

## 電子 EDM 探査のための有効電場解析：XH 分子と XF 分子の比較

○砂賀彩光<sup>1</sup>, 阿部穰里<sup>1</sup>, B. P. Das<sup>2</sup>, 波田雅彦<sup>1</sup><sup>1</sup> 首都大院理工 (〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1)<sup>2</sup> 東工大院理工 (〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

【緒言】宇宙誕生時は粒子と反粒子が同数存在したが、現在の宇宙には反粒子はほとんど存在しないことは、宇宙生成過程の大きな謎である。反粒子が消滅した理由の一つは、Charge-Parity(CP)対称性が破れているためだと考えられている。しかし現在観測されている CP 対称性の破れは小さく、反粒子消滅の理由を定量的には説明できていない。宇宙の謎を解明するために、より大きな CP 対称性の破れの探査が行われている。

新たな CP 対称性の破れとして存在が予言されている物理量の一つが、電子の電気双極子モーメント(eEDM) $d_e$ である[1]。eEDM は、分子内部の電場( $\mathbf{E}_{\text{int}}$ )との相互作用エネルギー $\Delta E$ を分光実験で観測することで、その存在が確認される。

$$\Delta E = d_e \sum_i^{N_e} \langle \Psi | \beta \sigma_i \cdot \mathbf{E}_{\text{int}} | \Psi \rangle = d_e E_{\text{eff}} \quad (1)$$

$N_e$ は分子の電子数、 $\beta, \gamma$ は Dirac 行列を表し、 $\Psi$ は分子の電子波動関数を表す。 $i$ は電子のラベルである。 $E_{\text{eff}}$ は有効電場と呼ばれ、量子化学計算でのみ求めることができる。

$\Delta E$ は非常に小さく観測値より測定誤差の方が大きいので、今までの実験報告では $d_e$ の値は上限値が推定されているにすぎない。測定感度は $E_{\text{eff}}$ が大きいほど上昇するため、大きな  $E_{\text{eff}}$ を持つ分子の提案及びその理由の解析は、eEDMを発見するために非常に重要である。先行研究では、分子が大きな有効電場 $E_{\text{eff}}$ を持つためには、分子の極性が高いことが必要だと考えられていた[2]。

しかし本研究では、極性が小さい分子でも大きな  $E_{\text{eff}}$ をもちうることを発見し、価電子軌道エネルギー差が  $E_{\text{eff}}$ の大きさに影響を及ぼす可能性があることを明らかにした。

【計算方法】本研究では、YbH, YbF, HgH, HgF 分子の  $E_{\text{eff}}$ 及び分子の永久双極子モーメント(PDM)を、4成分 Dirac-CCSD 法で計算した。UTChem と DIRAC08 を組み合わせ、プログラムの一部を改変して計算を行った。Yb, Hg 原子には DZ, QZ)、H, F 原子には Watanabe basis set を用いた。

【結果と考察】CCSD 法による計算結果を表 1 に示す。HgH は PDM が非常に小さいにも拘らず、HgF と同程度の  $E_{\text{eff}}$ を持つ。また、YbH は YbF より明らかに大きい  $E_{\text{eff}}$ を持つ。この結果は過去研究に基づく予想と矛盾する。

$E_{\text{eff}}$ のハミルトニアンから、Dirac-Fock レベルでは Single occupied molecular orbital(SOMO)のみが値に寄与し、SOMO で重原子の  $sp$  混成が起きることが、 $E_{\text{eff}}$ が値を持つ条件である。Yb, Hg 原子の価電子軌道は  $6s$  であるので  $S$ 、SOMO に  $6p$  軌道が大きく寄与するほど  $E_{\text{eff}}$ が大きくなると考えられる。マリケン電荷を用いて各分子の SOMO を解析したところ、水素化物はフッ化物より  $p$  軌道の寄与が大きいことが分かった。その理由は、水素化物における各原子の価電子軌道のエネルギー差は、フッ化物より小さく(表 2 参照)、軽原子の価電子軌道と重原子の  $6p$  軌道が相互作用しやすいためだと考えられる。価電子軌道エネルギー差が小さい原子の組み合わせを探すことで、 $E_{\text{eff}}$ が大きい分子を新たに提案することができるが、これについては当日報告する。

表 1. CCSD(QZ)での計算値

	$E_{\text{eff}}$ (GV/cm)	PDM (D)
YbH	31.3	2.93
YbF	23.2	3.59
HgH	118.5	0.15
HgF	114.4	2.97

表 2. 原子の価電子軌道のエネルギー差(a.u.)

YbH	YbF	HgH	HgF
0.30	0.53	0.17	0.41

[1] E. E. Salpeter, Phys. Rev. **112**, 1642 (1958).[2] P. G. H. Sandars, Phys. Rev. Lett. **19**, 1396 (1967); D. DeMille, Phys. Today **68**(12), 34 (2015).