

Развитие теории электронной структуры соединений тяжёлых элементов для поиска новой физики и исследования структуры ядра

Леонид Скрипников

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

&

Санкт-Петербургский государственный университет

<http://qchem.pnpi.spb.ru>

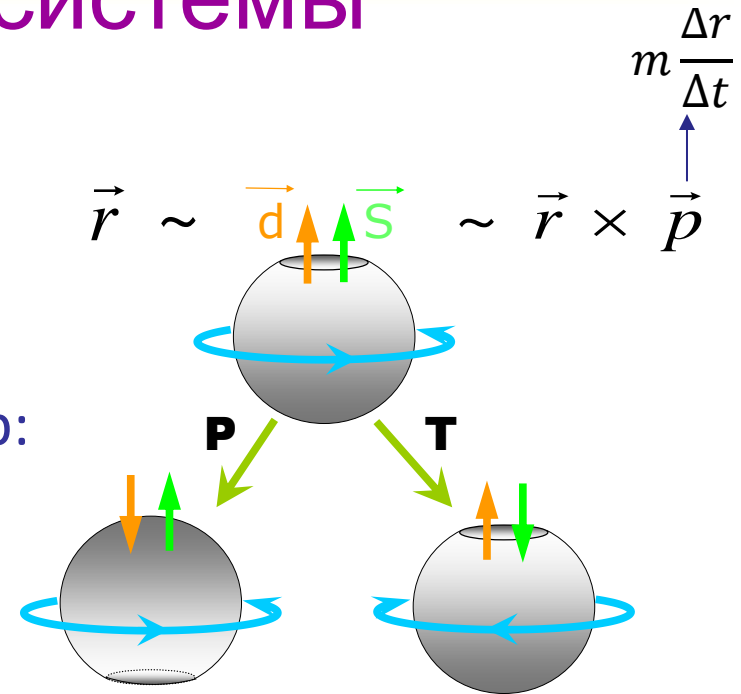
<http://fock.phys.spbu.ru>

Электрический дипольный момент изолированной системы

- ЭДМ - электрический дипольный момент частиц
- Дипольный момент \mathbf{d} - вектор,
- Спин \mathbf{S} - Т-нечётный псевдовектор:

НО

$\mathbf{d} \sim \mathbf{S}$, т.е. ЭДМ может возникнуть только в случае нарушения P,T, иначе ЭДМ $d=0$!

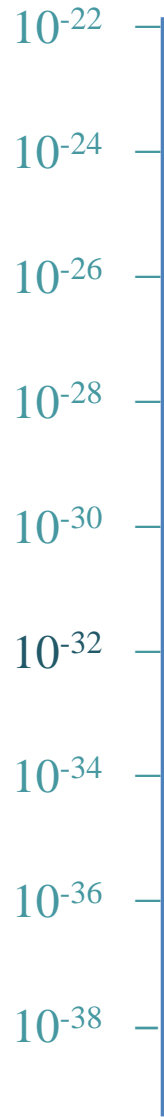


ЭДМ нарушает и P и T

Предсказания СМ и ее популярных расширений

Значения ЭДМ электрона, предсказываемые Стандартной моделью и ее расширениями (в $e \cdot \text{cm}$)

$e\text{EDM}$ ($e \cdot \text{cm}$)



MSSM
(SuSy)

Other
SuSy

Left
-
right

Multi-
Higgs

- ✧ MSSM – минимальная суперсимметричная (SuSy) СМ
- ✧ Other SuSy – другие суперсимметричные расширения СМ
- ✧ Left-Right – модели лево-правой симметрии
- ✧ Multi-Higgs – СМ с более чем одним бозоном Хиггса

Стандартная
модель

~~СР~~ в СМ не объясняет
асимметрию Вселенной
по материи-антиматерии

Задача о поиске электрического дипольного момента электрона

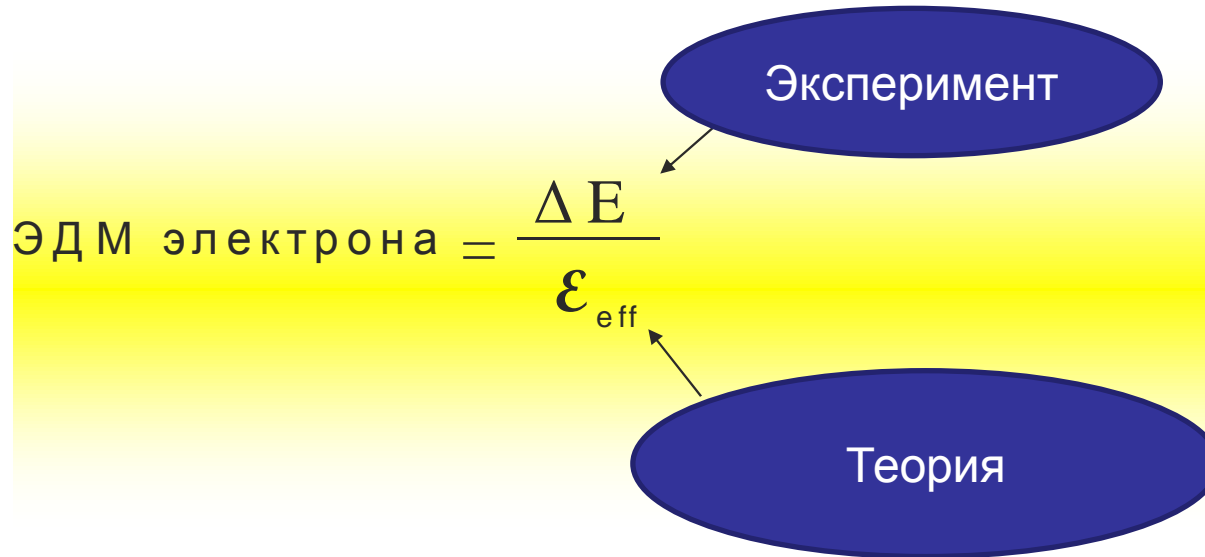
➤ $e\text{ЭДМ} \neq 0$ только при нарушении P и T

➤ тест для расширений стандартной модели, Новой физики
- некоторые из них предсказывают величину на уровне современного экспериментального ограничения

➤ эксперименты на молекулах, содержащих тяжёлые атомы:
[идеи: О.П. Сушков, В.В. Фламбаум, И.Б. Хриплович,
В.Г. Горшков, Л.Н. Лабзовский, А.Н. Москалёв]
**-достижимы огромные эффективные электрические поля E_{eff} ,
однако эти поля могут быть вычислены только теоретически**

Задачи теоретического исследования:

✓ Эффективное электрическое поле – необходимо для интерпретации эксперимента в терминах еЭДМ



✓ Схема энергетических уровней -
будет ли рабочее состояние основным и т.д.

✓ Вероятности переходов

✓ Постоянные сверхтонкой структуры, g-факторы, частоты колебаний...

Методы



Гамильтониан Дирака-Кулона

**Двухшаговый метод
(лаборатория квантовой химии,
НИЦ КИ-ПИЯФ)**

1. Расчёт валентной части волновой функции
2. Восстановление основной части В.Ф.

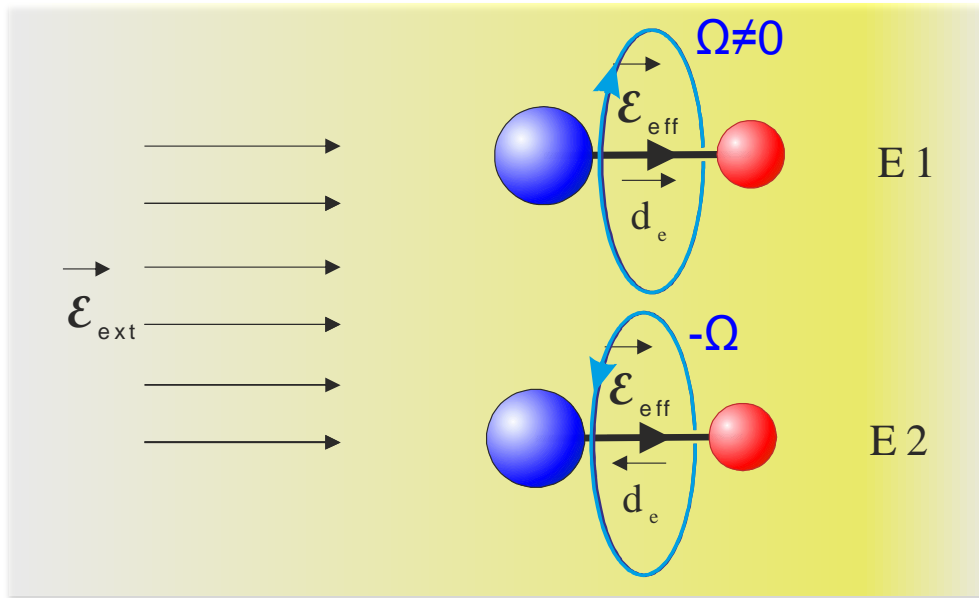
+ наиболее точные
гамильтониан

+ можно использовать большие базисы и т.д.

- Ограничения по параметрам расчёта - есть погрешность метода

**Можно комбинировать оба подхода и предсказывать
свойства соединений тяжёлых элементов с рекордной
точностью**

поиск ЭДМ электрона на молекуле ThO



Измеряется
энергетический

сдвиг: $\Delta E = E1 - E2$

[ACME Collaboration, Nature **562**, 355 (2018)]:

$$d_e < \frac{\Delta E}{79.9} = 1.1 \cdot 10^{-29} \text{ e} \cdot \text{cm}$$

L.V. Skripnikov, J. Chem. Phys. 145(21) 214301 (2016)

$e\text{EDM}$ ($e \cdot \text{cm}$)



MSSM
(SuSy)

Other
SuSy

Left
-
right

Multi-
Higgs

Текущее
ограничение

$$d_e < 1.1 \times 10^{-29} e \cdot \text{cm}$$

Планируемые
эксперименты

- ✧ MSSM – минимальная суперсимметричная (SuSy) CM
- ✧ Other SuSy – другие суперсимметричные расширения CM
- ✧ Left-Right – модели лево-правой симметрии
- ✧ Multi-Higgs – CM с более чем одним бозоном Хиггса

Стандартная
модель

Предсказания СМ и ее
популярных расширений

решена “загадка сверхтонкой структуры Вi”

$$\mu(\text{old}) = 4.1106(2) \mu_N$$

$$\mu(\text{new}) = 4.092(2) \mu_N$$

$$\mu = \overset{\text{эксперимент}}{\mu_{\text{uncorrected}}} / \overset{\text{Теория}}{(1-\sigma)}$$

$$\Delta'E = \Delta E^{(2s)} - \xi \Delta E^{(1s)}$$

Lochmann [2014]

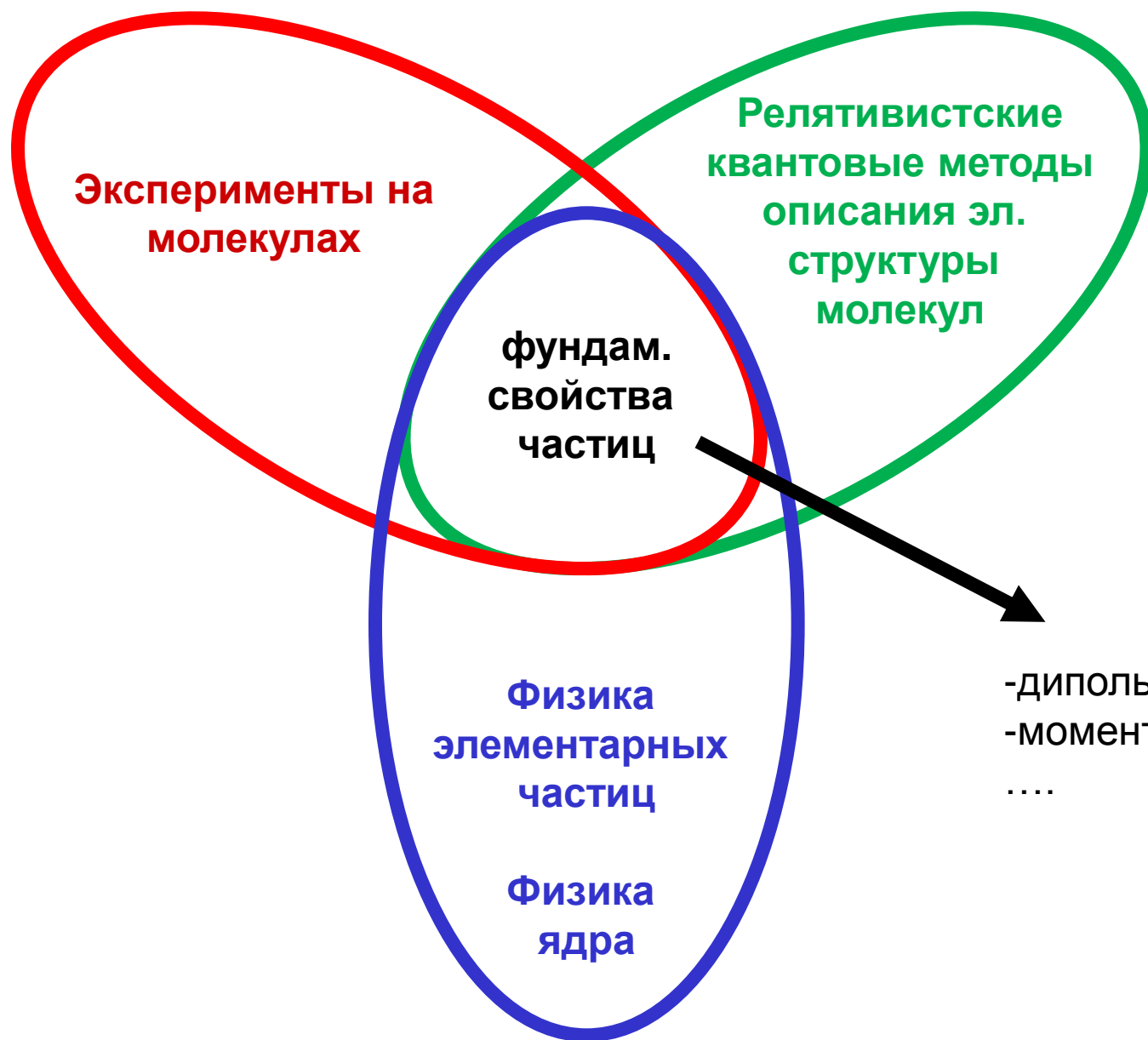
This work [2018]

Ullmann et al,
Experiment [2017]

Volotka [2012]

Shabaev [2001]

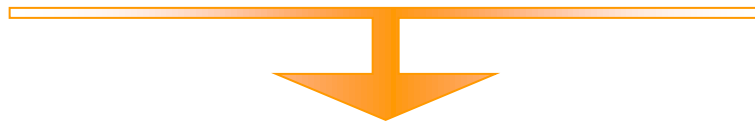




-дипольный момент электрона
-моменты ядер
....

Что ещё может дать теория?

- ✓ Предложить новые перспективные системы для поиска ЭДМ электрона и других эффектов нарушения симметрий фундаментальных взаимодействий
- ✓ Проверить экспериментальные данные – в ряде случаев теория может оказаться точнее эксперимента. Возможны ошибки обработки исходных эксп. данных
- ✓ Можно предложить оптимальные условия проведения эксперимента



Все эти задачи мы успешно решаем

Спасибо за внимание!

Спасибо за поддержку!

