

電気双極子モーメントの測定における有効電場と 分子内部の電子スピントルク

¹京大院工

○高橋俊貴¹, 瀬波大士¹

Effective electric field for measurement of electron electric dipole and spin torque in diatomic molecules

○Toshiki Takahashi¹, Masato Senami¹

¹ Department of Micro Engineering, Kyoto University, Japan

【Abstract】

The existence of a non-zero electric dipole moment (EDM) of the electron reveals a violation of the time reversal symmetry, so many experiments are trying to detect the electron EDM. Recently, heavy polar diatomic molecules, which have large internal electric fields, are selected for experiments to search for the electron EDM, where the precession motion of the electron spin is used for the detection. This motion depends on the internal effective electric field (E_{eff}). The improvements of the computational accuracy of E_{eff} for the EDM and the understanding of spin precession are important for the experimental determination of the upper bound of the EDM.

In this work, calculations of E_{eff} in YbF and ThO, which are representative ones for experiments of the electron EDM, are performed on the basis of the restricted active space configuration interaction approach by using four-component relativistic electronic structure calculations. We also discuss the effect of the difference of the bond length.

【序】

電子の電気双極子モーメント(EDM)は、そのスピンの付随し生まれる電荷分布の偏りを表すベクトル量である。ところで、素粒子論において CPT 定理により CP 対称性と T 対称性は等価である。小林・益川理論によって CP 対称性の破れは説明されており、K 中間子において実際に観測済みである。一方で T 対称性の破れを証明する現象はまだ観測されていない。そのため、時間反転対称性破れの直接的な証拠となる電子 EDM の探索実験が世界中で行われている。また、超対称性モデルなどの標準モデルに対する多くの拡張理論では、現在の実験精度で観測可能なほどの大きな値を持った電子 EDM の存在が予言されている。すなわち、電子 EDM の観測は標準モデルを超える新たな物理の探索の指標となる。

本研究では特に、分子を対象とした電子 EDM(eEDM)の観測実験に注目する。これらの実験では、eEDM と電場の相互作用エネルギーが観測される。eEDM の値 d_e を知るには、有効電場 E_{eff} を計算しなければならない。この計算には、相対論効果や電子相関を考慮する必要があり、その手法や条件の違いから研究グループによって結果に差異が出ている。

本研究では、そのような違いの内、分子の核間距離の変化に注目し、他の研究グループ同様、対象分子の有効電場を計算することに加え、場の理論に基づく局所的な電子の運動方程式に EDM 起因のスピントルクを加えることで得られる、EDM 存在下でのスピンドYNAMICS[1]の描像にも注目する。

【方法 (実験・理論)】

場の量子論における EDM 存在下での局所的な電子スピンの運動方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{s}_e(x) = \vec{t}_e(x) + \vec{\zeta}_e(x) + \vec{T}_{EDM}(x)$$

とかける[1]。ここで、それぞれの物理量は次のように定義される。

$$\begin{aligned} \hat{s}_e^i &= \hat{\psi}^\dagger \frac{\hbar}{2} \Sigma^i \hat{\psi}, \quad \hat{t}_e^i = -\varepsilon_{ijk} \frac{i\hbar c}{2} \left[\hat{\psi}^\dagger \gamma^0 \gamma^k \hat{D}_{ej} \hat{\psi} - (\hat{D}_{ej} \hat{\psi})^\dagger \gamma^0 \gamma^k \hat{\psi} \right], \\ \hat{\zeta}_e^i &= -\partial_i \hat{\phi}_5, \quad \hat{\phi}_5 = \frac{\hbar}{2Z_e e} \hat{j}_5^0, \quad \hat{T}_{EDM} = d_e \hat{\psi} \vec{\Sigma} \times \vec{E} \hat{\psi} + d_e i \hat{\psi} \gamma^0 \vec{\gamma} \times \vec{B} \hat{\psi} \end{aligned}$$

本要旨ではスピン角運動量密度 s_e を考察の対象とする。

計算対象は YbF 及び ThO とし、4 成分相対論的電子状態計算には DIRAC17[2]、スピン角運動量密度等の局所物理量には我々のグループが開発した QEDynamics[3]を用いる。

【結果・考察】

Fig.1 には YbF における有効電場の計算結果を示す。グラフの横軸には Yb と F の核間距離を表示し、縦軸に有効電場の値をプロットしている。なお、広く用いられる 2 種類の近似法を用いて計算した。有効電場の核間距離との依存性が見て取れる。Fig.2, 3 には核間距離 2.074Å 時の角運動量密度とそのスモール成分によるものをプロットしてあり、Fig.4,5 には核間距離 2.014Å 時とのそれぞれの物理量の差分を表示している。

Fig2,3 のようなスピン角運動量密度の左右非対称性は、同じ極性分子である HF⁺ には見られない[1]。また、Fig4,5 を見ると、核間距離の違いは、スピノルのスモール成分による角運動量密度変化に顕著に現われている。核間距離の違いによりスピン角運動量密度の非対称性が変化することは、実際に核間距離によって有効電場の値が変わることとも矛盾しない。

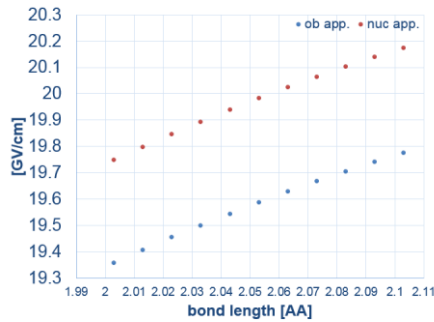


Fig. 1. E_{eff} in each bond for YbF

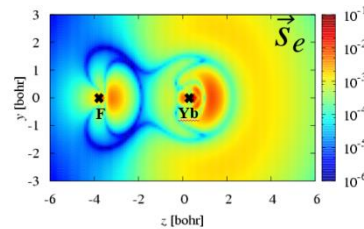


Fig. 2. \vec{s}_e (2.074[Å])

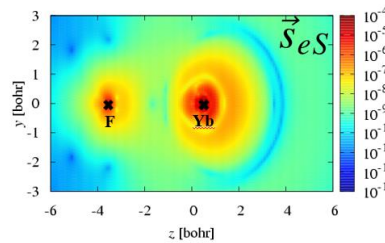


Fig. 3. \vec{s}_{eS} (2.074[Å])

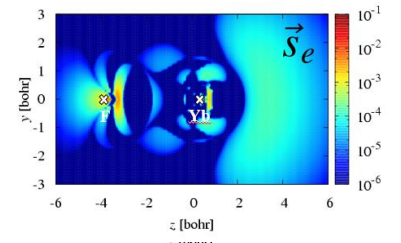


Fig. 4. The difference of \vec{s}_e between 2.074 and 2.014

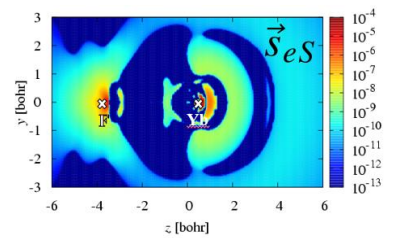


Fig. 5. The difference of \vec{s}_{eS} between 2.074 and 2.014

【参考文献】

- [1] M. Fukuda, K. Soga, M. Senami, and A. Tachibana, Phys. Rev. A 93, 012518(2016)
- [2] <http://www.diracprogram.org/doc/release-17/>
- [3] <https://github.com/mfukudaQED/QEDalpha>