

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ КАТИОНА $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$

Турченко П. Д.^{1,2}

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент Скрипников Л. В.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный университет

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
p.d.turchenko@ya.ru

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 24-12-00092 и «БАЗИС» № 24-1-1-36-3.

Введение

Недавно международной коллаборацией учёных на базе Массачусетского технологического института был инициирован эксперимент по измерению нарушающих пространственную чётность эффектов в катионе $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$ [1]. Для интерпретации результатов этого эксперимента необходимо прецизионное описание электронной структуры, а именно – расчёт молекулярного параметра, характеризующего такие эффекты в обозначенной системе. Ранее авторами настоящей работы описаны различные вклады в значение этого параметра. Однако, вносящая весомый вклад поправка на нулевые колебания не обсуждалась ввиду отсутствия в то время подходов, позволяющих её описать. В представленной работе приводятся результаты теоретического описания колебательно-вращательных спектров основного и возбуждённого взаимодействующих электронных состояний катиона $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$, благодаря которым представилось возможным описать эту колебательную поправку.

Основная часть

Описание двухатомной системы из 21 электрона сводится к решению электронной и колебательно-вращательной задач. Электронная задача решалась в рамках всецело релятивистских и скалярно-релятивистских *ab initio* подходов с выделением матричных элементов слабого взаимодействия и спин-орбитального взаимодействия при помощи метода связанных кластеров и линейного отклика. Потенциальные кривые строились путём аппроксимации аналитической функцией обобщённого потенциала Морзе [2]. Колебательно-вращательный строился в рамках метода изолированных колебательных каналов [3], а затем – в рамках метода связанных колебательных каналов [4].

Выводы

Полученные колебательно-вращательные спектры позволили рассчитать колебательную поправку к значению матричного элемента слабого взаимодействия в катионе $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$.

Литература

1. Karthein J., et al. Electroweak nuclear properties from single molecular ions in a Penning trap // *Physical Review Letters*. 2024. Vol. 133: 033003.
2. Lee E. G., et al. FTIR emission spectra, molecular constants, and potential curve of ground state GeO // *Journal of Molecular Spectroscopy*. Vol. 194. P. 197–202.
3. Lund J. R., Riley B. V. A sinc-collocation method for the computation of the eigenvalues of the radial Schrödinger equation // *IMA Journal of Numerical Analysis*. 1984. Vol. 4, no. 1. P. 83–98.
4. Hutson J. M. Coupled channel methods for solving the bound-state Schrödinger equation // *Computer Physics Communications*. 1994. Vol. 84, no. 1–3. P. 1–18.