

Расчеты разности энергий связи многозарядных ионов Но и Ду

И. М. Савельев¹⁾, М. Ю. Кайгородов⁺, Ю. С. Кожедуб⁺, И. И. Тупицын⁺, В. М. Шабавев⁺*

⁺ Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

* Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, 188300 Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2023 г.

После переработки 21 июня 2023 г.

Принята к публикации 22 июня 2023 г.

В работе рассчитаны разности энергий связи ионов $^{163}\text{No}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ со степенями ионизации $q = 38, 39$ и 40 . Расчеты выполнены с использованием релятивистского метода конфигурационного взаимодействия и релятивистского метода связанных кластеров. Учтены вклады квантово-электродинамических эффектов, эффекта отдачи ядра и частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия. Погрешность полученных значений не превышает 1 эВ. Объединив настоящие результаты с разностью энергий связи соответствующих нейтральных атомов, рассчитанной в [I. M. Savelyev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, Phys. Rev. A **105**, 012806 (2022)], мы получили вторичные разности энергий связи между ионами и атомами. Эти значения могут быть использованы для определения количества энергии, выделяющейся в процессе электронного захвата в атоме ^{163}No (энергии бета-распада Q), при условии, что из эксперимента известна разница масс многозарядных ионов $^{163}\text{No}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$. Значение Q необходимо для экспериментов по установлению ограничения на абсолютную величину массы электронного нейтрино путем изучения процесса электронного захвата.

DOI: 10.31857/S1234567823140021, EDN: gybarh

Нейтрино – одна из самых интригующих тематик современной физики [1]. С одной стороны, в рамках Стандартной модели нейтрино является безмассовой частицей, с другой стороны, наблюдения нейтринных осцилляций установили, что нейтрино должно иметь ненулевую массу. Однако при этом, осцилляционные эксперименты чувствительны только к абсолютной разнице квадратов масс массовых состояний нейтрино и не позволяют определить абсолютную величину массы нейтрино. Ограничения на сумму масс нейтрино могут быть получены из анализа космологических данных [2, 3]. Согласно СРТ-инвариантности Стандартной модели, масса нейтрино должна быть в точности равна массе антинейтрино. Однако в настоящее время верхние пределы на массы электронных нейтрино и антинейтрино различаются на несколько порядков [4]. В этой связи несомненный интерес представляет прямое модельно-независимое экспериментальное определение массы нейтрино.

Наинизший прямой верхний предел на массу электронного антинейтрино получен коллаборацией KATRIN [5]. Это значение, равное 0.8 эВ, определено путем кинематического анализа β^- распада

в тритии. Наинизший лабораторный верхний предел на массу электронного нейтрино примерно на два порядка больше. Так, в [6] из анализа спектра рентгеновских лучей, испускаемых в процессе электронного захвата (ЕС) в изотопе ^{163}No , был установлен предел в 225 эВ. В эксперименте совершенно другого типа, основанном на изучении β^- распада голого ядра ^{163}Dy с образованием электрона в связанном состоянии, было получено ограничение в 410 эВ [7]. Несколько коллабораций [8–10] нацелены на то, чтобы улучшить текущий лабораторный предел на массу электронного нейтрино до нескольких эВ и сделать его сравнимым со значением предела для электронного антинейтрино. Эти эксперименты также основаны на изучении процесса ядерного электронного захвата в нейтральном атоме ^{163}No , но уже с использованием более точного калориметрического метода. Недавно, в рамках эксперимента ЕСНо [10], верхний предел на массу электронного нейтрино был понижен до значения порядка 150 эВ [11].

Для того чтобы извлечь из этих экспериментов ограничение на массу электронного нейтрино с точностью до 1 эВ, необходимо заранее знать разницу масс участвующих в распаде изотопов ^{163}No и ^{163}Dy , называемую также энергией бета-распада Q , по крайней мере, с такой же точностью. Измерение

¹⁾e-mail: savelevigorm@gmail.com

разности масс на требуемом уровне точности возможно выполнить для многозарядных ионов с помощью масс-спектрометров на базе ловушек Пеннинга [12, 13]. Так, совсем недавно была измерена разность масс ионов ^{163}Ho и ^{163}Dy со степенями ионизации 38, 39 и 40 [14].

Чтобы получить из разности масс многозарядных ионов ^{163}Ho и ^{163}Dy разность масс нейтральных атомов ^{163}Ho и ^{163}Dy , которая и есть искомая величина Q , нужно рассчитать разность энергий связи атомов и ионов с соответствующей точностью. В работе [15] были выполнены расчеты разности энергий связи для ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ со степенями ионизации $q = 30, 48$ и 56 . Цель настоящей статьи состоит в расширении результатов работы [15] расчетами для степеней ионизации, рассмотренных в эксперименте [14]. В работе используется атомная система единиц.

Мы рассматриваем разность масс Δm^q ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ с одинаковой кратностью ионизации q ,

$$\Delta m^q = \Delta m_n + m_e + \Delta E^q, \quad (1)$$

где Δm_n – разность масс ядер ^{163}Ho и ^{163}Dy , m_e – масса электрона, ΔE^q – разность полных энергий связи электронов в ионах. Разность масс нейтральных атомов ^{163}Ho и ^{163}Dy соответствует случаю $q = 0$:

$$\Delta m^0 = \Delta m_n + m_e + \Delta E^0. \quad (2)$$

Разность масс нейтральных атомов Δm^0 связана с разностью масс ионов Δm^q соотношением

$$\Delta m^0 = \Delta m^q + \Delta E^{0,q}, \quad (3)$$

где введена вторичная разность энергий связи

$$\Delta E^{0,q} = \Delta E^0 - \Delta E^q. \quad (4)$$

Настоящие расчеты основаны на использовании релятивистских гамильтонианов Дирака–Кулона (DC) и Дирака–Кулона–Брейта (DCB):

$$\hat{H}_{\text{DC}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}})\Lambda^+, \quad (5)$$

$$\hat{H}_{\text{DCB}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}} + \hat{H}_{\text{B}})\Lambda^+, \quad (6)$$

где \hat{H}_{D} – сумма одноэлектронных гамильтонианов Дирака:

$$\hat{H}_{\text{D}} = \sum_{i=1}^N [(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i)c + (\beta - 1)mc^2 + V(r_i)], \quad (7)$$

\hat{H}_{C} и \hat{H}_{B} – двухэлектронные операторы кулоновского и брейтовского взаимодействий соответственно:

$$\hat{H}_{\text{C}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (8)$$

$$\hat{H}_{\text{B}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{2r_{ij}} \left[\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (9)$$

Здесь $\boldsymbol{\alpha}$ – вектор, состоящий из матриц Дирака, \mathbf{p} – оператор импульса, \mathbf{r}_{ij} – положение i -го электрона относительно j -го, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$. Проектор Λ^+ гарантирует, что гамильтониан действует в пространстве состояний, соответствующих положительно-энергетическому спектру гамильтониана Дирака–Фока.

Основным методом, используемым для расчета ΔE^q , является релятивистский метод конфигурационного взаимодействия в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма (CI-DFS) [16–18]. Для учета квантово-электродинамических (КЭД) эффектов используется модельный КЭД оператор $\hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}}$ [19–21], позволяющий приближенно учитывать вклады вакуумной поляризации и собственной энергии в многоэлектронных системах. Оператор $\hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}}$ включается непосредственно в многоэлектронный гамильтониан DCB

$$\hat{H}_{\text{DCBQ}} = \Lambda^+(\hat{H}_{\text{D}} + \hat{H}_{\text{C}} + \hat{H}_{\text{B}} + \hat{V}_{\text{QED}}^{\text{mod}})\Lambda^+. \quad (10)$$

Поправка на частотную зависимость брейтовского взаимодействия рассчитывается как среднее значение частотно-зависимой части оператора однофотонного обмена в кулоновской калибровке на многоэлектронной волновой функции, полученной методом CI-DFS. Вклад от эффекта отдачи ядра определяется усреднением релятивистского оператора отдачи ядра [22–25] на той же многоэлектронной волновой функции.

Чтобы проверить качество учета корреляционных эффектов методом CI-DFS при использовании гамильтониана DC, мы провели расчеты с использованием другого метода, а именно односсылочного релятивистского метода связанных кластеров, включающего полностью итеративные однократные, двукратные и пертурбативные трехкратные кластерные амплитуды (CCSD(T)). Для этой цели использовался пакет программ DIRAC23 [26, 27].

В качестве модели распределения заряда по ядру в расчетах методом CI-DFS используется модель Ферми, в то время как в расчетах методом CCSD(T) используется модель Гаусса, однако для рассматриваемых в работе свойств эта разница пренебрежимо мала. Значения среднеквадратичных радиусов (RMS) ядер взяты из работы [28].

Задача по расчету ΔE^q решается в несколько этапов. Сначала мы рассчитываем разность полных энергий связи ионов Ho и Dy методом CI-DFS с использованием гамильтониана DC. Конфигурации ос-

новых состояний рассматриваемых ионов Ho и Dy с $q = 38, 39$ и 40 приведены в табл. 1. В расчетах методом CI-DFS все занятые орбитали разделяются на остовные и валентные. Орбитали $1s2s2p$ относятся к замороженному остову, остальные занятые орбитали являются активными. Рассматриваются однократные и двукратные возбуждения из активных орбиталей в виртуальные. При этом анализируется сходимость ΔE^q в зависимости от числа виртуальных орбиталей. Мы начинаем расчеты с одной виртуальной s орбитали и постепенно расширяем базис виртуальных орбиталей в двух направлениях: путем последовательного добавления новых виртуальных орбиталей с бóльшим главным квантовым числом n и с бóльшим орбитальным квантовым числом l . Наши расчеты включают до пяти виртуальных орбиталей для каждого значения орбитального квантового числа l вплоть до i . Окончательные результаты получаются путем экстраполяции значений к пределу бесконечного базисного набора.

Таблица 1. Конфигурации основных состояний ионов Ho^{q+} и Dy^{q+}

q	Ho^{q+}		Dy^{q+}	
	Конфигурация	J	Конфигурация	J
38	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$	1/2	$[\text{Ar}]3d^{10}$	0
39	$[\text{Ar}]3d^{10}$	0	$[\text{Ar}]3d^9$	5/2
40	$[\text{Ar}]3d^9$	5/2	$[\text{Ar}]3d^8$	4

На следующем этапе мы оцениваем вклад от замороженного остова. Для этого мы проводим расчеты методом CI-DFS с использованием меньшего числа виртуальных орбиталей, которые адаптированы для корреляции сильно связанных остовных $1s2s2p$ электронов.

Далее, мы проверяем корректность наших результатов, полученных методом CI-DFS, проводя расчеты методом CCSD(T). В рамках подхода CCSD(T) все электроны являются активными, и для решения соответствующих уравнений используются стандартные базисные наборы `dyall.ae3z` и `dyall.ae4z`. Сходимость результатов CCSD(T) изучается аналогично тому, как это делалось для CI-DFS. Затем используется экстраполяция полученных данных к пределу бесконечного базисного набора. Следует отметить, что вклад от учета пертурбативных трехкратных кластерных амплитуд пренебрежимо мал для рассматриваемых систем.

Разности энергий связи для основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ с $q = 38, 39$ и 40 , рассчитанные методами CI-DFS и CCSD(T) с использованием гамильтониана DC, представлены в табл. 2. Результа-

ты, полученные с помощью двух концептуально разных методов, согласуются в пределах оцененных погрешностей.

Таблица 2. Разности энергий связи основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$, рассчитанные методами CI-DFS и CCSD(T) с использованием гамильтониана DC (а.е.)

q	CI-DFS	CCSD(T)
38	-461.298(7)	-461.305(11)
39	-502.088(16)	-502.089(16)
40	-500.931(17)	-500.934(17)

Для оценки вкладов от брейтовского взаимодействия, частотно-зависимого брейтовского взаимодействия, КЭД и эффекта ядерной отдачи была проведена серия расчетов методом CI-DFS с активными $3s3p3d$ (и $4s$ для Ho^{38+}) орбиталями. Оказалось, что необходимая точность вычисления этих поправок может быть достигнута при использовании меньшего базисного набора, чем при расчете энергий с использованием гамильтониана DC. Вклады от брейтовского взаимодействия и КЭД получены с использованием гамильтонианов \hat{H}_{DCB} и \hat{H}_{DCBQ} , соответственно, тогда как поправки на частотную зависимость брейтовского взаимодействия и на ядерную отдачу рассчитываются как средние значения соответствующих операторов. Погрешности, связанные с выбором моделей и среднеквадратичных радиусов ядер, оцениваются путем расчетов с различными моделями распределения заряда и варьирования среднеквадратичных радиусов ядер в пределах их экспериментальных погрешностей.

Окончательные результаты для полной разности энергий связи ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ для различных степеней ионизации $q = 38, 39$ и 40 , ΔE^q , а также отдельные вклады в эти разности от электронных корреляций, рассчитанных с использованием гамильтониана DCB, ΔE_{DCB}^q , от КЭД поправок, ΔE_{QED}^q , и поправок на частотно-зависимую часть брейтовского взаимодействия, ΔE_{BRFD}^q , представлены в табл. 3. Поправка от учета эффекта отдачи ядра составляет около 0.001 а.е. для всех рассмотренных q . Эта поправка включена в ΔE_{DCB}^q . Значения ΔE^q имеют два источника погрешности: в первых скобках указана погрешность, связанная с точностью учета электронных корреляций методом CI-DFS, а во вторых скобках представлена погрешность, связанная с выбором ядерных параметров. Разности энергий для ионов, ΔE^q , имеют меньшую погрешность, обусловленную электронными корреляциями, чем разность энергий нейтральных атомов из статьи [15], в силу более простой структуры электронных оболочек ионов. Отметим, что наши результаты, полу-

ченные методом Дирака–Фока без учета корреляционных эффектов, согласуются с результатами работы [29].

Таблица 3. Вклады в разности энергий основных состояний ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$, ΔE^q , в рамках брейтовского приближения, ΔE_{DCB}^q , от частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{BRFD}^q , и от КЭД эффектов, ΔE_{QED}^q (а.е.). В последнем столбце представлены окончательные значения разностей энергий основных состояний. Числа в первых скобках показывают погрешность, связанную с точностью учета электронных корреляций, тогда как числа во вторых скобках представляют погрешность, связанную с конечными размерами ядер

q	ΔE_{DCB}^q	ΔE_{BRFD}^q	ΔE_{QED}^q	ΔE^q
38	-460.678	-0.0140	0.439	-460.253(9)(13)
39	-501.446	-0.0146	0.405	-501.056(16)(13)
40	-500.291	-0.0146	0.405	-499.901(17)(13)

Объединив вычисленные разности энергий ионов, ΔE^q , с разностью энергий нейтральных атомов, ΔE^0 , рассчитанной в работе [15], мы получаем вторичные разности энергий связи между ионами и атомами $\Delta E^{0,q}$, которые (в эВ) представлены в табл. 4. Погрешности, связанные с конечными размерами ядер, сокращаются во вторичных разностях $\Delta E^{0,q}$, и погрешности окончательных результатов в основном определяются разностью энергий связи нейтральных атомов.

Таблица 4. Вклады во вторичные разности энергий связи для атомов и ионов изотопов ^{163}Ho и ^{163}Dy , $\Delta E^{0,q}$, в рамках приближения Брейта, $\Delta E_{\text{DCB}}^{0,q}$, от частотно-зависимой части брейтовского взаимодействия, $\Delta E_{\text{BRFD}}^{0,q}$, и от КЭД эффектов, $\Delta E_{\text{QED}}^{0,q}$ (эВ). Итоговые вторичные разности, $\Delta E^{0,q}$, приведены в последнем столбце

q	$\Delta E_{\text{DCB}}^{0,q}$	$\Delta E_{\text{BRFD}}^{0,q}$	$\Delta E_{\text{QED}}^{0,q}$	$\Delta E^{0,q}$
38	37.7	-0.03	-0.77	36.9(7)
39	1147.0	-0.01	0.17	1147.2(8)
40	1115.6	-0.01	0.18	1115.8(8)

Итак, в данной работе с помощью метода CI-DFS были рассчитаны разности полных энергий связи ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и $^{163}\text{Dy}^{q+}$ для степеней ионизации $q = 38, 39$ и 40 . Погрешность полученных значений находится в пределах 1 эВ. Электронные корреляции учитываются в рамках гамильтониана DCB. В работе также учтены поправки от КЭД эффектов, частотной зависимости брейтовского взаимодействия и эффекта отдачи ядра. Объединив полученные разности энергий ионов с разностью энергий нейтральных атомов, вычисленной в работе [15], мы получили вторичные разности энергий связи между ионами и атомами. Настоящие результаты могут быть использованы для пересчета разности масс ионов $^{163}\text{Ho}^{q+}$ и

$^{163}\text{Dy}^{q+}$ в энергию электронного захвата Q в атоме ^{163}Ho , что необходимо для предстоящих экспериментов по понижению верхнего лабораторного предела на массу электронного нейтрино.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 22-62-00004.

1. K. Zuber, *Neutrino Physics*, Series in High Energy Physics, Cosmology, and Gravitation, 3rd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, USA and Abingdon, UK (2020).
2. S. Vagnozzi, E. Giusarma, O. Mena, K. Freese, M. Gerbino, S. Ho, and M. Lattanzi, *Phys. Rev. D* **96**, 123503 (2017).
3. M. M. Ivanov, M. Simonović, and M. Zaldarriaga, *Phys. Rev. D* **101**, 083504 (2020).
4. R. L. Workman, V. D. Burkert, V. Crede et al. (Particle Data Group), *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2022**, 083C01 (2022).
5. M. Aker, A. Beglarian, J. Behrens et al. (KATRIN Collaboration), *Nature Phys.* **18**, 160 (2022).
6. P. T. Springer, C. L. Bennett, and P. A. Baisden, *Phys. Rev. A* **35**, 679 (1987).
7. M. Jung, F. Bosch, K. Beckert et al., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2164 (1992).
8. B. Alpert, M. Balata, D. Bennett et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **75**, 112 (2015).
9. M. P. Croce, M. W. Rabin, V. Mocko et al. (Collaboration), *J. Low Temp. Phys.* **184**, 958 (2016).
10. L. Gastaldo, K. Blaum, K. Chrysalidis et al. (Collaboration), *The European Physical Journal Special Topics* **226**, 1623 (2017).
11. C. Velte, F. Ahrens, A. Barth et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **79**, 1026 (2019).
12. A. Rischka, H. Cakir, M. Door et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **124**, 113001 (2020).
13. P. Filianin, C. Lyu, M. Door et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **127**, 072502 (2021).
14. S. Eliseev and Y. Novikov, *Eur. Phys. J. A* **59**, 34 (2023).
15. I. M. Savelyev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **105**, 012806 (2022).
16. I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, J. R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, and J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **68**, 022511 (2003).
17. I. I. Tupitsyn, A. V. Volotka, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, G. Plumien, J. R. Crespo López-Urrutia, A. Lapierre, and J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **72**, 062503 (2005).
18. I. I. Tupitsyn, N. A. Zubova, V. M. Shabaev, G. Plumien, and T. Stöhlker, *Phys. Rev. A* **98**, 022517 (2018).
19. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Phys. Rev. A* **88**, 012513 (2013).

20. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Comput. Phys. Commun.* **189**, 175 (2015).
21. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, *Comput. Phys. Commun.* **223**, 69 (2018).
22. V. M. Shabaev, *Teor. Mat. Fiz.* **63**, 394 (1985) [*Theor. Math. Phys.* **63**, 588 (1985)].
23. V. M. Shabaev, *Yad. Fiz.* **47**, 107 (1988) [*Sov. J. Nucl. Phys.* **47**, 69 (1988)].
24. C. W. P. Palmer, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 5987 (1987).
25. V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **57**, 59 (1998).
26. T. Saue, R. Bast, A. S. P. Gomes et al. (Collaboration), *J. Chem. Phys.* **152**, 204104 (2020).
27. R. Bast, A. S. P. Gomes, T. Saue et al. (Collaboration), *Dirac23* (2023),
URL <https://doi.org/10.5281/zenodo.7670749>.
28. I. Angeli and K. P. Marinova, *At. Data Nucl. Data Tables* **99**, 69 (2013).
29. G. Rodrigues, P. Indelicato, J. Santos, P. Patté, and F. Parente, *At. Data Nucl. Data Tables* **86**, 117 (2004).