

ВЛИЯНИЕ ВСТРЯСКИ НА СКОРОСТЬ БЕЗНЕЙТРИННОГО ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ЗАХВАТА В ^{164}Er

© 2022 г. Ф. Ф. Карпешин^{1)*}, М. Б. Тржасковская²⁾

Поступила в редакцию 28.03.2022 г.; после доработки 23.05.2022 г.; принята к публикации 25.05.2022 г.

Традиционно двойной безнейтринный электронный захват рассматривают как резонансный процесс. Нами выполнены расчеты вероятности встряски с ионизацией электронной оболочки, имеющей место в случае ^{164}Er . Ее учет снимает требование резонанса, приводя к увеличению скорости захвата. Вклад нового механизма увеличивает скорость захвата в 5.6 раза по сравнению с традиционным резонансно-флуоресцентным механизмом. Его учет также повышает вероятность захвата электронов из более высоких оболочек, что необходимо учитывать в экспериментальном исследовании. Более того, учет встряски способен потенциально расширить список ядер-кандидатов на проведение экспериментов.

DOI: 10.31857/S0044002722050063

1. ВВЕДЕНИЕ

Обнаружение скрытой материи во Вселенной стимулирует развитие теорий за пределами Стандартной модели. Как правило, они включают нарушение лептонного квантового числа, если не вводятся специальных ограничений. Этим привлекается большой интерес к исследованию двойных бета-процессов, включая $2e$ -распад ядра и захват им двух орбитальных электронов [1]. В рамках Стандартной модели лептонное квантовое число сохраняется. Это исключает двойной безнейтринный бета-распад или e -захват. Последние становятся возможны только при наличии у нейтрино массы и при том, что нейтрино являются частицами майорановской природы. Однако обнаружение массы у нейтрино и их осцилляций уже ознаменовало наблюдение процессов за пределами Стандартной модели. Таким образом, поиск безнейтринных двойных процессов должен дать ответ на вопрос о майорановской природе нейтрино. Из двух безнейтринных процессов большей скоростью распада обладает $2e0\nu$ -распад. $2e0\nu$ -захват, хотя и уступает $2e0\nu$ -распаду несколько порядков по вероятности, более удобен с точки зрения детектирования.

Существенный момент состоит в том, что безнейтринный $2e$ -захват традиционно рассматривался как резонансный, поскольку ни одной частицы

не испускается в результате ядерного превращения [2]. В то же время закон сохранения требует передачи части освобожденной энергии третьему телу. В качестве такового выступает электронная оболочка атома. Закон сохранения энергии восстанавливается, например, вследствие излучения кванта флуоресценции, энергия которого включает в себя избыточную величину Q . Поэтому энергия этих квантов отличается от обычных квантов флуоресценции, которая имеет место, как правило, в ионизованных атомах с одной-единственной дыркой во внутренней оболочке. Обнаружение таких сателлитов в спектре флуоресценции и может служить индикатором безнейтринного или двухнейтринного двойного электронного захвата [3, 4]. Таким образом, амплитуда безнейтринного захвата перманентно включает в себя, наряду с собственно амплитудой $2e$ -захвата, радиационную вершину, что удлиняет период процесса на два порядка. Поэтому главный критерий прикован к изучению ядер с малым значением Q . В работе [5] был отобран список из трех наиболее подходящих кандидатов на экспериментальное исследование: ^{152}Gd , ^{164}Er и ^{180}W . В настоящей работе мы уточняем вопрос о вероятности процесса $^{164}\text{Er} \rightarrow ^{164}\text{Dy}$, основываясь на новом механизме встряски, предложенном в работе [6].

Механизм встряски не требует резонанса, поскольку его вклад медленней убывает с увеличением дефекта резонанса Δ , чем обычного резонансно-флуоресцентного механизма. Поэтому он может быть реализован независимо от величины Δ . Восстановление закона сохранения энергии происходит вследствие ионизации электронной оболочки. При этом избыток энергии уносится

¹⁾ВНИИМ им. Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия.

²⁾НИЦ “Курчатовский институт” — ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия.

*E-mail: fkarpeshin@gmail.com

вылетевшим электроном. Оценки эффективности встряски были выполнены в работе [6] на примере распада $^{152}\text{Gd} \rightarrow ^{152}\text{Sm}$, обладающего минимальным дефектом резонанса $\Delta = 0.910$ кэВ среди известных кандидатов. Количественно вклад нового механизма оказался на уровне 23% по сравнению с традиционным механизмом. Ожидается, однако, что вклад встряски увеличивается с ростом дефекта резонанса, так что он может стать доминирующим в случае захвата с большим энерговыделением. В настоящей работе мы рассматриваем как раз такой случай на примере процесса $^{164}\text{Er} \rightarrow ^{164}\text{Dy}$, для которого $\Delta = 6.82$ кэВ. Результаты подтверждают ожидания. Учет встряски сокращает ожидаемый период процесса почти в 6 раз. В следующем разделе мы напомним основные формулы. Результаты расчетов приводятся в разд. 3. Раздел 4 посвящен обсуждению результатов, полученных в настоящей работе.

2. СРАВНЕНИЕ ДВУХ МЕХАНИЗМОВ БЕЗНЕЙТРИННОГО $2e$ -ЗАХВАТА: ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ И ФОРМУЛЫ ДЛЯ РАСЧЕТА

При $2e0\nu$ -захвате атом остается в целом нейтральным. Поэтому энерговыделение определяется разностью масс нейтральных атомов — начального M_1 и дочернего M_2 ³⁾:

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

Однако процесс с полным энерговыделением (1) мог бы реализоваться лишь при захвате самого внешнего, валентного электрона. Гораздо более вероятен захват внутренних электронов, плотность которых на ядре выше, соответственно атом остается в возбужденном состоянии с энергией E_A^* и двумя дырками в раздутой оболочке [4]. Соответственно вместо (1) реализуется эффективное энерговыделение

$$Q_{\text{eff}} = M_1 - M_2 - E_A^* = Q - E_A^*. \quad (2)$$

Процесс энергетически возможен при $Q > 0$, но Q_{eff} может быть и отрицательным: избыток энергии может как прибавляться, так и вычитаться из энергии кванта-сателлита. Именно Q_{eff} выступает в роли дефекта резонанса $\Delta = |Q_{\text{eff}}|$.

Формулу для резонансного механизма запишем в однополюсном приближении, воспользовавшись

³⁾Мы используем релятивистскую систему единиц $\hbar = c = m_e = 1$, m_e — электронная масса, если не указано иначе.

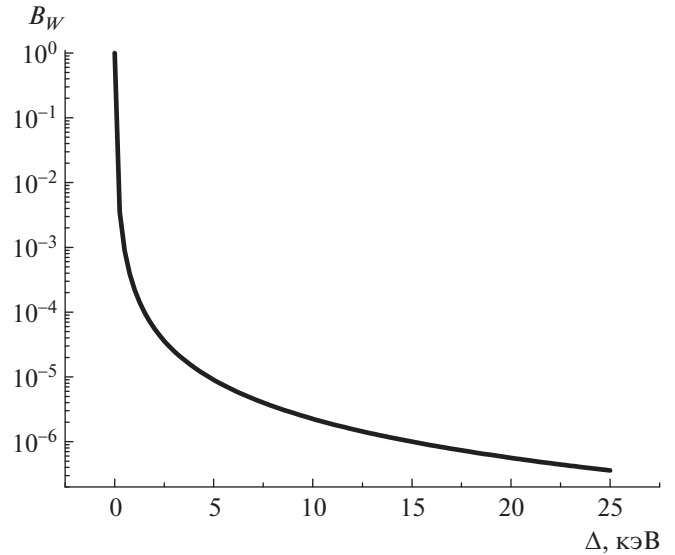


Рис. 1. Типичная зависимость резонансного фактора Брейта–Вигнера (4) (в релятивистских единицах) от дефекта резонанса Δ .

традиционной моделью. Формула получается (например, [7]) умножением квадрата амплитуды собственно захвата Γ_{2e} , который играет роль образования входного состояния, на резонансный фактор Брейта–Вигнера

$$\Gamma_{2e}^{(\gamma)} = \Gamma_{2e} B_W, \quad (3)$$

где

$$B_W = \frac{\Gamma/2\pi}{\Delta^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (4)$$

В (4) Γ — ширина раздутого состояния дочернего атома с двумя электронными дырками, равная сумме ширин каждой из дырок.

Типичное значение $\Gamma \approx 30$ эВ. Для иллюстрации на рис. 1 показан масштаб изменения фактора B_W в зависимости от дефекта резонанса. Он спадает в 2 раза при $\Delta = 1.5$ кэВ. Только один кандидат известен с подходящим значением: ^{152}Gd , у которого $\Delta = 0.91$ кэВ. В остальных известных случаях Δ составляет величину, по крайней мере, от нескольких кэВ до одного–двух десятков кэВ, при этом фактор Брейта–Вигнера спадает до шести порядков величины.

Встряска энергетически возможна только при положительных $Q_{\text{eff}} > 0$ с оболочек, чей потенциал ионизации в дочернем атоме с двумя вакансиями в электронной оболочке I_i удовлетворяет условию

$$I_i < Q_{\text{eff}}, \quad (5)$$

а энергия электронов встряски определится их разностью

$$E_{\text{sh}} = Q_{\text{eff}} - I_i. \quad (6)$$

Встряска возникает вследствие изменения внутриатомного электростатического потенциала $V_z(r)$ в исходном атоме на потенциал в дочернем атоме $V_{z-2}(r)$. Поэтому одноэлектронные волновые функции начального и конечного атомов неортогональны, даже с разными квантовыми числами. Для расчета вероятности встряски наиболее важна неортогональность волновых функций: $\phi_i(r)$ в родительском атоме и $\psi_f(r)$ электрона встряски с энергией E_{sh} в дочернем атоме. Обозначим изменение потенциала $\Delta V(r) \equiv V_z(r) - V_{z-2}(r)$. Таким образом, волновая функция $\phi_i(r)$ принадлежит родительскому нейтральному атому в основном состоянии, а $\psi_f(r)$ вычисляется в поле дочернего атома с тремя вакансиями: двумя на месте захваченных электронов и одной — на месте испущенного электрона встряски. Тогда амплитуда встряски будет [8]

$$F_{sh}(\Delta) = \langle \psi_f | \phi_i \rangle. \quad (7)$$

Полную амплитуду можно представить, аналогично (3), в виде произведения

$$F_{2e}^{(sh)} = F_{2e} F_{sh}(\Delta). \quad (8)$$

Сравнивая (8) с (3), получим относительную поправку к вероятности распада в единицу времени:

$$G = \Gamma_{2e}^{(sh)} / \Gamma_{2e}^{(\gamma)} = \sum_i N_i |\langle \psi_f | \phi_i \rangle|^2 / B_W \equiv \quad (9)$$

$$\equiv \sum_i N_i |F_{sh}(\Delta)|^2 / B_W.$$

В рамках резонансно-флуоресцентного механизма основной вклад возникает от захвата двух L_1 -электронов в атомах ^{164}Er , в результате чего они превращаются в атомы ^{164}Dy . Захват более низких электронов энергетически невозможен, а более высоких подавляется как уменьшением их плотности на ядре, так и падением фактора Брейта–Вигнера вследствие увеличения Q_{eff} . В нерезонансном механизме встряски уменьшение электронной плотности на ядре, например, при захвате из M_1 -оболочки, наоборот, частично компенсируется увеличением Q_{eff} , так как открывается канал встряски электронов с L_1 -оболочки. Это приводит к тому, что вероятность захвата из более высоких оболочек с учетом встряски, как мы увидим, оказывается даже выше, чем вероятность традиционного резонансного механизма. В случае, если происходит ik -захват с более высоких оболочек i, k , можно рассчитать фактор ускорения по сравнению с наиболее вероятным резонансным L_1L_1 -захватом по формуле

$$G_{ik} = \frac{\rho_i(0) \rho_k(0)}{\rho_{L_1}^2(0)} \times \quad (10)$$

$$\times \sum_j N_j \left| F_{sh}^{(j)} \left(\left| Q_{\text{eff}}^{(ik)} \right| \right) \right|^2 / B_W.$$

Здесь суммирование по-прежнему проводится по всем оболочкам j , энергетически разрешенным для встряски, с числами заполнения N_j . $F_{sh}^{(j)} \left(\left| Q_{\text{eff}}^{(ik)} \right| \right)$ — по-прежнему интеграл перекрытия волновых функций электрона на оболочке j и электрона в континууме, но вычисленный при фактическом энерговыделении $Q_{\text{eff}}^{(ik)}$, соответствующем ik -захвату. В случае наиболее вероятного L_1L_1 -захвата самой нижней оболочкой, с которой идет встряска, является M -оболочка. Если захват одного из электронов происходит с M -оболочки, то величина $Q_{\text{eff}}^{(LM)}$ увеличивается на разность потенциалов ионизации L - и M -оболочек. Это автоматически открывает канал встряски с L -оболочки (L_1, L_2, L_3), что приводит к скачкообразному увеличению вероятности встряски.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты по формулам (7), (9) выполнены в одноэлектронном приближении с помощью комплекса программ RAINE [9, 10]. Волновые функции электронов и их энергии вычислялись самосогласованным методом Дирака–Фока. С целью лучшего понимания физики процесса были рассчитаны матричные элементы (7) для ряда гипотетических значений Δ от 0.05 до 20 кэВ для всех электронов, чьи потенциалы ионизации меньше заданной величины Δ и которые, следовательно, вносят вклад в амплитуду нерезонансного механизма нашего процесса. Полные ширины электронных дырочных состояний взяты из работы [11].

Результаты расчетов представлены на рис. 2–5, а также в табл. 1, 2. Наши волновые функции

Таблица 1. Вычисленный вклад различных оболочек в ускорение $2e0\nu$ -захвата; $\rho(0)$ — нормированное на L_1L_1 -захват произведение плотностей в центре ядра двух электронов, захватываемых ядром [10]

Оболочка	Δ , кэВ	$\rho(0)$	G
LL	6.82	1	2.81
LM	14	0.218	1.22
MM	21	0.048	0.20
LN	15.6	0.051	0.29
MN	22.6	0.011	0.05
NN	24.3	0.003	0.01
Итого	—	—	4.58

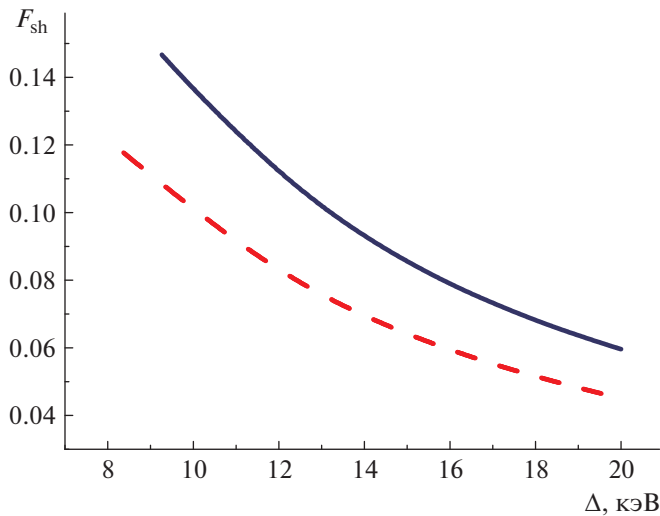


Рис. 2. Матричные элементы F_{sh} для $2p_{1/2}$ - (сплошная кривая) и $2p_{3/2}$ - (штриховая) подоболочек атома ^{164}Dy в зависимости от дефекта резонанса Δ .

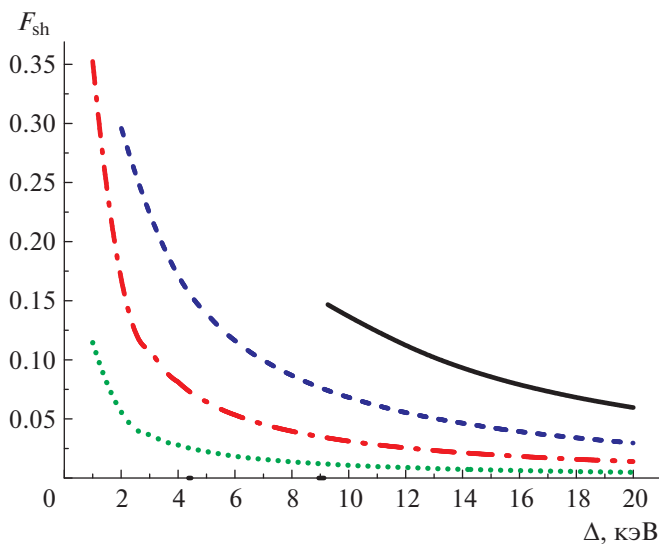


Рис. 3. Матричные элементы F_{sh} для $np_{1/2}$ -подоболочек атома ^{164}Dy : $n = 2$ (сплошная кривая), $n = 3$ (штриховая), $n = 4$ (штрихпунктирная) и $n = 5$ (точечная кривая).

нормированы на единицу для дискретных состояний и по шкале энергий — в континууме. Поэтому квадрат матричного элемента $F_{sh}(\Delta)$ имеет размерность, обратную энергии. Матричные элементы приведены ниже в релятивистской системе единиц.

Чем ближе оболочка к ядру, тем больший вклад дает она во встряску, если та не запрещена энергетически. Это иллюстрируется на рис. 2, на котором приведены матричные элементы F_{sh} для L_2 - и L_3 -подоболочек, представляющих компоненты тонкой

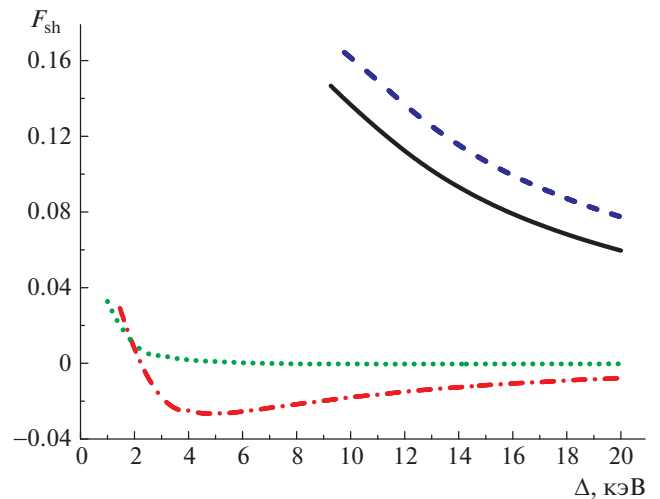


Рис. 4. Сравнение вкладов оболочек в амплитуду встряски в зависимости от орбитального углового момента. Матричные элементы F_{sh} для $2s$ -подоболочки (штриховая кривая), $2p_{1/2}$ -подоболочки (сплошная), $3d_{3/2}$ - (штрихпунктирная) и $4f_{5/2}$ - (точечная) подоболочек атома ^{164}Dy .

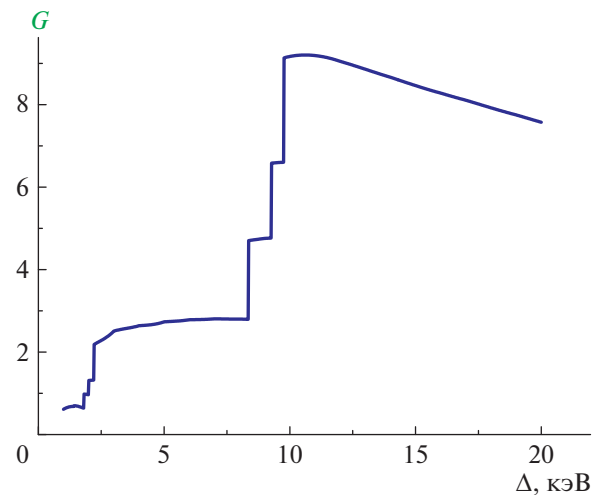


Рис. 5. Выигрыш встряски G (9) по сравнению с резонансно-флуоресцентным механизмом в вероятности двойного безнейтринного L_1L_1 -захвата в ^{164}Er в зависимости от дефекта резонанса Δ .

структуры $2p$ -орбитали. Кривые имеют различные пороги: 9.264 и 8.358 кэВ соответственно. Оба порога выше эффективного энерговыделения, поэтому в данном случае ни одна кривая не вносит вклада во встряску в наиболее вероятном случае L_1L_1 -захвата. На рис. 3 показаны матричные элементы для $2p_{1/2}$ – $5p_{1/2}$ -оболочек. Матричные элементы для остальных оболочек проиллюстрированы на рис. 4.

Суммарный фактор ускорения для L_1L_1 -зах-

Таблица 2. Периоды полураспада ^{152}Gd , ^{164}Er и ^{180}W путем двойного безнейтринного e -захвата, согласно резонансно-флуоресцентному механизму и встряске

Ядра	$^{152}\text{Gd} \rightarrow ^{152}\text{Sm}$	$^{164}\text{Er} \rightarrow ^{164}\text{Dy}$	$^{180}\text{W} \rightarrow ^{180}\text{Hf}$
Канал распада	KL	LL	KK
Δ , кэВ	0.910	6.82	12.5
Резонансный период, годы	10^{27}	2×10^{30}	3×10^{28}
Нерезонансный период	8×10^{26}	3.6×10^{29}	3×10^{27}

вата, соответствующий механизму встряски от всех электронов, относительно резонансного механизма представлен на рис. 5. 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 s - и p -оболочек. Видно, что при малых Q резонансный механизм доминирует. При фактическом значении $Q = 6.82$ кэВ вклад нерезонансного механизма в 3 раза превышает традиционное значение.

Приведенные на рис. 2–4 значения можно использовать для оценки вклада встряски в случаях захвата электронов и с других, более высоких оболочек. Используя полную ширину L_1 -дырки в атоме Dy: $\Gamma = 4.3$ эВ [11], получим по формуле (10) факторы ускорения для захвата с L -, M - и N -оболочек. Они приведены в табл. 1. Из приведенных результатов следует, что учет более высоких оболочек приводит к росту скорости захвата от 2.8 (в случае L_1L_1 -захвата) до 4.6 раза.

Анализ приведенных в табл. 1 результатов подтверждает весомый вклад более высоких оболочек в вероятность захвата по механизму встряски. Он оказывается в 1.8 раза выше, чем вклад резонансно-флуоресцентного механизма. А полный выигрыш составляет 5.6 раза.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Учет процессов встряски в безнейтринном двойном ядерном e -захвате сдвигает теоретические оценки значительно ближе к экспериментальным возможностям. Его особенность состоит в том, что это нерезонансный механизм. Поэтому можно ожидать, что он окажется более вероятным при распаде в ядрах, характеризующихся значительным энерговыделением. В случае безнейтринного механизма большое энерговыделение означает и большой дефект резонанса, вследствие чего значительно уменьшается вероятность распада по резонансному механизму. Рассмотрение нерезонансного механизма позволяет значительно

уточнить оценку периода распада. Приведенные выше расчеты подтверждают это предположение: учет нового механизма увеличивает оценку вероятности двойного захвата в 5.6 раза по сравнению с традиционным резонансно-флуоресцентным механизмом в случае ^{164}Er . Учитывая полученную в работе [7] оценку периода полураспада этого ядра относительно $2e0\nu$ -захвата 2×10^{30} лет в расчете на эффективную массу нейтрино $m_{\beta\beta} = 1$ эВ, получим уточненную оценку периода полураспада

$$T_{1/2}^{0\nu} \approx 3.6 \times 10^{29} \left| \frac{1 \text{ эВ}}{m_{\beta\beta}} \right|^2 \text{ лет.}$$

В табл. 2 мы сводим ожидаемые результаты для периодов полураспада трех вышеуказанных кандидатов: ^{152}Gd , ^{164}Er и ^{180}W . Принимая во внимание, что период полураспада другого кандидата на измерение $0\nu 2e$ -захвата ^{152}Gd остается на четыре порядка короче [6], можно заключить, что он остается более вероятным кандидатом на постановку эксперимента, чем ^{164}Er . Оценки, аналогичные приведенным выше, показывают, что в других случаях более тяжелых ядер с эффективным энерговыделением $\gtrsim 10$ кэВ, в том числе ^{180}W , выигрыш составляет уже полный порядок величины. Тогда ожидаемое время жизни ^{180}W относительно $2e0\nu$ -захвата оказывается всего в 4 раза больше, чем ^{152}Gd . Это может сделать его более предпочтительным кандидатом, учитывая, что распространенность изотопа ^{152}Gd в природе составляет всего 0.2%.

2. Учитывая, что учет встряски приводит к активизации роли высших оболочек, можно ожидать, что спектр флуоресценции имеет более богатую структуру, чем два сателлита, возникающие при захвате обоих электронов только с одной или двух определенных оболочек. В случае ^{164}Er в 20% случаев захват осуществляется с более высоких орбит, чем L_1 . Это приводит к сдвигу энергии основных сателлитов. Более того, возникают сателлиты квантов флуоресценции, отвечающих переходам электронов в состояния M - и N -оболочек. Это обстоятельство необходимо учитывать в эксперименте. Можно его использовать для более надежной идентификации процесса.

Подводя итог, можно заключить, что нерезонансный механизм двойного безнейтринного e -захвата представляет важный пример, в котором интереснейший процесс встряски проявляется удивительно ярко.

Один из авторов (ФФК) хотел бы выразить признательность Ю.Н. Новикову за иницирующие обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M. J. Dolinski, A. W. P. Poon, and W. Rodejohann, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **69**, 219 (2019).
2. Z. Sujkowski and S. Wycech, *Phys. Rev. C* **70**, 052501 (2004).
3. S. S. Ratkevich, A. M. Gangapshv, Yu. M. Gavriluk, F. F. Karpeshin, V. V. Kazalov, V. V. Kuzminov, S. I. Panasenko, M. B. Trzhaskovskaya, and S. P. Yakimenko, *Phys. Rev. C* **96**, 065502 (2017).
4. Ф. Ф. Карпешин, М. Б. Тржасковская, В. В. Кузьминов, *Изв. РАН. Сер. физ.* **76**, 986 (2012) [*Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **76**, 884 (2012)].
5. S. A. Eliseev, Yu. N. Novikov, and K. Blaum, *J. Phys. G* **39**, 124003 (2012).
6. Ф. Ф. Карпешин, М. Б. Тржасковская, Л. Ф. Витускин, *ЯФ* **83**, 344 (2020) [*Phys. At. Nucl.* **83**, 608 (2020)].
7. 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. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1974).
9. I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor, 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. I. M. Band and V. I. Fomichev, *At. Data Nucl. Data Tables* **23**, 295 (1979).
11. J. L. Campbell and T. Papp, *At. Data Nucl. Data Tables* **77**, 1 (2001).

EFFECT OF SHAKE-UP ON THE RATE OF A NEUTRINOLESS DOUBLE ELECTRONIC CAPTURE IN ^{164}Er

F. F. Karpeshin¹⁾, М. Б. Тржасковская²⁾

¹⁾*The D. I. Mendeleev All-Russian Institute for Metrology, St. Petersburg, Russia*

²⁾*NRC "Kurchatov Institute" — PNPI, Gatchina, Russia*

Traditionally double neutrinoless electronic capture is considered as a resonance process. We have fulfilled shake-off probability calculations, leading to ionization of the electron shell, in the case of ^{164}Er . Allowance for the shake-off removes the requirement of resonance leading to an increase of the capture rate. The contribution of the new mechanism increases the capture rate by a factor of 5.6 as compared to the conventional resonance fluorescence mechanism. It also increases the probability of electron capture from higher shells, which must be foreseen in an experimental study. Moreover, effect of the shake-off can potentially expand the list of candidate nuclei for experiments.