

## 異核2原子分子における scalar-pseudoscalar相互作用の量子化学的研究

(首都大院理工\*, 東工大院理工\*\*) ○砂賀彩光\*, 阿部穰里\*, Das Bhanu\*\*, 波田雅彦\*

Quantum-Chemical calculations of the scalar-pseudoscalar interaction in heteronuclear diatomic molecules

(Tokyo Metropolitan Univ.\*, Tokyo Institute of Technology \*\*)

○Ayaki Sunaga\*, Minoru Abe\*, Bhanu Das\*\*, Masahiko Hada\*

**【背景・理論】** scalar-pseudoscalar(s-ps)相互作用[1]は、核子と電子が scalar 粒子及び pseudoscalar 粒子を受け渡すことにより発生する相互作用である。scalar 粒子・pseudoscalar 粒子とは、スピンが0の粒子であり、pseudoscalar 粒子は標準模型を拡張した素粒子理論(拡張理論)で存在が予言されている。s-ps相互作用は、電子 electric dipole moment(EDM)と共に、時間反転対称性(T対称性)を破る相互作用の一つである。T対称性の破れは、CPT定理により、電荷・パリティ反転対称性(CP対称性)の破れを示す。CP対称性の破れは、実験的にも理論的にも証明されているが、現在発見されているCP対称性の破れは小さく、現在の宇宙に反物質がほとんど残っていない理由を説明できない。この理由を説明するためには、CP対称性が大きく破れている実験事実を発見する必要がある。s-ps相互作用では、T対称性が大きく破れている可能性が示唆されており、したがってs-ps相互作用が検出されて大きなT対称性破れが発見できれば、宇宙の成り立ちを説明する助けとなる。

s-ps 相互作用エネルギーのハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{sps}}$  は、以下のように定義される。

$$\hat{H}_{\text{sps}} \equiv i\sqrt{2}G_{\text{F}}k_{\text{s}} \sum_j^{N_e} \beta\gamma^5 \rho_N(\mathbf{r}_j) \quad (1)$$

$N_e$  は分子の電子数である。 $G_{\text{F}}$  はフェルミ定数、 $\beta$  及び  $\gamma^5$  は Dirac 行列を表し、 $\rho_N(\mathbf{r})$  は核の電荷密度を表す。 $j$  は電子のラベルである。 $k_{\text{s}}$  は s-ps 相互作用定数と呼ばれ、拡張理論を構築するために必要な物理定数である。 $k_{\text{s}}$  の値は直接測定できず、(2)式で定義される、実験で観測可能な相互作用エネルギー  $\Delta E_{\text{sps}}$  と、(3)式で定義される分子の電子波動関数  $\Psi$  を用いた計算から得られる  $W_{\text{s}}$  との比から求める必要がある。また重原子を含む異核二原子分子においては、軽原子の  $\Delta E_{\text{sps}}$  に対する寄与が小さいので、 $\Delta E_{\text{sps}}$  は重原子 X の核の電荷密度を  $\rho_X(\mathbf{r})$  として、以下のように表せる。

$$\Delta E_{\text{sps}} \equiv \langle \Psi | \hat{H}_{\text{sps}} | \Psi \rangle = k_{\text{s}} \langle \Psi | \hat{W}_{\text{s}} | \Psi \rangle = k_{\text{s}} W_{\text{s}} \quad (2)$$

$$\hat{W}_{\text{s}} \equiv i\sqrt{2}G_{\text{F}} \sum_j^{N_e} \beta\gamma^5 \rho_X(\mathbf{r}_j), \quad W_{\text{s}} \equiv \langle \Psi | \hat{W}_{\text{s}} | \Psi \rangle \quad (3)$$

$\Delta E_{\text{sps}}$  は、二原子分子の分子軸正・負方向に磁場を印加し、スピンの歳差運動の差を観測することで測定される。しかし現在の実験技術では  $\Delta E_{\text{sps}}$  の観測値より測定誤差の方が大きいため、 $k_{\text{s}}$  の値は確定値としてではなく、上限値として求められている。今後の実験精度の向上が望まれている。

$\Delta E_{\text{sps}}$  は  $W_{\text{s}}$  に比例するため、 $k_{\text{s}}$  の精度を良くするためには、 $W_{\text{s}}$  が大きい系を用いて実験を行うことが有効である。重原子を含む常磁性極性分子は、大きな  $W_{\text{s}}$  を示すことが知られている。 $W_{\text{s}}$  の過去計算はいくつか報告されているが、 $W_{\text{s}}$  が分子によってどのように異なるかを比較考察した研究例はない。そこで本研究では  $W_{\text{s}}$  を高精度な相対論的電子状態理論で決定する手法を新たに開発

し、さらにフッ化物分子(XF)に対して  $W_s$  が大きくなる理由を電子状態理論の観点から解析した。

**【計算方法】** 本研究では、 $\hat{H}_{\text{sps}}$  を電子のハミルトニアンに摂動的に取り込んで考慮し、核の電荷密度  $\rho_X(r)$  は Gauss 型関数を仮定して用いた。我々が開発したプログラム[2]では、Dirac-Fock 法と Dirac-CCSD 法に基づいた  $W_s$  の値が求められるが、今回の発表では DF 法に基づく解析を行う。基底関数は、重原子には Dyall Double zeta basis set, F 原子には Watanabe basis set を用いた。計算プログラムは UTChem を使い、 $W_s$  を計算するためにソースコードを改変した。

**【結果・考察】** XF 分子(X=Cd, Ba, Yb, Hg, Ra)の  $W_s$  の値を表 1 に示す。 $W_s$  は概ね X 原子の核電荷  $Z$  と相関があるが、HgF はより重原子である RaF よりも大きな値を示す。そこで HgF が特異的に大きな  $W_s$  を持つ理由を考察する。

表 1 Dirac-Fock 法で求めた XF 分子の  $W_s$  ( $Z$  は X 原子の核電荷を示す)

	CdF	BaF	YbF	HgF	RaF
$Z$	48	56	70	80	88
$W_s$ [kHz]	8.7	5.5	29.9	226.9	113.6

$W_s$  は核の電荷密度と電子波動関数の重なりを積分したものであるため、核上の電子密度が大きいほど  $W_s$  の値が大きくなると考えられる。ただしハミルトニアン中の  $\beta\gamma^5$  演算子の影響で、large 成分と small 成分の行列要素のみが寄与する。したがって large, small の波動関数が原子核上で共に大きくなる条件を考えると、s 軌道の large 成分と p 軌道の small 成分の重なりが重要であることがわかる。また DF 法レベルでは、 $W_s$  の値は演算子の形から SOMO 軌道のみ依存する。

そこで原子のプログラム `grasp2K` を用いて、X 原子の  $ns^1np^1$  励起状態の電子波動関数を求め、核上の有効電子密度  $\rho_{\text{elec}}$  (価電子 s 軌道の large 成分と価電子 p 軌道の small 成分の波動関数の積に対する核上での値)と  $W_s/Z$  の相関を調べた。(図 1)ただし  $\hat{W}_s$  演算子中の核電荷密度の寄与を取り除くため、 $W_s$  を原子番号  $Z$  で割って比較した。X 原子の有効電子密度  $\rho_{\text{elec}}(0)$  と  $W_s/Z$  は良い相関がみられた。特に Hg は、原子番号のより大きい Ra よりも、核上の有効電子密度が大きいことがわかり、 $W_s/Z$  においても HgF が RaF よりも大きいということが、この解析から理解できる。しかし HgF は他の分子から予測される  $W_s/Z$  よりも、さらに大きな値を示している。この特異性を考えるために、XF 分子における SOMO 軌道の Mulliken 解析を行ったところ、HgF では SOMO 軌道に p 軌道の small 成分が他の分子よりも多く混入していることが分かった。Mulliken 電荷解析の結果については当日発表する。

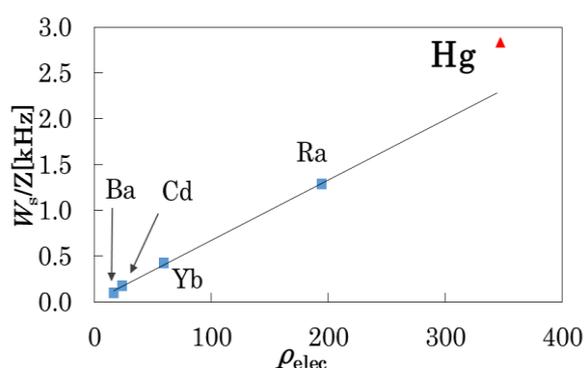


図 1 核極近傍の有効電子密度と  $W_s/Z$  の相関

[1] E. A. Hinds, C. E. Loving and P. G. H. Sandars, B62 (1976) 97.

[2] M. Abe, G. Gopakumar, M. Hada, B. P. Das, H. Tatewaki and D. Mukherjee, Phys. Rev. A 00, 2500 (2014).