

I. Несохранение пространственной четности и T-инвариантности в молекулах.

Известно, что тяжелые полярные двухатомные молекулы являются усилителями эффектов несохранения четности. Наибольший интерес представляет усиление электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона в молекулах с неспаренным электроном, таких как PbF, HgF и YbF, где усиление на несколько порядков больше, чем в тяжелых атомах.

В 1985 году нам удалось сделать первый полуэмпирический расчет для молекул HgF и BaF. В дальнейшем этот же метод был применен и для расчета молекулы YbF. Расчет этой молекулы существенно сложнее из-за наличия у итербия неглубокой 4f-оболочки. Это затрудняет как полуэмпирические, так и квантово-химические расчеты. Тем не менее, в настоящее время имеется несколько расчетов этой молекулы, проведенных разными методами и разными группами.

Большинство расчетов находятся в хорошем согласии друг с другом, но имеется один расчет отличающийся примерно в два раза.

P- and *T*-odd interactions

Interaction of the EDM of the electron d_e with the molecular electric field ($-\nabla\phi$):

$$H_d = 2d_e \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} (-\nabla\phi)$$

The molecular matrix element can be written as follows

$$\langle \lambda, \omega | H_d | \lambda, \omega \rangle = W_d d_e \omega$$

where the constant W_d can be expressed in terms of the molecular one-electron density matrix $\rho_{a,b}$

$$W_d = 8 \sum_{n,n',\kappa} \rho_{n',-\kappa;n,\kappa} \int_0^\infty g_{n',-\kappa} g_{n,\kappa} \frac{d\phi}{dr} r^2 dr$$

In this expression g is a small component of the Dirac orbital, κ is the relativistic quantum number and n stands for other quantum numbers.

Список литературы

- [1] van Zee R J, Seely M L, de Vore T C , Weltner W jr. 1978 *J.Phys.Chem* **82** 1192.
- [2] Sauer B, Wang J, and Hinds E A 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1554
- [3] Kozlov M G and Labzowsky L N 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt Phys* **28** 1933.
- [4] Kozlov M G 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt Phys* **30** L607.
- [5] Titov A V , Mosyagin N S, Ezhov V F 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 5346.
- [6] Quiney H M, Skaane H, Grant I P 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt Phys* **30**.
- [7] Parpia F A 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt Phys* **31** 1409.
- [8] Knight L.B., Easley W.C. and Weltner W. 1971 *J. Phys. Chem.* **54** 322.
- [9] Ryzlewicz C *et al* 1982 *Chem. Phys.* **71** 389.
- [10] Kozlov M G 1985 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **89** 1933.
- [11] Kozlov M G, Titov A V, Mosyagin N S, and Souchko P V 1997 *Phys. Rev. A* **56** R3326.

Таблица 1: Hyperfine constants, spin-doubling constants, and matrix elements of H'_d (W_d), H_1^{PT} (W_1^{PT}), and $H^{\mathcal{M}}$ ($W^{\mathcal{M}}$) for YbF and BaF molecules. Theoretical results were obtained within semiempirical method (SE), relativistic effective core potential method (RECP), restricted active space method (RAS), Dirac-Hartree-Fock method (DHF), and unrestricted Dirac-Hartree-Fock method (UDHF).

		A_{\parallel} (MHz)	$A_{\parallel} - A_{\perp}$ (MHz)	γ (MHz)	W^d ($10^{25} \frac{\text{Hz}}{\text{e cm}}$)	$W_1^{P,T}$ (kHz)	$W^{\mathcal{M}}$ ($10^{33} \frac{\text{Hz}}{\text{e cm}^2}$)
^{171}YbF							
Experiment	[1, 2]	7822	309	13			
SE	[3]	"	"	~ 500	-1.5	-48	-2.1
SE with f-hole	[4]	"	"	13	-1.26	-43	
RECP	[5]	5049	176		-0.91	-33	-1.3
RECP+RAS	[5]	4975	181		-0.91	-33	-1.3
DHF	[6]	5987	104		-0.31	-11	-0.6
DHF+core polar.	[6]	7985	180		-0.60	-21	-1.3
UDHF	[7]				-1.20		
^{137}BaF							
Experiment	[8]	2376	75	83.3			
Experiment	[9]	2453	52	81.03			
SE	[10]	2376	75		-0.41	-13	-0.98
RECP	[11]	1479	33		-0.23	-6	
RAS+RECP	[11]	1488	33		-0.22	-6	
RECP+RAS+MBPT	[11]	2272	72		-0.36		