

## К ПОИСКУ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА ЭЛЕКТРОНА: НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ $PtH^+$

Л.В.Скрипников<sup>1</sup>, А.Н. Петров<sup>1,2</sup>, А.В.Титов<sup>1</sup>, Н.С. Мосягин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ПИЯФ, г. Гатчина

<sup>2</sup> СПбГУ, г. Петродворец, Санкт-Петербург

В последние десятилетия бурно развивается новое направление – создание «экзотических» ультрахолодных молекул, их катионов и удержание их в ловушке. Оно предполагает новые методы манипулирования и исследования свойств таких молекул, позволяет решать новые классы фундаментальных задач. Одной из таких задач является измерение электрического дипольного момента электрона ( $eЭДМ$ ). Существование  $eЭДМ$  и различная его величина предсказывается многими современными фундаментальными физическими теориями, поэтому для их проверки важно его экспериментальное обнаружение, основанное на измерении энергии взаимодействия  $eЭДМ$  с внутренним эффективным электрическим полем полярной молекулы, содержащей тяжёлый атом. В таких молекулах могут быть достигнуты значения полей на несколько порядков выше тех, что достижимы в лаборатории. Однако для нахождения самой величины  $eЭДМ$  необходимо знать и величину внутреннего поля, которую можно вычислить только методами квантовой химии. Цель работы – вычисление этого поля в катионе  $PtH^+$ , предложенном к рассмотрению в [1].

В работе выполнены расчёты потенциальных кривых основного и возбуждённых электронных состояний  $PtH^+$ ; определены равновесные расстояния. Для расчёта эффективного поля была применена методика, аналогичная предложенной нами ранее [2], и состоящая из следующих этапов: выполняется корреляционный релятивистский расчёт валентной электронной структуры с использованием метода обобщённого реляти-вистского псевдопотенциала, позволяющего наиболее экономично использовать вычислительные ресурсы, обеспечивая при этом самую высокую точность расчёта. Далее восстанавливается основная структура и вычисляется эффективное поле, действующее на электрон. Рассчитанное значение этого поля составляет 28 GV/cm, что существенно отличается от оценки, сделанной в работе [1] – 73 GV/cm. Это сравнение показывает, что для аналогичных задач необходимо использовать наиболее современные и прецизионные методы, т.к. экспериментальное уточнение этих свойств в данном случае невозможно.

*Работа поддержана грантом РФФИ 09-03-01034-а. АП благодарит Минобрнауки РФ (Программа Развитие научного потенциала высшей школы, грант № 2.1.1/1136)*

1. Meyer E.R., Bohn J.L., Deskevich M.P. Phys. Rev. A. 73. 062108 (2006)
2. Titov A.V., Mosyagin N.S., Petrov A.N., Isaev T.A., DeMille D.P. Progr. Theor. Chem. Phys. B~15 253-283 (2006)