

Измерение энергии 8.3-эВ изомера ^{229}Th с помощью фотоэффекта

Ф. Ф. Карпешин⁽¹⁾

Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии имени Д. И. Менделеева (ВНИИМ),
190005 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 сентября 2023 г.

После переработки 18 сентября 2023 г.

Принята к публикации 18 сентября 2023 г.

Предлагается использовать фотоэффект на внутренних s -оболочках атома ^{229}Th для уточнения энергии его 8.3-эВ изомера. Расчет выполнен по теории встряски Фейнберга–Мигдала, которая приводит к вероятности образования изомера вплоть до 0.5×10^{-3} на K -оболочке. В результате в спектре фотоэлектронов предсказываются две линии, измерение расстояния между которыми покажет энергию изомера. Обсуждаются и другие пути применения метода для изучения свойств изомера: через встряску при формировании радиоактивных пучков на накопительных кольцах и др. Более того, регистрация эффекта в эксперименте позволит уточнить его парциальное время жизни.

DOI: 10.31857/S1234567823200028, EDN: oqtuly

В настоящее время наиболее точные атомные часы основаны на сверхтонком взаимодействии электронной оболочки атома с ядром. Рекордные экземпляры достигают относительной погрешности воспроизведения единицы частоты (времени) в пределах нескольких единиц 10^{-18} [1]. Этого недостаточно как для фундаментальных целей подобно определению дрейфа фундаментальных констант, детектирования сверхлегких бозонов темной материи [1], так и для решения прикладных задач навигационно-координатного обеспечения и других. Следующее поколение часов будет использовать для стабилизации непосредственно оптическую линию ядерного изомера. Ядра, будучи расположены в центре электронной оболочки, слабее по сравнению с атомными или молекулярными системами подвержены воздействиям внешних помех и внутрикристаллических полей. Эти линии достаточно узкие и устойчивые. Наиболее вероятным кандидатом является в настоящее время изомер ^{229}Th , возбужденное состояние которого $3/2^+[631]$ расположено на высоте $\omega_n = 8.338(24)$ эВ ([2]) над основным $5/2^+[633]$. В рамках данной работы атомы радиоактивных нуклидов с $A = 229$ внедрялись в кристаллические решетки CaF_2 , MgF_2 и др. В результате бета-распада образовывались ядра ^{229}Th , причем с повышенным по отношению к альфа-распаду ^{233}U изомерным отношением. Конверсионный канал распада подавлялся вследствие наличия запрещенной зоны с шириной, превышающей энергию изомера. Это позволило наблюдать фотоны от

ядерного распада и определить их энергию. Естественная ширина линии изомерного перехода составляет всего 10^{-5} Гц [3, 4], что удачно сочетается со временем когерентности лазерных установок. Тем не менее, правильное использование электронной оболочки играет решающую роль.

Пока, однако, отсутствует необходимое условие для конструирования стандарта частоты: энергия перехода неизвестна в пределах требуемой погрешности, которая определяется естественной шириной ядерной линии. Для ее определения подходит метод сканирования частоты лазера в поисках резонансного фотовозбуждения изомера. Тем не менее, и этот подход, чтобы иметь успех, должен быть построен на использовании резонансных свойств электронной оболочки [3]. Наиболее разработанный современный проект основан на применении частотной гребенки для поиска резонансной частоты в нейтральных атомах [5]. Метод использует уширение изомерной линии на 9 порядков величины вследствие внутренней конверсии, иначе поиск резонанса занял бы нереально много времени для практического воплощения.

Электронная оболочка предоставляет и возможность применения другого метода определения энергии изомера, рассматриваемого ниже. Сначала, однако, напомним кратко основы взаимодействия основного и изомерного уровней ядра через посредство электронной оболочки. С этой целью остановимся на результатах работы [6], в которой было показано ускорение распада изомера в водородоподобных ионах за счет смешивания основного и изомерного уровней ядра в состояниях атома с полным момен-

¹⁾e-mail: fkarpeshin@gmail.com

том $F = 2$. Когерентная суперпозиция их амплитуд вызывает осцилляцию во времени заселенностей основного и изомерного состояний ядра вокруг средних значений. Рассмотрим эти два вопроса по порядку.

В основном состоянии такой водородоподобной системы спины единственного электрона и ядра могут сложиться параллельно или антипараллельно. Соответствующий полный момент будет равен $F = 3$ или 2 . Аналогично складываются спин электрона с изомерным ядром, образуя состояния с $F = 2$ или 1 . Таким образом, состояние атома с $F = 2$ может быть двух типов: 1) ядро в основном состоянии, спины антипараллельны, и 2) ядро в изомерном состоянии, спины параллельны. А поскольку они взаимодействуют путем резонансной конверсии, то, согласно принципам квантовой механики, эти состояния образуют суперпозицию, которая и будет реальной волновой функцией. Обозначив амплитуды смешивания состояний атома двух типов α и β , соответственно, волновую функцию атома в основном и изомерном состояниях можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Psi_g &= \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle, \\ \Psi_{is} &= \alpha|2\rangle - \beta|1\rangle,\end{aligned}\quad (1)$$

где $\alpha \approx 1$, а β можно определить через матричный элемент взаимодействия и разность энергий двух состояний в первом порядке теории возмущений. Если атом в основном состоянии, то ядро тем не менее может быть с вероятностью $|\beta|^2$ в изомерном, а если атом в изомерном состоянии, то с той же вероятностью ядро у него может быть в основном. Это достигается за счет того, что основная и примесная амплитуды осциллируют во времени. Теперь на вопрос перехода атома из изомерного состояния в основное, например, радиационного можно взглянуть иначе: в какой-то момент времени ядро уже в основном состоянии, поэтому достаточно совершить спин-флип электрону, излучив избыток энергии. А поскольку ему это сделать на порядки легче, как отмечено во Введении, то время жизни изомера сокращается в сотни раз. На другое красивое следствие Варшавского эффекта смешивания ядерных уровней для гироманнитного отношения ядра ^{229}Th в основном состоянии было обращено внимание в работе [7].

Не менее заманчивым представляется использовать осцилляцию основного и изомерного уровней в основном состоянии атома. Например, представим, что мы внезапно отрываем электрон, взаимодействие с которым вызывает осцилляцию. Тогда очевидно, что ядро останется в том состоянии, в котором оно пребывало в момент отрыва. Это может быть как основное состояние, так и изомерное, причем отноше-

ние вероятностей прямо дается отношением квадратов амплитуд заселенности того и другого состояний. А вследствие закона сохранения энергии фотоэлектронов окажутся различающимися на разницу ядерных уровней, с точностью до изомерного сдвига. Мы таким образом можем определить энергию изомера, измерив разницу энергий между двумя линиями фотоэлектронов.

Теория эффектов, возникающих в ядерной физике вследствие внезапного возбуждения и ионизации атомов, была развита Фейнбергом [8] и независимо Мигдалом [9]. Проявление таких эффектов носит всеобщий характер в физике. Они наблюдаются в молекулярных, твердотельных системах, играя ключевую роль в экспериментах коллабораций LUX [10], XENON1T [11], DarkSide-50 [12], нацеленных на регистрацию взаимодействия частиц темной материи с веществом. Отдача ядра вследствие взаимодействия или изменение его заряда, согласно теории Фейнберга–Мигдала, сопровождаются ионизацией и возбуждением атомов, в процессе релаксации которых выделяется энергия, на регистрацию которой и ориентируются детекторы. В случае двойного безнейтринного e -захвата учет встряски приводит к его ускорению до порядка величины [13]. В двойном бета-распаде изменение заряда ядра на две единицы сопряжено с возбуждением дочернего атома не менее чем в 75 % случаев распада, причем энергия возбуждения составляет в среднем неожиданно большую величину: от 300 эВ до 1 кэВ [14]. Чтобы проиллюстрировать идею в нашем случае, рассмотрим фейнмановский график на рис. 1 в представлении Фарри

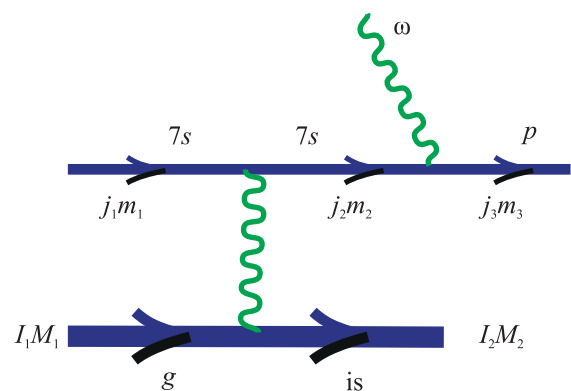


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентном $7s$ -электроне иона тория Th^+ с возбуждением изомера

для фотоэффекта на валентном $7s$ -электроне однократно ионизованного атома ^{229}Th . Ядро переходит в изомерное состояние в результате виртуального об-

мена фотоном с валентным электроном. Электрон же погружается на энергию ω_n ниже массовой поверхности. Затем он поглощает фотон из поля лазера и вылетает из атома. Удерживая в спектральном разложении в функции Грина электрона ближайшее $7s$ -состояние, амплитуду процесса можно записать в виде:

$$\begin{aligned} F_1 &= \sum_{j_2 m_2 M} \langle j_3 m_3 | H'_\gamma(\lambda, \mu) | j_2 m_2 \rangle \times \\ &\times \frac{1}{-\omega_n} \langle I_2 M_2 j_2 m_2 | H'_c(LM) | I_1 M_1 j_1 m_1 \rangle = \\ &= \sum_{j_2 m_2 M} \frac{C(j_2 m_2 \lambda \mu | j_3 m_3)}{\sqrt{2j_3 + 1}} \frac{\langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_2 \rangle}{\omega_n} \times \\ &\times \frac{C(j_2 m_2 LM | j_1 m_1) C(I_1 M_1 LM | I_2 M_2)}{\sqrt{(2j_1 + 1)(2I_2 + 1)}} \times \\ &\times \langle I_2 j_2 | H'_c(L) | I_1 j_1 \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $j_1, m_1, j_2, m_2, I_1, M_1, I_2, M_2$ – угловые моменты и их проекции $7s$ -электрона и ядра, как показано на графике рис. 1. Соответствующие волновые функции нормированы на одну частицу в единице объема, как и сферическая волновая функция фотона с квантовыми числами $\lambda\mu$. j_3, m_3 – квантовые числа электрона в сплошном спектре. Его волновая функция, также в виде сферической волны, нормирована на δ -функцию по энергии. Для перехода к вероятности процесса рис. 1 квадрат амплитуды надо усреднить по начальным квантовым числам, просуммировать по конечным и результат умножить на 2π . Результат получим в виде:

$$\begin{aligned} W_1 &= \frac{2\pi}{(2\lambda + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)} \sum_{M_1 M_2 \mu m_1 j_3 m_3} |M_1|^2 = \\ &= \sum_{j_3} \frac{2\pi |\langle I_2 j_2 | H'_c(L) | I_1 j_1 \rangle \langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_2 \rangle|^2}{(2\lambda + 1)(2L + 1)(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)\omega_n^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Поскольку в промежуточном состоянии мы ограничились $7s$ -уровнем, то в (3) существенны лишь слагаемые с $j_2 = j_3 = 1/2$. Вклад в амплитуду процесса от графика, аналогичного рис. 1, но с обратным порядком взаимодействия $7s$ -электрона с фотоном и ядром значительно меньше (например, ср. расчет графиков рис. 3а и с из работы [15]). Для получения сечения фотоэффекта из выражения (3) для вероятности ее надо разделить на поток падающих фотонов, равный s .

Фейнмановский график, отвечающий амплитуде обычного фотоэффекта, приведен на рис. 2. От со-

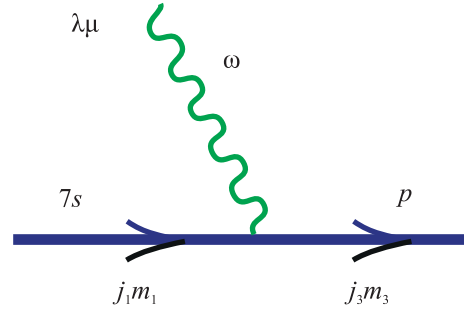


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентной $7s$ -оболочке однократно ионизованного атома тория

стояния ядра его амплитуда не зависит. Аналогично предыдущему, запишем для нее выражение в виде:

$$M_2 = \langle j_3 m_3 | H'_\gamma(\lambda, \mu) | j_1 m_1 \rangle, \quad (4)$$

и для вероятности в виде

$$W_2 = \frac{2\pi}{(2\lambda + 1)(2j_1 + 1)} \sum_{j_3} |\langle j_3 | H'_\gamma(\lambda) | j_1 \rangle|^2. \quad (5)$$

Приведенный конверсионный матричный элемент в (3) можно выразить через произведение коэффициента дискретной конверсии и радиационной ширины ядерного перехода (например, [16, 17])

$$\begin{aligned} &|\langle I_2 j_2 | H'_c(1) | I_1 j_1 \rangle|^2 = \\ &= 3(2I_1 + 1)(2j_1 + 1) \alpha_d(M1; j_1 \rightarrow j_2) \Gamma_n^{(\gamma)}(I_1 \rightarrow I_2) / 2\pi. \end{aligned} \quad (6)$$

Как сказано выше, резонансная конверсия открывает возможность смешивания основного и изомерного ядерных состояний, несмотря на то, что у них разные спины, с сохранением полного углового момента атома F . Если в диаграмме рис. 1 рассмотреть водородоподобные ионы вместо однократных, то были бы возможны в начальном состоянии полные моменты $F = 2$ и 3 , причем уровень с $F = 2$ был бы основным. Аналогично, изомер мог бы образовать с электроном состояния с $F = 1$ и 2 . Виртуальный переход в изомерное состояние возможен с $F = 2$, с начальным же состоянием с $F = 3$ процесс типа рис. 1 был бы невозможным. В рассматриваемом случае однократных ионов благодаря еще большему моменту электронной оболочки $j = 3/2$ тем более возможен целый ряд комбинаций для полного момента F как в начальном, так и в конечном состояниях. Правила отбора для дискретной конверсии автоматически учитывают эти комбинации в формулах для расчета дискретных КВК (коэффициентов внутренней кон-

версии) $\alpha_d(M1; 7s - 7s)$. Разделив теперь почленно (3) на (5), заключим, что

$$W_1 = \beta^2 W_2, \quad (7)$$

$$\beta^2 = \frac{\alpha_d(M1; j_2 \rightarrow j_1) \Gamma_n^{(\gamma)}(I_1 \rightarrow I_2) / 2\pi}{\omega_n^2}.$$

Выражение (7) представляет собой не что иное, как формулу для вероятности смешивания ядерных состояний в (1) в первом порядке теории возмущений, в полном согласии с высказанным ранее ожиданием пропорциональности заселения уровней квадратам соответствующих амплитуд в (1).

Тот же эффект смешивания ядерных уровней возникает и в нейтральных атомах тория. Фейнмановская диаграмма возбуждения изомера при ионизации $7s$ -электрона показана на рис. 3. Падающий фо-

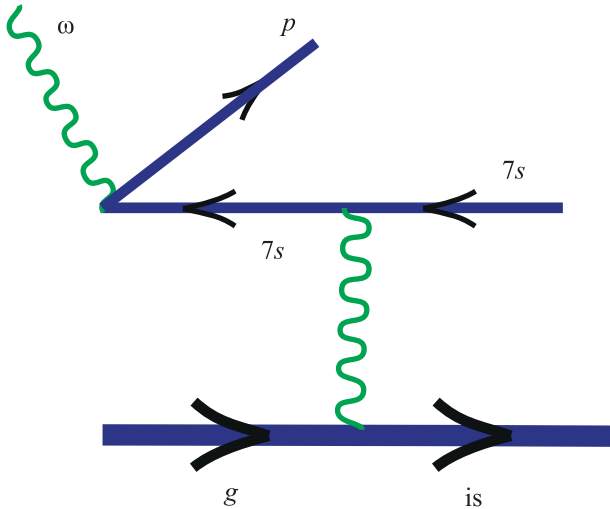


Рис. 3. (Цветной онлайн) Фейнмановская диаграмма фотоэффекта на валентной $7s$ -оболочке нейтрального атома тория с возбуждением изомера

тон выбивает один из $7s$ -электронов, образуя дырку в оболочке с избытком энергии над массовой поверхностью на величину ω_n . При взаимодействии дырки с ядром эта энергия передается ядру, переводя его в изомерное состояние. Расчет этой диаграммы вполне аналогичен приведенному выше и приводит к тому же результату (7). Спектр выбитых фотоном электронов так же будет состоять из двух линий, разделенных на величину энергии изомера ω_n .

Последний пример наводит на мысль, что и образование дырки во внутренних оболочках так же приведет к заселению изомера по механизму встряхивания атома. Разница появляется в том, что ширина дырочного состояния на внутренних оболочках достигает ощутимой величины: 88.2, 14.3 и 15.5 эВ на K -, L_1 - и M_1 -оболочках [18]. Наличие ширины в

конечном состоянии проявится появлением такой же ширины и в линиях фотоэлектронов вследствие закона сохранения энергии. Математически это выражается добавлением резонансного фактора Брейта-Вигнера в формуле (3) для спектра электронов:

$$\frac{dW_1}{dE} = \sum_{j_3} \frac{2\pi |\langle I_2 j_2 || H'_c(L) || I_1 j_1 \rangle \langle j_3 || H'_\gamma(\lambda) || j_2 \rangle|^2}{(2\lambda + 1)(2L + 1)(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)(2I_1 + 1)\omega_n^2} \times \frac{\Gamma/2\pi}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (8)$$

где Γ – полная ширина дырки, E , E_0 – кинетическая энергия выбитых электронов и ее резонансное значение.

После интегрирования по профилю электронной линии при условии, что $E_0 \gg \Gamma$, для вероятности возбуждения изомера получим то же выражение (3), и (7) – для отношения ветвления.

Коэффициенты дискретной конверсии были вычислены, например, в работах [4, 15]. Для энергии изомера 8.338 эВ $\alpha_d(M1; 7s \rightarrow 7s) = 3.90 \times 10^{10}$ эВ, $\alpha_d(M1; 1s \rightarrow 1s) = 5.14 \times 10^{18}$ эВ, $\alpha_d(M1; 2s \rightarrow 2s) = 1.77 \times 10^{17}$ эВ, и $\alpha_d(M1; 3s \rightarrow 3s) = 7.84 \times 10^{15}$ эВ для нейтральных атомов, соответственно. По формуле (7) найдем вероятность образования изомера $\beta^2 = 5.24 \times 10^{-4}$, 1.80×10^{-5} , 8.00×10^{-7} и 3.98×10^{-12} для $1s$ -, $2s$ -, $3s$ - и $7s$ -состояний, соответственно. Результаты расчета представлены в табл. 1.

Наши результаты для $1s$ -электронов согласуются с полученными ранее в работах [6, 15]. Если положить энергию изомера в формуле (7) $\omega_n = 3.5$ эВ и учесть, что $\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns) \sim \omega_n^{-3}$, то получилось бы $\beta^2 = 0.02$, что совпадает с использованным в [6] значением. Аналогичное согласие имеет место с работой [15]. Для $2s$ -электронов дискретный КВК и, соответственно, вероятность возбуждения на порядок меньше. Этого следовало ожидать, поскольку в первом приближении коэффициенты пропорциональны электронной плотности в начале координат. Убывание усиливается и вследствие экранирования. Для следующих орбит эффект убывает по тому же закону. Таким образом, эффект возбуждения изомера при встряске атома максимален для K -электронов, а с повышением номера оболочки он уменьшается. С другой стороны, ширина профиля электронной линии равна ширине дырки. Поэтому разрешить экспериментально две линии по энергии легче в случае образования дырки на более высоких оболочках. Следовательно, при выборе методики эксперимента надо исходить из конкретных условий, целей и задач.

Таблица 1. Значения дискретных КВК $\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns)$, вероятностей образования изомера β^2 и полных ширин дырочных состояний Γ

	1s	2s	3s	7s
$\alpha_d(M1; ns \rightarrow ns)$, эВ	5.14×10^{18}	1.77×10^{17}	7.84×10^{15}	1.95×10^{10}
β^2	5.24×10^{-4}	1.80×10^{-5}	8.00×10^{-7}	3.98×10^{-12}
Γ , эВ [18]	88.2	14.3	15.5	—

Подводя итог, резюмируем, что лавинообразное возрастание числа экспериментальных работ, в которых последовательно уточняется энергия изомера (например, [2, 19] и ссылки там), а также новых проектов [20, 21] говорит о том, что основная на сегодняшний день задача изучения ^{229m}Th – определения его энергии – входит в решающую фазу. На этом фоне предложенный выше способ измерения энергии изомера в случае его осуществления способен значительно уменьшить неопределенность измерения. Независимо от того, в какой оболочке наблюдается фотоэффект, в спектре фотоэлектронов предсказываются парные линии, разделенные на энергию изомера. Разумеется, возбуждение изомера при внезапном образовании дырки в оболочке представляет интерес и само по себе. Уместно заметить, что вероятность образования изомера пропорциональна парциальной ширине его радиационного распада. Поэтому изучение эффекта в эксперименте поможет уточнить ее значение.

Помимо фотоэффекта, внезапная ионизация может быть произведена электронным ударом и другими методами. В работе [15] рассмотрена ионизация при прохождении пучков тяжелых ионов сквозь легкие (бериллиевые) мишени. Такая методика как раз отработана на накопительных кольцах в ГСИ Дармштадт, ИСФ Ланьчжоу. Она является обычным инструментом для формирования радиоактивных пучков тяжелых ионов. Более того, по приведенной выше схеме фотоэффект может быть использован и в различных комбинациях с другими методами, например, в опытах с кристаллической решеткой типа описанных в работе [2].

Автор хотел бы выразить признательность Я. Жиличу и М. Пфюцнеру за иницирующие обсуждения.

1. M. Filzinger, S. Dörscher, R. Lange, J. Klose, M. Steinell, E. Benkler, E. Peik, C. Lisdat, and N. Huntemann, Phys. Rev. Lett. **130**, 253001 (2023).
2. S. Kraemer, J. Moens, M. Athanasakis-Kaklamanakis et al. (Collaboration), Nature **617**, 706 (2023); <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05894-z>.
3. Л. Ф. Витушкин, Ф. Ф. Карпешин, М. Б. Тржасковская, ЯФ **83**, 463 (2020) [L. F. Vitushkin,

- F. F. Karpeshin, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. At. Nucl. **83**, 775 (2020)].
4. F. F. Karpeshin and L. F. Vitushkin, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.08711>.
5. L. von der Wense and Z. Chuankun, Eur. Phys. J. Ser. D **74**, 146 (2020).
6. F. F. Karpeshin, S. Wycech, I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, M. Pfützner, and J. Zylicz, Phys. Rev. C **57**, 3085 (1998).
7. V. M. Shabaev, D. A. Glazov, A. M. Ryzhkov, C. Brandau, G. Plunien, W. Quint, A. M. Volchkova, and D. V. Zinenko, Phys. Rev. Lett. **128**, 043001 (2022).
8. E. L. Feinberg, J. Phys. (USSR) **4**, 423 (1941).
9. А. Мигдал, ЖЭТФ **11**, 207 (1941).
10. D. S. Akerib, S. Alsum, H. M. Araújo et al. (LUX Collaboration), Phys. Rev. Lett. **122**, 131301 (2019).
11. E. Aprile, J. Aalbers, F. Agostini et al. (XENON Collaboration), Phys. Rev. Lett. **123**, 241803 (2019).
12. P. Agnes, I. F. M. Albuquerque, T. Alexander et al. (DarkSide Collaboration), Phys. Rev. Lett. **130**, 101001 (2023).
13. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **107**, 045502 (2023).
14. М. И. Криворученко, К. С. Тырин, Ф. Ф. Карпешин, Письма в ЖЭТФ **117**, 887 (2023).
15. F. F. Karpeshin, I. M. Band, and M. B. Trzhaskovskaya, Nucl. Phys. A **654**, 579 (1999).
16. Б. А. Зон, Ф. Ф. Карпешин, ЖЭТФ **97**, 401 (1990) [B. A. Zon and F. F. Karpeshin, Sov. Phys. – JETP **70**, 224 (1990)].
17. Ф. Ф. Карпешин, Мгновенное деление в моонных атомах и резонансная конверсия, Наука, СПб. (2006).
18. J. L. Campbell and T. Papp, At. Data Nucl. Data Tables **77**, 1 (2001).
19. L. von der Wense and B. Seiferle, Eur. Phys. J. A **56**, 277 (2020).
20. Scientific Program and Abstracts of Int. Workshop on “100 years of Nuclear Isomers”, 2–4 May 2022, Berlin, Germany.
21. Scientific Program and Abstracts of 766-th WE-Heraeus-Seminar on “High-Precision Measurements and Searches for New Physics”, 9–13 May 2022, Physikzentrum Bad Honnef, Germany, <https://www.we-heraeus-stiftung.de/veranstaltungen/high-precision-measurements-and-searches-for-new-physics/>.