

UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI Facultatea de Fizică Școala Doctorală de Fizică



Ovidiu-Vasile NIŢESCU

# Contribuții în studiul dezintegrărilor nucleare $\beta,~2\nu\beta\beta$ și $0\nu\beta\beta$

Rezumatul Tezei de Doctorat

Coordonator Științific Prof. Dr. Sabin STOICA

București, 2023

# Cuprins

1	Intr	oduce	re	1
2	Efecte de violare a invarianței Lorentz in dezintegrarea dublă beta			3
3	Inve expe Star	estigar erimer ndard	ea detaliată a proceselor de captură electronică pentru itele cu xenon lichid ce caută fizică dincolo de Modelul	9
4	Funcții de undă pentru particule relativiste de spin $1/2$			15
5	5 Concluzii Generale		Generale	<b>21</b>
6	Listă de publicții științifice și diseminare			25
	6.1	Public	ții în perioada 2019-2023	25
		6.1.1	Publicații pe tematica tezei	25
		6.1.2	Alte publicații	25
	6.2	Confe	rinte	26
		6.2.1	Conferințe internaționale	26
		6.2.2	Conferințe naționale	26
Bi	Bibliografie			

### Introducere

Studiul dezintegrărilor nucleare radioactive guvernate de interacția slabă a fost și este subiectul unor intense investigații teoretice și experimentale. Aceste dezintegrări servesc ca o cale tangibilă către avansarea înțelegerii noastre în fizica particulelor, structura nucleară și proprietățile neutrinilor, făcându-le astfel o alee esențială pentru extinderea cunoștințelor în aceste domenii. De remarcat este faptul că studiul dezintegrării nucleare  $\beta$  și al dezintegrării duble beta (DBD) are un potențial real pentru a aduce lumină asupra aspectelor fundamentale precum natura neutrinilor (Dirac sau Majorana?), precum și scala maselor și ierarhia acestora.

Această teză își propune să avanseze înțelegerea noastră asupra dezintegrării nucleare  $\beta$  și DBD prin investigarea a două subiecte distincte de cercetare. Prima parte a tezei este dedicată studiului violării invarianței Lorentz (LIV) în sectorul neutrino, o extensie a Modelului Standard (SM). În mod specific, sunt investigate efectele LIV în dezintegrarea dublă beta cu emisie de doi antineutrini ( $2\nu\beta\beta$ ), furnizând înțelegeri în ceea ce privește deviațiile potențiale față de predicțiile SM. A doua parte a tezei reexaminează procesele de captură electronică care pot avea loc în nucleul atomic, mai exact captura electronică (EC) și captura dublă electronică cu emisie de doi neutrin ( $2\nu$ ECEC). Teza este structurată după cum urmează.

Primul capitol oferă o trecere în revistă concisă a dezvoltării istorice a interacției slabe, urmărind originile sale de la teoria lui Fermi privind dezintegrarea  $\beta$  până la încorporarea sa în Modelul Standard așa cum este cunoscută în prezent. Ulterior, este prezentată starea actuală și perspectivele viitoare ale dezintegrării nucleare  $\beta$  și DBD. Mai mult, discuția evidențiază potențialul acestor procese de dezintegrare în abordarea întrebărilor nerezolvate din cadrul domeniului fizicii neutrinilor.

Capitolul 2 este dedicat examinării efectelor de violare a invarianței Lorentz (LIV) în procesul de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$  în sectorul neutrino. Este prezentată o perspectivă de ansamblu asupra înțelegerii actuale și a investigațiilor în curs asupra LIV în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$ , evidențiind posibilitățile de îmbunătățire. Formularea cadrului teoretic complet pentru rata de dezintegrare, care încorporează efectele LIV, servește drept fundament pentru două abordări noi propuse în această teză. Aceste abordări își propun să restrângă parametrul care guvernează efectele LIV în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  prin utilizarea măsurătorilor spectrelor individuale de electroni și a corelației unghiulare dintre electronii emiși, oferind metodologii alternative față de analiza convențională a formei spectrului de sumă de energii ale electronilor emiși. Mai mult, explorăm diverse interacți dintre electronii emiși și sistemul atomic final. O descriere mai precisă a funcțiilor de undă pentru electronii emiși se traduce în predicții mai precise ale observabilelor pentru dezintegrare<br/>a $2\nu\beta\beta$ în cadrul Modelului Standard și în cadrul LIV.

În Capitolul 3, prezentăm progresele teoretice în captura electronică și în captura dublă de electroni cu emisie de doi neutrini ( $2\nu$ ECEC) care au fost dezvoltate în cursul acestei teze de doctorat. Accentul principal se pune pe investigarea proceselor de captură electronică care au importanță în experimentele cu xenon lichid, în special procesele de captură electronică ale <sup>125</sup>Xe și <sup>125</sup>I, împreună cu procesul  $2\nu$ ECEC al <sup>124</sup>Xe. Merită menționat că formalismul teoretic dezvoltat poate fi extins pentru a acoperi o gamă mult mai largă de nuclee. Pentru cazurile investigate, oferim informații detaliate despre energiile de relaxare atomică și fracțiunile de captură electronică relevante în modelarea de fundal a experimentelor cu xenon lichid. Datele sunt prezentate cu incertitudine teoretică, iar evaluarea acestora este discutată detaliat.

Capitolul 4 serveste ca blocuri de construcție esențiale pentru Capitolul 2 și Capitolul 3. Este furnizat cadrul teoretic pentru descrierea atât a stărilor relativiste cu spectru continuu, cât și a stărilor relativiste legate cu spectru discret ale electronilor în atomi. Pentru a descrie stările relativiste legate, adoptăm metoda autoconsistentă Dirac-Hartree-Fock-Slater. Prezentăm rezultate extinse și comparații cu date experimentale pentru diverse mărimi rezultate din calculul structurii atomice, incluzând energii de legătură pentru electronii individuali, energii totale de legătură atomice și energii de relaxare atomică. Pentru stările relativiste cu spectru continuu, discutăm condițiile asimptotice standard și normalizarea funcțiilor de undă corespunzătoare. În plus, prezentăm aproximațiile obișnuite pentru potențialele atomice care sunt utilizate în determinarea funcțiilor de undă corespunzătoare stărilor în continuu pentru electronii emiși în dezintegrarea nucleară  $\beta$  și DBD.

Capitolul 5 prezintă observațiile finale ale tezei, rezumând principalele concluzii. În Capitolul 6, sunt evidențiate contribuțiile mele în domeniu, iar Bibliografia furnizează o listă cuprinzătoare a referințelor utilizate în această cercetare, oferind cititorilor resursele necesare pentru o explorare ulterioară a subiectelor studiate în această teză de doctorat.

# Efecte de violare a invarianței Lorentz in dezintegrarea dublă beta

În timp ce așteptăm cu nerăbdare detectarea dezintegrării duble beta fără emisie de neutrini  $(0\nu\beta\beta)$ , un număr tot mai mare de evenimente corespunzătoare modului de dezintegrare cu emisie de doi neutrini  $(2\nu\beta\beta)$  sunt înregistrate în experimentele ce investighează dezintegrări beta duble. Aceast aspect se datorează în primul rând faptului că modul de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$  acționează ca un semnal de fundal pentru modul  $0\nu\beta\beta$ . Ca rezultat, explorarea fizicii noi dincolo de Modelul Standard prin intermediul procesului de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$  devine din ce în ce mai fiabilă. Dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  este utilizată pentru a investiga diverse fenomene fără a face presupuneri despre natura lor. Acestea includ căutarea interacțiilor cu neutrini cu chiralitate de dreapta [1], auto-interacția neutrinului [2], neutrini sterili cu mase de până la căldura de dezintegrare a procesului [3], componenta bosonică a neutrinului [4], violarea invarianței Lorentz [5, 6, 7, 8, 9], dezintegrări  $0\nu\beta\beta$  cu emisie de Majoron(i) [10, 11], și dezintegrarea cu patru neutrini [12]. Prin studiul dezintegrării  $2\nu\beta\beta$ , aceste investigații oferă oportunități de a explora și de a testa diverse aspecte ale fizicii dincolo de Modelul Standard.

Apariția diverselor scenarii de fizică nouă adesea introduce contribuții suplimentare la rata de dezintegrare a procesului  $2\nu\beta\beta$  acceptant în Modelul Standard, ceea ce poate altera cinematica procesului. Prin folosirea unei statistici îmbunătățite și folosirea predicțiilor teoretice precise pentru spectrul de sumă de energii ale electronilor emiși, devine fezabilă realizarea unor analize experimentale ale formei spectrului, care să răspundă dacă există sau nu deviații de la forma spectrului în Modelului Standard. În cazurile în care un răspuns concluziv rămâne evaziv (așa cum este cazul în analiza experimentală curentă), devine posibil să se restrângă diferite parametri care guvernează respectiva extensie a Modelului Standard. În Figura 2.1, prezentăm spectrul de sumă de energii ale electronilor emiși în cazul dezintegrării standard  $2\nu\beta\beta$ , împreună cu multiple contribuții din diferite scenarii de fizică nouă. Toate spectrele sunt normate la unitate.

O parte din această teză se concentrează exclusiv pe examinarea posibilei influențe a violării invarianței Lorentz (LIV) în sectorul neutrino asupra dezintegrării  $2\nu\beta\beta$ . Obiectivul principal este să se efectueze o analiză cuprinzătoare a efectelor LIV și a consecințelor lor pentru investigațiile experimentale în desfășurare și viitoare. Un obiectiv semnificativ este de a contribui la rafinarea constrângerilor asupra parametrului  $\mathring{a}_{of}^{(3)}$ , care controlează puterea LIV în sectorul neutrino. Pentru a atinge acest obiectiv, investigăm diverse interacțiuni între electronii emiși și sistemul atomic



**Figura** 2.1: Spectrul de sumă a energiilor cinetice ale electronilor emiși (T) pentru dezintegrarea standard  $2\nu\beta\beta$  a <sup>100</sup>Mo, comparat cu spectrele dezintegrării fără neutrini cu emisie de Majoroni ( $0\nu$ Mn), perturbația datorată violării invarianței Lorentz în sectorul neutrino ( $2\nu$ -LIV) și spectrul dezintegrării  $2\nu\beta\beta$  cu neutrino bosonic ( $2\nu$ -Boson). Toate spectrele sunt normate la unitate. Figura este preluată din [11].

final. În plus, propunem două abordări inovatoare care pot servi ca și complemente la metodele utilizate în studiile anterioare privind LIV. Aceste abordări noi, bazate pe spectrele individuale de electroni și pe corelația unghiulară dintre electronii emiși, oferă tehnici alternative pentru restrângerea coeficientului  $a_{of}^{(3)}$ . Prin extinderea cadrului teoretic și introducerea de metode de analiză inovatoare, căutăm să aducem mai multă lumină asupra posibilei violări a invarianței Lorentz și a implicațiilor sale pentru procesul de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$ .

În contextul Modelului Standard Extins (SME), este posibil ca efectele LIV să apară în sectorul neutrino prin acțiunea operatorilor "countershaded". Acest lucru poate fi realizat prin modificarea fiecărui 4-impuls al antineutrinului de la  $q^{\alpha} = (\omega, \boldsymbol{q})$  la un 4-impulsul efectiv  $\tilde{q}^{\alpha} = (\omega, \boldsymbol{q} + \boldsymbol{a}_{of}^{(3)} - \mathring{a}_{of}^{(3)} \hat{\boldsymbol{q}})$  [13, 14, 15]. Aici,  $\mathring{a}_{of}^{(3)}$  este legat de componenta izotropă a coeficientului  $(a_{of}^{(3)})_{jm}$  prin relația  $\mathring{a}_{of}^{(3)} = (a_{of}^{(3)})_{00}/\sqrt{4\pi}$  [13]. În experimentele de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$ , unde cei doi antineutrini nu sunt măsurați, integrarea peste toate direcțiile în care antineutrinii sunt emiși duce doar la coeficientul izotrop  $\mathring{a}_{of}^{(3)}$ . Prin urmare, pot fi examinate doar efectele LIV legate de această contribuție, în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$ . Acest lucru duce la o modificare a spațiului de fază diferențial al antineutrino din forma standard  $d^3q = 4\pi\omega^2 d\omega$  în forma care conține efecte LIV  $d^3q = 4\pi(\omega^2 + 2\omega\mathring{a}_{of}^{(3)})d\omega$ . Este important de remarcat că presupunem că doar neutrino sunt afectați de LIV.

Expresia SME a ratei diferențiale de dezintegrare pentru dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  în funcție de cosinusul unghiului dintre electronii emiși  $\theta_{12}$  este dată de

$$\frac{d\Gamma_{\rm SME}^{2\nu}}{d(\cos\theta_{12})} = \frac{1}{2}\Gamma_{\rm SME}^{2\nu} \left[1 + \kappa_{\rm SME}^{2\nu}\cos\theta_{12}\right],\tag{2.1}$$

unde coeficientul de corelație un ghiulară care include efectele LIV,  $\kappa_{\rm SME}^{2\nu},$  este definit de

$$\kappa_{\rm SME}^{2\nu} = \frac{\Lambda_{\rm SME}^{2\nu}}{\Gamma_{\rm SME}^{2\nu}}.$$
(2.2)

Putem exprima ratele de dezintegrar<br/>e $\Lambda_{\rm SME}^{2\nu}$ și  $\Gamma_{\rm SME}^{2\nu}$ ca sumă de contribuții standard și LIV,

$$\Gamma_{\rm SME}^{2\nu} = \Gamma^{2\nu} + \delta \Gamma^{2\nu},$$
  

$$\Lambda_{\rm SME}^{2\nu} = \Lambda^{2\nu} + \delta \Lambda^{2\nu},$$
(2.3)

cu următoarea separare în elementul de matrice nuclear (NME) standard și factorul spațiu de fază (PSF) extins,

$$\frac{\Gamma_{\rm SME}^{2\nu}}{\ln 2} = g_A^4 \left| m_e M^{2\nu} \right|^2 G_{\rm SME}^{2\nu},$$

$$\frac{\Lambda_{\rm SME}^{2\nu}}{\ln 2} = g_A^4 \left| m_e M^{2\nu} \right|^2 H_{\rm SME}^{2\nu},$$
(2.4)

unde  $G_{\text{SME}}^{2\nu} = G^{2\nu} + \delta G^{2\nu}$  și  $H_{\text{SME}}^{2\nu} = H^{2\nu} + \delta H^{2\nu}$ , cu

$$\begin{cases} G^{2\nu} \\ \delta G^{2\nu} \\ \delta G^{2\nu} \end{cases} = \frac{\tilde{A}^2 G_F^4 |V_{ud}|^4 m_e^9}{96\pi^7 \ln 2} \frac{1}{m_e^{11}} \int_{m_e}^{E_I - E_F - m_e} d\varepsilon_1 \varepsilon_1 p_1 \int_{m_e}^{E_I - E_F - \varepsilon_1} d\varepsilon_2 \varepsilon_2 p_2 \\ \times \int_0^{E_I - E_F - \varepsilon_1 - \varepsilon_2} d\omega_1 \omega_2^2 a(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \\ \times \left[ \langle K_N \rangle^2 + \langle L_N \rangle^2 + \langle K_N \rangle \langle L_N \rangle \right] \begin{cases} \omega_1^2 \\ 4 \mathring{a}_{of}^{(3)} \omega_1 \end{cases}$$
(2.5)  
$$\begin{cases} H^{2\nu} \\ \delta H^{2\nu} \end{cases} = \frac{\tilde{A}^2 G_F^4 |V_{ud}|^4 m_e^9}{96\pi^7 \ln 2} \frac{1}{m_e^{11}} \int_{m_e}^{E_I - E_F - m_e} d\varepsilon_1 \varepsilon_1 p_1 \int_{m_e}^{E_I - E_F - \varepsilon_1} d\varepsilon_2 \varepsilon_2 p_2 \\ \times \int_{0}^{E_I - E_F - \varepsilon_1 - \varepsilon_2} d\omega_1 \omega_2^2 b(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \end{cases}$$

$$\times \left[\frac{2}{3}\langle K_N \rangle^2 + \frac{2}{3}\langle L_N \rangle^2 + \frac{5}{3}\langle K_N \rangle \langle L_N \rangle\right] \left\{ \begin{matrix} \omega_1^2 \\ 4\mathring{a}_{of}^{(3)} \omega_1 \end{matrix} \right\}.$$
(2.6)

Cantitățile  $\langle K_N \rangle$  și  $\langle L_N \rangle$  sunt factori cinematici care depind de energiile leptonilor  $(\epsilon, \omega)$ , energia stării fundamentale a nucleului părinte  $(E_I)$ , și o energie medie a stărilor excitat 1<sup>+</sup> în nucleul intermediar  $(\langle E_N \rangle)$ . Acestea sunt date de [16],

$$\langle K_N \rangle = \frac{1}{\varepsilon_1 + \omega_1 + \langle E_N \rangle - E_I} + \frac{1}{\varepsilon_2 + \omega_2 + \langle E_N \rangle - E_I}$$
  
$$\langle L_N \rangle = \frac{1}{\varepsilon_1 + \omega_2 + \langle E_N \rangle - E_I} + \frac{1}{\varepsilon_2 + \omega_1 + \langle E_N \rangle - E_I}.$$
  
(2.7)

În calcule, energia $\langle E_N\rangle-E_I$ este determinată folos<br/>ind aproximarea,

$$\tilde{A} = [W_0/2 + \langle E_N \rangle - E_I], \qquad (2.8)$$

unde  $\tilde{A} = 1.12A^{1/2}$  (în MeV) reprezintă energia rezonanței gigant Gamow-Teller în nucleul intermediar, iar  $W_0 = E_I - E_F$ , unde  $E_F$  este energia stării fundamentale a nucleului fiică. Energie  $W_0$  este legată de căldura de dezintegrare Q a procesului prin

$$W_0 = Q + 2m_e, \tag{2.9}$$

unde  $m_e$  reprezintă energia de repaus a electronului.

Pe baza ecuațiilor de mai sus (selectate ca fiind cele mai reprezentative din acest Capitol), am realizat o analiză a efectelor violării invarianței Lorentz (LIV) asupra spectrelor individuale de electroni, spectrelor de energie sumată a electronilor și a corelației unghiulare dintre electroni în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  pentru diferite nuclee de interes experimental. Formulele pentru contribuțiile LIV la aceste spectre și la corelația unghiulară au fost derivate atât în ipoteza unde o singură state intermediară domină dezintegrarea (SSD) (în care  $\langle E_N \rangle$  este înlocuită cu energia primei stări  $1^+$  a nucleului intermediar) cât și în aproximația de închidere, permițându-ne să furnizăm predicții teoretice precise pentru observabilele SM și observabilele perturbate de LIV ale dezintegrării  $2\nu\beta\beta$ .

Am comparat calculul observabilelor dezintegrării  $2\nu\beta\beta$  folosind diverse interacții ale electronilor emiși cu sistemul atomic final. Descoperirile noastre au relevat diferențe semnificative în factorii spațiu de fază și ratele de dezintegrare calculate cu diferite interacții, cu variații de până la 30%. Pe baza acestor rezultate, am concluzionat că funcțiile de undă precise ale electronilor obținute prin rezolvarea numerică a ecuației lui Dirac într-un potențial realist de tip Coulomb, luând în considerare corecții finite ale dimensiunii nucleare și efectele de ecranare, sunt importante pentru calcularea precisă a factorilor spațiu de fază, a spectrelor de electroni și a deviațiilor LIV ale acestora. Folosind această metodă, am furnizat predicții teoretice ale spectrelor de energie sumată a electronilor pentru analizele LIV în nucleul <sup>100</sup>Mo. Am examinat deviațiile LIV pentru aceste spectre, observând că acestea prezintă comportamente distincte pentru valorile pozitive și negative ale coeficientului LIV  $\mathring{a}_{of}^{(3)}$ , devenind mai pronunțate pe măsură ce energia electronului se apropie de valoarea Q.

În plus, am propus două metode alternative pentru a restrânge  $a_{of}^{(3)}$  prin măsurarea spectrelor individuale de electroni și a coeficientului de corelație unghiulară între electronii emiși. Inițial, analiza noastră a efectelor LIV folosind aceste metode a fost inițial limitată la nucleul <sup>100</sup>Mo, unde ipoteza SSD este favorizată experimental. Am extins analiza noastră pentru a include toate nucleele investigate în prezent în experimente de dezintegrare dublă beta, în special <sup>48</sup>Ca, <sup>76</sup>Ge, <sup>82</sup>Se, <sup>100</sup>Mo, <sup>110</sup>Pd, <sup>116</sup>Cd, <sup>130</sup>Te, <sup>136</sup>Xe și <sup>150</sup>Nd. Distingându-se de cazul <sup>100</sup>Mo, majoritatea celorlalte nuclee aflate în investigație prezintă posibilitatea ca mai multe stări 1<sup>+</sup> în nucleul intermediar să contribuie la rata de dezintegrare (ipoteza HSD). Ca rezultat, perturbația în spectrele individuale de electroni cauzată de LIV a prezentat caracteristici diferite. În cele din urmă, am estimat cerințele statistice pentru diferitele experimente DBD care investighează diverse nuclee pentru a obține nivelul de restricție asupra lui  $a_{of}^{(3)}$ observat în experimentele curente de dezintegrare  $\beta$ . Rezultatele din acest Capitol au fost publicate în trei publicații separate [17, 18, 9]. De remarcat, rezultatele noastre au fost folosite în constrângerile parametrului LIV efectuate de colaborările CUPID-1T și GERDA în cursul acestei cercetări de doctorat. În plus, am furnizat spectrele teoretice standard și perturbate de LIV pentru experimentele viitoare, inclusiv colaborările MOJORANA și LEGEND, contribuind astfel la investigațiile lor viitoare.

# Investigarea detaliată a proceselor de captură electronică pentru experimentele cu xenon lichid ce caută fizică dincolo de Modelul Standard

Experimentele cu xenon lichid reprezintă un tip de experiment în fizica particulelor care încearcă să detecteze și să studieze evenimente rare ce ar putea furniza dovezi pentru fizica dincolo de Modelul Standard (BSM), cum ar fi împrăștiere coerentelastică a neutrinilor pe nuclee ( $CE\nu NS$ ) sau particule cu masă mai mare ca zero cu probabilitate de interacție foarte mică (WIMPs). Cu toate acestea, detectarea acestor evenimente rare este dificilă deoarece adesea sunt însoțite de niveluri ridicate de zgomot de fond. Prin urmare, calculele precise ale fondului așteptat sunt esențiale pentru aceste experimente.

O problemă inevitabilă este prezența semnalelor de fond. În special, evenimentele de captură electronică (EC) sau dublă captură electronică care au loc în experimentele cu xenon lichid pot genera semnale înșelătoare care se suprapun cu evenimentele țintă, cum ar fi CE $\nu$ NS sau WIMPs. Cele mai semnificative surse de fond sunt EC a <sup>125</sup>Xe, care apare după o captură neutronică în <sup>124</sup>Xe în camera de măsură, și rezultatul <sup>125</sup>I, care se dezintegrează, de asemenea, prin procesul EC. Un alt proces important care poate imita semnalele potențiale de la WIMPs sau CE $\nu$ NS este dubla captură electronică cu emisie de doi neutrini (2 $\nu$ ECEC) a <sup>124</sup>Xe.

Mai mult, procesul de captură de electroni <sup>125</sup>I reprezintă o componentă importantă de fond în investigațiile care măsoară captura dublă de electroni cu două neutrini în <sup>124</sup>Xe. Procesul de EC al <sup>125</sup>I are un semnal de dezintegrare care se suprapune semnificativ cu cel al procesului de captură dublă de electroni [19]. Acest lucru poate fi observat în Figura 3.1, unde sunt prezentate datele și modelul de fond din investigația capturii duble de electroni efectuată de colaborarea XENON1T [19]. Datorită importanței sale, procesul de EC al <sup>125</sup>I a fost examinat experimental recent, în 2022 [21].

După procesul de captură electronică, atomul final rămâne într-o stare excitată cu un electron în minus în orbital de unde se face captura. Relaxarea atomică are loc prin emisia de raze X și electroni Auger, și potențial prin raze  $\gamma$  dacă stările nucleare excitate sunt populate în nucleul final. O reprezentare schematică a procesului de captură electronică în <sup>125</sup>Xe este prezentată în Figura 3.2. În panoul din stânga, electronul capturat provine din orbitalul K al atomului <sup>125</sup>Xe. În panoul din dreapta,



**Figura** 3.1: Datele și modelul de fond al investigației experimentului XENON1T privind captura dublă de electroni a izotopului <sup>124</sup>Xe [19]. Vârfurile asociate capturii de electroni a izotopului <sup>125</sup>I se suprapun cu cele asociate capturii duble de electroni a izotopului <sup>124</sup>Xe. Figura este preluată din [19].

reprezentăm schematic relaxarea atomică a atomului final,  $^{125}$ I, și emisia neutrino electronic. Se poate observa că deexcitarea atomică prin raze X și electroni Auger din orbitalii exteriori produce o depunere diferită de energie în detector în funcție de orbitalul din care se face captura. Acest lucru se datorează faptului că mai puțină energie este emisă prin relaxarea atomică din captura din orbitalul L decât în cazul capturii din orbitalul K.

De obicei, în procesul  $2\nu$ ECEC, se consideră că electronii sunt capturați din straturile orbitale K și  $L_1$  [22, 23]. Acest aspect a fost extins în acest Capitul, dubla captură electronică fiind tratată incluzând toți orbitalii atomului inițial. O reprezentare schematică a procesului  $2\nu$ ECEC în <sup>124</sup>Xe este ilustrată în Fig. 3.3. În panoul de sus, ambii electroni capturați provin din orbitalul K, iar în panoul de jos, ei sunt capturați din orbitalul  $L_1$ . Se poate observa că deexcitația atomică prin emisii de raze X și electroni Auger din orbitalurile exterioare duce la diferite depuneri de energie în detector dacă procesul de captură are loc din orbitali K sau  $L_1$ .

În experimentele cu xenon lichid, semnalele rezultate în detector sunt vârfuri care corespund energiilor asociate relaxării atomice. Aceste vârfuri au forma unor Gausiene din cauza rezoluției energetică finite. Figura 3.4 ilustrează un exemplu de astfel de semnal pentru capturile unui electron din orbitalul K, L și M. Semnalul este caracterizat prin lățimea vârfului, aria și amplasarea sa (pe axa energetică). Lățimea vârfului este legată de rezoluția energetică a detectorului. În cazul în care conservarea energiei este satisfăcută, procesul de captură a electronului poate avea loc din



**Figura** 3.2: O reprezentare schematică a procesului de captură electronică în  $^{125}Xe$ . Panoul din stânga: un electron este capturat din orbitalul K al atomului  $^{125}Xe$ . Panoul din dreapta: relaxarea atomică a sistemului atomic final neutru  $^{125}I$ , cu un electron în minus în orbitalul K și emisia unui neutrino electronic. Deexcitarea se realizează prin emisii de raze X și electroni Auger din orbitali exterioare. Figura este reprodusă din [20].

toate straturile atomice ale nucleului inițial, ducând la apariția de vârfuri distincte în spectrul energetic pentru fiecare captură electronică. Raportul dintre aria de sub un vârf specific, de exemplu, cel legat de captura din orbitalul K, și aria spectrului complet reprezintă fracțiunea de captură. Aceasta poate fi calculată ca rata de dezintegrare a capturării unui electron din orbitalul K normalizată la rata totală de dezintegrare, numită fracțiunea de captură de pe orbitalul K. Amplasarea vârfului pe axa energetică este energia de dezexcitare atomică după procesul de captură electronică. Dintr-o perspectivă teoretică, este posibil să se calculeze fracțiunile de captură și energia asociată cu dezexcitarea atomică. Aceste calcule sunt esențiale pentru dezvoltarea unui model precis al evenimentelor de fond rezultate din capturile electronice în experimentele cu xenon lichid.

În acest capitol, am furnizat fracțiunile de captură a electronilor și energiile de relaxare atomică pentru procesele de captură a electronilor (EC) ale izotopilor <sup>125</sup>Xe și <sup>125</sup>I, precum și pentru procesul de dublă captură electronică cu emisie de doi neutrini ( $2\nu$ ECEC) al izotopului <sup>124</sup>Xe.

Compared with previous EC formalism, we have introduced a refined energetics in the electron capture (EC) process, which avoids approximations in the determination of the emitted neutrino. To accomplish this, we conducted extensive computational calculations to characterize the structure of both the excited and ground states of the final atomic system. While computationally intensive, this effort is justified by the pronounced sensitivity of the EC decay rate to the neutrino energy. Our findings demonstrate that the refined energetics approach yields improved agreement with experimental data for the electron capture fractions. The most significant advancements are observed in the low-energy transitions, where the limitations of previous models relying on approximations of the total binding energy are revealed. More details can be found in [24].



**Figura** 3.3: O reprezentare schematică a procesului  $2\nu ECEC$  în <sup>124</sup>Xe. Panouri superioare: ambii electroni sunt capturați din orbitalul K. Panouri inferioare: ambii electroni sunt capturați din orbitalul L. Panouri stânga: doi electroni legați din orbitalul K (sus) sau L (jos) sunt capturați de nucleul inițial <sup>124</sup>Xe. Panouri dreapta: relaxarea atomică a sistemului atomic final neutru <sup>124</sup>Te, cu două goluri în orbitalul K (sus) sau L (jos). Dezexcitarea se realizează prin emisii de raze X și electroni Auger din orbitalii exteriori. Figura este reprodusă din [20].

Comparativ cu cele mai recente modele teoretice ale procesului de captură electronică, subliniem câteva diferențe. În primul rând, folosim metoda autoconsistent Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS) pentru a determina energiile de legătură ale electronilor implicate în rata de captură electronică. Această abordare diferă de modelele recente care impun convergența acestor energii către valori specifice pentru fiecare număr atomic. Prin utilizarea cadrului autoconsistent DHFS, obținem o concordanță îmbunătățită cu valorile experimentale pentru energiile de legătură. Această concordanță îmbunătățită permite o descriere mai precisă a structurii atomice, în special pentru nivelele energetice interne, care sunt cruciale în procesul de captură electronică.

O altă îmbunătățire este faptul că modelul nostru include un calcul riguros al



**Figura** 3.4: The expected signals in liquid Xenon detector from and EC process. The width of the peak is connected to the energy resolution of the detector. The aria under the K peak corresponds to the decay rate of capturing an electron from the K shell normalized to the full decay rate. The location of the peaks on the energy axis is the energy of the atomic de-excitation after the EC process.

corecțiilor de suprapunere și de schimb, precum și al efectelor de "shake-up" și "shake-off". Realizăm acest lucru luând în considerare stările finale ale electronilor pe baza configurației atomului final. În contrast, modelele anterioare calculează aceste corecții și efecte contruind funcțiile de undă ale atomului final din cele ale atomului inițial utilizând teoria perturbației de prim ordin.

În studiul procesului  $2\nu$ ECEC, am luat în considerare captura electronilor din toate păturile, extinzându-ne dincolo de presupunerea convențională de captură doar din orbitali K si L. Cu toate că aceste noi contributiile individuale din orbitali superioari sunt mici, efectul colectiv al includerii acestor canale suplimentare este semnificativ, reprezentând aproximativ 6% din rata totală de dezintegrare pentru <sup>124</sup>Xe. Includerea acestor canale de captură suplimentare duce la mai multe dezexcitări atomice, oferind posibilitatea ca viitoarele experimente care folosesc detectoare de xenon lichid să observe și să studieze aceste procese în mai mare detaliu. Energiile de relaxare atomică au for prezentate în detaliu pentru fiecare dublă captură electronică. Mai mult, am făcut o predicție teoretică pentru timpul de înjumătățire al procesului  $2\nu$ ECEC al <sup>124</sup>Xe. Rezultatul nostru se încadrează în intervalul de incertitudine de  $2\sigma$ al măsurătorii experimentale, fiind în concordanță cu alte predicții raportate în literatură. Cu toate acestea, pentru a îmbunătăti si mai mult precizia si fiabilitatea evaluării noastre, efectuăm în prezent o investigație extinsă care include evaluarea NME în cadrul Aproximatiei Fazei Aproape Aleatorii proton-neutron (pnQRPA). Această analiză cuprinzătoare urmărește să îmbunătățească precizia predicțiilor noastre si să ofere o întelegere mai robustă a procesului de dezintegrare  $2\nu$ ECEC în <sup>124</sup>Xe.

# Funcții de undă pentru particule relativiste de spin 1/2

In acest capitol, a fost prezentat cadru teoretic pentru caracterizarea atât a stărilor relativiste cu spectru continuu, cât și a stărilor relativiste legate cu spectru discret ale electronilor în atomi. Pentru tratarea stărilor legate, a fost utilizată metoda autoconsistentă Dirac-Hartree-Fock-Slater pentru a descrie cu precizie structura atomică. Pentru a evalua exactitatea și fiabilitatea metodei autoconsistente DHFS, s-a efectuat o analiză cuprinzătoare, implicând calcule extinse și comparații cu date experimentale pentru diverse observabile atomice, incluzând energii de legătură pentru orbitali individuali, energii totale de relaxare atomică și energii de legătură totale pentru atomi cu orbitali relaxați. În plus, a fost pezentat în detaliu potențialul DHFS atât pentru atomii neutri, cât și pentru ioni pozitivi, și funcțiile radiale corespunzătoare. De asemenea, a fost discutată posibilitatea de a îmbunătăți modelul DHFS prin încorporarea componentelor lipsă ale hamiltonianului atomic total, respectiv energia de interacțiune Breit și energia de polarizare a vidului.

Pentru stările legate, energia totală a electronului este mai mică decât energia sa de repaus, adică  $E_e < m_e$ , și fiecare nivel de energie discret este caracterizat de numărul cuantic relativist  $\kappa$ , numărul cuantic principal n, și energia sa de legătură  $t_{n\kappa}$ . Pentru stările discrete ale unui electron legat, energia sa totală este dată de,

$$E_{n\kappa} = m_e - |t_{n\kappa}|. \tag{4.1}$$

Funcțiile de undă asociate cu stările legate respectă relația de ortonormalizare,

$$\langle \psi_{n\kappa m} | \psi_{n'\kappa'm} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\kappa\kappa'}, \tag{4.2}$$

unde  $\langle \boldsymbol{r} | \psi_{n\kappa m} \rangle = \psi_{n\kappa m}(\boldsymbol{r})$ . Relația de ortonormalizare poate fi exprimată în mod explicit în termeni de funcții de undă radiale,

$$\int_0^\infty r^2 \left[ g_{n,\kappa}(r) g_{n',\kappa'}(r) + f_{n,\kappa}(r) f_{n',\kappa'}(r) \right] dr = \delta_{nn'} \delta_{\kappa\kappa'}. \tag{4.3}$$

Pentru a determina funcțiile de undă și energiile de legătura asociate stărilor unui electron legat în atom, se va folosi metoda autoconsistentă Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS). Termenul "metodă autoconsistentă" implică faptul că procedura este repetată iterativ până când se atinge o convergență a energiilor de legătura pentru electronii legați în atom. Punctul de plecare al metodei autoconsistente DHFS este să rezolve sistemul de ecuații cuplate,

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa + 1}{r}\right)g_{n,\kappa} - (E_{n\kappa} - V_{\text{DHFS}}(r) + m_e)f_{n,\kappa} = 0,$$
  
$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa - 1}{r}\right)f_{n,\kappa} + (E_{n\kappa} - V_{\text{DHFS}}(r) - m_e)g_{n,\kappa} = 0,$$
 (4.4)

cu un potențial Dirac-Hartree-Fock-Slater de forma,

$$V_{\rm DHFS}(r) = V_{\rm nuc}(r) + V_{\rm el}(r) + V_{\rm ex}(r), \qquad (4.5)$$

construit dintr-o componentă nucleară, o componentă electronică și o componentă de schimb. Componentele potențialului DHFS sunt prezentate în detaliu în teza de doctorat. Este important să menționăm că metoda DHFS autocoerentă prezentată în acest articol converge doar pentru atomi neutri și ioni pozitivi, cu  $Z_p$  protoni, A nucleoni și  $N_e$  electroni legați.



**Figura** 4.1: Rapoartele dintre energiile de legătură prezise și cele experimentale în cadrul RLDA (triunghiuri portocalii) și cadrul DHFS (puncte albastre). Valorile experimentale sunt preluate din [28], iar predicțiile RLDA pot fi găsite online [29]. Rezultatele sunt prezentate pentru orbitalii  $1s_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$ ,  $3s_{1/2}$  și  $3p_{1/2}$  ai atomilor neutri în starea fundamentală, cu numărul atomic Z între 1 și 92. Figura este preluată din [24].

Pentru a compara performanța metodei autoconsitente DHFS, am ales comararea cu experimentul si cu metoda relativistă bazată pe aproximatia de densitate locală (RLDA). Metoda RLDA demonstrează o excelentă concordantă cu datele experimentale pentru proprietăți precum divizarea nivelelor dotorită interacției spinorbită, potențialul de ionizare și energia atomică totală. Cu toate acestea, în ceea ce priveste paturile interioare atomice, care sunt deosebit de relevante pentru procesele de captură electronică, metoda DHFS autoconsistentă prezintă o concordanță mai bună cu energiile de legătură experimentale. Acest lucru poate fi văzut în Figura 4.1 unde sunt prezentate rapoartele dintre energiile de legătură prezise de DHFS și RLDA și valorile experimentale corespunzătoare pentru atomii neutri în starea fundamentală în intervalul de numere atomice Z = 1 - 92. Metoda DHFS oferă rapoarte mai apropiate de unitate pentru orbitali  $1s_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$  și  $2p_{3/2}$  față de RLDA. Discrepanțele observate în energia de legătură a atomilor ușori pot fi atribuite abordării de câmp mediu folosită în descrierea potențialului atomic. Valorile experimentale sunt luate din [28], în timp ce predicțiile RLDA sunt disponibile online [29]. Concluziile noastre sugerează că metoda DHFS autoconsistentă oferă un cadru fiabil și eficient pentru calculul capturii de electroni.

În Capitoul 3, am demonstrat că detectarea evenimentelor de captură electronică (EC) și de captură electronică dublă ( $2\nu$ ECEC) depinde de relaxarea atomică a sistemului final, care duce la emisia de raze X și electroni Auger. Determinarea teoretică a poziției vârfului experimental în detector se bazează pe energia de relaxare atomică. Deoarece atomul final rămâne cu găuri în straturile x (și y) și revine la configurația sa de stare fundamentală atomică, energia de relaxare atomică poate fi exprimată în funcție de energiile totale de legătură ale acestor configurații,

$$R_{\rm x} = B_{\rm gs}(Z) - B_{\rm x}(Z) \qquad \text{for EC from shell x,} R_{\rm xy} = B_{\rm gs}(Z) - B_{\rm xy}(Z) \qquad \text{for } 2\nu \text{ECEC from shells x and y.}$$
(4.6)

În cele ce urmează prezintăm principalele componente implicate în calcularea energiei totale de legare a electronilor, B, pentru o anumită configurație atomică folosind abordarea auto-consistentă DHFS (mai multe detalii in teză). Este important de menționat că energia totală de legare a electronilor este definită ca fiind negativă și, prin urmare, este inclusă în masa atomică ca o scădere,

$$\mathcal{M}(A,Z) = M(A,Z) + Zm_e - B(Z). \tag{4.7}$$

Energia totală de legare a electronilor pentru o configurație atomică în stare fundamentală poate fi obținută din evaluarea următoarelor elemente matrice,

$$B_{\rm gs}[\Psi_{\rm gs}] = \langle \Psi_{\rm gs} | \mathcal{H} | \Psi_{\rm gs} \rangle, \tag{4.8}$$

unde  $\mathcal{H}$  este hamiltonianul atomic definit ca,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{Z} \left[ \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{p}_i + (\beta - 1) \, m_e \right] + \sum_{i=1}^{Z} V_{\text{nuc}}(\boldsymbol{r}_i) + \sum_{i< j=1}^{Z} \frac{\alpha}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}, \quad (4.9)$$

Aici,  $\boldsymbol{r}_i$  și  $\boldsymbol{p}_i$  sunt respectiv operatorii de poziție și impuls ai electronuluii.

Funcția de undă a stării fundamentale atomice,  $\Psi_{gs}$ , este construită ca un determinant Slater din funcțiile de undă individuale ale electronilor,

$$\Psi_{\rm gs} = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\boldsymbol{r}_1) & \dots & \psi_1(\boldsymbol{r}_Z) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_Z(\boldsymbol{r}_1) & \dots & \psi_Z(\boldsymbol{r}_Z) \end{vmatrix}.$$
(4.10)

Este important de menționat că atunci când atomul se află într-o stare excitată după procesul de captură electronică cu un gol în orbitalul x, construcția funcției de undă atomică  $\Psi_x$  implică un set diferit de funcții de undă individuale ale electronilor, diferite de cele corespunzatoare configurației electronice de stare fundamentală.



**Figura** 4.2: Diferența relativă între valorile experimentale și teoretice ale energiei de relaxare atomică,  $R_x$ , în funcție de numărul atomic. Valorile experimentale sunt preluate din [30].

Cu toate că nu include diverse correcții precum interacția Breit, corecții de electrodinamică quantică (QED), deplasarea Auger și altele (conform discuției din [30]), metoda autoconsistentă DHFS oferă o precizie adecvată pentru energia de relaxare atomică, având în vedere precizia experimentală cu care este determinată captura electronică. Figura 4.2 ilustrează diferența relativă dintre valorile experimentale și cele calculate ale energiei de relaxare în funcție de numărul atomic, indicând că metoda autoconsistentă DHFS este potrivită pentru majoritatea nucleele exceptând nucleele ușoare cu Z < 20. Este important de menționat că estimările noastre au tendința de a supraestima valorile reale ale lui  $R_x$ , și această discrepanță crește odată cu creșterea lui Z. Cu toate acestea, pentru majoritatea nucleelor de interes, deviațiile sunt în general mai mici de 1%, și am folosit această estimare în calcularea incertitudinilor mărimilor ce depind de energia de relaxare atomică.

Un alt aspect important al acestui Capitol a fost calcularea funcțiilor de undă corespunzătoare stărilor relativiste cu spectru continuu  $(E_e > m_e)$ . Au fost prezentate si dicutate condițiile asimptotice standard și normalizarea funcțiilor de undă. În plus, am prezentat mai multe aproximații folosite în mod obișnuit pentru potențialul atomic și am examinat soluțiile analitice pentru funcțiile de undă ale stărilor relativiste cu spectru continuu, atunci când acestea există prin rezolvarea ecuației Dirac. Merită să menționăm că accentul nostru a fost în principal pe un set specific de scheme de aproximare folosite în Capitolul 2 pentru a caracteriza în mod precis interacția dintre electronul emis din  $2\nu\beta\beta$  și sistemul atomic final. Privind spre viitoarele aplicații, ne propunem să incorporăm potențiale de tip DHFS atât pentru stările legate, cât și pentru stările relativiste cu spectru continuu.

## Concluzii Generale

Această teză a cuprins trei subiecte principale de cercetare. Primul subiect se referă la explorarea impactului potențial al violării invarianței Lorentz (LIV) în sectorul neutrino asupra procesului de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$ . Cel de-al doilea subiect abordează procesul de captură electronică în nucleele atomice, concentrându-se în mod specific pe cazurile care apar în modelarea de fundal a experimentelor cu xenon lichid. În cele din urmă, al treilea subiect explorează procesele de dublă captură electronică în nucleele atomice, luând în considerare captura simultană a doi electroni împreună cu emisia a doi neutrini.

În timp ce observarea efectelor LIV rămâne dificilă, eforturi experimentale extinse au fost dedicate căutării acestora în diverse contexte, inclusiv dezintegrarea  $\beta$ , dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  și experimentele de oscilație a neutrino. Obiectivul primei părți a tezei este de a îmbunătăți înțelegerea noastră a acestei extensii a Modelului Standard prin examinarea spectrului de sumă de energii ale electronilor, a spectrelor de electroni individuali și a corelației unghiulare dintre electronii emiși în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$ . Printr-o analiză cuprinzătoare, ne propunem să oferim o mai bună înțelegere asupra posibilei manifestări a violării invarianței Lorentz în acest proces nuclear. Principalele rezultate ale tezei referitoare la efectele LIV în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  sunt următoarele:

- Am extins cadrul teoretic al dezintegrării standard  $2\nu\beta\beta$  prin încorporarea efectelor LIV în sectorul neutrino. Formalismul dezvoltat în acest studiu furnizează, pentru prima dată, expresiile necesare pentru calcularea tuturor observabilelor în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  cu efecte LIV, în special spectrul de sumă de energii ale electronilor, spectrele individuale de electroni și corelația unghiulară dintre electronii emiși.
- Am încorporat o tratare mai realistă a interacției electrostatice dintre electronii emiși și sistemul atomic final în contextul dezintegrării  $2\nu\beta\beta$  cu efecte LIV. Investigațiile experimentale anterioare ale efectelor LIV în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  se bazau adesea pe o tratare nerelativistă a interacției electronilor. Pentru a captura importanța efectelor relativiste asupra electronilor aflați în stări cu spectru continuu, am introdus în acest studiu un cadru relativist. În plus, am cuantificat incertitudinile în factorii de spațiu de fază provenite din incertitudinile experimentale ale căldurilor de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$ .
- Am furnizat predicții pentru factorii de spațiu de fază atât în scenariul standard, cât și în scenariul perturbat de LIV, acoperind toate nucleele de interes în experimentele de dezintegrare dublă beta. Acești factori joacă un rol crucial

în investigațiile experimentale menite să restrângă parametrul ce controlează efectele LIV prin analiza formei spectrului de sumă de energii ale electronilor emiși. În plus, am oferit predicția pentru poziția energetică unde am anticipat că efectul LIV va avea cel mai mare impact.

• Am propus două abordări noi pentru a restrânge parametrul ce controlează efectele LIV, abordări care nu au fost anterior explorate. Prima abordare implică o analiză a formei spectrelor individuale de electroni, oferind informații adiționale în modificările induse de LIV. A doua abordare se concentrează asupra impactului efectelor LIV asupra corelației unghiulare a electronilor emiși în procesul  $2\nu\beta\beta$ . Am investigat aceste abordări pentru toate nucleele de interes în experimentele actuale de dezintegrare  $2\nu\beta\beta$  și am furnizat datele teoretice pentru viitoarele experimente dotate cu sisteme avansate de urmărire individuală a electronilor, capabile să măsoare corelația angulară și spectrele individuale de electroni. Am acordat o atenție specială nucleelor <sup>82</sup>Se și <sup>100</sup>Mo, unde preferința pentru ipoteza SSD față de ipoteza HSD a fost observată experimental.

Rezultatele acestei teze, referitoare la efectele de violare a invarianței Lorentz în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$ , au fost publicate în trei publicații separate [17, 18, 9]. De remarcat, rezultatele noastre au fost folosite în constrângerile parametrului LIV efectuate de colaborările CUPID-1T și GERDA în cursul acestei cercetări de doctorat. În plus, am furnizat spectrele teoretice standard și perturbate de LIV pentru experimentele viitoare, inclusiv colaborările MOJORANA și LEGEND, contribuind astfel la investigațiile lor viitoare.

Partea a doua a tezei se concentrează pe procesele de captură electronică atomică, care pot fi atât măsurate, cât și pot servi drept fundal inevitabil în experimentele cu xenon lichid. Această secțiune cuprinde progrese teoretice în studiul capturii simple de electroni (EC) și a capturii duble de electroni cu emisia a doi neutrini  $(2\nu ECE)$ . În timp ce rezultatele sunt prezentate în mod specific pentru cazurile selectate relevante pentru experimentele cu xenon lichid, cadrul dezvoltat pentru procesele de captură electronică poate fi extins cu ușurință la orice alt caz. Principalele concluzii ale acestei teze referitoare la procesele de captură electronică sunt următoarele:

- Am prezentat fracțiunile de captură electronică și energiile de relaxare atomică pentru procesele de captură electronică ale <sup>125</sup>Xe și <sup>125</sup>I, precum și procesul  $2\nu$ ECEC al <sup>124</sup>Xe. Rezultatele teoretice reprezintă intrări cheie în reconstrucția fundalului în experimentele cu xenon lichid.
- Am introdus o abordare a echilibrului energetic mai rafinată pentru procesul de captură electronică, utilizând masele atomice pentru a evita aproximațiile în energiile totale de legătură ale sistemelor atomice. Această metodă nouă permite o determinare mai precisă a energiei neutrinului implicat în proces. Pentru a realiza acest lucru, am efectuat calcule extinse de stuctură atomică atât pentru stările excitate, cât și a stărea fundamentală a sistemului atomic final. Deși solicitant din punct de vedere computațional, aceast efort este justificat de sensibilitatea ratei de dezintegrare a procesului de captură electronică

față de energia neutrinului emis. Rezultatele noastre demonstrează că abordarea rafinată a energeticii duce la o concordanță îmbunătățită cu valorile experimentale pentru fracțiunile de captură electronică. Cele mai semnificative progrese sunt observate în tranzițiile de energie joasă, unde limitele modelelor anterioare care se bazau pe aproximații ale energiei totale de legătură devin evidente.

- Comparativ cu cele mai recente modele teoretice ale procesului de captură electronică, subliniem câteva diferențe. În primul rând, folosim metoda autoconsistent Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS) pentru a determina energiile de legătură ale electronilor implicate în rata de captură electronică. Această abordare diferă de modelele recente care impun convergența acestor energii către valori specifice pentru fiecare număr atomic. Prin utilizarea cadrului autoconsistent DHFS, obținem o concordanță îmbunătățită cu valorile experimentale pentru energiile de legătură. Această concordanță îmbunătățită permite o descriere mai precisă a structurii atomice, în special pentru nivelele energetice interne, care sunt cruciale în procesul de captură electronică. În al doilea rând, modelul nostru include un calcul riguros al corectiilor de suprapunere și de schimb, precum si al efectelor de "shake-up" si "shake-off". Realizăm acest lucru luând în considerare stările finale ale electronilor pe baza configurației atomului final. În contrast, modelele anterioare calculează aceste corecții și efecte contruind functiile de undă ale atomului final din cele ale atomului initial utilizând teoria perturbatiei de prim ordin.
- Am luat în considerare efectele calculelor de structură atomică în evaluarea incertitudinilor, recunoscând impactul acestora asupra determinării energiei neutrinului emis. Pentru a aborda influența calculelor de structură atomică, introducem o incertitudine asociată pentru energiile de relaxare atomice. Această includere permite o estimare mai realistă a incertitudinilor în procesele de captură electronică. Spre deosebire de modelele anterioare care se bazau pe evaluări ad-hoc ale incertitudinilor, abordarea noastră utilizează pseudo-experimente pentru a asigura o acoperire de 68%, furnizând o caracterizare statistică mai robustă a incertitudinilor implicate.
- Am introdus o abordare nouă în calculul procesului  $2\nu$ ECEC prin luarea în considerare a posibilității capturii electronilor din toate orbitele, nu doar din orbitele K și L așa cum s-a făcut în studiile anterioare. Această includere a orbitalilor superiori, deși contribuie individual cu efecte mici, în ansamblu reprezintă aproximativ 6% din rata totală de dezintegrare pentru <sup>124</sup>Xe. Mai mult, includerea acestor canale suplimentare duce la multiple dezexcitări atomice, care pot fi observate în experimente viitoare ce utilizează detectoare cu xenon lichid. Am utilizat cadrul autoconsistent DHFS pentru a prezice ansamblul complet de energii de relaxare atomică în contextul procesului  $2\nu$ ECEC al <sup>124</sup>Xe.
- Pe baza calculului factorului de spațiu de fază (PSF) cu includerea capturii din toate nivelurile și a modelului nuclear în pături pentru elementul de matrice nuclear (NME), am realizat o predicție teoretică pentru timpul de înjumătățire al procesului 2*v*ECEC al <sup>124</sup>Xe. Rezultatul nostru se încadrează în intervalul

de incertitudine de  $2\sigma$  al măsurătorii experimentale, fiind în concordanță cu alte predicții raportate în literatură. Cu toate acestea, pentru a rafina în continuare evaluarea timpului de înjumătățire, efectuăm în prezent o investigație în detaliu care implică evaluarea NME în cadrul Aproximației Fazei Aproape Aleatorii proton-neutron (pnQRPA). Această analiză cuprinzătoare urmărește să îmbunătățească precizia predicțiilor noastre și să ofere o înțelegere mai robustă a procesului de dezintegrare  $2\nu$ ECEC în <sup>124</sup>Xe.

În concluzie, această teză ar putea reprezenta un pas semnificativ în înțelegerea efectelor de violare a invarianței Lorentz în dezintegrarea  $2\nu\beta\beta$  și în procesele de captură electronică. Abordările propuse, calculalele îmbunătățite și formalismele teoretice oferă o bază solidă pentru studiile experimentale viitoare și aprofundează înțelegerea noastră asupra forțelor fundamentale care guvernează universul nostru. Realizările prezentate aici deschid noi căi de cercetare și pregătesc terenul pentru progrese ulterioare în domeniul fizicii particulelor și fizicii nucleare.

## Listă de publicții științifice și diseminare

#### 6.1 Publicții în perioada 2019-2023

#### 6.1.1 Publicații pe tematica tezei

- Ştefan Ghinescu, Ovidiu Niţescu and Sabin Stoica, Investigation of Lorentz symmetry violation in double beta decay, AIP Conference Proceedings, 2165, 020025 (2019) https://doi.org/10.1063/1.5130986
- 2. Jameel-Un Nabi, Mavra Ishfaq, **Ovidiu Niţescu**, Mihail Mirea and Sabin Stoica,  $\beta^-$ -decay half-lives of even-even nuclei using the recently introduced phase space recipe, Universe **6** (1), 5, (2019) https://doi.org/10.3390/universe6010005 AIS=0.585 IF=1.752
- 3. Ovidiu Niţescu, Ştefan Ghinescu and Sabin Stoica, Lorentz violation effects in  $2\nu\beta\beta$  decay, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 47 (5), 055112, (2020) https://doi.org/10.1088/1361-6471/ab7e8c AIS=1.105 IF=3.054
- 4. Ovidiu Niţescu, Ştefan Ghinescu, Mihail Mirea and Sabin Stoica, Probing Lorentz violation in 2νββ using single electron spectra and angular correlations, Physical Review D 103 (3), L031701, (2021) https://doi.org/10.1103/PhysRevD.103. L031701 AIS=1.108 IF=5.407
- 5. Ştefan Ghinescu, Ovidiu Niţescu and Sabin Stoica, Investigation of the Lorentz invariance violation in two-neutrino double-beta decay, Physical Review D 105 (5), 055032, (2022) https://doi.org/10.1103/PhysRevD.105.055032 AIS=1.081 IF=5.000
- 6. Vasile Sevestrean, Ovidiu Niţescu<sup>\*</sup>, Ştefan Ghinescu and Sabin Stoica, Self-consistent calculations for atomic electron capture, Physical Review A 108, 012810 (2023) https://doi.org/10.1103/PhysRevA.108.012810 AIS=0.822 IF=2.900

#### 6.1.2 Alte publicații

 Ovidiu Niţescu, Rastislav Dvornický, Sabin Stoica and Fedor Šimkovic, Angular distributions of emitted electrons in the two-neutrino ββ decay, Universe 7 (5), 147, (2021) https://doi.org/10.3390/universe7050147 AIS=0.639 IF=2.813

- Ovidiu Niţescu Accurate approximants of inverse Brillouin functions, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 547, 168895, (2022) https://doi.org/10. 1016/j.jmmm.2021.168895 AIS=0.398 IF=2.700
- 3. Ovidiu Niţescu, Sabin Stoica and Fedor Šimkovic, Exchange correction for allowed β-decay, Physical Review C, 107, 025501, (2023) https://doi.org/10.1103/ PhysRevC.107.025501 AIS=0.683 IF=3.100

### 6.2 Conferințe

#### 6.2.1 Conferințe internaționale

- 1. **Ovidiu Niţescu**, Lorentz Violation Effects on  $2\nu\beta\beta$  Decay Electron Spectra, VIII International Pontecorvo Neutrino Physics School, Sinaia, 1 10 September 2019.
- 2. **Ovidiu Niţescu**, New Physics scenarios within Two-Neutrino Double-Beta Decay, EuCAPT Astroneutrino Theory Workshop, Praga, 20 September 1 October 2021.
- 3. **Ovidiu Niţescu**, Angular Distributions of Emitted Electrons in the Two-Neutrino Double-Beta Decay, Matrix Elements for the Double beta decay EXperiments 2022 (MEDEX'22), Praga, 13–17 June 2022.

#### 6.2.2 Conferințe naționale

- 1. **Ovidiu Niţescu**, Toward the precise description of  $\beta$  decay and  $2\nu\beta\beta$  decay, World Quantum Day 2022, Măgurele, 12–13 April 2022.
- 2. **Ovidiu Niţescu**, Detailed investigation of electron capture processes for new physics searches in liquid Xenon experiments, World Quantum Day 2023, Măgurele, 25–27 April 2023.

## Bibliografie

- [1] F. F. Deppisch, L. Graf, and F. Šimkovic, Phys. Rev. Lett. **125**, 171801 (2020).
- [2] F. F. Deppisch, L. Graf, W. Rodejohann, and X.-J. Xu, Phys. Rev. D 102, 051701 (2020).
- [3] P. D. Bolton, F. F. Deppisch, L. Gráf, and F. Simkovic, Phys. Rev. D 103, 055019 (2021).
- [4] A. Barabash, A. Dolgov, R. Dvornický, F. Šimkovic, and A. Smirnov, Nuclear Physics B 783, 90 (2007).
- [5] J. B. Albert *et al.* (EXO-200 Collaboration), Phys. Rev. D **93**, 072001 (2016).
- [6] O. Azzolini et al. (CUPID-0 Collaboration), Phys. Rev. D 100, 092002 (2019).
- [7] O. Niţescu, S. Ghinescu, and S. Stoica, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 47, 055112 (2020).
- [8] O. V. Niţescu, S. A. Ghinescu, M. Mirea, and S. Stoica, Phys. Rev. D 103, L031701 (2021).
- [9] S. A. Ghinescu, O. Niţescu, and S. Stoica, Phys. Rev. D 105, 055032 (2022).
- [10] R. Arnold *et al.*, Nuclear Physics A **765**, 483 (2006).
- [11] R. Arnold *et al.*, The European Physical Journal C **79**, 440 (2019).
- [12] R. Arnold *et al.* (NEMO-3 Collaboration), Phys. Rev. Lett. **119**, 041801 (2017).
- [13] V. A. Kostelecký and N. Russell, Rev. Mod. Phys. 83, 11 (2011).
- [14] J. S. Díaz, Phys. Rev. D 89, 036002 (2014).
- [15] V. A. Kostelecký and J. D. Tasson, Phys. Rev. Lett. **102**, 010402 (2009).
- [16] W. Haxton and G. Stephenson, Progress in Particle and Nuclear Physics 12, 409 (1984).
- [17] O. Niţescu, S. Ghinescu, and S. Stoica, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 47, 055112 (2020).
- [18] O. V. Niţescu, S. A. Ghinescu, M. Mirea, and S. Stoica, Phys. Rev. D 103, L031701 (2021).

- [19] E. Aprile et al. (XENON Collaboration), Phys. Rev. C 106, 024328 (2022).
- [20] G. Martínez-Lema *et al.* (The NEXT collaboration), Journal of High Energy Physics **2021**, 1029 (2021).
- [21] M. Kaur, A. adn Loidl and M. Rodrigues, Journal of Low Temperature Physics 209, 10.1007/s10909-022-02851-4 (2022).
- [22] M. Doi and T. Kotani, Progress of Theoretical Physics 87, 1207 (1992).
- [23] J. Kotila and F. Iachello, Phys. Rev. C 87, 024313 (2013).
- [24] V. A. Sevestrean, O. Niţescu, S. Ghinescu, and S. Stoica, Self-consistent calculations for atomic electron capture (2023), arXiv:2304.10373 [nucl-th].
- [25] J. Desclaux, Atomic Data and Nuclear Data Tables 12, 311 (1973).
- [26] S. Kotochigova, Z. H. Levine, E. L. Shirley, M. D. Stiles, and C. W. Clark, Phys. Rev. A 55, 191 (1997).
- [27] C. Lu, T. Carlson, F. Malik, T. Tucker, and C. Nestor, Atomic Data and Nuclear Data Tables 3, 1 (1971).
- [28] W. Lotz, J. Opt. Soc. Am. **60**, 206 (1970).
- [29] S. Kotochigova, Z. H. Levine, E. L. Shirley, M. D. Stiles, and C. W. Clark, https://math.nist.gov/DFTdata/ (1996).
- [30] R. D. Deslattes, E. G. Kessler, P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth, and J. Anton, Rev. Mod. Phys. 75, 35 (2003).