01

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

© А.В. Захарова [1,2]

[1] Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия
[2] Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“,
188300 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, $\mathcal{P}$ связана 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-Сакаты [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 l-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 l, так и K-дублеты, позволяющие подавлять многие систематические эффекты при проведении эксперимента.

$\mathscr{P}, \mathscr{T}$-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 радийсодержащих молекул типа „симметричный волчок“ к исследованию эффектов, нарушающих симметрии $\mathscr{CP}$ и $\mathscr{P}$: $RaOCH_3$ [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 $\mathscr{P}$- и $\mathscr{T}$-нечетные члены взаимодействия [22]:

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

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 $\sim 550\,\mathrm{km/s}$, что в сочетании со скоростью солнечной системы $\sim 200\,\mathrm{km/s}$ 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:

$$a(t) = a_0 \cos m_a t. \tag{2}$$

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

$$\tilde{A}^\mu(t) = \tilde{A}\delta_0^\mu \cos m_{\tilde{A}} t. \tag{3}$$

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

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

Таким образом, полный гамильтониан молекулы можно представить в виде

$$\hat{H}_{\mathrm{mol}} = \hat{H}^{\mathscr{PT}}_{\mathrm{mol}} + \hat{H}^a_{\mathrm{eff}} + \hat{H}^{\tilde{A}}_{\mathrm{eff}}, \tag{5}$$

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

$$H^{ij} = E_i\delta_{ij} + g_{a\bar{e}e}W^{ij}_a + g_{\tilde{A}\bar{e}e}W^{ij}_{\tilde{A}}, \tag{6}$$

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

$$W^{ij}_{\mathrm{a},\tilde{A}} = \frac{1}{g_{a,\tilde{A}\bar{e}e}}\,\langle\Psi_{\mathrm{tot},i}|\hat{H}^{a,\tilde{A}}_{\mathrm{eff}}|\Psi_{\mathrm{tot},j}\rangle, \tag{7}$$

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:

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

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

$$W^{ij}_{a,\tilde{A}} = \int \prod_I dQ_I\, \Psi^*_{\text{nuc,i}}(\{Q_I\})\Psi_{\text{nuc},j}(\{Q_I\})W_{a,\tilde{A}}(\{Q_I\}), \tag{9}$$

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

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

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

$$\mathscr{P}|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle = P_\psi|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle, \quad P_\psi = \pm 1, \tag{11}$$

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

$$\begin{aligned}\langle\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}|\gamma_5|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle &= \\ &= \langle\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}|\mathscr{P}^2\gamma_5\mathscr{P}^2|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle \\ &= P^2_\psi\langle\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}|\mathscr{P}\gamma_5\mathscr{P}|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle \\ &= -\langle\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}|\gamma_5|\psi_{\text{elec}}, \{Q_I\}\rangle = 0.\end{aligned} \tag{12}$$

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

$$I_{\text{OCH}_3} = \text{diag}\Big\{I_\xi, I_\xi, I_\xi\Big\}, \quad I_\xi > I_\xi. \tag{13}$$

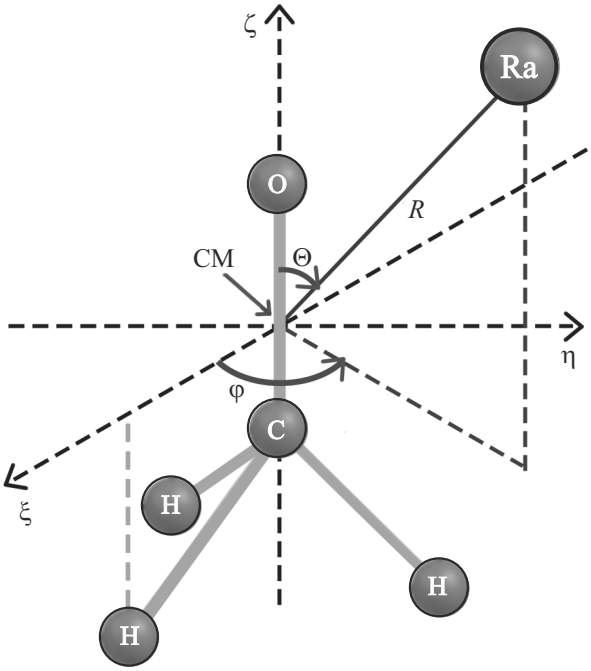
При жестком лиганде конфигурация молекулы в лабораторной системе координат (ЛСК) может быть задана следующими параметрами: вектором $\mathbf{R} \equiv \mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{R}}$, соединяющим центр масс лиганда с тяжелым атомом; углами Эйлера α, β, γ, задающими ориентацию лиганда в ЛСК. Углы α и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

Геометрия лиганда OCH_3

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

OCH_3 ligand geometry

Parameter	Meaning
r(O–C)	2.600 a. u.
r(C–H)	2.053 a. u.
$\angle$(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 (см. рисунок). Молекула является некиральной для равновесной конфигурации $\theta = 0$, а также для ненулевых значений θ при углах $\varphi = 0°, 60°, 120°, 180°, 240°, 300°$, 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:

$$\Psi_{\text{total}} \simeq \Psi_{\text{nuc}}(R, \hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{r}}, \gamma)\psi_{\text{elec}}(\{\mathbf{r_i}\}|\mathbf{R}, \theta, \varphi), \tag{14}$$

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,

$$W^{ij}_{a,\tilde{A}} = \int\limits_0^{+\infty} dR \int\limits_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi$$
$$\times \Psi^*_{\text{nuc},i}(R, \theta, \varphi)\Psi_{\text{nuc},j}(R, \theta, \varphi)W_{a,\tilde{A}}(R, \theta, \varphi), \tag{15}$$

где $W_{a,\tilde{A}}(R, \theta, \varphi)$ 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]

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

Первый член — гамильтониан симметричного волчка с полным моментом импульса $\hat{\mathbf{J}}$ и колебательным моментом импульса $\hat{\boldsymbol{\pi}}$. Матрицу моментов инерции в первом приближении можно считать равновесной $\mathscr{M} \simeq I^{(\text{eq})}_{\text{tot}}$. 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:

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

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:

$$\hat{H}_{\perp} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2_x} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2_y} + \frac{\omega^2_{\perp}(q^2_x + q^2_y)}{2}, \tag{18}$$

зависящий от переменных,

$$q_x = \sqrt{\mathscr{I}}\theta\cos\varphi, \;\; q_y = \sqrt{\mathscr{I}}\theta\sin\varphi, \;\; \mathscr{I} = \frac{\mu R^2_{\text{eq}} I_{\xi}}{\mu R^2_{\text{eq}} + I_{\xi}}. \tag{19}$$

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

$$\left|JMKv_{\parallel}v_{\perp}l\right\rangle \mapsto \Psi_{\text{nuc}} \simeq D^J_{MK}(\alpha_m, \beta_m, \gamma_m)$$
$$\times \phi_{v_{\parallel}}(q_{\parallel})\Phi_{v_{\perp}l}(q_x, q_y), \tag{20}$$

где D^J_{MK} — 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

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

В гармоническом приближении наблюдается большая вырожденность спектра,

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

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

$$\left|\pm, \{JMKv_{\parallel}v_{\perp}l\}\right\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|JMKv_{\parallel}v_{\perp} + l\right\rangle \pm \left|JM, -K, v_{\parallel}v_{\perp}, -l\right\rangle\right). \tag{23}$$

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. $W_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta, \varphi) = -W_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta, -\varphi)$. С другой стороны, из симметрии равновесной конфигурации молекулы следует, что $W_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta, \varphi + 2\pi/3) = W_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta, \varphi)$. Из этих двух фактов получаем, что усредненные по электронному состоянию должны иметь следующую зависимость от геометрии молекулы

$$W_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta, \phi) = \sum_{n=1}^{+\infty} W^{(n)}_{\text{a},\tilde{A}}(R, \theta)\sin 3n\phi. \tag{24}$$

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:

$$\left\langle JM, K = 0, v_{\parallel}v_{\perp}, l + 3n\left|W_{\text{a},\tilde{A}}\right|\right.$$
$$\left.\times JM, K = 0, v_{\parallel}v_{\perp}, l\right\rangle \equiv W^{JKv_{\parallel}v_{\perp}, l, l+3n}_{\text{a},\tilde{A}}, \tag{25}$$

а также противоположный ему по знаку

$$\left\langle JMKv_{\parallel}v_{\perp}, l\middle|W_{\mathrm{a},\tilde{A}}\middle|JMKv_{\parallel}v_{\perp}, l{+}3n\right\rangle = -W_{\mathrm{a},\tilde{A}}^{JKv_{\parallel}v_{\perp},\, l,l+3n}. \tag{26}$$

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 $\left|\pm, \{J = 3, K = 0, v_{\parallel} = 0, v_{\perp} = 3, l = 3\}\right\rangle$ 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 γ^5:

$$W_a(R, \theta, \varphi) = \frac{1}{m_e} m_a a_0 \langle\gamma^5\rangle(R, \theta, \varphi), \tag{27}$$

$$W_{\tilde{A}}(R, \theta, \varphi) = \frac{1}{m_e} \tilde{A}\langle\gamma^5\rangle(R, \theta, \varphi), \tag{28}$$

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:

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

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

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

$$\langle\gamma_5\rangle(R_{\mathrm{eq}}, \theta, \varphi) = (8.619 \cdot 10^{-8}\theta^2 + 2.947 \cdot 10^{-7}\theta^4)\sin 3\varphi, \tag{29}$$

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 $Z_{\mathrm{Ra}} = 88$, однако киральность молекулы обеспечивается за счет легких атомов водорода с $Z_{\mathrm{H}} = 1$. 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, arXiv:1311.5537 [hep-ph]
[11] Y. Yamaguchi, N. Yamanaka. Phys. Rev. Lett., **125**, 241802 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.241802, arXiv:2003.08195 [hep-ph]
[12] Y. Yamaguchi, N. Yamanaka. Phys. Rev. D, **103**, 013001 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevD.103.013001, arXiv:2006.00281 [hep-ph]
[13] A.D. Sakharov. In *The Intermissions... 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. Prosnyak, 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, arXiv:2012.08427 [physics.atom-ph]
[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. Physical 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.