

УДК: 539.163

СПРАВОЧНАЯ ПРОГРАММА ELENA: ДАННЫЕ О РАДИАЦИОННЫХ СВОЙСТВАХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИЗОТОПОВ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО АНАЛИЗА

Кабина Л.П.¹, Лисин С.С.¹, Митропольский И.А.^{1,2}

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Аннотация

Программа ELENA (ELEment NAvigator) разработана для информационного обеспечения элементного и изотопного анализа вещества методами рентген-флуоресцентного, нейтронно-активационного и нейтронно-радиационного анализа состава вещества. С ее помощью легко можно получить для заданного химического элемента:

- данные об основных физико-химических свойствах данного элемента;
- энергии и интенсивности линий характеристического рентгеновского излучения;
- изотопный состав, основные свойства известных изотопов данного элемента.

Для выбранного изотопа данного элемента приводятся:

- энергии, времена жизни и квантовые числа нижних возбуждённых состояний;
- данные о гамма-излучении, сопровождающем распад изотопа;
- сечение радиационного захвата тепловых нейтронов и величину резонансного интеграла;
- энергии и интенсивности гамма-переходов из реакции радиационного захвата нейтрона.

Программа позволяет определять список элементов или изотопов, имеющих линии рентгеновского или гамма-излучения в заданном энергетическом интервале.

Данные представлены в виде таблиц и графиков. Программа ELENA снабжена подробными комментариями и может быть использована в учебных целях.

Ключевые слова

программа для ЭВМ, нейтронный радиационный анализ, нейтронный активационный анализ, рентген-флуоресцентный анализ, физико-химические свойства элементов, радиационные свойства изотопов

Введение

Ядерно-физические методы анализа являются наиболее чувствительными и точными методами неразрушающего контроля состава вещества. Они основаны на регистрации характеристического излучения, сопровождающего ядерные реакции (мгновенное излучение) или возникающего при распадах (задержанное излучение) элементов, входящих в состав образца. Наибольшее распространение получили методы нейтронно-радиационного (НРА) и нейтронно-активационного анализа (НАА) на тепловых нейтронах, использующие реакцию радиационного нейтронного захвата и радиоактивные распады активированных ядер, соответственно. Принципиальной особенностью этих методов анализа является возможность количественного определения изотопного состава вещества и полная индифферентность к агрегатному состоянию и химической форме образца.

Нейтронные методы анализа состава вещества не требуют, как правило, специальной подготовки проб, а длительность наведённой радиоактивности обычно составляет от нескольких наносекунд до часов и дней. Нет принципиальных требований и к объёму и массе образца, форме его поверхности. Нейтронные методы используются как для определения основных компонентов образца, например, при анализе состава сплавов, так и для определения микропримесей. Часто нейтронные методы используются для качественного и количественного определения содержания редких и драгоценных металлов в рудах, для аналитических исследований произведений искусства и исторических артефактов.

К нейтронным методам тесно примыкает метод рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) состава вещества. Этот метод основан на регистрации характеристического излучения, сопровождающего девозбуждение электронной оболочки атома после облучения рентгеновским излучением или

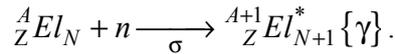
Митропольский И.А.* – доктор физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией ядерной спектроскопии Отделения нейтронных исследований; Кабина Л.П. – кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, лаборатория ядерной спектроскопии Отделения нейтронных исследований; Лисин С.С. – младший научный сотрудник, лаборатория ядерной спектроскопии Отделения нейтронных исследований, Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова.

*Контакты: 188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ФГБУ «ПНИЯФ». Тел.: (813)714-64-14; e-mail: mitropolsky_ia@pnpi.nrcki.ru.

быстрыми электронами. Хотя метод РФА высокого разрешения может использоваться для определения изотопного состава вещества, на практике ограничиваются элементарным анализом.

При обращении к таким высокотехнологичным (и довольно дорогим) методам анализа вещества очень важно составить предварительное мнение об эффективности их применения в различных конкретных случаях. При этом кроме физико-технических характеристик используемых приборов можно выделить три группы объективных условий, определяющих успех предприятия, – эффективность возбуждения анализируемых элементов образца, радиационные свойства продуктов ядерной реакции и/или распада, аналитические свойства характеристического излучения. Программа ELENA (ELEment NAvigator) является справочной системой, облегчающей такую оценку. Она предоставляет пользователю всю необходимую информацию о сечениях нейтронного захвата, радиационных свойствах элементов и их изотопов, свойствах характеристического излучения.

Эффективность нейтронных методов анализа определяется, в первую очередь, сечением σ захвата теплового нейтрона ядром элемента El :



Последнее переходит в возбуждённое, так называемое захватное состояние (отмечено звёздочкой) соседнего изотопа. Его разрядка сопровождается гамма-излучением $\{\gamma\}$ (захватное излучение), регистрация которого составляет суть НРА.

Далее, ядро в основном состоянии может быть радиоактивным и распадаться, как правило, бета-процессами в ядро изобары в возбуждённом состоянии, разрядка которого, в свою очередь, даёт характеристическое гамма-излучение. Это ядро также может быть радиоактивным, порождая следующее поколение ядер продуктов распада, которые, в свою очередь, могут использоваться для анализа, и т.д. Регистрация гамма-излучения ядер вдоль цепочки распадов (распадное излучение) лежит в основе метода НАА. При этом большое значение играют характерные времена распадов. Проводя измерения гамма-спектров в разные моменты времени (задержка может составлять часы, дни и месяцы), можно выделить те или иные участки распадной цепочки и повысить тем самым аналитическую чувствительность и точность метода.

К настоящему времени в результате фундаментальных спектроскопических исследований достаточно хорошо изучены схемы распадов и свойства характеристического гамма-излучения, практически всех известных элементов и их изотопов (около 3000 нуклидов). Соответствующая информация находится в файле оценённых данных о ядерной структуре и распадах ENSDF [1], поддерживаемом международной сетью оценщиков под эгидой МАГАТЭ [2]. Файл ENSDF включает всю спектроскопическую информацию о структуре атомных ядер и распадах и постоянно обновляется. Этот файл последовательного доступа преобразован нами в реляционную базу данных [3], что позволяет сравнительно просто строить таблицы интересующих спектроскопических свойств ядер, используемых в программе ELENA и представляющих интерес в задачах нейтронного и рентгеновского анализа.

Описание программы ELENA

Программа доставляет справочную информацию в виде таблиц и графиков, размещённых в окнах с соответствующими вкладками. Все вкладки имеют кнопки «Помощь», поясняющие представленную информацию и смысл использованных обозначений. Вызов помощи отменяется нажатием кнопки «ОК». Окна вкладок, по размеру не вмещающие таблицы, снабжены полосами прокрутки. Графики снабжены масштабирующим окном, позволяющим выделить область графика и увеличить её до требуемого размера. Для подготовки документального отчёта любые части таблиц или графики могут быть выделены и скопированы в любой текстовый или графический редактор.

Иерархия вложенных вкладок отражает информационную структуру данных и ограничена двумя уровнями – свойства элемента и свойства изотопа. Для удобства сравнения одновременно могут быть открыты несколько окон для разных изотопов данного элемента.

Программа ELENA открывается титульной страницей, содержащей две пары кнопок, рисунок 1. Кнопка «Радиационные свойства элементов и изотопов» открывает вкладки со справочной информацией (основная функция программы). Кнопка «Поиск элементов и изотопов по энергии линии» открывает вкладку, решающую «обратную задачу» – найти элементы или изотопы, имеющие в своем спектре линию гамма-излучения с данной энергией в заданном интервале. Для удобства работы эта кнопка содержится на всех вкладках программы. Кнопка «О программе» служит для вывода описания, а кнопка «Выход» для окончания работы.

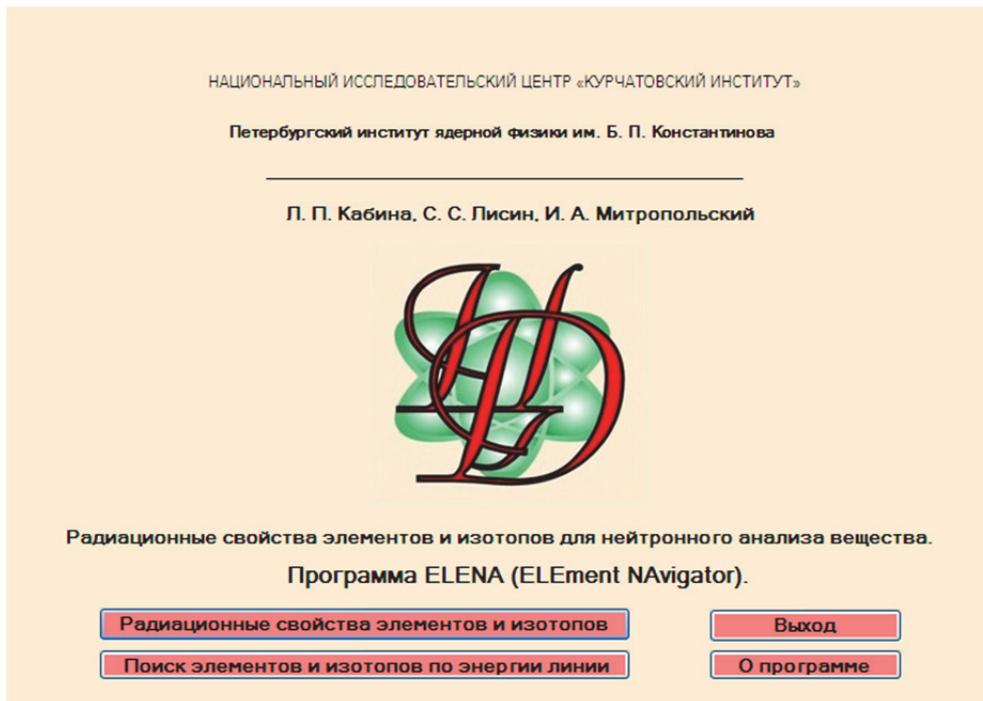


Рис. 1. Титульная страница программы ELENA

После начала работы появляется главное меню программы, оформленное в виде периодической системы элементов (рис. 2). Оно позволяет выбрать интересующий элемент несколькими способами: можно выделить щелчком мыши символ элемента непосредственно в таблице или задать его реквизиты в соответствующих окнах (окно «Element» служит для указания английского названия элемента). Для примера на рисунке 2 отмечено железо. После выделения элемента любым способом, остальные окна заполняются автоматически, и программа готова к работе. Наведение курсора на область элемента в таблице вызывает краткую справку о данном элементе, как это и показано на рисунке 2. Элементы можно задавать многократно – актуальным будет последний выбор.

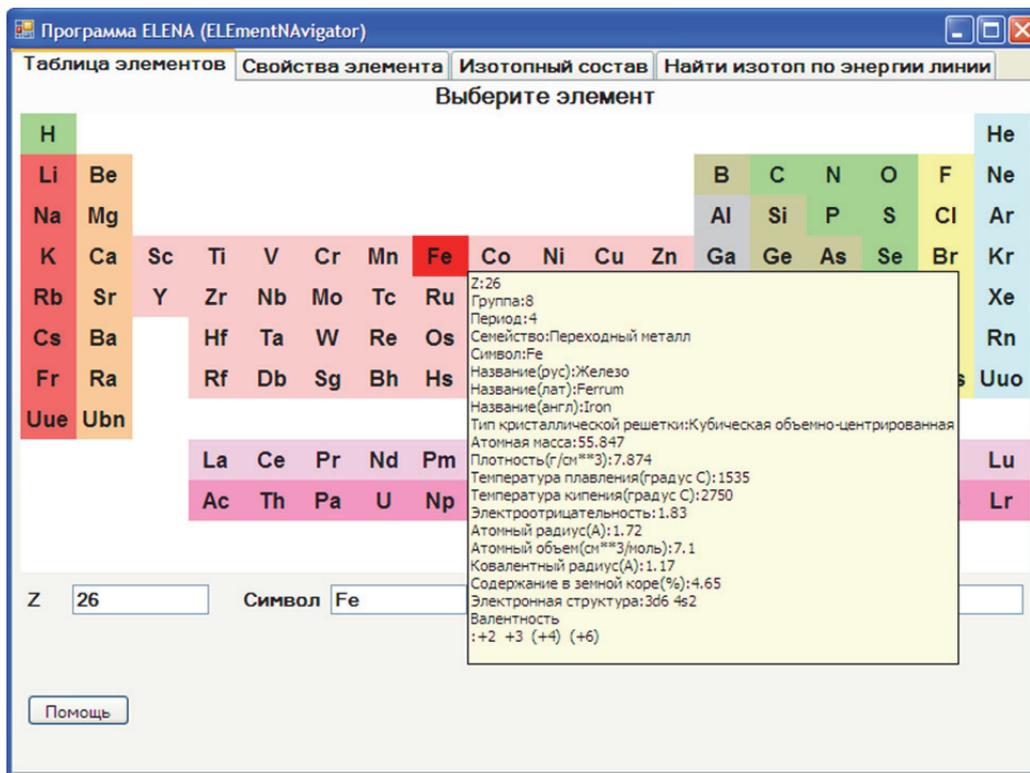


Рис. 2. Главное меню программы ELENA с отмеченным элементом Fe

Главное меню программы содержит вкладки «Свойства элемента» и «Изотопный состав», содержащие основные физико-химические свойства выбранного элемента и список изотопов данного элемента, соответственно.

Вкладка «Свойства элемента», в свою очередь, имеет две вкладки: «Основные физико-химические свойства» и «Энергии и интенсивности рентгеновских линий». Данные об основных свойствах элементов были взяты из энциклопедии [4] и представлены в виде таблиц. Для каждого элемента приведены плотность при нормальных условиях, температуры плавления и кипения, тип кристаллической решётки, электронная структура, атомный радиус, валентность, содержание элемента в земной коре и другие свойства.

Вкладка «Энергии и интенсивности рентгеновских линий», рисунок 3, содержит таблицу энергий и интенсивностей линий характеристического рентгеновского излучения, используемых для определения данного элемента методом РФА. Данные взяты из справочника [5]. Излучение представлено в стандартных спектроскопических обозначениях. Энергии приведены в единицах кэВ, интенсивности – в процентах, с ошибкой в последних значащих цифрах.

Z	№	Серия	E (кэВ)	К-оболочка	L1-оболочка	L2-оболочка	L3-оболочка	
26	1	Fe Ll	0.615	0.040	11	0.035		16
26	2	Fe Lh	0.628	0.028	7	0.019	5	0.062
26	3	Fe La2	0.705	0.037	9	0.032	9	0.056
26	4	Fe La1	0.705	0.33	8	0.29	8	0.51
26	5	Fe Lb6	0.708	0.0022	6	0.0019	5	0.0034
26	6	Fe Lb1	0.717	0.25	6	0.17	4	0.57
26	7	Fe Lb4	0.792	0.010	3	0.039	12	
26	8	Fe Lb3	0.792	0.016	5	0.061	18	
26	9	Fe Ka3	6.266	1.09E-05	6			
26	10	Fe Ka2	6.391	10.6	5			
26	11	Fe Ka1	6.404	21.0	9			
26	12	Fe Kb3	7.058	1.28	6			
26	13	Fe Kb1	7.058	2.50	11			
26	14	Fe Kb5	7.108	0.00133	8			
26	15	Fe Kb4	7.112	1.42E-07	8			

Рис. 3. Вкладка «Энергии и интенсивности рентгеновских линий» для выбранного элемента

Вкладка «Изотопный состав» из главного меню, рисунок 4, содержит список изотопов данного элемента и таблицу их основных свойств: энергию связи и её производные, период полураспада и распространённость стабильных изотопов, основные моды распада радиоактивных изотопов. В списке черным цветом отмечены стабильные изотопы, красным – распадающиеся β^+ -распадом (электронный захват), голубым – β^- -распадом, сиреневым – изотопы, обнаруживающие оба вида β -распада. Зелёным цветом выделены α -распадчики.

Выделение из списка конкретного изотопа, ^{56}Fe , например, окрашивает соответствующую кнопку в жёлтый цвет и открывает окно с четырьмя вкладками: «Свойства», «Энергии и времена жизни уровней», «Захватные гамма-линии» и «Распадные гамма-линии». Последние две вкладки появляются только в тех случаях, если имеются соответствующие данные. Так, например, ядро ^{56}Fe в основном состоянии является стабильным и не имеет распадных характеристик, поэтому соответствующая вкладка отсутствует.

Вкладка «Свойства» содержит таблицу свойств отмеченного изотопа, дополняющих общие свойства элемента и представляющих интерес в контексте нейтронного облучения. Она содержит сечение захвата тепловых нейтронов, значение резонансного интеграла с погрешностями, полное количество захватных гамма-линий, энергии и сечения наиболее интенсивных из них. Данные взяты из [6–8]. Следующие вкладки детализируют эту информацию.

Вкладка «Энергии и времена жизни уровней» содержит таблицу со свойствами низколежащих состояний выделенного нуклида: энергии уровней, их спины и чётности, периоды полураспада $T_{1/2}$. Данные взяты их файла ENSDF [1].

Программа ELENA (ELEmentNavigator)

Таблица элементов | Свойства элемента | **Изотопный состав** | Найти изотоп по энергии линии

Карта изотопов элемента: Fe, выбрать изотоп:

45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63
64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74								

Общие свойства изотопов:

A	Избыток массы(кэВ)	Энергия связи(кэВ)	Атомная масса	Пк			
45	13793	196	7313	4	45014807	211	1.8
46	755	354	7613	8	46000810	380	13
47	-6614	261	7779	6	46992900	280	21
48	-18160	70	8026	1	47980504	75	45
49	-24824	149	8163	3	48973350	160	64
50	-34488.532	60.002	8354.268	1.2	49962975.04	64.414	15
51	-40221.423	15.008	8461.129	0.294	50956820.52	16.111	30
52	-48332.996	6.53	8609.625	0.126	51948112.39	7.009	8.2
53	-50946.705	1.707	8648.783	0.032	52945306.46	1.832	8.5
54	-56253.838	0.494	8736.37	0.009	53939609.02	0.53	ST
55	-57480.611	0.472	8746.583	0.009	54938292.02	0.506	2.7
56	-60606.395	0.456	8790.342	0.008	55934936.36	0.489	ST
57	-60181.154	0.458	8770.267	0.008	56935392.87	0.491	ST
58	-62154.44	0.492	8792.238	0.008	57933274.46	0.528	ST
59	-60664.136	0.504	8754.76	0.009	58934874.37	0.54	44
60	-61412.853	3.427	8755.848	0.057	59934070.59	3.678	2 f

Рис. 4. Изотопный состав и общие свойства изотопов выбранного элемента

Вкладка «Захватные гамма-линии» содержит таблицу и график, представляющие свойства гамма-излучения, сопровождающего нейтронный захват, рисунок 5. Подчеркнем, что эта информация (так же как и «Количество захватных гамма-линий» и «Энергии и сечения наиболее сильных линий» на вкладке «Свойства») относится к изотопу, соседнему по отношению к выделенному, в данном случае к нуклиду ^{57}Fe . На этой вкладке в таблице приведены с погрешностями в последних значащих цифрах энергии гамма-линий в единицах кэВ, сечения выхода в барнах, множители K_0 , взятые из [9]. Для удобства работы данные в таблице могут быть упорядочены по возрастанию или убыванию как энергий, так и сечений. Двойной щелчок мыши по названию столбца меняет порядок упорядочения. Выбор области графика для подробного рассмотрения осуществляется с помощью мыши. Возврат к прежнему масштабу производится в контекстном меню, вызываемом правой кнопкой мыши.

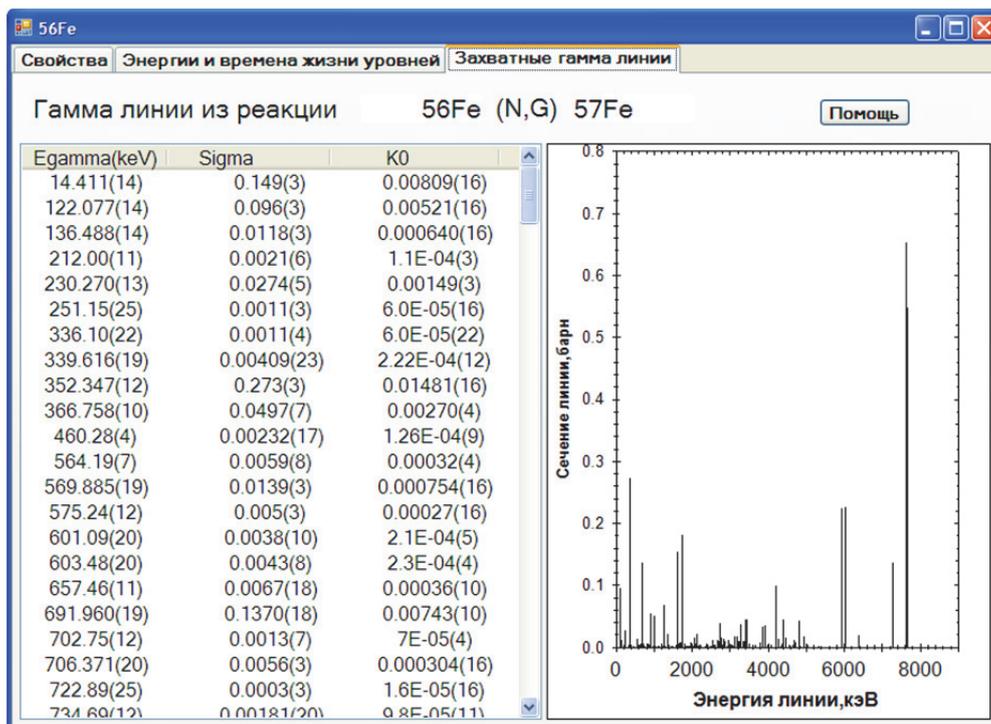


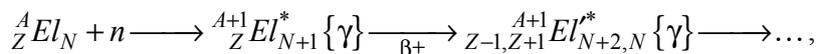
Рис. 5. Данные о захватном спектре

Вкладка «Распадные гамма-линии» содержит список гамма-линий, возникающих в распадах данного изотопа, с указанием периода полураспада, продукта распада, энергии гамма-излучения, относительных выходов. Данные, так же как в предыдущей таблице, могут упорядочиваться по возрастанию или убыванию значения, а участки графика масштабироваться. На вкладке использованы данные из ENSDF [1], относящиеся ко всем распадам данного ядра.

Информация на вкладке «Распадные гамма-линии» относится к ядрам, возникающим в результате распадов выделенного изотопа. Здесь же приводятся данные о гамма-распаде его изомерных состояний.

Ядро ^{53}Fe , например, является радиоактивным, для него нет данных по реакции нейтронного захвата – вкладка «Захватные гамма-линии» для него отсутствует. Для ядра ^{238}U , например, представлены обе вкладки.

Подчеркнём, что для получения информации о распадном (задержанном) гамма-излучении при захвате нейтрона ядром ${}^A_Z\text{El}_N$ для нужд НАА в программе ELENA следует выбирать соседний изотоп ${}^{A+1}_Z\text{El}_{N+1}$ или изотопы других элементов ${}^A_Z\text{El}'$ в соответствии со схемой:



которая отражает цепочку ядерных превращений при облучении образца нейтронами.

Сравнение характеристик гамма-излучения разных изотопов одного элемента удобно проводить в многооконном режиме. Передвижение по вкладкам в каждом окне произвольно.

Вкладка «Поиск элементов и изотопов по энергии линии» вызывается из любого места программы. В зависимости от типа излучения (из ядерного распада, из нейтронного захвата, из атомного возбуждения) она позволяет получить список ядер или элементов, имеющих в своем спектре линию с данной энергией. В качестве примера на рисунке 6 показан список изотопов, имеющих в своем распадном спектре гамма-линии, попадающие в заданный интервал $100,0 \pm 0,1$ кэВ.

Родительское ядро	Энергия	T1/2	Продукт распада	Энергия линии	Выход линии(в %/распад р.я.)
131TE	182.265	33.25 H	131I	100	0.07096
119XE	0	5.8 M	119I	100	95
144CE	0	284.91 D	144PR	99.961	0.03992
151PM	0	28.40 H	151SM	100.02	2.543
161ER	397	7.5 US	161ER	100	14.88
163ER	0	75.0 M	163HO	100	0.001691
157TM	0	3.63 M	157ER	100.05	2.325
170HF	0	16.01 H	170LU	99.93	1.98
181OS	0	105 M	181RE	100	0.2985
195IR	100	3.8 H	195IR	100	0
207PO	0	5.80 H	207BI	99.954	0.1413
221RN	0	25 M	221FR	99.91	1.514
229AC	0	62.7 M	229TH	99.93	0.00594
233U	0	159.2E3 Y	229TH	99.95	1.9e-05
249CF	0	351 Y	245CM	100	0
261BH	0	11.8 MS	257DB	100	0

Рис. 6. Результат поиска элементов или изотопов по энергии гамма-перехода

Все вкладки программы снабжены кнопками «Помощь», дающими краткую информацию об имеющихся возможностях программы и о содержании данного листа.

Структура программы и информационные решения

Информационная структура программы ELENA, рисунок 7, определяется логикой получения справочных данных о свойствах элементов и изотопов и имеет двухуровневую организацию информации:

- свойства элемента,
- свойства изотопа.

Совокупность свойств изотопов данного элемента рассматривается как одно из свойств этого элемента.



Рис. 7. Информационная схема программы ELENA

Программа ELENA написана на языке C# в среде разработки MS Visual Studio 10 и функционирует под ОС MS WINDOWS. Для работы программы необходимо установить на компьютер пакет Microsoft .NET FrameWork Version 2.0 или выше [10]. Для использования программы необходимо скопировать файл ELENA.EXE в рабочий каталог.

Данные, которые использует программа, включены в реляционную базу NAADF2 [3], которая содержит ядерные данные из ENSDF [1], а также необходимые атомные и нейтронные данные из других источников. Файлы данных, с которыми работает программа, имеют формат .CVS и получают путем выполнения SQL-запросов к базе NAADF2, работающей под СУБД MS ACCESS. Использование последней позволяет легко переходить, например, в MS EXCEL для обработки данных или в другие приложения MS OFFICE.

Для графического представления спектров гамма-линий в программе использована библиотека ZedGraph.dll [11]. Соответствующий файл также должен находиться в каталоге, содержащем исполняемый файл программы ELENA.

Программа не имеет собственного аппарата подготовки отчетов. Для распечатки данных достаточно выделить требуемую информацию и скопировать её в любой текстовый или графический редактор, имеющий функцию печати.

В принципе, программа ELENA может рассматриваться как некая оболочка – универсальный формат данных позволяет достаточно легко адаптировать программу для создания любой другой двухуровневой справочной системы с данными из любой другой области знаний.

Заключение

В каждой лаборатории, занимающейся элементным анализом, имеется некоторое количество специальных справочников и руководств. Большинство из них требуют обновления, особенно в части расширения списка нуклидов. К тому же часто информация собирается из разных источников, не всегда согласованных друг с другом. Возникает потребность в информационном обеспечении этих работ.

Сейчас известны примеры создания электронных справочных таблиц и поисковых систем в данном направлении, см., например, [5, 7, 12]. Эти источники служат прекрасным ориентиром для создания новых систем, адаптированных к конкретным условиям работы.

Программа ELENA является частью проекта информационного обеспечения исследований с нейтронами в ПИЯФ. Она ориентирована на описание радиационных свойств ядер, возникающих при облучении нейтронами. Следующим шагом должна быть программа, описывающая радиационные свойства ядер вдоль цепочек распада, с количественным учётом сечений образования, ветвлений распада и интенсивностей гамма-переходов.

Программа ELENA была создана в Центре данных ПИЯФ для непосредственного использования в работе группы нейтронно-активационного анализа. Она отражает локальные информационные

потребности исследователей и может стать хорошим помощником в повседневной работе, может оказать также полезной для молодых специалистов и студентов.

Программа зарегистрирована в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службы по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ) [13] и свободно распространяется по запросу.

Благодарности

Авторам приятно поблагодарить сотрудников Лаборатории ядерной спектроскопии Отделения нейтронных исследований ПИЯФ, Кафедры ядерной физики Физического факультета СПбГУ и особенно П.А.Сушкова, Отдел физики и техники реакторов ПИЯФ, за доброжелательную критику и замечания, направленные на углубление содержания и улучшение работы этой программы.

Список литературы

1. Tuli J.K. *Evaluated Nuclear Structure Data File*. NNDC, 2001. Available at: <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (accessed 31.10.2016).
2. *INTERNATIONAL NETWORK OF NUCLEAR STRUCTURE AND DECAY DATA EVALUATORS (NSDD)*. Available at: <http://www-nds.iaea.org/nsdd/> (accessed 31.10.2016).
3. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. *Проблемно ориентированные базы данных как инструмент анализа больших массивов ядерных данных*. Гатчина, ПИЯФ, 2012. 17 с.
4. *Справочник химика*. Доступно на: <http://chem100.ru/table.php/> (дата обращения 31.10.2016). Кнунянц И.Л., Зефиоров Н.С. *Химическая энциклопедия: в 5 т. М., Большая Российская энциклопедия, 1988-1998*. Доступно на: <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/> (дата обращения 31.10.2016).
5. Firestone R.B., Ekstrom L.P. *WWW Table of Radioactive Isotopes, 2004*. Available at: <http://ie.lbl.gov/toi/xraySearch.asp/> (accessed 31.10.2016).
6. Audi G. et al. *The Ame2012 atomic mass evaluation. Chinese Physics C, 2012, vol.36, p.1287*. Available at: <http://amdc.impcas.ac.cn/evaluation/data2012/data/mass.mas12> (accessed 31.10.2016).
7. Tuli J.K. *Nuclear Wallet Cards, NNDC, 2011*. Available at: <http://www.nndc.bnl.gov/wallet/> (accessed 31.10.2016).
8. Mughabghab S.F. *Atlas of Neutron Resonances: Resonance Parameters and Thermal Cross Sections, Z = 1-100*. Amsterdam, Elsevier Science, 2006.
9. *Database of Prompt Gamma Rays from Slow Neutron Capture for Elemental Analysis*. Vienna: IAEA, 2007. Available at: http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263_web.pdf (accessed 31.10.2016).
10. *Microsoft .NET Framework 2.0 (2009)*. Available at: <https://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=1639> (accessed 31.10.2016).
11. *ZedGraph (2008)*. Available at: <http://sourceforge.net/projects/zedgraph/files/> (accessed 31.10.2016).
12. *Библиотека нуклидов. ВНИИФТРИ, 1999*. Доступно на: <http://www.vniiftri.ru/> (дата обращения 31.10.2016).
13. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. *Программа ELENA, описывающая радиационные свойства элементов и изотопов для нейтронного анализа вещества*. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014611564. Роспатент, 2014.

UDC 539.163

COMPUTER CODE ELENA: RADIATION PROPERTIES OF ELEMENTS AND ISOTOPES FOR THE PURPOSE OF NEUTRON ANALYSIS

Kabina L.P.¹, Lisin S.S.¹, Mitropolsky I.A.^{1,2}

¹ B.P. Konstantinov Nuclear Physics Institute, St.-Petersburg, Russia

² St.-Petersburg State University, St.-Petersburg, Russia

Abstract

The code ELENA (ELEment NAVigator) is designed for the information ensuring of X-ray fluorescent, neutron activation and neutron radiation analysis of the elemental and isotopic compound of materials. For the selected chemical element the code reports:

- basic principal physical and chemical properties of the element;
- energies and intensities of the characteristic X-radiation lines;
- isotopic abundance and properties of isotopes known for the element.

The following can be got for each isotope:

- energies, lifetimes and quantum numbers of low-lying excited states;
- energies and yields of gamma-lines in decay of the isotope;
- cross-section in the radiation capture of thermal neutrons and the resonant integral value;
- energies and intensities of the γ -lines from the radiation capture of neutrons.

The program delivers a list of elements or isotopes that have the X-ray or gamma radiation in a given energy interval.

Actual data are presented in tables and graphs. The code ELENA is supplied with detailed comments and can be used for training purposes.

Keywords

computer code, neutron radiation analysis, neutron activation analysis, X-ray fluorescent analysis, physical and chemical properties of elements, radiation properties of isotopes

References

1. Tuli J.K. *Evaluated Nuclear Structure Data File*. NNDC, 2001. Available at: <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (accessed 31.10.2016).
2. *INTERNATIONAL NETWORK OF NUCLEAR STRUCTURE AND DECAY DATA EVALUATORS (NSDD)*. Available at: <http://www-nds.iaea.org/nsdd/> (accessed 31.10.2016).
3. Kabina L.P., Lisin S.S., Mitropolsky I.A. *Problemno orientirovannye bazy dannykh kak instrument analiza bol'shikh massivov yadernykh dannykh* [Problem-oriented database as a tool for the analysis of large amounts of nuclear data]. Gatchina, PNPI Publ., 2012. 17 p.
4. *Spravochnik khimika* [Handbook chemist]. Available at: <http://chem100.ru/table.php/> (accessed 31.10.2016).
Knunyanc I.L., Zefirov N.S. Khimicheskaya entsiklopediya [Chemical encyclopedia]. Moscow, Great Russian Encyclopedia, 1988-1998. Available at: <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/> (accessed 31.10.2016).
5. Firestone R.B., Ekstrom L.P. *WWW Table of Radioactive Isotopes, 2004*. Available at: <http://ie.lbl.gov/toi/xraySearch.asp/> (accessed 31.10.2016).
6. Audi G. et al. *The Ame2012 atomic mass evaluation*. *Chinese Physics C*, 2012, vol.36, p.1287. Available at: <http://amdc.impcas.ac.cn/evaluation/data2012/data/mass.mas12> (accessed 31.10.2016).
7. Tuli J.K. *Nuclear Wallet Cards, NNDC, 2011*. Available at: <http://www.nndc.bnl.gov/wallet/> (accessed 31.10.2016).
8. Mughabghab S.F. *Atlas of Neutron Resonances: Resonance Parameters and Thermal Cross Sections, Z = 1-100*. Amsterdam, Elsevier Science Publ., 2006.
9. Database of Prompt Gamma Rays from Slow Neutron Capture for Elemental Analysis. Vienna: IAEA, 2007. Available at: http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263_web.pdf (accessed 31.10.2016).

Mitropolsky I.A.* – Doctor of Sciences (Phys.-Math.), professor, Head of the Laboratory of Nuclear Spectroscopy; Kabina L.P. – PhD (Phys.-Math.), Senior Researcher of the Laboratory of Nuclear Spectroscopy; Lisin S.S. – Junior Researcher of the Laboratory of Nuclear Spectroscopy, B.P. Konstantinov Nuclear Physics Institute.

*Contacts: 188300, Leningrad region, Gatchina, Orlova Roscha, PNPI. Tel.: (81371) 464-14; e-mail: mitropolsky_ia@pnpi.nrcki.ru.

10. *Microsoft .NET Framework 2.0 (2009)*. Available at: <https://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=1639> (accessed 31.10.2016)
11. *ZedGraph (2008)*. Available at: <http://sourceforge.net/projects/zedgraph/files/> (accessed 31.10.2016).
12. *Biblioteka nuklidov [Nuclide Library]. VNIIFTRI, 1999*. Available at: <http://www.vniiftri.ru/> (accessed 31.10.2016).
13. Kabina L.P., Lisin S.S., Mitropol'skiy I.A. *Programma ELENA, opisyyvayushchaya radiatsionnye svoystva elementov i izotopov dlya neytronnogo analiza veshchestva* [ELENA program, describing the radiative properties of elements and isotopes for neutron analysis substance]. Certificate of state registration of the computer program № 2014611564. Rospatent 2014.