

Теоретическое изучение электрон-ядерного взаимодействия, индуцированного новыми векторными бозонами, с помощью молекулы монофторида иттербия YbF

© С.Д. Просняк¹, Л.В. Скрипников^{1,2}

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

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

e-mail: prosnyak.sergey@yandex.ru

Поступила в редакцию 05.05.2026 г.

В окончательной редакции 12.05.2026 г.

Принята к публикации 12.05.2026 г.

Для молекулы монофторида иттербия YbF выполнен расчёт молекулярного параметра, характеризующего не сохраняющее чётность и зависящее от спина ядерно–электронное взаимодействие, обусловленное обменом Z' -бозоном для широкого диапазона масс этой гипотетической частицы. Отдельно рассмотрена сходимость к пределам лёгких и тяжёлых бозонов. С точки зрения полученных значений этого параметра молекула YbF может рассматриваться как перспективная система для поиска Z' -бозонов средней и большой массы.

Ключевые слова: новая физика, несохранение чётности, электронная структура молекул.

DOI: 10.61011/OS.2026.07.63548.9712-26

1. Введение

На данный момент практически все экспериментальные исследования в области физики элементарных частиц укладываются в рамки Стандартной модели (СМ). Однако на некоторые вопросы СМ ответить пока не может. Одними из наиболее значимых нерешённых проблем являются барионная асимметрия Вселенной, природа тёмной материи и тёмной энергии, а также сильная CP -проблема в квантовой хромодинамике [1]. Для решения этих проблем было развито множество расширений СМ. Помимо экспериментов на ускорителях элементарных частиц, непрямая проверка этих расширений возможна в прецизионных экспериментах с атомами и молекулами [2,3]. В первую очередь речь идёт об экспериментах по поиску эффектов нарушения дискретных симметрий в фундаментальных взаимодействиях, в том числе пространственной чётности P .

В атомных системах эксперименты по поиску эффектов нарушения P были проведены на атомах висмута [4], таллия [5], иттербия [6,7]. Наиболее значимый на сегодняшний день эксперимент был выполнен на запрещённом переходе $6s-7s$ E1 в атоме цезия [8]. И хотя были измерены эффекты несохранения P , отклонений от СМ при этом не обнаружено. В работе [9] из сравнения теории и эксперимента были установлены ограничения на константы взаимодействия с частицами, возникающими в расширениях СМ.

Основным источником нарушения пространственной чётности в атомных системах являются не зависящие

от ядерного спина эффекты. В то же время обратная ситуация наблюдается в двухатомных молекулах. В этих системах данные эффекты оказываются подавлены, делая доступными для исследования эффекты нарушения P , зависящие от спина (СЗНСЧ) [10–12]. Интерес к исследованию СЗНСЧ-эффектов обусловлен поиском новых гипотетических частиц, в частности Z' -бозона, появляющегося во многих расширениях СМ [13–16], а также являющегося кандидатом на роль связующего звена между материей и тёмной материей [17]. Среди СЗНСЧ-эффектов можно выделить аксиально-векторно-векторные ядерно-электронные взаимодействия ($AV-Ne$), индуцированные сверхтонким взаимодействием P -нечётные электрон-ядерные взаимодействия, а также эффекты, обусловленные электромагнитным взаимодействием электронов с анапольным моментом ядра [2,18].

В работе [19] был выполнен эксперимент по измерению СЗНСЧ-эффектов для молекулы $^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}$. В работе [20] из анализа результатов этого эксперимента и теоретических расчётов были установлены ограничения на произведение констант взаимодействия с Z' -бозоном. Также было показано, что эксперимент с молекулой ^{137}BaF при достижении аналогичной точности позволит для тяжёлых бозонов и бозонов средней массы на несколько порядков уточнить эти ограничения.

Ещё одной перспективной системой для проведения эксперимента по поиску эффектов нарушения чётности является молекула монофторида иттербия YbF [21]. Как и для других двухатомных молекул, благодаря

близко расположенным уровням противоположной чётности, эффекты нарушения P -симметрии значительно усилены [10–12]. Кроме того, лазерное охлаждение YbF даёт возможность добиться высокой точности измерений [21,22]. Настоящая работа посвящена исследованию СЗНСЧ-AV-Ne эффектов в молекуле YbF ($I_{Yb} \neq 0$), обусловленных прямым обменом Z' -бозоном между ядром итербия и электронами.

2. Теория

Для двухатомной молекулы типа YbF в электронном состоянии $X^2\Sigma_{1/2}$ эффективный гамильтониан нарушающего чётность взаимодействия может быть представлен в виде [12]:

$$H_{PV} = k_a W_a [\lambda \times S'] \cdot \mathbf{I}, \quad (1)$$

где k_a — безразмерная константа, характеризующая СЗНСЧ-эффекты, W_a — электронный параметр, λ — единичный вектор вдоль молекулярной оси z , направленный от тяжёлого ядра к лёгкому, S' — эффективный спин электрона [12], $\mathbf{I}$ — спин ядра.

При введении в рассмотрение нового Z' -бозона в гамильтониан H_{PV} следует включить новое взаимодействие, обусловленное прямым обменом этим Z' -бозоном между ядром и электронами. Оно соответствует замене:

$$k_a W_a \rightarrow k_a W_a + g_N^A g_e^V W_{AV-Ne}, \quad (2)$$

где g_N^A и g_e^V — константы аксиально-векторного и векторного взаимодействия Z' с ядром и электроном соответственно. Константа g_N^A может быть приблизительно записана как $g_N^A \approx g_n^A \langle \sigma \rangle_n + g_p^A \langle \sigma \rangle_p$, где g_n^A и g_p^A соответственно константы аксиально-векторного взаимодействия Z' с нейтроном и протоном, а $\langle \sigma \rangle_n$ и $\langle \sigma \rangle_p$ — усреднённые спины нейтронов и протонов. Параметр W_{AV-Ne} в приближении нерелятивистского ядра, имеющего распределение плотности $\rho(\mathbf{r}')$, может быть вычислен как

$$W_{AV-Ne} = \frac{\hbar c}{4\pi} \left\langle \Omega \left| \sum_i^{N_{elec}} \alpha_{+,i} V_Y(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N) \right| - \Omega \right\rangle, \quad (3)$$

где $\hbar$ — редуцированная постоянная Планка, c — скорость света, Ω — проекция полного момента импульса электрона на молекулярную ось, $\alpha_+ = \alpha_x + i\alpha_y$. Электрон-ядерное взаимодействие типа Юкавы в формуле (3) даётся выражением

$$V_Y(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_N) = \int d^3 r' \rho(\mathbf{r}') \frac{\exp(-Mc/\hbar |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N - \mathbf{r}'|}, \quad (4)$$

где $\mathbf{r}_N$ и $\mathbf{r}_i$ — координаты центра ядра и i -го электрона, M — масса бозона, а плотность $\rho(\mathbf{r}')$ нормирована на 1, $\int d^3 r \rho(\mathbf{r}) = 1$.

Рассмотрим предельные случаи лёгких и тяжёлых Z' -бозонов. При уменьшении массы M характерный радиус взаимодействия (4) постепенно увеличивается. После того как радиус взаимодействия станет больше размеров

Таблица 1. Состав применённых в расчётах базисных наборов

Базис	Yb	F
SBas	27s22p13d8f2g	10s6p1d
MBas	33s27p16d11f4g	14s8p3d1f

молекулы YbF, дальнейшее его увеличение перестанет существенно влиять на величину параметра W_{AV-Ne} . При увеличении массы бозона M всё с большей точностью будет выполняться следующее асимптотическое выражение:

$$\frac{e^{-rMc/\hbar}}{r} \simeq \frac{4\pi\hbar^2}{(Mc)^2} \delta(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Следовательно, при больших массах выражение (4) с точностью до постоянного множителя можно приближённо заменить на $\rho(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N)/M^2$. В результате при достаточно больших массах Z' -бозона $W_{AV-Ne}(M) \simeq \tilde{W}_{AV-Ne}/M^2$, где параметр $\tilde{W}_{AV-Ne}$ не зависит от M . Кроме того, как не трудно заметить, параметр $\tilde{W}_{AV-Ne}$ с точностью до постоянного множителя совпадает с параметром W_a , характеризующим взаимодействие электронов с анапольным моментом ядра:

$$W_a = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \left\langle \Omega \left| \sum_i^{N_{elec}} \rho(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N) \alpha_{+,i} \right| - \Omega \right\rangle,$$

где G_F — постоянная Ферми.

3. Детали расчёта электронной структуры

В работе [23] нами был развит подход по вычислению примитивных интегралов типа $\langle ab|e^{-m_a r}/r|cd \rangle$, где a, b, c, d — гауссовы базисные функции вида $x^n y^m z^k e^{-\beta r^2}$. Он был применён для расчёта молекулярных параметров нарушающего T и P -симметрии индуцированного аксионоподобными частицами (АПЧ) электрон-электронного взаимодействия в молекулярном катионе Hf^+ . Далее в работе [24] для молекулы BaF аналогичный подход был применён для вычисления параметров T, P -нечётного индуцированного АПЧ электрон-ядерного взаимодействия с учётом конечного размера ядра. В качестве модели распределения ядерной плотности использовалась гауссова модель, имеющая такую же форму, как и распределение заряда по ядру $\rho \sim e^{-ar^2}$ [25]. В данной работе мы также использовали гауссову модель ядра. В результате задача по вычислению молекулярного параметра W_{AV-Ne} была сведена к вычислению примитивных интегралов типа $\langle ab|e^{-m_a r}/r|cd \rangle$. Для этого был адаптирован код, развитый в работах [23,24].

Моделирование электронной волновой функции молекулы было выполнено с помощью локальной версии программы [26,27], а также программы Exr-T [28,29]. Эффекты межэлектронной корреляции при этом учитывались

на уровне метода связанных кластеров в пространстве Фока с однократными и двухкратными возбуждениями в секторе 0h1p, FS-CCSD [30]. В качестве межатомного расстояния для основного состояния $X^2\Sigma_{1/2}$ молекулы YbF нами использовалось значение $R_e = 2.016514 \text{ \AA}$, близкое к величине, полученной в эксперименте [31]. Основные расчёты были выполнены с использованием базисного набора MBas, являющегося модифицированной версией базисов Дайлла AE3Z для Yb [32,33] и F [34]. Для корректного описания взаимодействия при больших массах Z' -бозона к базису на атоме Yb были добавлены функции $3s$ и $3p$ с высокими показателями экспоненты, а также для уменьшения вычислительной сложности исключены функции $2h$. Итоговый состав этого базисного набора, а также других базисных наборов, используемых в этой работе, приведены в табл. 1. Кроме того, при расчёте методом связанных кластеров FS-CCSD с базисом MBas электроны на орбиталях $1s - 3d$ были заморожены. Энергия виртуальных орбиталей была ограничена величиной 500 а.е. Для оценки погрешности такого приближения были проведены расчёты в меньшем базисе SBas, полученным на основе базисов Дайлла [32–34] AE2Z для Yb и F, где к набору для атома Yb также были добавлены функции $3s$ и $3p$ с высокими показателями экспоненты. С этим базисным набором были произведены расчёты как аналогичные проведённым в MBas, так и с корреляцией всех электронов и учётом виртуальных орбиталей вплоть до энергии 10000 а.е. Необходимость учёта виртуальных орбиталей с такой высокой энергией в корреляционном расчёте для тяжёлых атомов при учёте электронов, лежащих глубоко в остовах, была обоснована в работах [35,36]. В качестве модели распределения заряда ядра использовалась гауссова модель, хорошо себя зарекомендовавшая в молекулярных расчётах [25]. При этом среднеквадратичный зарядовый радиус ядра подбирался по интерполяционной формуле из работы [37].

4. Результаты вычислений

В качестве начального приближения нами был использован метод Дирака–Хартри–Фока (DHF) для замкнутой оболочки катиона YbF⁺. Полученные в рамках этого метода значения параметра $W_{\text{AV-Ne}}$ для широкого диапазона масс Z' -бозона представлены в табл. 2. Как не трудно заметить, наблюдается сходимость к соответствующим пределам для лёгких и тяжёлых Z' -бозонов. Следовательно, рассматриваемый диапазон позволяет получить полную картину зависимости изучаемого параметра $W_{\text{AV-Ne}}$ от массы M .

Далее для учёта корреляционных эффектов были проведены расчёты методом связанных кластеров в пространстве Фока FS-CCSD. Полученные результаты приведены в табл. 3. Во втором и четвёртом столбцах представлены значения, полученные в FS-CCSD-расчёте с заморозкой занятых орбиталей $1s - 3d$ и учё-

Таблица 2. Рассчитанные методом DHF значения молекулярного параметра $W_{\text{AV-Ne}}$ (Hz) с использованием нескольких базисных наборов для различных масс Z' -бозона

Mc^2, eV	SBas	MBas
$5.1 \cdot 10^{-1}$	$-6.00 \cdot 10^{12}$	$-6.01 \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^1$	$-5.98 \cdot 10^{12}$	$-5.99 \cdot 10^{12}$
$2.5 \cdot 10^2$	$-5.65 \cdot 10^{12}$	$-5.66 \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^2$	$-4.89 \cdot 10^{12}$	$-4.89 \cdot 10^{12}$
$2.5 \cdot 10^3$	$1.59 \cdot 10^{12}$	$1.59 \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^3$	$4.93 \cdot 10^{12}$	$4.92 \cdot 10^{12}$
$2.5 \cdot 10^4$	$1.04 \cdot 10^{13}$	$1.03 \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^4$	$1.24 \cdot 10^{13}$	$1.23 \cdot 10^{13}$
$2.5 \cdot 10^5$	$1.52 \cdot 10^{13}$	$1.50 \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^5$	$1.25 \cdot 10^{13}$	$1.23 \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^6$	$8.98 \cdot 10^{11}$	$8.88 \cdot 10^{11}$
$5.1 \cdot 10^7$	$1.75 \cdot 10^{10}$	$1.74 \cdot 10^{10}$
$5.1 \cdot 10^9$	$1.97 \cdot 10^6$	$1.97 \cdot 10^6$
$5.1 \cdot 10^{11}$	$1.97 \cdot 10^2$	$1.97 \cdot 10^2$

том виртуальных орбиталей до энергии в 500 а.е. для базисов SBas и MBas. Расчёты, в которых выполнялось исключение остовных электронов помечены как „FC“ (frozen core). В третьем столбце приведены результаты расчётов с учётом остовных орбиталей $1s - 3d$ и виртуальных орбиталей с энергиями до 10000 а.е. включительно с применением базиса SBas. Можно отметить, что поправка на учёт остовных электронов, вычисленная как разность $W_{\text{AV-Ne}}\{\text{SBas}\} - W_{\text{AV-Ne}}\{\text{SBas, FC}\}$ оказывается значительно больше разности между результатами в разных базисах с заморозкой орбиталей $1s - 3d$. В последнем столбце табл. 3 приведены финальные значения и соответствующие им погрешности. Итоговые значения были вычислены как $W_{\text{AV-Ne}}\{\text{Final}\} = W_{\text{AV-Ne}}\{\text{MBas, FC}\} + (W_{\text{AV-Ne}}\{\text{SBas}\} - W_{\text{AV-Ne}}\{\text{SBas, FC}\})$. Итоговую погрешность мы оценили как квадратный корень из суммы квадратов следующих двух вкладов: (i) вклад от неполноты базисного набора, вычисленный как разность результатов метода FS-CCSD с заморозкой орбиталей $1s - 3d$ в базисах SBas и MBas, (ii) вклад корреляции остовных электронов, рассчитанный как разность результатов полноэлектронного расчёта и расчёта с заморозкой орбиталей $1s - 3d$ в базисе SBas.

Из сравнения табл. 2 и 3 следует, что эффекты межэлектронной корреляции играют существенную роль при вычислении параметра $W_{\text{AV-Ne}}$. Из этого можно сделать вывод, что для дальнейшего существенного повышения точности необходимо проводить полноэлектронные расчёты в базисе MBas, а также учитывать корреляционные эффекты на более высоком уровне, например в рамках подхода FS-CCSDT [38]. Однако для задач настоящей работы уровня теории FS-CCSD достаточно.

Как и в случае результатов, полученных методом DHF, на уровне FS-CCSD также можно отметить нали-

Таблица 3. Рассчитанные методом FS-CCSD значения молекулярного параметра W_{AV-Ne} (Hz) с использованием нескольких базисных наборов для различных масс Z' -бозона. Итоговое значение приведено в последнем столбце вместе с погрешностью в круглых скобках

Mc^2, eV	SBas, FC	SBas	MBas, FC	Final
$5.1 \cdot 10^{-1}$	$-3.70 \cdot 10^{12}$	$-3.12 \cdot 10^{12}$	$-3.91 \cdot 10^{12}$	$-3.33(61) \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^1$	$-3.69 \cdot 10^{12}$	$-3.12 \cdot 10^{12}$	$-3.90 \cdot 10^{12}$	$-3.32(61) \cdot 10^{12}$
$2.5 \cdot 10^2$	$-3.42 \cdot 10^{12}$	$-2.85 \cdot 10^{12}$	$-3.62 \cdot 10^{12}$	$-3.05(61) \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^2$	$-2.72 \cdot 10^{12}$	$-2.15 \cdot 10^{12}$	$-2.93 \cdot 10^{12}$	$-2.36(61) \cdot 10^{12}$
$2.5 \cdot 10^3$	$4.70 \cdot 10^{12}$	$5.28 \cdot 10^{12}$	$4.40 \cdot 10^{12}$	$4.98(66) \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^3$	$1.03 \cdot 10^{13}$	$1.09 \cdot 10^{13}$	$9.83 \cdot 10^{12}$	$1.05(8) \cdot 10^{13}$
$2.5 \cdot 10^4$	$1.59 \cdot 10^{13}$	$1.64 \cdot 10^{13}$	$1.57 \cdot 10^{13}$	$1.63(6) \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^4$	$1.65 \cdot 10^{13}$	$1.71 \cdot 10^{13}$	$1.67 \cdot 10^{13}$	$1.72(6) \cdot 10^{13}$
$2.5 \cdot 10^5$	$2.07 \cdot 10^{13}$	$2.15 \cdot 10^{13}$	$2.08 \cdot 10^{13}$	$2.16(8) \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^5$	$1.68 \cdot 10^{13}$	$1.75 \cdot 10^{13}$	$1.69 \cdot 10^{13}$	$1.75(6) \cdot 10^{13}$
$5.1 \cdot 10^6$	$1.20 \cdot 10^{12}$	$1.25 \cdot 10^{12}$	$1.21 \cdot 10^{12}$	$1.26(5) \cdot 10^{12}$
$5.1 \cdot 10^7$	$2.34 \cdot 10^{10}$	$2.43 \cdot 10^{10}$	$2.36 \cdot 10^{10}$	$2.45(9) \cdot 10^{10}$
$5.1 \cdot 10^9$	$2.64 \cdot 10^6$	$2.74 \cdot 10^6$	$2.68 \cdot 10^6$	$2.78(11) \cdot 10^6$
$5.1 \cdot 10^{11}$	$2.64 \cdot 10^2$	$2.74 \cdot 10^2$	$2.68 \cdot 10^2$	$2.78(11) \cdot 10^2$

чие сходимости к пределам лёгких и тяжёлых бозонов. Полученное при $M \rightarrow \infty$ итоговое значение константы $\tilde{W}_{AV-Ne}$ соответствует параметру $W_a = 601(24)$ Hz. При этом в рамках погрешности эта величина хорошо согласуется со значением, полученным прямым расчётом параметра W_a при помощи программы OneProp [39] с использованием тех же методов моделирования электронной структуры молекулы. Кроме того, можно отметить разумное согласие с итоговым значением $W_a = 576(86)$ Hz из работы [40], полученным в рамках метода теории функционала плотности, а также приведёнными там результатами расчётов других групп [41–44].

В работе [20], исходя из погрешности $\Delta\nu = 0.7$ Hz эксперимента [19] для молекулы $^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}$ и расчётов параметра W_{AV-Ne} были получены ограничения на произведение констант взаимодействия $|g_{Ng_e}^A|^V$ для разных масс Z' -бозона. Кроме того, было показано [20], что при проведении эксперимента с такой же точностью на молекуле $^{137}\text{Ba}^{19}\text{F}$ могут быть установлены более строгие ограничения, начиная от одного порядка в случае средних масс Z' -бозона ($10^3 \text{ eV} < Mc^2 < 10^7 \text{ eV}$) и до четырёх порядков в случае больших масс ($Mc^2 > 10^7 \text{ eV}$). Полученные нами параметры W_{AV-Ne} для молекулы YbF оказались примерно в два раза больше для Z' -бозонов со средней массой и приблизительно в четыре раза больше для тяжёлых Z' -бозонов, чем для $^{137}\text{Ba}^{19}\text{F}$ в работе [20]. Таким образом, с точки зрения вычисленных молекулярных параметров взаимодействия, молекула YbF представляется перспективной системой для измерения рассмотренных эффектов. При этом окончательное получение ограничений на параметры взаимодействия с новым Z' -бозоном на основе экспериментальных данных по молекуле YbF потребует также учёта вклада не сохраняющих P -симметрию эффектов в рамках СМ, т. е.

рассмотрения первого слагаемого выражения (2), прежде всего от анапольного момента ядра. Это является отдельной задачей для методов теории ядра. Ранее подобные исследования были выполнены для атома Cs [9] и молекулы BaF [20], а также более тяжёлых ядер, таких как Tl, Bi, Pb [45,46]. Мы надеемся, что измерение P -нечётных эффектов в молекулах мотивирует систематическое проведение таких расчётов.

5. Заключение

В настоящей работе впервые для монофторида итербия были выполнены неэмпирические расчёты молекулярного параметра W_{AV-Ne} , характеризующего не сохраняющее чётность и зависящее от спина AV–Ne-взаимодействие, обусловленное обменом Z' -бозоном. При этом была исследована зависимость параметра W_{AV-Ne} от массы Z' -бозона. В предельном случае тяжёлых бозонов было установлено, что соответствующий полученным в работе результатам параметр взаимодействия с анапольным моментом ядра W_a хорошо согласуется со значениями, полученными в более ранних исследованиях. Из сравнения вычисленных значений параметра W_{AV-Ne} для YbF и с результатами предыдущих расчётов для $^{137}\text{Ba}^{19}\text{F}$ установлено, что молекула YbF также может рассматриваться как перспективная система для поиска проявлений эффектов новой физики.

Благодарности

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования „Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса“ НИЦ „Курчатовский институт“, <http://ckp.nrcki.ru/>.

Финансирование работы

Расчёт электронной структуры выполнен при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 24-12-00092, <https://rscf.ru/project/24-12-00092/>. Вычисление матричных элементов оператора электрон-ядерного взаимодействия, индуцированного обменом векторным бозоном, проведено при поддержке гранта Базис № 24-1-1-36-1.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.D. Sakharov. JETP lett., **5**, 24 (1967).
- [2] M.S. Safronova, D. Budker, D. DeMille, D.F.J. Kimball, A. Derevianko, C.W. Clark. Rev. Mod. Phys., **90** (2), 025008 (2018).
- [3] G. Arrowsmith-Kron, M. Athanasakis-Kaklamanakis, M. Au, J. Ballof, R. Berger, A. Borschevsky, A.A. Breier, F. Buchinger, D. Budker, L. Caldwell, C. Charles, N. Dattani, R.P. de Groote, D. DeMille, T. Dickel, J. Dobaczewski, C.E. Düllmann, E. Eliav, J. Engel, M. Fan, V. Flambaum, K.T. Flanagan, A.N. Gaiser, R.F. Garcia Ruiz, K. Gaul, T.F. Giesen, J.S.M. Ginges, A. Gottberg, G. Gwinner, R. Heinke, S. Hoekstra, J.D. Holt, N.R. Hutzler, A. Jayich, J. Kartheim, K.G. Leach, K.W. Madison, S. Malbrunot-Ettenauer, T. Miyagi, I.D. Moore, S. Moroch, P. Navratil, W. Nazarewicz, G. Neyens, E.B. Norrgard, N. Nussgart, L.F. Pašteka, A.N. Petrov, W.R. Plaß, R.A. Ready, M. Pascal Reiter, M. Reponen, S. Rothe, M.S. Safronova, C. Scheidenberger, A. Shindler, J.T. Singh, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, S.M. Udrescu, S.G. Wilkins, X. Yang. Rep. Prog. Phys., **87** (8), 084301 (2024).
- [4] L.M. Barkov, M.S. Zolotarev. JETP Lett., **28**, 503 (1978).
- [5] P.A. Vetter, D.M. Meekhof, P.K. Majumder, S.K. Lamoreaux, E.N. Fortson. Phys. Rev. Lett., **74** (14), 2658 (1995).
- [6] K. Tsigutkin, D. Dounas-Frazer, A. Family, J.E. Stalnaker, V.V. Yashchuk, D. Budker. Phys. Rev. Lett., **103** (7), 071601 (2009).
- [7] D. Antypas, A. Fabricant, J.E. Stalnaker, K. Tsigutkin, V. Flambaum, D. Budker. Nature Physics, **15** (2), 120 (2019).
- [8] C. Wood, S. Bennett, D. Cho, B. Masterson, J. Roberts, C. Tanner, C.E. Wieman. Science, **275**, 1759 (1997).
- [9] V.A. Dzuba, V.V. Flambaum, Y.V. Stadnik. Phys. Rev. Lett., **119** (22), 223201 (2017).
- [10] L.N. Labzowsky. Sov. Phys. JETP, **48**, 434 (1978).
- [11] O.P. Sushkov, V.V. Flambaum. Sov. Phys. JETP, **48**, 608 (1978).
- [12] M.G. Kozlov, L.G. Labzowsky. J. Phys. B, **28** (9), 1933 (1995).
- [13] J.L. Lopez. Nuclear Physics B — Proceedings Supplements, **52** (1), 284 (1997).
- [14] D. Gómez Dumm. Phys. Lett. B, **411** (3), 313 (1997).
- [15] T.G. Rizzo. Phys. Rev. D, **59** (1), 015020 (1998).
- [16] S. Baek, J.H. Jeon, C. Kim. Phys. Lett. B, **641** (2), 183 (2006).
- [17] B. Shuve, I. Yavin. Phys. Rev. D, **89** (11), 113004 (2014).
- [18] J.S.M. Ginges, V.V. Flambaum. Phys. Rep., **397**, 63 (2004).
- [19] E. Altuntaş, J. Ammon, S.B. Cahn, D. DeMille. Phys. Rev. Lett., **120** (14), 142501 (2018).
- [20] K. Gaul, L. Cong, D. Budker. Phys. Rev. Lett., **136** (18), 181805 (2026).
- [21] N.J. Fitch, J. Lim, E.A. Hinds, B.E. Sauer, M.R. Tarbutt. Quantum Sci. Technol., **6** (1), 014006 (2020).
- [22] J. Lim, J. Almond, M. Trigatzis, J. Devlin, N. Fitch, B. Sauer, M. Tarbutt, E. Hinds. Phys. Rev. Lett., **120** (12), 123201 (2018).
- [23] S.D. Prosyak, D.E. Maison, L.V. Skripnikov. Symmetry, **15** (5), 1043 (2023).
- [24] S.D. Prosyak, L.V. Skripnikov. Phys. Rev. A, **109** (4), 042821 (2024).
- [25] L. Visscher, K. Dyall. At. Data Nucl. Data Tables, **67** (2), 207 (1997).
- [26] DIRAC, a relativistic *ab initio* electronic structure program, Release DIRAC26 (2026), written by A.S.P. Gomes, T. Saue, L. Visscher, H.J.A. Jensen, R. Bast, with contributions from M. Abe, I.A. Aucar, J.J. Aucar, V. Bakken, J. Brandeys, C. Chibueze, J. Creutzberg, K.G. Dyall, S. Dubillard, U. Ekström, E. Eliav, T. Enevoldsen, G. Fabbro, E. Faßhauer, T. Fleig, O. Fossgaard, K. G. Gaul, L. Halbert, E. D. Hedegård, T. Helgaker, B. Helmich-Paris, J. Henriksson, M. van Horn, M. Iliaş, S. Iwamuro, Ch. R. Jacob, S. Knecht, S. Komorovský, O. Kullie, J.K. Lærdahl, C.V. Larsen, E.D. Laersson, M. Le, Y.S. Lee, T. Lejeune, N.H. List, Y. Masuda, H.S. Nataraj, M.K. Nayak, K. Noda, P. Norman, A. Nyvang, G. Olejniczak, J. Olsen, J.M.H. Olsen, A. Papadopoulos, Y.C. Park, J.K. Pedersen, M. Pernpointner, J.V. Pototschnig, R. di Remigio Eikas, M. Repisky, C.M.R. Rocha, K. Ruud, P. Salek, B. Schimmelpfennig, B. Senjean, A. Shee, J. Sikkema, A. Sunaga, A.J. Thorvaldsen, J. Thyssen, J. van Stralen, M.L. Vidal, S. Villaume, O. Visser, S.K. Sorensen, T. Winther, S. Yamamoto and X. Yuan (available at <https://doi.org/10.5281/zenodo.18662050>, see also <https://www.diracprogram.org>).
- [27] T. Saue, R. Bast, A.S.P. Gomes, H.J.A. Jensen, L. Visscher, I.A. Aucar, R. Di Remigio, K.G. Dyall, E. Eliav, E. Fasshauer, T. Fleig, L. Halbert, E.D. Hedegard, B. Helmich-Paris, M. Iliaş, C.R. Jacob, S. Knecht, J.K. Laerdahl, M.L. Vidal, M.K. Nayak, M. Olejniczak, J.M.H. Olsen, M. Pernpointner, B. Senjean, A. Shee, A. Sunaga, J.N.P. van Stralen. J. Chem. Phys., **152** (20), 204104 (2020).
- [28] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav. Towards high performance relativistic electronic structure modelling: the EXP-T program package In: *Supercomputing*, ed. by V. Voevodin, S. Sobolev.
- [29] A. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav, 2021 EXP-T, an extensible code for Fock space relativistic coupled cluster calculations <http://www.qchem.pnpi.spb.ru/expt>.
- [30] L. Visscher, E. Eliav, U. Kaldor. J. Chem. Phys., **115** (21), 9720 (2001).
- [31] C. Dickinson, J. Coxon, N. Walker, M. Gerry. J. Chem. Phys., **115** (15), 6979 (2001).
- [32] K.G. Dyall. J. Phys. Chem. A, **113** (45), 12638 (2009).
- [33] K.G. Dyall. Theor. Chem. Acc., **131** (5), 1217 (2012).
- [34] K.G. Dyall. Theor. Chem. Acc., **135** (5), 128 (2016).
- [35] L.V. Skripnikov, A.V. Titov. Phys. Rev. A, **91** (4), 042504 (2015).
- [36] L.V. Skripnikov, D.E. Maison, N.S. Mosyagin. Phys. Rev. A, **95** (2), 022507 (2017).

- [37] W. Johnson, G. Soff. *At. Data Nucl. Data Tables*, **33** (3), 405 (1985).
- [38] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, E. Eliav. *Symmetry*, **12** (7), 1101 (2020).
- [39] L.V. Skripnikov. *J. Chem. Phys.*, **145** (21), 214301 (2016).
- [40] A. Borschevsky, M. Iliaš, V.A. Dzuba, V.V. Flambaum, P. Schwerdtfeger. *Phys. Rev. A*, **88** (2), 022125 (2013).
- [41] D. DeMille, S.B. Cahn, D. Murphree, D.A. Rahmlow, M.G. Kozlov. *Phys. Rev. Lett.*, **100** (2), 023003 (2008).
- [42] A.V. Titov, N.S. Mosyagin, V.F. Ezhov. *Phys. Rev. Lett.*, **77** (27), 5346 (1996).
- [43] T.A. Isaev, R. Berger. *Phys. Rev. A*, **86** (6), 062515 (2012).
- [44] N.S. Mosyagin, M.G. Kozlov, A.V. Titov. *J. Phys. B*, **31** (19), L763 (1998).
- [45] V.F. Dmitriev, V.B. Telitsin. *Nucl. Phys. A*, **674** (1), 168 (2000).
- [46] W.C. Haxton, C.P. Liu, M.J. Ramsey-Musolf. *Phys. Rev. C*, **65** (4), 045502 (2002).