**Теоретическая модель строения и свойств матрично-изолированной молекулы BaF**

***Тупицын Д.И.,1 Каморзин Б.Б.2***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*2Сколковский институт науки и технологий, Центр энергетических технологий, Москва, Россия*

*E-mail:* *dmitrii.tupitsyn@chemistry.msu.ru*

Измерение дипольного момента электрона (EDM) — одна из наиболее интересных задач современной экспериментальной физики, решение которой может дать ответ на вопросы границ применимости Стандартной модели, а также неравномерного распределения материи и антиматерии во вселенной. Сразу несколькими научными группами было независимо предложено провести прецизионный эксперимент, основанный на использовании техники матричной изоляции радикала BaF [1, 2]. В рамках такого подхода возможно добиться существенного увеличения чувствительности измерения за счёт наличия большого числа частиц и их ориентации вдоль одного направления, что недостижимо в рамках классических экспериментов в пучках. Исходная матричная система переводится в когерентное состояние, в котором наблюдается прецессия спинов электронов относительно направления внешнего магнитного поля. В случае отличия электрического дипольного момента электрона от нуля, будет наблюдаться взаимодействие с электрическим полем направленным коллинеарно с направлением магнитного поля. Регистрация отклика измеряется при помощи ЭПР спектроскопии.

Для оценки параметров эксперимента в данной работе использовалась техника моделирования матричной изоляции разработанная ранее и успешно показавшая себя на задачах атомной матричной изоляции [3]. Данная техника основана на представлении матрицы сферическим фрагментом идеального кристалла и использовании метода выпуклых оболочек для оценки термодинамической стабильности сайтов захвата. Поверхности потенциальной энергии основного и возбуждённых состояний рассчитываются методами, основанными на применении парных потенциалов.

Рассчитанные неэмпирически двумерные поверхности потенциальной энергии аппроксимировались комбинацией мультипольного разложения с использованием полиномов Лежандра на дальних расстояниях с экспоненциальным и сплайновым представлениями в области коротких расстояний. Далее генерировались начальные геометрии кристалла, соответствующие удалению 0-8 атомов инертного газа, а также различным углам поворота молекулы в матрице. Полученные геометрии оптимизировались градиентными методами. Влияние электрического поля на систему учитывалось в нулевом приближении без учёта поляризации матрицы и электростатических взаимодействий внутри системы.

Проведён анализ стабильности сайтов захвата молекулы BaF в матрице аргона. Показано, что наиболее стабильной является вакансия, образованная удалением четырёх атомов из решётки. Рассмотрена вариация стабильности начальных конфигураций при ненулевых внешних электрических полях. Для стабильных вакансий оценены характеристики кинетической стабильности и величин электрического поля, необходимых для выравнивания молекул относительно направления наведённого поля.

**Литература**

1. Kozlov, M.G.; Derevianko, A. // Phys. Rev. Lett. 2006, 97, 063001.

2. Vutha A.C., Horbatsch M., Hessels E.A. // Atoms. – 2018. – Т. 6. – №. 1. – С. 3.

3. Tarakanova A.S., Buchachenko A.A., Bezrukov D.S. // Low Temperature Physics 46, 165 (2020).