

Эффект отдачи при β -распаде молекулярного трития

В. И. Савичев¹⁾

Department of Physics, Wesleyan University, Middletown, CT 06459-0155, USA

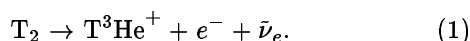
Поступила в редакцию 1 июля 2002 г.

После переработки 24 июля 2002 г.

В последнее десятилетие была проведена серия высокоточных атомных экспериментов с целью определения массы покоя электронного (анти)нейтрино m_ν . В качестве материала мишени использовался молекулярный тритий T_2 в газообразном и замороженном состоянии. Ненулевая масса нейтрино должна проявляться в виде тонких особенностей вблизи верхней границы спектра β -электронов. Мы обсуждаем проблему вычисления теоретического спектра конечных возбуждений. Последний оказывается критически важен для определения конечной величины m_ν . Использован операторный подход для анализа спектральных сумм. Это позволяет количественно обсудить ряд эффектов, которые до сих пор были недоступны рассмотрению. Среди них эффект отдачи, который, согласно нашим оценкам, может играть существенную роль при интерпретации существующих и планируемых в будущем подобных экспериментов.

PACS: 23.40.Bw, 14.60.Pq, 31.10.+z

Последние атомные эксперименты по измерению массы нейтрино основываются на наблюдении β -распада молекулярного трития [1–6]:



Конечная величина массы нейтрино фиксируется посредством совместного фита экспериментального и теоретического спектров, где квадрат массы нейтрино m_ν^2 выступает в качестве подгоночного параметра. Верхняя граница спектра β -электронов наиболее чувствительна к наличию ненулевой массы нейтрино. Верхняя граница спектра соответствует энергии порядка 18.6 кэВ. Энергия отдачи и мгновенное изменение кулоновского заряда приводят к заселению широкого спектра электронно-колебательно-вращательных состояний молекулы T^3He^+ . Теоретический спектр конечных возбуждений был рассчитан в больших деталях в серии публикаций [7–13]. Было показано, что около 99% конечных состояний распределены по первым 100 эВ вблизи верхней границы спектра. Спектр состоит в основном из сравнительно узких по энергии колебательно-вращательных мультиплетов, соответствующих связанным и резонансным адиабатическим электронным состояниям. Из них 57.4% оказывается в основном электронном состоянии молекулы T^3He^+ . Основной колебательно-вращательный мультиплет состоит из нескольких сотен связанных и резонансных молекулярных состояний со средним вращательным квантовым числом

$J \sim 22 \div 25$ [8]. Хотя вероятность заселения отдельного колебательно-вращательного состояния весьма чувствительна к вариациям момента(энергии) отдачи p_β [13], интегральный вклад мультиплета – практически константа. При статистической обработке большинства из упомянутых экспериментов выявилась проблема, препятствующая однозначной интерпретации существования ненулевой массы нейтрино. Дело в том, что наилучшая аппроксимация β -электронного спектра приводит к сползанию параметра m_ν^2 в нефизическую отрицательную область. Конечное значение параметра m_ν^2 зависит от величины энергетического интервала фитирования. В консервативном подходе результаты экспериментов могут быть выражены в виде верхней оценки на величину массы нейтрино, которая оказывается порядка $m_\nu \leq 2 \div 3 \text{ эВ}/c^2$. Новая серия экспериментов в планах коллаборации KATRIN призвана достичь точности измерения массы в субэлектронвольтном диапазоне [14]. В этой статье мы рассматриваем проблему вычисления спектра конечных возбуждений. Мы развиваем операторную технику вычисления спектральных сумм. Это позволяет нам, в частности, количественно обсудить влияние эффекта отдачи на форму спектра конечных возбуждений. Показано, что поправка явно зависит от энергии β -электрона и оказывается на уровне электронвольта в области энергий $\sim 100 \text{ эВ}$ ниже верхней границы спектра, то есть в области чувствительности будущих экспериментов.

Введем необходимые формулы и определения. Дифференциальный спектр β -электронов дается выражением [10] ($e = m_e = \hbar = 1$)

¹⁾e-mail: vsavichev@wesleyan.edu

$$\left| \frac{dN(\epsilon_\beta)}{d\epsilon_\beta} \right| = AF(p_\beta, Z)E_\beta p_\beta \sum_n P_n(p_\beta) \epsilon_n \times \\ \times (\epsilon_n^2 - m_\nu^2 c^4)^{1/2} \theta(\epsilon_n - m_\nu c^2), \\ \epsilon_n = W_0 - \epsilon_\beta - E_n, \epsilon_\beta = E_\beta - m_e c^2. \quad (2)$$

Сумма в (2) пробегает по всем конечным состояниям молекулы $T^3\text{He}^+$; E_β, ϵ_β – полная релятивистская и кинетическая энергии, p_β – импульс β -электрона; $F(p_\beta, Z)$ – фактор Ферми [15]. Отсчитывая энергии конечных состояний E_n от основного состояния E_g , получаем выражение для верхней границы спектра W_0 :

$$W_0 = (M_t - M_\alpha)c^2 + E_{T_2} - E_g - E_R - m_e c^2, \quad (3)$$

где E_{T_2} – основное состояние молекулы T_2 ; $E_R = p_\beta^2/4M_t$ – энергия отдачи центра масс молекулы; M_t – масса ядра трития. Вероятность заселения конечных состояний $P_n(p_\beta)$ дается квадратом матричного элемента оператора отдачи:

$$P_n(p_\beta) = \int \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{4\pi} |\langle n | e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{R})} | T_2 \rangle|^2, \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}_\beta}{2}, \quad (4)$$

где \mathbf{R} – межъядерное расстояние. Все β -спектрометры, построенные до сих пор, измеряют интегральный спектр

$$N(\epsilon_\beta) = \frac{A}{3} F(p_\beta, Z) E_\beta p_\beta \sum_n P_n(p_\beta) \times \\ \times (\epsilon_n^2 - m_\nu^2 c^4)^{3/2} \theta(\epsilon_n - m_\nu c^2). \quad (5)$$

Теоретический спектр конечных возбуждений представляет собой таблицы пар величин (E_n, P_n) .

В ходе вычислений некоторые приближения были неизбежно сделаны. Во-первых, спектр конечных возбуждений рассчитывался при постоянном p_β , соответствующем верхней границе спектра. Вариации численных значений матричных элементов оператора отдачи (4) трудно оценить количественно. Очевидно, однако, что полная энергия отдачи на молекулу должна уменьшаться с уменьшением энергии β -электрона. Во-вторых, для спектра конечных возбуждений выше границы одноэлектронного континуума был использован упрощенный подход, в котором ядерное движение не принималось во внимание. Ad-hoc поправки к спектру были включены в версии таблиц, опубликованных в [12].

Анализ качества сделанных приближений осложняется необходимостью оценки высокоосциллирующих интегралов (4), где $|qR| \sim 25$. Заметим, однако, что для интерпретации эксперимента нам было бы достаточно знания интегральных характеристик, данных спектральными суммами вида (2), (5).

Весьма похожая проблема возникает при анализе эффекта Месбауера [16]. Один из вариантов решения проблемы заключается в применении операторного формализма, приводящего к формулировке семейства правил сумм. Мы предлагаем аналогичный подход при анализе спектральных сумм для распределения β -электронов.

Используем в (5) эквивалентную подстановку $E_n \rightarrow H$, где H – гамильтониан молекулы $T^3\text{He}^+$. После подстановки зависимость от E_n пропадает, что позволяет свернуть сумму по n :

$$N(\epsilon_\beta) = \frac{A}{3} F(p_\beta, Z) E_\beta p_\beta \int \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{4\pi} \langle T_2 | e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{R})} \times \\ \times (\hat{\epsilon}^2 - m_\nu^2 c^4)^{3/2} \theta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{R})} | T_2 \rangle. \quad (6)$$

Здесь $\hat{\epsilon} = W_0 - \epsilon_\beta - H$. Главное соотношение, используемое при преобразовании операторного выражения (6)

$$H e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{R})} = e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{R})} \left[H + \frac{q^2}{2M} + \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} \right], \quad (7)$$

легко проверяется, принимая во внимание форму оператора кинетической энергии $\hat{T}_k = -\frac{1}{2M} \Delta_{\mathbf{R}}$, где $M = M_t/2$ – приведенная молекулярная масса. Используя соотношение (7), можно прокоммутировать и исключить экспоненту отдачи в формуле (6). При этом, согласно (7), необходимо сделать следующую подстановку:

$$W_0 - \epsilon_\beta - H \rightarrow W_0 - \epsilon_\beta - \frac{q^2}{2M} - \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} - H. \quad (8)$$

Как показывает анализ, член $q^2/2M$ соответствует интегральной колебательно-вращательной энергии отдачи. Добавим ее к энергии отдачи центра масс молекулы

$$E_R \rightarrow E_R + \frac{q^2}{2M} = \frac{p_\beta^2}{2M_t} = \frac{\epsilon_\beta}{M_t} \left(1 + \frac{\epsilon_\beta}{2m_e c^2} \right). \quad (9)$$

Переопределяя величину E_R и W_0 , получаем выражение для спектра β -электронов в виде операторного среднего по начальному состоянию молекулы T_2 :

$$N(\epsilon_\beta) = \frac{A}{3} F(p_\beta, Z) \times \\ \times E_\beta p_\beta \langle T_2 | \left(\hat{\epsilon} - \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} \right)^2 - m_\nu^2 c^4 \rangle^{3/2} \times \\ \times \theta \left(\hat{\epsilon} - \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} - m_\nu c^2 \right) | T_2 \rangle. \quad (10)$$

Линейный по импульсу операторный член в (7) оказывается порядка $|(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})/M| \sim 10^{-2}$ или 0.3 эВ

в энергетических единицах. Используем его как параметр разложения. Для операторного разложения θ -функции используем соотношение вида

$$f(\hat{A} + \hat{\epsilon}) = f(\hat{A}) + f'(\hat{A})\hat{\epsilon} + \frac{1}{2}f''(\hat{A})[\hat{\epsilon}, \hat{A}] + O(\hat{\epsilon}^2, [\hat{A}, [\hat{\epsilon}, \hat{A}], \dots]), \quad (11)$$

что приводит к

$$\theta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2 - \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M}) = \theta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2) - \delta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2) \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} + \dots \quad (12)$$

Как обычно, обобщенные функции понимаются в терминах свертки с некоторой гладкой функцией. В случае сплошного электронно-колебательно-вращательного спектра свертка, естественным образом, возникает как интегрирование по конечным состояниям. В случае дискретного спектра свертка обеспечивается дополнительным усреднением с функцией разрешения β -спектрометра

$$N_{\text{exp}}(\epsilon_\beta) = \int d\epsilon R(\epsilon_\beta - \epsilon)N(\epsilon). \quad (13)$$

В обоих случаях δ -подобные члены в (12) приводят к локальным по энергии пикам в спектральных суммах. Благодаря добавочному усреднению по углам $\int d\hat{\mathbf{q}}$, ведущая поправка должна быть порядка $|(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})/M|^2 \sim 10^{-4}$. В данной статье мы ограничимся первым членом в разложении (12).

Разложение показательной функции в (10) следует аналогичной процедуре. После усреднения по углам получаем:

$$(\hat{\epsilon}^2 - m_\nu^2 c^4)^{3/2} - \left(\frac{q}{M}\right)^2 \Delta_{\mathbf{R}} \hat{\epsilon} + \hat{C} + O\left(\frac{(m_\nu c^2)^4}{\hat{\epsilon}} \left| \frac{(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{R}})}{M} \right|^2\right), \quad (14)$$

где оператор \hat{C} дается выражением

$$\hat{C} = -\frac{1}{3} \left(\frac{q}{M}\right)^2 \left([[H, \frac{d}{dR}], \frac{d}{dR}] - \frac{d}{dR} [H, \frac{d}{dR}] \right). \quad (15)$$

Оценки показывают, что спектральный вклад данного члена достаточно мал. Так, для основного электронного состояния получаем интегральную оценку $|\hat{C}| \leq 0.1 \text{ эВ}^3$. Остаточные поправки в разложении (14) должны быть следующего порядка малости.

Окончательно получаем эквивалентное операторное представление для спектра β -электронов:

$$N(\epsilon_\beta) = \frac{A}{3} F(p_\beta, Z) E_\beta p_\beta < T_2 | [(\hat{\epsilon}^2 - m_\nu^2 c^4)^{3/2} - \left(\frac{q}{M}\right)^2 \Delta_{\mathbf{R}} \hat{\epsilon}] \theta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2) | T_2 >. \quad (16)$$

Следуя аналогичной процедуре для дифференциального спектра, получаем

$$\frac{dN(\epsilon_\beta)}{d\epsilon_\beta} = AF(p_\beta, Z) E_\beta p_\beta < T_2 | [\hat{\epsilon}^2 - m_\nu^2 c^4]^{1/2} - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{M}\right)^2 \Delta_{\mathbf{R}} \theta(\hat{\epsilon} - m_\nu c^2) | T_2 >. \quad (17)$$

Операторные формулы обретают свою практическую ценность, если мы вновь введем разложение единицы $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ в (16)–(17). Для интегрального спектра получаем:

$$N(\epsilon_\beta) = \frac{A}{3} F(p_\beta, Z) E_\beta p_\beta \sum_n \bar{P}_n [(\epsilon_n^2 - m_\nu^2 c^4)^{3/2} + 2 \frac{q^2}{M} \epsilon_n < T_2 | \hat{T}_k | n \rangle \langle n | T_2 \rangle / \bar{P}_n] \theta(\epsilon_n - m_\nu c^2), \quad (18)$$

$$\bar{P}_n = | \langle T_2 | n \rangle |^2.$$

Полученные формулы (16)–(18) являются *асимптотически точными*. Поправки обратно пропорциональны величине энергетического интервала и в целом малы (14). Рассматривая (18), нетрудно понять, что *псевдо-спектр* конечных возбуждений состоит только из колебательных мод. Анализ простейшей классической модели приводит к выводу, что член $q^2/2M = p_\beta^2/4M_t$ представляет собой интегральную классическую колебательно-вращательную энергию отдачи молекулы. Остаточное суммирование по *псевдо-спектру* колебательных мод соответствует усреднению по начальному колебательному состоянию.

Рассмотрим в качестве конкретного примера основное электронное состояние молекулы $T^3\text{He}^+$. *Псевдо-спектр* конечных возбуждений соответствует вкладу небольшого числа колебательных состояний

$$\begin{aligned} | \langle T_2 | g, v = 0 \rangle |^2 &= 0.522, \\ | \langle T_2 | g, v = 1 \rangle |^2 &= 0.046, \\ | \langle T_2 | g, v = 2 \rangle |^2 &= 0.004, \dots \end{aligned} \quad (19)$$

Интегральная вероятность, как и в стандартном подходе, равна 0.574 [7]. Используя (19), можем посчитать среднюю энергию возбуждения основного колебательно-вращательного мультиплета

$$\begin{aligned} \langle E_n \rangle_g &= \frac{q^2}{2M} + 1/P_g \sum_n \bar{P}_n E_n = \\ &= 1.69 + 0.03 = 1.72 \text{ эВ}. \end{aligned} \quad (20)$$

Это численно совпадает с результатом суммирования нескольких десятков колебательно-вращательных линий, представленных в таблицах [9]. В (20) мы ис-

пользовали значение импульса отдачи p_β , соответствующее верхней границе спектра. При этом использовалась нерелятивистская связь между импульсом и энергией β -электрона. Использование релятивистской формулы, как это было сделано при расчетах в [13], приводит к дополнительным 0.03 эВ. На самом деле этот результат есть простое следствие точного правила сумм

$$\sum_n E_n P_n = \sum_n \bar{P}_n + P_g \frac{q^2}{2M}, \quad (21)$$

которое является частным случаем соотношений, использованных при выводе операторных формул. Дополнительный сдвиг центра возбуждений колебательно-вращательного мультиплета, даваемый вторым членом в (20), оказывается порядка 0.1 эВ для возбужденных электронных состояний.

Как мы уже упоминали, при расчете высоковозбужденных электронных состояний ядерное движение вообще не было принято во внимание. Ad-hoc поправки, сделанные при составлении таблиц в [12], соответствовали приписыванию интегральным линиям сдвига в 1 эВ, имитирующего эффект колебательно-вращательной энергии отдачи. Согласно нашему анализу, однородный сдвиг в 1.7 эВ должен быть приписан всем линиям. Остаточная неопределенность порядка 0.1 эВ зависит от деталей данного электронного состояния. Заметим, что численная величина сдвига 1.9 эВ, предложенная в [13], напротив, несколько велика. Кроме того, вероятность вклада электронных резонансов была размазана по энергиям с гауссианом полуширины 3 эВ, имитируя колебательно-вращательное уширение. Согласно нашей картине спектра, можно вычислить интеграл перекрытия с простейшей осцилляторной волновой функцией в начальном состоянии и квазиклассической радиальной функцией типа Эйри в конечном состоянии. Это приводит к гауссиано-подобному контуру распределения по энергии с полушириной

$$\delta E = F \sqrt{\ln 2 / M \omega_{T_2}}, \quad F = Z_{\text{эфф}} / R_0^2, \quad (22)$$

где ω_{T_2} – частота колебаний молекулы T_2 ; $R_0 \approx 1.4$ – равновесное межъядерное расстояние начальной молекулы T_2 ; $Z_{\text{эфф}} \approx 1.5 \div 2$ – эффективный заряд, определяющий наклон молекулярного терма конечного состояния в точке R_0 . Пользуясь (22), получаем оценку для полуширины $\delta E \approx 3 \div 4$ эВ. Заметим, что, согласно [12], детальное значение ширины линий резонансных состояний слабо влияет на конечное значение параметра массы нейтрино.

В заключение нам бы хотелось обсудить одно интересное следствие нашего исследования. А имен-

но, влияние поправки полной энергии отдачи молекулы (9). Энергия верхней границы спектра W_0 является одним из свободных параметров фитирования спектра β -электронов. Абсолютное значение энергии отдачи не играет при этом большой роли. Мы выяснили, однако, что полная энергия отдачи явно зависит от энергии. Зависимость проявляется как в изменении энергии отдачи центра масс молекулы, так и в интегральном сдвиге центров колебательно-вращательных мультиплетов. В последнем случае сдвиг является главным эффектом зависимости матричных элементов оператора отдачи $P_n(p_\beta)$ от энергии β -электронов. Ясно, что величина эффекта не зависит от способа расчета спектра.

В формулах для спектра β -электронов (2), (5) эффект поправки можно выразить в виде слабой энергетической зависимости энергии верхней границы спектра W_0 :

$$W_0^{(\text{эфф})} = W_0 + \delta W_0(\epsilon_\beta), \quad (23)$$

$$\delta W_0 = E_R^{(0)} - E_R \approx \frac{\epsilon_\beta^{(0)} - \epsilon_\beta}{M_t},$$

где $\epsilon_\beta^{(0)}$ – произвольная реперная точка спектра. Абсолютная величина эффекта оказывается невелика. Так, для энергетического интервала порядка 200 эВ $\delta W_0 \sim 0.04$ эВ. Заметим, однако, что интегральный спектр ведет себя грубо, как $(W_0 - \epsilon_\beta)^3$. Вариация W_0 приводит к возникновению членов порядка $\delta W_0 (W_0 - \epsilon_\beta)^2$. Зависимость от массы нейтрино приводит к отрицательным вкладам в спектр порядка $m_\nu^2 (W_0 - \epsilon_\beta)$. Величина энергетического интервала, таким образом, является своеобразным эффектом усиления.

При фитировании эксперимента мы ожидаем, что среднее значение величины W_0 будет определяться в основном точками вблизи *нижней* границы спектра, где число событий на несколько порядков выше, чем вблизи верхней границы. Существование слабой энергетической зависимости приводит к небольшой положительной поправке к стандартному спектру с фиксированной величиной W_0 . Чтобы компенсировать эффект, среднее значение свободного параметра m_ν^2 должно быть сделано отрицательным. Чем дальше нижняя граница спектра, тем меньше эффективное значение W_0 , тем больше эффективное значение поправки δW_0 , тем более отрицательно значение параметра m_ν^2 . В самом деле, подобная тенденция ясно прослеживалась в подробных экспериментальных отчетах [5], см. табл. 1.

Чтобы оценить величину эффекта, мы проделали простейший численный эксперимент. Пользуясь стандартными таблицами спектра конечных возбуж-

дений, мы вычислили гипотетический спектр β -электронов с учетом и без учета поправки δW_0 , при этом масса нейтрино полагалась равной нулю. При выборе W_0 по нижней границе интервала фитирования два спектра совпадают на двух концах энергетического интервала. Разница двух спектров на всем интервале аппроксимировалась методом наименьших квадратов, используя m_ν^2 как параметр, для которого получаем $m_\nu^2 \approx -1.9 \text{ эВ}^2/c^4$. Отрицательные величины m_ν^2 такого порядка сообщаются в [4, 6]. Включение поправки в процедуры фитирования экспериментального спектра должно показать реальную величину эффекта.

В заключение мы применили операторный формализм для анализа спектральных сумм. Мы предлагаем несколько модификаций, призванных улучшить качество теоретического спектра конечных состояний. В частности, мы обсудили количественно эффект влияния энергии отдачи на величину массы нейтрино, определяемой из совместного анализа экспериментального и теоретического спектров β -электронов. Численные оценки, расчеты спектра, а также более детальный анализ операторных разложений будут даны в отдельной работе.

Работа выполнена при поддержке NSF гранта # PHY-9984075.

1. R. G. H. Robertson, T. J. Bowles, G. J. Stephenson Jr. et al., Phys. Rev. **67**, 957 (1991).
2. W. Stoeffl and D. J. Decman, Phys. Rev. Lett. **75**, 3237 (1995).
3. C. Weinheimer, M. Przyrembel, H. Backe et al., Phys. Lett. **B300**, 210 (1993).
4. C. Weinheimer, B. Degenndag, A. Bleile et al., Phys. Lett. **B460**, 219 (1999).
5. A. I. Belesev, A. I. Bleule, E. V. Geraskin et al., Phys. Lett. **B350**, 263 (1995).
6. V. M. Lobashev, V. N. Aseev, A. I. Belesev et al., Phys. Lett. **B460**, 227 (1999).
7. W. Kolos, B. Jeziorski, K. Szalewich, and H. J. Monkhorst, Phys. Rev. **A31**, 551 (1985).
8. W. Kolos, B. Jeziorski, K. Szalewich, and H. J. Monkhorst, Phys. Rev. **A32**, 2573 (1985).
9. O. Fackler, B. Jeziorski, W. Kolos et al., Phys. Rev. Lett. **55**, 1388 (1985).
10. K. Szalewicz, O. Fackler, B. Jeziorski et al., Phys. Rev. **A35**, 965 (1987).
11. P. Froelich, B. Jeziorski, W. Kolos et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 2871 (1993).
12. S. Jonsell and H. J. Monkhorst, Phys. Rev. Lett. **76**, 2871 (1996).
13. A. Saenz, S. Jonsell, and P. Froelich, Phys. Rev. Lett. **84**, 242 (2000).
14. <http://www-ik1.fzk.de/tritium>
15. E. J. Konopinski, *The Theory of Beta Radioactivity*, Clarendon Press, Oxford, 1966.
16. H. J. Lipkin, *Quantum mechanics; new approaches to selected topics*, American Elsevier Pub. Co., New York, 1973.