

Колебательная структура трехатомных молекул и поиск эффектов нарушающих пространственную четность и временную инвариантность

Одними из наиболее перспективных для поиска новой физики за рамками стандартной модели являются эксперименты по поиску электрического дипольного момента электрона (еЭДМ, d_e) и других проявлений нарушения пространственной четности (P) и временной инвариантности (T) на лазерно-охлаждаемых полярных трехатомных молекулах с атомами тяжелых элементов, например, RaOH, YbOH и др.

Подобные эксперименты нуждаются в теоретической поддержке. Одной из наиболее важных является величина эффективного электрического поля (E_{eff}), которая не может быть получена в эксперименте, но используется при получении значения еЭДМ из экспериментально наблюдаемого P,T-нечетного эффекта Штарка. Расчеты E_{eff} для трехатомных молекул перспективных для поиска P,T- нечетных эффектов ранее проводились и другими группами [PHYSICAL REVIEW A 99, 042512 (2019), PHYSICAL REVIEW A 99, 062502 (2019), PHYSICAL REVIEW A 101, 012508 (2020)], однако такие исследования нельзя считать полностью завершенными, так как конечная величина для E_{eff} должна быть получена в результате усреднения по колебательно-вращательной функции, чего сделано не было до результатов наших работ. Впервые рассчитан эффект l-удвоения для первого возбужденного по деформационной моде колебательного состояния. Расчет проводился двумя способами, в лабораторной и в системе координат, связанной с молекулой, которые дали идентичные результаты. Корректное значение l-удвоения крайне важно для расчета чувствительности молекулы к P,T-нечетным эффектам во внешних полях.

Важно определить оптимальные условия (значения внешних полей) для эксперимента. Для этого нужно знать зависимость сверхтонкой структуры, g-факторов, отклик молекулы на P,T-нечетные эффекты как функции внешних полей. Нами разработаны метод и программа для расчета соответствующих свойств. Нами обнаружено, что ни при каком значении электрического поля чувствительность молекулы YbOH (в отличие от двухатомных) не достигает 100% от максимально возможного значения $E_{\text{eff}} d_e$. Данный результат противоречит начальным ожиданиям и расчетам работы [Phys. Rev. Lett. 119, 133002 (2017)] (а также последующим работам) где структура l-удвоения, как аналог Ω -удвоения двухатомных молекул, рассматривалась для измерения возможных P,T-нечетных эффектов. Нами установлено, что данный факт имеет общий характер и затрагивает все планируемые эксперименты на многоатомных молекулах. Авторы работы [Phys. Rev. Lett. 119, 133002 (2017)] (Nicholas Hutzler частное сообщение) согласны со сделанными нами выводами.

1. Anna Zakharova, Alexander Petrov. *P, T -odd effects for the RaOH molecule in the excited vibrational state*, PRA **103**, 032819 (2021), <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.032819>
2. Anna Zakharova, Igor Kurchavov, Alexander Petrov, *Rovibrational structure of the Ytterbium monohydroxide molecule and the P,T -violation searches*, JCP **155**, 164301 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0069281>
3. Alexander Petrov, Anna Zakharova, *Sensitivity of the YbOH molecule to P,T -odd effects in the external electric field*, <http://arxiv.org/abs/2111.02772>