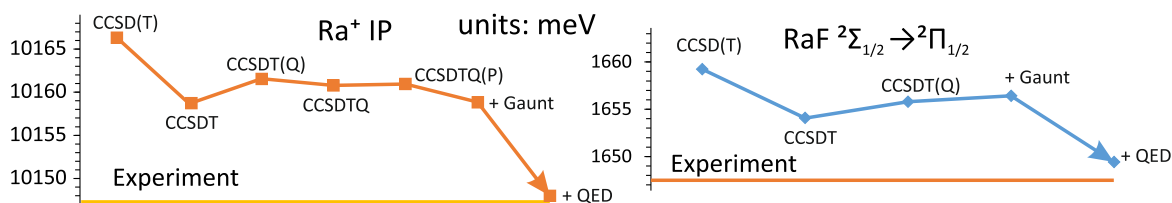
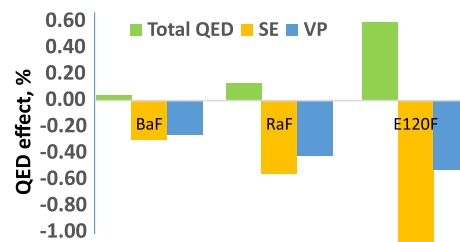


Новый уровень точности молекулярной теории: учёт вклада КЭД

Молекулы, содержащие атомы тяжёлых элементов очень перспективны для экспериментов по поиску новой физики за рамками стандартной модели. Наиболее точное ограничение на электрический дипольный момент электрона, который нарушает симметрии фундаментальных взаимодействий относительно обращения времени и инверсии пространства, было получено в эксперименте на молекулах ThO. Особенностью этих экспериментов является необходимость использования “входных теоретических данных” для их интерпретации. Другой особенностью является то, что для таких экспериментов всё чаще предлагаются нестабильные, радиоактивные молекулы. Недавно в ЦЕРН был начат эксперимент на молекуле RaF. Важным этапом является измерение спектров. Теоретические предсказания могут значительно ускорить эксперимент, но только если они имеют высокую точность. В последние годы в этом направлении удалось продвинуться: стало возможным одновременно использовать достаточно точные релятивистские гамильтонианы и на высоком уровне учитывать эффекты электронной корреляции. Однако по сравнению с атомами в таких подходах не умели учитывались эффекты квантовой электродинамики. Эту проблему удалось решить в нашей работе, где был сформулирован метод учёта эффектов КЭД в молекулах. Наиболее сложной задачей является расчёт вклада собственной энергии. Для этого был предложен и реализован модельный оператор, который позволяет эффективно учитывать эти эффекты в многоэлектронных молекулах. Сам оператор основан на теории, развитой для многозарядных ионов и атомов в группе В.М. Шабаева. Особенностью же рассмотренного подхода является возможность и удобство его использования в молекулярных расчётах без снижения точности. Идея модельного оператора основана на возможности “масштабирования” матричных элементов лэмбовского сдвига для кулоновского потенциала.

В нашей работе были получены энергии переходов в катионе радия Ra^+ и молекуле монофторида радия RaF. Рассмотренный переход $X^2\Sigma_{1/2} \rightarrow A^2\Pi_{1/2}$ в этой молекуле может быть использован для её лазерного охлаждения для последующего измерения электрического дипольного момента электрона. Для вычисления энергий переходов мы вышли за рамки гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта, а также рассмотрели эффекты электронной корреляции высокого порядка. Эффекты КЭД включались непертурбативно с использованием развитого модельного оператора. Показано, что учёт эффектов КЭД в молекулярных и атомных расчетах является ключевым для устранения расхождения между теоретическими значениями, полученными в рамках гамильтониана Дирака – Кулона – Брейта, и экспериментом. Погрешность расчёта составила всего несколько мэВ. Это более чем на порядок лучше, чем «химическая точность» (1ккал/моль=43 мэВ), которая обычно считается целью в подобных исследованиях. Мы также проследили за вкладом эффектов КЭД в ряду гомологичных молекул BaF, RaF и E120F, где E120 – сверхтяжёлых элемент восьмого периода с зарядом ядра $Z=120$. В работе нам удалось улучшить точность теоретических предсказаний энергий переходов в среднем на порядок по сравнению с лучшими предыдущими теоретическими исследованиями в мире не только для молекул, но и для ионов Ba^+ и Ra^+ .



Результат опубликован: L.V. Skripnikov. *Approaching meV level for transition energies in the radium monofluoride molecule RaF and radium cation Ra^+ by including quantum-electrodynamics effects* // J. Chem. Phys. 154, 201101 (2021);

L.V. Skripnikov, D.V. Chubukov, V.M. Shakhova. *The role of QED effects in transition energies of heavy-atom alkaline earth monofluoride molecules: A theoretical study of Ba^+ , BaF, RaF, and E120F* // J. Chem. Phys. 155, 144103 (2021).