

Тасмұрат А.З.¹, Бекбаев А.К.^{1*}, Азнабаев Д.Т.²¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы²Ядролық зерттеулердің біріккен институты, Ресей, Дубна

*e-mail: akbekbaev@gmail.com

 H_2^+, HD^+, D_2^+ СУТЕГІ МОЛЕКУЛАЛЫҚ ИОНДАР

Бұл жұмыста H_2^+, HD^+, D_2^+ молекулалық иондарының статистикалық поляризациясы есептелген, соның ішінде релятивистік емес жақындатуында DC Штарк эффектісі (тұрақты электр өрісінде) есептелген. Біздің есептеулер айналмалы-тербелмелі күйлер тәуелділігімен қоса деңгейлердің аса нәзік ыдырауының тәуелділігін ескереді. Бұрыштық момент алгебрасымен байланысты аналитикалық шешімдер қабылдай алатын жеке жағдайлар қарастырылды.

Жұмыс нәтижелері метрологияда үлкен маңызы бар. Біріншіден, іргелі физикалық тұрақтыларды айқындауға, бірінші кезекте протон массасының электрон массасына қатынасын m_p/m_e жақсарту. Статикалық поляризациялану мәндерін аса дәл есептеу, іргелі тұрақтыларды тексеру вариацияларын лаборатория шарттары уақытында тәжірибелерде аса маңызды. Жуырда сутегі молекулалық ионын H_2^+ және HD^+ аса дәл сағаттарды бөлме температурасында салыстырмалы тиянақтылықпен 10^{-18} іске асыруда. Салыстыру үшін ең жақсы дәлдік цезиден жасалған сағаттарда (қазіргі уақыт үлгісі), 2011 жылы АҚШ Ұлттық стандарттар және технологиялар институтында іске асырылды: $2.3 \cdot 10^{-16}$.

Түйін сөздер: молекулалық ион, спектроскопия, Шредингер теңдеуі.

Tasmurat A.Z.¹, Bekbaev A.K.^{1*}, Aznabayev D.T.¹¹Al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty²Joint Institute for Nuclear Research, Russia, Dubna

*e-mail: akbekbaev@gmail.com

 H_2^+, HD^+, D_2^+ hydrogen molecular ions

The article is devoted to the study of statistical polarizability of molecular ions H_2^+, HD^+, D_2^+ . Particularly DC Stark effect (at constant electric field) in the nonrelativistic approximation was calculated. Our calculation takes into account the dependence of the rotational-vibrational states, and the dependence of the hyperfine splitting of levels. We have considered special cases that allow obtain explicit analytical solutions associated with the algebra of angular momentum.

The results of the work have a great importance in metrology. At first to clarify the fundamental physical constants, primarily to improve the value of the mass ratio of the electron to the proton m_p/m_e . Precise calculations of the values of static polarizabilities will be of a great importance for verification experiments of variations of fundamental constants in time in a laboratory. Recently has been proposed to use molecular hydrogen ions H_2^+ and HD^+ for development of high-precision clock with a relative stability of order of 10^{-18} at room temperature. For comparison, the best accuracy achieved in cesium clocks (the current standard time) implemented by the National Institute of Standards and Technology in 2011: $2.3 \cdot 10^{-16}$.

Key words: Molecular hydrogen ion, spectroscopy, Schrodinger equation.

Тасмурат А.З.¹, Бекбаев А.К.^{1*}, Азнабаев Д.Т.²¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы²Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Дубна

*e-mail: akbekbaev@gmail.com

Молекулярные ионы водорода H_2^+, HD^+, D_2^+

В данной работе изучена статистическая поляризуемость молекулярных ионов водорода H_2^+, HD^+, D_2^+ , в частности, рассчитан ДС Штарк эффект (при постоянном электрическом поле) в нерелятивистском приближении. Наш расчет учитывает как зависимость от вращательно-колебательных состояний, так и зависимость от сверхтонкого расщепления уровней. Нами рассмотрены частные случаи, которые позволяют получать явные аналитические решения, связанные с алгеброй углового момента.

Результаты работы имеют большое значение в метрологии. Во-первых для уточнения фундаментальных физических констант, в первую очередь для улучшения значения отношения массы электрона к протону, m_p/m_e . Сверхточные расчеты значений статической поляризуемостей будут иметь огромное значение для экспериментов по проверке вариации фундаментальных констант во времени в лабораторных условиях. Недавно было предложено использовать молекулярные ионы водорода H_2^+ и HD^+ для реализации сверхточных часов с относительной стабильностью порядка 10^{-18} при комнатной температуре. Для сравнения наилучшая точность, достигнутая в цезиевых часах (нынешний стандарт времени), реализованных в Национальном институте стандартов и технологии США в 2011 году: $2.3 \cdot 10^{-16}$.

Ключевые слова: молекулярный ион водорода, спектроскопия, уравнение Шредингера.

Кіріспе

Соңғы көрсетулер [1] бойынша, қарапайым молекулалық ионын тұрақтылығы жоғары оптикалық сағаттар үшін қолдану мүмкіндігі ие болуда. Осындай сағаттардың жоғарғы дәлділігі үшін жалпы тәжірибе жүзінде молекулалық реакция ішкі өрісте пайда болатынын білу қажет. Сутегі молекулалық ионы үшін қарапайым үш дене жүйесі ретінде осы мәліметтер өте жоғарғы дәлділікпен қатаң түрде алынуы мүмкін. Сегізден жоғары санға ие ро-вибрационды жағдайдың релятивисттік емес полярлылығы қазіргі таңда құрылымның кең бөлігі үшін қолайлы [2-5]. Полярлылықтағы релятивисттік көрсетулер салыстырмалы $O(\alpha^2)$ ретіне жатады немесе 10^{-4} салыстырмалы дәлділікпен өлшеуде мүмкіндік туғызады [6].

Сонымен қатар, спектроскопиялық ро-вибрационды өткелді пайданала отырып протон массасының электрон массасына жақсы қатынасын алу мақсатында көптеген тәжірибелер жүргізілген [7-8] және аса нәзік құрылымды сутегі молекулалық ионының жағдайын зерттеу маңызды рөл атқаруда [9-10]. Ро-вибрационды өткел үшін теорияның қазіргі жағдайы сутегі молекулалық ионындағы негізгі өткелдер үшін $\sim 7 \cdot 10^{-12}$ -ның белгісіз бөлігі болып табылады

[11] және аса нәзік құрылымға дәл жету үшін 1ppm деңгейден басталады [12].

Бұл жұмыста біз H_2^+, HD^+, D_2^+ сутегі молекулалық ионының дипольді полярлылық қатарына байланысты негізгі релятивисттік өзгертулер арқылы бірнеше есептеу жұмыстарын жүргіземіз. Сондай-ақ біз ро-вибрационды жағдайдың кең спектрін талқылаймыз: $L=0-5$, $v=0-10$. Бұл әртүрлі жағдайлар үшін сутегі молекулалық иондарының полярлылығына қатысты релятивисттік құбылыстырды байқауда алғашқы жүйелік зерттеулер болып табылады. Радиациялық түзетулердің жоғарғы қатары да ($O(\alpha^3)$) ескерілуі мүмкін, бірақ бұл тек гелий жағдайы үшін ғана алынған [13-14]. Біздің зерттелініп отырған жұмысымызда бұл мәселені қарастырмаймыз, сол себепті жүргізілетін болжамдар қарапайым физикалық көп мәнді сандар сияқты 6-7 санмен шектеледі.

Бұл жұмыс барысында біз атомдық бірліктерді қолданамыз ($m_e = \hbar = e = 1$).

Релятивисттік емес дипольді поляризация

Біз есептеулерді релятивисттік емес Шредингер теңдеуінен бастаймыз:

$$(H_0 - E_0)\Psi_0 = 0$$

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2M_1} + \frac{P_2^2}{2M_2} - \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \quad (1)$$

мұндағы P_i және M_i нуклондардың (протон немесе дейтрон) импульстары мен массалары, R ядролар арасындағы қашықтық, r_1 және r_2 1 және 2 ядроларымен сәйкесінше электрондардың ара-қашықтығы. Z_1 және Z_2 ядролардың зарядтары, кейінірек біз $Z_1 = Z_2 = Z$ деп аламыз. $\Psi_0 = |\nu L\rangle$ релятивисттік емес жағдайы қозбаған күйде болады, сонымен қатар ол тербелетін және айналатын ν, L кванттық сандарымен сипатталады және мұндағы E_0 энергетикалық күй болып табылады.

Электрлік дипольді ұғымдарда ε ішкі электр өрісімен әрекеттесулерді келесі формуладан аламыз:

$$V_p = -\varepsilon \cdot d, \quad d = e[Z(R_1 + R_2) - r], \quad (2)$$

$$a_+ = \frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| d \| n(L+1) \rangle \langle n(L+1) \| d \| 0L \rangle}{E_0 - E_n},$$

$$a_0 = -\frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| d \| nL \rangle \langle nL \| d \| 0L \rangle}{E_0 - E_n}, \quad (5)$$

$$a_- = \frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| d \| n(L-1) \rangle \langle n(L-1) \| d \| 0L \rangle}{E_0 - E_n},$$

мұндағы $E_n |nL\rangle$ өтпелі жағдайының энергиясы. Кеңістіктегі полярлылықты операторлық тензор L орбиталды моменттің толық санын тіркейді және келесідей көрініске ие болады:

$$a_d^{ij} = a_s + a_t [L^i L^j + L^j L^i - \frac{2}{3} L^2], \quad (6)$$

мұндағы,

$$a_s = \frac{1}{3} [a_+ + a_0 + a_-],$$

мұндағы d – сутегі молекулалық ионының электрлік диполь моменті, ионның массасының центріне қатысты R_{12} және r ядро мен электронның векторлық жағдайы.

Молекулалық ионның полярлылығы есебінен энергияның өзгеруі келесідей көрініс табады:

$$E_p^{(2)} = \langle \Psi_0 | V_p (E_0 - H_0)^{-1} V_p | \Psi_0 \rangle =$$

$$= \varepsilon^i \varepsilon^j \langle \Psi_0 | d^i (E_0 - H_0)^{-1} d^j | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} a_d^{ij} \varepsilon^i \varepsilon^j, \quad (3)$$

мұндағы a^{ij} екінші дәрежелі полярлылық тензоры болып табылады,

$$a_d^{ij} = -2 \langle \Psi_0 | d^i (E_0 - H_0)^{-1} d^j | \Psi_0 \rangle. \quad (4)$$

Статистикалық дипольді полярлылық тензор кейінірек скалярға өзгереді [15],

$$a_t = -\frac{a_+}{2(L+1)(2L+3)} +$$

$$+ \frac{a_0}{2L(L+1)} - \frac{a_-}{2L(2L-1)}. \quad (7)$$

Стенографикалық векторлық жазбалардың негізгі формализмдерін келесідей жазуға болады:

$$\Psi_1 = (E_0 - H_0)^{-1} d | \Psi_0 \rangle,$$

$$a_d = \langle \Psi_0 | d | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_0 | d (E_0 - H_0)^{-1} d | \Psi_0 \rangle. \quad (8)$$

Радиус шектеріндегі әрекеттер ро-вибрационды жағдайда қарастырылатын

H_2^+, HD^+, D_2^+ иондары үшін релятивисттік емес нәтижелердің толық жиыны үшін кестелер [5]-ші жұмыста көрсетілген.

Дипольді поляризацияға релятивисттік түзетулер

Статистикалық дипольді поляризацияға α_B релятивисттік түзетулер:

$$a_d = a_d^{nonrel} + (1/c)^2 a^B, \quad (9)$$

бұл келесідей өрнектеледі:

$$\begin{aligned} a_B &= 2\langle \Psi_B | d | \Psi_1 \rangle + \langle \Psi_1 | H_B - \langle H_B \rangle | \Psi_1 \rangle \\ &= 2\langle \Psi_0 | H_B Q (E_0 - H_0)^{-1} Q d | (E_0 - H_0)^{-1} d \Psi_0 \rangle \\ &+ \langle \Psi_0 | H_B Q (E_0 - H_0)^{-1} (H_B - \langle H_B \rangle) (E_0 - H_0)^{-1} d | \Psi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

мұндағы H_B үш дене жүйесі үшін Брейт-Паули әрекетінің Гамильтонианы [16 17]:

$$\begin{aligned} H_B &= -\frac{p_e^4}{8m_e^3} + \frac{4\pi}{8m_e^2} [Z_1 \delta(r_1) + Z_2 \delta(r_2)] - \frac{P_1^4}{8M_1^3} - \frac{P_2^4}{8M_2^3} \\ &+ \frac{Z_1}{2m_e M_1} \left(\frac{p_e P_1}{r_1} + \frac{r_1 (r_1 p_e) P_1}{r_1^3} \right) + \frac{Z_2}{2m_e M_2} \left(\frac{p_e P_2}{r_2} + \frac{r_2 (r_2 p_e) P_2}{r_2^3} \right) \\ &- \frac{Z_1 Z_2}{2M_1 M_2} \left(\frac{P_1 P_2}{R} + \frac{R (R P_1) P_2}{R^3} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

және Ψ_B – бұл Ψ_0 релятивисттік емес толқындық функциясына релятивисттік түзету болып табылады:

$$\Psi_B = Q (E_0 - H)^{-1} Q H_B | \Psi_0 \rangle. \quad (12)$$

Жоғарыда берілген теңдеудегі Q операторы $|\Psi_0\rangle$ функциясына ортогональ болатын кеңістіктегі жобалық операторы. Атомдық бірлік $c = \alpha^{-1}$ ескере кеткен жөн, мұндағы α нәзік құрылымның константасы. Ψ_1 және Ψ_B толқындық функциялары үшін (8) және (12) теңдеулер сәйкесінше сызықтық теңдеулер болып табылады. Сонымен қатар v үшін соңғы α_B мәндерді Гамильтонианының толық диагонализациясыз алуға болады және ары қарай, сандық әдістерді тез әрі тұрақты түрде шығаратын деңгейлер мен псевдодеңгейлер бойынша суммалауды алуға болады.

Энергия өзгерісінің поляризациясына қатысты релятивисттік түзетулер ауытқу теориясының үшінші қатарына жатады.

Сызықтық теңдеудегі α^2 параметрі релятивисттік көбеюдің шынайы параметрі болып табылады және ол ε электрлік өріс тығыздығында квадратты болып келеді.

Нәтижелер

Біздің есептеулерімізде біз ретсіз таңдалған көрсеткіштері бар экспоненциалды ұлғаю негізіндегі вариационды әдісті қолданамыз, сондай-ақ бұл туралы алдыңғы зерттеу жұмыстарында [15, 17] толық сипаттама берілген және біз мұнда әдістің айқын тұжырымдамасын ескермейміз.

Ең алдымен біз сандық нәтижелердің жинақтылығын зерттейміз. H_2^+ молекулалық ионының көрсеткіштері үшін біз жерге тұйықталған ($L = 0, v = 0$) жағдайды қарастырамыз. 1-ші кестеде көрініп тұрғандай, α_B релятивисттік әрекет сегіз мәнді санмен анықталуы мүмкін, яғни [19] жұмысында көрсетілгендей релятивисттік емес поляризация нақты мәнге ие болады.

Кесте 1 – Сандық нәтижелердің жинақтылығын тексеру. H_2^+ молекулалық ионының жерге тұйықталған жағдайы талқылауға алынды. Бастапқы және аралық жағдайлар үшін есептеулерде қолданылған N – негізгі функциялардың саны. Өзге де авторлармен салыстыру барысында ыңғайлы болу үшін ядролық массалар мәндері келесідей алынды: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_n = 36702.483014m_e$.

N	E_{NR}	α_d	$(1/c)^2 a_B \times 10^2$
2000	-0.59713 90631 23404 0757	3.16872 58022 7017	-1.52753848
3000	-0.59713 90631 23405 0374	3.16872 58026 7529	-1.52753844
4000	-0.59713 90631 23405 0730	3.16872 58026 7610	-1.52753841
5000	-0.59713 90631 23405 0747	3.16872 58026 7613	-1.52753839

Сандық есептеулеріміздегі жалпы мәліметтер жиыны 2-4 кестелерінен құралған және H_2^+ , HD^+ , D_2^+ молекулалық иондарының поляризациясы ағымдағы жұмыстың негізгі нәтижелері болып табылады. Сол себепті, ядролардың массаларының мәні соңғы жарияланған [18] жұмысынан алынды, яғни CODATA тобы

бойынша: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_n = 36702.483014m_e$. Олар сондай-ақ біздің алдыңғы релятивисттік емес есептеулерімізге [5] сәйкес келеді.

Сандық қателіктерді болдырмас үшін біз алты есе прецизионды арифметикасын қолдандық (48 ондық сандар).

Кесте 2 – H_2^+ молекулалық ионы үшін поляризация

v	L = 0		L = 1		L = 2		L = 3		L = 4		L = 5	
	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t
0	3.1685731	3.1781425	-0.8033502	3.1973545	-0.1931356	3.2262879	-0.0914433	3.2650990	-0.0544748	3.3139976	-0.0367128	
1	3.8973934	3.9099178	-1.1441799	3.9350819	-0.2750942	3.9730164	-0.1302617	4.0239695	-0.0776116	4.0882763	-0.0523165	
2	4.8213113	4.8378793	-1.6000406	4.8711902	-0.3847577	4.9214594	-0.1822335	4.9890778	-0.1086134	5.0745756	-0.0732459	
3	6.0091177	6.0313112	-2.2129254	6.0759600	-0.5322677	6.1434165	-0.2521933	6.2342968	-0.1503867	6.3494400	-0.1014829	
4	7.5602216	7.5903867	-3.0434518	7.6511105	-0.7322788	7.7429690	-0.3471380	7.8669387	-0.2071473	8.0243574	-0.1399094	
5	9.6215210	9.6632217	-4.1811193	9.7472225	-1.0064538	9.8744707	-0.4774294	10.046534	-0.2851531	10.265571	-0.1928167	
6	12.415730	12.474532	-5.7615463	12.593067	-1.3876642	12.772916	-0.6588237	13.016644	-0.3939470	13.327789	-0.2667717	
7	16.290723	16.375602	-9.965248	16.546853	-1.9273285	16.807161	-0.9160282	17.160827	-0.5485430	17.613818	-0.3721506	
8	21.809221	21.935211	-11.228720	22.189694	-2.7088006	22.577348	-1.2892136	23.105612	-0.7734482	23.784904	-0.5259745	
9	29.920158	30.113640	-16.036365	30.504982	-3.8730665	31.102663	-1.8465662	31.920118	-1.1104628	32.976304	-0.7574536	
10	42.306376	42.616282	-23.446097	43.244214	-5.6711694	44.206322	-2.7100353	45.528226	-1.6347899	47.246401	-1.1195399	

Кесте 3 – D_2^+ молекулалық ионы үшін поляризация

v	L = 0		L = 1		L = 2		L = 3		L = 4		L = 5	
	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t
0	3.0718385	3.0764328	-0.7579298	3.0856549	-0.1813369	3.0995081	-0.0852409	3.1180309	-0.0502995	3.1412711	-0.0335034	
1	3.5528638	3.5584089	-0.9782491	3.5695458	-0.2340523	3.5862817	-0.1100231	3.6086695	-0.0649249	3.6367756	-0.0432467	
2	4.1194070	4.1261334	-1.2485728	4.1396485	-0.2987404	4.1599666	-0.1404395	4.1871595	-0.0828801	4.2213195	-0.0552122	
3	4.7910944	4.7993001	-1.5808434	4.8157922	-0.3782640	4.8405962	-0.1778400	4.8738102	-0.1049648	4.9155614	-0.0699351	
4	5.5931121	5.6031855	-1.9903702	5.6234356	-0.4762945	5.6539046	-0.2239563	5.694727	-0.1322053	5.7460784	-0.0881031	
5	6.5581008	6.5705539	-2.4969746	6.5955906	-0.5975866	6.6332784	-0.2810323	6.6838036	-0.1659331	6.7474075	-0.1106091	
6	7.7288214	7.7443358	-3.1265993	7.7755297	-0.7483664	7.8225084	-0.3520083	7.8855305	-0.2078938	7.9649300	-0.1386246	
7	9.1619614	9.1814571	-3.9136098	9.2206579	-0.9368846	9.2797220	-0.4407829	9.3590190	-0.2604042	9.4590076	-0.1737066	
8	10.933664	10.958399	-4.9041347	11.008137	-1.1742218	11.083110	-0.5525959	11.183859	-0.3265811	11.311016	-0.2179523	
9	13.147705	13.179427	-6.1610100	13.243217	-1.4754799	13.339457	-0.6945965	13.468847	-0.4106816	13.632332	-0.2742296	
10	15.947847	15.989024	-7.7712522	16.071842	-1.8615859	16.196869	-0.8766962	16.365114	-0.5186156	16.577941	-0.3465270	

Кесте 4 – HD^+ молекулалық ионы үшін поляризация:

v	L = 0		L = 1		L = 2		L = 3		L = 4		L = 5	
	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t	α_s	α_t
0	395.27754	3.9899486	175.46989	4.0093758	13.826954	4.0386030	3.1905097	4.0777634	1.1013280	4.1270299	0.4731528	
1	462.62017	4.7029195	205.18613	4.7267328	16.142249	4.7625805	3.7153046	4.8106388	1.2779012	4.8711642	0.5463772	
2	540.64963	5.5690125	239.56394	5.5984707	18.814812	5.6429097	4.3189073	5.7025090	1.4799073	5.7776380	0.6295018	
3	631.36149	6.6325616	279.45735	6.6693071	21.908555	6.7251653	5.0148197	6.7999232	1.7113981	6.8942638	0.7239099	
4	737.27142	7.9543692	325.93821	8.0010358	25.503117	8.0716799	5.8197299	8.1666401	1.9772885	8.2866362	0.8312163	
5	861.59725	9.6180552	380.37171	9.6782520	29.699534	9.7691277	6.7545125	9.8914502	2.2835914	10.046247	0.9533009	
6	1008.5213	11.742867	444.52180	11.821446	34.627354	11.940196	7.8456173	12.100244	2.6377250	12.303109	1.0923369	
7	1183.5771	14.499937	520.70922	14.604304	40.455664	14.762192	9.1270207	14.975296	3.0489087	15.245914	1.2507930	
8	1394.2333	18.141977	612.04499	18.283320	47.409088	18.497399	10.643024	18.786825	3.5286700	19.155146	1.4313721	
9	1650.8015	23.051744	722.79107	23.247524	55.792076	23.544383	12.452318	23.946515	4.0914633	24.459532	1.6367943	
10	1967.8945	29.827372	858.93232	30.105532	66.026733	30.528154	14.633990	31.101840	4.7553467	31.835850	1.8692259	

5-кестеде кестеде өзіміздің есептеу нәтижелерін алдыңғы жұмыстардағы нәтижелермен салыстырамыз. Релятивисттік поляризация үшін мәліметтердің жоқтығынан поляризация

үшін тек релятивисттік емес мәндерді кестеге енгіземіз. Барлық жағдайлар үшін біздің нәтижелеріміз алдыңғы есептеулерге ұқсас екендігін көрсетеді.

Кесте 5 – Релятивисттік емес статистикалық дипольді поляризация. Алдыңғы есептеулермен салыстыру. Атомдық масса мәндерін салыстыру оңай болу үшін келесідей алынды: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_p = 36702.483014m_e$.

	H_2^+	D_2^+	HD^+
Hilico et al. [2]	3.16872 5803	3.07198 8696	395.30632 88
Olivares Pileon, Baye [3]	3.16872 58026 5		
Li-Yan Tang et al. [19]	3.16872 58026 76(1)	3.07198 86956 6(7)	395.3063287972(1) ^a
Біздің жұмыс нәтижелері	3.16872 58026 7613(1)	3.0719886956 7511(2)	395.306328797231(3)

^aZong-Chao Yan et al. [20]

Қорытынды

Сутегі молекулалық ионының поляризациясы үшін жаңа мәндердің алынғандығы туралы мәлімдейміз, және ол физикалық шамалар сияқты 6–7 мәнді санға ие, осы уақытта сандық тұрақтылық сегіз немесе одан көп санға

жетеді. Бұл мәліметтер КЭД жоғарғы қатарының түзетулерін қоса отырып, физикалық мәндердің тұрақтылығын өсіру үшін қолданылуы мүмкін [13]. Бұл ең алғашқы басқарылатын релятивисттік қатары бар жүйелік есептеулер екенін ескере кеткен жөн.

Әдебиеттер

- Schiller S., Bakalov D., and Korobov V.I. Simplest Molecules as Candidates for Precise Optical Clocks // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Vol.113. – P.023004.
- Hilico L., Billy N., Grøemaud B., and Delande D. Polarizabilities, light shifts and two-photon transition probabilities between $J=0$ states of the H_2^+ and D_2^+ molecular ions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2001. – Vol. 34. – P. 491; Karr J.-Ph., Kilic S., and Hilico L. Energy levels and two-photon transition probabilities in the HD^+ ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2005. – Vol. 38. – P. 853.
- Pilon H.O. and Baye D. Static and dynamic polarizabilities of the non-relativistic hydrogen molecular ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – Vol. 45. – P.235101.
- Quan-Long Tian, Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, and Ting-Yun Shi, Static Dipole Polarizabilities for Low-Lying Rovibrational States of HD^{+*} // Chin. Phys. Lett. – 2015. – Vol.32. – P.083101.

- 5 Schiller S., Bakalov D., Bekbaev A.K., and Korobov V.I. Static and dynamic polarizability and the Stark and blackbody-radiation frequency shifts of the molecular hydrogen ions H_2^+ , HD^+ , and D_2^+ // *Phys. Rev. A.* – 2014. – Vol. 89. – P.052521.
- 6 Korobov V.I. Relativistic corrections to the dipole polarizability of the ground state of the molecular ion H_5^+ // *Phys. Rev. A.* – 2001. – Vol. 63. – P.044501.
- 7 Koelemeij J.C.J., Roth B., Wicht A., Ernsting I., and Schiller S. Vibrational Spectroscopy of HD^+ with 2-ppb Accuracy // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol.98. – P.173002.
- 8 Biesheuvel J., Karr J.-Ph., Hilico L., Eikema K.S.E., Ubachs W., and Koelemeij J.C.J., Probing QED and fundamental constants through laser spectroscopy of vibrational transitions in HD^+ // *Nature Comm.* – 2016. – Vol.7. – P.10385.
- 9 Shen J., Borodin A., Hansen M., and Schiller S. Observation of a rotational transition of trapped and sympathetically cooled molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2012. – Vol.85. – P.032519.
- 10 Bressel U., Borodin A., Shen J., Hansen M., Ernsting I., and Schiller S., Manipulation of Individual Hyperfine States in Cold Trapped Molecular Ions and Application to HD^+ Frequency Metrology // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – Vol.108. – P.183003.
- 11 Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-Ph. Theoretical transition frequencies beyond 0.1 ppb accuracy in H_2^+ , HD^+ , and antiprotonic helium // *Phys. Rev. A.* – 2014. – Vol.89. – P.032511; Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-P. Bound-state QED calculations for antiprotonic helium // *Hyperfine Interactions.* – 2015. – Vol. 233. – P.75-82.
- 12 Korobov V.I., Koelemeij J.C.J., Karr J.-Ph., and Hilico L. Theoretical Hyperfine Structure of the Molecular Hydrogen Ion at the 1 ppm Level // *Phys. Rev. Lett.* – 2016. – Vol.116. – P.053003.
- 13 Pachucki K. and Sapirstein J. Relativistic and QED corrections to the polarizability of helium // *Phys. Rev. A.* – 2000. – Vol.63. – P.012504.
- 14 Lach G., Jeziorski B., and Szalewicz K. Radiative Corrections to the Polarizability of Helium *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol.92. – P.233001; Piszczatowski K., Puchalski M., Komasa J., Jeziorski B., and Szalewicz K. Frequency-Dependent Polarizability of Helium Including Relativistic Effects with Nuclear Recoil Terms // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – Vol.114. – P.173004.
- 15 Landau L.D. and Lifshitz E.M. *Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory.* – Oxford: Pergamon, 1977.
- 16 Berestetsky V.B., Lifshitz E.M. and Pitaevsky L.P. *Relativistic Quantum Theory.* – Oxford: Pergamon, 1982.
- 17 Korobov V.I. Leading-order relativistic and radiative corrections to the rovibrational spectrum of H_2^+ and HD^+ molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2006. – Vol.74. – P.052506.
- 18 Mohr P.J., Taylor B.N., and Newell D.B. CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2010 // *Rev. Mod. Phys.* – 2012. – Vol.84. – P.1527-1605.
- 19 Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, and Babb J.F. High-precision nonadiabatic calculations of dynamic polarizabilities and hyperpolarizabilities for low-lying vibrational-rotational states of hydrogen molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2014. – Vol.90. – P.012524.
- 20 Zong-Chao Yan, Jun-Yi Zhang, and Yue Li. Energies and polarizabilities of the hydrogen molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2003. – Vol.67. – P.062504.

References

- 1 S. Schiller, D. Bakalov, and V.I. Korobov, *Phys. Rev. Lett.* 113, 023004 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.023004
- 2 L. Hilico, N. Billy, B. Grøemaud, and D. Delande, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 34, 491 (2001); J.-Ph. Karr, S. Kilic, and L. Hilico, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 38, 853 (2005).
- 3 H. Olivares Pilon and D. Baye, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45, 235101 (2012).
- 4 Quan-Long Tian, Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, and Ting-Yun Shi, *Chin. Phys. Lett.* 32, 083101 (2015).
- 5 S. Schiller, D. Bakalov, A.K. Bekbaev, and V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 89, 052521 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevA.89.052521
- 6 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 63, 044501 (2001). doi.org/10.1103/PhysRevA.63.044501
- 7 J.C.J. Koelemeij, B. Roth, A. Wicht, I. Ernsting, and S. Schiller, *Phys. Rev. Lett.* 98, 173002 (2007). doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.173002
- 8 J. Biesheuvel, J.-Ph. Karr, L. Hilico, K.S.E. Eikema, W. Ubachs, and J.C.J. Koelemeij, *Nature Comm.* 7, 10385 (2016). doi:10.1038/ncomms10385
- 9 J. Shen, A. Borodin, M. Hansen, and S. Schiller, *Phys. Rev. A* 85, 032519 (2012). doi.org/10.1103/PhysRevA.85.032519
- 10 U. Bressel, A. Borodin, J. Shen, M. Hansen, I. Ernsting, and S. Schiller, *Phys. Rev. Lett.* 108, 183003 (2012).
- 11 V.I. Korobov, L. Hilico, and J.-Ph. Karr, *Phys. Rev. A* 89, 032511 (2014) doi.org/10.1103/PhysRevA.89.032511; V.I. Korobov, L. Hilico, and J.-P. Karr, *Hyperfine Interactions* 233, 75-82 (2015) DOI 10.1007/s10751-015-1149-5 .
- 12 V.I. Korobov, J.C.J. Koelemeij, J.-Ph. Karr, and L. Hilico, *Phys. Rev. Lett.* 116, 053003 (2016).
- 13 K. Pachucki and J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* 63, 012504 (2000).
- 14 G. Lach, B. Jeziorski, and K. Szalewicz, *Phys. Rev. Lett.* 92, 233001 (2004) doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.233001; K. Piszczatowski, M. Puchalski, J. Komasa, B. Jeziorski, and K. Szalewicz, *Phys. Rev. Lett.* 114, 173004 (2015) doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.173004.
- 15 L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory* (Pergamon, Oxford, 1977).
- 16 V.B. Berestetsky, E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevsky, *Relativistic Quantum Theory*, (Oxford, Pergamon, 1982).
- 17 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 74, 052506 (2006) doi.org/10.1103/PhysRevA.74.052506.
- 18 P.J. Mohr, B.N. Taylor, and D.B. Newell, *Rev. Mod. Phys.* 84, 1527 (2012) doi:10.1103/RevModPhys.84.1527
- 19 Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, and J.F. Babb, *Phys. Rev. A* 90, 012524 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevA.90.012524
- 20 Zong-Chao Yan, Jun-Yi Zhang, and Yue Li, *Phys. Rev. A* 67, 062504 (2003). doi.org/10.1103/PhysRevA.67.062504.