

**ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА
ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД
МОСКВА

ТОМ 112, ВЫПУСК 5(11)
НОЯБРЬ, 1997
«НАУКА»

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ β -РАСПАДА
ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА ТРИТИЯ**

© 1997

Ф. Ф. Горяев, Л. П. Суханов

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 мая 1997 г.

Проведен расчет вероятности основного канала β -распада отрицательного иона трития как одного из возможных процессов, влияющих на форму β -спектра тритиевого источника около конечной точки. Вычислены соответствующие энергетические характеристики. Отмечается необходимость учета исследованного процесса при интерпретации экспериментальных кривых β -спектра вблизи конечной точки в связи с проблемой нахождения массы покоя нейтрино.

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые теоретические работы по изучению воздействия β -распада ядра на электронную оболочку атома были выполнены Мигдалом и Файнбергом [1, 2]. В дальнейшем теоретические исследования перестройки электронной оболочки атомов при β -распаде проводились многими авторами (см., например, обзор [3]). В случае β -распада ядра, входящего в состав молекулы, физическая ситуация усложняется, поскольку в результате β -распада могут происходить как электронные, так и колебательно-вращательные возбуждения, а также иметь место диссоциация молекулы. Подробно исследованным является лишь β -распад простейшей молекулы НТ [4–7]; наиболее точный расчет проведен Вольниевичем [7]. Влияние β -распада трития на возбуждение электронных оболочек молекул ОНТ, NH_2T и CH_3T было исследовано в работе [8].

Интерес к исследованию перестройки электронной оболочки молекулы при β -распаде одного из ядер был стимулирован актуальной проблемой определения массы покоя нейтрино. Связано это с тем, что измерение формы β -спектра вблизи его высокоэнергетического края является наиболее чувствительным способом определения величины массы покоя нейтрино. Эксперименты такого рода проводятся с тритиевыми источниками, так как тритий имеет наименьшую граничную энергию β -электронов $E_{\beta, \max} = 18.6$ кэВ, что позволяет получить максимальное разрешение по энергии.

В первой работе Ханна и Понтекорво [9] было получено ограничение на массу покоя нейтрино сверху порядка 1 кэВ, что соответствовало разрешению по энергии в их методе. Весь дальнейший прогресс в экспериментальных исследованиях связан с улучшением разрешающей способности измерительных приборов. Успех в этом направлении был достигнут в работах Бергквиста [10, 11], который получил верхний предел на массу нейтрино ~ 55 эВ с 90% уровнем достоверности на магнитном β -спектрометре, имеющем на конце β -спектра трития разрешение ~ 50 эВ. Бергквист впервые достиг энергий разрешения, сравнимых по величине с энергиями возбуждения дочерних ионов гелия, образующихся в результате β -распада, и указал на необходимость учета влияния этих возбуждений на форму β -спектра и оценку массы нейтрино.

В 1980 г. в результате обработки серии экспериментов, поставленных в ИТЭФ, впервые было получено ограничение снизу на массу покоя нейтрино [12, 13]. В качестве источника β -электронов была использована дважды тритированная аминокислота — валин ($C_3H_{11}NO_2$). Измерения проводились на уникальном безжелезном спектрометре [14], имеющем разрешение по энергии ~ 45 эВ и уровень фона в 15 раз меньше, чем в спектрометре Бергквиста. Поскольку спектр возбуждения β -источника не был известен, авторы провели обработку экспериментальных данных в двух случаях:

а) спектр с одним конечным состоянием, или отсутствие возбуждений в источнике; полученный интервал 99% достоверности для массы нейтрино

$$14 \leq m_\nu \leq 26 \text{ эВ};$$

б) атомарный тритий в двухуровневой аппроксимации Бергквиста [10]; полученный интервал

$$24 \leq m_\nu \leq 46 \text{ эВ}.$$

Эти результаты указывают, что величина массы нейтрино, полученная из обработки экспериментальных данных, существенно зависит от учета перераспределения энергии β -распада на электронные степени свободы β -источника. Этим был поставлен на повестку дня вопрос корректного учета влияния химической структуры источника на β -спектр.

После публикации группы ИТЭФ [12, 13] появился ряд работ [15–18], авторы которых попытались учесть влияние оттока энергии β -распада в электронный канал на величину массы покоя нейтрино, получаемую при обработке экспериментов по β -спектрам. В частности, в работе [18] был проведен последовательный учет влияния молекулярной структуры источника на форму β -спектра и рассчитаны вероятности возбуждения молекул различной природы при β -распаде входящего в них ядра трития. Обсуждался многоканальный характер β -распада и влияние этого обстоятельства на величину доверительного интервала для массы покоя нейтрино.

В эксперименте ИЯИ РАН–ИЯФ «КИ» (Троицк) (1994 г.) [19] были получены результаты исследований β -спектра трития около конечной точки. Экспериментальная

установка представляла собой интегральный электростатический спектрометр с адиабатической магнитной коллимацией и газовый тритиевый источник электронов. Обработка данных эксперимента дает

$$m_\nu^2 = -18 \pm 6 \text{ (эВ)}^2.$$

Изучение β -спектра в области на 7–15 эВ ниже конечной точки указывает на возможность того, что эффект отрицательной m_ν^2 может быть объяснен присутствием пика (в дифференциальном спектре), соответствующего полной вероятности распада около $6 \cdot 10^{-11}$. Был получен верхний предел для m_ν , равный 4.5 эВ при 95% уровне достоверности.

Результаты этого эксперимента поднимают вопрос о природе пика в β -спектре трития. Одним из источников помех, влияющих на форму β -спектра, могут быть отрицательные ионы трития в газовой мишени. В настоящей работе проводится расчет вероятности основного канала β -распада отрицательного иона трития и его энергетических характеристик.

2. РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ β -РАСПАДА ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА ТРИТИЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕССА

β -распад отрицательного иона трития отвечает реакции



в результате которой образуется β -электрон, антинейтрино $\bar{\nu}_e$ и атом гелия ${}^3\text{He}$. Атом ${}^3\text{He}$ может образовываться в различных электронных состояниях, так что реакция (1) отвечает многоканальному процессу. Нами рассматривается случай, когда атом гелия остается в основном состоянии: канал $0 \rightarrow 0$ процесса (1).

Для расчета с хорошей степенью точности можно считать, что вероятность дочерней системе ${}^3\text{He}$ остаться в основном электронном состоянии дается теорией внезапных возмущений Мигдала [20] и равна

$$W_{00} = |\langle \Psi_0(\text{He}) | \Psi_0(T^-) \rangle|^2, \quad (2)$$

где $\Psi_0(T^-)$, $\Psi_0(\text{He})$ — волновые функции иона T^- и атома ${}^3\text{He}$ в основном электронном состоянии соответственно.

Как известно, волновые функции многоэлектронных систем могут быть найдены только приближенными методами. Нами использовался метод Хартри–Фока–Рутана (ХФР) [21, 22]. Следует отметить, что в методе ХФР не учитываются эффекты электронной корреляции. В этой связи наибольшего доверия заслуживают результаты, полученные в работах [18, 23], в которых был проведен последовательный учет влияния корреляции электронов для некоторых молекул, содержащих атом трития. Было показано, что в простейшем случае двухатомной двухэлектронной молекулы НТ вероятность электронной оболочке комплекса $(\text{HHe})^+$ остаться в основном состоянии в результате β -распада трития, без учета эффектов электронной корреляции, завышена в пределах 7%. Проведенные в этих работах расчеты указывают на малый вклад корреляции электронов в вероятность образования дочерней молекулы в основном электронном состоянии и, тем самым, обосновывают возможность использования приближения ХФР.

Вероятность β -распада иона трития T^- по основному каналу процесса (1) в приближении ХФР определяется по формуле

$$W_{00} = |\langle \varphi_{1s}^{T^-}(\mathbf{r}) | \varphi_{1s}^{He}(\mathbf{r}) \rangle|^4, \tag{3}$$

где $\varphi_{1s}^{T^-}(\mathbf{r})$ и $\varphi_{1s}^{He}(\mathbf{r})$ — $1s$ -орбитали иона трития T^- и атома гелия ${}^3\text{He}$ соответственно. Матричный элемент в выражении (3) рассчитывался нами с разными базисными наборами декартовых функций гауссова типа [22]. При этом экспоненты и коэффициенты контракции для s -функций атомов He и T брались из работ [24, 25]. Экспоненты диффузных s -функций находились нами для иона T^- из условия минимума его полной энергии. Вариационные коэффициенты, энергетические характеристики иона трития T^- и атома гелия ${}^3\text{He}$ вычислялись по программе MICROMOL [26], адаптированной [27] для персональных компьютеров АТ/386/486.

В качестве энергетических характеристик использовались следующие: E_{tot} — полная энергия основного состояния двухэлектронной системы, ϵ — энергия орбитали (одноэлектронная энергия Хартри–Фока), E_{ion} — потенциал ионизации двухэлектронной системы, ΔE — химический сдвиг для основного канала при β -распаде. Потенциал ионизации вычислялся по теореме Купманса [22], согласно которой $E_{ion} = -\epsilon$. Химический сдвиг ΔE дается выражением

$$\Delta E = E_0(T^-) - E_0({}^3\text{He}), \tag{4}$$

где $E_0(T^-)$ — полная энергия основного состояния иона трития T^- , $E_0({}^3\text{He})$ — полная энергия основного состояния атома гелия ${}^3\text{He}$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами были рассчитаны вероятность основного канала процесса (1) β -распада иона трития T^- и соответствующие β -распаду энергетические характеристики. Результаты расчетов сведены в таблицу.

Вероятность основного канала β -распада иона трития T^- и энергетические характеристики процесса распада

Тип базисного набора	T^-			He			$\Delta E, \text{эВ}$	W_{00}
	$E_{tot}, \text{а.е.}$	$\epsilon, \text{а.е.}$	$E_{ion}, \text{эВ}$	$E_{tot}, \text{а.е.}$	$\epsilon, \text{а.е.}$	$E_{ion}, \text{эВ}$		
3-21G	-0.4004	0.0774	-2.11	-2.8357	-0.9036	24.59	66.3	0.55
4s/2s	-0.4481	0.0232	-0.63	-2.8552	-0.9141	24.87	65.5	0.46
5s/3s	-0.4868	-0.0450	1.22	-2.8599	-0.9169	24.95	64.6	0.33
6s/4s	-0.4876	-0.0455	1.24	-2.8611	-0.9177	24.97	64.6	0.33
Экспериментальные данные	—	—	0.75	—	—	24.59	64.6	

При вычислениях по методу Рутана использовались разные наборы базисных функций. Проведенные расчеты указывают на тенденцию понижения вероятности исследуемого процесса при расширении используемого базисного набора и выход ее к асимптотическому значению $W_{00} = 0.33$. Как отмечалось выше, в методе ХФР не учитывается электронная корреляция, вклад которой для вероятности мал. Поэтому уточнение значения полученной вероятности не является принципиальным для поставленной в работе задачи. Из таблицы видно, что потенциал ионизации иона трития выходит на положительное значение по мере расширения базисного набора, но несколько отличается от экспериментального значения, что связано с упомянутой неучтенной корреляцией электронов. В то же время для достаточно компактного двухэлектронного атома гелия ${}^3\text{He}$, а также для химического сдвига реакции (1) получены результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными.

Следует отметить, что канал $0 \rightarrow 1$, при котором дочерний атом гелия ${}^3\text{He}$ переходит в первое возбужденное состояние, не является важным для интерпретации β -спектра газового молекулярного источника НТ в эксперименте ИЯИ РАН-ИЯФ «КИ», что видно из следующих рассуждений.

Химический сдвиг канала $0 \rightarrow 1$ имеет значение

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1} = E_0(\text{T}^-) - E_1({}^3\text{He}) = 44.0 \text{ эВ.}$$

В работе [23] было получено значение химического сдвига для процесса $\text{HT} \rightarrow (\text{HHe})^+$:

$$\Delta E = E_0(\text{HT}) - E_0(\text{HHe}^+) = 49.1 \text{ эВ.}$$

Значит, энергетические выходы этих реакций близки и существенно отличаются от полученного нами значения химического сдвига для основного канала $0 \rightarrow 0$:

$$\Delta E = E_0(\text{T}^-) - E_0({}^3\text{He}) = 64.6 \text{ эВ.}$$

Таким образом, проведенные расчеты вероятности показывают необходимость учета исследованного нами процесса при интерпретации кривых β -спектра вблизи конечной точки в эксперименте [19].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматривается β -распад отрицательного иона трития T^- и вычисляется вероятность образования дочернего атома He в основном состоянии. Данный процесс интересен в связи с ведущимися в настоящее время в ИЯИ РАН-ИЯФ «КИ» (Троицк) экспериментами по определению массы нейтрино путем прецизионного исследования высокоэнергетической части спектра β -электронов, образующихся при распаде трития в газовом источнике. Точность ограничений на массу нейтрино, получаемых в этом эксперименте, имеет масштаб нескольких эВ. Поэтому все процессы, способные изменить на несколько эВ граничную энергию β -электронов, должны быть приняты во внимание при обработке экспериментальных данных. Одним из источников помех такого рода могут быть отрицательные ионы трития в газовой мишени. Действительно, при перестройке электронной оболочки атома трития в основное состояние положительного иона гелия выделяется энергия ~ 41 эВ, тогда как при аналогичном переходе от иона T^- к основному состоянию (g.s.) атома He высвобождается энергия ~ 65 эВ.

Таким образом, полученная нами вероятность перехода $T^- \rightarrow He$ (g.s.) при β -распаде ядра трития оказывается важной для оценки возможного влияния отрицательных ионов трития на результаты эксперимента по определению массы покоя нейтрино.

Авторы благодарны С. С. Герштейну за стимулирование интереса к работе и плодотворные обсуждения, а также С. П. Аллилуеву и А. Л. Барабанову за ценные критические замечания.

Литература

1. A. Migdal, J. Phys. (USSR) **4**, 449 (1941).
2. E. Fainberg, J. Phys. (USSR) **4**, 423 (1941).
3. И. С. Баткин, Ю. Г. Смирнов, ЭЧАЯ **11**, 1421 (1980).
4. H. M. Schwartz, J. Chem. Phys. **23**, 400 (1955).
5. M. Cantwell, Phys. Rev. **101**, 1747 (1956).
6. M. Wolfsberg, J. Chem. Phys. **24**, 24 (1956).
7. L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **43**, 1087 (1965).
8. S. Ikuta, S. Iwata, and M. Imamura, J. Chem. Phys. **66**, 4671 (1977).
9. G. C. Hanna and B. Pontecorvo, Phys. Rev. **75**, 933 (1949).
10. K. E. Bergkvist, Nucl. Phys. B **39**, 317 (1972).
11. K. E. Bergkvist, Physica Scripta **4**, 23 (1971).
12. В. С. Козик, В. А. Любимов, Е. Г. Новиков и др., ЯФ **32**, 301 (1980).
13. В. А. Любимов, Е. Г. Новиков, В. З. Нозик и др., ЖЭТФ **81**, 1158 (1981).
14. Е. Ф. Третьяков, Изв. АН СССР, сер. физ. **39**, 583 (1975).
15. M. Fukugita and R. Kubodeva, Z. Phys. C **9**, 365 (1981).
16. J. Law, Phys. Lett. B **102**, 371 (1981).
17. C. Chengrui, H. Tschsing, and C. Shaolin, Preprint AS-ITP-81-22 (1981).
18. И. Г. Каплан, В. Н. Смутный, Г. В. Смелов, ЖЭТФ **84**, 833 (1983).
19. А. И. Белесев, А. И. Блейле, Е. В. Гераскин и др., Препринт ИЯИ-862/94 (1994).
20. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975), с. 87.
21. М. Дьюар, *Теория молекулярных орбиталей в органической химии*, Мир, Москва (1972), с. 95.
22. С. Фудзинага, *Метод молекулярных орбиталей*, Мир, Москва (1983).
23. И. Г. Каплан, Г. В. Смелов, В. Н. Смутный, Доклады АН СССР **279**, 1110 (1984).
24. S. Huzinaga, J. Chem. Phys. **42**, 1293 (1965).
25. T. H. Dunning Jr., P. J. Hay, in *Methods of Electronic Structure Theory*, ed. by H. F. Schaefer III, Plenum Publishing Corporation, N. Y. (1977), Vol. 1, p. 1.
26. S. M. Colwell, *MICROMOL Tutor*, University of Cambridge, Cambridge (1987).
27. Л. П. Суханов, Ш. Ш. Набиев, Ж. физ. хим. **70**, 848 (1996).