

Шестиатомная молекула RaOCH_3 как платформа для изучения взаимодействий с гало Темной материи

© А.В. Захарова^{1,2}¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“,
Гатчина, Россия

e-mail: zakharova.annet@gmail.com

Поступила в редакцию 04.04.2025 г.

В окончательной редакции 10.06.2025 г.

Принята к публикации 13.06.2025 г.

Изучено взаимодействие электронной оболочки шестиатомной молекулы типа „симметричный волчок“ с гало Темной материи в предположении, что оно образовано конденсатом псевдоскалярного аксионного поля. В линейном порядке вклад соответствующего взаимодействия обращается в ноль для некиральных молекул в равновесных конфигурациях, поэтому ранее для его поиска рассматривались киральные молекулы. В настоящей работе мы указываем на возможность проявления этого взаимодействия для некиральных молекул типа „симметричный волчок“ через переходы между возбужденными колебательно-вращательными состояниями и рассматриваем его на примере молекулы RaOCH_3 . Для этой молекулы эффект оказывается сильно подавлен, но рассмотренный механизм может привести к наблюдаемым эффектам в других молекулах этого типа.

Ключевые слова: аксион, симметричный волчок, уровни противоположной четности, метод самосогласованного поля.

DOI: 10.61011/OS.2025.07.61100.7682-25

1. Введение

Важной проблемой фундаментальной физики является природа Темной материи, существование которой известно из кривых вращений галактик и данных гравитационного линзирования галактическими кластерами. Она также необходима для описания образования структур в ранней Вселенной и наблюдаемых неоднородностей реликтового излучения.

Потенциальными кандидатами на роль частиц Темной материи являются псевдоскалярные частицы, называемые аксионами. Такие частицы в определенном диапазоне масс могут решать сильную $\mathcal{CP}$ -проблему [1], которая не решена в Стандартной модели (СМ) физики элементарных частиц [2,3]. Дискретное преобразование $\mathcal{C}$ обозначает симметрию относительно зарядового сопряжения, $\mathcal{P}$ связано с обращением пространства. Нарушение симметрии относительно $\mathcal{CP}$ -преобразования эквивалентно нарушению симметрии относительно обращения времени $\mathcal{T}$ [4]. В СМ все известные нарушения четности происходят при слабом взаимодействии, связанном со смешиванием матриц кварков Кабиббо-Кобаяси-Маскавы [5,6] и матриц нейтрино — Понтекорво-Маки-Накагавы-Сакавы [7,8]. Некоторые физические эффекты, например, электрический дипольный момент электрона, оказываются сильно подавленными в Стандартной модели [9–12]. Однако отдельные сценарии Новой физики, например, суперсимметрия, предсказывают намного

большие значения для этих эффектов. Существование новых источников $\mathcal{CP}$ -нарушения может быть также необходимо для объяснения проблемы барионной асимметрии Вселенной [13].

Молекулярные эксперименты позволяют исследовать эффекты, связанные с нарушением $\mathcal{P}$ - и $\mathcal{T}$ -четностей [10,14–17]. Например, ограничение на электрический дипольный момент электрона было получено в эксперименте с двухатомной молекулой HfF^+ [18]. Теоретические расчеты нужны, чтобы оценить параметры нарушения $\mathcal{P}$ - и $\mathcal{T}$ -четностей для этих эффектов [19].

Среди исследований эффектов, вызванных новыми взаимодействиями с аксионами на молекулах, можно выделить работы по эффектам обмена аксионами между электронами и ядрами, а также между электронами [20,21]. Чувствительность киральной молекулы CHBrClF к взаимодействиям с космическими полями аксионов и темных фотонов, образующих гало Темной материи, ранее была рассмотрена в [22]. Симметрии взаимодействия подразумевают, что этот эффект может быть ненулевым только для киральных конфигураций. Однако даже некиральные в равновесной конфигурации молекулы могут быть киральными в неравновесных конфигурациях. В частности, такими являются молекулы типа „симметричный волчок“, такие как RaOCH_3 . В этой работе мы показываем, как эти эффекты взаимодействия с фоновыми полями Темной материи могут проявлять-

ся в переходах между возбужденными колебательными состояниями.

Шестиатомные молекулы характеризуются богатым колебательно-вращательным спектром, в котором присутствуют различные уровни противоположной четности. Помимо дублетов, связанных с вращением электронной оболочки, трехатомные линейные молекулы обладают I -дублетами [23–25]. В шестиатомных молекулах типа „симметричный волчок“ появляются дополнительные дублеты, связанные с вращением лиганда CH_3 в двух противоположных направлениях [26]. Таким образом, в такой молекуле как RaOCH_3 , можно исследовать как I -, так и K -дублеты, позволяющие подавлять многие систематические эффекты при проведении эксперимента.

$\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$ -нечетные эффекты ранее изучались и в молекулах типа „симметричный волчок“. Интересующая нас молекула RaOCH_3 была изучена в работе [26]. Кроме того, еще в нескольких работах были исследованы другие молекулы [27–30]. Лазерное охлаждение в многоатомных молекулах было теоретически предсказано [31–34] и показано экспериментально [35,36]. Ранее были получены большие значения параметров экспериментальной чувствительности радиосодержащих молекул типа „симметричный волчок“ к исследованию эффектов, нарушающих симметрии $\mathcal{CP}$ и $\mathcal{P}$: RaOCH_3 [26], RaOCH_3^+ и RaCH_3^+ [37].

2. Взаимодействие полей Темной материи с электронной оболочкой молекул

Предположим, что гало Темной материи порождено конденсатом Бозе-Эйнштейна псевдоскалярных частиц-аксионов, описываемых полем a . Благодаря большой плотности аксионного конденсата и малой константе связи взаимодействия с обычными частицами [38], его когерентность не нарушается даже на космологических временах. Таким образом, обычные частицы взаимодействуют с таким конденсатом когерентным образом, поэтому его можно считать классическим полем. Кроме того, Темный сектор может включать в себя дополнительные поля, такие как, например, новое векторное поле A^μ , известное как Темный фотон. Среди предполагаемых взаимодействий этих полей Темного сектора с полями СМ рассматриваются следующие $\mathcal{P}$ - и $\mathcal{T}$ -нечетные члены взаимодействия [22]:

$$\mathcal{L}^a = -\frac{g_{a\bar{e}e}}{m_e} (\partial_\mu a) \bar{\psi}_e \gamma^\mu \gamma^5 \psi_e, \quad \mathcal{L}^{\tilde{A}} = -\frac{g_{\tilde{A}\bar{e}e}}{m_e} \tilde{A}^\mu \bar{\psi}_e \gamma^\mu \gamma^5 \psi_e, \quad (1)$$

где $g_{a\bar{e}e}$ и $g_{\tilde{A}\bar{e}e}$ — константы связи взаимодействия с лептонами аксионного поля и поля темных фотонов соответственно.

Будем считать, что в масштабах солнечной системы плотность аксионного конденсата меняется мало. Можно ожидать, что скорость аксионов, составляющих гало,

относительно центра галактики не должна превышать второй космической скорости галактики $\sim 550 \text{ km/s}$, что в сочетании со скоростью солнечной системы $\sim 200 \text{ km/s}$ дает относительные скорости молекулы и аксионов много меньше скорости света. Эти два предположения подразумевают, что плотность аксионного конденсата a можно считать зависящей только от t , а его градиент $\partial_\mu a$ направлен вдоль оси времени. Поле a должно подчиняться уравнению Клейна-Гордона-Фока для соответствующей массы m_a . Отсюда следует, что аксионное поле можно считать осциллирующим с частотой, определяемой его массой:

$$a(t) = a_0 \cos m_a t. \quad (2)$$

Аналогично будем считать, что вектор потенциала темного фотона также направлен вдоль оси времени:

$$\tilde{A}^\mu(t) = \tilde{A}_0^\mu \cos m_{\tilde{A}} t. \quad (3)$$

Для состояний с фиксированным числом электронов, описывающих электронную оболочку молекулы, эти члены взаимодействия приводят к следующим добавкам в эффективный гамильтониан молекулы:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^a = \frac{g_{a\bar{e}e}}{m_e} m_a a_0 \gamma^5 \cos m_a t, \quad \hat{H}_{\text{eff}}^{\tilde{A}} = \frac{g_{\tilde{A}\bar{e}e}}{m_e} \tilde{A} \gamma^5 \cos m_{\tilde{A}} t. \quad (4)$$

Таким образом, полный гамильтониан молекулы можно представить в виде

$$\hat{H}_{\text{mol}} = \hat{H}_{\text{mol}}^{\mathcal{PT}} + \hat{H}_{\text{ef}}^a + \hat{H}_{\text{ef}}^{\tilde{A}}, \quad (5)$$

где $\hat{H}_{\text{mol}}^{\mathcal{PT}}$ — гамильтониан молекулы без учета эффектов Новой физики, который является $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$ -симметричным. Будем считать вклад новых эффектов малым возмущением гамильтониана $H_{\text{mol}}^{\mathcal{PT}}$. Тогда гамильтониан молекулы в базисе невозмущенных волновых функций молекулы $|\Psi_{\text{tot},i}\rangle$ представляется в виде матрицы

$$H^{ij} = E_i \delta_{ij} + g_{a\bar{e}e} W_a^{ij} + g_{\tilde{A}\bar{e}e} W_{\tilde{A}}^{ij}, \quad (6)$$

где E_i — значение энергии состояния $|\Psi_{\text{tot},i}\rangle$ для невозмущенного гамильтониана молекулы $H_{\text{mol}}^{\mathcal{PT}}$, а матричные элементы даются через усреднение гамильтонианов взаимодействий по невозмущенным состояниям:

$$W_{a,\tilde{A}}^{ij} = \frac{1}{g_{a,\tilde{A}\bar{e}e}} \langle \Psi_{\text{tot},i} | \hat{H}_{\text{ef}}^{a,\tilde{A}} | \Psi_{\text{tot},j} \rangle, \quad (7)$$

Как можно видеть, оба взаимодействия описываются одним эффективным одноэлектронным оператором γ_5 .

В приближении Борна-Оппенгеймера полную волновую функцию молекулы можно представить в виде произведения волновой функции ядер со степенями свободы $\{Q_I\}$ и волновой функции электронов со степенями свободы $\{q_i\}$ для фиксированной конфигурации молекулы:

$$\Psi_{\text{tot}} = \Psi_{\text{nuc}}(\{Q_I\}) \psi_{\text{elec}}(\{q_i\} | \{Q_I\}), \quad (8)$$

где состояние электронов для определенной конфигурации $\{Q_I\}$ мы также будем обозначать как $|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle$. Если ограничить рассмотрение только основным электронным состоянием, то матричные элементы новых взаимодействий можно представить в виде

$$W_{a,\bar{A}}^{ij} = \int \prod_I dQ_I \Psi_{\text{nuc},i}^*(\{Q_I\}) \Psi_{\text{nuc},j}(\{Q_I\}) W_{a,\bar{A}}(\{Q_I\}), \quad (9)$$

где ввели параметры, характеризующие чувствительность электронной оболочки к новым взаимодействиям для фиксированной конфигурации молекулы:

$$W_{a,\bar{A}}(\{Q_I\}) = \frac{1}{g_{a,\bar{A}\bar{e}e}} \langle \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} | \hat{H}_{\text{eff}}^{a,\bar{A}} | \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} \rangle, \quad (10)$$

т.е. задача разбивается на вычисление свойства для фиксированных конфигураций молекулы с последующим усреднением по колебательно-вращательной волновой функции ядер.

При отражении конфигурации молекулы оператор γ_5 нечетный. Для некиральных конфигураций молекул

$$\mathcal{P}|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle = P_\psi |\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle, \quad P_\psi = \pm 1, \quad (11)$$

и нечетность оператора $\mathcal{P}\gamma_5\mathcal{P} = -\gamma_5$ означает, что

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} | \gamma_5 | \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} \rangle &= \\ &= \langle \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} | \mathcal{P}^2 \gamma_5 \mathcal{P}^2 | \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} \rangle \\ &= P_\psi^2 \langle \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} | \mathcal{P} \gamma_5 \mathcal{P} | \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} \rangle \\ &= -\langle \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} | \gamma_5 | \psi_{\text{elec}}, \{Q_I\} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Таким образом, γ_5 вносит вклад только для некиральных конфигураций.

3. Структура молекулы

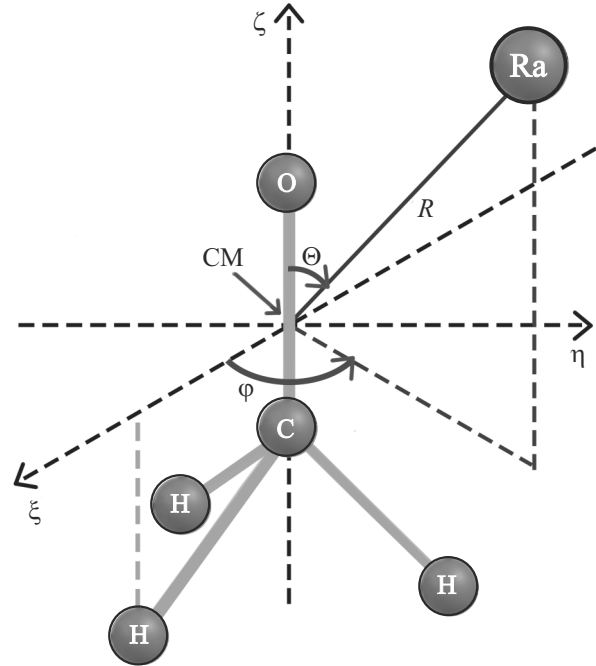
Молекулу $RaOCH_3$ можно рассматривать как систему, состоящую из тяжелого атома радия и лиганда OCH_3 . Частоты колебаний, соответствующих деформациям лиганда, оказываются намного больше, чем частоты колебаний этой системы, поэтому мы будем считать лиганд OCH_3 жестким. Мы используем такую же геометрию лиганда OCH_3 , как в статье [26], параметры которой приведены в таблице. Лиганд OCH_3 сам по себе является симметричным волчком с моментом инерции

$$I_{OCH_3} = \text{diag}\{I_\xi, I_\xi, I_\xi\}, \quad I_\xi > I_\zeta. \quad (13)$$

При жестком лиганде конфигурация молекулы в лабораторной системе координат (ЛСК) может быть задана следующими параметрами: вектором $\mathbf{R} \equiv \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{R}}$, соединяющим центр масс лиганда с тяжелым атомом; углами Эйлера α, β, γ , задающими ориентацию лиганда в ЛСК. Углы α и β задают единичный вектор $\hat{\mathbf{r}}$, соответствующий направлению главной оси лиганда C-O,

Геометрия лиганда OCH_3

Параметр	Значение
$r(\text{O-C})$	2.600 a.u.
$r(\text{C-H})$	2.053 a.u.
$\angle(\text{O-C-H})$	110.73°



Геометрия молекулы $RaOCH_3$.

а угол γ выбирается таким образом, чтобы при $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$ одна из плоскостей O-C-H совпадала с плоскостью xz.

С точки зрения молекулярной системы координат (МСК) конфигурация молекулы может быть описана с помощью расстояния R от центра масс лиганда (CM, указан прямой стрелкой на рисунке) до тяжелого атома, углом θ между вектором $\hat{\mathbf{R}}$ и осью C-O, а также углом ϕ между плоскостью Ra-O-C и одной из плоскостей O-C-H (рисунок). Молекула является некиральной для равновесной конфигурации $\theta = 0$, а также для ненулевых значений θ при углах $\phi = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 300^\circ$, когда плоскость Ra-O-C совпадает с какой-либо из плоскостей O-C-H. Однако при других значениях ϕ конфигурация молекулы становится киральной и чувствительной к возмущению оператором γ_5 .

В приближении Борна-Оппенгеймера волновая функция молекулы разбивается на произведение волновой функции движения ядер и волновой функции электронов:

$$\Psi_{\text{total}} \simeq \Psi_{\text{nuc}}(R, \hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{r}}, \gamma) \psi_{\text{elec}}(\{\mathbf{r}_i\} | \mathbf{R}, \theta, \phi), \quad (14)$$

где ψ_{elec} вычисляется для фиксированной геометрии молекулы (R, θ, ϕ) , а Ψ_{nuc} является собственной функцией гамильтониана движения ядер.

Формула (9) тогда принимает вид

$$W_{a,\bar{A}}^{ij} = \int_0^{+\infty} dR \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \Psi_{\text{nuc},i}^*(R, \theta, \varphi) \Psi_{\text{nuc},j}(R, \theta, \varphi) W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi), \quad (15)$$

где $W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi)$ рассчитана усреднением гамильтониана нового взаимодействия по электронной волновой функции при фиксированной конфигурации молекулы.

В гармоническом приближении гамильтониан движения ядер может быть представлен в виде [26]

$$\hat{H}_{\text{nuc}} \simeq \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\pi})\mathcal{M}(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\pi}) + \hat{H}_{\parallel} + \hat{H}_{\perp}. \quad (16)$$

Первый член — гамильтониан симметричного волчка с полным моментом импульса $\hat{\mathbf{J}}$ и колебательным моментом импульса $\hat{\pi}$. Матрицу моментов инерции в первом приближении можно считать равновесной $\mathcal{M} \simeq I_{\text{tot}}^{(\text{eq})}$. Квантовые числа проекций $\hat{\mathbf{J}}$ на оси ЛСК и МСК мы обозначим как M и K соответственно. Второй член $\hat{H}_{\parallel}$ — гамильтониан одномерного гармонического осциллятора продольных колебаний:

$$\hat{H}_{\parallel} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_{\parallel}^2} + \frac{\omega_{\parallel}^2 q_{\parallel}^2}{2}, \quad q_{\parallel} = \sqrt{\mu} \delta R, \quad (17)$$

где $\delta R = R - R_{\text{eq}}$, а $\mu = m_{\text{Ra}} m_{\text{OCH}_3} / (m_{\text{Ra}} + m_{\text{OCH}_3})$. Число заполнения $\hat{H}_{\parallel}$ будем обозначать как $v_{\parallel}$. В работе [26] было получено значение $\omega_{\parallel} = 345.17 \text{ cm}^{-1}$. Третий член $\hat{H}_{\perp}$ — гамильтониан двумерного гармонического осциллятора поперечных колебаний:

$$\hat{H}_{\perp} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_y^2} + \frac{\omega_{\perp}^2 (q_x^2 + q_y^2)}{2}, \quad (18)$$

зависящий от переменных

$$q_x = \sqrt{\mathcal{J}} \theta \cos \varphi, \quad q_y = \sqrt{\mathcal{J}} \theta \sin \varphi, \quad \mathcal{J} = \frac{\mu R_{\text{eq}}^2 I_{\xi}}{\mu R_{\text{eq}}^2 + I_{\xi}}. \quad (19)$$

В работе [26] было получено значение $\omega_{\perp} = 151.32 \text{ cm}^{-1}$. Собственные состояния $\hat{H}_{\perp}$ могут быть охарактеризованы числом заполнения $v_{\perp} = 0, 1, \dots$ и колебательным моментом импульса $l = -v_{\perp}, -v_{\perp} + 2, \dots, v_{\perp}$. В рассматриваемом приближении можно приближенно описывать собственные состояния гамильтониана движения ядер как

$$|JMK v_{\parallel} v_{\perp} l\rangle \mapsto \Psi_{\text{nuc}} \simeq D_{MK}^J(\alpha_m, \beta_m, \gamma_m) \times \phi_{v_{\parallel}}(q_{\parallel}) \Phi_{v_{\perp} l}(q_x, q_y), \quad (20)$$

где D_{MK}^J — функция Вигнера, зависящая от углов Эйлера, описывающих ориентацию МСК относительно

ЛСК; $\phi_{v_{\parallel}}$ — собственная функция одномерного гармонического осциллятора; $\Phi_{v_{\perp} l}$ — собственная функция двумерного гармонического осциллятора, которая зависит от φ как

$$\Phi_{v_{\perp} l} = F_{v_{\perp} l}(\theta) e^{il\varphi}. \quad (21)$$

В гармоническом приближении наблюдается большая вырожденность спектра

$$E \simeq BJ(J+1) + (A-B)K^2 + \omega_{\parallel} \left(v_{\parallel} + \frac{1}{2} \right) + \omega_{\perp} (v_{\perp} + 1) \quad (22)$$

которая нарушается при учете ангармонических вкладов и эффектов вращений. В частности, состояния с противоположными знаками l должны образовывать расщепленные дублеты состояний противоположной четности:

$$\begin{aligned} & \left| \pm, \{JMK v_{\parallel} v_{\perp} l\} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| JMK v_{\parallel} v_{\perp} + l \right\rangle \pm \left| JM, -K, v_{\parallel} v_{\perp}, -l \right\rangle \right), \end{aligned} \quad (23)$$

Заметим, что в молекуле типа симметричный волчок K не определяется полностью l за счет дополнительного вклада от вращения лиганда OCH_3 .

Нечетность оператора γ_5 при отражениях конфигурации молекулы означает, что свойства, определенные в (10), антисимметричны по φ , т.е. $W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi) = -W_{a,\bar{A}}(R, \theta, -\varphi)$. С другой стороны, из симметрии равновесной конфигурации молекулы следует, что $W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi + 2\pi/3) = W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi)$. Из этих двух фактов получаем, что усредненные по электронному состоянию должны иметь следующую зависимость от геометрии молекулы:

$$W_{a,\bar{A}}(R, \theta, \varphi) = \sum_{n=1}^{+\infty} W_{a,\bar{A}}^{(n)}(R, \theta) \sin 3n\varphi. \quad (24)$$

Нас интересуют матричные элементы между близко расположенными состояниями, т.е. с одинаковыми J , $K = 0$, $v_{\parallel}$ и $v_{\perp}$. Требование $K = 0$ в гармоническом приближении следует из ортогональности функций Вигнера с ненулевыми $K = \pm|K|$ в волновой функции ядер (20). Из (21) и (24) можно получить, что ненулевыми могут являться следующие матричные элементы:

$$\begin{aligned} & \left\langle JM, K = 0, v_{\parallel} v_{\perp}, l + 3n \left| W_{a,\bar{A}} \right| \right. \\ & \left. \times JM, K = 0, v_{\parallel} v_{\perp}, l \right\rangle \equiv W_{a,\bar{A}}^{JK v_{\parallel} v_{\perp}, l, l+3n}, \end{aligned} \quad (25)$$

а также противоположный ему по знаку

$$\left\langle JMK v_{\parallel} v_{\perp}, l \left| W_{a,\bar{A}} \right| JMK v_{\parallel} v_{\perp}, l + 3n \right\rangle = -W_{a,\bar{A}}^{JK v_{\parallel} v_{\perp}, l, l+3n}. \quad (26)$$

Заметим, что поскольку в мультиплете с одинаковым $v_{\perp}$ содержатся состояния с l , отличающимися

только на четные значения, вклады в (24) с нечетными n не могут дать интересующие нас матричные элементы. Поэтому ведущий вклад ожидается от члена с $\sin 6\varphi$. Самые низкие состояния, в которых этот член может порождать переходы, это дублет $|\pm, \{J = 3, K = 0, v_{||} = 0, v_{\perp} = 3, l = 3\}\rangle$ далее обозначаемый как $|\pm\rangle$.

4. Обсуждение результатов

Для электронных расчетов использовался реализованный в программном пакете DIRAC19 метод самосогласованного поля Дирака-Хартри-Фока. Для атома радия использовался полноэлектронный 3z-базис Дайолла с диффузными функциями (aae3z). Для атомов O, C и H использовались базисы cc-pVTZ.

Пренебрегая зависимостью Темных полей от времени, заметим, что значения свойств выражаются через среднее значение $\langle\gamma^5\rangle$:

$$W_a(R, \theta, \varphi) = \frac{1}{m_e} m_a a_0 \langle\gamma^5\rangle(R, \theta, \varphi),$$

$$W_{\tilde{A}}(R, \theta, \varphi) = \frac{1}{m_e} \tilde{A} \langle\gamma^5\rangle(R, \theta, \varphi), \quad (27)$$

где большинство параметров характеризуют фоновые Темные поля, а специфичным для молекулы является значение $\langle\gamma^5\rangle$, получаемое усреднением соответствующего одноэлектронного оператора по электронной волновой функции для фиксированной конфигурации:

$$\langle\gamma^5\rangle(R, \theta, \varphi) = \langle\psi_{\text{elec}}, \{R, \theta, \varphi\} | \gamma^5 | \psi_{\text{elec}}, \{R, \theta, \varphi\} \rangle. \quad (28)$$

Расчеты проводились для фиксированного расстояния от центра масс лиганда OCH_3 до тяжелого атома радия $R_{\text{eq}} = 5.7$ а.е., соответствующего равновесному значению. Угловые координаты рассматривались на сетке значений $\theta = 0^\circ, \dots, 25^\circ$ и $\varphi = 0^\circ, \dots, 60^\circ$ с шагом 5° .

Результаты хорошо описываются (отклонения в пределах машинной точности вычислений) формулой

$$\langle\gamma^5\rangle(R_{\text{eq}}, \theta, \varphi) = (8.619 \cdot 10^{-8} \theta^2 + 2.947 \cdot 10^{-7} \theta^4) \sin 3\varphi, \quad (29)$$

где θ и φ даны в радианах.

Формула (29) для $\theta = 12^\circ$ (соответствующего пику плотности вероятности для состояния $|v = 3, l = 3\rangle$) и $\varphi = 30^\circ$ (соответствующего максимуму свойства W_a) дает значение $\langle\gamma^5\rangle = 4.35 \cdot 10^{-9}$. Это значение сравнимо по порядку величины с $\langle\gamma^5\rangle = -8.28 \cdot 10^{-9}$, полученным в [22] для основного состояния киральной молекулы $CHBrClF$. Тем не менее для нашего механизма необходимы достаточно большие вклады $\sin 6\varphi$. В наших вычислениях такие вклады оказались пренебрежимо малы.

Следует отметить, что вычисления проводились только для метода самосогласованного поля. Корреляционные эффекты могут существенно повлиять на значение и качественное поведение $\langle\gamma^5\rangle$ как функции (θ, φ) .

Вычисление средних значений с учетом корреляционных эффектов требует применения метода конечного поля, в котором к гамильтониану молекулы добавляется оператор свойства с некоторым коэффициентом ϵ , и его среднее значение может быть получено исходя из формулы для энергии $E \simeq E_0 + \epsilon \langle\gamma^5\rangle$. В нашем случае расчеты с применением метода связанных кластеров показали очень плохую сходимость, поэтому мы не приводим эти результаты.

Кроме того, следует отметить, что, согласно оценкам в [22] с ростом зарядов ядер Z среднее значение свойства масштабируется как $\langle\gamma^5\rangle \sim c_1 \alpha^5 Z_A^2 Z_B^2 + c_2 \alpha^3 Z_A^3 + c_3 \alpha^3 Z_B^3$. В нашем случае тяжелый атом радия обеспечивает большое значение $Z_{\text{Ra}} = 88$, однако киральность молекулы обеспечивается за счет легких атомов водорода с $Z_H = 1$. Можно предположить, что для молекул типа симметричный волчок с более тяжелыми атомами, такими как $RaOCF_3$, данный эффект может быть существенно усилен.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-72-10060, <https://rscf.ru/project/24-72-10060/>.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] R.D. Peccei, H.R. Quinn. Phys. Rev. Lett., **38**, 1440 (1977). DOI: 10.1103/PhysRevLett.38.1440
- [2] M.D. Schwartz. *Quantum field theory and the standard model* (Cambridge University Press, 2014).
- [3] S. Navas et al. (Particle Data Group). Phys. Rev. D, **110**, 030001 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevD.110.030001
- [4] I.B. Khriplovich, S.K. Lamoreaux. *CP violation without strangeness: electric dipole moments of particles, atoms, and molecules* (Springer Science & Business Media, 1997).
- [5] N. Cabibbo. Phys. Rev. Lett., **10**, 531 (1963). DOI: 10.1103/PhysRevLett.10.531
- [6] M. Kobayashi, T. Maskawa. Prog. Theor. Phys., **49**, 652 (1973). DOI: 10.1143/PTP.49.652
- [7] B. Pontecorvo. Zh. Eksp. Teor. Fiz., **34**, 247 (1957).
- [8] Z. Maki, M. Nakagawa, S. Sakata. Prog. Theor. Phys., **28**, 870 (1962). DOI: 10.1143/PTP.28.870
- [9] T. Fukuyama. Int. J. Mod. Phys. A, **27**, 1230015 (2012). DOI: 10.1142/S0217751X12300153
- [10] M. Pospelov, A. Ritz. Phys. Rev. D, **89**, 056006 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevD.89.056006
- [11] Y. Yamaguchi, N. Yamanaka. Phys. Rev. Lett., **125**, 241802 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.241802
- [12] Y. Yamaguchi, N. Yamanaka. Phys. Rev. D, **103**, 013001 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevD.103.013001
- [13] A.D. Sakharov. In: *The Intermittencies... Collected Works on Research into the Essentials of Theoretical Physics in Russian Federal Nuclear Center, Arzamas-16* (World Scientific, 1998). P. 84–87.

- [14] J. Ginges, V.V. Flambaum. *Phys. Rep.*, **397**, 63 (2004). DOI: 10.1016/j.physrep.2004.03.005
- [15] J. Baron, W.C. Campbell, D. DeMille, J.M. Doyle, G. Gabrielse, Y.V. Gurevich, P.W. Hess, N.R. Hutzler, E. Kirilov, I. Kozyryev et al. *Science*, **343**, 269 (2014). DOI: 10.1126/science.1248213
- [16] D.V. Chubukov, L.V. Skripnikov, L.N. Labzowsky. *JETP Lett.*, **110**, 382 (2019). DOI: 10.1134/S0021364019180036
- [17] V. Andreev, D. Ang, D. DeMille, J. Doyle, G. Gabrielse, J. Haefner, N. Hutzler, Z. Lasner, C. Meisenhelder, B.O. Leary et al. *Nature*, **562**, 355 (2018). DOI: 10.1038/s41586-018-0599-8
- [18] T.S. Roussy, L. Caldwell, T. Wright, W.B. Cairncross, Y. Shagam, K.B. Ng, N. Schlossberger, S.Y. Park, A. Wang, J. Ye et al. *Science*, **381**, 46 (2023). DOI: 10.1126/science.adg4084
- [19] M.G. Kozlov, L.N. Labzowsky. *J. Phys. B*, **28**, 1933 (1995). DOI: 10.1088/0953-4075/28/10/008
- [20] D. Maison, L. Skripnikov, A. Oleynichenko, A. Zaitsevskii. *J. Chem. Phys.*, **154**, 224303 (2021). DOI: 10.1063/5.0051590
- [21] S.D. Prosnjak, L.V. Skripnikov. *Phys. Rev. A*, **109**, 042821 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.109.042821
- [22] K. Gaul, M.G. Kozlov, T.A. Isaev, R. Berger. *Phys. Rev. Lett.*, **125**, 123004 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.123004
- [23] A. Zakharova, A. Petrov. *Phys. Rev. A*, **103**, 032819 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.103.032819
- [24] A. Zakharova, I. Kurchavov, A. Petrov. *J. Chem. Phys.*, **155**, 164301 (2021). DOI: 10.1063/5.0069281
- [25] A. Zakharova, A. Petrov. *J. Chem. Phys.*, **157**, (2022). DOI: 10.1063/5.0121110
- [26] A. Zakharova. *Phys. Rev. A*, **105**, 032811 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevA.105.032811
- [27] P. Yu, N.R. Hutzler. *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 023003 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.023003
- [28] C. Zhang, X. Zheng, L. Cheng. *Phys. Rev. A*, **104**, 012814 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.104.012814
- [29] Y. Chamorro, A. Borschevsky, E. Eliav, N.R. Hutzler, S. Hoekstra, L.F. Pašteka. *Phys. Rev. A*, **106**, 052811 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevA.106.052811
- [30] A. Zakharova. *Chem. Phys. Lett.*, **854**, 141552 (2024). DOI: 10.1016/j.cplett.2024.141552
- [31] T.A. Isaev, R. Berger. *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 063006 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.063006
- [32] I. Kozyryev, L. Baum, K. Matsuda, J.M. Doyle. *Chem. Phys. Chem.*, **17**, 3641 (2016). DOI: 10.1002/cphc.201601051
- [33] I. Kozyryev, T.C. Steimle, P. Yu, D.-T. Nguyen, J.M. Doyle. *New J. Phys.*, **21**, 052002 (2019). DOI: 10.1088/1367-2630/ab19d7
- [34] B.L. Augenbraun, Z.D. Lasner, A. Frenett, H. Sawaoka, A.T. Le, J.M. Doyle, T.C. Steimle. *Phys. Rev. A*, **103**, 022814 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.103.022814
- [35] D. Mitra, N.B. Vilas, C. Hallas, L. Anderegg, B.L. Augenbraun, L. Baum, C. Miller, S. Raval, J.M. Doyle. *Science*, **369**, 1366 (2020). DOI: 10.1126/science.abc53
- [36] M. Fan, C. Holliman, X. Shi, H. Zhang, M. Straus, X. Li, S. Buechele, A. Jayich. *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 023002 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.023002
- [37] K. Gaul, N.R. Hutzler, P. Yu, A.M. Jayich, M. Iliaš, A. Borschevsky. *Phys. Rev. A*, **109**, 042819 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.109.042819
- [38] G. Dvali, S. Zell. *J. Cosm. Astropart. Phys.*, **2018** (07), 064.