

**ПОПРАВКА НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЧАСТОТЫ К МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПАРАМЕТРУ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩЕМУ ЯДЕРНО-СПИН-ЗАВИСИМЫЕ ЭФФЕКТЫ, НАРУШАЮЩИЕ ПРОСТРАНСТВЕННУЮ ЧЁТНОСТЬ В КАТИОНЕ  $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$**

**Турченко П. Д.<sup>1,2</sup>, Скрипников Л. В.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова  
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург  
*p.d.turchenko@vk.com*

В работе [1] обсуждается вычисление молекулярного параметра  $W_A$ , характеризующего ядерно-спин-зависимые эффекты, нарушающие пространственную чётность (NSD-PV) в катионе  $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$  для основного состояния. Одним из таких эффектов является ядерный анапольный момент [2], который доминирует в NSD-PV [3]. В работе [1] перечислены различные источники вкладов и их неопределённости, к которым также можно добавить поправку на колебания молекулы.

При учёте колебательной поправки в первом приближении становится ясно, что для её корректного описания необходимо учитывать неадиабатические эффекты. В адиабатическом приближении термы основного состояния  $\Sigma_{1/2}$  и возбуждённого состояния  $\Pi_{1/2}$  «отталкиваются» друг от друга из-за спин-орбитального взаимодействия. В результате функция  $W_A(R)$  (где  $R$  — межъядерное расстояние) имеет разрыв в точке «псевдопересечения» этих термов, что мешает корректному усреднению по колебательным частотам основного состояния. Следовательно, для решения неадиабатической колебательной задачи с использованием скалярно-релятивистских расчётов необходимо учитывать недиагональный матричный элемент спин-орбитального взаимодействия между этими термами.

В этой работе с использованием метода связанных каналов [4] обсуждается решение неадиабатической колебательной задачи. Также была написана программа на Python для расчёта неадиабатических колебательных волновых функций. Полученный результат необходим для интерпретации эксперимента, который готовится группой из MIT [5] и направлен на уточнение Стандартной модели в секторе слабых взаимодействий.

*Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 24-12-00092 и грантом «БАЗИС» № 24-1-1-36-3.*

Список литературы

1. P. D. Turchenko, L. V. Skripnikov, Molecular Parameter Characterizing NSD-PV in the  $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$  Cation, Book of abstracts XIII International Conference on Chemistry for Young Scientists “MENDELEEV 2024”, 793 (2024).
2. Ia. B. Zel'dovich, Electromagnetic Interaction with Parity Violation, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 33, 1531–1533 (1958).
3. J. S. M. Ginges, V. V. Flambaum, Violations of Fundamental Symmetries in Atoms and Tests of Unification Theories of Elementary Particles, Phys. Rep. 397, 63–154 (2004).
4. С. В. Козлов, Е. А. Пазюк, Моделирование энергетических и радиационных характеристик возбуждённых электронных состояний молекулы KRb, кандидатская диссертация (2020).
5. J. Karthein, S. M. Udrescu, S. B. Moroch, et al., Electroweak Nuclear Properties from Single Molecular Ions in a Penning Trap, Phys. Rev. Lett., 133, 033003 (2024).