

電子の電気双極子モーメント (EDM) 探査のための

相対論的分子理論の開発

○阿部穰里¹, Geetha Gopakumar¹, B. P. Das², 波田雅彦¹, D. Mukherjee²

¹ 首都大学東京理工学部化学科 (〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1)

² Indian Institute of Astrophysics

(II Block, Koramangala, Bangalore 560 034, INDIA)

³ Raman Centre for Atomic, Molecular and Optical Sciences

(2A & 2B Raja S. C. Mullick Road, Jadavpur, Kolkata 700032, India)

【緒言】

素粒子が電気双極子モーメント(Electric dipole moment: EDM)を持つならば、T(時間反転)対称性が破れてなくてはならない。T対称性破れはCPT定理よりCP(電荷・パリティ)対称性破れを意味する。CP対称性破れは標準模型に組み込まれている小林-益川理論で説明され、中間子において実際に観測されている。しかし小林-益川によるCP対称性破れは小さく、現在の宇宙に反物質がほとんど残っていないことを説明できない。このような標準模型の欠点を補完するために、標準模型を拡張した理論(例えば超対称性理論(SUSY)など)がいくつか提案されている。

電子EDM(d_e)に話を絞ると、各拡張理論が予測する電子EDMの値は、標準模型の予測する電子EDMの値 $10^{-38}(\text{e cm})$ より 10^{10} 以上大きく、また各理論によってばらつきがある。そして現在、実験的に見積もられている d_e の上限値は、2011年5月Nature誌に発表されたYbF分子の実験結果 $10.53 \times 10^{-28}(\text{e cm})$ である[1]。ただしこの実験の測定誤差は観測値を上回っている。したがって有限の d_e の値が観測されたわけではなく、あくまで上限値が与えられたにすぎない。今後測定精度が向上して、有限値として d_e が特定できると、どの拡張理論がよりの確かさを判断する重要な指標になる。

電子EDMは通常その値 d_e だけを直接観測することはできない。原子に作用させる外部電場や分子に存在する内部電場と d_e との相互作用として観測される。また非相対論で考慮すると原子の相互作用エネルギーは0になってしまうが、相対論的な枠組みで考えると同じ値が非0になることが知られている。さらに相互作用エネルギーは原子番号Zの2~3乗にスケールして増幅されるため、重原子や重原子を含む分子を用いると高い感度で測定できる。観測する相互作用エネルギーは、原子・分子内で増幅されて d_e に比例する値となるが、その増幅を示す係数部分は原子や分子の電子状態の波動関数からしか求められない。したがって、 d_e の値を知るためには、原子・分子での観測値と、相対論的な電子状態理論計算による増幅係数の算出が双方必要となる。

また実験室で原子に作用できる外部電場は最大100kV/cm程度である。しかし極性分子に内在している内部電場は1~100GV/cmのオーダーと予想されており、分子で測定する方が高い感度が得られると期待される。こうした背景から、現在は分子を用いた電子EDM探査にも注目が集められている。原子の増幅係数に関しては、相対論と電子相関理論において高精度な取り扱いをした理論計算が多く報告されている。しかし分子においては、原子の時とは演算子の形が異なること、原子専用のプログラムは使えないことなどから、十分に高精度な計算例はみられていない。Meyerらの行っているように、擬相対論的な枠組みで分子を取り扱い、最後に原子の理論に射影するなど、近似を含む研究が一般的である[2,3]。そこで本研究では4成分Dirac-Coulomb Hamiltonianを用いて分子における増幅係数(分子では特に有効電場と呼ばれる)を求める。

【理論・方法】

1 電子が EDM(d_e)を持つと仮定すると、その向きはスピン軸に平行か反平行になる。したがって分子中の電子の EDM は分子内の電場 \mathbf{E}_{int} と相互作用をし、以下のような摂動を生じさせる。

$$\tilde{H}_{EDM} = -d_e \sum_i^{N_{\text{elec}}} \beta \sigma_i \cdot \mathbf{E}_{\text{int}} \quad (1)$$

ここで β は Dirac 行列であり、 σ は Pauli のスピン行列である。この演算子は相対論の要請を満たすように設計されている。多電子系 Dirac-Coulomb(DC)ハミルトニアン H_{DC} の解を $|\Psi_{DC}\rangle$ とすると、実際に測定するのは、下記で表される一次摂動エネルギーになる。

$$\langle \Psi_{DC} | \tilde{H}_{EDM} | \Psi_{DC} \rangle = d_e \langle \Psi_{DC} | \sum_i^{N_{\text{elec}}} \beta \sigma_i \cdot \mathbf{E}_{\text{int}} | \Psi_{DC} \rangle = d_e W \quad (2)$$

W が今回分子軌道法から求めたい有効電場である。分子の内部電場 \mathbf{E}_{int} は、2 つの原子核の作る電場と電子が作る電場に分類することができる。これまで報告されている分子の研究例では、電子の作る電場を無視する近似が行われてきた。しかし本研究では電子の電場も考慮できるように下記のような 1 体の有効演算子を用いる[4]

$$\frac{1}{d_e} \langle \Psi_{DC} | \hat{H}_{EDM} | \Psi_{DC} \rangle = 2i \frac{c}{e} \langle \Psi_{DC} | \beta \gamma_5 p^2 | \Psi_{DC} \rangle \quad (3)$$

プログラムは主に UTChem を用い、有効電場計算のためにソースコードを改変して求めた。

【結果】

表 1 は EDM 測定の候補と考えられている 8 種の分子について、DC Hartree-Fock 法/Faegri's basis(TZ)を用いて W の値を見積もったものである。我々の結果は過去の Meyer らの計算結果[2,3]と概ね近い傾向を見せている。Meyer らの手法に比べて本研究では相対論効果を高精度に取り込んでいるが、電子相関効果が考慮されていない。現在 CCSD 法を用いてより高精度な値を出せるよう検討中である。

表 1. 8 つの分子における有効電場(W)と永久双極子モーメント(PDM)の値

		YbF		BaF		HgF		PbF	
		This work	Meyer	This work	Meyer	This work	Meyer	This work	Meyer
W	(GV/cm)	16.7	32	5.8	6.1	79.3	95	-40.5	-31
PDM	(Debye)	4.2	3.55	4.21	3.51	4.98	4.14	4.42	3.38
		YbSr ⁺		YbBa ⁺		YbRb		YbCs	
		This work	Meyer	This work	Meyer	This work	Meyer	This work	Meyer
W	(GV/cm)	3.1	-11	0.7	1.2	0.3	-0.7	0.2	0.5
PDM	(Debye)	6.6	5.1	4.5	5.1	0.6	0.2	0.8	0.2

参考文献

- [1] J. J. Hudson et al. Nature, **473** (2011), 495.
- [2] E. R Meyer and J. L. Bohn, Phys. Rev. A, **78**, (2008) 010502(R).
- [3] E. R. Meyer and J. L. Bohn, Phys. Rev. A, **80**, (2009) 042508.
- [4] B. P. Das, Lecture Notes in Chemistry, **50**, 411 (1988)