

電子 EDM 探査のための
相対論的量子化学計算による有効電場の解析

○砂賀彩光¹, 阿部穰里¹, B. P. Das², 波田雅彦¹

¹ 首都大院理工, ² 東工大理工

sunaga-ayaki@ed.tmu.ac.jp

【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。その直接的な原因は、Charge-Parity(CP)対称性が破れており、粒子と反粒子が従う物理法則が異なること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。より大きな CP 対称性の破れを発見することは、宇宙の謎を解明するために必須である。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に、電子の電気双極子モーメント(eEDM) d_e がある[1]。eEDM は、分子内部の電場(\mathbf{E}_{int})との相互作用エネルギー ΔE を実験的に観測することで、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、 β, σ は Dirac 行列を表し、 Ψ 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_{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。

ΔE 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。 E_{eff} が大きい分子を用いると測定感度が上昇するため、 E_{eff} が大きい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。過去 50 年の間、分子が大きく分極しているほど、内部電場 E_{eff} も大きいと考えられていた[2]。しかし本研究では、分極が小さい分子でも大きな E_{eff} を持ちうることを発見し、原子軌道エネルギー差が E_{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_{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 Dyal basis set (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。水素化物は、PDM がフッ化物よりも小さいにもかかわらず大きい E_{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_{eff} のハミルトニアンから、Dirac-Fock レベルでは SOMO のみが値に寄与し、SOMO に p 軌道が混ざることが、 E_{eff} が値を持つ条件である。そのため、SOMO に p 軌道が大きく寄与するほど E_{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、各原子の価電子軌道のエネルギー差が F 系より小さく(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。本解析結果から、 E_{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。

[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)

表 1. CCSD(QZ)での計算値

	E_{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