

# 评价核结构数据库的程序系统及其相关数据库<sup>1</sup>

周春梅 黄小龙

(中国原子能科学研究院, 中国核数据中心 北京 102413)

**摘 要** 简要介绍了评价核结构数据库的程序系统, 内容包括主要程序功能及其数据库.

**关键词** 核结构 程序系统 数据库

**分类号** O571.1

核结构数据(包括核结构和衰变数据)是核物理基础研究、核技术应用和核工程设计的重要基本数据, 具有广泛的应用价值.

核结构数据涉及的数据量大、范围广, 新测量数据不断出现, 更新数据的工作繁重. 为此, 1974 年在国际原子能机构核数据科主持下, 组成了核结构数据评价国际协作网, 按其规定和要求各成员国分工完成指定给各有关国家的核结构数据评价与更新及其评价核结构数据库(ENSDF)建设等工作. 其成果各成员国共享. 中国自 80 年代初就积极参与有关活动, 于 1986 年成为其正式成员国, 并长期承担  $A=51\sim 56$ 、 $195\sim 198$  等 10 个  $A$  链的核结构和衰变数据的评价及更新工作, 临时负责  $A=61$ 、 $170$  和  $172$  等 3 个  $A$  链的核结构数据评价工作. 中国评价组由中国原子能科学研究院(中国方面的牵头和归口单位)、吉林大学物理系和中国科学院上海原子核研究所(1996 年停止)等单位组成.

除数据评价与更新及其评价数据库建设外, ENSDF 程序系统也是国际协作网的一项重要成果. 该系统不仅对核结构数据评价提供了很好的工具, 而且对推动数据评价和数据库建设发挥了重要作用, 同时也为原子核物理基础研究及核技术应用等提供了重要

工具, 为其研究的深入发展提供了重要条件. 因此, 本文将简要介绍这方面的有关情况, 以供感兴趣的科技工作人员参考.

## 1 评价系统的组织结构

图 1 给出了 ENSDF 程序目录结构图. 可分为四类: 说明; 物理分析和理论计算; 数据库检索与管理; 数据出版等. 这些程序系统在各成员国有关单位(特别是美国 Brookhaven 国家实验室国家核数据中心)20 多年的共同努力下, 经过研制、配套、修订和优化等一系列发展过程, 目前已有 VAX 机、Alpha 机和 PC 机等多种版本. 该程序系统相当完备、实用方便, 是国际核物理方面通用的程序系统之一, 深受广大用户欢迎. 我国已全部开发移植并已应用这些程序.

## 2 主要程序及其功能

表 1 列出了核结构数据评价系统主要程序及其功能简况. 从表 1 可以看出, 这些程序包括了核结构和衰变数据物理分析和理论计算的相当广泛的内容, 综合了人们对核物理学的全部认识和经验. 大多数程序都经过许多次补充、修订、更新和优化. 例如, LOGFT 程序至 1997 年 11 月已进行了 39 次补充、修订和优化. 它们已成为核结构数据

评价的主要工具，在实际工作中很好地满足了核结构数据评价工作的需要。

### ENSDF—PGM

```

|-----ANALYSIS (物理分析和理论计算)
|   |-----ALPHAD
|   |-----DELTA
|   |-----GABS
|   |-----GAMUT
|   |-----GTOL
|   |-----HSICC
|   |-----LOGFT
|   |-----PANDOR
|   |-----RADLST
|   |-----RULER
|   |-----SPINOZ
|   |-----QCACL
|-----DATA. TST (样本数据文件)
|-----DISTRM. MEM
|-----DOS—DIST (微机版本)
|   |-----AAREADME. TXT
|   |-----ENSDF—C1. ZIP
|   |-----ENSDF—C2. ZIP
|   |-----ENSDF—C3. ZIP
|   |-----ENSDF—C4. ZIP
|   |-----INSTALL. DOC
|   |-----INSTALL. PS
|-----NSDFLIB. FOR (说明及子程序库)
|-----NSDFLIB. MEM
|-----README. 1ST
|-----READNSDF. ME
|-----SETMDC. ANS
|-----SETMDC. MEM
|-----SETMDC. VAX
|-----UTILITY (检验系统)
|   |-----ADDGAM
|   |-----FMTCHK
|   |-----PREND
|   |-----TREND
|-----PUBLICATION (出版系统)
|   |-----ENSDAT
|   |-----NNDCLIB

```

图 1 ENSDF 程序目录结构图

表 1 核结构数据评价系统主要程序及其功能简况

程序名称*	主要功能
GTOL	拟合 $\gamma$ 能量 $E_\gamma$ 、计算能级能量 $E_i$ 及计算衰变强度平衡
LOGFT	计算 $\beta^-$ 和 $\epsilon$ 衰变的 $\log ft$ 值及平均能量
ALPHAD	计算 $\alpha$ 衰变的禁戒因子
GABS	计算核衰变的 $\gamma$ 绝对强度及其不确定性
AVERAG#	用加权方法求多家测量数据平均值
HSICC	计算 $\gamma$ 跃迁内转换系数 $\alpha_K$ 、 $\alpha_L$ 、 $\dots\alpha$
HSMRG	将计算内转换系数由自由格式变为 ENSDF 格式
RULER	计算 $\gamma$ 约化跃迁几率 ELW 和 MLW
FMTCHK	ENSDF 数据格式检验
PANDOR	物理检验
TREND	制备数据表
PREND	画能级图
RADLST	计算衰变能量平衡及内转换、欧歇电子与 X 射线能量和强度
ROTFIT#	拟合转动能谱并参数化
SDFIT#	拟合 SD 带 $\gamma$ 能谱并指定能级自旋
PSC#	输出能级图至宽行打印机(M3081)
PSC-1#	输出能级图至激光打印机
QCALC	计算核反应 Q 值、核反应能和核衰变能
ENSDAT	按“Nuclear Data Sheets”要求列数表, 画纲图及带结构图等

\* 中国核数据中心开发移植, # 中国核数据中心研制.

### 3 评价系统工作流程及其特点

图 2 给出了该评价系统的工作流程. 评价是以 1 个核素为单位进行的. 由图 2 可以看出, 该评价系统的主要特点有:

(1) 推荐“最佳”实验数据. 评价者从保存在美国 Brookhaven 国家实验室的核结构数据参考文献库检索有关参考文献, 以该参考文献为主要依据, 从国内外有关文献资料中收集所有实验测量数据、理论文章和其它相关信息. 在此基础上, 按获得该核素特性的各种核反应和各种核衰变的实验进行数据分析和比较, 经仔细筛选和适当取舍或用新标准归一后, 用恰当的数据处理方法(如加权平均方法或直接推荐一家最好的实验测量数据)推荐“最佳”实验数据和能级纲图. 经过物

理初步评价后, 以手工方式按国际标准数据格式 ENSDF 将这些数据及有关说明信息(包括数据来源)输入计算机, 并建立相应的临时数据文件. 对这些临时文件进行格式检验、物理分析与理论计算, 必要时用理论计算结果填补实验数据的空缺.

(2) 综合物理评价. 以临时数据文件为新的基础, 进行一个核素能级特性及其  $\gamma$  辐射数据的综合物理评价推荐, 给出该核素的自洽、准确和完整的成套核结构数据(包括能级纲图)及必要的注释.

(3) 完整 A 链核结构数据的评价推荐. 在评价推荐了某一 A 链的每一个核素的成套核结构数据的基础上, 进一步按 Z 值由小到大进行合并, 并作适当统调, 使之成为一个完整的 A 链核结构数据并保持自洽.

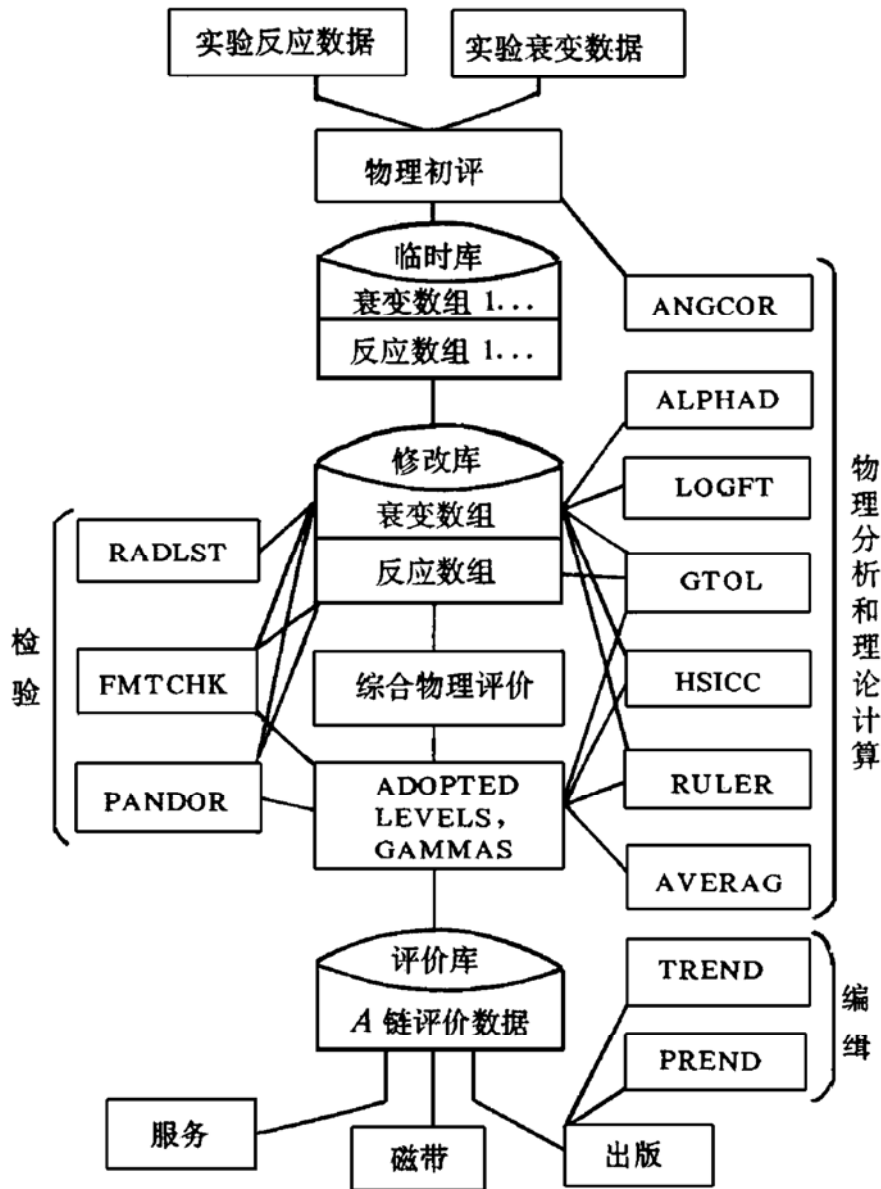


图 2 核结构数据评价系统流程图

(4) 数据的列表输出和能级纲图绘制。为评价数据审评、入库和发表等作好各项准备工作。

(5) 经国际专家审评，满足国际协作网的规定和要求的评价核结构数据可正式存入国际评价核结构数据库，并推荐给各国使用，同时，在《Nuclear Data Sheets》杂志上公开发表。

(6) 每 5 年左右进行一次更新评价(视新数据情况而定)。

#### 4 相关数据库

除 ENSDF 主体数据库外，还有两类数

据库：

(1) 专门为物理分析和理论计算提供的数据库。如：计算内转换系数数据表，计算  $\log ft$  值的径向波函数数据表，计算衰变能和核反应能的原子质量数据表等。

(2) 从 ENSDF 主库导出的其它数据库(包括汇编等)。最主要的导出数据库见表 2。

导出核数据库的主要特点是：(1) 以列表数据表和图示形式给出有关数据，便于读者阅读和用户使用。(2) 随着主体数据库的更新而及时更新，特别是计算机应用较普及后，可通过 www 网络获取有关数据。

表 2 从 ENSDF 主库导出的其它主要数据库简介

主要导出数据库	主要内容	实验室
Table of Isotopes (8-edition)	所有 A 链核结构和衰变数据表	美国 LBL
Table of Radioisotopes	放射性核素衰变辐射数据表	美国 LBL
Nubase	所有核素及其同质异能态特性数据表	法国 Saclay
PCNudat	PC 版核结构和衰变辐射数据表	美国 BNL
Nuclear Wallet Cards	袖珍核数据手册	美国 BNL
NUDat	核质量, 能级及其特性; 核自旋, 衰变数据等	美国 BNL
Chart of the Nuclides	核素图	美、日等 5 国

致谢 感谢核结构数据评价国际协作网及主要组织者: 美国国家核数据中心提供程序、数据及有关资料等。

## Program System of Evaluated Nuclear Structure Data File and Its Relevant Database

Zhou Chunmei Huang Xiaolong

(China Institute of Atomic Energy, China Nuclear Data Center, Beijing 102413)

**Abstract** The program system of evaluating nuclear structure data file and the relevant database are briefly introduced. The main functions of these program system and their derived database are also presented.

**Key words** nuclear structure program system database

(上接第 165 页)

(500 MeV) Ne ions. The Monte Carlo simulation, positron annihilation and IR spectroscopy were used to study the radiation induced defects. The result showed that monovacancies existed in as-grown samples, but more monovacancies were introduced, after Ne ions irradiation, and with increasing radiation dose, divacancies were formed, and eventually large voids were observed. The IR measurement for irradiated GaAs samples confirmed the existence of amorphous zones. The antisite defects  $\text{Ga}_{\text{As}}$  and  $\text{In}_{\text{P}}$  as well as  $\text{Zn}_{\text{In}}$  acceptors were also observed in the irradiated sample. The optical experiment was performed for the ion irradiated InP with dose of  $10^{14}$  ions/cm<sup>2</sup>, and a metastable center was revealed.

**Key words** positron annihilation radiation effect metastable center