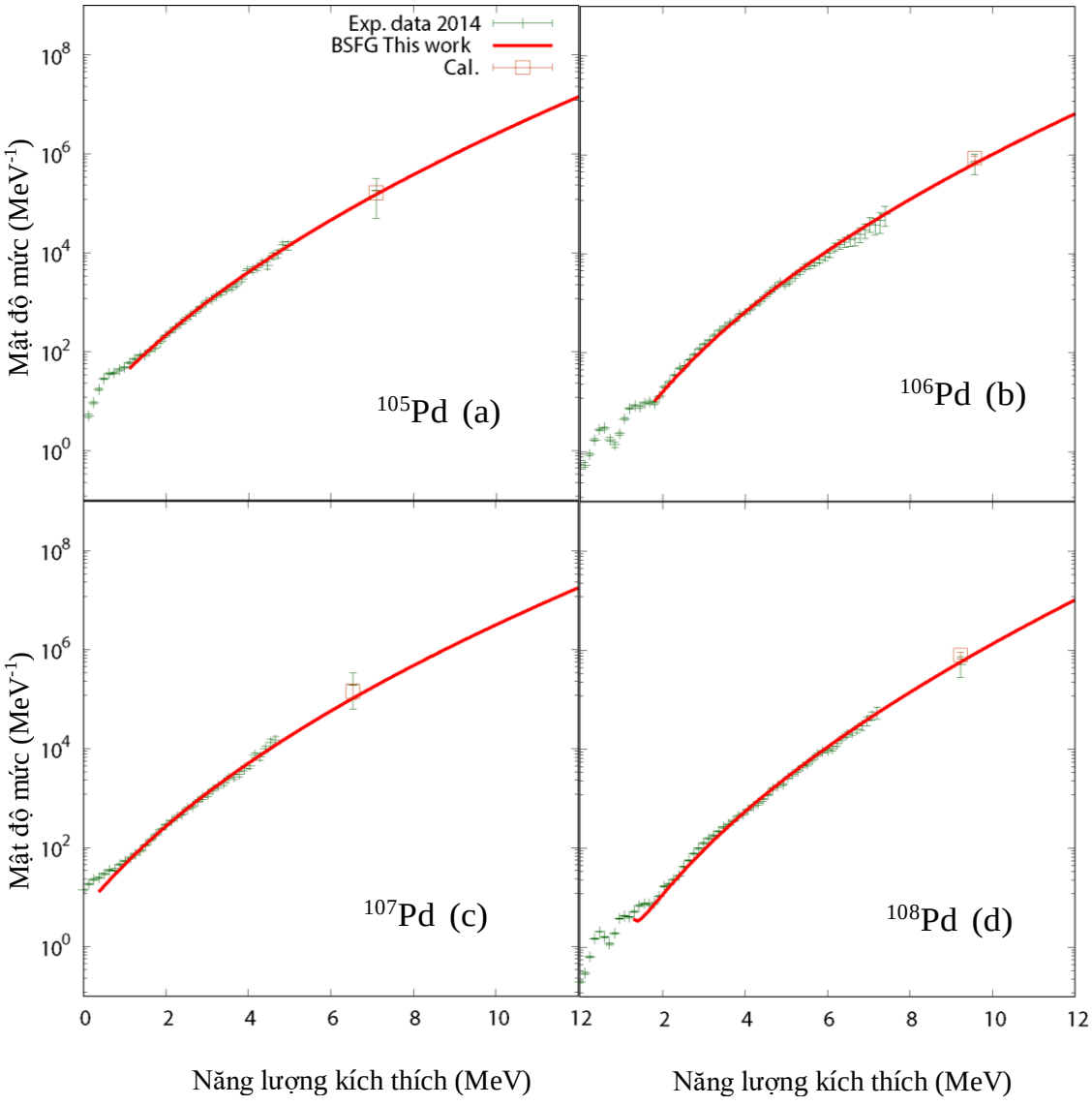
Hình 3.7. So sánh nhiệt dung riêng C được tính theo mô hình BSFG từ số liệu thực nghiệm của năm 2017(1) (This work) cho hạt nhân $^{56\text{-}57}$Fe.

Hình 3.7 biểu diễn nhiệt dung riêng được tính từ MĐM thực nghiệm của năm 2017 bằng BSFG có tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng trong nghiên cứu của chúng tôi. Các đường nét đứt là kết quả thu được trong nghiên cứu hiện tại bằng cách sử dụng công thức tính MĐM exp + BSFG của ^{56}Fe, còn đường nét liền là các kết quả thu được trong nghiên cứu hiện tại bằng cách sử dụng công thức tính MĐM exp + BSFG của ^{57}Fe. Nhiệt dung riêng của hạt nhân ^{56}Fe có một chút điểm uốn trong khoảng nhiệt độ từ 0.5 đến 0.7 MeV. Tuy nhiên, điều này không thật sự rõ nét. Chúng tôi hoàn toàn không thấy điểm uốn đối với hạt nhân ^{57}Fe. Trong vùng nhiệt độ thấp từ 0 đến 0.2 MeV, sự thăng giáng của nhiệt dung ở cả hai hạt nhân là rất lớn. Nguyên nhân có thể là do sự thăng giáng giá trị MĐM thực nghiệm năm 2017 của hai hạt nhân ở vùng này thể hiện ở hình 3.1.

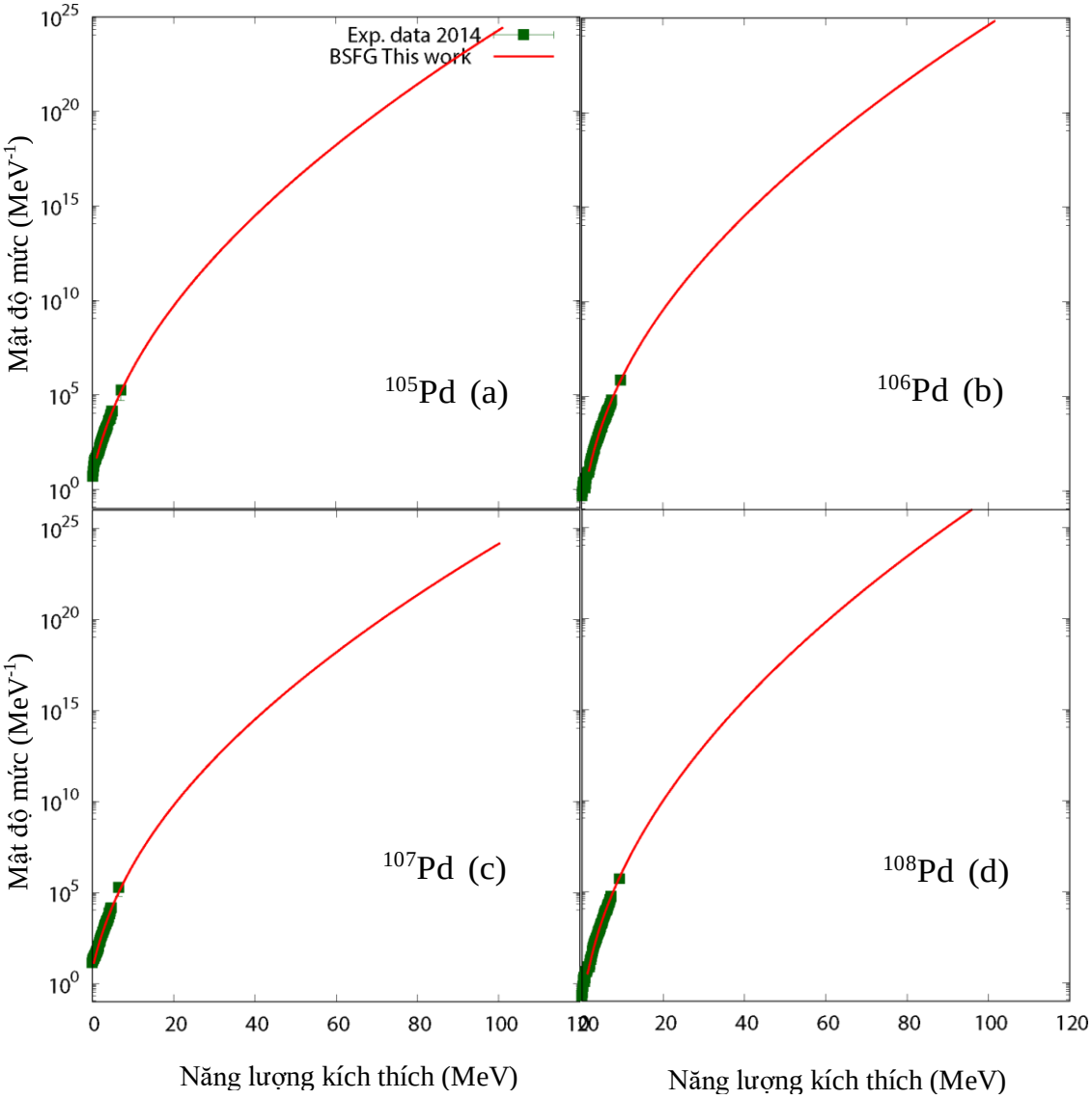
3.2.2. Hạt nhân Pd

Hình 3.8 (a-d) biểu diễn mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d) thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM có phụ thuộc vào năng

lượng (đường nét đứt) và so sánh với số liệu thực nghiệm (đường gạch với sai số) của nhóm Oslo [76]. ρ_{BSFG} rất phù hợp với các số liệu thực nghiệm cho tất cả các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d). Điều này đã góp phần khẳng định độ tin cậy của phương pháp BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng.



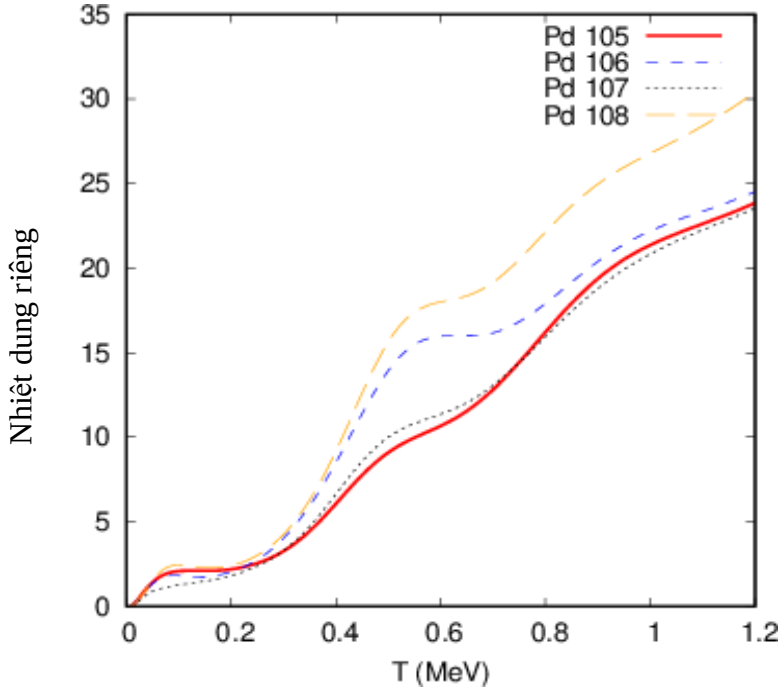
Hình 3.8. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-12 MeV thu được từ mô hình BSFG và so sánh với số liệu thực nghiệm năm 2014 cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d).



Hình 3.9. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG và so sánh với số liệu thực nghiệm năm 2014 cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d).

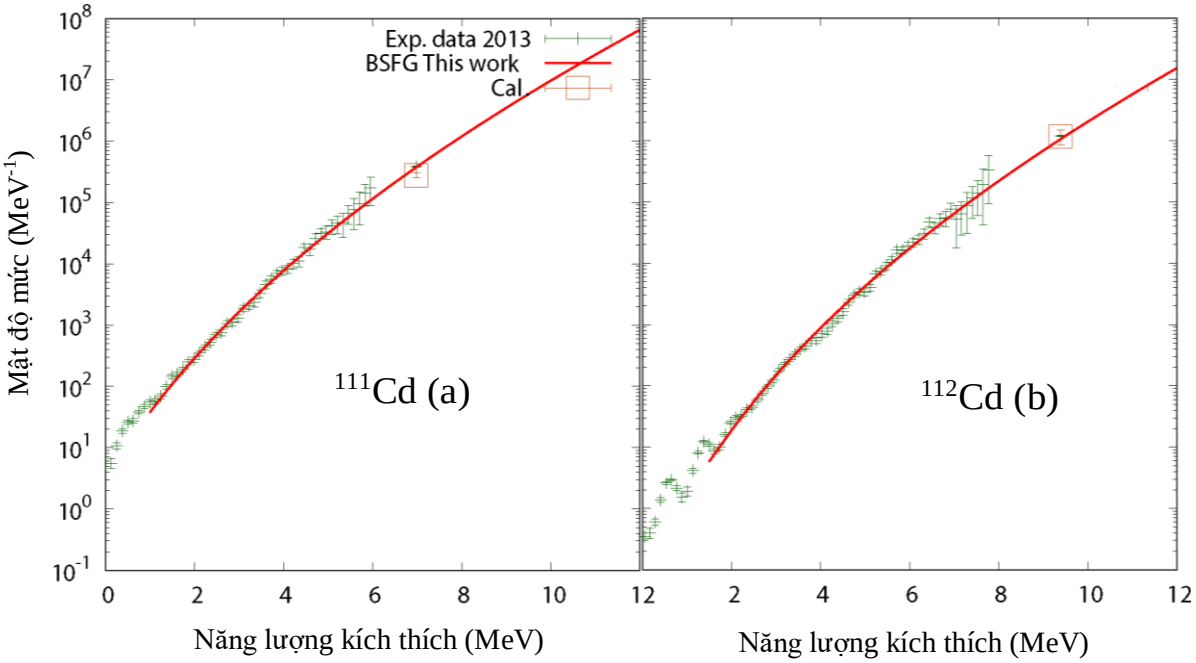
Hình 3.9 biểu diễn mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0 – 100 MeV thu được từ mô hình BSFG với MĐM phụ thuộc năng lượng và so sánh với số liệu thực nghiệm năm 2014 cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d). Việc tính MĐM hạt nhân trong khoảng năng lượng từ 0 đến 100 MeV giúp mô tả tốt nhiệt dung riêng.

Từ hình 3.10 thấy rằng nhiệt dung riêng của các hạt nhân chẵn – chẵn ^{106}Pd (b), ^{108}Pd (d) có hình dạng tương tự nhau, các hạt nhân chẵn – lẻ ^{105}Pd (a), ^{107}Pd (c) cũng có hình dạng tương tự nhau. Đặc biệt, nhiệt dung riêng của các hạt nhân chẵn – chẵn có hình dạng chữ S rất rõ nét. Điều này chứng tỏ năng lượng kết cặp lớn. Bên cạnh đó, nhiệt dung riêng các hạt nhân chẵn – lẻ có điểm uốn nhỏ. Về mặt lí thuyết, điều này hoàn toàn phù hợp do hạt nhân chẵn – chẵn được biết sẽ có năng lượng kết cặp lớn hơn các hạt nhân chẵn – lẻ.



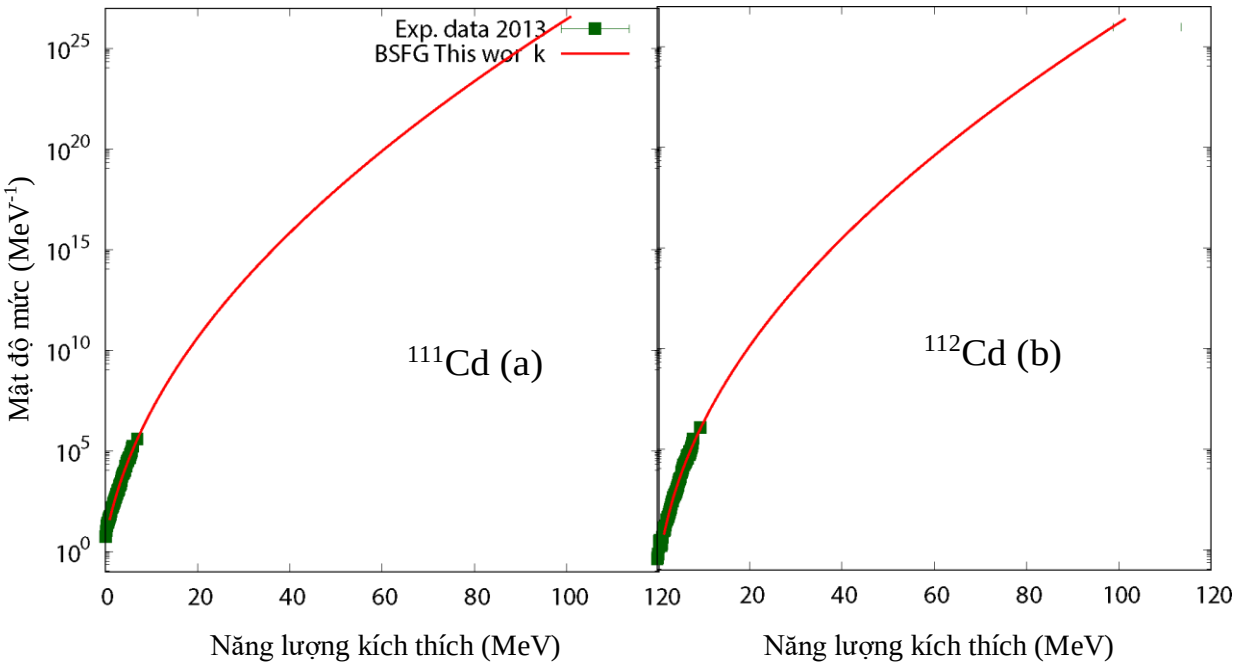
Hình 3.10. Nhiệt dung riêng theo hàm của nhiệt độ thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân ^{105}Pd (a), ^{106}Pd (b), ^{107}Pd (c), ^{108}Pd (d).

3.2.3. Hạt nhân Cd



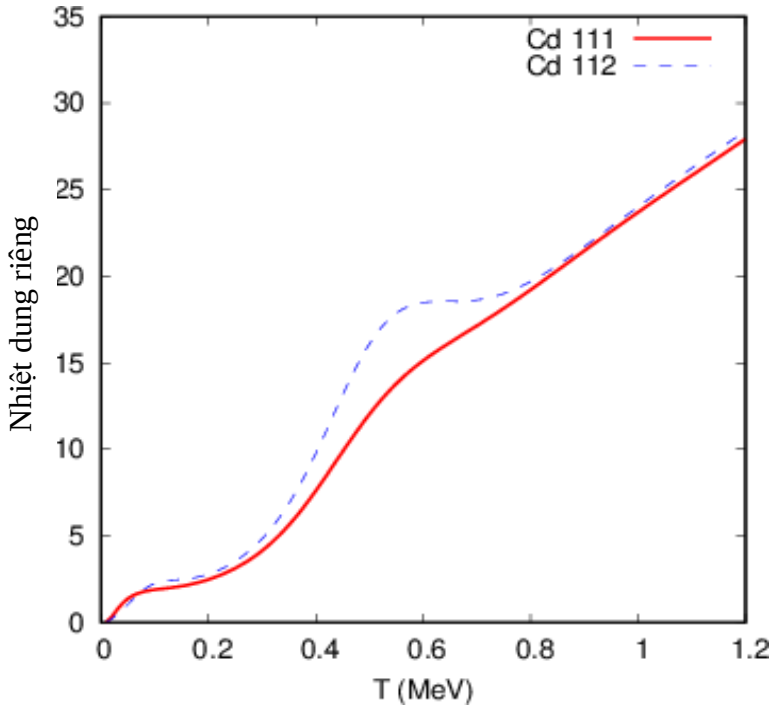
Hình 3.11. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0 – 12 MeV cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b).

Hình 3.11 và hình 3.12 biểu diễn mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (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 năm 2013 [80]. ρ_{BSFG} rất phù hợp với các số liệu thực nghiệm cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b). Điều này một lần nữa khẳng định độ tin cậy của phương pháp BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng.



Hình 3.12. Mật độ mức ρ theo hàm năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0 – 100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b).

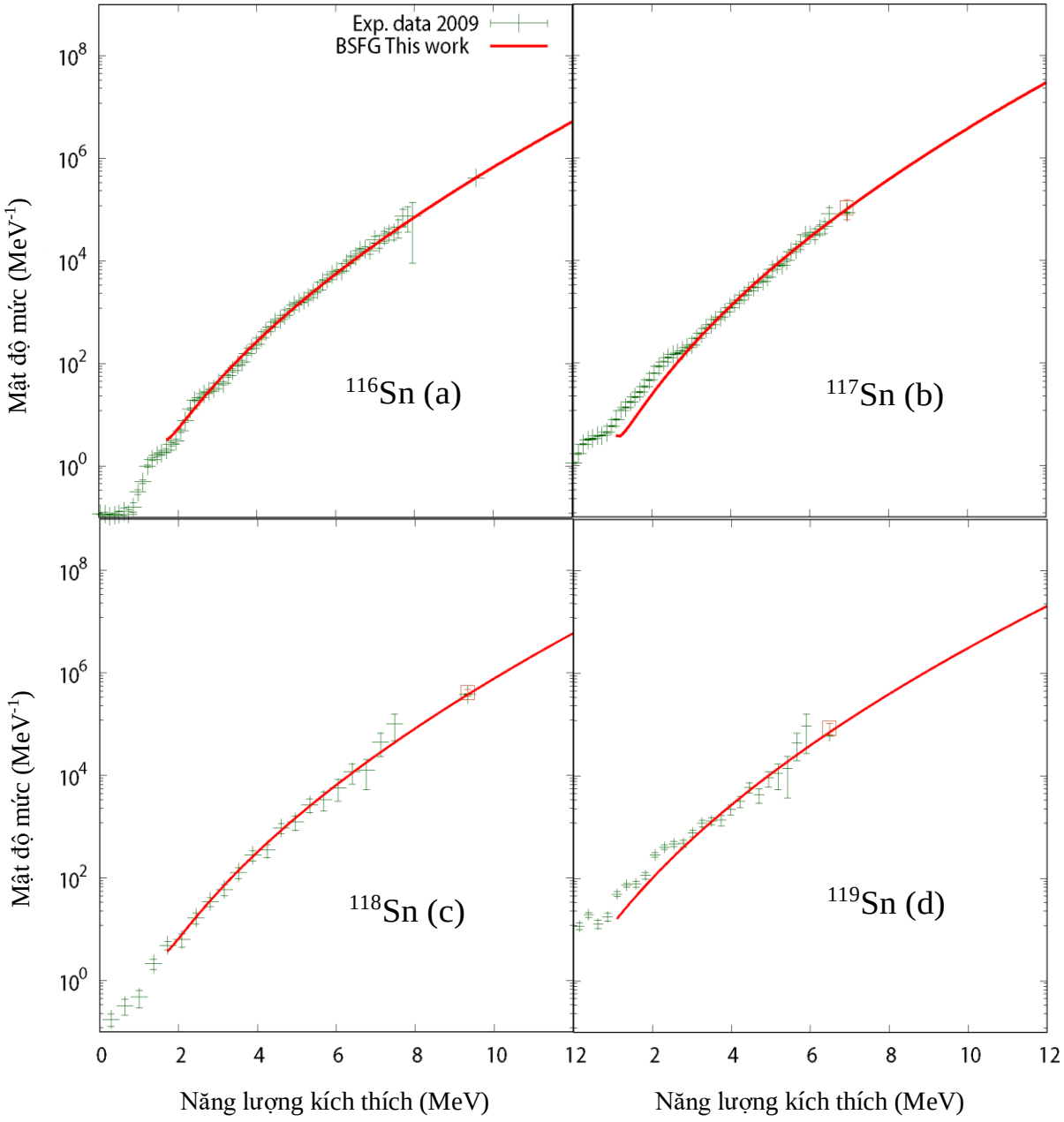
Hình 3.12 biểu diễn mật độ mức ρ theo hàm năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0 – 100 MeV thu được từ mô hình BSFG cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b).



Hình 3.13. Nhiệt dung riêng *C* theo hàm nhiệt độ *T* thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng cho các hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b).

Hình 3.13 biểu diễn nhiệt dung riêng *C* theo hàm của nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG cho các đồng vị của hạt nhân ^{111}Cd (a) và ^{112}Cd (b). Trong hình vẽ, nhiệt dung riêng của đồng vị hạt nhân ^{112}Cd (b) được so sánh với nhiệt dung riêng của hạt nhân ^{111}Cd (a). Từ hình vẽ ta thấy, nhiệt dung riêng của hạt nhân chẵn – chẵn ^{112}Cd (b) có hình dạng chữ S mạnh hơn nhiều so với hạt nhân chẵn – lẻ ^{111}Cd (a). Sự khác biệt rõ ràng giữa hai nhiệt dung riêng này là hợp lí bởi vì hạt nhân chẵn – chẵn thường biểu hiện tương quan kết cặp mạnh hơn hạt nhân chẵn – lẻ.

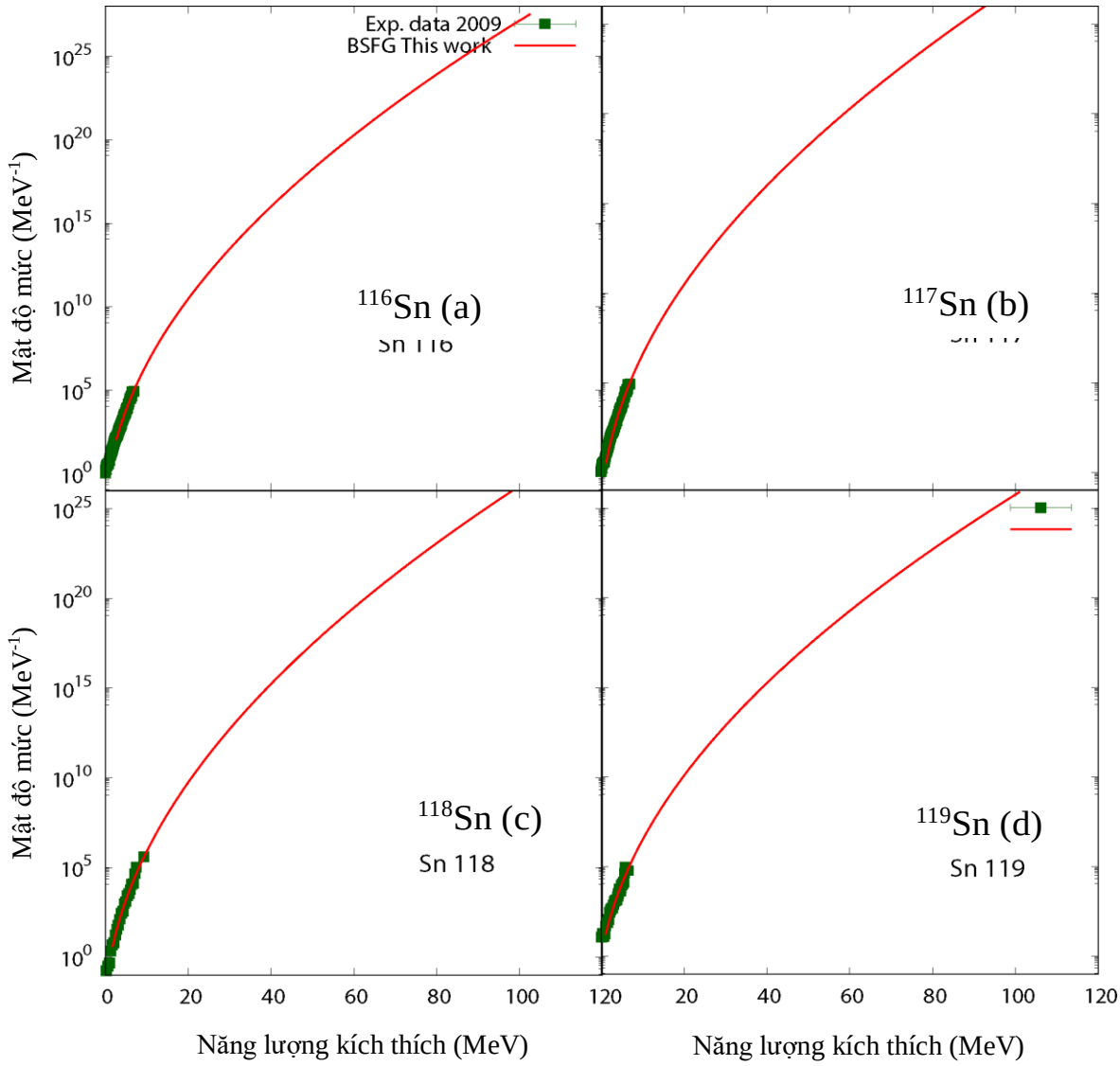
3.2.4. Hạt nhân Sn



Hình 3.14. Mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích trong khoảng 0-12 MeV cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d).

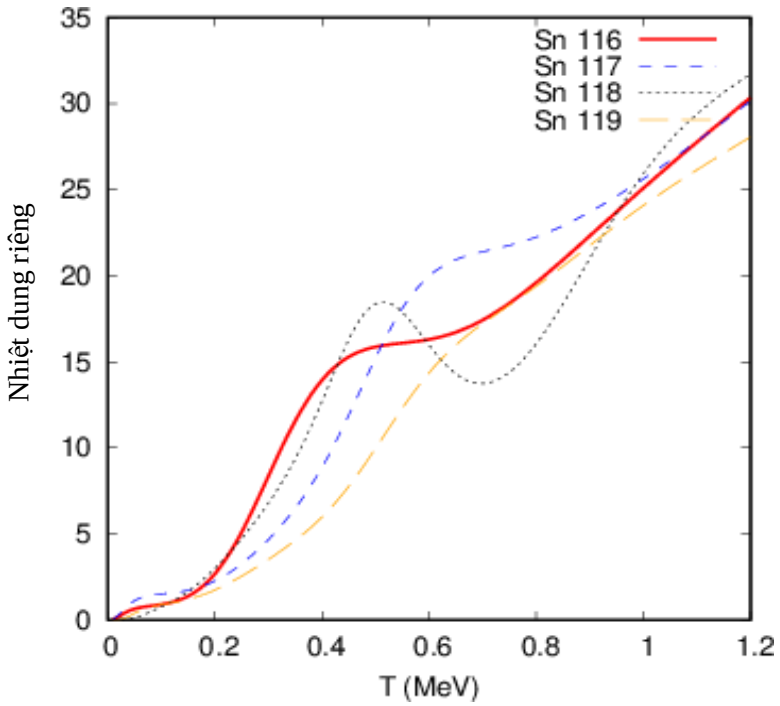
Hình 3.14 (a), (b), (c), (d) biểu diễn mật độ mức toàn phần ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b),^{118}Sn (c) và ^{119}Sn (d) thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM có phụ thuộc vào năng lượng (đường nét liền) và so sánh với số liệu thực nghiệm của

nhóm Oslo năm 2009 [78]. ρ_{BSFG} rất phù hợp với các số liệu thực nghiệm cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b),^{118}Sn (c) và ^{119}Sn (d). Tuy nhiên, trong vùng năng lượng kích thích thấp từ 0 đến 4 MeV, mô hình BSFG không mô tả tốt MĐM thực nghiệm. Nguyên nhân điều này đã giải thích ở mục 3.1.



Hình 3.15. Mật độ mức ρ theo hàm của năng lượng kích thích E^* trong khoảng 0-100 MeV thu được từ mô hình BSFG theo năng lượng kích thích cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d).

Hình 3.15 biểu diễn mật độ mức ρ 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 ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c) và ^{119}Sn (d).



Hình 3.16. Nhiệt dung riêng C theo hàm nhiệt độ T thu được từ mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc năng lượng cho các hạt nhân ^{116}Sn (a), ^{117}Sn (b), ^{118}Sn (c), ^{119}Sn (d).

Từ hình 3.16 thấy rằng nhiệt dung riêng của các hạt nhân chẵn - chẵn ^{116}Sn và ^{118}Sn có hình dạng tương tự nhau, các hạt nhân chẵn - lẻ ^{117}Sn và ^{119}Sn cũng có hình dạng tương tự nhau. Nhiệt dung riêng của các hạt nhân chẵn - chẵn có hình dạng chữ *S* rất rõ nét. Nhiệt dung riêng của các hạt nhân chẵn - lẻ cũng có hình dạng chữ *S* mặc dù không rõ bằng các hạt nhân chẵn - chẵn. Đặc biệt, hạt nhân chẵn - chẵn ^{118}Sn có điểm uốn rất lớn. Điều này chứng tỏ năng lượng kết cặp lớn. Về mặt lí thuyết, nhiệt dung riêng của cả bốn hạt nhân $^{116-119}$Sn đều có hình dạng chữ S rõ nét, được giải thích là do các đồng vị của hạt nhân Sn có số proton là số magic (Z=50). Do đó, các hạt nhân này có năng lượng kết cặp khá lớn.

KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

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 kích thích có khối lượng nhẹ và trung bình, 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 nhẹ và trung bình. Áp dụng mô hình BSFG với tham số MĐM phụ thuộc vào năng lượng vào mô tả MĐM toàn phần của một số hạt nhân mà hai nhóm thực nghiệm gần đây đã xác định được (nhóm Oslo và Ohio) như $^{56-57}$Fe, $^{105-108}$Pd, $^{111-112}$Cd và $^{116-119}$Sn, 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 kích thích có khối lượng nhẹ và trung bình.

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 nhiệt dung riêng C theo T của một số hạt nhân kích thích có khối lượng nhẹ và trung bình.

5. Tổng hợp, đánh giá, phân tích kết quả nghiên cứu về các đại lượng nhiệt động học của một số hạt nhân kích thích có khối lượng nhẹ và trung bình.

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.

Trong đề tài luận văn này, chúng tôi chỉ giới thiệu kết quả tính toán MĐM và các đại lượng nhiệt dung riêng cho 12 hạt nhân là $^{56-57}$Fe, $^{105-108}$Pd, $^{111-112}$Cd và $^{116-119}$Sn. Thời gian tới, chúng tôi sẽ mở rộng tính toán cho các hạt nhân khác, đặc biệt là các hạt nhân đã có và được cập nhật số liệu

MĐM thực nghiệm.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

Công trình công bố

1. 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*, Vol. 33, No. 2 (2023), pp. 133-142. *DOI: https://doi.org/10.15625/0868-3166/17582*.

Báo cáo hội nghị

1. 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. Dey B., et al, 2017, Level density and thermodynamics in the hot rotating $^{96}T_c$ nucleus, *Physical Review C*, 96 , pp. 054326(1-9).

2. Hung N. Q.,Pandit D.,Bhattacharya S., Dang N. D.,Huong L.T.Q et al, 2019, S-shaped heat capacity in an odd-odd deformed nucleus, *Physical Letters B*, 789 , pp. 634-638.

3. Rossignoli R., 1998,Thermal and quantal fluctuations for fixed particle number in finite superfluid systems, *Physical Review Letters*, 80 (9), pp. 1853-1856.

4. Liu and Y. Alhassid S., 2001, Signature of a pairing transition in the heat capacity of finite nuclei, *Physical Review Letters*, 87 (2), pp.022501(1-4).

5. Alhassid Y.,Bertsch F.G. and Fang L., 2003, Nuclear level statistics: Extending shell model theory to higher temperatures, *Physical Review C*, 68, pp. 044322(1-4).

6. Egido J., Robledo L. and Martin V., 2000, Behavior of shell effects with the excitation energy in atomic nuclei, *Physical Review Letters*, 85 (1), pp. 26-29.

7. Belic A., Dean D. and Hjorth-Jensen M., Pairing correlations and transitions in nuclear systems.

8. Hung N.Q., Dang N.D.,Moretto L., Pairing in excited nuclei: a review, *Physical Review*, 82.

9. Schiller A.,Bjerve A.,Guttormsen M.,Hjorth-Jensen M.,Ingebretsen F., Melby E., Critical temperature for quenching of pair correlations, *Physical Review C*, 63 , pp. 021306(1-5).

10. Chankova R. et al., 2006, Level densities and thermodynamical quantities of heated $^{93-98}Mo$ isotopes, *Physical Review C*, 73, 034311(1-12).

11. Xuan T.D, Hung N. Q., Cong V.D., Anh N.N. and Huong L.T.Q, 2022, Investigation of empirical heat capacity in hot-rotating A 200 nuclei,

Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 49 , pp. 105102(1-14).

12. M. Guttormsen, B. Jurado, J. Wilson, M. Aiche, L. Bernstein, Q. Ducasse et al, 2013, Constant-temperature level densities in the quasi-continuum of Th and U isotopes, *Physical Review C*, 88, 024307.
13. L. T. Q. Huong, T. D. Xuan, N. N. Anh and N. Q. Hung, Re-investigation of heat capacity and paring phase transition in hot $^{93\text{-}98}Mo$ nuclei, *Eur. Phys. J.*, A 57.
14. M. Guttormsen, A. Bagheri, R. Chankova, J. Rekstad, S. Siem, A. Schiller et al.,2003, Thermal properties and radiative strengths in $^{160,161,162}Dy$, *Physical Review C*, 68, 064306.
15. H. Nyhus, S. Siem, M. Guttormsen, A. Larsen, A. Burger, N. Syed et al., 2012, Level density and thermodynamic properties of dysprosium isotopes, *Physical Review C*, 58, 014323.
16. Algin E. et al., 2008, Thermodynamic properties of $^{56-57}Fe$, *Physical Review C*, 78, 054321.
17. Schiller A., Algin E. and et al., 2003, level densities in $^{56-57}Fe$ and $^{96-97}Mo$, *Physical Review C*, 68, 054326.
18. Larsen A.C, Guttormsen M. and et al., 2017, Low-energy enhancement and fluctuations of γ-ray strength functions in $^{56-57}Fe$: test of the Brink-Axel hypothesis, *Physical Review C*, 44, 064005.
19. T. Egidy and D. Bucurescu, 2005, Systematics of nuclear level density parameters, *Physical Review C*, 72, 044311.
20. 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 $^{93-98}Mo$ nuclei, *The European Physical Journal A*, 57, 109.
21. 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.

22. Ericson T., 1960, The statistical model and nuclear level densities, *Advances in Physics*, 9(36), pp. 425-511.
23. 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.
24. Kopecky J. and Chrien R.E., 1987, Observation of the M1 giant resonance by resonance averaging in $^{1}96Pd$, *Nuclear Physics A*, 468(2), pp.285-300.
25. Alhassid Y., Liu S. and Nakada H., 1999, Particle-number reprojection in the shell model Monte Carlo method: Application to nuclear level densities, *Physical Review Letters*, 83(21), pp. 4265-4268.
26. 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).
27. 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).
28. 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).
29. Demetriou P. and Goriely S., 2001, Microscopic nuclear level densities for practical applications, *Nuclear Physics A*, 695(1-4), pp. 95-108.
30. 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).
31. Goriely S. and Khan E., 2002, Large-scale QRPA calculation of E1-strength and its impact on the neutron capture cross section, *Nuclear Physics A*, 706(1-2), pp. 217-232.

32. 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.

33. Lê Thị Quỳnh Hương, 2019, *Nghiên cứu vi mô mật độ mức toàn phần của các hạt nhân $^{60-63}$Ni, $^{160-163}$Dy và $^{170-172}$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.

34. Greiner W. and Maruhn J.A., 1996, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, *Nuclear Models.*

35. Moretto L.G., 1972, Statistical description of a paired nucleus with the inclusion of angular momentum, *Nuclear Physics A*, 185(1), pp. 145-165.

36. 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.

37. Junghans A.R., et al., 1998, Projectile-fragment yields as a probe for the collective enhancement in the nuclear level density, *Nuclear Physics A*, 629(3-4), pp. 635-655.

38. Nasrabadi M.N. and Sepiani M., 2014, Study of Collective Rotational Enhancement Factors for Nuclear Level Densities Using the Microscopic Theory of Interacting Fermions, *Acta Physica Polonica B*, 45(no.9), pp. 1865-1874.

39. Ring P. and Schuck P., 1980, The nuclear many-body problem, *Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.*

40. Dang N.D.and Arima A., 2003, Thermal quasiparticle correlations and continuum coupling in nuclei far from stability, *Physical Review C*, 67(1), pp. 014304 (1-14).

41. Dang N.D.and Zelevinsky V., 2001, Improved treatment of ground-

state correlations: Modified random phase approximation, *Physical Review C*, 64(6), pp. 064319-064319.

42. Frauendorf S., Kuzmenko N.K., Mikhajlov V.M. and Sheikh J.A., 2003, Temperature-induced pair correlations in clusters and nuclei, *Physical Review B*, 68(2), pp. 024518 (1-4).

43. Goodman A.L., 1984, Statistical fluctuations in the i13/2 model, *Physical Review C*, 29(5), pp. 1887-1896.

44. Zelevinsky V., Brown B.A., Frazier N. and Horoi M., 1996, The nuclear shell model as a testing ground for many-body quantum chaos, *Physics reports*, 276(2-3), pp. 85-176.

45. Hilaire S., Delaroche J.P. and Girod M., 2001, Combinatorial nuclear level densities based on the Gogny nucleon-nucleon effective interaction, *European Physical Journal A*, 12(2), pp. 169-184.

46. Bohr A. and Mottelson B.R., 1975, Vol. I: Single Particle Motion, Benjamin, New York, *Nuclear Structure*.

47. Brink D.M. and Broglia R.A., 2005, *Nuclear superfluidity: pairing in finite systems, Cambridge University Press*.

48. Behkami A.N. and Huizenga J.R., 1993, Comparison of experimental level densities and spin cutoff factors with microscopic theory for nuclei near A=60, *Nuclear Physics A*, 217(1), pp. 78-92.

49. Lang G.H., Johnson C.W.,Koonin S.E.,and Ormand W.E. , 1993, Monte Carlo evaluation of path integrals for the nuclear shell model, *Physical Review C*, 48(4), pp. 1518 – 1545.

50. 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).

51. Nakada H. and Alhassid Y., 1997, Total and Parity-Projected Level Densities of Iron-Region Nuclei in the Auxiliary Fields Monte Carlo Shell Model, *Physical Review Letters*, 79(no.16), pp. 2939-2942.

52. Johnson C.W., Koonin S.E., Lang G.H. and Ormand W.E., 1992, Monte Carlo methods for the nuclear shell model, *Physical Review letters*, 69(22), pp. 3157-3160.

53. Voinov A.V., Oginni B.M., Grimes S.M., Brune C.R., Guttormsen M., Larsen A.C., Masey T.N., Schiller A. and Siem S., 2009, Nuclear excita-tions at constant temperature, *Physical Review C*, 79, pp.031301(R)(1-4).

54. Dang N.D., Hung N.Q. and Huong L.T.Q., 2017, Testing the constant-temperature approach for the nuclear level density, *Physical Review C*, 96(5), pp. 054321 (1-10).

55. H.A. Bethe, 1936, An attempt to calculate the number of energy levels of a heavy nucleus, *Physical Review C*, 50, 332.

56. Griffiths D.J., 2005, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education, United State of America.

57. 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.

58. Lynn J.E., 1968, *The Theory of Neutron Resonance Reactions*, Clarendon Press, Oxford.

59. Malyshev A.V., 1969, *Level Density and Structure of Atomic Nuclei*, Atomizdat, Moscow, USSR.

60. Nguyen Minh Hien, 2023, *Khảo sát các đại lượng nhiệt động học của một số hạt nhân nặng kích thích*, Luận văn Thạc sĩ, Viện hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

61. H. Utsunomiya et al., 2013, Photoneutron cross sections for Mo isotopes: A step toward a unified understanding of (γ, η) and (η, γ) reactions, *Physical Review C*, 88, 01580.

62. Belgya T., et al. (1998), Reference Input Parameter Library (RIPL-1), [online] Available at: https://www-nds.iaea.org/RIP-1/ [Release date

15 May 1998].

63. Belgya T., et al. (2003), Reference Input Parameter Library (RIPL-2), [online] Available at: https://www-nds.iaea.org/RIP-2/ [Release date April 20 2003].

64. 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.

65. 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.

66. 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.

67. A.V. Ignatyuk, K.K. Istekov, G.N. Smirenkin, 2019, *Soviet journal of nuclear physics*, 29, 450.

68. T.V. Egidy, D. Bucurescu, ibid. 2006, Physical Review C, 73, 049901.

69. A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nuclear Structure: Volume 1*, 471, 1969, Benjamin, New York.

70. Sumaryada T. and Volya A., 2007, Thermodynamics of pairing in mesoscopic systems, *Physical Review C*, 76(2), pp. 024319 (1-18).

71. 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).

72. 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.

73. 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.

74. A. Schiller et al., 2001, Critical temperature for quenching of pair correlations, *Physical Review C*, 63, 021306.

75. K. Kaneko et al., 2006, Breaking of nucleon Cooper pairs at finite temperature in $^{93-98}Mo$, *Physical Review C*, 74, 024325.

76. Eriksen T.K., Nyhus H.T. et al., 2014, Pygmy resonance and low-energy enhancement in the γ-ray strength functions of Pd isotopes, *Physical Review C*, 90, 044311.

77. Agvaanluvsan U.,Larsen A.C., et al., 2009, Evidence for the pair-breaking process in $^{116,117}Sn$, *Physical Review C*, 79, 014320.

78. Toft H.K., et al., 2010, Level densities and γ-ray strength functions in Sn isotopes, *Physical Review C*, 81, 064311.

79. Belgya T., et al. (2020), Reference Input Parameter Library (RIPL-3), [online] Available at: http://www-nds.iaea.org/RIPL-3/[Accesses Septemper 2020].

80. Le Thi Quynh Huong, Tran Dong Xuan, Nguyen Ngoc Anh, Nguyen Minh Hien, Tran Cong Duy and Nguyen Quang Hung, 2023, Updated heat capacities of $^{161-164}$Dy nuclei, *Physics Review C*, Vol. 33, pp. 133-142.

Communications in Physics, Vol. 33, No. 2 (2023), pp. 133-142
DOI: https://doi.org/10.15625/0868-3166/17582

Updated heat capacities of $^{161-164}$Dy nuclei

Le Thi Quynh Huong[1,†], **Tran Dong Xuan**[2,3], **Nguyen Ngoc Anh**[4,5], **Nguyen Minh Hien**[6], **Tran Cong Duy**[6] **and Nguyen Quang Hung**[2,3,‡]

[1]*Department of Natural Science, University of Khanh Hoa, Nha Trang City, Khanh Hoa Province, Vietnam*

[2]*Institute of Fundamental and Applied Sciences, Duy Tan University, Ho Chi Minh City 700000, Vietnam*

[3]*Faculty of Natural Sciences, Duy Tan University, Da Nang City 550000, Vietnam*

[4]*Faculty of Fundamental Science, PHENIKAA University, Yen Nghia, Ha Dong, Hanoi 12116, Vietnam*

[5]*PHENIKAA Research and Technology Institute (PRATI), A&A Green Phoenix Group JSC, No.167 Hoang Ngan, Trung Hoa, Cau Giay, Hanoi 11313, Vietnam*

[6]*Graduate University of Sciences and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, 18 Hoang Quoc Viet, Cau Giay, Hanoi, Vietnam*

E-mail: [†]lethiquynhhuong@ukh.edu.vn; [‡]nguyenquanghung5@duytan.edu.vn

Received 13 October 2022; *Accepted for publication 15 December 2022*; *Published 23 April 2023*

Abstract. *This work presents the updated heat capacities of $^{161-164}$Dy nuclei in the nuclear temperature region from 0 to 1 MeV. The updated heat capacities are obtained within the canonical ensemble method making use of the most recent and recommended experimental nuclear level density (NLD) data together with those calculated within the back-shifted Fermi gas (BSFG) model with energy-dependent parameters. By comparing the updated heat capacities with the un-updated ones, which are obtained by using the old experimental NLD data and the BSFG with energy-independent parameters, we found that the updated and un-updated heat capacities are almost identical at low temperature, but differ from each others at high temperature. This discrepancy can be interpreted by the damping of nuclear shell structure with increasing the excitation energy. Besides, we observe that the S-shape in the updated heat capacities is much more pronounced in even-even Dy isotopes than in even-odd ones, whereas the un-updated heat capacities do not clearly exhibit this S-shape. Therefore, the updated heat capacities should provide a more convincing evidence for the signature of pairing phase transition in nuclear systems.*

Keywords: nuclear level density; back-shifted Fermi-gas model; heat capacity; $^{161-164}$Dy nuclei.
Classification numbers: 21.10.Ma; 75.40.Cx.

©2023 Vietnam Academy of Science and Technology

1. Introduction

The heat capacity of finite Fermi systems, such as nuclei, has gained many attentions because of the probable connection between its shape and the quenching of pairing correlations [1,2]. The experimental or empirical and/or heat capacity data are also crucial for testing different theoretical nuclear models including the shell-model Monte-Carlo [3] and finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov [4], ect. In macroscopic systems as neutron stars, pairing correlations abruptly quench at a critical temperature T_C, resulting in a discontinuity in the heat capacity [5]. However, in finite nuclear systems, paring correlations do not quench at T_C but monotonously decrease with increasing $T > T_C$, due to the strong statistical and thermal fluctuations beyond the mean field [6]. This phenomenon might be indicated as a local change in the slope of the heat capacity curve, which is commonly referred to the *S*-shape of the heat capacity [2, 4, 7–10].

Practically, the heat capacity of a given nucleus is a thermodynamic quantity, which can be determined within both canonical and micro-canonical ensemble methods, providing that the experimental nuclear level density (NLD) of the nucleus, at least in some excitation energy region, is known. The micro-canonical ensemble (MCE) method seems to be incompatible with systems of a small number of particles as it quite often provides non-physical values, such as negative temperature (see e.g., Fig. 8 of Ref. [11] and Fig. 9 of Ref. [12]), when being applied to calculate thermodynamic quantities of nuclei. This never happens in the canonical ensemble (CE) method, hence it is a more judicious approach to study the thermodynamic quantities of nuclei. Nevertheless, the calculation of the heat capacity using the CE method is still imperfect because it requires to know the experimental NLD over the entire excitation energy range, namely from 0 to a few hundred of MeV. Unfortunately, the experimental NLD data are only available in the low excitation-energy region, frequently below the neutron binding energy B_n, due to the limitation of experimental technology. To overcome this drawback, one must use the theoretical NLD whenever the experimental NLD data is missing. The back-shifted Fermi gas (BSFG) NLD model, which is the most widely used phenomenological model of NLD, is often employed for this purpose [11, 13]. Fitting the BSFG formula to the experimental NLD data gives the most reliable values for its free parameters.

It is also obvious that any update in the experimental NLD data should result in a change in the values of the BSFG free parameters, thus altering the calculated heat capacity. For instance, the heat capacities of $^{93-98}$Mo isotopes have been re-investigated using the newly updated and recommended NLD data of $^{93-98}$Mo nuclei collected in 2013 [13]. It was noticed that the updated heat capacities significantly differ from those calculated using the old NLD data measured in 2003 and 2006. As a result, Ref. [13] recommended that *"to obtain the correct heat capacity and associated pairing phase transition in excited nuclei, one should use the correct NLD data and the best fitted BSFG NLD in the entire region where the experimental data are available"*.

In 2003 and 2012, the Oslo group carried out experiments employing the (^{3}He,^{3}He$'$) reaction and deduced the experimental NLDs in the energy region below B_n for $^{161-162}$Dy [14] and $^{163-164}$Dy [15] nuclei. By using the BSFG model in conjunction with these measured data, they examined the thermodynamic quantities, including the heat capacity, of $^{161-164}$Dy isotopes. However, they decided to employ the energy-independent parameter version of the BSFG model, which does not account for the damping of the shell effects at high-excitation energies. Indeed, systematic works on the BSFG model have recommended the use of the BSFG version

with energy-dependent parameters for the high excitation-energy region because it includes the damping of shell effects with increasing the excitation energy [16]. In addition, an additional parameter, η, was introduced in order to rescale the BSFG NLD to match the experimental average level spacings of the neutron resonance (D_0 data). These parameters are less trustworthy than those obtained from fitting the model to the specific experimental NLD data of each isotope. For example, the Oslo group calculated the global level density parameter by using a systematic equation in which the level density parameters of isobars are the same, i.e., $a = 0.21A^{0.87}$ with A being the mass number, but Fig. 2 of Ref. [16] demonstrates that the level density parameters of isobars can differ from each others up to 25%, and even more in some specific cases. In 2018, the Oslo group re-analyzed their previously conducted experiment and updated the experimental NLDs of $^{161-164}$Dy nuclei [17]. However, the heat capacities of these Dy isotopes have not yet been reexamined.

In the present work, we calculate the heat capacities of $^{161-164}$Dy nuclei using the most recent recommended NLD data in Ref. [17] in combination with the BSFG NLD model with energy-dependent parameters. The updated heat capacities will be compared with those reported in 2003 and 2012 in Refs. [14, 15].

2. Heat capacity and back-shifted Fermi gas nuclear level density formalism

Within the CE method, the heat capacity C can be derived once the partition function Z as a function of temperature T is known. Explicitly, the heat capacity is simply the first derivative of the total thermal energy $\overline{E}$ with respect to T, namely $C = \partial\overline{E}/\partial T$, where $\overline{E} = F + TS$ with F and S being the free energy and entropy. The latter can be directly calculated from the partition function Z

$$F = -T\ln Z,\ S = -\partial F/\partial T\ , \tag{1}$$

with Z being determined based on the inverse Laplace transform of the total NLD as [18]

$$Z(T) = \sum_{E_i=0}^{\infty} \rho(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i\ , \tag{2}$$

where $\rho(E_i)$ is the NLD at an excitation energy E_i and δE_i is the energy interval. In practice, for the low temperature below about 1.0 MeV, one can determine $Z(T)$ by summing $\rho(E_i)e^{-E_i/T}\delta E_i$ with $E_i = 0$ to about 100 MeV instead of infinity as given in Eq. (2) because $\rho(E_i)e^{-E_i/T}\delta E_i$ is negligible when $E_i \gg T$. As mentioned in the Introduction, due to the limitation of experimental NLD data, to calculate the partition function, we use the experimental data if available, otherwise the BSFG NLDs are used. Thus, Eq. (2) can be re-written as

$$Z(T) = \sum_{E_i=0}^{E_i \le E_{max}} \rho_{\rm exp}(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i + \sum_{E_i > E_{max}}^{E_i = 100\ \rm MeV} \rho_{\rm BSFG}(E_i) e^{-E_i/T} \delta E_i\ ,$$

where $\rho_{\rm exp}$ and $\rho_{\rm BSFG}$ stand, respectively, for the experimental and BSFG NLDs, whereas E_{max} is the maximum energy that the experimental NLD data are able to measure. Specifically, the values of E_{max} are 5.420, 7.100, 5.300, and 6.860 MeV for $^{161-164}$Dy, respectively.

In 1965, Gilbert and Cameron [19] introduced the BSFG model with parameters that are independent of the excitation energy. However, later microscopic studies of the NLD have indicated that the level density parameter a should depend on the excitation energy [20, 21], leading

consequently to the concept of the BSFG with energy-dependent parameters. The values of free parameters in both BSFG versions can be obtained by fitting the model to the experimental data or by applying global equations derived from systematic works. The latter are preferred only once the experimental NLD data are absent. The formalism of the energy-independent parameter BSFG model was described in detail in e.g, Refs. [14, 15], therefore it will not be repeated here. We should recall that the values of free parameters of the BSFG model with energy-independent parameters, that were used to study the heat capacity of $^{161-164}$Dy nuclei in Refs. [14, 15], were determined from global equations instead of fitting to the experimental NLD data. In order to reproduce the BSFG NLD with experimental D_0 data given in RIPL-3 database [22], the authors of Refs. [14, 15] also need to scale (by introducing an additional parameter η) their BSFG NLDs by a factor of 1.19, 0.94, 0.52, and 0.56 for $^{161-164}$Dy, respectively. In the present work, we calculate the heat capacity using the BSFG model with energy-dependent parameters of the form as [19]

$$\rho_{\mathrm{BSFG}}(E) = \frac{\exp\left[2\sqrt{a(E-E_1)}\right]}{12\sqrt{2}\sigma a^{1/4}(E-E_1)^{5/4}} \,, \tag{3}$$

where a, E_1, and σ are the level density, back-shifted energy, and spin cut-off parameters, respectively. This BSFG formalism takes into account the damping of the shell effect with increasing the excitation energy, thus its level density parameter a depends on the excitation energy as follows [20]

$$a(E) = \widetilde{a}\left\{1 + \frac{\delta W}{E-E_1}[1 - e^{-\gamma(E-E_1)}]\right\} \,, \tag{4}$$

where $\widetilde{a}$ is the asymptotic level density and $\delta W\{Z,A\}$ is the shell-correction energy defined as

$$\delta W = M_{\mathrm{exp}} - M_{\mathrm{LD}} \,, \tag{5}$$

with M_{exp} and M_{LD} being the experimental and theoretical masses, respectively. Theoretical mass M_{LD} is often calculated by using the macroscopic liquid-drop formula. The damping parameter γ in Eq. (4) determines how rapidly a approaches $\widetilde{a}$. In the present work, we take the values of δW from RIPL-3 database [22], and consider $\widetilde{a}$, E_1, and γ to be free parameters, whose values are determined by fitting the BSFG NLD to the experimental NLD data given in Ref. [17] for $^{161-164}$Dy. The spin cut-off parameter σ is determined using the following equation [19]

$$\sigma^2 = 0.0888A^{2/3}\sqrt{a(E-E_1)} \,. \tag{6}$$

3. Numerical results and discussion

Figure 1 shows the experimental NLD data of $^{161-164}$Dy taken from Ref. [17] along with the fitted BSFG NLDs obtained within the present work. As can be seen, the BSFG NLDs well describe the experimental data for the excitation energy above 2 MeV for all investigated nuclei. Below 2 MeV of excitation energy, the BSFG fails to reproduce the low-energy part of the experimental NLDs. This is understandable because the BSFG model assumes that the NLD is continuous (see Eq. (3)) in the low-energy region, but the NLD data in this energy region often exhibit a characteristic step-like structure, i.e., an abrupt change in the slope of the NLD at a certain energy could be a result of the breaking of the first nucleon pair. This observed step-like structure is more pronounced in the even-even (^{162,164}Dy) than in the even-odd (^{161,163}Dy) nuclei because the latter already have an unpaired nucleon in their stable state, whereas the former must

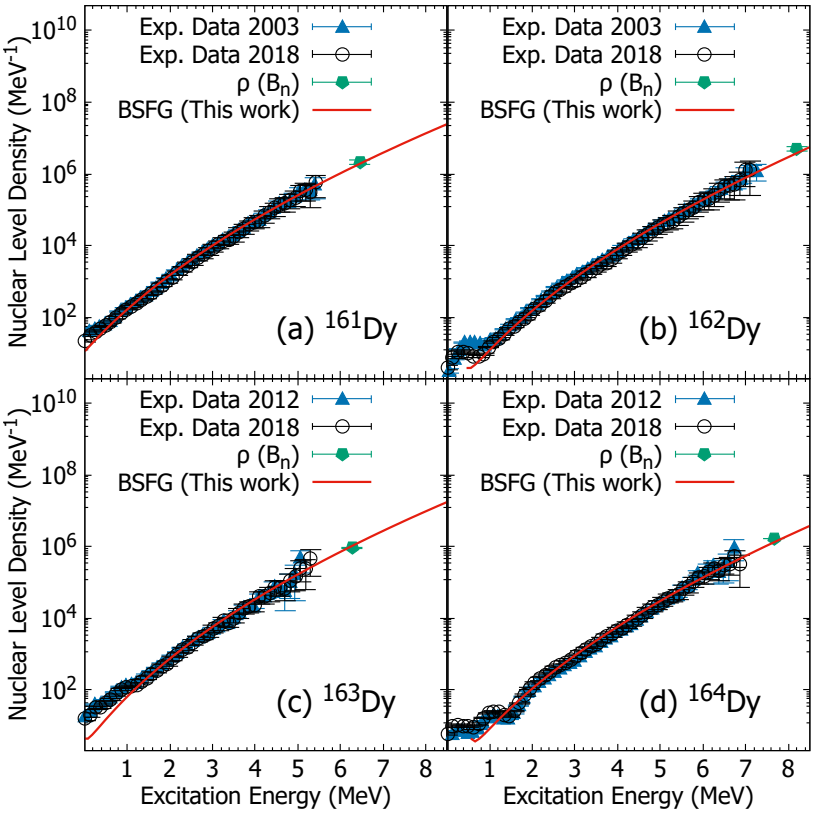


Fig. 1. Comparison between the most recent and recommended experimental NLD data of $^{161-164}$Dy given in Ref. [17] and the corresponding fitted BSFG NLDs obtained within the present work. The level densities at the neutron binding energy $\rho(B_n)$ estimated from the experimental D_0 data given in RIPL-3 database [22] are shown to evaluate the goodness of the fitting. Old experimental NLD data taken from Refs. [14, 15] are also plotted.

be excited to a specific energy in order to break the first nucleon pair. As the excitation energy increases, the breaking of consecutive nucleon pairs occurs, resulting in a high number of unpaired nucleons.The step-like structure is, thus, smoothed out and no longer observed. Figure 1 also indicates that the present BSFG well reproduces the experimental D_0 data retrieved from RIPL-3 database [22] since all the BSFG lines cross their corresponding $\rho(B_n)$ data points. The best fitted values of free parameters obtained within the present BSFG model are listed in Table 1.

Figure 2 compares the updated heat capacities of $^{161-164}$Dy calculated using the most recent and recommended experimental NLD data given in Ref. [17] and the BSFG NLDs, whose parameters values are presented in Table 1, with the un-updated ones published in Refs. [14, 15]. As stated in Sections **1** and **2**, the un-updated heat capacities are calculated using the old NLD data given in Refs. [14, 15] and the BSFG with energy-independent parameters. It is noted that the un-updated heat capacities of ^{161,163,164}Dy are directly extracted from figures presented in Refs. [14, 15], whereas the heat capacity of ^{162}Dy is calculated using the experimental NLD data

Table 1. The values of free parameters obtained by fitting the BSFG model with energy-dependent parameters to the experimental NLD data of $^{161-164}$Dy given in Ref. [17]. The values of δW and D_0 are taken from RIPL-3 database [22].

Nucleus	δW (MeV)	γ (MeV^{-1})	$\tilde{a}$ (MeV^{-1})	E_1 (MeV)	D_0 (eV)
^{161}Dy	2.76808	0.06842	15.23090	-0.53358	27.0 ± 5.0
^{162}Dy	2.46351	0.01526	16.26649	0.36851	2.4 ± 0.2
^{163}Dy	2.16632	0.11511	15.27796	-0.09472	62.0 ± 5.0
^{164}Dy	2.01707	0.05396	15.16655	0.49798	6.8 ± 0.6

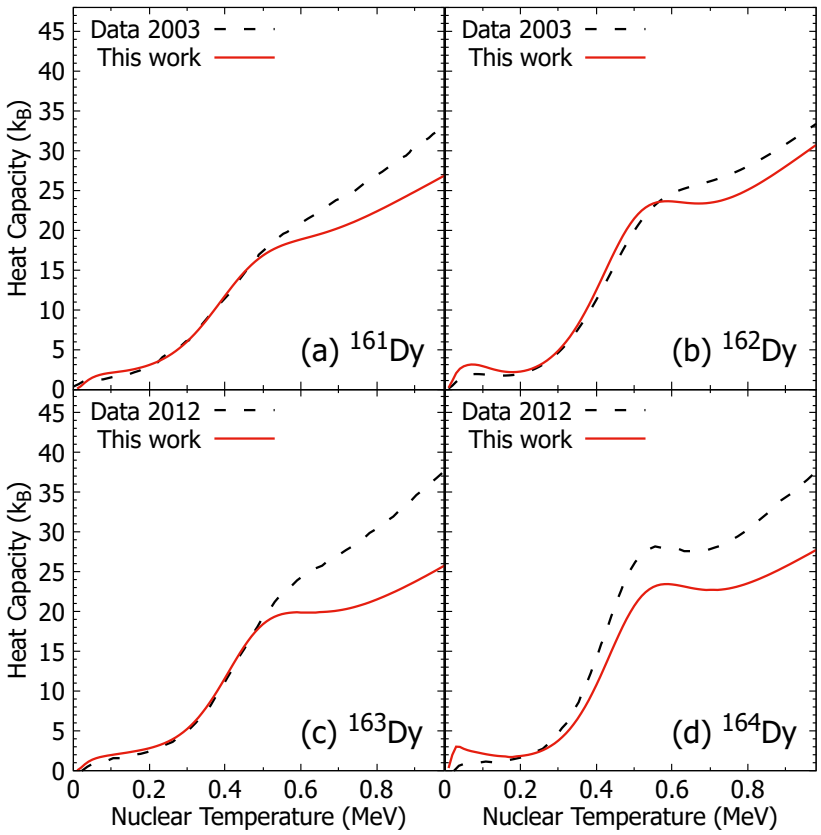


Fig. 2. Comparison between the updated heat capacities determined within the present work with the un-updated ones presented in Refs. [14, 15]. The un-updated heat capacity of ^{162}Dy was not presented in any figure of Ref. [14], so we have to re-calculate it (please see text for more detail).

and the BSFG with energy-independent parameter given in Ref. [14]. It can be seen in Fig. 2 that the updated and un-updated heat capacities are almost the same in the temperature regions below 0.5 MeV for $^{161-163}$Dy and 0.3 MeV for ^{164}Dy. This result is expectable since the experimental NLD data in the low-energy region are often obtained by counting the number of discrete

levels in the experimental level scheme at low energy. For instance, one can see in Fig. 1 that the experimental NLD data in the low-energy region are almost identical for all the 2003, 2012, and 2018 datasets. The difference between the updated and un-updated heat capacities is observed at higher temperatures. Specifically, the updated heat capacities of four investigated nuclei are smaller and less steep than the un-updated ones. This discrepancy comes from the differences between the BSFG NLDs used. It is clear to see in Fig. 3 that the BSFG NLDs used to calculate

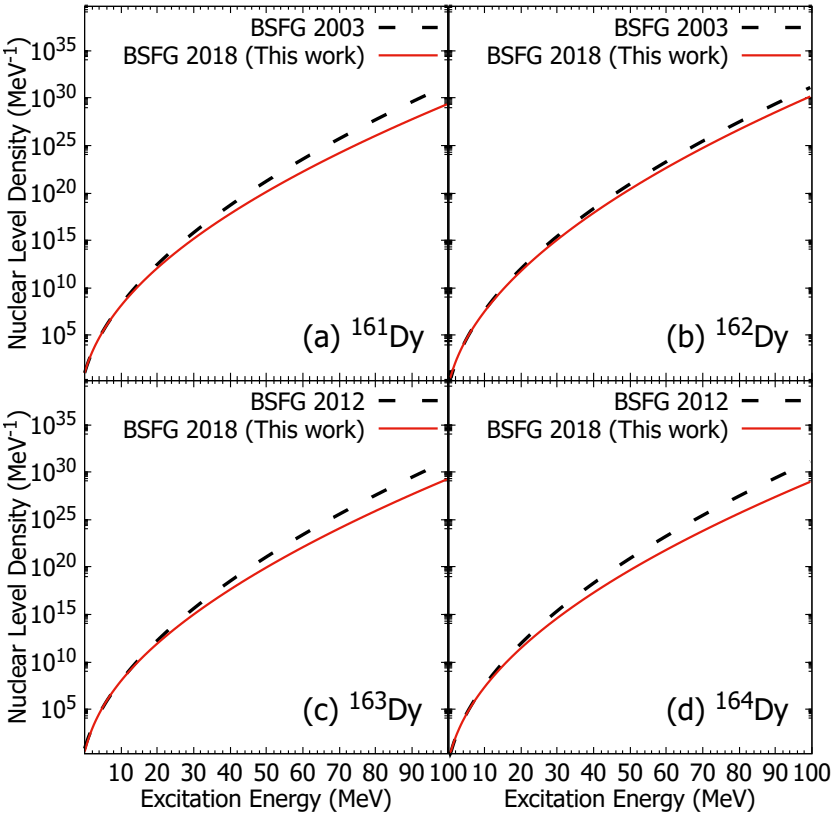


Fig. 3. Comparison between the BSFG NLDs in the excitation-energy region from 0 to 100 MeV used to calculate the updated and un-updated heat capacities in Fig. 2.

the updated heat capacities (denoted as BSFG 2018) are lower than those used to determine the un-updated heat capacities (denoted as BSFG 2003 and BSFG 2012) in the high-energy region, while they are practically the same in the low-energy region. The discrepancy between the BSFG 2003 and BSFG 2018 NLDs of ^{162}Dy (Fig. 3b) is smallest, which results in the small difference between the updated and un-updated heat capacities of this nucleus (Fig. 2b). For the remaining Dy isotopes, the differences between the BSFG 2018 and 2003/2012 NLDs are significant (Figs. 3a, c, and d), leading to a large discrepancy between their updated and un-updated heat capacities (Figs. 2a, c, and d). It is worthwhile to recall that the BSFG NLDs, which are used to compute the updated heat capacities, take into account the damping of the shell effect with increasing the excitation energy (see e.g., Eq. (4)). This damping is not included in the BSFG NLDs that are

used to calculate the un-updated heat capacities. Therefore, the difference between the updated and un-updated heat capacities in the high-temperature region can be interpreted by the damping of nuclear shell structure. To explicitly understand the influence of nuclear shell effect on the heat capacity, we show in Fig. 4 the heat capacities of ^{161}Dy obtained by using different values of shell correction δW within a range of 0 to 10 MeV. This figure clearly indicates that the shell correction can significantly alter the shape of the calculated heat capacities, which consequently lead to different physical interpretations of the associated pairing phase transition. Thus, one should use NLD models that take into account the nuclear shell effect to accurately study the nuclear heat capacity.

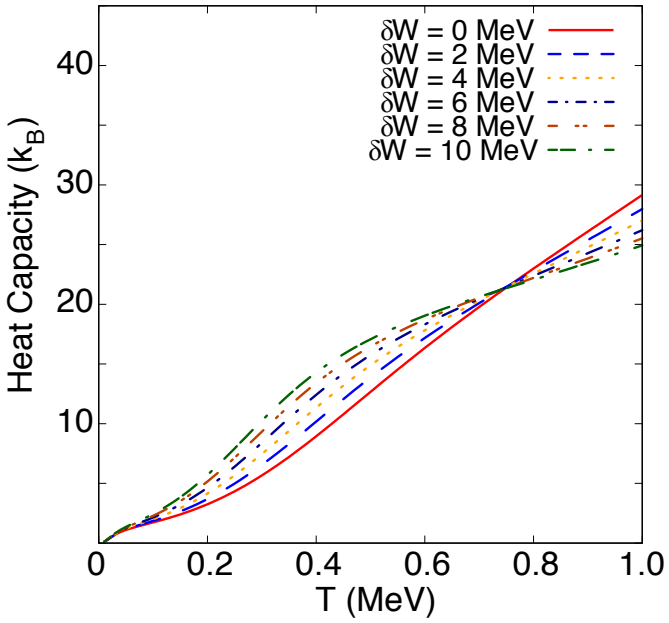


Fig. 4. The BSFG heat capacities of ^{161}Dy obtained by using different shell corrections δW.

In general, the updated heat capacities reveal the same physical information as the un-updated ones, that is, all investigated Dy isotopes exhibit an *S*-shaped heat capacity and this *S*-shape is more pronounced in even-even than odd-even isotopes. For a better visualization, we re-plot the heat capacities that are already given in Fig. 2 with a different arrangement in Fig. 5.

One can easily see in Fig. 5 that the *S*-shapes in the updated heat capacities of even-even ^{162,164}Dy are more pronounced than those of odd-even ^{161,163}Dy (Fig. 5b), while *S*-shapes in the un-updated heat capacities of ^{162}Dy and ^{163}Dy are almost the same (Fig. 5a). The fact that the even-even nuclei, which contain strong pairing correlation, always exhibit stronger *S*-shape than odd-even and odd-odd ones, which include weaker pairing correlation, the *S*-shape predicted by the updated heat capacities should reflect the more reliable physics than that predicted by the un-updated heat capacities. In other words, we can consider the updated heat capacities a more confident proof for predicting the pairing phase transition in finite systems.

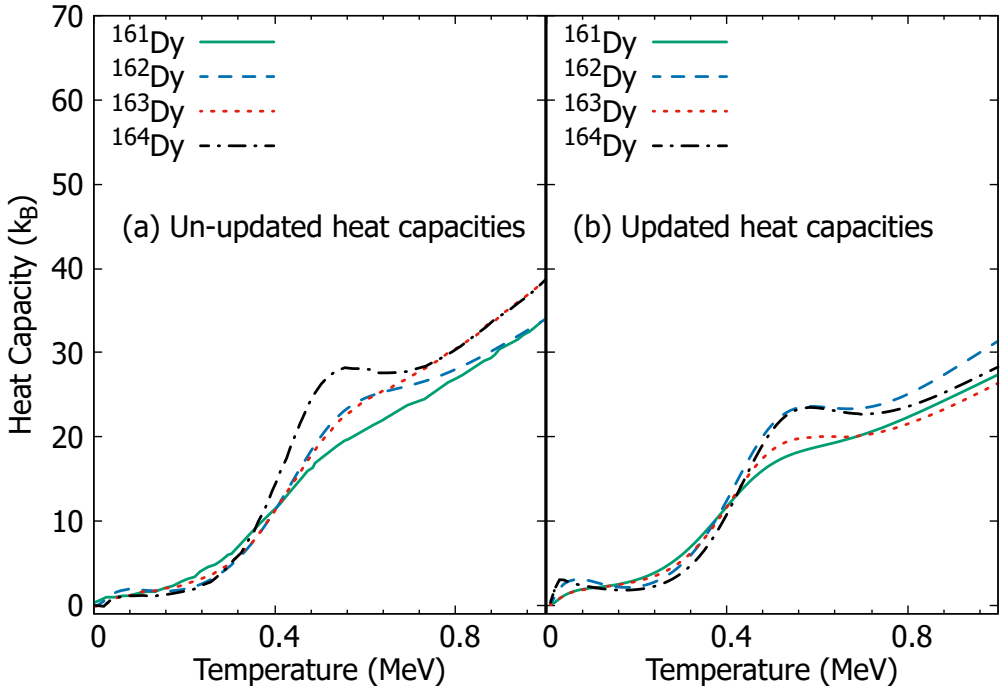


Fig. 5. Comparison of the updated and un-updated heat capacities of $^{161-164}$Dy isotopes.

4. Conclusions

In the present work, the heat capacities of $^{161-164}$Dy have been determined using the most recent and recommended experimental NLD data together with the theoretical NLDs obtained within the BSFG model with energy-dependent parameters. The obtained results, called the updated heat capacities, have been compared with the un-updated heat capacities determined previously using the old experimental NLD data and the BSFG model with energy-independent parameters. It is shown that the updated and un-updated heat capacities are almost the same in the low-temperature region ($T \lesssim 0.4$ MeV). In the high-temperature region, the updated heat capacities are smaller and less steep than the un-updated ones. This can be explained by the damping of the shell effect in nucleus with increasing the excitation energy, which is employed in the BSFG with energy-dependent parameters. In general, the updated heat capacities confirm and provide more convincing evidences on the physical information that the *S*-shape in the heat capacity of even-even nuclei is more pronounced than that of even-odd or odd-odd ones.

Acknowledgment

This work is funded by the National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) of Vietnam under Grant No. 103.04-2019.371. The authors also wish to thank the University of Khanh Hoa for supporting through the research project No. KHTN 21.02.

Conflict of interest

The authors have no conflict of interest to declare.

References

[1] R. Rossignoli, N. Canosa and P. Ring, *Thermal and quantal fluctuations for fixed particle number in finite superfluid systems*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1853.

[2] S. Liu and Y. Alhassid, *Signature of a pairing transition in the heat capacity of finite nuclei*, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 022501.

[3] Y. Alhassid, G. F. Bertsch and L. Fang, *Nuclear level statistics: Extending shell model theory to higher temperatures*, Phys. Rev. C **68** (2003) 044322.

[4] J. Egido, L. Robledo and V. Martin, *Behavior of shell effects with the excitation energy in atomic nuclei*, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 26.

[5] A. Belic', D. Dean and M. Hjorth-Jensen, *Pairing correlations and transitions in nuclear systems*, .

[6] N. Q. Hung, N. D. Dang and L. Moretto, *Pairing in excited nuclei: a review*, Rep. Prog. Phys. **82** .

[7] A. Schiller, A. Bjerve, M. Guttormsen, M. Hjorth-Jensen, F. Ingebretsen, E. Melby *et al.*, *Critical temperature for quenching of pair correlations*, Phys. Rev. C **63** .

[8] R. Chankova, A. Schiller, U. Agvaanluvsan, E. Algin, L. Bernstein, M. Guttormsen *et al.*, *Level densities and thermodynamical quantities of heated $^{93-98}$Mo isotopes*, Phys. Rev. C **73** (2006) 034311.

[9] B. Dey, D. Pandit, S. Bhattacharya, N. Q. Hung, N. D. Dang, L. T. Tan *et al.*, *Level density and thermodynamics in the hot rotating ^{96}Tc nucleus*, Phys. Rev. C **96** (2017) 054326.

[10] B. Dey, N. Q. Hung, D. Pandit, S. Bhattacharya, N. D. Dang, L. T. Q. Huong *et al.*, *S-shaped heat capacity in an odd-odd deformed nucleus*, Phys. Lett. B **789** (2019) 634.

[11] T. D. Xuan, N. Q. Hung, V. D. Cong, N. N. Anh and L. T. Q. Huong, *Investigation of empirical heat capacity in hot-rotating A$\sim$ 200 nuclei*, Journal of Physics G: Nucl. Part. Phys. **49** (2022) 105102.

[12] M. Guttormsen, B. Jurado, J. Wilson, M. Aiche, L. Bernstein, Q. Ducasse *et al.*, *Constant-temperature level densities in the quasicontinuum of Th and U isotopes*, Phys. Rev. C **88** (2013) 024307.

[13] L. T. Q. Huong, T. D. Xuan, N. N. Anh and N. Q. Hung, *Re-investigation of heat capacity and paring phase transition in hot $^{93-98}$Mo nuclei*, Eur. Phys. J. A **57** (2021) 1.

[14] M. Guttormsen, A. Bagheri, R. Chankova, J. Rekstad, S. Siem, A. Schiller *et al.*, *Thermal properties and radiative strengths in ^{160,161,162}Dy*, Phys. Rev. C **68** (2003) 064306.

[15] H. Nyhus, S. Siem, M. Guttormsen, A. Larsen, A. Bürger, N. Syed *et al.*, *Level density and thermodynamic properties of dysprosium isotopes*, Phys. Rev. C **85** (2012) 014323.

[16] T. Egidy and D. Bucurescu, *Systematics of nuclear level density parameters*, Phys. Rev. C **72** (2005) 044311.

[17] T. Renstrøm, H. Utsunomiya, H. Nyhus, A. Larsen, M. Guttormsen, G. Tveten *et al.*, *Verification of detailed balance for γ absorption and emission in Dy isotopes*, Phys. Rev. C **98** (2018) 054310.

[18] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear Structure: Volume 1*. Benjamin, New York, Jan, 1969.

[19] A. Gilbert and A. Cameron, *A composite nuclear-level density formula with shell corrections*, Can. J. Phys. **43** (1965) 1446.

[20] A. Ignatyuk, G. Smirenkin and A. Tishin, *Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter*, Yad. Fiz. **21** (1975) 485.

[21] A. Ignatyuk, K. Istekov and G. Smirenkin, *Role of the collective effects in a systematics of nuclear level density*, Yad. Fiz. **29** (1979) 875.

[22] R. Capote, M. Herman, P. Oblozinsky, P. Young, S. Goriely, T. Belgya *et al.*, "Reference input parameter library (ripl-3)." `https://www-nds.iaea.org/RIPL-3/`.

BÁO CÁO HỘI NGHỊ

Link: https://iop.vast.vn/vctp/46/program.php?t=1&n=21

Programme

P.21 -- Poster, VCTP-46

Date: Tuesday, 5 October 2021

Time: 08:30 - 10:00

Investigation of thermodynamic quantities in some excited nuclei

Le Thi Quynh Huong (1), Nguyen Minh Hien (2), Tran Cong Duy (2), Nguyen Quang Hung (3)

(1) University of Khanh Hoa, (2) Graduate University of Sciences and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, (3) Institute of Fundamental and Applied Sciences, Duy Tan University

The thermodynamic quantities in some excited nuclei are investigated by using extrapolating the experimental level densities. The latest updated nuclear level density (NLD) data below the neutron binding energy B_n is combined with the back-shifted Fermi-gas (BSFG) model for the energy region above B_n. The results obtained indicate that the heat capacities of even nuclei show a more pronounced S-shape than those in odd isotopes. The present work also suggests that the energy-dependent level density parameter in the BSFG formula should be used to obtain the best fit to the NLD data in the whole data range.