

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный  
исследовательский центр «Курчатовский институт»

На правах рукописи



Тырин Кирилл Сергеевич

**Некоторые задачи физики бета-процессов с участием  
электронной оболочки атомов**

Специальность 01.04.16 —

«Физика атомного ядра и элементарных частиц»

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
Криворученко Михаил Иванович

Москва — 2022

## Оглавление

	Стр.
Введение . . . . .	3
<b>Глава 1. Электронный захват в атоме <math>^{159}\text{Dy}</math></b> . . . . .	<b>11</b>
1.1 Вероятность электронного захвата . . . . .	12
1.2 Построение радиальных волновых функций с помощью GRASP2018 . . . . .	13
1.3 Волновая функция электрона внутри ядра, величины $\beta_x p_x^{k-1}$ . . . . .	15
1.4 Вычисление поправки на перекрытие и обмен $B_x$ . . . . .	17
1.5 Другие величины, необходимые для определения вероятности . . . . .	20
1.6 Спектр вторичного излучения и результаты вычислений . . . . .	22
<b>Глава 2. Перекрытие электронных оболочек в бета и двойных     бета—распадах</b> . . . . .	<b>27</b>
2.1 Аналитическая модель . . . . .	27
2.2 Учет экранировки . . . . .	31
2.3 Релятивистский подход . . . . .	32
2.4 Результаты вычислений . . . . .	33
<b>Глава 3. Ионизация атома в бета—распаде трития</b> . . . . .	<b>39</b>
3.1 Вероятность рассеяния бета—электрона на атоме трития . . . . .	40
3.2 Результаты вычислений . . . . .	43
Заключение . . . . .	48
Список литературы . . . . .	51
Список рисунков . . . . .	57
Список таблиц . . . . .	60
Приложение А. Рисунки . . . . .	62
Приложение Б. Таблицы . . . . .	65

## Введение

Нейтрино являются одними из наиболее интересных частиц для исследования физики за пределами Стандартной модели. Есть три типа нейтрино: электронное, мюонное и тау-нейтрино, вместе с соответствующими античастицами. В Стандартной модели нейтрино предполагаются безмассовыми. Однако эксперименты по осцилляциям нейтрино показывают, что нейтрино являются массивными частицами [1]. Из экспериментальных данных возможно оценить разность квадратов масс нейтрино, но нельзя определить абсолютные значения. Абсолютный масштаб масс нейтрино является одним из главных вопросов современной физики. Электронейтральность и чрезвычайная малость масс нейтрино также ставят вопрос являются ли нейтрино майорановскими или дираковскими частицами. Майорановские нейтрино, будучи истинно нейтральными частицами со спином  $1/2$ , не сохраняют полное лептонное число, в то время как нейтрино, описываемые уравнением Дирака, предполагают сохранение разности числа частиц и античастиц. В последнее время широко обсуждалась идея о существовании так называемых стерильных нейтрино, участвующих только в гравитационном взаимодействии, но способных проявлять себя косвенно через смешивание с обычными нейтрино.

Решение проблем физики нейтрино требует теоретического и экспериментального исследования физики бета—процессов. К бета—процессам относят:

1. Бета—распад, при котором нейтрон превращается в протон с излучением электрона и электронного антинейтрино.
2. Бета—плюс—распад, при котором протон внутри ядра превращается в нейтрон с излучением позитрона и электронного нейтрино.
3. Электронный захват, при котором электрон атома поглощается протоном, превращаясь в нейтрон и излучая электронного нейтрино.
4. Двойной бета—распад и двойной электронный захват: аналогично обычным, но два нуклона испытывают превращение одновременно.
5. Двойной безнейтринный бета—распад и двойной безнейтринный электронный захват являются до сих пор не наблюдавшимися гипотетическими процессами, при которых не происходит излучения нейтрино. В данном процессе лептонное число не сохраняется, изменяясь на две

единицы. Процессы возможны только если нейтрино является майорановским.

Существуют и другие гипотетические процессы, такие как двойной бета—плюс—распад (в том числе безнейтринный), одновременный бета—плюс—распад и электронный захват, бета—распады высших порядков. Современный статус физики нейтрино и бета—процессов представлен в монографиях [2], [3] и обзорах [4], [5], [6], [7].

Эксперименты по прямому измерению массы электронного (анти)нейтрино основываются на измерении энергетических спектров частиц, рождающихся в бета—распаде и электроном захвате. Бета—распад обладает трехчастичной кинематикой, энергия реакция распределяется между электроном, антинейтрино, а дочернее ядро испытывает отдачу. Рассматриваются процессы с пренебрежимо малой отдачей ядра в силу малости выделяемой энергии. Интерес представляют события, в которых электрон вылетает с максимально возможной энергией; правый край энергетического бета—спектра сравнивается с теоретическими предсказаниями. В случае массивного электронного антинейтрино правый край смещается влево на величину его массы  $m_{\bar{\nu}_e}$ , а форма спектра искажается вблизи правого края. На сегодняшний день наиболее совершенным экспериментом по прямому измерению массы электронного антинейтрино является эксперимент KATRIN [8]. Используя тритий в качестве бета—эмиттера, в результате анализа правого края экспериментального спектра получены ограничения на массу  $m_{\bar{\nu}_e} < 0.8$  эВ [9].

При электронном захвате энергия реакции распределяется между электронным нейтрино и вторичным излучением оболочки атома (пренебрегая отдачей ядра). Оболочка дочернего атома содержит вакансию и релаксирует, излучая в диапазоне, определяемом энергетической шириной атомного уровня, с которого произошел захват. Анализируя смещение спектра вторичного излучения, можно дать ограничение на массу электронного нейтрино  $m_{\nu_e}$ . Коллаборацией ЕСНО [10], в результате эксперимента по электронному захвату в изотопе гольмия-163, получено ограничение  $m_{\nu_e} < 150$  эВ, что является лучшим ограничением полученным в результате прямого измерения на сегодняшний день. Что касается двойного безнейтринного бета—распада, безнейтринные моды искались в двойных бета—распадах германия-76, теллура-130, ксенона-136 коллаборациями GERDA [11], CUORE [12], KamLAND-Zen [13]. Поиском двойного безнейтринного бета—распада изотопа молибдена-100 занимались кол-

лаборации NEMO-3 [14], CUPID-Mo [15], AMoRE [16]. На настоящий момент убедительные доказательства существования безнейтринной моды отсутствуют.

**Актуальность** определяется активным развитием исследований в области физики бета—процессов и связанной с ним необходимостью в улучшении точности действующих и планируемых экспериментов, что, в свою очередь, требует учета более тонких эффектов в теоретических расчётах. Данная работа посвящена трем задачам физики бета—процессов, которые объединяет факт вовлечения оболочки атома в бета—процесс.

Наиболее ярко роль атомной оболочки проявляется в электронном захвате: поскольку захват происходит в многоэлектронном атоме, требуются адекватные расчеты волновых функций электронов и атомных матричных элементов. Для средних и тяжелых элементов такие вычисления возможны только с использованием программного обеспечения для моделирования многочастичных релятивистских атомных систем. В Главе 1 диссертационной работы исследован процесс электронного захвата в диспрозии-159, оказывающийся интересной альтернативой гольмию-163 для экспериментов по прямому измерению массы электронного нейтрино. Согласно новейшим экспериментальным данным [17], электронный захват диспрозия-159 с разрешенным переходом в один из возбужденных ядерных уровней дочернего тербия-159 обладает рекордно низкой энергией реакции  $Q = 1.14(19)$  кэВ. У диспрозия-159 также может существовать другой канал электронного захвата, с третьим запрещенным уникальным переходом в возбужденное дочернее ядро, с достаточно низкой энергией реакции  $Q = 2.62(19)$  кэВ.

В Главе 2 диссертационной работы обсуждается эффект неортогональности волновых функций электронов родительского и дочернего атомов в бета—процессах, возникающий в силу изменения электрического заряда ядра. Для двойных бета—распадов амплитуда перекрытия волновых функций начальных и конечных электронных оболочек (атомный матричный элемент) оказывается значительно меньше единицы, что указывает на наличие ветвей спектра с возбужденным или частично ионизированным дочерним атомом. Данный эффект является дополнительным источником неопределённости при установлении экспериментальных ограничений на эффективную майорановскую массу электронного нейтрино.

Эффект рассеяния бета—электрона на электроном атоме при распаде трития, приводящий к его ионизации, рассмотрен в Главе 3. Потеря энергии на

ионизацию приводит к искажению формы бета—спектра. Экспериментальное наблюдение подобного спектра без принятия во внимание указанного эффекта может быть ошибочно принято за наличие новой физики, в частности легких стерильных нейтрино.

**Целью** данной работы является:

1. Теоретическое описание электронных захватов в диспрозии-159, обусловленных двумя низкоэнергетическими ядерными переходами - разрешённым и уникальным третьего запрета.
2. Исследование эффекта перекрытия электронных оболочек материнского и дочернего атомов в бета—процессах, связанного с изменением электрического заряда ядра. Оценка амплитуды перекрытия волновых функций электронных оболочек — атомного матричного элемента при одиночных бета и двойных бета—распадах.
3. Построение модифицированного бета—спектра в распаде  ${}^3_1\text{H} \rightarrow {}^3_2\text{H} + e^- + \bar{\nu}_e$ , учитывающего ионизационное рассеяние бета—электрона на атоме трития.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. С помощью многочастичного численного моделирования построить волновые функции электронов атома диспрозия-159, в том числе внутри ядра, а также дочернего атома тербия-159 в зависимости от квантовых чисел захваченного электрона. Вычислить значения волновых функций (амплитуды) внутри ядра, вычислить атомный матричный элемент, задающий поправку на перекрытие и обменные корреляции электронов атома. Используя данные, представленные в литературе, найти соответствующие энергии и ширины вакансий дочернего атома, необходимые для вычислений. Вычислить энергии вакансий, не приведенные в литературе. Вычислить постоянные распада и соответствующие парциальные периоды полураспада. Построить спектр вторичного излучения и проанализировать его на предмет возможности использования процесса для измерения массы электронного нейтрино.
2. Разработать аналитическую модель, позволяющую оценить эффект перекрытия в бета—процессах для средних и тяжелых элементов в широком диапазоне атомных номеров. Предложить феноменологический метод для вычисления атомных матричных элементов на основе простых выражений и эмпирических данных.

3. Исследовать процесс рассеяния бета—электрона на электроном атома трития. Вывести выражение для амплитуды рассеяния. Учесть тождественность электронов. Вычислить вероятность ионизации. Построить распределение по энергии и импульсу вылетевшего электрона атома. Построить поправку к бета—спектру.

### **Научная новизна:**

1. На основе новейших экспериментальных данных по энергиям реакции, впервые вычислены парциальные периоды полураспада и калориметрический спектр вторичного излучения для электронного захвата в диспрозии-159 с переходом в возбужденное состояние ядра тербия-159.
2. В работе впервые предложен способ оценки атомных матричных элементов для электронов—спектаторов при одиночном бета— и двойном бета—распаде на основании того факта, что отношение изменения заряда ядра к величине заряда является параметром малости для средних и тяжелых элементов.
3. Показано, что вероятность ионизации трития при рассеянии бета—электрона на атомарном является заметной величиной, приводящей к искажению формы кривой бета—спектра на несколько процентов. Ранее эффект считался пренебрежимо малым в сравнении с эффектами встряхивания.

### **Практическая значимость**

1. Результаты вычислений в задаче об электронном захвате в диспрозии-159 показывают, что исследованный разрешенный переход с рекордно низкой энергией реакции обладает сравнительно низким периодом полураспада и имеет превосходящее гольмий-163 на порядок число событий на конце расчетного калориметрического спектра. Данный переход может быть использован для уточнения экспериментальных ограничений на массу электронного нейтрино.
2. Величина амплитуд перекрытия начальной и конечной волновых функций атомных оболочек при бета—процессах указывает на существование вторичных ветвей в бета—спектре, эти вклады следуют принимать во внимание при обработке экспериментальных данных. Показано что эффект перекрытия создает дополнительную неопределенность при извлечении эффективной майорановской массы электронного нейтрино, при условии обнаружения двойного безнейтринного бета—распада.

3. Ионизационная поправка к бета—спектру трития важна в связи с тем, что тритий является перспективным источником для экспериментов по прямому поиску массы электронного антинейтрино и поиску стерильных нейтрино; в частности, результаты могут представлять интерес для действующего эксперимента KATRIN.

**Методология и методы исследования.** В данной теоретической работе используется математический аппарат квантовой механики и квантовой теории поля. При аналитических и численных расчетах использовались программы для символьных вычислений MAPLE и Wolfram Mathematica. При численном моделировании многоэлектронных атомных систем был использован программный пакет GRASP2018 [18], [19].

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Исследованы каналы разрешенного и третьего запрещенного уникального перехода в процессе электронного захвата в диспрозии-159 с переходом в тербий-159 с возбужденным ядром. Для разрешенного перехода были вычислены парциальные периоды полураспада и построен калориметрический спектр вторичного излучения. Анализ спектра демонстрирует превосходство в относительном числе событий на конце спектра в сравнении с гольмием-163, что делает этот переход перспективным кандидатом для будущих экспериментов по прямому измерению массы электронного нейтрино. Оценка периода полураспада в канале третьего запрещенного уникального перехода приводит к слишком большой величине, исключая потенциальный эксперимент по измерению массы нейтрино в данном канале.
2. Предложены две модели, оценивающие амплитуды перекрытия волновых функций электронов в начальных и конечных атомах в бета процессах. Амплитуда перекрытия волновых функций электронных орбиталей с одинаковыми квантовыми числами и полная амплитуды перекрытия волновых функций электронных оболочек оценена аналитически с помощью простой нерелятивистской модели. Далее эта модель улучшается за счет учета экранирования заряда ядра электронами, лежащими на глубоких уровнях. Также рассмотрена модель релятивистских оболочек, основанная на уравнении Дирака, в которой эффективный заряд ядра самосогласованно определяется с использо-

ванием полуэмпирических данных об энергиях связи электронов на отдельных уровнях.

3. Исследован эффект внутренней ионизации при бета—распаде трития в результате рассеяния бета—электрона на электроном атома. Рассчитана полная вероятность процесса на одно событие распада. Построены распределения по импульсу и кинетической энергии вылетевшего электрона. Определена поправка к бета—спектру за счет внутренней ионизации.

**Достоверность** Результаты работы получены с использованием общепринятых представлений и математического аппарата теоретической физики. Программный пакет GRASP2018, использованный при численном моделировании многоэлектронных атомных систем, считается золотым стандартом в атомных вычислениях. Все выводы работы согласуются с современными научными представлениями о физике атомов, ядер и элементарных частиц.

**Личный вклад.** Автор принимал участие в формулировке целей и задач работ, по материалам которых написана диссертация; изучал научную литературу по теме исследований; проводил расчеты всех величин лептонной части процесса, необходимых для вычисления постоянных распада и построения спектра вторичного излучения для реакций электронного захвата в диспрозии-159; построении аналитической модели для оценки амплитуды перекрытия волновых функций электронных оболочек материнского атома и дочернего иона в бета и двойном бета—распаде; проводил все вычисления вероятности ионизационного рассеяния на атоме трития при бета—распаде; построении распределений по энергии и импульсу выбитого при ионизации электрона; выполнял расчеты поправки к бета—спектру трития, обусловленной ионизацией дочернего атома; обсуждении результатов; докладывал полученные результаты на конференциях и семинарах ИТЭФ и Курчатовского института; принимал участие в написании статей по результатам работы. Для решения поставленных задач автором был освоен программный пакет релятивистского моделирования атомных систем GRASP2018 [18], [19].

**Апробация работы.** Результаты задачи об ионизации, сопутствующей бета—распаду трития докладывались на Молодежной конференции по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ), г. Москва, 2018 г. [20].

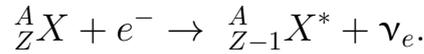
**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 3 печатных изданиях: 3 статьи [17], [21], [22] опубликованы в рецензируемых на-

учных изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования «Scopus» и «Web of Science».

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и двух приложений. Полный объем диссертации составляет 71 страницу, включая 12 рисунков и 14 таблиц. Список литературы содержит 59 наименований.

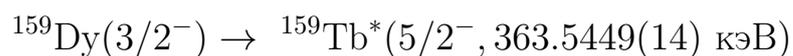
## Глава 1. Электронный захват в атоме $^{159}\text{Dy}$

Как известно, электронный захват это бета—процесс при котором электрон с оболочки атома поглощается протоном в атомном ядре. При этом протон превращается в нейтрон и испускает электронное нейтрино:

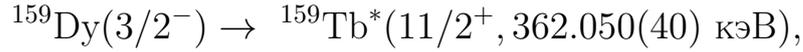


Атомное ядро в свою очередь может изменить свой спин  $J$ , пространственную четность, оказаться в возбужденном состоянии, а его заряд  $Z$  уменьшается на единицу. Изменение электронной конфигурации вследствие наличия вакансии и возбуждений, образовавшихся в атомной оболочке дочернего элемента, приводит к релаксации электронного облака атома через электромагнитные процессы, что в свою очередь наблюдается в виде так называемого калориметрического спектра вторичного излучения. Энергия в виде разности масс родительского атома и дочернего атома с учетом энергии возбуждения ядра и дефекта атомной оболочки (вакансии и возбуждения) уносится нейтрино и вторичным излучением. При этом, если нейтрино обладает массой  $m_{\nu_e}$ , спектр вторичного излучения смещается на величину  $m_{\nu_e}$  в силу сохранения энергии и импульса, при условии что отдачей ядра можно пренебречь. Отсюда возникает идея о прямом измерении массы электронного нейтрино по экспериментальному спектру. Разумеется, для экспериментов такого рода интересны только такие переходы, в которых энергия, уносимая нейтрино, предельно мала и при этом вероятность процесса достаточна высока, чтобы наблюдать необходимое для значимой статистики число событий. Одним из элементов, электронный захват в котором может обладать необходимыми свойствами, оказывается диспрозий-159.

Экспериментальной группой Университета Йювяскюля (Финляндия), с помощью двойной ловушки Пеннинга была измерена разность масс  $\Delta M$  атомов  $^{159}\text{Dy}$  и  $^{159}\text{Tb}$ . Новое измерение  $\Delta M = 364.73(19)$  кэВ [17] оказывается более чем в пять раз более точным в сравнении с предыдущим известным значением, равным  $\Delta M = 365.2(12)$  кэВ [23, с. 233]. У ядра  $^{159}\text{Tb}$ , образующегося после электронного захвата, есть два возбуждения с энергиями, близкими к разности масс  $\Delta M$ . Этим возбуждениям соответствуют ядерные переходы [24, с. 225]



и



а соответствующие энергии реакции  $Q = \Delta M - 363.5449$  кэВ и  $Q = \Delta M - 362.050$  кэВ. В первом случае речь идет об энергии реакции  $Q = 1.14(19)$  кэВ, что является самым малым значением из известных для переходов данного типа, к тому же такой переход наблюдался экспериментально [25]. Во втором случае величина  $Q = 2.62(19)$  кэВ. Чем меньше энергия реакции, тем большее число событий попадает на правый край спектра — в область чувствительную к экспериментальному определению массы нейтрино. Возникает необходимость теоретических расчетов вероятностей электронного захвата и калориметрического спектра вторичного излучения для оценки частоты событий и возможности постановки эксперимента по определению массы нейтрино по вторичному излучению атома  $^{159}\text{Dy}$ . В настоящее время в таких экспериментах используется реакция электронного захвата в изотопе  $^{163}\text{Ho}$  с переходом в основное состояния дочернего ядра  $^{163}\text{Dy}$ , энергия реакция  $Q = 2.83$  кэВ [10] и период полураспада  $T_{1/2} = 4570$  лет.

### 1.1 Вероятность электронного захвата

Вероятность электронного захвата в единицу времени  $\lambda_x$  (постоянная распада) имеет следующий вид [26, с. 261], [27, с. 85]:

$$\lambda_x = \frac{G_\beta^2}{(2\pi)^2} n_x B_x \beta_x^2 (Q - e_x)^2 C_x, \quad (1.1)$$

где  $x = \{n, l, j\}$  набор квантовых чисел захваченного электрона в атоме Dy. Число  $n_x$  есть относительная заселенность уровня  $x$ : отношение числа электронов с квантовыми числами  $x$  к числу возможных проекций  $2j + 1$  полного углового момента  $j = l \pm s$ , где  $l$  — орбитальный угловой момент,  $s = 1/2$  — спин электрона. Константа взаимодействия  $G_\beta^2 = G_F^2 V_{ud}^2 (1 + \Delta_R)$ ,  $G_F$  — постоянная Ферми [28, с. 137],  $V_{ud}$  элемент матрицы смешивания  $u$  и  $d$  кварков [28, с. 261],  $\Delta_R$  — универсальная электрослабая радиационная поправка [29, с. 3]. Амплитуда  $\beta_x$  есть числовая константа, пропорциональная значениям одночастичной радиальной волновой функции захваченного электрона внутри ядра.

Множитель  $B_x$  учитывает перекрытие волновых функций электронных оболочек родительского атома Ду и дочернего Ть, а также обменные корреляции электронов в этих атомах. Энергия реакции  $Q$  есть разность масс нейтрального атома  $^{159}\text{Du}$  и атома  $^{159}\text{Tь}$  с возбужденным ядром, энергия возбуждения ядра зависит от типа перехода. Величина  $e_x$  является энергией вакансии, образовавшейся на месте захваченного электрона, т. е. энергией связи электрона в дочернем атоме  $^{159}\text{Tь}$ . Разность  $(Q - e_x)^2$  отвечает фазовому объему испущенного электронного нейтрино  $\nu_e$  в безмассовом случае и с пренебрежением отдачи ядра. Малое значение массы нейтрино, а также вклад от эффекта отдачи ядра, с малостью, выражающейся отношением энергии реакции к массе ядра  $O(Q/M_{nuc}) = 10^{-8}$ , существенно не влияют на значения  $\lambda_x$ . Величина  $C_x$  является функцией формы перехода, она содержит ядерный матричный элемент соответствующего ядерного перехода и правила отбора по угловым моментам захваченного электрона и испущенного нейтрино. Формула (1.1) приведена в системе единиц  $\hbar = c = m_e = 1$ ,  $m_e$  — масса электрона. Эта система является естественной для задач физики бета-процессов и подразумевается всюду далее, если у физических величин не указана другая размерность.

## 1.2 Построение радиальных волновых функций с помощью GRASP2018

Вычисление величин  $\beta_x$  и  $B_x$  требует построения волновых функций электронов в атомах  $^{159}\text{Du}$  и  $^{159}\text{Tь}$ . Эта сложная многочастичная задача может быть решена только численно, и для этого был использован программный пакет GRASP2018 [18]. Программное обеспечение GRASP2018 (General Relativistic Atomic Structure Package) представляет собой набор программ FORTRAN 95 для выполнения полностью релятивистских многочастичных расчетов электронной структуры атомов. Теория релятивистского многоэлектронного атома, лежащая в основе вычислений, а так же детали реализации кода GRASP2018 подробно изложены в книге [19].

Волновые функции электронов строятся по схеме Дирака — Хартри — Фока в самосогласованном поле электронов атома, а распределение заряда в ядре для соответствующего электростатического потенциала ядра моделируется с

помощью распределения Ферми:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp(r - c)/a}. \quad (1.2)$$

Константа  $\rho_0$  определяется из условия нормировки на заряд ядра  $Z = 4\pi \int_0^\infty \rho(r)r^2 dr$ , параметры  $c$  и  $a$  подбираются так, чтобы соответствующий среднеквадратичный радиус ядра был равен  $R = 0.836A^{1/3} + 0.570$  фм,  $A$  — массовое число. Для ядер  $^{159}\text{Tb}$  и  $^{159}\text{Dy}$ :  $R = 5.099$  фм,  $c = 6.0848$  фм,  $a = 0.5233$  фм. Помимо параметров ядра, для построения волновых функций требуется указать электронную конфигурацию атома и полный угловой момент  $J$  атомной оболочки. Атому  $^{159}\text{Dy}$  в основном состоянии соответствует электронная конфигурация

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2 \quad (1.3)$$

и  $J = 8$ . Полностью заселенные орбитали  $p$ ,  $d$  конфигурации (1.3) в свою очередь расщепляются на релятивистские орбитали  $p_{1/2}^2 p_{3/2}^4$  и  $d_{3/2}^4 d_{5/2}^6$ , а частично заселенной орбитали  $4f^{10}$  соответствует  $4f_{5/2}^6 4f_{7/2}^4$ . При построении волновых функций электронов дочернего атома  $^{159}\text{Tb}$  учитывается наличие вакансии на месте захваченного электрона. Также предполагается что все электроны, за исключением захваченного, наследуют квантовые числа атома  $^{159}\text{Dy}$ , что приводит к наличию десятого возбужденного электрона на орбитали  $4f$ . Список электронных конфигураций атома  $^{159}\text{Tb}$  с наличием вакансии представлен в Таблице 8 Приложения Б. Как результат, программа выводит численные таблицы верхней  $f_x^{(+)}(r)$  и нижней  $f_x^{(-)}(r)$  радиальных компонент релятивистской волновой функций (1.4) электрона с квантовыми числами  $x$  в зависимости от радиуса  $r$ . В качестве примера график функции  $r f_{N_5}^{(\pm)}(r)$  для орбитали  $4d_{5/2}$  ( $N_5$  в обозначениях ИЮПАК) атома  $^{159}\text{Dy}$  представлен на Рисунке А.1. На Рисунке А.2 представлен график  $r f_{L_2}^{(\pm)}(r)$  для орбитали  $2p_{1/2}$  ( $L_2$ ) атома  $^{159}\text{Tb}$  при наличии вакансии на этой же орбитали.

### 1.3 Волновая функция электрона внутри ядра, величины $\beta_x p_x^{k-1}$

Применительно к задачам атомной физики, решение уравнения Дирака в центральном поле имеет вид [19, с. 132]:

$$\psi_{xm}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_x^{(+)}(r)\chi_{\kappa m} \\ i f_x^{(-)}(r)\chi_{-\kappa m} \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Число  $\kappa = -j(j+1) + l(l+1) - 1/4$ , принимает отрицательные значения при  $j = l + 1/2$  и положительные при  $j = l - 1/2$ . Проекция  $m$  полного углового момента принимает значения от  $-j$  до  $j$  с единичным шагом. Сферические спиноры  $\chi_{\kappa m}$  имеют явный вид

$$\chi_{+|\kappa|m}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} Y_{j+1/2}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{j+1/2}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

$$\chi_{-|\kappa|m}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{j-1/2}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{j-1/2}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

где  $Y_j^m(\theta, \varphi)$  сферические функции, и обладают свойством ортонормированности:

$$\int \chi_{\kappa m}(\theta, \varphi) \chi_{\kappa' m'}^\dagger(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (1.7)$$

Для вычисления амплитуд  $\beta_x$  требуется знать поведение  $f_x^{(\pm)}(r)$  вблизи  $r = 0$ . В случае связанных состояний в сферически—симметричном электростатическом потенциале ядра разложение радиальных компонент имеет вид [26, с. 151]

$$f_x^{(\pm)}(r) = \beta_x \frac{(p_x r)^{k-1}}{(2k-1)!!} \sum_{a=0}^{\infty} c_{xa}^{(\pm)} \left(\frac{r}{R}\right)^a, \quad (1.8)$$

$k = |\kappa|$ , параметр  $p_x = \sqrt{1 - (1 - e_x)^2}$  содержит абсолютное значение энергии связи  $e_x$  электрона в родительском атоме  $^{159}\text{Dy}$ ,  $R$ —радиус ядра,  $c_{xa}^{(\pm)}$  модельно зависимые коэффициенты разложения. При  $a = 0$ ,  $c_{x0}^{(\pm)} = (k \mp \kappa)/2k$ , а старшие  $c_{xa} \ll 1$ . Для положительных  $\kappa$ , т. е. орбиталей  $p_{1/2}, d_{3/2}, f_{5/2}$  нижняя радиальная компонента доминирует:  $f_x^{(-)}(r \leq R) \gg f_x^{(+)}(r \leq R)$ . В силу того что функция формы перехода  $C_x$  в формуле (1.1) всегда содержит параметр  $p_x^{k-1}$ , из разложения (1.8) имеет смысл извлекать произведение величин

$\beta_x p_x^{k-1}$ . Зная значение радиальной компоненты  $f_x^{(\pm)}$  в первой ненулевой точке численной сетки  $r = 8.221 \times 10^{-5}$  фм и учитывая только слагаемое с  $a = 0$  в силу малости старших членов, получаем значения, представленные в Таблице 1. Полученные значения хорошо согласуются с известными в литературе табличными [30, с. 9], [27, с. 95].

Для оценки правомерности пренебрежения старшими членами ряда полезно рассмотреть поведение функций

$$\varphi_x^{(\pm)}(r) = \left(\frac{R}{r}\right)^{k-1} \frac{f_x^{(\pm)}(r)}{f_x^{(\pm)}(R)}. \quad (1.9)$$

Функции  $\varphi_x^{(\pm)}(r)$  показывают величину относительного отклонения поведения радиальных компонент от зависимости, задаваемой только первым членом ряда на масштабе ядерных расстояний. На Рисунке А.3 и Рисунке А.4 показаны графики зависимости функции  $\varphi_x^{(+)}(r)$  для орбиталей  $1s, 2p_{3/2}, 3d_{5/2}, 4f_{7/2}$  и  $\varphi_x^{(-)}(r)$  для орбиталей  $2p_{1/2}, 3d_{3/2}, 4f_{5/2}$  в зависимости от радиуса на расстоянии от нуля до двух среднеквадратичных радиусов  $R$  ядра  $^{159}\text{Dy}$ . Отклонение от поведения  $\sim r^{k-1}$  медленно меняется внутри ядра и не превышает 5 %.

Таблица 1 — Величины  $\beta_x p_x^{k-1}$

$x$	К	L <sub>1</sub>	L <sub>2</sub>	L <sub>3</sub>
$\beta_x p_x^{k-1}$	1.2406	0.45339	$0.96917 \times 10^{-1}$	0.12749
$x$	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>
$\beta_x p_x^{k-1}$	0.21147	$0.47616 \times 10^{-1}$	$0.63902 \times 10^{-1}$	$0.44469 \times 10^{-2}$
$x$	M <sub>5</sub>	N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>
$\beta_x p_x^{k-1}$	$0.76136 \times 10^{-2}$	0.10185	$0.22579 \times 10^{-1}$	$0.30306 \times 10^{-1}$
$x$	N <sub>4</sub>	N <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>
$\beta_x p_x^{k-1}$	$0.21196 \times 10^{-2}$	$0.36124 \times 10^{-2}$	$0.61144 \times 10^{-4}$	$0.11181 \times 10^{-3}$
$x$	O <sub>1</sub>	O <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>	P <sub>1</sub>
$\beta_x p_x^{k-1}$	$0.39251 \times 10^{-1}$	$0.79109 \times 10^{-2}$	$0.10246 \times 10^{-1}$	$0.97677 \times 10^{-3}$

## 1.4 Вычисление поправки на перекрытие и обмен $B_x$

При выводе формулы (1.1) для вероятности электронного захвата в единицу времени, в лептонный ток ставят одночастичную волновую функцию захватываемого электрона [26, с. 202]. Однако электронному захвату подвержен многоэлектронный атом, все электроны которого испытывают квантовые корреляции, поэтому лептонный ток следует усреднять по многоэлектронным состояниям. Более того в силу неортогональности волновых функций начальной и конечной атомной оболочки возможно обнаружить дочерний атом в возбужденном состоянии (shake-up) и ионизированном (shake-off) состояниях. Для учета этих многоэлектронных эффектов вводят корректирующий множитель  $B_x$  [26, с. 153], равный

$$B_x = \left| \frac{1}{f_x^{(\pm)}(r)} \langle F | O(r) | I \rangle \right|_{r=R}^2, \quad (1.10)$$

где

$$O(r) = \sum_n f_{nlj}^{(\pm)}(r) \hat{a}_{nlj} \quad (1.11)$$

Радиальная компонента  $f_x^{(\pm)}(r)$  волновой функции электрона атома  $^{159}\text{Dy}$  выбирается в зависимости от знака числа  $\kappa$ : верхняя компонента  $f^{(+)}$  при  $\kappa < 0$  и нижняя  $f^{(-)}$  при  $\kappa > 0$ . Значения радиальных компонент в данной работе брались на среднеквадратичном радиусе ядра  $r = R$ , в литературе так же встречается вариант  $r \sim 0$ , который дает близкие результаты. Состояния электронной оболочки атомов  $^{159}\text{Dy}$   $|I\rangle$  до электронного захвата и  $^{159}\text{Tb}$   $\langle F|$  после захвата представляют из себя слэтеровские детерминанты, составленные из волновых функций электронов (1.4). Оператор  $O(r)$  содержит не только оператор уничтожения  $\hat{a}_x$  захватываемого электрона, но и слагаемые со всеми остальными возможными главными квантовыми числами при заданных  $l, j$ . Это обстоятельство учитывает обменные корреляции электронов с разными главными квантовыми числами при их захвате. Вклад корреляций электронов с разными значениями  $l, j$  при электронном захвате отсутствует в силу условия ортогональности (1.7). В моделях с не центральными потенциалами ядра и среднего поля это свойство не выполняется, но такие эффекты не учитывались в данной работе. Отдельно стоит остановиться на конечных состояниях

$\langle F|$ . Строго говоря, электронной оболочке конечного атома соответствует бесконечный набор состояний с электронами, находящимися как на возбужденных уровнях так и ушедшими в непрерывный спектр. Это так называемый эффект встряхивания, сопутствующий бета—процессу. Усреднение по всем возможным конечным многоэлектронным состояниям представляет из себя сложную техническую задачу. Поэтому при вычислении коэффициентов (1.10) использовалось приближение, предложенное E. Vatai [31], [27, с. 110]: все электроны в конечном состоянии наследуют квантовые числа родительского атома за исключением захваченного электрона, эффекты встряхивания не учитываются. При этом в оригинальной работе E. Vatai использовал нерелятивистскую схему Хартри — Фока для волновых функций электронов начального и конечного атомов, а присутствие вакансии на месте захваченного электрона в дочернем атоме учитывалось по теории возмущений. Как уже упоминалось в Главе 1.2, в данных вычислениях эффект присутствия вакансии, а также десятого электрона на орбитали  $4f$  учитывался точно на уровне построения численного решения в релятивистской самосогласованной схеме. Атомный матричный элемент  $\langle F|O(r)|I\rangle$  сводится к слэтеровскому детерминанту, состоящему из перекрытий  $\mathcal{O}_{nn'}^{jl}$  радиальных компонент волновых функций электронов атомов Dy и Tb:

$$\mathcal{O}_{nn'}^{jl} = \int_0^\infty (f_{nlj}^{(+)}(r; \text{Dy})f_{n'l_j}^{(+)}(r; \text{Tb}) + f_{nlj}^{(-)}(r; \text{Dy})f_{n'l_j}^{(-)}(r; \text{Tb}))r^2 dr. \quad (1.12)$$

В силу (1.7), детерминант имеет блочно—диагональную структуру и распадается на произведение блоков, каждый из которых содержит перекрытия со всеми возможными главными квантовыми числами от минимального  $n_{jl}$  до максимального  $N_{jl}$ , при заданных  $l, j$ . В блоке, содержащем квантовые числа  $l_1, j_1$  захватываемого электрона, в результате действия оператора (1.11) соответствующая строчка заменяется значениями радиальных компонент на ядре. В итоге получаем

$$\langle F|O(R)|I\rangle = \left\| \begin{array}{ccc} \mathcal{O}_{n_{j_1 l_1} n_{j_1 l_1}}^{j_1 l_1} & \cdots & \mathcal{O}_{n_{j_1 l_1} N_{j_1 l_1}}^{j_1 l_1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ f_{n_{j_1 l_1}}^{(\pm)}(R) & \cdots & f_{N_{j_1 l_1}}^{(\pm)}(R) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathcal{O}_{N_{j_1 l_1} n_1}^{j_1 l_1} & \cdots & \mathcal{O}_{N_{j_1 l_1} N_{j_1 l_1}}^{j_1 l_1} \end{array} \right\| \prod_{jl \neq j_1 l_1} \left\| \begin{array}{ccc} \mathcal{O}_{n_{jl} n_{jl}}^{jl} & \cdots & \mathcal{O}_{n_{jl} N_{jl}}^{jl} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathcal{O}_{N_{jl} n_{jl}}^{jl} & \cdots & \mathcal{O}_{N_{jl} N_{jl}}^{jl} \end{array} \right\|. \quad (1.13)$$

Показательным является поведение величин (1.12) в зависимости от главных квантовых чисел. В Таблице 2 представлены численные значения перекрытий

радиальных волновых функций  $\mathcal{O}_{nn'}^{\frac{1}{2}0}$  при захвате с орбитали 4s ( $N_1$ ). Таким

Таблица 2 — Величины  $\mathcal{O}_{nn'}^{\frac{1}{2}0}$  при наличии вакансии на орбитали  $N_1$ .

$n'$	1	2	3	4	5	6
$\mathcal{O}_{1n'}^{\frac{1}{2}0}$	0.99987	0.00953	0.00369	0.00170	0.00067	0.00016
$\mathcal{O}_{2n'}^{\frac{1}{2}0}$	-0.00978	0.99964	0.01641	0.00621	0.00234	0.00058
$\mathcal{O}_{3n'}^{\frac{1}{2}0}$	-0.00375	-0.01699	0.99926	0.02204	0.00710	0.00172
$\mathcal{O}_{4n'}^{\frac{1}{2}0}$	-0.00173	-0.00632	-0.02312	0.99870	0.03018	0.00651
$\mathcal{O}_{5n'}^{\frac{1}{2}0}$	-0.00066	-0.00230	-0.00703	-0.03139	0.99886	0.01153
$\mathcal{O}_{6n'}^{\frac{1}{2}0}$	-0.00016	-0.00056	-0.00170	-0.00658	-0.01233	0.99966

образом величины  $\mathcal{O}_{nn'}^{jl}$  имеют порядок  $10^{-2}$  при  $|n - n'| = 1$ ,  $10^{-3}$  при  $|n - n'| = 2, 3$ ,  $10^{-4}$  при  $|n - n'| = 4, 5$ . При этом интеграл (1.12) вычисляется с точностью до пятого знака после запятой. Поэтому при раскрытии детерминанта (1.13) можно оставлять слагаемые, содержащие максимум один множитель  $\mathcal{O}_{nn'}^{jl}$  с  $n \neq n'$ . В результате получаются формулы, встречающиеся в литературе [27], [26], [31]. В качестве примера приведем формулу для коэффициента  $B_x$  при захвате электрона с орбитали  $M_2$ :

$$\begin{aligned}
B_{M_2} \approx D_{M_2}^2 & \left( \mathcal{O}_{22}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{44}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{55}^{\frac{1}{2}1} - \frac{f_{211/2}^{(-)}(R)}{f_{311/2}^{(-)}(R)} \mathcal{O}_{32}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{44}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{55}^{\frac{1}{2}1} - \right. \\
& \left. - \frac{f_{411/2}^{(-)}(R)}{f_{311/2}^{(-)}(R)} \mathcal{O}_{34}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{22}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{55}^{\frac{1}{2}1} - \frac{f_{511/2}^{(-)}(R)}{f_{311/2}^{(-)}(R)} \mathcal{O}_{35}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{44}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{22}^{\frac{1}{2}1} \right)^2. \quad (1.14)
\end{aligned}$$

Произведение множителя  $D_{M_2}$  на первое слагаемое скобки содержит перекрытия радиальных волновых функций между всеми электронами начальной и конечной электронной оболочки, за исключением одного захваченного и без учета обменных корреляций:

$$\begin{aligned}
D_{M_2} = & (\mathcal{O}_{11}^{\frac{1}{2}0} \mathcal{O}_{22}^{\frac{1}{2}0} \mathcal{O}_{33}^{\frac{1}{2}0} \mathcal{O}_{44}^{\frac{1}{2}0} \mathcal{O}_{55}^{\frac{1}{2}0} \mathcal{O}_{66}^{\frac{1}{2}0})^2 (\mathcal{O}_{22}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{33}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{44}^{\frac{1}{2}1} \mathcal{O}_{55}^{\frac{1}{2}1}) (\mathcal{O}_{22}^{\frac{3}{2}1} \mathcal{O}_{33}^{\frac{3}{2}1} \mathcal{O}_{44}^{\frac{3}{2}1} \mathcal{O}_{55}^{\frac{3}{2}1})^4 \times \\
& \times (\mathcal{O}_{33}^{\frac{3}{2}2} \mathcal{O}_{44}^{\frac{3}{2}2})^4 (\mathcal{O}_{33}^{\frac{5}{2}2} \mathcal{O}_{44}^{\frac{5}{2}2})^6 (\mathcal{O}_{44}^{\frac{5}{2}2})^6 (\mathcal{O}_{44}^{\frac{7}{2}2})^4 \quad (1.15)
\end{aligned}$$

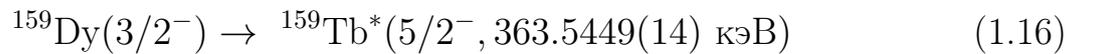
Скобка в свою очередь содержит лидирующие вклады обменных корреляций. Результаты вычисления по подобным формулам представлены в Таблице 3. Для захвата с орбиталей  $N_1$ ,  $O_1$ ,  $P_1$  величины  $B_x$  заметно превышают единицу, и в силу того, что данные уровни вносят заметный вклад в исследуемый разращенный переход, учет поправки на перекрытие и обмен представляется необходимым.

Таблица 3 — Результаты вычисления величин  $B_x$ 

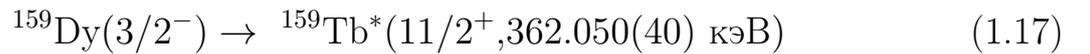
$x$	K	L <sub>1</sub>	L <sub>2</sub>	L <sub>3</sub>
$B_x$	0.9897	1.022	0.9716	0.9714
$x$	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>
$B_x$	1.056	1.001	0.9947	0.9503
$x$	M <sub>5</sub>	N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>
$B_x$	0.9483	1.111	0.9420	1.045
$x$	N <sub>4</sub>	N <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>
$B_x$	1.010	1.007	0.9350	0.9348
$x$	O <sub>1</sub>	O <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>	P <sub>1</sub>
$B_x$	1.148	0.9677	1.096	1.247

### 1.5 Другие величины, необходимые для определения вероятности

Ядерный переход



классифицируется как разрешенный, в то время как переход



классифицируется как третий запрещенный уникальный. Разность спинов начального и конечного ядер  $K = \Delta J$  компенсируется захватом электрона с орбитали с определенным числом  $k$  и электронным нейтрино, обладающим определенным угловым моментом. Информация о том как именно угловой момент распределяется между электроном и нейтрино, а так же о том, какой ядерный матричный элемент обеспечивает сопутствующий ядерный переход, содержится в функции формы перехода  $C_x$ . Для электронного захвата эти функции исследованы и представлены в литературе [27], [26]. Для разрешенного перехода  $K = \Delta J = 1$  лидирующий вклад задается выражением

$$C_x = ({}^A F_{101}^{(0)})^2, \quad (1.18)$$

и при вычислении постоянных распада (1.1) учитываются только орбитали с числом  $k = 1$ , т. е. орбитали  $s, p_{1/2}$ . Для третьего запрещенного уникального

перехода  $K = \Delta J = 4$ ,

$$C_x = \frac{16p_x^{2k-2}R^6(Q - e_x)^{(8-2k)}}{35((8 - 2k) + 1)!(2k - 1)!} ({}^A F_{431}^{(0)})^2. \quad (1.19)$$

В запрещенных переходах все оболочки с энергиями связи электронов дочернего атома, обеспечивающих положительное энерговыделение  $e_x < Q$ , могут вносить вклад в электронный захват, однако вклады  $k \neq K$  обычно подавлены в силу излучения нейтрино с большим угловым моментом. Даже в случае захвата с орбитали  $4f_{7/2}$ ,  $k = 4 = K$ , формула (1.19) содержит общую малость в виде числового коэффициента и радиуса ядра  $R$  в шестой степени. Малые значения амплитуд волновых функций для электронов с большим угловым моментом дополнительно подавляют вероятность электронного захвата с таких орбиталей. Форм-факторные коэффициенты [26]  ${}^A F_{101}^{(0)}$ ,  ${}^A F_{431}^{(0)}$  содержат ядерный матричный элемент соответствующего перехода, а также поправки, связанные с неточечностью нуклона и модификацией нуклонного тока внутри ядерной среды [26]. Период полураспада  $T_{1/2} = \ln 2(\sum_x \lambda_x)^{-1}$  для перехода (1.16), вычисленный при  ${}^A F_{101}^{(0)} = 1$ , нормируется на значение  $T_{1/2} = 2.08 \cdot 10^5$  лет, полученное из экспериментальных данных по брэнчингу [25] и полному периоду полураспада [32], что исключает необходимость вычисления ядерного матричного элемента для данного процесса. Энергии связи электронов атома  ${}^{159}\text{Tb}$  возможно получить из эмпирических данных, доступных в литературе. Значения  $e_x$  также можно вычислить для изолированного атома с помощью GRASP2018, однако в приоритете использование экспериментальных данных, поскольку энергии связи могут зависеть от агрегатного состояния и условий среды. В настоящей работе были использованы данные из работ [33], [34]. Недостающая величина энергии связи для валентного электрона на орбитали  $P_1$  вычислена в GRASP2018, с учетом десятого электрона оказавшегося на  $4f$  орбитали в силу факта наследования квантовых чисел. Значения приведены в Таблице 4.

Отдача ядра приводит к поправкам, известным как нормальные и удельные сдвиги массы атомов. Кинетическая энергия ядра с массой  $M$  и  $Z$  электронов можно записать в виде

$$T = \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 + \frac{1}{2m_e} \sum_i \mathbf{p}_i^2. \quad (1.20)$$

Таблица 4 — Энергии связи  $e_x$  в кэВ электронов на орбитали  $x$  для атома Tb.

$x$	K	L <sub>1</sub>	L <sub>2</sub>	L <sub>3</sub>
$e_x$	51.9957	8.7080	8.2516	7.5140
$x$	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>
$e_x$	1.9675	1.7677	1.6113	1.2750
$x$	M <sub>5</sub>	N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>
$e_x$	1.2412	0.3979	0.3102	0.2850
$x$	N <sub>4</sub>	N <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>
$e_x$	0.1470	0.1470	0.0026	0.0026
$x$	O <sub>1</sub>	O <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>	P <sub>1</sub>
$e_x$	0.0390	0.0254	0.0254	0.0095

В центре масс системы  $\mathbf{P} + \sum_{i=1} \mathbf{p}_i = 0$ . С учетом этого соотношения кинетическая энергия принимает вид

$$T = \frac{1}{2\mu} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + \frac{1}{M} \sum_{i<j} \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j, \quad (1.21)$$

где  $\mu = m_e M / (m_e + M)$  - приведенная масса. Первый член приводит, как хорошо известно, к переопределению атомного масштаба; энергия связи в нерелятивистском приближении при этом изменяется как  $E_B \rightarrow \mu/m_e E_B$ . Это изменение называется нормальным сдвигом массы. Второй член в уравнении (1.21), также оцениваемый пакетом GRASP2018, представляет собой удельный сдвиг массы, который отличается от нуля, начиная с  $Z = 2$ . В рамках квантовой электродинамики (КЭД) эффект ядерной отдачи во всех порядках по  $\alpha Z$  рассмотрен в [35]. GRASP2018 частично учитывает однопетлевые КЭД поправки.

## 1.6 Спектр вторичного излучения и результаты вычислений

Парциальные периоды полураспада  $t_x^{(1/2)} = \ln 2 \lambda_x^{-1}$  при электронном захвате с орбитали  $x$  для разрешенного перехода (1.16) представлены в Таблице 5. Доминирует захват с орбитали N<sub>1</sub>, второй по величине вклад дает захват с орбитали O<sub>1</sub>. Для сравнения, у изотопа <sup>163</sup>Ho, использующегося в текущих

экспериментах по определению массы электронного нейтрино [10], пик электронного захвата находится на орбитали  $M_1$  с энергией вакансии  $e_x = 2.128$  кэВ,  $t_{N_1} \sim 10^3$  лет.

Таблица 5 — Периоды полураспада  $t_x^{(1/2)}$  при захвате электрона с орбитали с квантовым числом  $x$  в атоме  $^{159}\text{Dy}$  в случае разрешенного перехода (1.16).

$x$	$N_1$	$N_2$	$O_1$	$O_2$	$P_1$
$t_x^{(1/2)}$ , лет	$3.0 \times 10^5$	$5.8 \times 10^6$	$8.9 \times 10^5$	$2.6 \times 10^7$	$1.3 \times 10^7$

В свою очередь, по результатам вычислений с единичным  $^A F_{431}^{(0)}$ , третий запрещенный уникальный переход (1.17) обладает полным периодом полураспада  $T_{1/2} > 10^{24}$  лет. Оценка ядерной части процесса  $^A F_{431}^{(0)}$  была проведена под руководством J. Suhonen и в этом случае период полураспада составляет  $T_{1/2} \sim 10^{25}$  лет. Этот переход не наблюдался экспериментально, огромное значение периода полураспада исключает его как кандидата для измерения массы электронного нейтрино. Рассмотренный переход (1.16) сохраняет интерес, но проигрывают изотопу  $^{163}\text{Ho}$  в абсолютных значениях периода полураспада. Однако в контексте эксперимента по определению массы нейтрино главным фактором выбора между изотопами является значение относительной доли событий, приходящихся на правый край спектра. Для решения этой задачи был построен спектр вторичного излучения при электронном захвате  $^{159}\text{Dy}$  с разрешенным ядерным переходом (1.16) и сравнен с аналогичным спектром для  $^{163}\text{Ho}$ . Энергетическое распределение событий электронного захвата представляется в виде некогерентной суммы вкладов захватов с отдельных орбиталей:

$$\frac{d\lambda}{dE} = \sum_x \frac{G_\beta^2}{(2\pi)^2} n_x B_x \beta_x^2 E_\nu p_\nu C_x \frac{\Gamma_x/2\pi}{(E - e_x)^2 + \Gamma_x^2/4}. \quad (1.22)$$

Помимо величин встречающихся в (1.1), здесь фигурирует энергетическая ширина электронной вакансии  $\Gamma_x$ , образованной в дочернем атоме. Импульс  $p_\nu = \sqrt{E_\nu^2 - m_{\nu_e}^2}$  учитывает массивность нейтрино, энергия вторичного излучения  $E = Q - E_\nu$ . Выражение (1.22) определяет вероятность электронного захвата с энергией вторичного излучения, выделяемой в бесконечно малом интервале значений  $(E, E + dE)$ , а вакансии рассматриваются как Брейт — Вигнеровские резонансы. В приближении нулевой ширины  $\Gamma_x \rightarrow 0$  полная постоянная распада

$$\lambda(E = Q - E_\nu) = \int_0^{E=Q-E_\nu} \frac{d\lambda}{dE'} dE'$$

совпадает с результатом полученным суммированием формулы (1.1). При конечных значениях  $\Gamma_x \sim 1$  эВ различие результатов оказывается незначительным,  $\lambda(Q - E_\nu) \approx \sum_x \lambda_x$ . Суммирование в (1.22) проходит по электронным орбиталям из Таблицы 5, а также по орбиталям  $M_1$  и  $M_2$ . Последние находятся в кинематически запрещенной области  $e_x > Q$ , однако хвосты Брейт — Вигнеровской амплитуды для этих вкладов проникают в разрешенный энергетический диапазон и дают заметный вклад в спектр. Энергетические ширины  $\Gamma_x$  вакансий  $N_1, N_2, M_1$  и  $M_2$  в атоме  $^{159}\text{Tb}^*$  взяты из [36]. Данные для остальных ширин не доступны и полагались равными  $\Gamma_{N_2} = 5.26$  эВ. Ширины уровней  $N_1, N_2, M_1$  и ближайшего к энергетическому порогу уровня  $M_2$  известны с точностью 10%, 10%-15%, 5% и 5%-10%. Соответствующая неопределенность спектра не превышает 30%, а интеграл по спектру, как уже упоминалось, практически не зависит от значения ширины уровней. Здесь также следует отметить что экспериментальная неопределенность  $\Delta Q = 190$  эВ энергии реакции  $Q$  вводит через фазовый объем около 50% неопределенности в оценку периода полураспада.

Вычисленный для сравнения калориметрический спектр для случая электронного захвата в изотопе  $^{163}\text{Ho}$  учитывает электроны на уровнях  $N_1, N_2, M_1, M_2, O_2$  а необходимые величины были заимствованы из [37]. Расстояния от правого края спектра до ближайшего пика для диспрозия ( $N_1$ ) и гольмия ( $M_2$ ) сопоставимы. Близость орбиталей диспрозия  $M_1, M_2$  к правому краю спектра частично компенсирует большое различие в абсолютных значениях вероятностей электронного захвата у этих элементов. График спектров для обоих изотопов представлен на Рис.1.1. Оба спектра нормированы на единицу. Из рисунка видно, что для случая  $^{159}\text{Dy}$  на конечную точку спектра приходится большее число событий, чем для электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$ .

Нормированное кумулятивное распределение событий электронного захвата вблизи конечной точки спектра ведет себя пропорционально импульсу нейтрино в третьей степени:

$$\frac{(\lambda - \lambda(E))}{\lambda} \approx Cp_\nu^3.$$

Соответствующие константы  $C = 0.0061$  кэВ $^{-3}$  для  $^{159}\text{Dy}$  и  $C = 0.00056$  кэВ $^{-3}$  для  $^{163}\text{Ho}$ . Числовое значение  $C$  оказывается большим на порядок для случая диспрозия, что объясняется вкладами подпороговых уровней  $M_1, M_2$ . Таким образом наше исследование демонстрирует, что переход (1.16) обладает превосходством на порядок в числе событий в области, чувствительной для

экспериментального определения массы нейтрино. Этот переход является разрешенным, описывается универсальной формой спектра и всего одним ядерным матричным элементом, выпадающим при нормировке спектра, он наблюдался экспериментально, его период полураспада известен. Эти преимущества позволяют рассматривать его как перспективного кандидата для проведения эксперимента по измерению массы электронного нейтрино.

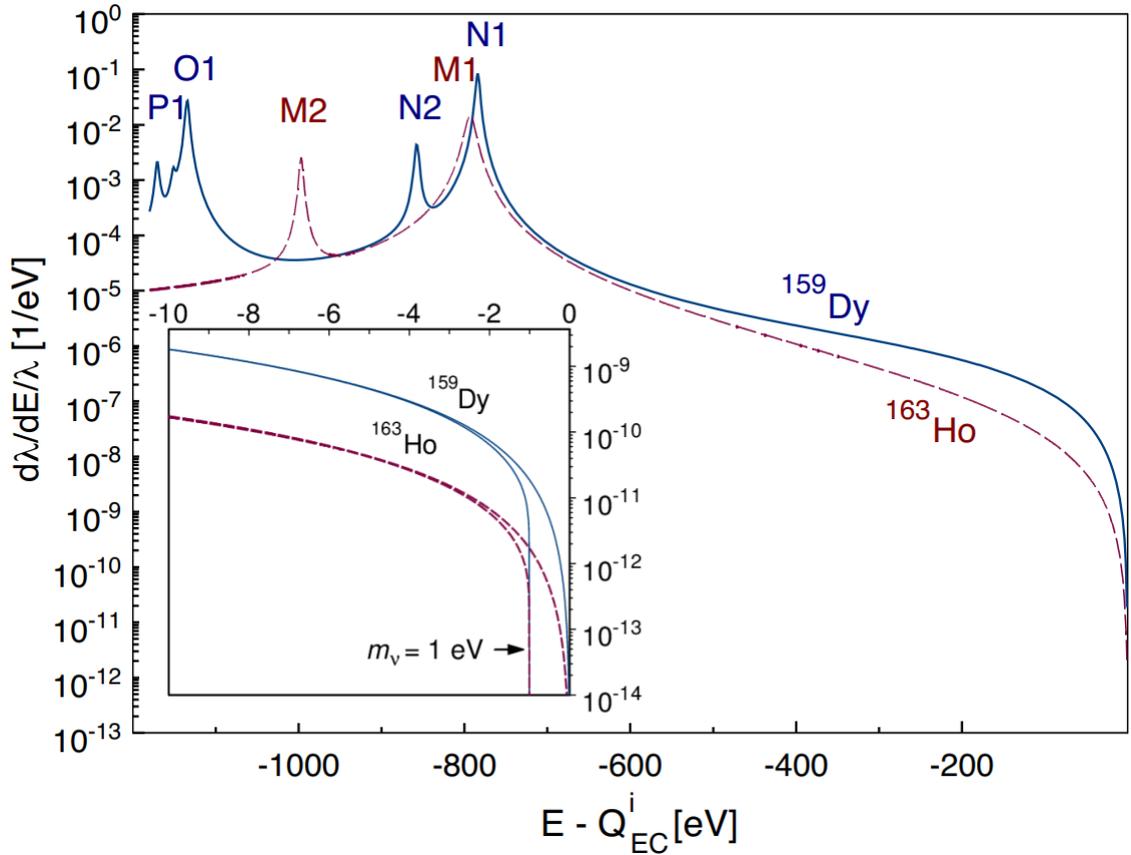


Рисунок 1.1 — Спектры вторичного излучения. Сплошная кривая описывает нормированное распределение событий электронного захвата по энергии вторичного излучения, соответствующее разрешенному переходу (1.16). Пики  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $O_1$  и  $P_1$  соответствуют электронным вакансиям дочернего атома  $^{159}\text{Tb}$ .

Вклад от уровня  $O_2$  едва различим и не обозначен. Штриховая кривая показывает аналогичное распределения для процесса электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$ . Пики  $M_1$ ,  $M_2$  соответствуют вакансиям в дочернем для этого перехода атоме  $^{163}\text{Dy}$ . Энергия вторичного излучения  $E$ , выделяющаяся при электронном захвате, принимает значения во всей кинематически разрешенной области распада. Энергии реакции  $Q_{\text{EC}}^i$  для данных распадов составляют  $Q_{\text{EC}}^{\text{Dy}} = 1.14$  кэВ и  $Q_{\text{EC}}^{\text{Ho}} = 2.83$  кэВ. На вставке в левой нижней части рисунка показаны энергетические спектры для диспрозия и гольмия в увеличенном масштабе у правого края, для визуализации эффекта массивности нейтрино при  $m_{\nu_e} = 0$  и  $1$  эВ. Видно, что  $^{159}\text{Dy}$  характеризуется большим числом событий на конце спектра в сравнении с  $^{163}\text{Ho}$ .

## Глава 2. Перекрывание электронных оболочек в бета и двойных бета—распадах

Каналы бета и двойного бета—распада, не сопровождающиеся возбуждением электронных оболочек, могут быть подавлены из-за неортогональности электронных волновых функций родительского и дочернего атомов. Этот эффект чувствителен к вкладу внешних электронных оболочек. Поскольку валентные электроны—спектаторы участвуют в образовании химических связей и коллективизируются в металлах, бета—спектр также может модифицироваться. Электроны на глубоко лежащих электронных оболочках менее подвержены влиянию окружающей среды, и их амплитуды перекрывания более стабильны. Эффект подавления перехода атомной оболочки в основное состояние дочернего атома оценен для бета—распада  $^{87}\text{Kr}$ , электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$  и двойных бета—распадов  $^{76}\text{Ge}$ ,  $^{100}\text{Mo}$ ,  $^{130}\text{Te}$  и  $^{136}\text{Xe}$ . Бета и двойные бета—распады сопровождаются изменением заряда ядра  $Z$  на одну или две единицы соответственно. Электроны, которые изначально находятся в основном состоянии родительского атома, оказываются в квантовой суперпозиции всех возможных состояний дочернего атома. Как было показано в Главе 1, неортогональность волновых функций электронов приводит к изменению вероятности электронного захвата за счет поправки на перекрывание и обмен. Это обстоятельство также приводит к модификации спектра электронного захвата, в частности для изотопа  $^{163}\text{Ho}$  [38], [39], [40]. В этой главе оценивается вероятность выживания основного состояния электронных оболочек в бета и двойном бета—распадах. Подобный эффект имеет место и для нуклонов, перекрывания волновых функций нуклонов, не участвующих напрямую в двойном бета—распаде обсуждается в [41].

### 2.1 Аналитическая модель

Стандартное разделение переменных в собственных функциях гамильтониана нерелятивистской кулоновской задачи водородоподобного атома дает

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = Z^{3/2} R_{nl}(Zr) Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad (2.1)$$

где  $Z$  — заряд ядра,  $n$  — главное квантовое число,  $l$  — орбитальный угловой момент,  $m$  — его проекция, а  $Y_{lm}(\mathbf{n})$  — сферическая функция. Используется атомная система единиц, где масса электрона  $m_e = 1$  и борковский радиус  $a_0 = 1/(\alpha m_e) = 1$ .  $R_{nl}(Zr)$  удовлетворяет радиальному уравнению Шрёдингера. Условие нормировки имеет вид

$$Z^3 \int_0^\infty r^2 dr R_{nl}^2(Zr) = 1. \quad (2.2)$$

Эта формула справедлива для любого  $Z$ . Дифференцируя обе части уравнения по  $Z$ ,

$$\int_0^\infty r^3 dr R_{nl}(Zr) R'_{nl}(Zr) = -\frac{3}{2Z^4}. \quad (2.3)$$

Амплитуда перекрытия волновых функций электронов с одинаковыми квантовыми числами для атомов с зарядами ядра  $Z$  и  $Z' = Z + \Delta Z$  может быть записана следующим образом:

$$O_{nl} = \int_0^\infty r^2 dr Z^{3/2} R_{nl}(Zr) Z'^{3/2} R_{nl}(Z'r). \quad (2.4)$$

Амплитуда перекрытия  $O_{nl}$  определяет вероятность электрона в дочернем атоме обладать такими же квантовыми числами, как и в родительском. Заметим, что в содержательном случае  $Z \gg 1$ , который охватывает средне—тяжелые и тяжелые атомы, величина  $\Delta Z/Z$  является параметром малости. Разложив множитель  $Z'^{3/2} R_{nl}(Z'r)$  в степенной ряд  $\Delta Z/Z$  до второго порядка, получаем

$$O_{nl} \approx \int_0^\infty r^2 dr Z^{3/2} R_{nl}(Zr) \times \quad (2.5)$$

$$\times \left( 1 + \Delta Z \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{1}{2} \Delta Z^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) Z^{3/2} R_{nl}(Zr).$$

Слагаемое, содержащее вторую производную, может быть выброшено с использованием радиального уравнения Шрёдингера, условия нормировки и уравнения (2.3). Слагаемое, содержащее первую производную, обращается в нуль из-за условия (2.3). Единица в скобках дает нормировку. В результате

$$O_{nl} \approx 1 + \frac{1}{2} \left( -\frac{3}{4} + l(l+1) - 2Z \langle r \rangle \frac{1}{n^2} Z^2 \langle r^2 \rangle \right) \frac{\Delta Z^2}{Z^2}, \quad (2.6)$$

где средний радиус также определяется через квантовые числа [42, с. 158]:

$$Z \langle r \rangle = \frac{1}{2} (3n^2 - l(l+1)),$$

$$Z^2 \langle r^2 \rangle = \frac{n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l+1)).$$

В результате

$$O_{nl} \approx 1 - \frac{1}{8} (1 + 2n^2 - 2l(l+1)) \frac{\Delta Z^2}{Z^2}. \quad (2.7)$$

Для примера можно сравнить вычисления по формуле (2.7) с числами, приведенными в литературе. Амплитуда перекрытия при электронном захвате в  ${}_{67}\text{Ho}$  для уровней  $l = 0$ ,  $n = 1..4$  оказывается равной 0.999916, 0.999749, 0.999470, и 0.999081 в то время как релятивистские вычисления основанные на само-согласованной схеме дают 0.999910, 0.999716, 0.999389, и 0.999332 [38]. Для уровней  $l = 1$ ,  $n = 2..4$  формула (2.7) дает 0.999860, 0.999582, и 0.999192, против 0.999801, 0.999563, и 0.999524 [38] соответственно. Таким образом, для глубоко лежащих и средних электронных уровней разница не превышает  $10^{-4}$ . Теперь сосредоточимся на вычислении амплитуды перекрытия всех электронных оболочек  $K_Z$ . Для начала рассмотрим атомы с заполненными оболочками. В этом случае справедливо следующее соотношение между зарядом ядра  $Z$  и главным квантовым числом  $n_Z$ :

$$Z = \sum_{n=1}^{n_Z} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \sum_{\sigma} 1 = \frac{1}{3} n_Z (n_Z + 1) (2n_Z + 1), \quad (2.8)$$

где суммирование ведется по проекции спина  $\sigma = \pm 1/2$ , угловому моменту  $l$ , проекции углового момента  $m$  и главному квантовому числу  $n$ . Амплитуда перекрытия электронных оболочек  $K_Z$  может быть найдена как произведение  $O_{nl}$  всех электронов:

$$K_Z = \prod_{n=1}^{n_Z} \prod_{l=0}^{n-1} \prod_{m=-l}^l \prod_{\sigma} O_{nl}, \quad (2.9)$$

где произведение ведется по последовательно заполненным электронным оболочкам вплоть до максимально возможного главного квантового числа  $n_Z$ , в то время как эффект экранирования заряда ядра нижележащими электронами не был учтен. Также в этой качественной модели не был учтен эффект перекрытия электронов, обладающих разными главными квантовыми числами  $n$ , подробно обсуждавшийся в Главе 1. Величина  $K_Z^2$  имеет смысл вероятности выживания, то есть вероятности для всех электронов дочернего атома остаться на невозбужденных уровнях. Произведение (2.9) можно оценить с помощью того факта, что для малых  $\varepsilon$ ,

$$\prod_k (1 + c_k \varepsilon) \approx \exp \left( \sum_k c_k \varepsilon \right), \quad (2.10)$$

что приводит к

$$K_Z \approx \exp\left(-\frac{3(n_Z^2 + n_Z + 3)}{40Z}\Delta Z^2\right). \quad (2.11)$$

Формулы (2.8) - (2.11) были получены в предположении что  $n_Z$  есть целое число. После взятия сумм как функций  $n_Z$ , результат аналитически продолжается на любые  $Z$ , для которых действительное положительное решение уравнения (2.8) не обязательно целое число. В пределе больших  $Z$ , асимптотическое поведение формулы (2.11)

$$K_Z \approx \exp\left(-\frac{3^{5/3}2^{1/3}}{80}\frac{\Delta Z^2}{Z^{1/3}}\right). \quad (2.12)$$

Из оценки по формуле (2.12) следует, что при двойном бета-распаде  $^{76}\text{Ge}$  электронная оболочка остается не возбужденной в  $K_Z^2 \approx 0.75$  случаев. Данная формула применима в том числе для оценки диагональных множителей перекрытия  $D$  (1.14) при двойном захвате электронов, безнейтринная мода которого представляет повышенный интерес [43], [44], [45], [7].

Вероятность безнейтринного двойного бета-распада в единицу времени в канал с невозбужденной оболочкой дочернего дважды ионизированного атома пропорциональна

$$\Gamma^{0\nu 2\beta} \propto |K_Z m_{\beta\beta} g_A^2 \mathcal{M}^{0\nu 2\beta}|^2, \quad (2.13)$$

где  $\mathcal{M}^{0\nu 2\beta}$  ядерный матричный элемент,  $g_A$  аксиальная константа,  $m_{\beta\beta}$  — эффективная майорановская масса нейтрино. Аналогично, квадрату  $K_Z$  пропорциональны ширины двух нейтринной моды двойного бета-распада  $\Gamma^{2\nu 2\beta^\pm}$  и обычного бета-распада  $\Gamma^\beta$ . Эффект перекрытия электронов-спектаторов подавляет скорость распада в невозбужденный атом и усложняет процедуру извлечения  $|m_{\beta\beta}|$  из экспериментов [11–14], поскольку требуется учет ветвей с возбужденными состояниями.

Точность разложения  $\Delta Z/Z$  можно проверить, сравнив амплитуду перекрытия электронных оболочек  $K_Z$ , рассчитанную с использованием формулы (2.4) и произведения всех  $O_{nl}$ , расставленного в порядке заполнения для реального атома с одной стороны, и формулы (2.11) с другой. Относительные ошибки  $\delta K_Z$  изображены на Рисунке 2.1. Относительная ошибка не превышает 3 % при  $Z \geq 10$  и  $\Delta Z = \pm 1$ .

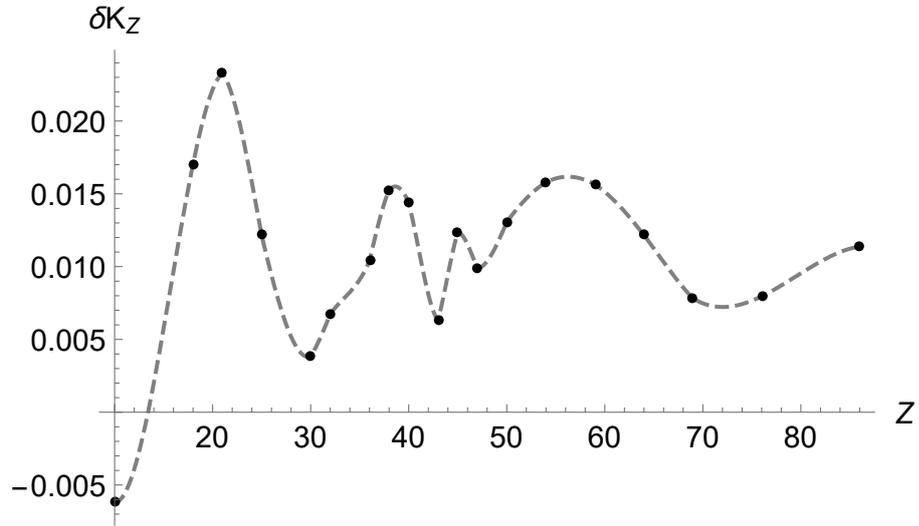


Рисунок 2.1 — Относительная ошибка разложения  $\Delta Z/Z$ , использованного для вывода формулы (2.12). Интерполяционная кривая проходит через конечное число точек, для которых величины  $\delta K_Z = \Delta K_Z/K_Z$  вычислены для бета—распада в диапазоне зарядов ядра  $10 \leq Z \leq 90$ .

## 2.2 Учет экранировки

Оценку амплитуды перекрытия электронных оболочек можно улучшить, учитывая экранирование заряда ядра электронами. Электроны в атоме движутся в эффективном потенциале, который можно аппроксимировать кулоновским потенциалом с эффективным зарядом  $Z_{\text{eff}} < Z$ . На электрон с главным квантовым числом  $n$  действует эффективный заряд  $Z_{\text{eff}} \approx Z - Z_s$ , где  $Z_s$  - количество электронов на нижних орбиталях с главными квантовыми числами  $1 \dots n - 1$ . Число  $Z_s$  задается формулой (2.8) с заменой  $n_Z$  на  $n - 1$ . Соответственно, в формуле (2.7) достаточно сделать замену  $Z \rightarrow Z_{\text{eff}}$ . Это приводит к следующему выражению для амплитуды перекрытия электронных оболочек

$$K_Z \approx \exp \left( - \sum_{n=1}^{n_Z} \frac{9n^2 (n^2 + 2) \Delta Z^2}{4(n((3 - 2n)n - 1) + n_Z(n_Z + 1)(2n_Z + 1))^2} \right), \quad (2.14)$$

сумма вычисляется в терминах специальных функций и окончательное выражение получается довольно громоздким. С учетом экранировки, числа  $O_{nl}$  для случая электронного захвата  ${}_{67}\text{Ho}$  становятся равными 0.999916, 0.999733, 0.999269, 0.997287 для уровней  $l = 0$ ,  $n = 1..4$  и 0.999852, 0.999422, 0.997616 для уровней  $l = 1$ ,  $n = 2..4$ . Разница с числами из [38] меньше  $10^{-4}$  для  $n \leq 3$  и  $10^{-3}$  для  $n = 4$ . Амплитуды перекрытия уменьшаются с увеличением  $n$ .

Произведение по проекции спина, проекции орбитального углового момента и орбитального момента дает

$$\prod_{l=0}^{n-1} \prod_{m=-l}^l \prod_{\sigma} O_{nl} \approx \exp \left( -n^2(n^2 + 2) \frac{\Delta Z^2}{Z^2} \right). \quad (2.15)$$

Амплитуда перекрытия  $O_{nl}$  для электрона с главным квантовым числом  $n$  пропорциональна  $\sim n^4/Z^2$ . С учетом экранировки, если  $Z_{\text{eff}}$  - экранированный заряд для электронов с главным квантовым числом  $n$ , то вклад в амплитуду перекрытия увеличивается как  $\sim n^4/Z_{\text{eff}}^2 > n^4/Z^2$ . Формулы (2.7) и (2.15) показывают, что максимальный вклад в подавление дают электроны с высокими значениями  $n$  и низкими значениями  $l$ . Особенно важна внешняя валентная электронная оболочка.

### 2.3 Релятивистский подход

Поскольку амплитуды перекрытия  $O_{nl}$  близки к единице ( $O_{nl} - 1 \sim 10^{-2} \div 10^{-4}$ ), при использовании программного обеспечения для моделирования атомных систем, точность численного определения волновых функций электронов следует тщательно контролировать. Использование аналитических выражений для волновых функций электронов имеет в этом отношении определенное преимущество, поскольку аналитические методы могут сузить диапазон неопределенностей, присущих численным схемам. Оценка амплитуды перекрытия волновых функций электронов может быть дана с помощью решений уравнения Дирака в кулоновском поле путем определения эффективного заряда ядра для каждого электронного уровня из известных полуэмпирических значений энергий связи электронов [33]. Такой подход упоминается в литературе, в частности он использовался для расчета энергии кулоновского взаимодействия вакансий, образующихся при двойном безнейтринном электронном захвате [46]. Используя известные энергии связи электронов, эффективные заряды родительского и дочернего ядер рассчитываются для каждого электронного уровня и затем подставляются в решения уравнения Дирака для водородоподобного атома. Полученные волновые функции нормируются и используются для вы-

числения амплитуды перекрытия

$$O_{njl} = \int_0^{\infty} r^2 dr (f_{njl}^{(+)}(Z_{\text{eff}}, r) f_{njl}^{(+)}(Z'_{\text{eff}}, r) + f_{njl}^{(-)}(Z_{\text{eff}}, r) f_{njl}^{(-)}(Z'_{\text{eff}}, r)), \quad (2.16)$$

при этом обменные эффекты за счет перекрытия с разными главными квантовыми числами (1.12) не учитываются. Интеграл (2.16) вычисляется аналитически для конкретных значений  $n, l, j$ . Численные значения с высокой точностью можно получить с использованием программ для научных расчетов, таких как Wolfram Mathematica или Maple.

## 2.4 Результаты вычислений

На Рисунке 2.2 показан график зависимости  $K_Z^2$ , вычисленного по формулам (2.11) и (2.12) как функции заряда ядра  $Z$ . Сплошные кривые показывают поведение  $K_Z^2$  с учетом экранировки для  $\Delta Z = \pm 1$  (верхняя кривая) и  $\Delta Z = \pm 2$  (нижняя кривая). Величины  $K_Z$  быстро выходят на плато, отсутствуют осцилляции, присущие периодическому закону в силу нетривиального порядка заполнения оболочек. Аналитическая модель строилась так, как будто все оболочки заполнены. Амплитуды (2.16) для бета-распада Kr, электронного захвата в No и двойных бета-распадов Ge, Mo, Te и Xe представлены в Таблицах 9–14, также приведены соответствующие энергии электронов и эффективные заряды для каждого уровня. Оценки, представленные в Таблицах 9–14, демонстрируют преобладание вкладов внешних электронных орбиталей и, в частности, валентных электронов. Поскольку валентные электроны участвуют в химических связях и коллективизированы в металлах, их влияние плохо контролируемо. Прямой расчет с использованием модельных функций (2.16) с учетом вклада электронов валентной оболочки дает нерегулярные значения полной амплитуды перекрытия  $K_Z$ , представленные в Таблице 6. Для амплитуды перекрытия электронных оболочек в распадах Kr и Xe было пренебрежено различием между твердым и газообразным агрегатным состоянием поскольку использованные волновые функции подразумевают изолированный атом, эмпирические энергии связи взятые из [33] даны для разных фаз. Энергия связи для уровня  $5s$  атома Mo не приведена в [33], поэтому этот уровень не был учтен при

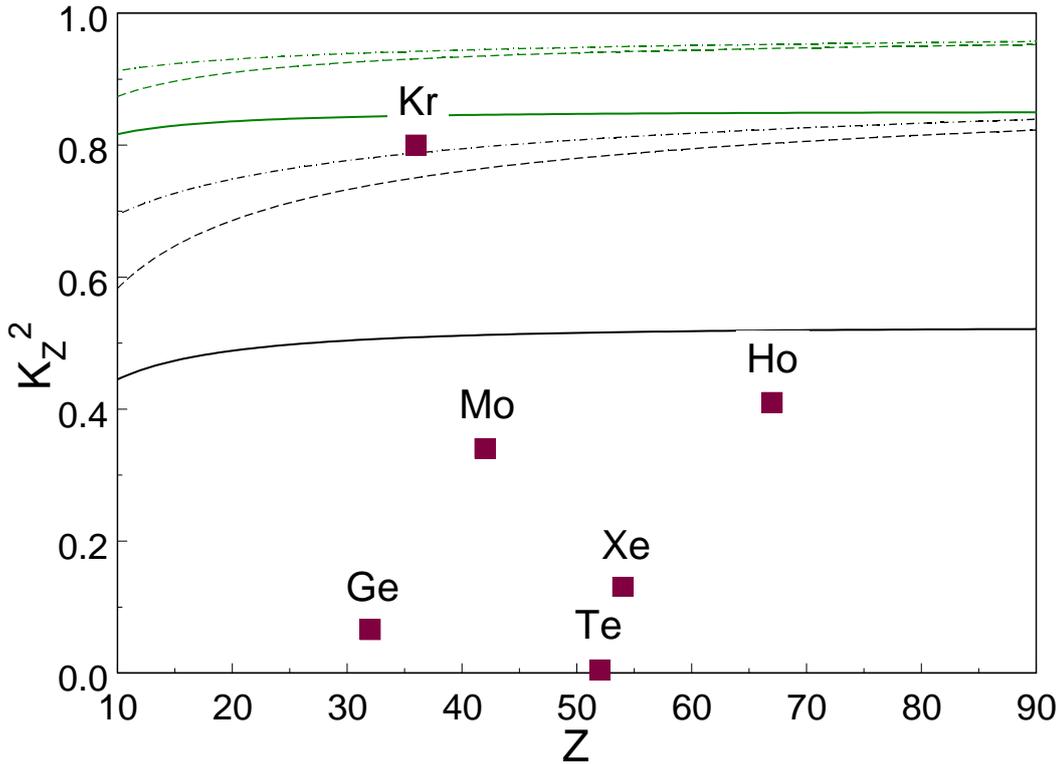


Рисунок 2.2 — Вероятность выживания невозбужденных электронных оболочек  $K_Z^2$  в зависимости от заряда ядра  $Z$ . Зеленые верхние кривые соответствуют процессам с  $\Delta Z = \pm 1$ . Черные нижние кривые соответствуют процессам с  $\Delta Z = \pm 2$ . Пунктирные и точно пунктирные кривые рассчитаны с использованием формул (2.11) и (2.12) соответственно. Сплошные кривые рассчитаны с учетом экранировки (2.14). Красными квадратами обозначены величины  $(K_Z^{\text{core shells}})^2$ , вычисленные с помощью модельных волновых функций (2.16), для бета—распада Kr, электронного захвата Ho и двойных бета—распадов Ge, Mo, Te и Xe

вычисления  $K_Z$ . В случае электронного захвата в атоме Ho число  $K_Z$  есть величина амплитуды перехода атомной оболочки гольмия и дочернего атома Dy без учета образовавшихся вакансий и обменных эффектов. Аккуратный расчет рассмотренный в Параграфе 1.4, требует вычисления коэффициентов  $B_x$ , что не является возможным в рамках обсуждаемых здесь простых моделей.

Низкие значения  $K_Z$  означают, что канал распада, в котором электронные оболочки дочернего атома не возбуждены, подавлен. Чтобы понять, какие каналы преобладают в случаях с низким значением  $K_Z$ , необходимо рассмотреть переходы в возбужденные состояния. Числа, полученные для германия

Таблица 6 — Полная амплитуда перекрытия  $K_Z$  и амплитуда перекрытия за вычетом валентных оболочек  $K_Z^{\text{core shells}}$  рассчитанные с помощью (2.16) для бета—распада  $^{87}\text{Kr}$ , электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$  и двойном бета—распаде  $^{76}\text{Ge}$ ,  $^{100}\text{Mo}$ ,  $^{130}\text{Te}$  и  $^{136}\text{Xe}$ . Число валентных электронов указано в скобках после символа элемента.

Элемент	$_{32}\text{Ge}(4)$	$_{36}\text{Kr}(8)$	$_{42}\text{Mo}(6)$	$_{52}\text{Te}(6)$	$_{54}\text{Xe}(8)$	$_{67}\text{Ho}(3)$
$K_Z$	$6.2 \times 10^{-3}$	0.89	0.56	$1.4 \times 10^{-4}$	0.22	0.53
$K_Z^{\text{core shells}}$	0.26	0.90	0.58	0.069	0.36	0.64

и теллура обладают аномальной малостью, что может свидетельствовать о недостаточной точности описанного в Параграфе 2.3 метода. Вероятность выживания основных электронов, то есть электронов атома за вычетом электронов из валентных оболочек, в меньшей степени подвержена эффектам среды. Исключая 4 валентных электрона в атоме Ge, получаем  $K_Z^{\text{core shells}} = 0.26$ . Аналогичные вычисления для Kr без 8, Mo без 6, Te без 6, Xe без 8, и Ho без 3 валентных электронов представлены в Таблице 6. Внешняя электронная оболочка криптона и ксенона заполнена, что приводит к адекватным значениям  $K_Z$ . В силу малости отношения  $K_Z/K_Z^{\text{core shells}}$  полученных для некоторых элементов, необходимо выполнить расчеты по альтернативным схемам моделирования структуры электронной оболочки. Расчеты были проведены в GRASP2018 для бета—распада  $^{87}\text{Kr}$  и двойных бета—распадов  $^{76}\text{Ge}$ ,  $^{130}\text{Te}$ ,  $^{136}\text{Xe}$ , результаты представлены в Таблице 7. Малость значений  $K_Z$  для атомов Ge и Te оказы-

Таблица 7 — Величины  $K_Z$ , вычисленные при помощи GRASP2018.

Элемент	$_{32}\text{Ge}$	$_{36}\text{Kr}$	$_{52}\text{Te}$	$_{54}\text{Xe}$
$K_Z$	0.575	0.876	0.589	0.606

вается связанной с тем что амплитуда перекрытия, вычисленная по формуле (2.16) с помощью водородоподобных релятивистских волновых функций с эффективным зарядом, сильно зависит от разницы энергии связи электрона в начальном и конечном атоме. Например, в случае двойного бета—распада Te в Xe величины энергий для внешних орбиталей  $N_4 - O_2$  отличаются в полтора—два раза что приводит к значениям  $O_{njl} \approx 0.8 - 0.3$  (Таблица 12). Эти числа возводятся в соответствующие степени заселенности уровня что и приводит к  $K_Z \sim 10^{-4}$ . В тоже время величины полученные с помощью GRASP2018 близки

к единице:  $O_{njl} - 1 \sim 10^{-4} - 10^{-2}$ . Для химических элементов с простой структурой внешних электронных оболочек и малой разницей энергии связи между начальным и конечным состоянием электрона формула (2.16) дает адекватную оценку. Стоит отметить что GRASP2018 позволяет провести вычисления только для изолированного атома, эффекты среды не контролируются.

При стандартных значениях температуры и давления криптон и ксенон являются инертными газами, которые обычно не образуют химических связей с другими атомами. Однако число валентных электронов является усредненной характеристикой атомов. Например, гольмий имеет максимальную валентность 13, в то время как в химических соединениях он обычно отдает три электрона. Криптон обычно отдает два электрона при образовании соединений и т. д. Отношение  $K_Z/K_Z^{\text{core shells}}$  определяет вклад валентной оболочки. Малость  $K_Z \ll K_Z^{\text{core shells}}$  означает, что доминирующие каналы распада связаны с возбуждением валентных оболочек. Вычисление отношения  $K_Z/K_Z^{\text{core shells}}$  требует многочастичного численного моделирования с учетом эффектов среды, простые модели переоценивают вклад валентных оболочек, в то время как GRASP2018 недооценивает эффект в силу отсутствия функционала для учета эффектов среды.

Учитывая, что лидирующий вклад в амплитуду перекрытия пропорционален  $\Delta Z^2$ , для процессов с  $\Delta Z = 2$  характерно заметное отклонение величины  $K_Z$  от единицы, в частности такое поведение можно ожидать в двойном электронном захвате  $^{124}\text{Xe}$ , который недавно наблюдался коллаборацией XENON [47].

Амплитуды вероятности двойного безнейтринного бета-распада и безнейтринного двойного электронного захвата пропорциональны эффективной майорановской массе электронного нейтрино

$$m_{\beta\beta} = \sum_i U_{ei}^2 m_i,$$

где  $U_{\alpha i}$  - матрица смешивания Понтекорво—Маки—Накагавы—Сакаты, а  $m_i$  — диагональные массы нейтрино. Исследование анизотропии космического микроволнового фона коллаборацией Planck дает ограничение  $\sum_i m_i < 0.12$  эВ [48].

Экзотические взаимодействия за пределами Стандартной модели могут изменять массу нейтрино в ядерной материи, поэтому эффективная майорановская масса электронного нейтрино, извлеченная из экспериментов по двойному безнейтринному бета-распаду, может отличаться от вакуумного значения [49].

Аналогичный эффект возникает в суперсимметричных обобщениях Стандартной модели [50; 51].

Коллаборации GERDA и KamLAND-Zen [11; 13] по поиску двойного безнейтринного бета—распада в  $^{76}\text{Ge}$  и  $^{136}\text{Xe}$ , дают ограничения  $|m_{\beta\beta}| < 120 - 260$  мэВ и 61 - 165 мэВ соответственно, с учетом неопределенностей ядерных матричных элементов и при значении аксиальной константы  $g_A = 1.27$ . Ранее коллаборациями NEMO-3 и CUORE [12; 14] были получены ограничения  $|m_{\beta\beta}| < 330 - 620$  мэВ и 270 - 760 мэВ для элементов  $^{100}\text{Mo}$  и  $^{130}\text{Te}$ . Ограничения на массу  $|m_{\beta\beta}|$  должны быть дополнены новым условием  $K_Z = 1$  согласно соотношению (2.13). Неидеальное перекрытие электронных оболочек при умеренно низком значении  $K_Z$  приводит к увеличению верхних пределов на множитель  $1/K_Z$ , если при извлечении  $|m_{\beta\beta}|$  не учитываются дополнительные ветви спектра с возбуждениями дочернего атома. Результаты из Таблицы 6 для двойного безнейтринного бета—распада изотопов  $^{100}\text{Mo}$  и  $^{136}\text{Xe}$  демонстрируют соответствующее увеличение ограничения в 1.8 и 4.6 раз. Если использовать значения из Таблицы 7 полученные с помощью GRASP2018, для элементов Xe, Te и Ge ограничение увеличивается примерно в 1.7 раз. Случай  $K_Z \ll 1$  уводит за пределы применимости формулы (2.13) и требует аккуратного расчета эффектов встряхивания, т. е. каналов спектра с возбужденной или ионизованной атомной оболочкой.

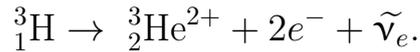
Калориметрические детекторы при бета—процессах измеряют полную выделяемую энергию. Поскольку энергии возбуждения валентных электронов в атомах составляют примерно 10 эВ, для того чтобы экспериментально различить вклад с невозбужденным атомом от вклада каналов с возбуждением электронных оболочек требуется измерение энергии бета—электрона с разрешением как минимум 10 эВ. В противном случае эти каналы невозможно различить экспериментально.

Амплитуда перекрытия валентных оболочек,  $K_Z/K_Z^{\text{core shells}}$  чувствительна к химическим связям, свойствам окружающей среды, условиям эксперимента и т. д. Эти неопределенности складываются с неопределенностями, присущими расчету ядерной части процесса. Неопределенности ядерных матричных элементов в безнейтринном двойном бета—распаде достигают 50 % [52]. Аксиальная константа в ядерной среде также плохо определена: отклонение может достигать половины от её значения для свободного нуклона  $g_A = 1.27$  [53],

что, в свою очередь, может увеличить верхний предел величины  $|m_{\beta\beta}|$  примерно в 4 раза.

### Глава 3. Ионизация атома в бета—распаде трития

В случае бета—распада трития интерес представляет процесс, при котором испущенный ядром электрон рассеивается на электроне атома путем кулоновского взаимодействия, уводя его в непрерывный спектр и оставляя дочерний атом гелия дважды ионизированным:



При этом бета—электрон теряет часть своей энергии, что отражается на форме кривой бета—спектра. Этот процесс следует различать с эффектом встряхивания, при котором изменение заряда ядра на единицу действует на электрон атома как внезапное возмущение: неортогональность волновой функции электрона в атоме трития и волновой функции электрона иона гелия дает возможность наблюдать электрон конечного состояния на возбужденном уровне либо в континууме. В случае ионизации эффект пропорционален амплитуде перекрытия волновой функций электрона родительского атома и волновой функции непрерывного спектра электрона в поле дочернего иона. Для водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$  этот эффект хорошо изучен в силу простоты волновых функций, в работе [54, с. 432] вычислена вероятность встряхивания с К оболочки, равная

$$W_K = \frac{32(Z+1)}{3Z^3} \left( 1 + \frac{2(Z+1)}{3Z} \right) \exp(-4(Z+1)/Z), \quad (3.1)$$

а средняя кинетическая энергия вылетевшего электрона оказывается равной  $\bar{E}_2 = 11/10 \epsilon$ , где  $\epsilon$  — энергия связи электрона в атоме. Для трития  $W_K \approx 0.016$  и  $\bar{E}_2 \approx 15$  эВ. Вопрос о рассеянии бета—электрона на электронах атома рассматривался в работах [54], [55], [56]. В работе [54] приведены аргументы, согласно которым эффект пренебрежимо мал по сравнению с встряхиванием. Позже, в работе [55, с. 7], это утверждение частично опровергается: при кинетической энергий бета—электрона  $E$  много меньше его массы (нерелятивистский случай) и энергии  $E_2$  вылетевшего электрона порядка его энергии связи в атоме  $\epsilon$ , вероятность рассеяния может превышать вероятность встряхивания. Для уточнения величины эффекта и соответствующей корректировки формы бета—спектра трития требуются количественные расчеты. В частности, эти расчеты могут оказаться полезными для эксперимента KATRIN, цель которого — измерение

массы электронного антинейтрино и поиск стерильных нейтрино в диапазоне масс нескольких кэВ при распаде трития [8]).

### 3.1 Вероятность рассеяния бета—электрона на атоме трития

Максимальная кинетическая энергия бета—электрона при распаде трития составляет 18.564 кэВ. Следовательно, рассеяние бета—электрона на электроне атома можно описать, используя нерелятивистскую теорию возмущений. Волновая функция бета—электрона  $\psi_s(r_1)$ , излученного неполяризованным ядром, задается сферической волной:

$$\psi_s(r_1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi k}} \frac{e^{ikr_1}}{r_1},$$

нормированной на единичный поток через сферу единичного радиуса с центром в ядре,  $k$  — величина импульса, распределенная по бета—спектру. Предполагается что до рассеяния атом находится в основном состоянии, волновая функция электрона К-оболочки

$$\psi_K(r_2) = \frac{b^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-br_2},$$

где  $b$  — обратный Боровский радиус, в используемой системе единиц  $\hbar = c = m_e = 1$  его численное значение совпадает с постоянной тонкой структуры  $\alpha = 1/137$ , а энергия связи электрона на К-оболочке равна  $\varepsilon = b^2/2$ . Электроны рассеиваются кулоновским потенциалом  $\alpha/r$ ,  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , и после рассеяния их волновые функции описываются плоскими волнами

$$\psi_{k_i}(\mathbf{r}_i) = e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}_i},$$

$i = 1, 2$ . В этом случае амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений принимает вид

$$M = -i \int \psi_{k_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) \frac{\alpha}{r} \psi_s(r_1) \psi_K(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (3.2)$$

Чтобы избавиться от угловой зависимости плоские волны следует разложить по сферическим:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_l^m(\mathbf{n}_k) Y_l^{*m}(\mathbf{n}_r),$$

$\mathbf{n}_r$ ,  $\mathbf{n}_k$  — единичные орты вдоль направлений векторов  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{k}$ ;  $j_l(kr)$  — сферические функции Бесселя. Кулоновский потенциал в свою очередь раскладывается по формуле Лапласа:

$$\frac{1}{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^l (-1)^m \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^m(\mathbf{n}_{\mathbf{r}_2}) Y_l^{-m}(\mathbf{n}_{\mathbf{r}_1}),$$

где  $r_{<} = \min(r_1, r_2)$  и  $r_{>} = \max(r_1, r_2)$ . Подставляя разложения в (3.2) и проведя интегрирование по углам с помощью условия ортонормированности получаем амплитуду

$$M = 32\pi^2 \frac{b^{5/2}}{\sqrt{k}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{(-1)^l}{2l+1} I_l(k_1, k_2) Y_l^m(\mathbf{n}_{\mathbf{k}_1}) Y_l^{*m}(\mathbf{n}_{\mathbf{k}_2}), \quad (3.3)$$

содержащую радиальный интеграл

$$I_l(k_1, k_2) = \int_0^{\infty} dr_1 j_l(k_1 r_1) \frac{e^{ikr_1}}{r_1^l} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^{l+2} j_l(k_2 r_2) e^{-br_2} + \\ + \int_0^{\infty} dr_1 r_1^{l+1} j_l(k_1 r_1) e^{ikr_1} \int_{r_1}^{\infty} dr_2 \frac{1}{r_2^{l-1}} j_l(k_2 r_2) e^{-br_2}. \quad (3.4)$$

Вероятность рассеяния  $W(k)$  в единицу времени за одно событие бета—распада как функция импульса  $k$  бета—электрона может быть вычислена согласно золотому правилу Ферми:

$$W(k) = \int |M|^2 2\pi\delta \left( \frac{k^2}{2} - \frac{k_1^2}{2} - \frac{k_2^2}{2} - \varepsilon \right) \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3}. \quad (3.5)$$

Сферические функции, содержащиеся в формуле (3.3), позволяют проинтегрировать квадрат модуля амплитуды по угловой части фазового объема. Снимая интеграл по абсолютной величине импульса  $k_1$  с помощью дельта функции, выражающей закон сохранения энергии, находим

$$W(k) = \frac{(2b)^5}{\pi k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \int_0^{k_{2m}} dk_2 |I_l(k_1, k_2)|^2 k_2^2 \sqrt{k^2 - b^2 - k_2^2}. \quad (3.6)$$

Верхнему пределу интегрирования  $k_{2m} = \sqrt{k^2 - b^2}$  соответствует максимальный возможный импульс вылетевшего электрона, а на величину импульса бета—электрона накладывається ограничение  $k \geq b$ , соответствующее пороговому значению для данного процесса.

Амплитуда процесса (3.2) написана без учета тождественности частиц. Двухчастичная волновая функция электронов в начальном и конечном состоянии с учетом их спиновой части  $\chi(\sigma)$  должна быть антисимметрична:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = 2^{-1/2}(\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\chi_1(\sigma_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2)\chi_2(\sigma_2) - \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\chi_1(\sigma_2)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_1)\chi_2(\sigma_1)),$$

$\xi = \{\mathbf{r}, \sigma\}$ . Использование двухчастичной антисимметричной волновой функции в начальном и конечном состоянии и усреднение по спинам  $\sigma$  приводит к тому, что квадрат модуля радиального интеграла (3.4) расщепляется на вклады синглетного и триплетного спиновых состояний:

$$|I_l(k_1, k_2)|^2 \rightarrow \frac{1}{2} \left( \frac{3}{4} |I_l(k_1, k_2) - I_l(k_2, k_1)|^2 + \frac{1}{4} |I_l(k_1, k_2) + I_l(k_2, k_1)|^2 \right). \quad (3.7)$$

Полная вероятность ионизировать атом за счет рассеяния на одно событие бета—распада задается усреднением (3.6) по бета—спектру, нормированному на единицу:

$$\mathcal{W} = \int W(k) d\Gamma = \int_b^{k_m} \frac{d\Gamma}{dk} W(k) dk, \quad (3.8)$$

$k_m = \sqrt{2E_m}$ ,  $E_m = 18.564$  кэВ. Для вычислений был использован бета—спектр трития, представленный в работе [57, с. 2]. В переменных кинетической энергии  $E$  спектр имеет вид

$$\frac{d\Gamma}{dE} = \frac{G_\beta^2}{2\pi^3} |\mathcal{M}^\beta|^2 F(Z', E) k E (E_m - E)^2, \quad (3.9)$$

эффект отдачи ядра пренебрежен, неизвестная масса электронного антинейтрино полагается равной нулю. Постоянная  $G_\beta$ , определенная в Главе 1, и ядерный матричный элемент  $|\mathcal{M}^\beta|^2$  сокращаются при нормировке спектра на единицу

$$\int d\Gamma = 1.$$

Функция Ферми

$$F(Z', E) = \frac{|\Gamma(\gamma + i\eta)|^2}{\Gamma(1 + 2\gamma)^2} 2(1 + \gamma)(2kR')^{2\gamma-2} e^{\pi\eta}$$

учитывает притяжение электрона дочерним ядром гелия-3 с зарядом  $Z' = 2$  и радиусом  $R' = 1.966$  фм. Здесь кулоновский параметр  $\eta = Z'/k$ ,  $\gamma = \sqrt{1 - (\alpha Z')^2}$ .

### 3.2 Результаты вычислений

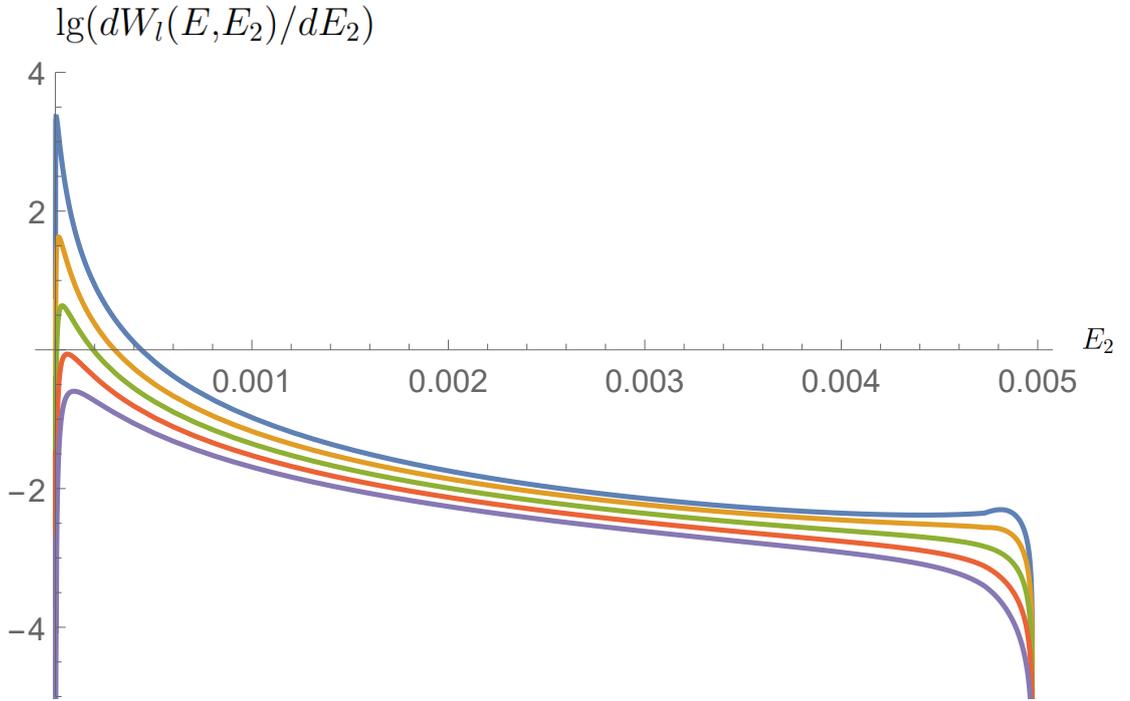


Рисунок 3.1 — Распределение по кинетической энергии  $E_2$  вылетевшего электрона в логарифмическом масштабе  $\lg(dW_l(E, E_2)/dE_2)$  при фиксированном значении энергии бета-электрона  $E = k^2/2$  соответствующей величине импульса  $k = 0.1$  в безразмерных единицах. Кривые расположены сверху вниз, в порядке увеличения углового момента  $l = 0..4$ .

Численный расчет по формулам (3.6), (3.8) приводит к вкладам в полную вероятность ионизации, быстро убывающим с ростом углового момента  $l$  в радиальном интеграле (3.4):  $\mathcal{W} = 0.0554$  при  $l = 0$ ,  $\mathcal{W} = 0.0031$  при  $l = 1$ ,  $\mathcal{W} = 0.0007$  при  $l = 2$ . При этом радиальный интеграл (3.4) является сильно осциллирующим и обладает медленной численной сходимостью при больших  $l$ . Для дальнейших вычислений мы ограничимся вкладом  $l = 0$ . Учет тождественности электронов (3.7) приводит к некоторому уменьшению значения  $\mathcal{W} = 0.0536$ .

На Рисунке 3.1 представлена зависимость индивидуальных слагаемых ряда по  $l$  (3.6) в распределении вероятностей по кинетической энергии  $E_2$  вышедшего электрона

$$\frac{dW_l(E, E_2)}{dE_2} = \frac{dW_l(k, k_2)}{dk_2} \frac{1}{k_2}$$

при фиксированном значении импульса бета—электрона в логарифмическом масштабе. Вклады в вероятность быстро убывают с увеличением  $l$ .

На Рисунке 3.2 показан график распределения

$$\frac{d\mathcal{W}(k_2)}{dk_2} = \int_{\sqrt{b^2+k_2^2}}^{k_m} \frac{(2b)^5}{\pi k} |I_0|^2 k_2^2 \sqrt{k^2 - b^2 - k_2^2} \frac{d\Gamma}{dk} dk \quad (3.10)$$

в безразмерных единицах по импульсам вылетевшего электрона  $k_2$ , усредненного по бета—спектру, ограничиваясь вкладом  $l = 0$ , когда оба электрона излучаются в виде  $s$ —волн. Под  $I_0$  понимается выражение (3.7), тождественность частиц учтена. Острому пику соответствует наиболее вероятное значение импульса примерно равное  $6b/10$ , а в переменных кинетической энергии этому пику соответствует значение  $E_2 \sim 5$  эВ. За острым пиком следует медленно убывающее плато, при вычислении среднего это приводит к значению средней кинетической энергии  $\overline{E}_2 = 85.8$  эВ. Это число не является пренебрежимо малым: средняя кинетическая энергия спектра (3.9) составляет  $\overline{E} = 5.669$  кэВ. Из этого значения следует вычесть среднюю энергию, затраченную на рассеяние  $\overline{E}_2 + \varepsilon \sim 100$  эВ, что задает масштаб эффекта в несколько процентов. Поправку к бета—спектру трития, учитывающую ионизационное рассеяние на электроны атома, можно оценить следующим образом. С вероятностью  $(1 - \mathcal{W})$  рассеяния не происходит и бета—спектр  $d\Gamma/dE$  остается не возмущенным. В случае рассеяния бета—электрон теряет энергию  $\varepsilon$  плюс кинетическую энергию  $E_2$ , сообщенную вылетевшему электрону с вычисленным распределением вероятностей  $dW_l(E, E_2)/dE_2$ . Таким образом результирующий спектр

$$\frac{d\Gamma_1}{dE} = (1 - \mathcal{W}) \frac{d\Gamma}{dE} + \int_0^{E_m - \varepsilon - E} \frac{d\Gamma(E + \varepsilon + E_2)}{dE} \frac{dW_0(E + \varepsilon + E_2, E_2)}{dE_2} dE_2. \quad (3.11)$$

Этот спектр характеризуется средним значением кинетической энергии  $\overline{E} = 5.45$  кэВ. Отклонение спектра (3.11) от бета—спектра трития (3.9)  $1 - d\Gamma_1/d\Gamma$  показано на Рисунке 3.3. Разница достигает 4 % в середине энергетического диапазона  $E > 5$  кэВ. Точно такой же эффект отклонения спектра вниз на несколько процентов ожидается при наличии четвертого стерильного нейтрино с массой  $m_4 \sim 10$  кэВ и коэффициентом смешивания с электронным нейтрино  $\sin^2(\theta_{14}) \sim 0.2$  [58]. Отсутствие учета ионизационного рассеяния может быть ошибочно принято за наличие физики за рамками Стандартной модели. На Рисунке 3.4 изображена разность исходного и модифицированного спектров  $(d\Gamma - d\Gamma_1)/dE$  в средней части энергетического диапазона.

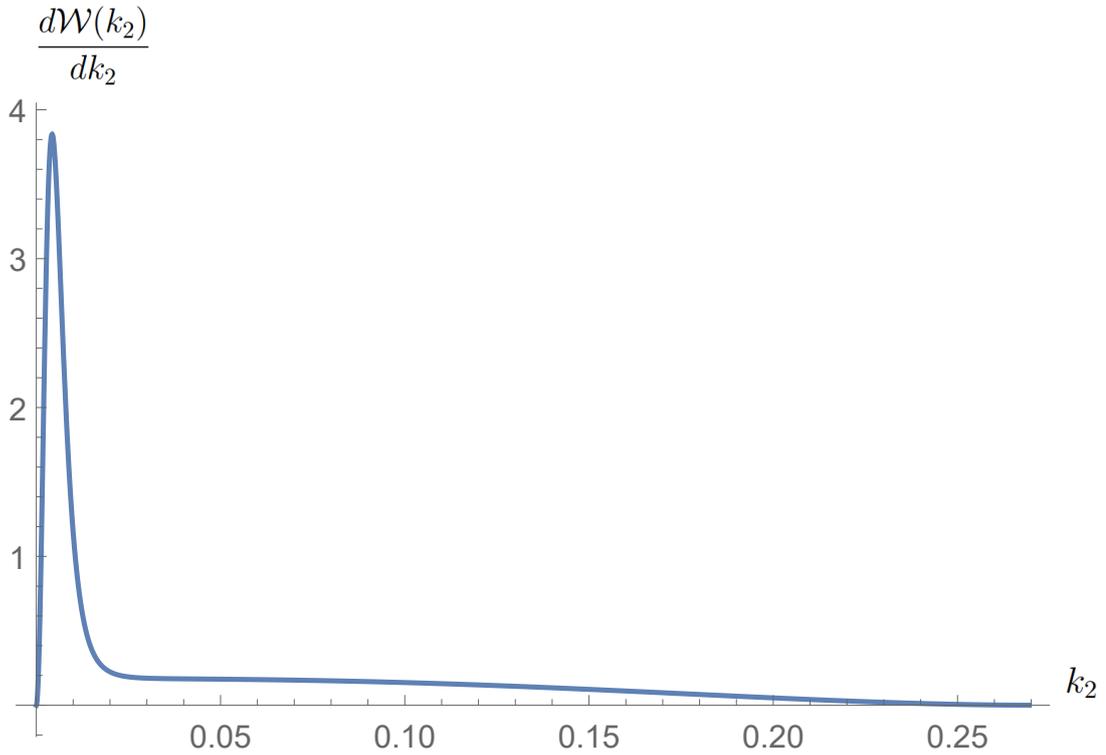


Рисунок 3.2 — Распределение  $dW/dk_2$  по импульсам  $k_2$  вылетевшего электрона в безразмерных единицах, усредненное по бета-спектру трития (3.9), с учетом тождественности частиц.

На Рисунке 3.5 правый край модифицированного бета-спектра  $d\Gamma_1(E)/dE$  показан в сравнении со стандартной кривой  $d\Gamma(E)/dE$ . Конечная точка спектра  $E = 18.564$  кэВ остается несмещенной. Рассмотренный эффект не изменяет значимым образом энергетический спектр в области, чувствительной к измерению массы нейтрино.

Изложенные вычисления могут переоценивать эффект. Волновые функции электронов в конечном состоянии брались в виде плоских волн. В тоже время вылетевший при ионизационном рассеянии электрон обладает малыми энергиями, поэтому эффект притяжения ядра может быть значительным. Фактор  $F(Z', E)$ , содержащийся в бета-спектре, учитывает только притяжение бета-электрона ядром. Так как для вылетевшего электрона наиболее вероятны энергии порядка его энергии связи в атоме, эффект отталкивания от бета-электрона в конечном состоянии также должен быть принят во внимание. В эксперименте KATRIN используется молекулярный тритий  ${}^3\text{H}_2$ . Аккуратные вычисления должны учитывать молекулярные эффекты. В работе [59] рассмотрены все поправки к бета-спектру молекулярного трития, известные в литературе. В частности учтен эффект встряхивания в возбужденные состоя-

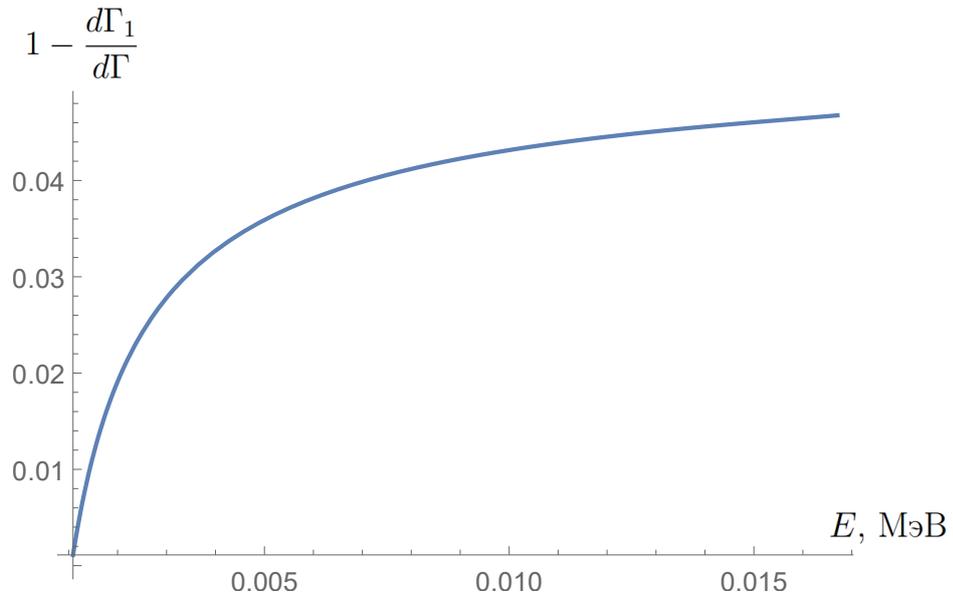


Рисунок 3.3 — Отклонение от формы стандартного бета—спектра ( $1 - d\Gamma_1/d\Gamma$ ), за счет учета потери энергии на ионизационное рассеяние на атоме трития в диапазоне кинетической энергии  $E$  1 - 18 кэВ. Отклонение превышает 4 % в средней части спектра. Положительная величина отклонения означает, что кривая модифицированного спектра (3.11) расположена ниже кривой (3.9).

ния дочерней молекулы  ${}^3\text{H } {}^3\text{He}^+$ , однако эффект ионизационного рассеяния на молекулярных электронах не упоминается.

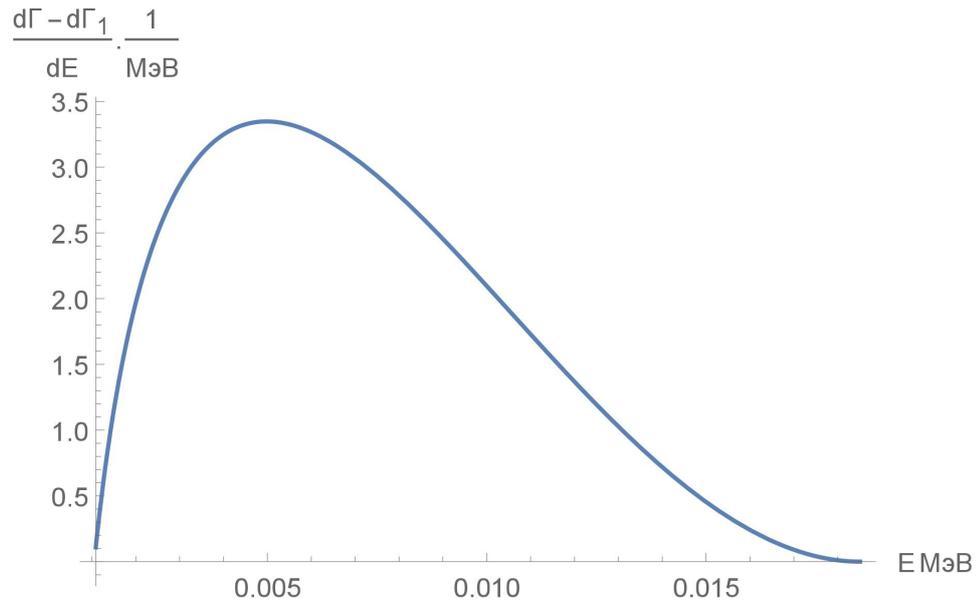


Рисунок 3.4 — Разность исходного  $d\Gamma/dE$  и модифицированного  $d\Gamma_1/dE$  спектров в среднем энергетическом диапазоне.

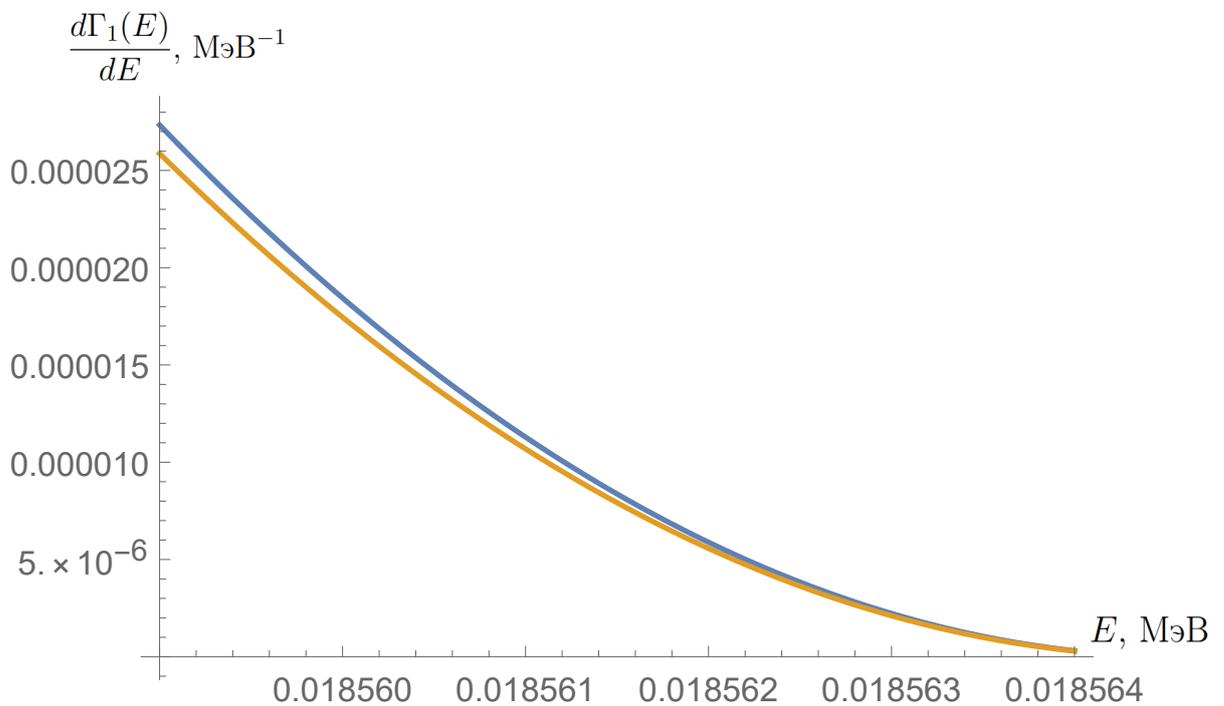


Рисунок 3.5 — Правый край спектра. Кривая, соответствующая исходному спектру  $d\Gamma(E)/dE$  лежит выше кривой соответствующей спектру  $d\Gamma_1(E)/dE$ .

Поскольку  $\Gamma$  нормировалась на единицу, величина  $d\Gamma_1(E)/dE$  имеет размерность обратной энергии.

## Заключение

Настоящая диссертационная работа посвящена изучению влияния электронной оболочки атомов на бета—процессы. Основное внимание уделено бета—процессам, чувствительным к массе и дираковской/майорановской природе нейтрино. Данные характеристики нейтрино важны в поисках обобщений Стандартной модели.

Рассмотрены два канала процесса электронного захвата в диспрозии-159 с последующим переходом в возбужденные состояния ядра тербия-159. Согласно новейшим экспериментальным данным, оба перехода обладают рекордно низкими энергиями реакции. Для вычисления парциальных периодов полураспада и калориметрического спектра вторичного излучения при электронном захвате в диспрозии-159 были проведены многочастичные численные расчеты с помощью программного пакета моделирования релятивистских атомных систем GRASP2018. Использовались стандартные выражения для вероятности электронного захвата в единицу времени и спектра. Вероятность пропорциональна значению волновой функции захваченного электрона внутри ядра, атомному матричному элементу задающему поправку на перекрытие волновых функций и обменные корреляции всех электронов атома, фазовому объему, содержащему энергию реакции и зависящему от вакансии в дочернем атоме тербия-159, а также ядерному матричному элементу. Исследованный третий запрещенный уникальный переход в возбужденное состояние  $11/2^+$  дочернего ядра тербия-159, как было показано, обладает полным периодом полураспада  $T_{1/2} > 10^{24}$  лет, что исключает его из списка возможных кандидатов для использования в экспериментах по прямому измерению массы электронного нейтрино. Для разрешенного перехода в возбужденное состояние  $5/2^-$  дочернего ядра тербия-159, были проведены расчеты парциальных периодов полураспада. Доминирует электронный захват с орбитали  $N_1$  ( $e_x = 0.397$  кэВ) с периодом полураспада  $t_{N_1}^{(1/2)} \sim 10^5$  лет. Это число следует сравнивать с периодом полураспада  $t_{M_1}^{(1/2)} \sim 10^3$  лет при электронном захвате с орбитали  $M_1$  ( $e_x = 2.128$  кэВ) в изотопе гольмия-163, используемом в настоящее время для прямого измерения массы электронного нейтрино по энергетическому спектру вторичного излучения. Анализ спектра вторичного излучения в сравнении с таковым для гольмия-163 показал преимущество диспрозия-159 несмотря на больший

период полураспада. Исследованный разрешенный переход описывается универсальной формой спектра и только одним ядерным матричным элементом, выпадающим при нормировке спектра; он наблюдался экспериментально, его период полураспада известен. Данный канал обладает превосходством на порядок в относительном числе событий в области, чувствительной для экспериментального определения массы нейтрино в сравнении с используемым в настоящий момент электронным захватом в гольмии-163. Эти преимущества позволяют рассматривать его как перспективного кандидата для проведения эксперимента по прямому измерению массы электронного нейтрино.

В бета—процессах электронная оболочка атома, как правило, рассматривается в качестве зрителя. При изменении заряда ядра волновые функции электронов начального и конечного ядра с разными квантовыми числами более не ортогональны, что ведет к подавлению канала с невозбужденным конечным атомом. В диссертационной работе был рассмотрен эффект перекрытия электронных оболочек при бета и двойном бета—распаде. Простая оценка демонстрирует, что полная амплитуда перекрытия волновых функций электронных оболочек (атомный матричный элемент)  $K_Z$  заметно отличается от единицы несмотря на то, что амплитуды перекрытия отдельных электронных уровней чрезвычайно близки к единице. Это поведение подтверждается вычислениями, проведенными при помощи GRASP2018. Отмечается, что амплитуда перекрытия  $K_Z$  чувствительна к вкладам внешних электронных оболочек. Валентные электроны участвуют в образовании химических связей, коллективизируются в кристаллах и чувствительны к условиям эксперимента. Если эти эффекты не учтены, величина  $K_Z$  содержит существенную неопределенность. Соответствующая погрешность атомного матричного элемента накладывается на неопределенности, возникающие при вычислении ядерной части процесса. Для вычисления  $K_Z$ , помимо простой аналитической модели, был так же предложен релятивистский подход, позволяющий проводить вычисления с помощью простых модельных волновых функций и эмпирических данных по энергиям связи электронов в атомах. Для изотопов германий-76, теллур-130, ксенон-136, подверженных двойному бета—распаду, вычисления также проведены с помощью программного пакета GRASP2018. Эффект перекрытия оказывается значительным для двойного бета—распада, величина  $K_Z \sim 0.6$  для приведенных выше элементов, что также демонстрирует существенный вклад ветвей спектра с возбужденным или ионизированным дочерним атомом. Отличие атом-

ного матричного элемента от единицы модифицирует связь ширины двойного безнейтринного бета—распада с эффективной майорановской массой нейтрино  $m_{\beta\beta}$ , что ставит вопрос о необходимости более детального анализа эффекта в связи с ограничениями на величину  $m_{\beta\beta}$  извлекаемыми экспериментально.

В задаче об ионизационном рассеянии бета—электрона на атоме трития, вычислена вероятность процесса на акт бета—распада, оказывающаяся заметной величиной  $\sim 5\%$ . Электрон, находившийся в основном состоянии атома трития, оказывается в непрерывном спектре со средней кинетической энергией  $\sim 85$  эВ. За счет потери энергии на ионизацию, энергетический бета—спектр испытывает подавление в средней части, при этом величина отклонения от спектра без учета эффекта достигает  $4\%$  при промежуточной кинетической энергии бета—электрона. Рассмотренный эффект не влияет значимым образом на поведение вблизи правого края спектра, чувствительного к измерению массы нейтрино.

Полученные результаты демонстрируют важную роль коллективных эффектов в электронных оболочках атомов в бета—процессах. Корректное описание коллективных эффектов позволяет указать атомы и процессы, перспективные для изучения фундаментальных свойств нейтрино.

## Список литературы

1. Evidence for Oscillation of Atmospheric Neutrinos / Y. Fukuda, T. Hayakawa, E. Ichihara et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81. — Pp. 1562–1567.
2. *Bilenky S. M.* Introduction to the Physics of Massive and Mixed Neutrinos (Lecture Notes in Physics) 2nd ed. — Berlin: Springer-Verlag, 2018. — Vol. 947. — 277 pp.
3. *Карпешин Ф. Ф.* Деление ядра в мюонных атомах. — Санкт-Петербург: Наука, 2006. — 336 с.
4. *Bilenky S. M., Petcov S. T.* Massive neutrinos and neutrino oscillations // *Rev. Mod. Phys.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 671–754.
5. *Vergados J. D., Ejiri H., Šimkovic F. F.* Theory of neutrinoless double-beta decay // *Reports on Progress in Physics.* — 2012. — Vol. 75, no. 10. — P. 106301.
6. *Ejiri H., Suhonen J., Zuber K.* Neutrino–nuclear responses for astro-neutrinos, single beta decays and double beta decays // *Phys. Rept.* — 2019. — Vol. 797. — Pp. 1–102.
7. Neutrinoless double-electron capture / K. Blaum, S. Eliseev, F. A. Danevich et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2020. — Vol. 92. — P. 045007.
8. Improved Upper Limit on the Neutrino Mass from a Direct Kinematic Method by KATRIN / M. Aker, K. Altenmüller, M. Arenz et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — Vol. 123. — P. 221802.
9. Direct neutrino-mass measurement with sub-electronvolt sensitivity / M. Aker, A. Beglarian, J. Behrens et al. // *Nature Physics.* — 2022. — Vol. 18, no. 2. — Pp. 160–166.
10. *Velte C. et al.* High-resolution and low-background  $^{163}\text{Ho}$  spectrum: interpretation of the resonance tails // *Eur. Phys. J. C.* — 2019. — Vol. 79, no. 12. — P. 1026.

11. Improved Limit on Neutrinoless Double- $\beta$  Decay of  $^{76}\text{Ge}$  from GERDA Phase II / M. Agostini, A. M. Bakalyarov, M. Balata et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2018. — Vol. 120. — P. 132503.
12. Search for Neutrinoless Double-Beta Decay of  $^{130}\text{Te}$  with CUORE-0 / K. Alfonso, D. R. Artusa, F. T. Avignone et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 115. — P. 102502.
13. Search for Majorana Neutrinos Near the Inverted Mass Hierarchy Region with KamLAND-Zen / A. Gando, Y. Gando, T. Hachiya et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2016. — Vol. 117. — P. 082503.
14. Results of the search for neutrinoless double- $\beta$  decay in  $^{100}\text{Mo}$  with the NEMO-3 experiment / R. Arnold, C. Augier, J. D. Baker et al. // *Phys. Rev. D.* — 2015. — Vol. 92. — P. 072011.
15. *Armengaud E. et al.* The CUPID-Mo experiment for neutrinoless double-beta decay: performance and prospects // *Eur. Phys. J. C.* — 2020. — Vol. 80, no. 1. — P. 44.
16. *Alenkov V. et al.* First Results from the AMoRE-Pilot neutrinoless double beta decay experiment // *Eur. Phys. J. C.* — 2019. — Vol. 79, no. 9. — P. 791.
17.  $^{159}\text{Dy}$  Electron-Capture: A New Candidate for Neutrino Mass Determination / Z. Ge, T. Eronen, K. S. Tyrin et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2021. — Vol. 127. — P. 272301.
18. GRASP2018-A Fortran 95 version of the General Relativistic Atomic Structure Package / C. Froese Fischer, G. Gaigalas, P. Jönsson, J. Bieroń // *Computer Physics Communications.* — 2019. — Vol. 237. — Pp. 184–187.
19. *Grant I. P.* Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules. — New York: Springer, 2007. — 800 pp.
20. *Тырин К. С.* Внутренняя ионизация атома при бета распаде трития // Сборник аннотаций докладов молодежной конференции по теоретической и экспериментальной физике МКТЭФ-2018. — 2018.
21. *Krivoruchenko M. I., Tyrin K. S.* Overlap of electron shells in  $\beta$  and double- $\beta$  decays // *Eur. Phys. J. A.* — 2020. — Vol. 56. — P. 16.

22. *Tyrin K. S., Krivoruchenko M. I., Šmkovic F. F.* Internal Ionization of an Atom in the  $\beta$  Decay of Tritium // *Phys. Atom. Nucl.* — 2020. — Vol. 82. — Pp. 1627–1630.
23. The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures\* / W. J. Huang, Meng Wang, F. G. Kondev et al. // *Chinese Physics C.* — 2021. — Vol. 45, no. 3. — P. 030002.
24. *Reich C.W.* Nuclear Data Sheets for A = 159 // *Nuclear Data Sheets.* — 2012. — Vol. 113, no. 1. — Pp. 157–363.
25. *Myslek B., Sujkowski Z., Kotlinska B.* The Levels in  $^{159}\text{Tb}$  Populated from the  $\beta^-$  Decay of  $^{159}\text{Gd}$  and Electron Capture Decay of  $^{159}\text{Dy}$  // Proceedings of the Conference on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 15–18, 1968. T. 1. C. 102-7. — 1969.
26. *Behrens H., Bühring W.* Electron Radial Wave Functions and Nuclear Beta-decay. — Oxford: Clarendon Press, 1982. — 626 pp.
27. Orbital electron capture by the nucleus / W. Bambynek, H. Behrens, M. H. Chen et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 1977. — Vol. 49, no. 1. — Pp. 77–221.
28. *Zyla P. A. et al.* Review of Particle Physics // *PTEP.* — 2020. — Vol. 2020, no. 8. — P. 083C01.
29. *Czarnecki A., Marciano W. J., Sirlin A.* Radiative corrections to neutron and nuclear beta decays revisited // *Phys. Rev. D.* — 2019. — Vol. 100, no. 7. — P. 073008.
30. *Band I. M., Trzhaskovskaya M. B.* Electron-wave-function expansion amplitudes near the origin calculated in the Dirac-Fock-Slater and Dirac-Fock potentials // *Atomic Data and Nuclear Data Tables.* — 1986. — Vol. 35, no. 1. — Pp. 1–13.
31. *Vatai E.* On the exchange and overlap corrections in electron capture // *Nucl. Phys. A.* — 1970. — Vol. 156. — Pp. 541–552.
32. National Nuclear Data Center. — URL: <https://www.nndc.bnl.gov/> (дата обращения: 07.04.2020).

33. *Larkins F. P.* Semiempirical Auger-electron energies for elements  $10 \leq Z \leq 100$  // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. — 1977. — Vol. 20, no. 4. — Pp. 311–387.
34. X-Ray Data Booklet. — URL: [https://xdb.lbl.gov/Section1/Table\\_1-1.pdf](https://xdb.lbl.gov/Section1/Table_1-1.pdf) (дата обращения 01.05.2021).
35. *Shabaev V. M.* QED theory of the nuclear recoil effect in atoms // *Phys. Rev. A*. — 1998. — Vol. 57. — Pp. 59–67.
36. *Campbell J.L., Papp T.* Widths of the Atomic K–N7 Levels // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. — 2001. — Vol. 77, no. 1. — Pp. 1–56.
37. The electron capture in  $^{163}\text{Ho}$  experiment – ECHO / L. Gastaldo, K. Blaum, K. Chrysalidis et al. // *European Physical Journal: Special Topics*. — 2017. — Vol. 226, no. 8. — Pp. 1623–1694.
38. *Faessler A., Gastaldo L., Šmkovic F. F.* Electron capture in  $^{163}\text{Ho}$ , overlap plus exchange corrections and neutrino mass // *J. Phys. G*. — 2015. — Vol. 42, no. 1. — P. 015108.
39. *Faessler A., Gastaldo L., Šmkovic F. F.* Neutrino mass, electron capture, and the shake-off contributions // *Phys. Rev. C*. — 2017. — Vol. 95. — P. 045502.
40. *Ab initio* calculation of the calorimetric electron capture spectrum of  $^{163}\text{Holmium}$ : Intra-atomic decay into bound-states / M. Braß, C. Enss, L. Gastaldo et al. // *Phys. Rev. C*. — 2018. — Vol. 97, no. 5. — P. 054620.
41. Proton-neutron pairing in the deformed BCS approach / F. F. Šmkovic, Ch. C. Moustakidis, L. Pacearescu, A. Faessler // *Phys. Rev. C*. — 2003. — Vol. 68. — P. 054319.
42. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Том III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — Москва: Физматлит, 2004. — 800 с.
43. *Georgi H. M., Glashow S. L., Nussinov S.* Unconventional model of neutrino masses // *Nuclear Physics B*. — 1981. — Vol. 193, no. 2. — Pp. 297–316.
44. *Voloshin M. B., Mitselmakher G. V., Eramzhyan R. A.* Conversion of an atomic electron into a positron and double  $\beta^+$  decay // *JETP Letters*. — 1982. — Vol. 35, no. 12. — Pp. 656–659.

45. *Karpeshin F. F.* Electron Shell as a Resonator // *Hyperfine Interactions*. — 2002. — Vol. 143. — Pp. 79–96.
46. Resonance enhancement of neutrinoless double electron capture / M. I. Krivoruchenko, F. F. Šmkovic, D. Frekers, A. Faessler // *Nucl. Phys. A*. — 2011. — Vol. 859. — Pp. 140–171.
47. *Aprile E. et al.* Observation of two-neutrino double electron capture in  $^{124}\text{Xe}$  with XENON1T // *Nature*. — 2019. — Vol. 568, no. 7753. — Pp. 532–535.
48. Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters / N Aghanim, Y Akrami, M Ashdown et al. // *Astronomy & Astrophysics*. — 2020. — Vol. 641. — P. A6.
49. *Kovalenko S., Krivoruchenko M. I., Šimkovic F. F.* Neutrino Propagation in Nuclear Medium and Neutrinoless Double- $\beta$  Decay // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112. — P. 142503.
50. *Mohapatra R. N.* New contributions to neutrinoless double-beta decay in supersymmetric theories // *Phys. Rev. D*. — 1986. — Vol. 34. — Pp. 3457–3461.
51. *Vergados J. D.* Neutrinoless Double Beta Decay Without Majorana Neutrinos in Supersymmetric Theories // *Phys. Lett. B*. — 1987. — Vol. 184. — Pp. 55–62.
52. Anatomy of nuclear matrix elements for neutrinoless double-beta decay / F. F. Šmkovic, A. Faessler, V. Rodin et al. // *Phys. Rev. C*. — 2008. — Vol. 77. — P. 045503.
53. *Suhonen J.* Value of the Axial-Vector Coupling Strength in  $\beta$  and  $\beta\beta$  Decays: A Review // *Frontiers in Physics*. — 2017. — Vol. 5. — P. 55.
54. *Feinberg E. L.* Ionization of the Atom due to  $\beta$ -Decay // *J. Phys. (USSR)*. — 1941. — Vol. 4. — P. 423.
55. *Feinberg E. L.* On the Ionization of the Atom due to Beta-Decay // *Soviet J. Nucl. Phys.* — 1965. — Vol. 1. — P. 438.
56. *Stephas P., Crasemann B.* Internal Ionization during Beta Decay // *Phys. Rev.* — 1967. — Vol. 164. — Pp. 1509–1520.

57. Šimkovic F. F., Dvornický R., Faessler A. Exact relativistic tritium  $\beta$ -decay endpoint spectrum in a hadron model // *Phys. Rev. C*. — 2008. — Vol. 77. — P. 055502.
58. Wavelet approach to search for sterile neutrinos in tritium  $\beta$ -decay spectra / S. Mertens, K. Dolde, M. Korzeczek et al. // *Phys. Rev. D*. — 2015. — Vol. 91. — P. 042005.
59. Sensitivity of Next-Generation Tritium Beta-Decay Experiments for keV-Scale Sterile Neutrinos / S. Mertens, T. Lasserre, S. Groh et al. // *JCAP*. — 2015. — Vol. 02. — P. 020.

## Список рисунков

- 1.1 Спектры вторичного излучения. Сплошная кривая описывает нормированное распределение событий электронного захвата по энергии вторичного излучения, соответствующее разрешенному переходу (1.16). Пики  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $O_1$  и  $P_1$  соответствуют электронным вакансиям дочернего атома  $^{159}\text{Tb}$ . Вклад от уровня  $O_2$  едва различим и не обозначен. Штриховая кривая показывает аналогичное распределения для процесса электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$ . Пики  $M_1$ ,  $M_2$  соответствуют вакансиям в дочернем для этого перехода атоме  $^{163}\text{Dy}$ . Энергия вторичного излучения  $E$ , выделяющаяся при электронном захвате, принимает значения во всей кинематически разрешенной области распада. Энергии реакции  $Q_{\text{EC}}^i$  для данных распадов составляют  $Q_{\text{EC}}^{\text{Dy}} = 1.14$  кэВ и  $Q_{\text{EC}}^{\text{Ho}} = 2.83$  кэВ. На вставке в левой нижней части рисунка показаны энергетические спектры для диспрозия и гольмия в увеличенном масштабе у правого края, для визуализации эффекта массивности нейтрино при  $m_{\nu_e} = 0$  и 1 эВ. Видно, что  $^{159}\text{Dy}$  характеризуется большим числом событий на конце спектра в сравнении с  $^{163}\text{Ho}$ . . . . . 26
- 2.1 Относительная ошибка разложения  $\Delta Z/Z$ , использованного для вывода формулы (2.12). Интерполяционная кривая проходит через конечное число точек, для которых величины  $\delta K_Z = \Delta K_Z/K_Z$  вычислены для бета—распада в диапазоне зарядов ядра  $10 \leq Z \leq 90$ . 31

- 2.2 Вероятность выживания невозбужденных электронных оболочек  $K_Z^2$  в зависимости от заряда ядра  $Z$ . Зеленые верхние кривые соответствуют процессам с  $\Delta Z = \pm 1$ . Черные нижние кривые соответствуют процессам с  $\Delta Z = \pm 2$ . Пунктирные и точно пунктирные кривые рассчитаны с использованием формул (2.11) и (2.12) соответственно. Сплошные кривые рассчитаны с учетом экранировки (2.14). Красными квадратами обозначены величины  $(K_Z^{\text{core shells}})^2$ , вычисленные с помощью модельных волновых функций (2.16), для бета—распада Кг, электронного захвата Но и двойных бета—распадов Ge, Мо, Те и Хе . . . . . 34
- 3.1 Распределение по кинетической энергии  $E_2$  вылетевшего электрона в логарифмическом масштабе  $\lg(dW_l(E, E_2)/dE_2)$  при фиксированном значении энергии бета—электрона  $E = k^2/2$  соответствующей величине импульса  $k = 0.1$  в безразмерных единицах. Кривые расположены сверху вниз, в порядке увеличения углового момента  $l = 0..4$ . . . . . 43
- 3.2 Распределение  $dW/dk_2$  по импульсам  $k_2$  вылетевшего электрона в безразмерных единицах, усредненное по бета—спектру трития (3.9), с учетом тождественности частиц. . . . . 45
- 3.3 Отклонение от формы стандартного бета—спектра  $(1 - d\Gamma_1/d\Gamma)$ , за счет учета потери энергии на ионизационное рассеяние на атоме трития в диапазоне кинетической энергии  $E$  1 - 18 кэВ. Отклонение превышает 4 % в средней части спектра. Положительная величина отклонения означает, что кривая модифицированного спектра (3.11) расположена ниже кривой (3.9). . . . . 46
- 3.4 Разность исходного  $d\Gamma/dE$  и модифицированного  $d\Gamma_1/dE$  спектров в среднем энергетическом диапазоне. . . . . 47
- 3.5 Правый край спектра. Кривая, соответствующая исходному спектру  $d\Gamma(E)/dE$  лежит выше кривой соответствующей спектру  $d\Gamma_1(E)/dE$ . Поскольку  $\Gamma$  нормировалась на единицу, величина  $d\Gamma_1(E)/dE$  имеет размерность обратной энергии. . . . . 47
- A.1 График зависимости функций  $r f_{N_5}^{(\pm)}(r)$  от радиуса  $r$ , для электрона атома  $^{159}\text{Du}$  на орбитали  $N_5$ . Величины представлены в атомной системе единиц. . . . . 62

- А.2 График зависимости функций  $rf_{L_2}^{(\pm)}(r)$  от радиуса  $r$ , для электрона атома  $^{159}\text{Tb}$  на орбитали  $L_2$ , при наличии вакансии на этой же орбитали. Величины представлены в атомной системе единиц. . . . . 63
- А.3 График зависимости функции  $\varphi_x^{(+)}(X)$  от безразмерной переменной  $X = r/R$ , демонстрирующий отклонение от поведения задаваемого первым членом ряда (1.8) на расстоянии от нуля до двух среднеквадратичных радиусов  $R$  для орбиталей  $K, L_3, M_5, N_7$ . . . . . 63
- А.4 График зависимости функции  $\varphi_x^{(-)}(X)$  от безразмерной переменной  $X = r/R$ , демонстрирующий отклонение от поведения задаваемого первым членом ряда (1.8) на расстоянии от нуля до двух среднеквадратичных радиусов  $R$  для орбиталей  $L_2, M_4, N_6$ . . . . . 64

## Список таблиц

1	Величины $\beta_x p_x^{k-1}$ . . . . .	16
2	Величины $O_{nn'}^{\frac{1}{2}0}$ при наличии вакансии на орбитали $N_1$ . . . . .	19
3	Результаты вычисления величин $B_x$ . . . . .	20
4	Энергии связи $e_x$ в кэВ электронов на орбитали $x$ для атома Ть. . .	22
5	Периоды полураспада $t_x^{(1/2)}$ при захвате электрона с орбитали с квантовым числом $x$ в атоме $^{159}\text{Dy}$ в случае разрешенного перехода (1.16). . . . .	23
6	Полная амплитуда перекрытия $K_Z$ и амплитуда перекрытия за вычетом валентных оболочек $K_Z^{\text{core shells}}$ рассчитанные с помощью (2.16) для бета—распада $^{87}\text{Kr}$ , электронного захвата в $^{163}\text{Ho}$ и двойном бета—распаде $^{76}\text{Ge}$ , $^{100}\text{Mo}$ , $^{130}\text{Te}$ и $^{136}\text{Xe}$ . Число валентных электронов указано в скобках после символа элемента. . . . .	35
7	Величины $K_Z$ , вычисленные при помощи GRASP2018. . . . .	35
8	Электронные конфигурации атома $^{159}\text{Tb}$ при наличии вакансии на орбитали с квантовым числом $x$ . . . . .	65
9	Амплитуды перекрытия $O_{njl}$ электронов с квантовыми числами $n, j, l$ для двойного бета—распада $^{76}\text{Ge}$ . Энергии связи электронов $\epsilon^*$ из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми. Эффективный $Z_{\text{eff}}$ определяется для каждого уровня через спектр водородоподобного атома. . . . .	66
10	Амплитуды перекрытия $O_{njl}$ электронов с квантовыми числами $n, j, l$ для бета—распада $^{87}\text{Kr}$ . Энергии связи электронов $\epsilon^*$ из [33] для Kr приведены в кэВ для газообразной фазы, и для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми для атома Rb. . . . .	67
11	Амплитуды перекрытия $O_{njl}$ электронов с квантовыми числами $n, j, l$ для двойного бета—распада $^{100}\text{Mo}$ . Энергии связи электронов $\epsilon^*$ из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми. . . . .	68

- 12 Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n$ ,  $j$ ,  $l$  для двойного бета—распада  $^{130}\text{Te}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] для Te приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми, и для газообразной фазы для атома Хе. 69
- 13 Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n$ ,  $j$ ,  $l$  для двойного бета—распада  $^{136}\text{Xe}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] для Хе приведены в кэВ для газообразной фазы, и для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми для атома Ва. 70
- 14 Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n$ ,  $j$ ,  $l$  для электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми. . . . . 71

## Приложение А

## Рисунки

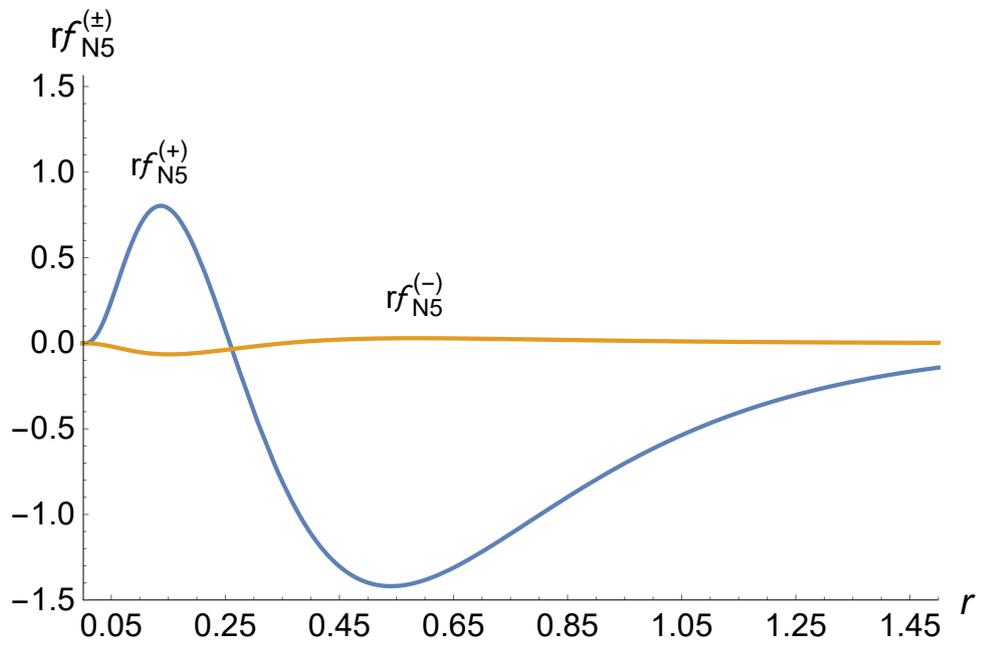


Рисунок А.1 — График зависимости функций  $rf_{N5}^{(\pm)}(r)$  от радиуса  $r$ , для электрона атома  $^{159}\text{Dy}$  на орбитали  $N_5$ . Величины представлены в атомной системе единиц.

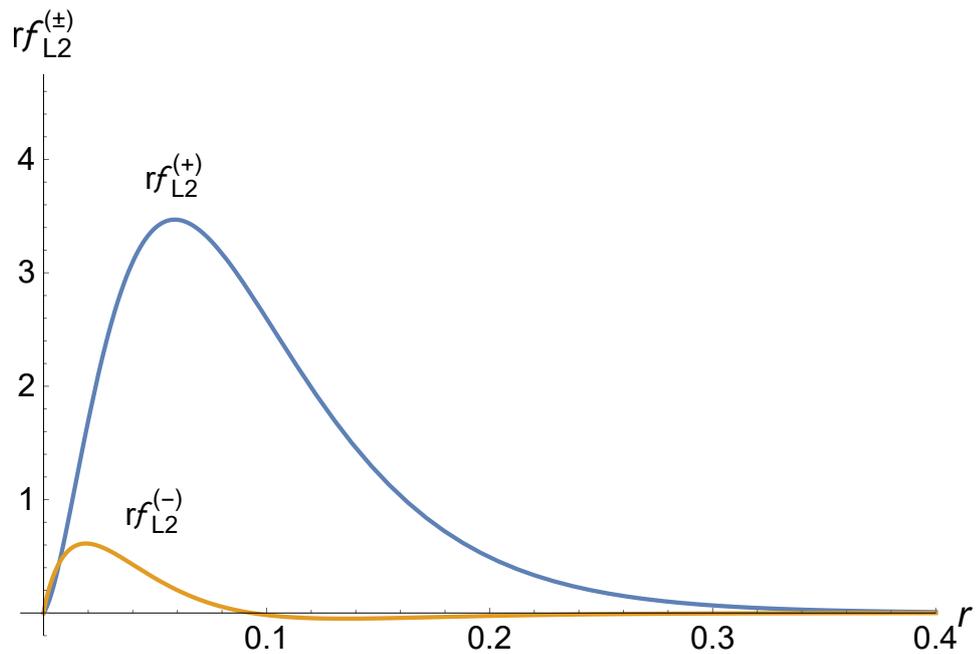


Рисунок А.2 — График зависимости функций  $rf_{L_2}^{(\pm)}(r)$  от радиуса  $r$ , для электрона атома  $^{159}\text{Tb}$  на орбитали  $L_2$ , при наличии вакансии на этой же орбитали. Величины представлены в атомной системе единиц.

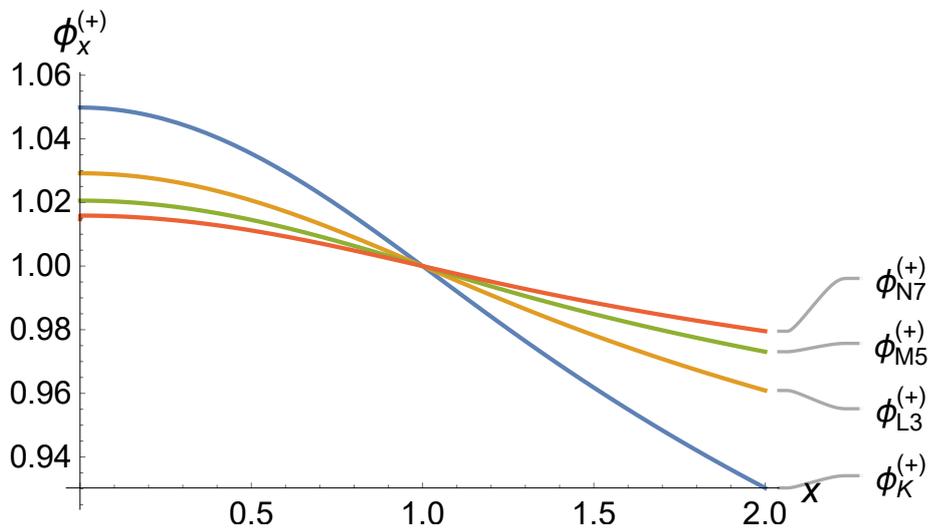


Рисунок А.3 — График зависимости функции  $\phi_x^{(+)}(X)$  от безразмерной переменной  $X = r/R$ , демонстрирующий отклонение от поведения задаваемого первым членом ряда (1.8) на расстоянии от нуля до двух среднеквадратичных радиусов  $R$  для орбиталей  $K, L_3, M_5, N_7$ .

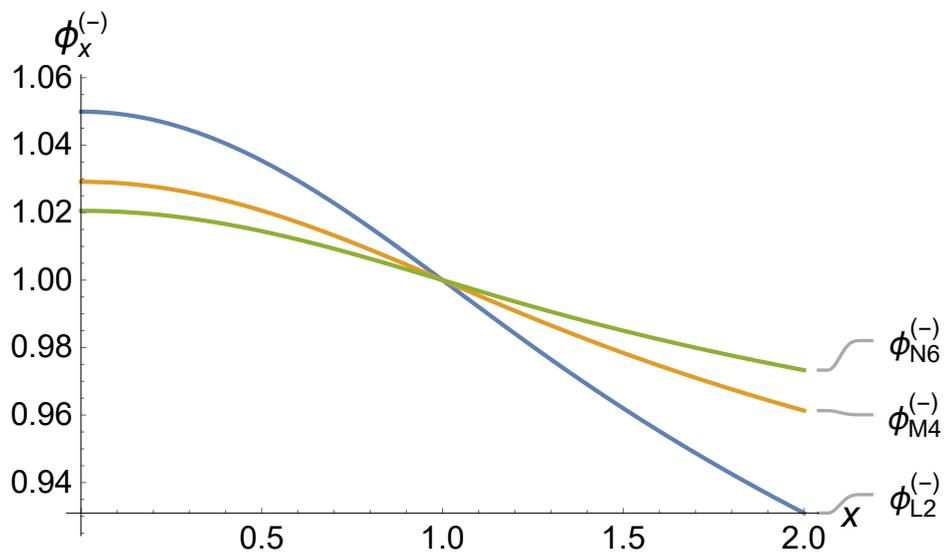


Рисунок А.4 — График зависимости функции  $\phi_x^{(-)}(X)$  от безразмерной переменной  $X = r/R$ , демонстрирующий отклонение от поведения задаваемого первым членом ряда (1.8) на расстоянии от нуля до двух среднеквадратичных радиусов  $R$  для орбиталей  $L_2$ ,  $M_4$ ,  $N_6$ .

## Приложение Б

## Таблицы

Таблица 8 — Электронные конфигурации атома  $^{159}\text{Tb}$  при наличии вакансии на орбитали с квантовым числом  $x$ 

x	конфигурация
K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
L <sub>1</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
L <sub>2</sub>	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
L <sub>3</sub>	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
M <sub>1</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
M <sub>2</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^4 3s^2 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
M <sub>3</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^3 3s^2 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
M <sub>4</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
M <sub>5</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>1</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>2</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p_{1/2}^4 4p_{3/2}^3 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>3</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p_{1/2}^2 4p_{3/2}^3 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>4</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d_{3/2}^3 4d_{5/2}^6 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>5</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d_{3/2}^4 4d_{5/2}^5 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
N <sub>6</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f_{5/2}^5 4f_{7/2}^4 6s^2$
N <sub>7</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f_{5/2}^6 4f_{7/2}^3 6s^2$
O <sub>1</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s^2$
O <sub>2</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p_{1/2}^4 5p_{3/2}^3 4f^{10} 6s^2$
O <sub>3</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p_{1/2}^2 5p_{3/2}^3 4f^{10} 6s^2$
P <sub>1</sub>	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{10} 6s$

Таблица 9 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для двойного бета—распада  ${}^{76}\text{Ge}$ . Энергии связи электронов  $\epsilon^*$  из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми. Эффективный  $Z_{\text{eff}}$  определяется для каждого уровня через спектр водородоподобного атома.

$n2jl$	${}_{32}\text{Ge}$		${}_{34}\text{Se}$		$O_{njl}$
	$\epsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\epsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	11.1031	28.41	12.6578	30.31	0.99832
210	1.4143	20.32	1.6539	21.96	0.99303
211	1.2478	19.09	1.4762	20.76	0.99553
231	1.2167	18.90	1.4358	20.53	0.99570
310	0.1800	10.90	0.2315	12.36	0.96272
311	0.1279	9.19	0.1682	10.54	0.96516
331	0.1208	8.93	0.1619	10.34	0.96031
332	0.0287	4.36	0.0567	6.12	0.90397
352	0.0287	4.36	0.0567	6.12	0.90398
410	0.0050	2.42	0.0120	3.76	0.36980
411	0.0023	1.64	0.0056	2.57	0.41864

Таблица 10 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для бета—распада  $^{87}\text{Kr}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] для Kr приведены в кэВ для газообразной фазы, и для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми для атома Rb.

$n2jl$	$^{36}\text{Kr}$		$^{37}\text{Rb}$		$O_{njl}$
	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	14.3256	32.21	15.1997	33.17	0.99966
210	1.9210	23.65	2.0651	24.51	0.99850
211	1.7272	22.43	1.8639	23.30	0.99908
231	1.6749	22.17	1.8044	23.01	0.99913
310	0.2921	13.88	0.3221	14.57	0.99431
311	0.2218	12.10	0.2474	12.78	0.99439
331	0.2145	11.90	0.2385	12.55	0.99473
332	0.0950	7.92	0.1118	8.60	0.99421
352	0.0938	7.87	0.1103	8.54	0.99427
410	0.0275	5.68	0.0293	5.87	0.99586
411	0.0147	4.16	0.0148	4.17	0.99996
431	0.0140	4.06	0.0140	4.06	1.00000

Таблица 11 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для двойного бета—распада  $^{100}\text{Mo}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми.

$n2jl$	$^{42}\text{Mo}$		$^{44}\text{Ru}$		$O_{njl}$
	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	19.9995	37.95	22.1172	39.87	0.99898
210	2.8655	28.81	3.2240	30.54	0.99599
211	2.6251	27.60	2.9669	29.31	0.99759
231	2.5202	27.18	2.8379	28.84	0.99778
310	0.5046	18.22	0.5850	19.62	0.98696
311	0.4097	16.43	0.4828	17.83	0.98732
331	0.3923	16.10	0.4606	17.44	0.98794
332	0.2303	12.34	0.2836	13.69	0.99055
352	0.2270	12.25	0.2794	13.59	0.99060
410	0.0618	8.52	0.0749	9.38	0.96224
411	0.0348	6.39	0.0431	7.12	0.95900
431	0.0348	6.39	0.0431	7.12	0.95902
432	0.0018	1.45	0.0020	1.54	0.99273
452	0.0018	1.45	0.0020	1.54	0.99273

Таблица 12 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для двойного бета—распада  $^{130}\text{Te}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] для Te приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми, и для газообразной фазы для атома Xe.

$n2jl$	$^{52}\text{Te}$		$^{54}\text{Xe}$		$O_{njl}$
	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	31.8138	47.60	34.5644	49.54	0.99928
210	4.9392	37.65	5.4528	39.51	0.99712
211	4.6120	36.41	5.1037	38.25	0.99831
231	4.3414	35.65	4.7822	37.41	0.99852
310	1.0060	25.68	1.1487	27.43	0.98940
311	0.8697	23.89	1.0021	25.63	0.99046
331	0.8187	23.24	0.9406	24.91	0.99095
332	0.5825	19.61	0.6894	21.33	0.99378
352	0.5721	19.45	0.6767	21.15	0.99384
410	0.1683	14.05	0.2133	15.82	0.94280
411	0.1102	11.38	0.1455	13.07	0.93124
431	0.1102	11.38	0.1455	13.08	0.93138
432	0.0398	6.84	0.0695	9.04	0.80895
452	0.0398	6.84	0.0675	8.91	0.82734
453					
473					
510	0.0116	4.61	0.0234	6.56	0.36726
511	0.0023	2.06	0.0134	4.96	-0.34644
531	0.0023	2.06	0.0121	4.71	-0.36107

Таблица 13 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для двойного бета—распада  $^{136}\text{Xe}$ . Энергии связи электронов  $\varepsilon^*$  из [33] для Xe приведены в кэВ для газообразной фазы, и для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми для атома Ba.

$n2jl$	$^{54}\text{Xe}$		$^{56}\text{Ba}$		$O_{njl}$
	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\varepsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	34.5644	49.54	37.4406	51.49	0.99933
210	5.4528	39.51	5.9888	41.35	0.99740
211	5.1037	38.25	5.6236	40.10	0.99845
231	4.7822	37.41	5.2470	39.17	0.99863
310	1.1487	27.43	1.2928	29.08	0.99156
311	1.0021	25.63	1.1367	27.28	0.99243
331	0.9406	24.91	1.0622	26.47	0.99304
332	0.6894	21.33	0.7961	22.92	0.99546
352	0.6767	21.15	0.7807	22.72	0.99553
410	0.2133	15.82	0.2530	17.22	0.97004
411	0.1455	13.07	0.1918	15.00	0.93194
431	0.1455	13.08	0.1797	14.53	0.96003
432	0.0695	9.04	0.0925	10.43	0.94724
452	0.0675	8.91	0.0899	10.28	0.94702
453					
473					
510	0.0234	6.56	0.0291	7.31	0.92576
511	0.0134	4.96	0.0166	5.52	0.93386
531	0.0121	4.72	0.0146	5.18	0.94892

Таблица 14 — Амплитуды перекрытия  $O_{njl}$  электронов с квантовыми числами  $n, j, l$  для электронного захвата в  $^{163}\text{Ho}$ . Энергии связи электронов  $\epsilon^*$  из [33] приведены в кэВ для кристаллической фазы с привязкой к уровню Ферми.

$n2jl$	$^{67}\text{Ho}$		$^{66}\text{Dy}$		$O_{njl}$
	$\epsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	$\epsilon^*$	$Z_{\text{eff}}$	
110	55.6177	62.17	53.7885	61.20	0.99987
210	9.3942	51.35	9.0458	50.43	0.99956
211	8.9178	50.09	8.5806	49.17	0.99975
231	8.0711	48.52	7.7901	47.67	0.99980
310	2.1283	37.17	2.0468	36.46	0.99906
311	1.9228	35.36	1.8418	34.62	0.99910
331	1.7412	33.85	1.6756	33.21	0.99930
332	1.3915	30.28	1.3325	29.63	0.99959
352	1.3514	29.88	1.2949	29.25	0.99960
410	0.4357	22.57	0.4163	22.07	0.99784
411	0.3435	20.05	0.3318	19.71	0.99890
431	0.3066	18.97	0.2929	18.55	0.99810
432	0.1610	13.75	0.1542	13.46	0.99878
452	0.1610	13.76	0.1542	13.46	0.99878
453	0.0037	2.09	0.0042	2.22	0.99549
473	0.0037	2.09	0.0042	2.22	0.99549
510	0.0512	9.70	0.0629	10.75	0.93362
511	0.0203	6.11	0.0263	6.95	0.90411
531	0.0203	6.11	0.0263	6.95	0.90415