Письма в ЖЭТФ, том 110, вып. 6, с. 363 – 367 © 2019 г. 25 сентября

К поиску электрического дипольного момента электрона: $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетный эффект Фарадея на молекулярном пучке PbF

Д. В. Чубуков[1], *Л. В. Скрипников*, *Л. Н. Лабзовский*

Федеральное государственное бюджетное учреждение "Петербургский институт ядерной физики" им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра "Курчатовский институт", 188300 Гатчина, Россия

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 11 августа 2019 г.
После переработки 11 августа 2019 г.
Принята к публикации 14 августа 2019 г.

Предложен подход к измерению электрического дипольного момента электрона, основанный на наблюдении $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея на молекулярном пучке, пересекающем полость, методами усиленной резонатором внутриполостной лазерной абсорбционной спектроскопии. Нами вычислено эффективное электрическое поле, действующее на электрический дипольный момент электрона, а также молекулярный параметр скалярно-псевдоскалярного ядерно-электронного взаимодействия для основного и возбужденного электронных состояний молекулы монофторида свинца. Выполненное моделирование эксперимента показывает, что с использованием предложенного подхода, текущее ограничение на величину электрического дипольного момента электрона и константу скалярно-псевдоскалярного ядерно-электронного взаимодействия может быть улучшено на 6 порядков.

DOI: 10.1134/S0370274X19180024

1. Введение. Наличие электрического дипольного момента у электрона (eЭДМ) нарушает одновременно симметрии фундаментальных взаимодействий относительно инверсии пространства ($\mathcal{P}$) и обращения времени ($\mathcal{T}$) [1–3]. Лучшее ограничение на eЭДМ $d_e < 1.1 \times 10^{-29}\, e$ см [4] было получено на молекуле ThO. Чтобы извлечь величину eЭДМ из экспериментальных данных, необходим теоретический расчет коэффициентов усиления в случае атомов и эффективных электрических полей в случае молекул (см., например, [5, 6]).

Эксперименты по измерению eЭДМ должны выполняться на молекулах с открытыми электронными оболочками с ненулевой проекцией электронного момента на ось молекулы. Следует отметить, что из этих же экспериментов можно установить ограничение на безразмерную константу скалярно-псевдоскалярного ядерно-электронного $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного взаимодействия [7, 8, 9]. Для того чтобы различить эффекты, вызываемые этим взаимодействием и эффекты, индуцированные eЭДМ, требуется выполнить серию экспериментов на различных атомах или молекулах [10, 6].

Текущие эксперименты на пучках молекул или молекулярных ионах в ловушке основаны на измерении прецессии спина электрона [4, 11, 12] во внешних электрических полях. Экспериментальное ограничение на eЭДМ, установленное в этих экспериментах, уже находится на уровне предсказаний различных расширений Стандартной модели (СМ) [13]. Однако оценки в рамках самой СМ для eЭДМ примерно на 9 порядков ниже этого ограничения [14, 15]. В связи с этим приобретает особую актуальность разработка альтернативных подходов и принципов измерения eЭДМ с использованием атомов и молекул.

Хорошо изученным эффектом является эффект Фарадея, заключающийся в оптическом вращении плоскости поляризации линейно-поляризованного света, распространяющегося в среде, в присутствии внешнего магнитного поля. Однако при наличии $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного взаимодействия в атомах или молекулах среды можно рассмотреть так называемый $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетный эффект Фарадея. В нем оптическое вращение происходит под действием внешнего электрического поля [16–19]. Недавно нами было предложено наблюдать такой эффект на атомах методами усиленной резонатором внутриполостной лазерной абсорбционной спектроскопии (англ. *cavity-enhanced intracavity absorption spectroscopy* (ICAS)) [20–22]. В работах [23–26] были произведены теоретические расчеты и моделирование этого эффекта для различных атомов, ориентированные на применение методов ICAS. В данной же работе мы рассматриваем возможность проведения такого экс-

[1] e-mail: dmitrybeat@gmail.com

перимента по наблюдению $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея на пучке из молекул монофторида свинца PbF.

Выбор данной молекулы обусловлен тем, что она довольно хорошо исследована. В ней известен переход X1 $^2\Pi_{1/2} \rightarrow$ X2 $^2\Pi_{3/2}$ с длиной волны $\lambda = 1210$ нм. Он лежит в области, доступной для современных лазеров. Важным достоинством является также и маленькая ширина этого перехода (в экспериментах с пучками столкновительным уширением можно пренебречь). Для поляризации молекулы PbF может быть использовано достигаемое в эксперименте внешнее электрическое поле порядка 10^4 В/см. Его возможно создать на расстояниях порядка сантиметра.

Предлагаемый принцип эксперимента заключается в следующем. Рассматривается полость, которую пересекает молекулярный пучок в поперечном направлении. При этом пучок пересекает лазерный луч, распространяющийся вдоль полости. Область их взаимодействия помещается во внешнее электрическое поле, ориентированное вдоль направления распространения света. Типичный размер полости в продольном направлении составляет 1 м. Однако усиленная резонатором оптическая длина пути может достигать 100 км [20] или даже 70000 км [21]. Учитывая то, что интересующая нас область взаимодействия молекул с лазером составляет величину порядка сантиметра, можно принять, что эффективная усиленная резонатором оптическая длина пути примерно равна 1 км [20] и 700 км [21]. Текущие эксперименты с использованием усиленной резонатором схемы продемонстрировали чувствительность сдвига фазы в эксперименте по двулучепреломлению, ограниченную дробовым шумом, на уровне 3×10^{-13} рад [22]. Данные параметры будут использованы ниже для получения оценки рассматриваемого эффекта.

Моделирование эксперимента по поиску $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея на пучке молекул PbF. $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетный эффект Фарадея проявляет себя как циркулярное двулучепреломление, возникающее вследствие распространения света в некоторой среде во внешнем электрическом поле при учете $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетных взаимодействий. В этом случае имеет место линейный эффект Штарка. Плоскость поляризации света для любого типа двулучепреломления поворачивается на угол

$$\psi(\omega) = \pi \frac{l}{\lambda} \mathrm{Re}\left[n^+(\omega) - n^-(\omega)\right], \tag{1}$$

где l – оптическая длина пути, ω – частота перехода и λ – соответствующая ей длина волны, а $n^{\pm}(\omega)$ – коэффициенты преломления для лево- и право-циркулярно поляризованных фотонов. В случае $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея на молекулах [24]

$$\mathrm{Re}\left[n^+(\omega) - n^-(\omega)\right] = \frac{d}{d\omega} n(\omega) \left(\omega^+ - \omega^-\right), \tag{2}$$

где $\omega^{\pm}$ – частоты лево- и право-циркулярно поляризованных фотонов. Представим сигнал $R(\omega)$ в экспериментах по двулучепреломлению в виде

$$R(\omega) = \psi(\omega) T(\omega). \tag{3}$$

Здесь $T(\omega)$ – функция пропускания (или трансмиссии), связанная с поглощением света внутри полости и подчиняющаяся закону Бугера–Ламберта–Бера:

$$T(\omega) = e^{-l/L(\omega)}, \tag{4}$$

где $L(\omega)$ – длина поглощения. Здесь мы не учитываем трансмиссию от зеркал полости, которые используются для увеличения оптической длины. Предельный уровень дробового шума для любого поляриметра пропорционален квадратному корню из числа регистрируемых фотонов. Тогда соотношение между сигналом и шумом $(R(\omega)/\sqrt{T(\omega)})$ оптимально, когда $\frac{d}{dl}\left(l e^{-l/2L(\omega)}\right) = 0$, т.е. когда $l = 2L(\omega)$.

В случае магнитного дипольного (M1) перехода угол поворота и длину поглощения для $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея можно выразить в виде

$$\psi(\omega) = \frac{2\pi^2}{3} \frac{l}{\lambda} \rho \mu_0^2 |\langle i|\mathbf{l} - g_S \mathbf{s}|f\rangle|^2 \frac{h(u,v)}{\hbar \Gamma_D} \frac{(\omega^+ - \omega^-)}{\Gamma_D}, \tag{5}$$

$$\omega = \omega_0 + \Delta\omega, \tag{6}$$

$$L^{-1}(\omega) = 4\pi\rho \frac{\omega_0}{\Gamma_D} f(u,v) \frac{\mu_0^2 |\langle i|\mathbf{l} - g_S \mathbf{s}|f\rangle|^2}{3\hbar c}. \tag{7}$$

Здесь ρ – численная плотность молекул, $|i\rangle$ и $|f\rangle$ – начальное и конечное состояния для резонансного перехода, $\mathbf{s}$ и $\mathbf{l}$ – операторы спинового и орбитального электронных моментов, соответственно, $g_S = -2.0023$ – g-фактор свободного электрона, μ_0 – магнетон Бора, Γ_D – доплеровская ширина, ω_0 – резонансная частота перехода, $\Delta\omega$ – отстройка частоты, $\hbar$ и c – редуцированная постоянная Планка и скорость света, соответственно. Функции $g(u,v)$, $f(u,v)$, $h(u,v)$, а также переменные u, v связаны с фогтовским описанием формы спектральной линии [1]:

$$g(u,v) = \mathrm{Im}\,\mathcal{F}(u,v), \tag{8}$$

$$f(u,v) = \mathrm{Re}\,\mathcal{F}(u,v), \tag{9}$$

$$\mathcal{F}(u,v) = \sqrt{\pi}e^{-(u+iv)^2}\left[1 - \mathrm{Erf}(-i(u+iv))\right], \quad (10)$$

где $\mathrm{Erf}(z)$ – функция ошибок,

$$u = \frac{\Delta\omega}{\Gamma_D} \quad (11)$$

и

$$v = \frac{\Gamma_n}{2\Gamma_D}. \quad (12)$$

Γ_n – естественная ширина,

$$h(u,v) = \frac{d}{du}g(u,v). \quad (13)$$

Функция $f(u,v)$ определяет поведение поглощения и имеет максимум в точке резонанса ω_0. Максимум функции $h(u,v)$ тоже совпадает с ω_0. Но эта функция имеет также и второй максимум [24], что позволяет наблюдать $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетный эффект Фарадея вдали от резонанса в области, где поглощение очень мало.

Применим условие оптимальности $l = 2L(\omega)$. Из него следует выражение для оптимальной столбцовой плотности ρl. Выразим ее в терминах естественной ширины возбужденного уровня Γ_n вместо матричного элемента M1 перехода, тогда

$$\rho l = \frac{2\omega_0^2}{\pi c^2}\frac{\Gamma_D}{f(u,v)\Gamma_n}. \quad (14)$$

Подставляя ур. (14) в выражение (5), имеем

$$\psi_{\max}(u) = \frac{h(u,v)}{2f(u,v)}\frac{(\omega^+ - \omega^-)}{\Gamma_D}. \quad (15)$$

При $u \gg 1$ в асимптотике $h(u,v) \approx 1/u^2$ и $f(u,v) \approx \approx v/u^2$. Точное построение функций в уравнениях (14)–(15) показывает, что при $u > 4$, т.е. после достижения второго максимума $h(u,v)$ эти асимптотики хорошо работают и

$$\psi_{\max}(u) = \frac{(\omega^+ - \omega^-)}{\Gamma_n}. \quad (16)$$

В наших дальнейших оценках примем $u = 5$ и для оценки угла поворота будем пользоваться ур. (16).

Рассмотрим X1 $^2\Pi_{1/2} \to$ X2 $^2\Pi_{3/2}$ переход ($\lambda = = 1210$ нм) в молекуле PbF. Естественная ширина уровня X2 $\Gamma_n = 2.7 \times 10^3\,\mathrm{c}^{-1}$ [27]. Типичная поперечная температура для таких молекулярных пучков равна 1 K (например, это так для молекулярного пучка YbF в работе [28]). Тогда $\Gamma_D = 4.5 \times 10^7\,\mathrm{c}^{-1}$. Разность $(\omega^+ - \omega^-)$ для случая eЭДМ выражается через эффективные электрические поля молекулы $\mathcal{E}_{\mathrm{eff}}$, которые необходимо рассчитывать теоретически (см. ниже), для состояний, между которыми рассматривается переход. В случае X1→X2 перехода в PbF $(\omega^+ - \omega^-) = 2d_e\left(\mathcal{E}_{\mathrm{eff}}(^2\Pi_{+1/2}) - \mathcal{E}_{\mathrm{eff}}(^2\Pi_{+3/2})\right)$.

Эффективное электрическое поле связано с параметром W_d, используемым в задачах интерпретации экспериментов по поиску eЭДМ следующим образом: $E_{\mathrm{eff}} = W_d|\Omega|$. В свою очередь:

$$W_d = \frac{1}{\Omega}\langle\Psi|\frac{H_d}{d_e}|\Psi\rangle, \quad (17)$$

где Ψ – это волновая функция рассматриваемого состояния молекулы, Ω – проекция полного электронного момента на ось молекулы, а гамильтониан взаимодействий имеет вид [29]:

$$H_d = d_e\sum_j \frac{2i}{e\hbar}c\gamma_j^0\gamma_j^5\mathbf{p}_j^2, \quad (18)$$

где $\mathbf{p}_j$ – оператор импульса электрона j, γ^0, γ_j^5 – матрицы Дирака.

Помимо eЭДМ источником $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта может являться и скалярно-псевдоскалярное ядерно-электронное взаимодействие с безразмерной константой связи C_S. Гамильтониан этого взаимодействия может быть записан в виде [2]:

$$H_{SP} = i\frac{G_F}{\sqrt{2}}AC_S\sum_j \gamma_j^0\gamma_j^5\rho_N(\mathbf{r}_j), \quad (19)$$

где A – суммарное число протонов и нейтронов в ядре, G_F – константа Ферми, $\rho_N(\mathbf{r})$ – функция ядерной плотности ядра, нормированная на единицу. Рассматриваемое взаимодействие характеризуется молекулярным параметром W_S:

$$W_S = \frac{1}{\Omega}\langle\Psi|\frac{H_{SP}}{C_S}|\Psi\rangle. \quad (20)$$

Следует отметить, что в литературе [30] часто используется константа W_{SP}, которая связана с W_S соотношением: $W_{SP} = W_S\frac{Z}{A}$, где Z – число протонов в ядре.

В данной работе эффективные электрические поля и константы W_S для электронных состояний X1$^2\Pi_{1/2}$ и X2$^2\Pi_{3/2}$ молекулы PbF были рассчитаны методом релятивистских связанных кластеров с однократными, двухкратными и неитеративными трехкратными кластерными амплитудами с использованием гамильтониана Дирака–Кулона [31] в рамках подхода конечного поля. Все электроны были включены в корреляцию. Для атома Pb был использован полноэлектронный базисный набор AAETZ [32]. Для атома F был использован полноэлектронный базисный набор AETZ [33–35]. Погрешность расчета эффективных электрических полей можно оценить в 5 %. Для этих расчетов была использована программа DIRAC15 [36], а также программы, разработанные в работе [37]. Величины $\mathcal{E}_{\rm eff}$ для основного электронного состояния PbF хорошо согласуются с предыдущими расчетами [38, 39]. Наш расчет дал следующие значения для величин эффективных электрических полей: $\mathcal{E}_{\rm eff}(^2\Pi_{+1/2}) = 38.0$ ГВ/см и $\mathcal{E}_{\rm eff}(^2\Pi_{+3/2}) = 9.3$ ГВ/см. Для констант W_S были получены значения: $W_S(^2\Pi_{+1/2}) = 222.3$ кГц и $W_S(^2\Pi_{+3/2}) = 19.4$ кГц. Согласно моделированию, для оптимального соотношения между сигналом и шумом следует использовать $\rho l = 2 \times 10^{19}$ см$^{-2}$. В этом случае угол, соответствующий текущему ограничению на значение eЭДМ [4]: $\psi_{\max} = 4 \times 10^{-7}$ рад. В работах [40, 41] обсуждалось достижение численных плотностей для молекулярных пучков вплоть до $\rho \sim (10^{12} - 10^{13})$ см$^{-3}$. В этом случае оптическая длина для достижения максимального эффекта должна быть $l \sim 20$ км. Такие оптические длины могут быть получены для пучкового эксперимента в полости [21].

Результаты обсуждаемого эксперимента смогут быть интерпретированы и в терминах константы C_S в предположении, что $d_e = 0$, подобно тому, как это было сделано, например, в работе [4]. Выполняя рассуждения, аналогичные случаю eЭДМ, используя вычисленные значения констант W_S и ограничение на величину C_S, установленное в работе [4], получаем: $\psi_{\max} = 3 \times 10^{-7}$ рад.

3. Заключение. Лучшее ограничение на eЭДМ $d_e < 1.1 \times 10^{-29}\, e$ см [4] было получено в эксперименте на молекуле ThO. В этом эксперименте изучается эффект прецессии спина электрона во внешнем электрическом поле. Данный эффект пропорционален времени, которое отдельная молекула находится в электрическом поле. В нашей работе мы предлагаем другой метод наблюдения таких эффектов – ICAS эксперимент на молекулярном пучке PbF по поиску $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$-нечетного эффекта Фарадея. При моделировании предлагаемого эксперимента были использованы параметры, соответствующие современным достижениям в области ICAS. В данной работе мы рассматриваем только принцип эксперимента и не касаемся его деталей и возможных технических проблем. В предлагаемом эксперименте уже не нужно держать дольше отдельную молекулу в электрическом поле, так как носителем эффекта является лазерный луч, взаимодействующий со множеством молекул. Согласно нашим оценкам и принимая во внимание рекордную чувствительность 3×10^{-13} рад [22], в ICAS эксперименте на пучке PbF можно, в принципе, улучшить ограничение на величину eЭДМ на 6 порядков. Это соответствует тестированию масштаба масс новых частиц, на три порядка больших по величине, чем в работе [4], т.е. на десятках ПэВ [4, 13].

Авторы признательны Т. А. Исаеву, А. Н. Петрову и П. Ракитзису за полезные обсуждения.

Работа, связанная с подготовкой статьи, моделированием эксперимента и нахождением оптимальных параметров, выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 17-12-01035). Работа, связанная с расчетом эффективных электрических полей для молекулы, была выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (гранты # 17-15-577-1 и 18-1-3-55-1), а также гранта Президента # МК-2230.2018.2. Расчеты в данной работе были выполнены с использованием ресурсов центра коллективного пользования “Моделирование и прогнозирование свойств материалов” НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ.

1. И. Б. Хриплович, *Несохранение четности в атомных явлениях*, Наука, М. (1988).
2. J. S. Ginges and V. V. Flambaum, Phys. Rep. **397**, 63 (2004).
3. M. S. Safronova, D. Budker, D. DeMille, D. F. J. Kimball, A. Derevianko, and C. W. Clark, Rev. Mod. Phys. **90**, 025008 (2018).
4. V. Andreev et al. (ACME collaboration), Nature **562**, 355 (2018).
5. A. V. Titov, N. S. Mosyagin, A. N. Petrov, T. A. Isaev, and D. DeMille, *Study of parity violation effects in polar heavy-atom molecule*, in: *Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems* [“Progress in Theoretical Chemistry and Physics” series] (2006), v. 15, ch. 2, p. 253.
6. L. V. Skripnikov, J. Chem. Phys. **147**, 021101 (2017).
7. P. G. H. Sandars, At. Phys. **4**, 71 (1975).
8. В. Г. Горшков, Л. Н. Лабзовский, А. Н. Москалев, ЖЭТФ **76**, 414 (1979) [Sov. Phys. JETP **49**, 209 (1979)].
9. M. G. Kozlov, and L. N. Labzowsky, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, 1933 (1995).
10. A. A. Bondarevskaya, D. V. Chubukov, O. Yu. Andreev, E. A. Mistonova, L. N. Labzowsky, G. Plunien, D. Liesen, and F. Bosch, J. Phys. B **48**, 144007 (2015).
11. J. J. Hudson, D. M. Kara, I. J. Smallman, B. E. Sauer, M. R. Tarbutt, and E. A. Hinds, Nature **473**, 493 (2011).
12. W. B. Cairncross, D. N. Gresh, M. Grau, K. C. Cossel, T. S. Roussy, Y. Ni, Y. Zhou, J. Ye, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **119**, 153001 (2017).
13. J. Engel, M. J. Ramsey-Musolf, and U. van Kolck, Prog. Part. Nucl. Phys. **71**, 21 (2013).
14. M. Pospelov and A. Ritz, Phys. Rev. D **89**, 056006 (2014).
15. D. V. Chubukov and L. N. Labzowsky, Phys. Rev. A **93**, 062503 (2016).

16. Н. Б. Баранова, Ю. В. Богданов, Б. Я. Зельдович, УФН **123**, 349 (1977) [Sov. Phys. Usp. **20**, 1977, (1978)].
17. О. П. Сушков, В. В. Фламбаум, ЖЭТФ **75**, 1208 (1978) [Sov. Phys. JETP **48**, 608 (1978)].
18. Л. М. Барков, М. С. Золотарев, Д. А. Мелик-Пашаев, Письма в ЖЭТФ **48**, 134 (1988) [JETP Lett. **48**, 144 (1988)].
19. D. Budker, W. Gawlik, D. Kimball, S. M. Rochester, V. Yashchuk, and A. Weis, Rev. Mod. Phys. **74**, 1153 (2002).
20. L. Bougas, G. E. Katsoprinakis, W. von Klitzing, and T. P. Rakitzis, Phys. Rev. A **89**, 052127 (2014).
21. V. M. Baev, T. Latz, and P. E. Toschek, Appl. Phys. B **69**, 171 (1999).
22. M. Durand, J. Morville, and D. Romanini, Phys. Rev. A **82**, 031803 (2010).
23. D. V. Chubukov and L. N. Labzowsky, Phys. Rev. A **96**, 052105 (2017).
24. D. V. Chubukov, L. V. Skripnikov, and L. N. Labzowsky, Phys. Rev. A **97**, 062512 (2018).
25. D. V. Chubukov, L. V. Skripnikov, L. N. Labzowsky, V. N. Kutuzov, and S. D. Chekhovskoi, Phys. Rev. A **99**, 052515 (2019).
26. D. V. Chubukov, L. V. Skripnikov, V. N. Kutuzov, S. D. Chekhovskoi, and L. N. Labzowsky, Atoms **7**, 56 (2019); doi:10.3390/atoms7020056.
27. K. K. Das, I. D. Petsalakis, H.-P. Liebermann, A. B. Alekseyev, and R. J. Buenker, J. Chem. Phys. **116**, 608 (2002).
28. J. R. Almond, *PhD Thesis "Laser cooling of YbF molecules for an improved measurement of the electron electric dipole moment"*, Imperial College, London (2017).
29. E. Lindroth, B. W. Lynn, and P. G. H. Sandars, J. Phys. B **22**, 559 (1989).
30. A. N. Petrov, L. V. Skripnikov, A. V. Titov, and V. V. Flambaum, Phys. Rev. A **98**, 042502 (2018).
31. L. Visscher, E. Eliav, and U. Kaldor, J. Chem. Phys. **115**, 9720 (2002).
32. K. G. Dyall, Theor. Chem. Acc. **115**, 441 (2006).
33. K. G. Dyall, Theor. Chem. Acc. **135**, 128 (2016).
34. A. S. P. Gomes, K. G. Dyall, and L. Visscher, Theor. Chem. Acc. **127**, 369 (2010).
35. K. G. Dyall, Theor. Chem. Acc. **131**, 1217 (2012).
36. R. Bast, T. Saue, L. Visscher, and H. J. Aa. Jensen, with contributions from V. Bakken, K. G. Dyall, S. Dubillard, U. Ekstroem, E. Eliav, T. Enevoldsen, E. Fasshauer, T. Fleig, O. Fossgaard, A. S. P. Gomes, T. Helgaker, J. Henriksson, M. Ilias, Ch. R. Jacob, S. Knecht, S. Komorovsky, O. Kullie, J. K. Laerdahl, C. V. Larsen, Y. S. Lee, H. S. Nataraj, M. K. Nayak, P. Norman, G. Olejniczak, J. Olsen, Y. C. Park, J. K. Pedersen, M. Pernpointner, R. Di Remigio, K. Ruud, P. Salek, B. Schimmelpfennig, J. Sikkema, A. J. Thorvaldsen, J. Thyssen, J. van Stralen, S. Villaume, O. Visser, T. Winther, and S. Yamamoto. DIRAC, a relativistic ab initio electronic structure program, Release DIRAC15; http://www.diracprogram.org.
37. L. V. Skripnikov, J. Chem. Phys. **145**, 214301 (2016).
38. L. V. Skripnikov, A. D. Kudashov, A. N. Petrov, and A. V. Titov, Phys. Rev. A **90**, 064501 (2014).
39. S. Sasmal, H. Pathak, M. K. Nayak, N. Vaval, and S. Pal, J. Chem. Phys. **143**, 084119 (2015).
40. D. Patterson and J. M. Doyle, J. Chem. Phys. **126**, 154307 (2007).
41. N. R. Hutzler, H.-I. Lu, and J. M. Doyle, Chem. Rev. **112**, 4803 (2012).