

01

Интерференция между $E1$ - и $M1$ -амплитудами перехода из состояния H в C молекулы ThO

© А.Н. Петров^{1,2}, Л.В. Скрипников^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константина
Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“,
188300, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: alexsandernp@gmail.com, leonidos239@gmail.com

Поступила в редакцию 28.11.2018 г.

В окончательной редакции 28.11.2018 г.

Принята к публикации 04.12.2018 г.

Выполнены расчеты систематической ошибки для эксперимента по поиску электрического дипольного момента электрона из-за штарковской интерференции между $E1$ - и $M1$ -амплитудами перехода из состояния $H^3\Delta_1$ в $C^1\Pi$ молекулы ThO. Расчеты показывают, что ошибка примерно на три порядка меньше, чем текущее ограничение на электрический дипольный момент электрона.

DOI: 10.21883/OS.2019.04.47508.346-18

Текущее ограничение на электрический дипольный момент электрона (e ЭДМ) (эксперимент АСМЕ II), $|d_e| < 1.1 \cdot 10^{-29}$ есм (вероятность 90%), было установлено путем измерения прецессии спина молекул монооксида тория (ThO) в метастабильном электронном состоянии $H^3\Delta_1$ [1]. В предыдущем эксперименте (АСМЕ I) с использованием молекулы ThO было получено ограничение $|d_e| < 9 \cdot 10^{-29}$ есм (вероятность 90%). В обоих экспериментах измерения проводились на основном вращательном уровне, обладающем близко расположенными уровнями Ω -дублета противоположной четности. Ранее было показано, что из-за существования близко расположенных уровней Ω -дублетов эксперимент на ThO очень устойчив к целому ряду систематических эффектов [2–6]. В АСМЕ I приготовление состояния и измерение угла прецессии спина, ϕ , осуществлялся путем индуцирования перехода $H^3\Delta_1 \rightarrow C^1\Pi$ линейно поляризованным лазером [7], тогда как в АСМЕ II используется переход $H^3\Delta_1 \rightarrow I^1\Pi$. В обоих экспериментах использовались переходы в основные вращательные состояния $C^1\Pi$ (АСМЕ I) или $I^1\Pi$ (АСМЕ II), которые аналогично $H^3\Delta_1$ имеют структуру Ω -дублетов. Анализ систематических ошибок является важной частью экспериментов по поиску e ЭДМ. Ранее было показано, что одна из систематических ошибок в эксперименте АСМЕ I [7] обусловлена штарковской интерференцией между $E1$ - и $M1$ -амплитудами перехода из $H^3\Delta_1$ в $C^1\Pi$, индуцированного лазерами, используемыми для подготовки начального состояния молекулы и считывания сигнала e ЭДМ [8]. Аналогичная систематическая ошибка, связанная с переходом из $H^3\Delta_1$ в $I^1\Pi$, ожидается для эксперимента АСМЕ II.

Измерение прецессии спина повторяется при разных условиях, которые могут быть охарактеризованы бинарными параметрами, переключаемыми с $+1$ на -1 . Три основных двоичных параметра $\tilde{\mathcal{N}}, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{B}}$: $\tilde{\mathcal{N}} = +1(-1)$ означает, что измерение было выполнено на нижнем (верхнем) уровне Ω -дублета $H^3\Delta_1$, $\tilde{\mathcal{E}} = \text{sgn}(\tilde{z} \cdot \mathbf{E})$ и $\tilde{\mathcal{B}} = \text{sgn}(\tilde{z} \cdot \mathbf{B})$ определяют ориентацию внешних статических электрического и магнитного полей соответственно вдоль лабораторной оси z . Измеренный угол прецессии ϕ может быть представлен [8] как

$$\begin{aligned} \phi(\tilde{\mathcal{N}}, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{B}}) = & \phi^{nr} + \tilde{\mathcal{B}}\tilde{\mathcal{E}}\phi^{\mathcal{B}\mathcal{E}} + \tilde{\mathcal{E}}\phi^{\mathcal{E}} + \tilde{\mathcal{E}}\tilde{\mathcal{B}}\phi^{\mathcal{E}\mathcal{B}} \\ & + \tilde{\mathcal{N}}\phi^{\mathcal{N}} + \tilde{\mathcal{N}}\tilde{\mathcal{B}}\phi^{\mathcal{N}\mathcal{B}} + \tilde{\mathcal{N}}\tilde{\mathcal{E}}\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}} + \tilde{\mathcal{N}}\tilde{\mathcal{E}}\tilde{\mathcal{B}}\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}\mathcal{B}}, \quad (1) \end{aligned}$$

где $\phi^{S_1 \cdot S_2 \dots}$ означает компоненту, которая меняет знак при переключениях S_1, S_2, \dots ; ϕ^{nr} означает компоненту, которая остается неизменной при любых переключениях. Сигнал e ЭДМ извлекается из $\tilde{\mathcal{N}}\tilde{\mathcal{E}}$ -компоненты измеряемой фазы, $\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}} = d_e E_{\text{eff}} \tau$ [7], где $E_{\text{eff}} = 79.9$ GV/cm [9–11] (см. также [12]) — эффективное электрическое поле, действующее на e ЭДМ в молекуле, τ — время взаимодействия. В случае идеального эксперимента только взаимодействие с e ЭДМ $d_e E_{\text{eff}}$ дает вклад в $\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}}$. Однако, как сказано выше, штарковская интерференцией между $E1$ - и $M1$ -амплитудами приводит к дополнительному вкладу в $\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}}$ и приводит к систематическим ошибкам в измерении e ЭДМ. Цель настоящей работы — рассмотреть этот эффект для эксперимента АСМЕ I. Теория может быть применена и к эксперименту АСМЕ II, но требует более сложного расчета электронной структуры и будет выполнена в последующей работе.

1. Расчеты электрических и магнитных моментов перехода

Для выполнения расчётов систематических ошибок необходимы значения следующих матричных элементов:

$$D_+^{XC} = \langle C^1\Pi_1 | \hat{D}_+ | X^1\Sigma_0 \rangle, \quad (2)$$

$$G_+^{XC} = \langle C^1\Pi_1 | \hat{L}_+^e + g_e \hat{S}_+^e | X^1\Sigma_0 \rangle, \quad (3)$$

$$J_+^{XC} = \langle C^1\Pi_1 | \hat{J}_+^e | X^1\Sigma_0 \rangle, \quad (4)$$

$$D_{||}^{HC} = \langle C^1\Pi_1 | \hat{D}_z | H^3\Delta_1 \rangle, \quad (5)$$

$$G_{||}^{HC} = \langle C^1\Pi_1 | \hat{L}_z + g_e \hat{S}_z | H^3\Delta_1 \rangle, \quad (6)$$

где $g_e = 2.0023193$ — g -фактор свободного электрона, \hat{D} — оператор дипольного момента, \hat{J}^e , \hat{L}^e , \hat{S}^e — операторы полного (электронного), орбитального и спин-ового моментов; $\hat{D}_+ = \hat{D}_x + i\hat{D}_y$, аналогично для других операторов.

Для расчета этих матричных элементов были использованы два базисных набора. Первый набор, LBas, включает гауссовы функции 27s, 25p, 23d, 6f, 3g, 2h и 1i на Th (базисные функции f, g-, h- и i-типов брались в контрактированном виде) и может быть записан в краткой записи как (27s, 25p, 23d, 15f, 10g, 10h, 5i)/[27s, 25p, 23d, 6f, 3g, 2h, 1i]. Набор LBas для кислорода соответствует базисному набору aug-cc-pVTZ, (11s, 6p, 3d, 2f)/[5s, 4p, 3d, 2f], [13,14]. Также мы использовали базис MBas, который для тория может быть записан в виде (25s, 22p, 21d, 14f, 10g)/[25s, 22p, 21d, 5f, 3g], а для кислорода соответствует базису aug-cc-pVTZ [13,14]. Для построения контрактированных функций $f - i$ была использована техника построения натуральных базисных наборов, разработанная в [15]. Электроны $1s..4f$ Th были исключены из явного рассмотрения при помощи метода обобщенного релятивистского потенциала остова в полулокальной формулировке [16,17].

Переходные матричные элементы были рассчитаны в рамках метода линейного отклика для связанных кластеров с однократными и двукратными кластерными амплитудами, LR-CCSD [18]. В основной корреляционный расчет были включены 20 электронов ($6s6p6d7s$ от Th и $1s2s2p$ от O). Этот расчет был выполнен в рамках базиса LBas. Для расчета корреляционного вклада от внешних остовных (ВО) электронов $5s5p5d$ Th был использован базисный набор MBas. Во всех расчетах межъядерное расстояние составляло 3.5107 а.у., что соответствует экспериментальному равновесному расстоянию молекулы ThO в состоянии $H^3\Delta_1$. Расчеты были выполнены с использованием пакетов DIRAC 15 [19] и MRCC [20]. Для расчета матричных элементов (2)–(6) был использован программный код, разработанный в [10,21,22].

2. Расчеты систематических ошибок

Базисный набор, описывающий волновые функции состояний $H^3\Delta_1$ и $C^1\Pi$ может быть представлен как произведение электронных и вращательных волновых функций $\Psi_{H(C)\Omega} \theta_{M,\Omega}^J(\alpha, \beta)$. Здесь $\Psi_{H(C)\Omega}$ — электронная волновая функция состояния $H^3\Delta_1$ или $C^1\Pi$, $\theta_{M,\Omega}^J(\alpha, \beta) = \sqrt{(2J+1)/4\pi} D_{M,\Omega}^J(\alpha, \beta, \gamma=0)$ — вращательная волновая функция, α, β, γ — углы Эйлера, M ($\Omega = \pm 1$) — проекция момента количества движения молекулы \mathbf{J} на лабораторную \hat{z} (межъядерную \hat{n}) ось. Для краткости будем обозначать базис как $|H(C), J, M, \Omega\rangle$. В данной статье будут рассматриваться состояния $|H, J=1, \Omega, M = \pm 1\rangle$ и $|C, J=1, \Omega, M=0\rangle$, представляющие интерес для эксперимента по поиску $e\Delta$ ДМ.

В отсутствие внешнего электрического поля каждый вращательный уровень разбивается на два подуровня, называемых Ω -дублетами. Один из них четный ($\tilde{\mathcal{P}} = 1$), а другой нечетный ($\tilde{\mathcal{P}} = -1$) по отношению к изменению знака электронных и ядерных координат. Состояния $\tilde{\mathcal{P}} = (-1)^J$, обозначаемые как e , и состояния $\tilde{\mathcal{P}} = (-1)^{J+1}$, обозначаемые как f , представляют из себя линейную комбинацию состояний с противоположными знаками Ω :

$$\begin{aligned} |H(C)J, \tilde{\mathcal{P}}, M\rangle \\ = \frac{|H(C), J, 1, M\rangle + (-1)^J \tilde{\mathcal{P}} |H(C), J, -1, M\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Экспериментальные значения Ω -удвоения, $\Delta(J) = E(|e, J, M\rangle) - E(|f, J, M\rangle)$ равняются $\Delta_H = +0.181 J(J+1)$ МГц для $|H\rangle$ - и $\Delta_C = -25 J(J+1)$ МГц для $|C\rangle$ -состояний соответственно [7].

Внешнее электрическое поле $\mathbf{E} = \tilde{\mathcal{E}} \hat{z}$ не связывает $|C, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = -1, M=0\rangle$ - и $|C, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = +1, M=0\rangle$ -состояния, в то время как состояния $|H, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = -1, M = \pm 1\rangle$ и $|H, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = +1, M = \pm 1\rangle$ смешиваются. Пренебрегая взаимодействием между различными вращательными и электронными состояниями:

$$\begin{aligned} |H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, M\rangle = k(-\tilde{\mathcal{N}}) |H, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = -1, M = \pm 1\rangle \\ - k(+\tilde{\mathcal{N}}) \tilde{\mathcal{E}} \tilde{\mathcal{N}} M |H, J=1, \tilde{\mathcal{P}} = +1, M = \pm 1\rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$k(\pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \frac{\Delta_H(J=1)}{\sqrt{\Delta_H(J=1)^2 + (d_H \tilde{\mathcal{E}})^2}}}, \quad (9)$$

$d_H = -1.612$ а.у. — дипольный момент состояния H [23,24], $\tilde{\mathcal{E}} > 0$ — величина напряженности электрического поля, $\tilde{\mathcal{E}}$ определяет направление электрического поля.

Темное состояние (которое приготавливающий лазер не связывает с состоянием C), $|H_D, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}\rangle$, есть

Таблица 1. Рассчитанные электрические и магнитные дипольные моменты (а. у.) переходов для молекулы ThO

	D_+^{XC}	G_+^{XC}	J_+^{XC}	$D_{ }^{HC}$	$D_{ }^{HC}$
20e	-0.596	0.217	0.211	0.018	-0.069
BO	0.071	-0.013	-0.015	-0.002	-0.002
Сумма	-0.525	0.204	0.197	0.016	-0.071

начальное состояние для эксперимента по измерению прецессии спина. Предположим, что приготавливающий лазер обладает идеальной линейной поляризацией: $\hat{\epsilon}_p = \hat{x}$. Тогда, пренебрегая малым вкладом от магнитной амплитуды, начальное (темное) состояние при идеальных условиях есть

$$|H_D, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, +1\rangle + |H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, -1\rangle \right). \quad (10)$$

Затем молекулы попадают в область с ненулевыми магнитным и электрическим полями, взаимодействие с которыми приводит к относительному сдвигу подуровней Зеемана $|H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, \pm 1\rangle$ и, следовательно, прецессии спина. Конечное состояние молекулы есть

$$\Psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\phi} |H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, +1\rangle + e^{i\phi} |H, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathcal{N}}, -1\rangle \right). \quad (11)$$

Далее ϕ измеряется в области детектирования посредством индуцирования того же перехода $H^3\Delta_1 \rightarrow C^1\Pi$ линейно поляризованными лазерами с поляризациями $\hat{\epsilon}_x, \hat{\epsilon}_y$ определяемыми азимутальными углами $\theta_x = 45^\circ, \theta_y = 135^\circ$ (азимутальный угол для приготавливающего лазера $\theta_p = 0^\circ$). Тогда, пренебрегая маленьким вкладом от магнитной амплитуды, для угла $\phi \ll 1$ и лазеров с

идеально линейной поляризацией можно получить [7]

$$\mathcal{A}(\Psi(\phi)) = \frac{F_X - F_Y}{F_X + F_Y} = 2\tilde{P}\phi, \quad (12)$$

где \mathcal{A} — асимметрия, $F_{X,Y}$ — детектируемая в эксперименте флуоресценция после применения считывающих лазеров. Чувствительная к e ЭДМ компонента $\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}}$ может быть рассчитана как

$$\phi^{\mathcal{N}\mathcal{E}} = \frac{1}{8} \sum_{\tilde{\mathcal{B}}, \tilde{\mathcal{N}}, \tilde{\mathcal{E}}} \mathcal{N}\mathcal{E}\phi \left(\tilde{\mathcal{N}}, \tilde{\mathcal{B}}, \tilde{\mathcal{E}} \right). \quad (13)$$

Аналогично могут быть рассчитаны другие компоненты из (1).

Единичный вектор, параллельный волновому вектору \hat{k} , и поляризация могут быть параметризованы как

$$\hat{k} = \cos \vartheta \sin \vartheta \hat{x} + \sin \vartheta \sin \vartheta \hat{y} + \cos \vartheta \hat{z}, \quad (14)$$

$$\hat{\epsilon} = \epsilon_x \hat{x} + \epsilon_y \hat{y} + \epsilon_z \hat{z}, \quad (15)$$

где

$$\epsilon_x = \cos \theta (\cos \Theta + \sin \Theta) + i \sin \theta (\sin \Theta - \cos \Theta), \quad (16)$$

$$\epsilon_y = \sin \theta (\cos \Theta + \sin \Theta) + i \cos \theta (\cos \Theta - \sin \Theta), \quad (17)$$

$$\epsilon_z = \tan \vartheta (\cos(\theta - \varphi) (\cos \Theta + \sin \Theta) + i \sin(\theta - \varphi) (\sin \Theta - \cos \Theta)), \quad (18)$$

Θ — угол эллиптичности. Для идеального эксперимента $\Theta_{p,X,Y} = 45^\circ, \vartheta_{p,X,Y} = 0^\circ, \theta_p = 0^\circ, \theta_x = 45^\circ, \theta_y = 135^\circ$. Индекс $i = p, X, Y$ относится к приготавливающему и считывающим X, Y лазерам. Отклонения $\Theta, \vartheta, \theta$ от их идеальных значений вместе со штарковской интерференцией между амплитудами $E1$ и $M1$ приводит к систематической ошибке в эксперименте по поиску

Таблица 2. Рассчитанные систематические ошибки $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}\mathcal{E}}, \tilde{\phi}^{\mathcal{N}\mathcal{B}}, \tilde{\phi}^{\mathcal{B}}$ (в 10^{-8} rad) как функции $\vartheta, \varphi, \theta, \Theta$ (в градусах) для приготавливающего и считывающих лазеров, численные расчеты учитывают взаимодействие между различными вращательными и электронными уровнями

ϑ_p	φ_p	θ_p	Θ_p	ϑ_x	φ_x	θ_x	Θ_x	ϑ_y	φ_y	θ_y	Θ_y	(19) $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}\mathcal{E}}$	Численные расчеты		
													$\tilde{\phi}^{\mathcal{N}\mathcal{E}}$	$\tilde{\phi}^{\mathcal{N}\mathcal{B}}$	$\tilde{\phi}^{\mathcal{B}}$
0.3	20	1	46	0.2	20	46	44	0	0	136	45	0.3426	0.3423	3.621	0.4961
0.3	20	1	46	0.2	20	46	44	0	0	136	47	-0.1347	-0.1353	10.0857	1.488
0.3	20	1	46	0.2	20	46	44	0	0	136	44	0.8199	0.8162	-3.616	-0.4956
0.3	20	1	46	0.2	20	46	44	0.3	0	136	44	0.4596	0.4578	-3.616	-0.4956
0.3	20	1	46	0.2	20	44	44	0.3	0	136	44	0.4765	0.4496	-3.611	-0.4949
0.3	20	1	46	0.2	20	44	44	0.3	0	134	44	0.4224	0.4048	-3.598	-0.4931
0.3	20	1	46	0.2	20	44	44	0.3	0	134	46	-0.2530	-0.2978	7.207	0.9877
0.3	20	1	46	0.2	20	44	44	0.3	10	134	46	-0.0933	-0.1477	7.207	0.9877
0.3	20	1	46	0.2	20	44	44	0.3	-10	134	46	-0.3675	-0.4029	7.207	0.9877
0.3	20	1	46	0.3	20	44	44	0.3	-10	134	46	-0.3835	-0.4322	7.207	0.9877

e ЭДМ согласно [8]

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}} = & \frac{a_{M1}}{4} [\vartheta_p^2 (-2S_p c_p + \tilde{P} s_p (S_X - S_Y)) \\ & + \vartheta_X^2 (S_X c_X + \tilde{P} S_p s_X) + \vartheta_Y^2 (S_Y c_Y - \tilde{P} S_p s_Y)], \quad (19) \end{aligned}$$

где, a_{M1} есть отношение амплитуд $M1$ и $E1$, $S_i = -2d\Theta_i$, $d\Theta = \Theta - \pi/4$, $c_i = \cos(\theta_i - \varphi_i)$, $s_i = \sin(\theta_i - \varphi_i)$. Уравнение (19) предполагает, что основные вращательные состояния $H^3\Delta_1$ и $C^1\Pi$ могут быть записаны согласно (7), (8). Однако учет взаимодействий с другими электронными и вращательными состояниями, магнитным полем может изменить уравнения (7), (8), (19) и привести к возникновению систематических ошибок для других компонент ϕ . Чтобы учесть возмущения описанные выше, мы провели соответствующие численные расчеты. Следуя схеме расчета работ [3,5,25,26], волновые функции состояний H и C во внешних статических электрических и магнитных полях получают численной диагонализацией молекулярного гамильтониана на электронно-вращательных базисных функциях. Детальное описание гамильтониана дано в работе [3]. После расчета волновых функций систематическая ошибка $\tilde{\phi}$ для угла прецессии ϕ была рассчитана как $\mathcal{A}(\Psi(\phi = 0)) = 2P\tilde{\phi}$.

3. Результаты и обсуждение

В табл. 1 представлены результаты расчетов матричных элементов (2)–(6). Из таблицы видно, что корреляционный вклад электронов $5s5p5d$ не является пренебрежимым и должен учитываться. Ранее в работе [10] было показано, что учет корреляции этих электронов важен также и для других свойств, таких как константа сверхтонкого расщепления и эффективное электрическое поле.

Сравнение численного расчета и уравнения (19) для $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}}$ дано в табл. 2. Для расчета использовались типичные значения для $\Theta_{p,x,y}$, $\vartheta_{p,x,y}$, $\theta_{p,x,y}$ [8], немного отличающиеся от идеальных значений. Расчеты показывают, что учет возмущений, описанных выше, не приводит к большим изменениям в $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}}$. Численные расчеты согласуются с уравнением (19) на уровне 15% или меньше. Систематическая ошибка для e ЭДМ из-за штарковской интерференцией между амплитудами $E1$ и $M1$ есть $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}} \sim 10^{-8}$ rad. Заметим, что текущие ограничения в терминах $\phi^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}}$ примерно составляют $\phi^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}} < 10^{-5}$ rad для АСМЕ I и $\phi^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}} < 10^{-6}$ rad для АСМЕ II. Систематическая ошибка может быть далее подавлена примерно на порядок путем вращения поляризации считывающих лазеров: $\theta_{x,y} \rightarrow \theta_{x,y} + 90^\circ$, и глобального вращения поляризации как приготавливающего, так и считывающего лазеров: $\theta_{p,x,y} \rightarrow \theta_{p,x,y} + 90^\circ$ [8]. Окончательная систематическая ошибка $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}} \sim 10^{-9}$ rad существенно меньше чем текущее ограничение для $\phi^{\mathcal{N}^{\mathcal{E}}}$. Аналогичная систематическая ошибка ожидается и для эксперимента

АСМЕ II, который использует переход из $H^3\Delta_1$ в $I^1\Pi$ вместо перехода из $H^3\Delta_1$ в $C^1\Pi$.

Расчеты показывают, что $\tilde{\phi}^{\mathcal{N}^{\mathcal{B}}} \sim 10^{-7}$ rad и $\tilde{\phi}^{\mathcal{B}} \sim 10^{-8}$ rad, что формально является источником систематических ошибок при измерении g -фактора и разности между g -факторами уровней Ω -дублетов [3], хотя на несколько порядков меньше измеренных $\phi^{\mathcal{N}^{\mathcal{B}}}$ и $\phi^{\mathcal{B}}$.

4. Заключение

Рассчитана систематическая ошибка для эксперимента по поиску e ЭДМ из-за штарковской интерференцией между амплитудами $E1$ и $M1$. Расчеты показывают, что ошибка примерно на три порядка меньше, чем текущее ограничение на e ЭДМ, полученное в эксперименте АСМЕ II [1].

Расчеты электронной структуры выполнены в ЦОД ПИК НИЦ „Курчатовский институт“ — ПИЯФ. Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 18-12-00227.

Список литературы

- [1] Andreev V., Ang D.G., DeMille D., Doyle J.M., Gabrielse G., Haefner J., Hutzler N.R., Lasner Z., Meisenhelder C., O'Leary B.R., Panda C.D., West A.D., West E.P., Wu X. // Nature. 2018. V. 562. P. 355.
- [2] DeMille D., Bay F., Bickman S., Kowall D., Hunter L., Krause D., Maxwell S., Ulmer K. // AIP Conference Proceedings. 2001. V. 596. P. 72.
- [3] Petrov A.N., Skripnikov L.V., Titov A.V., Hutzler N.R., Hess P.W., O'Leary B.R., Spaun B., DeMille D., Gabrielse G., Doyle J.M. // Phys. Rev. A. 2014. V. 89. P. 062505.
- [4] Vutha Amar, DeMille David. Geometric phases without geometry. Режим доступа: <http://arxiv.org/abs/0907.5116>
- [5] Petrov A.N. // Phys. Rev. A. 2015. V. 91. P. 062509.
- [6] Petrov A.N. // Phys. Rev. A. 2018. V. 97. P. 052504.
- [7] Jacob Baron, Wesley C. Campbell, D. Demille, John M. Doyle, Gerald Gabrielse, Yulia V. Gurevich, Paul W. Hess, Nicholas R. Hutzler, Emil Kirilov, Ivan Kozyryev, Brendon R. O'Leary, Cristian D. Panda, M.F. Parsons, Elizabeth S. Petrik, Ben Spaun, Amar C. Vutha, Adam D. West // Science. 2014. V. 343. P. 269.
- [8] J. Baron, W.C. Campbell, D. Demille, J.M. Doyle, G. Gabrielse, Y.V. Gurevich, P.W. Hess, N.R. Hutzler, E. Kirilov, I. Kozyryev, B.R. O'Leary, C.D. Panda, M.F. Parsons, B. Spaun, A.C. Vutha, A.D. West, E.P. West // New Journal of Physics. 2017. V. 19. P. 073029.
- [9] Skripnikov L.V., Petrov A.N., Titov A.V. // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. P. 221103.
- [10] Skripnikov L.V., Titov A.V. // J. Chem. Phys. 2015. V. 142. P. 024301.
- [11] Skripnikov L.V. // J. Chem. Phys. 2016. V. 145, N 21. P. 214301.
- [12] Denis Malika, Fleig Timo. // J. Chem. Phys. 2016. V. 145. P. 214307.

- [13] *Dunning, Jr T.H.* // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 1007.
- [14] *Kendall R. A., Dunning Jr. T.H., Harrison R.J.* // J. Chem. Phys. 1992. V. 96. P. 6796–6806.
- [15] *Skripnikov L.V., Mosyagin N.S., Titov A.V.* // Chem. Phys. Lett. 2013. V. 555. P. 79.
- [16] *Mosyagin N.S., Zaitsevskii A.V., Titov A.V.* // Review of Atomic and Molecular Physics. 2010. V. 1. P. 63.
- [17] *Nikolai S. Mosyagin, Andrei V. Zaitsevskii, Leonid V. Skripnikov, Anatoly V. Titov* // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. P. 301.
- [18] *K'allay Mih'aly, Gauss Jürgen* // J. Chem. Phys. 2004. V. 121. P. 9257.
- [19] *R. Bast, T. Saue, L. Visscher, and H.J. Aa. Jensen* with contributions from V. Bakken, K.G. Dyll, S. Dubillard, U. Ekstroem, E. Eliav, T. Enevoldsen, E. Fasshauer, T. Fleig, O. Fossgaard, A.S.P. Gomes, T. Helgaker, J. Henriksson, M. Ilias, Ch.R. Jacob, S. Knecht, S. Komorovsky, O. Kullie, J.K. Laerdahl, C.V. Larsen, Y.S. Lee, H.S. Nataraj, M.K. Nayak, P. Norman, G. Olejniczak, J. Olsen, Y.C. Park, J.K. Pedersen, M. Pernpointner, R.Di Remigio, K. Ruud, P. Salek, B. Schimmelpfennig, J. Sikkema, A.J. Thorvaldsen, J. Thyssen, J. van Stralen, S. Villaume, O. Visser, T. Winther, and S. Yamamoto. DIRAC, a relativistic ab initio electronic structure program, Release DIRAC15 Режим доступа: <http://www.diracprogram.org>
- [20] *M. K'allay, Z. Rolik, I. Ladj'anszki, L. Szegedy, B. Lad'oczki, J. Csontos, and B. Kornis.* MRCC, a quantum chemical program suite. See also Z. Rolik and M.K'allay. J. Chem. Phys. 2011. V. 135. P. 104111. Режим доступа: <http://www.mrcc.hu>
- [21] *Skripnikov L.V., Titov A.V.* // Phys. Rev. A. 2015. V. 91. P. 042504.
- [22] *L.V. Skripnikov, A.N. Petrov, A.V. Titov, R.J. Mawhorter, A.L. Baum, T.J. Sears, J.-U. Grabow* // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. P. 032508.
- [23] *A.C. Vutha, B. Spaun, Y.V. Gurevich, N.R. Hutzler, E. Kirilov, J.M. Doyle, G. Gabrielse, D. DeMille* // Phys. Rev. A. 2011. V. 84. P. 034502.
- [24] *Hess Paul William.* Improving the Limit on the Electron EDM: Data Acquisition and Systematics Studies in the ACME Experiment / Ph. D. thesis. Harvard University. 2014.
- [25] *Petrov A.N.* // Phys. Rev. A. 2011. V. 83. P. 024502.
- [26] *Petrov A.N.* // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. P. 062501.