= ЯДРА =

# НЕРЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ВСТРЯСКИ ПРИ БЕЗНЕЙТРИННОМ ДВОЙНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ЗАХВАТЕ

© 2020 г. Ф. Ф. Карпешин<sup>1)\*</sup>, М. Б. Тржасковская<sup>2)</sup>, Л. Ф. Витушкин<sup>1)</sup>

Поступила в редакцию 20.11.2019 г.; после доработки 04.01.2020 г.; принята к публикации 04.01.2020 г.

Общепринято считать, что двойной безнейтринный электронный захват является резонансным процессом. Ниже выполнены расчеты вероятности встряски с ионизацией электронной оболочки, имеющей место в ходе превращения ядер  $^{152}$ Gd. Данный нуклид обладает наименьшим значением дефекта резонанса среди всех известных ядер, являясь основным кандидатом на поиск безнейтринной моды распада. Поэтому вклад нового механизма оказывается меньше, чем традиционно-резонансного механизма, представляя таким образом поправку к вероятности распада. Тем не менее значение этой поправки достаточно велико и составляет 23% в случае  $^{152}$ Gd. Она быстро возрастает с увеличением дефекта резонанса, так что для других ядер ожидается, что поправка превысит вклад резонансного механизма и станет основным механизмом двойного безнейтринного электронного захвата. Поэтому в принципе двойной безнейтринный *e*-захват оказывается вовсе не резонансным процессом.

DOI: 10.31857/S0044002720030125

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Недавно коллаборацией Хепоп было заявлено о первом случае прямого наблюдения 2e2
u-захвата в ядре <sup>124</sup>Xe [1]. Это событие является вехой в поисках двойного безнейтринного е-захвата. Его изучение важно для проверки майорановской природы нейтрино. Этот процесс традиционно рассматривают как резонансный, поскольку ни одной частицы не испускается в результате ядерного превращения [2]. Поэтому он не может осуществляться на голых ядрах, даже при энерговыделении Q > 0. Закон сохранения требует передачи части энергии и импульса третьему телу. В качестве такового выступает электронная оболочка атома. Образующиеся вакансии заполняются путем флуоресценции. Закон сохранения энергии-импульса восстанавливается после излучения первого кванта, энергия которого включает в себя избыточную величину Q.

Вероятность безнейтринного захвата максимальна вблизи резонанса. Поэтому главный интерес в настоящее время прикован к изучению ядер с малым значением Q. В некоторых случаях с большим Q уменьшение дефекта резонанса возможно при захвате электронов из более высоких оболочек:  $L_1, M_1$ , или на возбужденные состояния ядра или атома, в связи с чем этот процесс будет более вероятен, чем захват на основной уровень. Так, распад  $^{152}$ Gd  $\rightarrow ^{152}$ Sm с большей вероятностью будет происходить путем захвата  $KL_1$ -электронов в основное состояние дочернего ядра  $^{152}$ Sm. В этом случае дефект резонанса  $\Delta = 0.919$  кэВ. В числе других кандидатов как наиболее вероятные рассматриваются превращения  $^{164}$ Er  $\rightarrow ^{164}$ Dy с  $\Delta = 6.82$  кэВ и  $^{180}$ W  $\rightarrow ^{180}$ Hf с  $\Delta = 11.24$  кэВ [3].

В настоящей работе мы предлагаем другой, нерезонансный механизм двойного безнейтринного е-захвата. Поскольку он может быть реализован независимо от величины  $\Delta$ , его вклад медленней убывает с увеличением дефекта резонанса, чем обычного резонансно-флуоресцентного механизма. А восстановление закона сохранения энергииимпульса происходит вследствие ионизации электронной оболочки, вызванной эффектом встряски. В самом деле, процесс 2е-захвата — быстрый по сравнению с характерными атомными временами. Поэтому изменение внутриатомного потенциала вследствие уменьшения заряда ядра на две единицы и исчезновения двух электронов можно рассматривать как внезапное [2, 4]. Следовательно, оно может сопровождаться встряской электронной оболочки, в результате которой один из электронов вылетает из атома. Он-то и уносит избыток энергии. Количественно вклад нового механизма в рассмотренной ниже модели даже в случае ядра  $^{152}$ Gd, обладающего минимальным дефектом резонанса среди известных кандидатов, увеличивает вероятность распада приблизительно на 23% по сравнению с традиционным механизмом. В то же время

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>ВНИИМ имени Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия.

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup>НИЦ "Курчатовский институт" — ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия.

<sup>\*</sup>E-mail: **fkarpeshin@gmail.com** 

в случае других кандидатов с большим значением дефекта резонанса вполне можно ожидать, что его вклад окажется доминирующим. Физические основы нерезонансного механизма излагаются в следующем разделе. Параллельно там же выводятся основные формулы. Результаты расчетов применительно к <sup>152</sup>Gd приводятся в разд. 3. Раздел 4 посвящен обсуждению результатов, полученных в настоящей работе.

#### 2. ФОРМУЛЫ ВЕРОЯТНОСТИ ВСТРЯСКИ ПРИ ДВОЙНОМ *e*-ЗАХВАТЕ

Вновь образованные атомы обладают на две единицы меньшим атомным номером. Они образуются нейтральными, хотя и в специфическом переходном состоянии с оболочкой, "раздутой" наличием двух дырок в *K*-и *L*<sub>1</sub>-оболочках [5].

Энерговыделение в процессе двойного eзахвата определяется разностью масс нейтральных атомов — начального  $M_1$  и конечного  $M_2^{3}$ :

$$Q = M_1 - M_2. (1)$$

Даже при захвате двух K-электронов дочерний атом образуется хотя и нейтральным, но в возбужденном состоянии с двумя дырками на месте захваченных электронов. Такое состояние атома образно было названо раздутым [5]. При захвате электронов из более высоких оболочек энергия возбуждения дочернего атома соответственно возрастает. Обозначим энергию возбуждения дочернего атома  $E_A$ . Тогда дефект резонанса будет

$$\Delta = Q - E_A. \tag{2}$$

Если к тому же захват происходит на возбужденное состояние ядра с энергией  $E_N$ , при достаточно больших Q это приводит к дальнейшему уменьшению дефекта резонанса

$$\Delta = Q - E_A - E_N. \tag{3}$$

В нашем случае путем одновременного ядерного захвата K- и  $L_1$ -электронов атомы <sup>152</sup>Gd превращаются в атомы <sup>152</sup>Sm. Одноэлектронные волновые функции начального и конечного атомов неортогональны. Это порождает всевозможные процессы встряски в конечном атоме, когда один или несколько электронов переходят в возбужденное состояние (shake-up) или даже вылетают из атома в сплошной спектр, что приводит к ионизации атома (shake-off). Рассмотрим более детально процесс второго типа. Пусть *i*-й электрон в результате встряски переходит в состояние *f*  в сплошном спектре. Обозначим  $\psi_i(\mathbf{r})$  волновую функцию этого электрона в материнском атоме гадолиния,  $\phi_f(\mathbf{r})$  — в сплошном спектре в поле однократно ионизованного дочернего атома самария с дыркой на месте *i*-го электрона. Величина кинетической энергии электрона встряски *E* выбирается из условия равенства нулю дефекта резонанса (2)

$$E = \Delta - I_i, \tag{4}$$

где  $I_i$  — потенциал ионизации *i*-го электрона. Состояния *i* и *f* неортогональны, поскольку описываются собственными функциями разных гамильтонианов. Соответственно обозначим  $V_Z(r)$  и  $V_{Z-2}(r)$  одноэлектронные потенциалы в исходном и дочернем атомах, а внезапное изменение потенциала  $\Delta V(r) \equiv V_{Z-2}(r) - V_Z(r)$ . Тогда амплитуда встряски будет [6]

$$F_{\rm sh} = \langle \phi_f | \psi_i \rangle. \tag{5}$$

Полную же амплитуду можно представить в виде произведения

$$F_{2e}^{(sh)} = F_{2\beta}F_{sh},$$
 (6)

где  $F_{2\beta}$  мы обозначили собственно амплитуду двойного электронного захвата, приводящего к образованию переходного состояния атома самария. Соответственно выражение для полной ширины получим в виде

$$\Gamma_{2\beta}^{(\mathrm{sh})} = \Gamma_{2\beta} \sum_{i} N_{i} |\langle \phi_{f} | \psi_{i} \rangle|^{2} =$$
(7)  
$$= \Gamma_{2\beta} \sum_{i} N_{i} |F_{\mathrm{sh}}|^{2},$$

где N<sub>i</sub> — число заполнения *i*-й оболочки.

### 3. ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ ДВОЙНОЙ БЕЗНЕЙТРИННЫЙ *e*-ЗАХВАТ

Сравним выражение (7) с формулой для обычного резонансного механизма безнейтринного 2eзахвата, например в модели, рассмотренной в [7]. Она получается умножением ширины образования входного состояния  $\Gamma_{2\beta}$  на резонансный фактор Брэйта—Вигнера

 $\Gamma_{2\beta}^{(\gamma)} = \Gamma_{2\beta} B_W,$ 

где

$$B_W = \frac{\Gamma/2\pi}{\Delta^2 + (\Gamma/2)^2}.$$
(9)

(8)

В (9)  $\Gamma = \Gamma_K + \Gamma_{L_1}$  — полная ширина "раздутого" состояния с электронными дырками в *K*- и *L*<sub>1</sub>- оболочках, образованного в результате резонансного 2*e*-захвата. Сравнивая (7) с (8), получим

<sup>&</sup>lt;sup>3)</sup>Мы используем релятивистскую систему единиц  $\hbar = c = m_e = 1, m_e$  — электронная масса, если не указано иначе.

относительную поправку к вероятности распада в единицу времени в физически ясном виде

$$g \equiv \Gamma_{2\beta}^{(\text{sh})} / \Gamma_{2\beta}^{(\gamma)} =$$
(10)  
$$= \sum_{i} N_{i} |\langle \phi_{f} | \psi_{i} \rangle|^{2} / B_{W} \equiv$$
$$\equiv \sum_{i} N_{i} |F_{\text{sh}}|^{2} / B_{W}.$$

Заметим, что формулу (5) можно переписать в другом, эквивалентном виде [6]

$$F_{\rm sh} \approx I_2 = \frac{\langle \phi_f | \Delta V(r) | \psi_i \rangle}{\Delta}.$$
 (11)

В принципе, встряска возможна на любой оболочке, энергия ионизации которой меньше Q. Но формула (11) позволяет лучше понять, что она максимальна на электронах s-оболочек. В самом деле, потенциал  $\Delta V(r)$  ограничен в пространстве областью вблизи орбит дырочных состояний, образованных захватом соответствующих электронов. А поскольку наибольшую вероятность *е*-захвата имеют *s*-электроны, то в нашем случае это область К- и L<sub>1</sub>-оболочек. Соответственно потенциал  $\Delta V(r)$  максимален в области ядра. С увеличением расстояния от ядра он равномерно уменьшается. Вследствие этого область перекрывания с ним у внешних электронов, и особенно с большим угловым моментом, также значительно меньше, чем у внутренних электронов, что и приводит к уменьшению вероятности встряски. Отметим, что если не учитывать в потенциале встряски  $\Delta V(r)$  вклада от поля захватываемых электронов, т.е. считать ответственным за встряску только изменение заряда ядра на две единицы, вклад внешних электронов был бы завышен.

В заключение этого раздела остановимся на вопросе о том, в каком поле вычислять резонансную энергию испущенного фотона: материнского или дочернего атома. Этот вопрос был разобран в работах [2, 4]. Восходя к известной работе Мигдала о встряске в атоме при бета-распаде [6, 8], в работе [4] было аргументировано, что математически корректный способ решения задачи состоит в разложении волновых функций материнского и промежуточного атомов по базисному набору собственных функций конечного атома. Поэтому резонансная энергия определяется уровнями конечного атома <sup>152</sup>Sm. Аналогичное заключение сделано в работе [2]. В нашем подходе вопрос с энергией находит тот же ответ посредством формулы (4): в нее входит энергия именно конечного состояния атома. Так же и в случае традиционного резонанснофлуоресцентного механизма: энергия первого фотона определяется законом сохранения энергии, исходя из баланса для конечного состояния атома.

Другое дело — волновые функции: в пределах точности метода матричные элементы в формуле (11) можно вычислять либо с волновыми функциями начального, либо конечного атома. С целью контроля мы проводили расчеты по формулам (5) и (11) с неизменными волновыми функциями для удобства счета.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты по формулам (5), (10) выполнены в одноэлектронном приближении с помощью комплекса программ RAINE [9]. Волновые функции электронов и их энергии вычислялись самосогласованным методом Дирака—Фока. С целью лучшего понимания физики процесса были рассчитаны матричные элементы (5) и (11) для ряда гипотетических значений  $\Delta$  от 0.05 до 10 кэВ для всех электронов, чьи потенциалы ионизации меньше заданной величины  $\Delta$  и которые, следовательно, вносят вклад в амплитуду нерезонансного механизма нашего процесса.

Наши волновые функции нормированы на единицу для дискретных состояний и по шкале энергий — в континууме. Поэтому квадрат матричного элемента  $F_{\rm sh}$  имеет размерность, обратную энергии. Матричные элементы и факторы Брэйта— Вигнера приведены в релятивистской системе единиц. В качестве ширин дырочных состояний мы использовали значения  $\Gamma_K = 20$  эВ,  $\Gamma_{L_1} = 5$  эВ [10]. Используя наиболее точное измерение величины Q = 55.70(18) кэВ [7] вместе с приведенным там же расчетным значением  $E_A = 54.794(9)$  кэВ, получим для дефекта резонанса значение  $\Delta =$ = 0.91(19) кэВ.

Результаты расчетов представлены в табл. 1, а также на рис. 1. Парциальные вклады *s*-электронов разных оболочек выписаны в табл. 1. Представленные результаты подтверждают практическую эквивалентность методов расчета по формулам (5) и (11). Соответствующие матричные элементы несколько различаются при малых  $Q \approx 0.5$  кэВ, но с увеличением  $\Delta$  разница нивелируется до нескольких процентов, уже начиная с  $\Delta \approx 0.7$  кэВ.

Суммарный вклад нерезонансного механизма от всех электронов относительно резонансного механизма представлен на рис. 1. Вероятность этого процесса носит резко выраженный ступенчатый характер благодаря тому, что с увеличением Q подключаются все более глубокие оболочки, причем чем более глубоко лежит оболочка, тем большую величину составляет ее вклад на пороге. Как и ожидалось, основной вклад происходит от электронов 4s-, 5s- и 6s-оболочек. Остальные оболочки, в основном  $p_{1/2}$ ,  $p_{3/2}$  и  $d_{3/2}$ , вносят



**Рис. 1.** Отношение (10) вкладов нерезонансного механизма встряски и традиционного резонанснофлюоресцентного механизма в вероятность двойного безнейтринного e-захвата в <sup>152</sup>Gd в зависимости от дефекта резонанса  $\Delta$ .

дополнительную поправку ~30%. Видно, что при малых Q резонансный механизм доминирует. При фактическом значении Q = 0.919 кэВ вклад нерезонансного механизма встряски составляет 23%. Но при Q = 3.43 кэВ вклады обоих механизмов были бы одинаковы. Если бы величина Q составила 10 кэВ, вклад нерезонансного механизма был бы уже в 4.5 раза больше резонансного.

#### 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Выше положено начало изучению процессов встряски в безнейтринном двойном ядерном *e*захвате. В результате предложен новый механизм безнейтринного двойного ядерного *e*-захвата. Его

**Таблица 1.** Результаты расчета матричных элементов  $F_{\rm sh}$  (5) и относительной величины поправки g (10) к вероятности безнейтринного 2e-захвата на встряску для электронов s-оболочек (для сравнения приведены также значения суммы квадратов матричных элементов (5) и (11), обозначенных  $\Sigma_{\rm sh}$  и  $\Sigma_2$  соответственно)

$\Delta$ , кэ ${ m B}$	$F_{\rm sh} = \langle \phi_f   \psi_i \rangle$			$\sum_{i=1}^{n}$	$\Sigma_{0}$	Buy	a
	4s	5s	6s	⊿sh	- 22	$D_W$	9
0.5	0.72	0.30	0.08	0.62	0.90	8.13	0.15
0.65	0.57	0.22	0.06	0.38	0.48	4.81	0.16
0.83	0.45	0.17	0.05	0.23	0.26	2.95	0.16
1.01	0.37	0.14	0.04	0.16	0.16	1.99	0.16
1.2	0.31	0.12	0.03	0.11	0.11	1.41	0.16
1.5	0.25	0.09	0.02	0.071	0.064	0.90	0.16

ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА том 83 № 4 2020

особенность состоит в том, что это нерезонансный механизм. Поэтому можно ожидать, что он окажется более вероятным при распаде в ядрах, характеризуемых значительным энерговыделением. В случае безнейтринного механизма такие случаи могут сочетаться с большим дефектом резонанса, вследствие чего значительно уменьшается вероятность резонансного распада. Рассмотрение нерезонансного механизма позволяет значительно уточнить оценку периода распада. Расчеты, выполненные для <sup>152</sup>Gd, подтверждают это предположение: учет нового механизма увеличивает оценку вероятности двойного захвата на 23% по сравнению с традиционным резонансно-флуоресцентным механизмом. Учитывая полученную в работе [7] оценку периода полураспада этого ядра относительно 0v2eзахвата 10<sup>26</sup> лет в расчете на эффективную массу нейтрино  $m_{\beta\beta} = 1$  эВ, получим уточненную оценку полупериода  $T_{1/2}^{0\nu} \approx 8.1 \times 10^{25} \left| \frac{1 \text{ }_{3B}}{m_{\beta\beta}} \right|^2$  лет. Принимая во внимание другие достоинства  $^{152}\mathrm{Gd}$  как кандидата на измерение  $0\nu 2e$ -захвата [7], такие, как почти полное отсутствие фона от 2*v*2*e*-захвата ввиду малости фазового пространства для последнего процесса, а также абсолютно наибольшее значение резонансного фактора усиления (9), данный нуклид, по-видимому, остается наиболее вероятным кандидатом для поиска двойного безнейтринного езахвата как свидетельства майорановской природы нейтрино.

Авторы признательны Ю.Н. Новикову за инициирующие обсуждения. Они также хотели бы поблагодарить И. Алиханова за ценные замечания.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. XENON Collab., Nature 568, 532 (2019).
- Z. Sujkowski and S. Wycech, Phys. Rev. C 70, 052501 (2004).
- S. A. Eliseev, Yu. N. Novikov, and K. Blaum, J. Phys. G 39, 124003 (2012).
- 4. Ф. Ф. Карпешин, Письма в ЭЧАЯ 5, 636 (2008) [Phys. Part. Nucl. Lett. 5, 379 (2008)].
- 5. Ф. Ф. Карпешин, М. Б. Тржасковская, В. В. Кузьминов, Изв. РАН. Сер. физ. **76**, 986 (2012) [Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **76**, 884 (2012)].
- 6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механи*ка (Наука, Москва, 1974).
- S. Eliseev, C. Roux, K. Blaum, M. Block, C. Droese, F. Herfurth, H.-J. Kluge, M. I. Krivoruchenko, Yu. N. Novikov, E. Minaya Ramirez, L. Schweikhard, V. M. Shabaev, F. Simkovic, I. I. Tupitsyn, K. Zuber, and N. A. Zubova, Phys. Rev. Lett. **106**, 052504 (2011).

- 8. A. Migdal, J. Phys. USSR 4, 449 (1941); E. L. Feinberg, J. Phys. USSR 4, 423 (1941).
- I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor, Jr., P. O. Tikkanen, and S. Raman, At. Data Nucl. Data Tables 81, 1 (2002); I. M. Band and

M. B. Trzhaskovskaya, At. Data Nucl. Data Tables **55**, 43 (1993); **35**, 1 (1986).

10. J. L. Campbell and T. Papp, At. Data Nucl. Data Tables 77, 1 (2001).

## THE NON-RESONANCE SHAKE MECHANISM OF THE NEUTRINOLESS DOUBLE ELECTRONIC CAPTURE

F. F. Karpeshin<sup>1)</sup>, M. B. Trzhaskovskaya<sup>2)</sup>, L. F. Vitushkin<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>D.I. Mendeleyev Institute for Metrology, St. Peterburg, Russia <sup>2)</sup>National Research Center "Kurchatov Institute" — PNPI, St. Peterburg, Russia

It is generally accepted that double neutrinoless electron capture is a resonance process. The calculations of the probability of shaking with the ionization of the electron shell occurring during the transformation of  $^{152}$ Gd nuclei are performed below. This nuclide has the lowest resonance defect among all known nuclei, being considered as one of the main candidates for discovering the neutrinoless mode of the transformation. As a result, the contribution of the new mechanism turns out to be smaller than that of the traditional resonance mechanism, thus representing a correction to the decay probability. However, the value of this amendment is high enough, attaining twenty-three percent. It rapidly increases with an increasing resonance defect, so that for other nuclei it is expected to exceed the contribution of the resonance mechanism and become the main mechanism of double neutrinoless electron capture. Therefore, in principle, double neutrinoless *e*-capture appears not to be a resonance process at all.