

Санкт-Петербургский государственный университет

КУРЧАВОВ Игорь Павлович

Выпускная квалификационная работа

Расчет катиона HfF^+ для поиска эффектов несохранения четности

Уровень образования: *магистратура*

Направление *03.04.02 «Физика»*

Основная образовательная программа *ВМ.5511.2018«Физика»*

Научный руководитель:
научный сотрудник,
кафедра квантовой механики,
к.х.н., доцент,
Петров Александр Николаевич

Рецензент:
научный сотрудник,
ПИЯФ им. Б.П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт»,
к.ф.-м.н., без у/з,
Демидов Юрий Андреевич

Санкт-Петербург
2020

Содержание

1	Введение	3
2	Методы	4
3	Результаты	6
4	Заключение	14
5	Список литературы	14

Аннотация

В работе были рассчитаны энергетические сдвиги, возникающие из-за взаимодействий, которые нарушают инвариантность относительно обращения времени (\mathcal{T}) и инверсии пространства (\mathcal{P}), g-факторы и энергии как функции внешних электрических и магнитных полей для подуровней сверхтонкой структуры основного вращательного уровня электронного состояния ${}^3\Delta_1$ для иона ${}^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$. Расчеты могут быть использованы для планирования эксперимента для измерения магнитного квадрупольного момента ${}^{177}\text{Hf}$ и интерпретации полученных данных.

Abstract

The energy shifts due to interactions violating time (\mathcal{T}) reversal invariance and parity (\mathcal{P}) symmetry, g-factors and energies for the hyperfine levels of the ground rotational level of the ${}^3\Delta_1$ electronic state of ${}^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ ion are calculated as functions of the external electric and magnetic fields. The calculations can be used to plan an experiment to measure the magnetic quadrupole moment of ${}^{177}\text{Hf}$ nucleus and to interpret the obtained data.

1 Введение

Для поиска физики за пределами Стандартной Модели (СМ) или её подтверждения особый интерес представляет изучение перманентного электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона. По его обнаружению проводятся эксперименты с захваченными ионами [1], к которым относится катион ${}^{180}\text{HfF}^+$.

ЭДМ электрона существует из-за нарушения \mathcal{P} , \mathcal{T} инвариантности, возникающее в СМ из-за нарушающих эту инвариантность компонентах СКМ-матрицы при рассмотрении слабого взаимодействия, при этом ЭДМ оказывается очень малым. Другие теории, расширяющие СМ, дают большее значение ЭДМ. Отметим, что нарушение \mathcal{T} -инвариантности эквивалентно \mathcal{CP} -инвариантности вследствие \mathcal{CPT} -теоремы, которая выполнена для любых физических явлений.

Текущее ограничение $|d_e| < 1.3 \times 10^{-28} \text{ e}\cdot\text{cm}$ (90% точности) для электронного ЭДМ было получено из эксперимента с захваченными ионами ${}^{180}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ с бесспиновым изотопом ${}^{180}\text{Hf}$ [2]. Измерения проводились на основном вращательном уровне $J = 1$ в метастабильном электронном состоянии ${}^3\Delta_1$. Учитывая большой потенциал для изучения эффектов нарушения \mathcal{T} , \mathcal{P} на ионах HfF^+ в работе [3] было предложено использовать ионы ${}^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$

и $^{179}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$, чтобы измерить магнитный квадрупольный момент (МКМ) ядер ^{177}Hf и ^{179}Hf со спинами $I = 7/2$ и $I = 9/2$ соответственно.

\mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетные эффекты, возникающие в результате взаимодействия МКМ, электронного ЭДМ и скалярного–псевдоскалярного электрон–ядерного нейтрального тока (СП) в $^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ и в $^{179}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ были рассмотрены в работе [4]. Была исследована роль сверхтонкого взаимодействия, был рассчитан МКМ-сдвиг как функция внешнего статического электрического поля, и было показано, что МКМ-эффекты можно отличить от электронного ЭДМ из-за неявной зависимости МКМ-сдвига от сверхтонкого подуровня. Эффект МКМ был выражен в терминах ЭДМ протона, вакуумного угла КХД θ и кваркового хромо-ЭДМ. Было подтверждено, что измерение ядерного МКМ является перспективным для установления новых ограничений на эти свойства.

Важной характеристикой экспериментов на HfF^+ является то, что для захвата ионов используются *вращающиеся* магнитные и электрические поля. В этом случае магнитное поле, в отличие от экспериментов в статических полях, не является вспомогательным инструментом, но должно обеспечивать ненулевой сдвиг энергии из-за возможных \mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетных эффектов [2, 5]. Поэтому чтобы полностью поляризовать молекулу и получить максимальный \mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетный эффект, как вращающиеся электрические, так и магнитные поля должны быть достаточно большими. Величина насыщающегося магнитного поля сильно зависит от используемого зеемановского подуровня иона и их значения необходимы для планирования эксперимента. Основная цель данной работы - изучить чувствительность зеемановских подуровней различных сверхтонких компонент основного вращательного уровня состояния $^3\Delta_1$ в $^{177}\text{HfF}^+$ к \mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетным свойствам во внешних переменных электрических и магнитных полях, чего раньше не было сделано.

Чтобы заселить требуемые уровни в экспериментах, нужно знать структуру энергетических уровней, в дальнейшем знание g-факторов помогает контролировать и подавлять систематические эффекты от неучтенного магнитного поля [6, 4]. Поэтому расчеты этих свойств во внешних полях также сделаны в данной работе.

2 Методы

В данной работе молекулярный гамильтониан записывается во внешних полях для $^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ в виде:

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{mol}} = \hat{\mathbf{H}}_{\text{el}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{rot}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{hfs}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{ext}}, \quad (1)$$

Расчет электронной структуры уже был ранее произведен методом обобщенного релятивистского потенциала остова (ОРЭПО), в котором лежит идея замораживания химически неактивного атомного остова после выполнения расчета атома. В данном методе электронный гамильтониан записывается в виде

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{el}} = \sum_{i_v} [h^{\text{Schr}}(i_v) + U^{\text{Ef}}(i_v)] + \sum_{i_v > j_v} \frac{1}{r_{i_v j_v}}, \quad (2)$$

U^{Ef} - оператор ОРЭПО, индексы i_v и j_v пробегают только по валентным и явно включенным в ОРЭПО расчет внешним остовным электронам,

$$h^{\text{Schr}} = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 + V \quad (3)$$

есть нерелятивистский одноэлектронный гамильтониан Шрёдингера. При вычислении оператора сверхтонкого структуры, ЭДМ, МКМ выполняется восстановление базисных спиноров.

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{rot}} = B_{\text{rot}}\mathbf{J}^2 - 2B_{\text{rot}}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}^e) \quad (4)$$

учитывает вращение, $B_{\text{rot}} = 0.2989 \text{ cm}^{-1}$ [7] это вращательная постоянная, \mathbf{J} – полный молекулярный угловой момент за вычетом ядерных спинов, \mathbf{J}^e – полный угловой момент электронной подсистемы,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{\text{hfs}} = & g_{\text{F}}\mu_N I^2 \cdot \sum_i \left(\frac{\alpha_i \times r_{2i}}{r_{2i}^3} \right) + g_{\text{Hf}}\mu_N I^1 \cdot \sum_i \left(\frac{\alpha_i \times r_{1i}}{r_{1i}^3} \right) \\ & - e^2 \sum_q (-1)^q \hat{Q}_q^2(I^1) \sum_i \sqrt{\frac{2\pi}{5}} \frac{Y_{2q}(\theta_{1i}, \phi_{1i})}{r_{1i}^3} \end{aligned} \quad (5)$$

это сверхтонкое взаимодействие, которое включает магнитное сверхтонкое взаимодействие электронов с обоими ядрами, и взаимодействие с магнитным квадрупольным моментом ^{177}Hf , $g_{\text{F}} = 5.25773$ и $g_{\text{Hf}} = 0.2267$ это ^{19}F и ^{177}Hf ядерные g -факторы, μ_N это ядерный магнетон, $I^1 = 7/2$ это ядерный спин для ^{177}Hf и $I^2 = 1/2$ это ядерный спин ^{19}F , α это вектор матриц Дирака, r_{1i} (r_{2i}) это радиус-вектор для i -ого электрона в координатной системе центрированной на ядре $\text{Hf}(\text{F})$, $\hat{Q}_q^2(I^1)$ это оператор квадрупольного момента для ядра ^{177}Hf ,

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{ext}} = \mu_B(\mathbf{L}^e - g_s \mathbf{S}^e) \cdot \mathbf{B} - g_{\text{F}} \frac{\mu_N}{\mu_B} I^2 \cdot \mathbf{B} - \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - g_{\text{Hf}} \frac{\mu_N}{\mu_B} I^1 \cdot \mathbf{B} \quad (6)$$

описывает взаимодействие со внешними полями, $g_s = -2.0023$ это g -фактор для свободного электрона, \mathbf{D} это оператор дипольного момента, μ_B это магнетон Бора.

В данной работе используется два типа вычислений: при наличии статичного ($\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{static}}$, $\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\text{static}}$) или вращающегося против часовой стрелки вокруг оси \hat{z} [5]:

$$\mathbf{E}(t) = \mathcal{E}_{\text{rot}}(\hat{x}\cos(\omega_{\text{rot}}t) + \hat{y}\sin(\omega_{\text{rot}}t)), \quad (7)$$

$$\mathbf{B}(t) = \mathcal{B}_{\text{rot}}(\hat{x}\cos(\omega_{\text{rot}}t) + \hat{y}\sin(\omega_{\text{rot}}t)) \quad (8)$$

электрических и магнитных полей. Ниже полагается $\omega_{\text{rot}}/2\pi = +250, +150$ кГц как было принято в эксперименте на ионах $^{180}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ [2].

Собственные значения и собственные функции получены численной диагонализацией молекулярного гамильтониана ($\hat{\mathbf{H}}_{\text{mol}}$) с базисным набором электронно-вращательных волновых функций

$$\Psi_{\Omega}\theta_{M,\Omega}^J(\alpha,\beta)U_{I^1M^1}^{\text{Hf}}U_{I^2M^2}^{\text{F}}. \quad (9)$$

Здесь Ψ_{Ω} это электронная волновая функция, $\theta_{M,\Omega}^J(\alpha,\beta) = \sqrt{(2J+1)/4\pi}D_{M,\Omega}^J(\alpha,\beta,\gamma=0)$ вращательная волновая функция, α, β, γ углы Эйлера, $U_{I^1M^1}^{\text{Hf}}$ и $U_{I^2M^2}^{\text{F}}$ это Hf и F ядерные спиновые волновые функции, M (Ω) это проекция молекулярного углового момента молекулы на лабораторную ось \hat{z} (межъядерную ζ) и $M^{1,2}$ это проекция ядерных угловых моментов на ту же ось.

Низколежащие электронные состояния $^3\Delta_1$, $^3\Delta_2$, $^3\Pi_{0+}$ и $^3\Pi_{0-}$ были включены в вычисления. Основным интересом представляет состояние $^3\Delta_1$ и таким образом сверхтонкое взаимодействие только для этого состояния рассмотрено. Как было показано раньше в [4] учет неадиабатического взаимодействия с $^3\Delta_2$, $^3\Pi_{0+}$ и $^3\Pi_{0-}$ важно для аккуратного вычисления g-факторов и других связанных с ним свойств состояния $^3\Delta_1$.

Следуя [5], учет взаимодействия с вращающимися полями выполнен с помощью перехода во вращающуюся систему координат. Электронные матричные элементы, требующиеся для вычисления $\hat{\mathbf{H}}_{\text{mol}}$ на базисном наборе (9) взяты из работ [4, 8].

3 Результаты

Сверхтонкая структура основного вращательного уровня $J = 1$ состояния $^3\Delta_1$, вычисленная в отсутствие внешних полей, показана на рис. 1. Представленные уровни хорошо описываются схемой связи:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= \mathbf{J} + \mathbf{I}^1 \\ \mathbf{F} &= \mathbf{F}_1 + \mathbf{I}^2. \end{aligned} \quad (10)$$

Для $J = 1$, $^3\Delta_1$, $^{177}\text{HfF}^+$ возможно $F_1 = 5/2$, $F_1 = 7/2$, $F_1 = 9/2$. Сверхтонкое взаимодействие с ядром фтора расщепляет далее уровни энергий с полным моментом $F = F_1 \pm 1/2$. На рис. 1 также изображены Ω -дублеты с противоположной четностью ($\Omega = \pm 1$), возникающие по причине вращения молекулы и электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия.

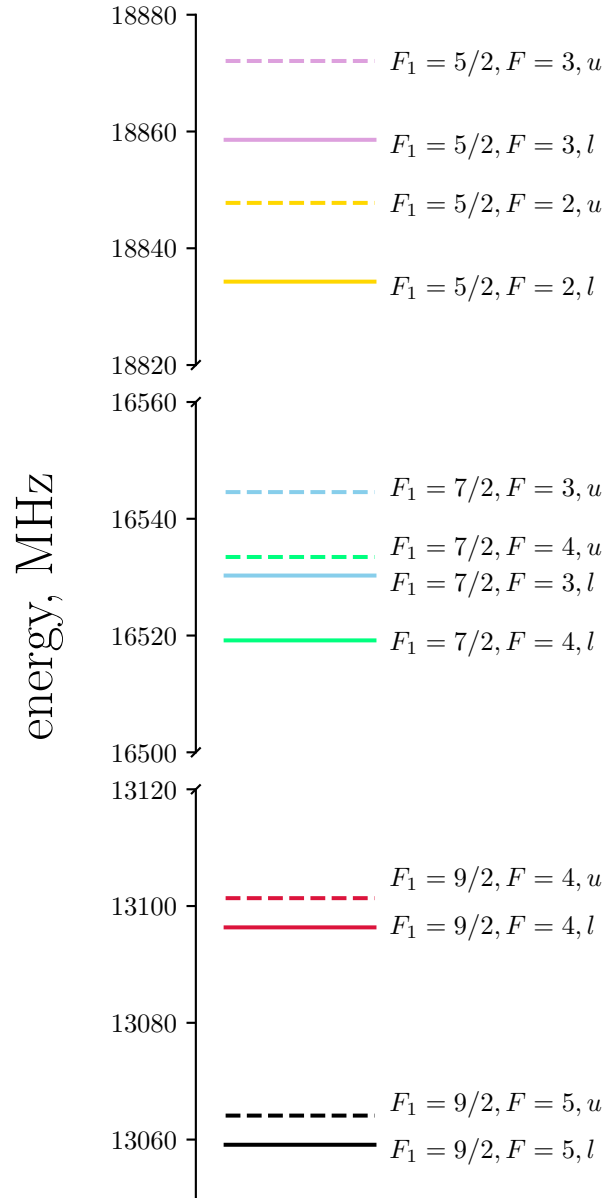


Рис. 1: Схема уровня ${}^3\Delta_1 J = 1$ для ${}^{177}\text{Hf}{}^{19}\text{F}^+$, включая Ω (проекция полного момента на межъядерную ось) удвоение, которое появляется из-за вращения молекулы и электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия. Здесь пунктирные линии для верхнего Ω дублета и сплошная для нижнего.

g-факторы в отсутствии внешних полей и в присутствии внешнего постоянного электрического поля были рассчитаны методом конечного поля. Определение g-факторов такое, чтобы зеемановский сдвиг был равен [4, 9]:

$$E_{\text{Zeeman}} = -g(E_{\text{static}})\mu_B B_{\text{static}} m_F, \quad (11)$$

где m_F это проекция полного углового момента F на лабораторную ось \hat{z} .

Простая аналитическая формула для g-фактора при отсутствии электрического поля была получена в этой работе согласно со схемой связи (10):

$$g = g^1 \frac{F(F+1) + F_1(F_1+1) - I^2(I^2+1)}{2F_1(F_1+1)J(J+1)} + g_F \frac{\mu_N}{\mu_B} \frac{F(F+1) - F_1(F_1+1) + I^2(I^2+1)}{2F(F+1)}, \quad (12)$$

где

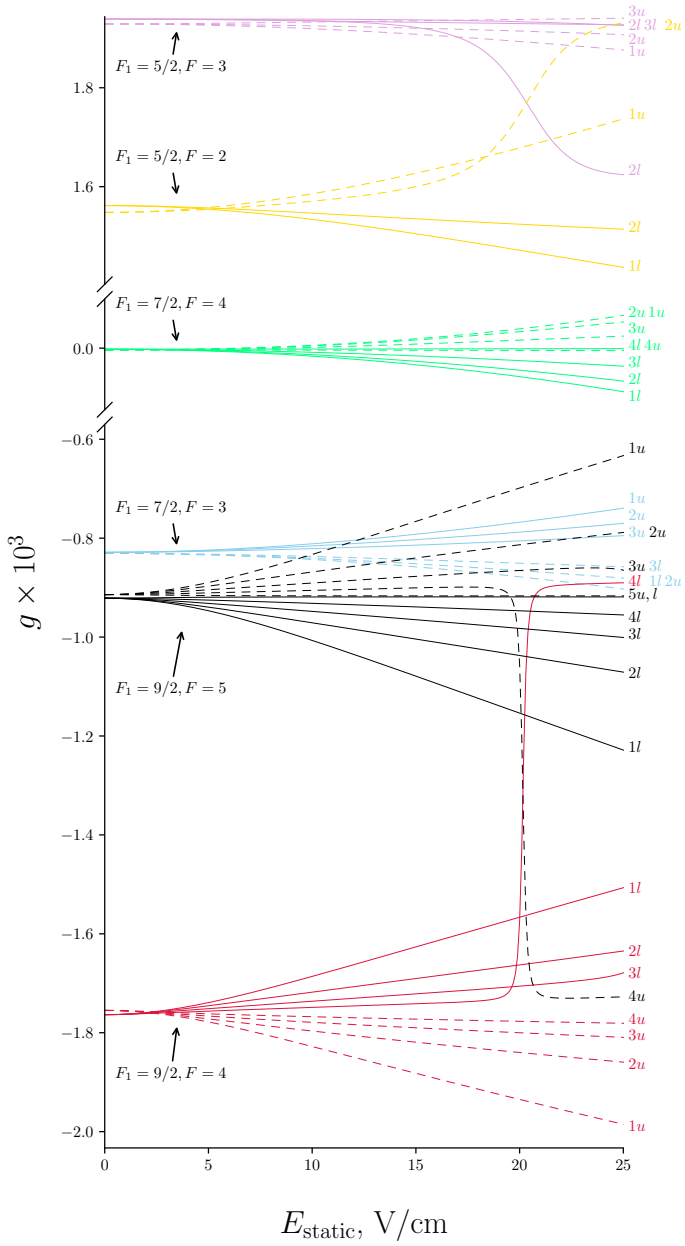
$$g^1 = -G_{\parallel} \frac{F_1(F_1+1) + J(J+1) - I^1(I^1+1)}{2F_1(F_1+1)J(J+1)} + g_{\text{Hf}} \frac{\mu_N}{\mu_B} \frac{F_1(F_1+1) - J(J+1) + I^1(I^1+1)}{2F_1(F_1+1)}. \quad (13)$$

Здесь μ_N это ядерный магнетон, g_{Hf} , g_F это ^{177}Hf и ^{19}F ядерные g-факторы. G_{\parallel} это матричный элемент, который отвечает за электронный вклад:

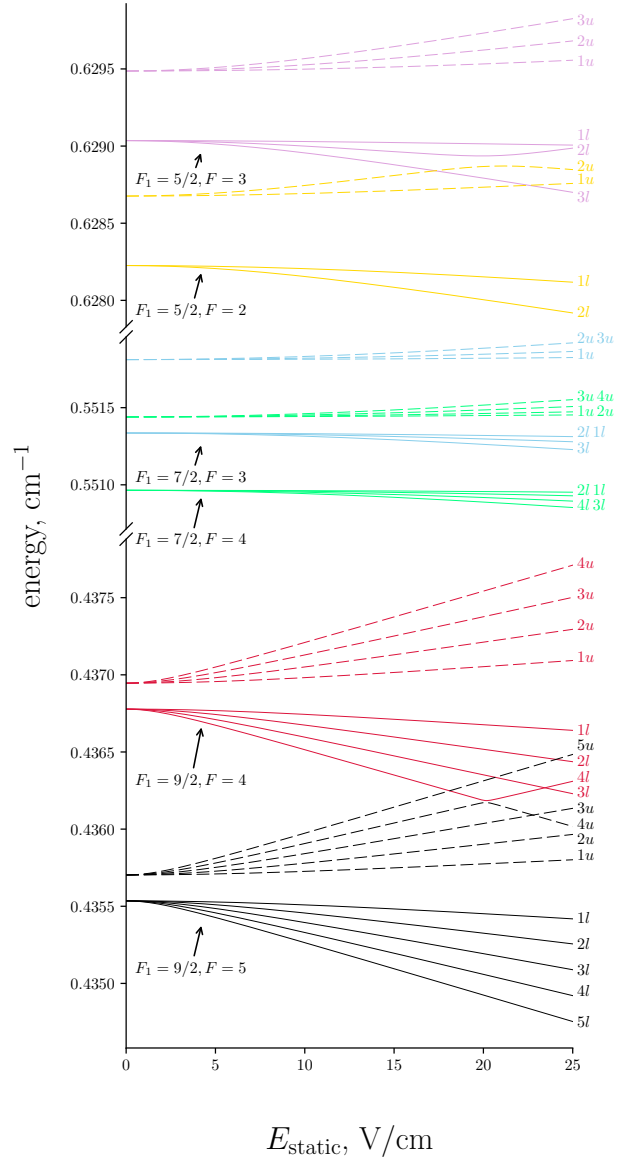
$$G_{\parallel} = \frac{1}{\Omega} \langle \Psi_{3\Delta_1} | \hat{L}_{\zeta}^e - g_s \hat{S}_{\zeta}^e | \Psi_{3\Delta_1} \rangle = 0.011768 \quad (14)$$

Уравнение (12) не учитывает неадиабатическое взаимодействие между различными электронными состояниями и сверхтонкое взаимодействие между различными сверхтонкими подуровнями (принадлежащие тому же или другим вращательным уровням). Таблица 1 показывает результаты численных вычислений. В численных вычислениях учитывались неадиабатическое взаимодействие $^3\Delta_1$ с $^3\Delta_2$, $^3\Pi_1$, $^1\Pi_1$ и сверхтонкое взаимодействие различных вращательных состояний. Можно видеть, что численные вычисления отличаются от значений, которые даёт формула (12)-(13) на 4-28%, кроме $F_1 = 7/2$, $F = 4$, где различие очень большое из-за частичного сокращения различных вкладов. В последней столбце таблицы 1 приведены результаты, где неадиабатическое взаимодействие пренебрежено.

На рисунке 2 а) изображены g-факторы для различных проекций полного момента F как функции постоянного электрического поля. График уровней энергии на рисунке 2 б) показывает, что резкое изменение в g-факторах для уровней $F_1 = 9/2$, $F = 4$, $m_F = 4$ и $F_1 = 9/2$, $F = 5$, $m_F = 4$, $F_1 = 5/2$; $F = 2$, $m_F = 2$ и $F_1 = 5/2$, $F = 3$, $m_F = 2$ возникают из-за псевдопересечения их уровней и подтверждает общее утверждение, что уровни с одинаковой симметрией не могут пересечься. Уровни с различными проекциями m_F не взаимодействуют и могут пересекаться. g-факторы для верхнего и нижнего Ω -дублетов становятся равными при $E_{\text{static}} = 2-6$ В/см для $F_1 = 9/2$, $F = 4$, $F_1 = 7/2$, $F = 4$ и $F_1 = 5/2$, $F = 3$.



a)



b)

Рис. 2: g-факторы (панель а) и уровни энергии (панель б) для различных проекций как функции электрического поля. Из рисунка можно увидеть, что порядок энергии изменяется и уровни смешиваются, когда электрическое поле достигает приблизительно 20 В/см. Равенство g-факторов может уменьшить систематические ошибки в экспериментах.

Таблица 1: Значения g -факторов для уровня ${}^3\Delta_1$, $J = 1$, полученное разными подходами при отсутствии полей.

F_1	F	g^a	g^b	$\delta g\%$	g^c
5/2	3	0.00201	0.00193	-4%	0.001883
	2	0.00167	0.00155	-7%	0.001484
7/2	3	-0.000648	-0.000830	-28%	-0.0008458
	4	0.000132	-0.00000294		-0.00001591
9/2	4	-0.00162	-0.00176	-9%	-0.001743
	5	-0.000804	-0.000918	-14%	-0.0009043

^a Уравнение (12)

^b численный расчет

^c численный расчет, неадиабатическое взаимодействие между различными электронными состояниями пренебрежено.

Одной из главных целей данной работы является вычисление сдвигов энергии зеемановских подуровней из-за \mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетного электромагнитного взаимодействия электронного ЭДМ и ядерного магнитного квадрупольного момента с электронами во внешних вращающихся электрических и магнитных полях¹. Сдвиги энергии были рассчитаны как средние значения соответствующих \mathcal{T} , \mathcal{P} -нечетных гамильтонианов (см. [8]) на волновых функциях, полученных как описано в предыдущей главе. Соответствующие вычисления для сдвигов уровней как функций вращающегося магнитного поля для вращающегося электрического поля $\mathcal{E}_{\text{tot}} = 24$ В/см для различных зеемановских подуровней представлены на рисунках 3, 4. Уровни с $m_F = 0$ не чувствительны к электронному ЭДМ и МКМ и не представлены на графиках. В случае вращающихся полей m_F означает проекцию полного момента на направление полей. Результаты представлены в единицах $d_e E_{\text{eff}}$ для электронного ЭДМ и MW_M для сдвигов МКМ соответственно. Здесь E_{eff} это эффективное электрическое поле, вычисляемое как

$$E_{\text{eff}} = \langle \Psi_{3\Delta_1} | \sum_i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\sigma_i E_i \end{pmatrix} | \Psi_{3\Delta_1} \rangle, \quad (15)$$

σ это матрицы Паули, E_i – внутреннее молекулярное электрическое поле, действующее на

¹Зависимость сдвига энергии из-за СП взаимодействия точно такое же, как для случая электронного ЭДМ [8].

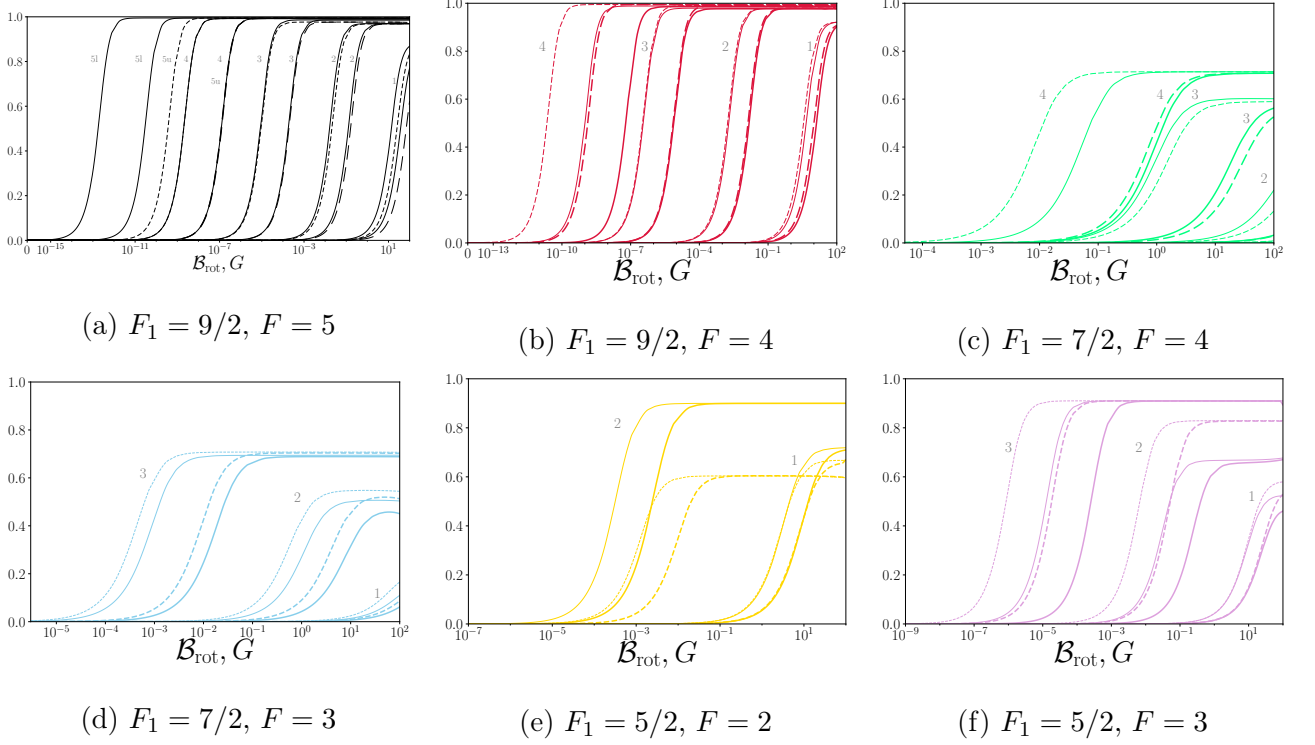


Рис. 3: Сдвиг энергии, наведенный электронным ЭДМ [5], как функция вращающихся магнитных полей для разных проекций m_F (числа серым цветом на графике). В вычислениях $\mathcal{E}_{\text{rot}} = 24$ В/см. Тонкая линия для $\omega = 150$ кГц и толстая для $\omega = 250$ кГц.

i электрон, M это магнитный квадрупольный момент ядра ^{177}Hf ,

$$W_M = \frac{3}{2} \frac{1}{\Omega} \langle \Psi_{3\Delta_1} | \sum_i \left(\frac{\alpha_i \times \mathbf{r}_i}{r_i^5} \right) r_{\zeta} | \Psi_{3\Delta_1} \rangle, \quad (16)$$

Значения $E_{\text{eff}} = 24$ ГВ/см [10, 11], 22.5 ГВ/см [12], 22.7 ГВ/см [13], $W_M = 0.494 \frac{10^{33} \text{Hz}}{e \text{ cm}^2}$ [14] были получены ранее в предыдущих работах. Как можно видеть из рисунков 3 и 4 графики для электронного ЭДМ и МКМ похожи и насыщающее магнитное поле сильно зависит от значения m_F . Объяснение следующее.

Чтобы достигнуть предел насыщения для сдвигов ЭДМ и МКМ, лабораторное электрическое поле \mathcal{E}_{rot} должно быть достаточно большим, для того чтобы полностью поляризовать молекулу. Далее, вращающееся электрическое поле связывает зеемановские подуровни m_F и $-m_F$ и превращает вырождение между ними (в случае статичного электрического поля) в расщепление между новыми собственными состояниями, которые представляют из себя когерентную суперпозицию m_F и $-m_F$ с одинаковыми весами. Поскольку m_F и $-m_F$ подуровни имеют разные знаки для сдвигов ЭДМ и МКМ, значение для вращающегося магнитного поля, \mathcal{B}_{rot} , должно быть также достаточно большим, чтобы m_F было хорошим квантовым числом. Значения для рассчитанных расщеплений, описанных выше, для

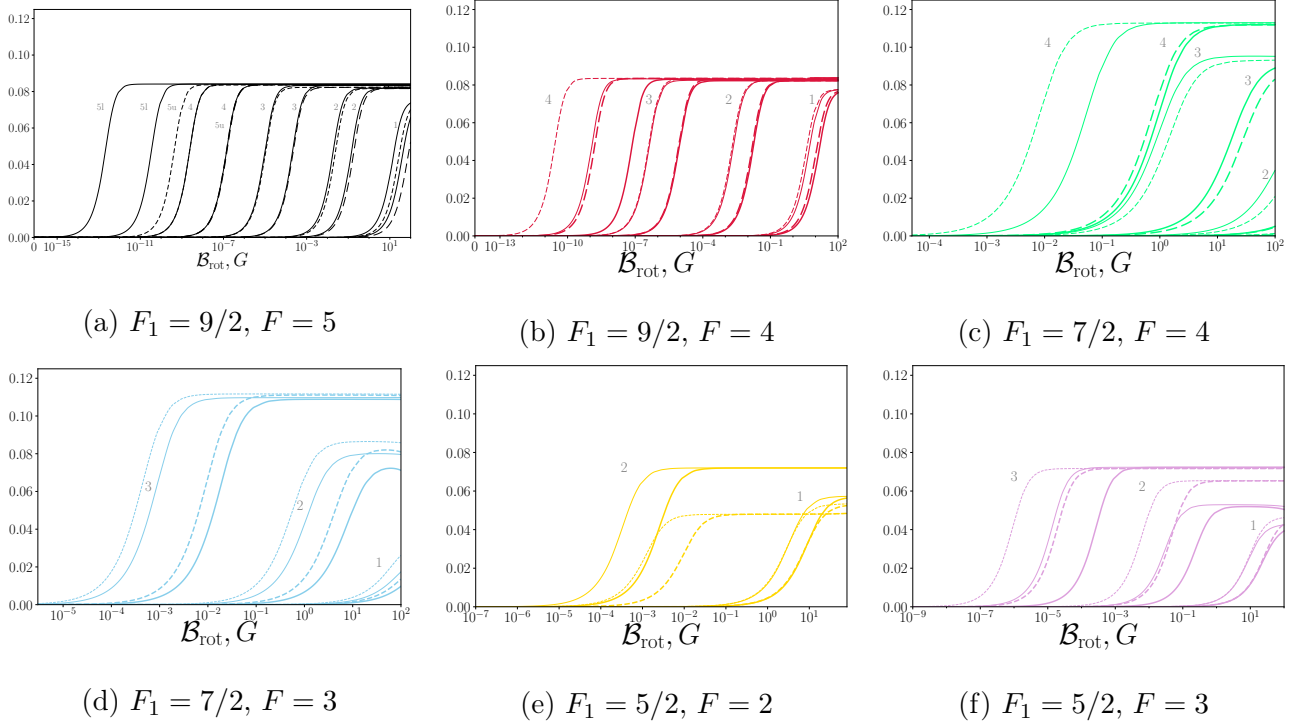


Рис. 4: Сдвиг энергии, наведенный МКМ [5], как функция вращающихся магнитных полей для разных проекций m_F (числа серым цветом на графике). В вычислениях $\mathcal{E}_{\text{rot}} = 24$ В/см. Тонкая линия для $\omega = 150$ кГц и толстая для $\omega = 250$ кГц.

верхнего ΔE_u и нижнего ΔE_l Ω -дублетов даны в таблице 2. $\Delta E_{u,l}$ изменяется в широком интервале, по порядку от 10^{-15} до 10^{-1} МГц. Чем больше m_F , тем меньше расщепление [15], и меньшее B_{rot} нужно для насыщения. Результаты показывают, что насыщение не достигается для некоторых уровней с $m_F = 1, 2$ даже при $B_{\text{rot}} = 100$ Г.

$J = 1$ $^{180}\text{HfF}^+$ становится почти полностью поляризованным при $\mathcal{E}_{\text{rot}} > 4$ В/см [7]. $^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ требует намного большее электрическое поле для поляризации из-за большого эффекта Ω -удвоения, возникающего по причине наличия электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия [8]. Для текущих вычислений было положено $\mathcal{E}_{\text{rot}} = 24$ В/см. Если потребуется, вычисления могут быть проведены для другого электрического поля методом, описанным в работе. Можно заметить, что электрические поля для эксперимента должны быть выбраны с осторожностью. Для некоторых значений электрических полей зеemanовские подуровни разных сверхтонких состояний начинают сильно взаимодействовать (в точках псевдопересечения на рисунке 2), что портит структуру Ω -удвоения, полезную для подавления различных систематических ошибок.

Таблица 2: Значения ΔE_u и ΔE_l . В вычислениях $\mathcal{E}_{\text{rot}} = 24$ В/см.

F_1	F	m_F	ω , kHz	ΔE_l , MHz	ΔE_u , MHz	
9/2	5	1	150	6.66243×10^{-2}	6.60901×10^{-2}	
			250	1.78572×10^{-1}	1.77226×10^{-1}	
		2	150	1.58640×10^{-4}	1.52535×10^{-4}	
			250	1.20935×10^{-3}	1.16315×10^{-3}	
		3	150	1.19590×10^{-7}	1.09330×10^{-7}	
			250	2.53924×10^{-6}	2.32070×10^{-6}	
		4	150	3.64828×10^{-11}	6.62874×10^{-11}	
			250	2.15341×10^{-9}	3.83477×10^{-9}	
		5	150	4.44089×10^{-15}	7.91900×10^{-12}	
			250	6.41265×10^{-13}	2.71951×10^{-9}	
	4	1	150	3.02679×10^{-2}	3.02678×10^{-2}	
			250	8.29207×10^{-2}	8.29175×10^{-2}	
		2	150	2.95556×10^{-5}	2.97533×10^{-5}	
			250	2.26799×10^{-4}	2.28309×10^{-4}	
		3	150	8.42976×10^{-9}	8.59549×10^{-9}	
			250	1.79483×10^{-7}	1.83383×10^{-7}	
4		150	1.67590×10^{-11}	7.58504×10^{-13}		
		250	1.02960×10^{-9}	4.49258×10^{-11}		
7/2	4	1	150	3.56013×10^{-1}	3.64874×10^{-1}	
			250	5.54187×10^{-1}	5.45227×10^{-1}	
		2	150	4.58698×10^{-2}	6.19217×10^{-2}	
			250	1.98629×10^{-1}	2.33366×10^{-1}	
		3	150	3.72187×10^{-4}	4.30050×10^{-4}	
			250	6.84522×10^{-3}	7.94068×10^{-3}	
		4	150	5.13365×10^{-7}	4.05367×10^{-7}	
			250	2.79358×10^{-5}	2.24608×10^{-5}	
	3	1	150	2.50847×10^{-1}	2.18939×10^{-1}	
			250	4.70865×10^{-1}	4.37961×10^{-1}	
		2	150	6.69897×10^{-3}	3.88734×10^{-3}	
			250	4.41296×10^{-2}	2.69503×10^{-2}	
		3	150	8.31842×10^{-6}	4.50228×10^{-6}	
			250	1.71076×10^{-4}	9.29105×10^{-5}	
	5/2	2	1	150	1.88499×10^{-2}	1.99718×10^{-2}
				250	5.18187×10^{-2}	5.48290×10^{-2}
		2	150	4.02012×10^{-6}	1.92455×10^{-5}	
			250	3.09512×10^{-5}	1.50314×10^{-4}	
3		1	150	6.73063×10^{-2}	7.06996×10^{-2}	
			250	1.74904×10^{-1}	1.85079×10^{-1}	
		2	150	4.03793×10^{-4}	9.53715×10^{-5}	
			250	3.07170×10^{-3}	7.29433×10^{-4}	
3		150	3.12733×10^{-7}	2.11585×10^{-8}		
		250	6.26883×10^{-6}	4.50623×10^{-7}		

4 Заключение

Рассчитаны уровни энергии и g-факторы как функции электрического поля для основного вращательного уровня $J = 1$ электронного состояния ${}^3\Delta_1$ катиона ${}^{177}\text{Hf}^{19}\text{F}^+$ с учетом сверхтонкого и неадиабатических взаимодействий. Найдены значения электрических полей, где g-факторы штарковских дублетов становятся равны. Наблюдались резкие изменения g-факторов в точках псевдопересечения сверхтонких уровней.

Была рассчитана зависимость сдвигов зеемановских подуровней вследствие взаимодействия с электронным ЭДМ и МКМ ядра ${}^{177}\text{Hf}$ от значений вращающегося электрического и магнитного полей. Сдвиг для некоторых подуровней с проекцией $m_F = 1, 2$ не достигает насыщения вплоть до магнитного поля в 100 Гс. Тогда как уровни с большими проекциями достигают предельного насыщения при очень малых магнитных полях $\sim 10^{-10\div-7}\text{Гс}$.

5 Список литературы

- [1] H. Loh, K. C. Cossel, M. C. Grau, K.-K. Ni, E. R. Meyer, J. L. Bohn, J. Ye, and E. A. Cornell. Precision spectroscopy of polarized molecules in an ion trap. *Science*, 342(6163):1220–1222, 2013.
- [2] William B. Cairncross, Daniel N. Gresh, Matt Grau, Kevin C. Cossel, Tanya S. Roussy, Yiqi Ni, Yan Zhou, Jun Ye, and Eric A. Cornell. Precision measurement of the electron’s electric dipole moment using trapped molecular ions. *Phys. Rev. Lett.*, 119:153001, Oct 2017.
- [3] V. V. Flambaum, D. DeMille, and M. G. Kozlov. Time-reversal symmetry violation in molecules induced by nuclear magnetic quadrupole moments. 113:103003, Sep 2014.
- [4] A. N. Petrov, L. V. Skripnikov, and A. V. Titov. Zeeman interaction in the ${}^3\Delta_1$ state of HfF^+ to search for the electron electric dipole moment. *Phys. Rev. A*, 96:022508, Aug 2017.
- [5] A. N. Petrov. Systematic effects in the HfF^+ -ion experiment to search for the electron electric dipole moment. *Phys. Rev. A*, 97:052504, May 2018.
- [6] A. N. Petrov, L. V. Skripnikov, A. V. Titov, N. R. Hutzler, P. W. Hess, B. R. O’Leary, B. Spaun, D. DeMille, G. Gabrielse, and J. M. Doyle. Zeeman interaction in $\text{ThO } H^3\Delta_1$ for the electron electric-dipole-moment search. *Phys. Rev. A*, 89:062505, Jun 2014.

- [7] Kevin C. Cossel, Daniel N. Gresh, Laura C. Sinclair, Tyler Coffey, Leonid V. Skripnikov, Alexander N. Petrov, Nikolai S. Mosyagin, Anatoly V. Titov, Robert W. Field, Edmund R. Meyer, Eric A. Cornell, and Jun Ye. Broadband velocity modulation spectroscopy of HfF^+ : Towards a measurement of the electron electric dipole moment. *Chem. Phys. Lett.*, 546(0):1 – 11, 2012.
- [8] A. N. Petrov, L. V. Skripnikov, A. V. Titov, and V. V. Flambaum. Evaluation of CP violation in HfF^+ . *Phys. Rev. A*, 98:042502, Oct 2018.
- [9] A. N. Petrov. Hyperfine and Zeeman interactions of the $a(1)[^3\Sigma_1^+]$ state of PbO . *Phys. Rev. A*, 83:024502, Feb 2011.
- [10] A N Petrov, N S Mosyagin, T A Isaev, and A V Titov. Theoretical study of HfF^+ in search of the electron electric dipole moment. 76:030501(R), 2007.
- [11] A N Petrov, N S Mosyagin, and A V Titov. Theoretical study of low-lying electronic terms and transition moments for HfF^+ for the electron EDM search. 79:012505, 2009.
- [12] L. V. Skripnikov. Communication: Theoretical study of HfF^+ cation to search for the t,p -odd interactions. 147(2):021101, 2017.
- [13] Timo Fleig. \mathcal{P}, \mathcal{T} -odd and magnetic hyperfine-interaction constants and excited-state lifetime for HfF^+ . *Phys. Rev. A*, 96:040502, Oct 2017.
- [14] L. V. Skripnikov, A. V. Titov, and V. V. Flambaum. Enhanced effect of cp -violating nuclear magnetic quadrupole moment in a HfF^+ molecule. 95:022512, Feb 2017.
- [15] A.E. Leanhardt, J.L. Bohn, H. Loh, P. Maletinsky, E.R. Meyer, L.C. Sinclair, R.P. Stutz, and E.A. Cornell. High-resolution spectroscopy on trapped molecular ions in rotating electric fields: A new approach for measuring the electron electric dipole moment. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 270(1):1 – 25, 2011.