

# Изотопологи метанола как зонды пространственных и временных вариаций отношения массы электрона к массе протона

Ю. С. Воротынцева<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

yuvorotynceva@yandex.ru

**Аннотация.** Сложные органические молекулы с заторможенным внутренним движением, образующиеся в плотных молекулярных облаках, являются зондами фундаментальных физических постоянных, в частности, параметра  $\mu$  – отношения массы электрона к массе протона. Это обусловлено тем, что микроволновые переходы таких молекул обладают высокой чувствительностью к изменению  $\mu$ , что можно использовать в качестве тестов физических теорий, расширяющих Стандартную Модель элементарных частиц. Нами рассчитаны коэффициенты чувствительности к изменению параметра  $\mu$  для молекулярных линий изотопологов метанола  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ . По спектрам теплового излучения  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  в зоне звездообразования NGC6334I получен верхний предел на относительное изменение  $\mu$ ,  $\Delta\mu/\mu < 3 \times 10^{-8}$ . Также по линиям  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и комбинации с метанольным переходом, наблюдаемым в газо-пылевом облаке Oigip-KL, установлен верхний предел  $\Delta\mu/\mu < 1.1 \times 10^{-8}$ . Данные результаты являются одним из наиболее жестких верхних пределов, установленных астрофизическими методами в Галактике.

**Ключевые слова:** межзвездная среда; методы; спектроскопия; молекулы; элементарные частицы

## I. ВВЕДЕНИЕ

Сложные органические молекулы – это молекулы с углеродом, содержащие, по крайней мере, 6 атомов. Среди них можно выделить особый класс – молекулы с внутренним заторможенным движением. Простейшим примером такой молекулы является метанол  $\text{CH}_3\text{OH}$ . Внутреннее движение здесь связано с квантовомеханическим туннельным эффектом: метильная группа может совершать крутильные (торсионные) колебания относительно гидроксильной группы. При этом, атом водорода гидроксильной группы может занимать одно из трех возможных положений с равными энергиями, и, чтобы перейти из одной конфигурации в другую, он должен пройти через потенциальный барьер, создаваемый тремя атомами водорода метильной группы. Таким образом, вращение атома водорода относительно метильной группы заторможено.

Частоты, соответствующие таким движениям, попадают в микроволновой диапазон спектра (1–100 ГГц), следовательно, при помощи

радиоспектроскопических наблюдений становится возможным оценивать границы применимости фундаментальных физических законов.

В настоящее время активно обсуждаются различные теории, расширяющие Стандартную модель (СМ) физики элементарных частиц. Одним из примеров являются теории темной материи, в которых предполагается гипотетическое взаимодействие между барионным веществом и Хиггсоподобными скалярными полями [1, 2, 3]. Если подобные взаимодействия существуют, они должны по-разному модулировать массы фермионов, что должно отражаться на молекулярных спектрах. Такие теории можно проверять при помощи астрономических измерений параметра  $\mu$  – отношения массы электрона к массе протона, где масса электрона напрямую связана со скалярными полями, а основной вклад в массу протона идет непосредственно от энергии связи кварков.

Подобные исследования основаны на том, что небольшое изменение  $\mu$  приводит к смещению положения спектральных линий в электронно-колебательно-вращательных переходах [4, 5, 6]. Такие смещения индивидуальны для каждого конкретного перехода, и каждый такой переход характеризуется безразмерным коэффициентом чувствительности к  $\mu$ -вариациям, который определяется как

$$Q = \frac{df/f}{d\mu/\mu}, \quad (1)$$

где  $df/f$  – относительный сдвиг частоты, а  $d\mu/\mu$  – относительное изменение  $\mu$ ,

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{\mu_{obs} - \mu_{lab}}{\mu_{lab}}, \quad (2)$$

где  $\mu_{lab}$  – лабораторные значения,  $\mu_{obs}$  – астрономические значения  $\mu$ .

## II. МОДЕЛЬ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТониАНА И ПАРАМЕТРЫ

Чтобы вычислить коэффициенты чувствительности переходов, необходимо рассчитать уровни энергии молекулы, которые описываются набором двух квантовых чисел – полного углового момента  $J$  и его проекции  $K$  на главную ось молекулы для верхнего и нижнего уровней соответственно:  $J''_K''$  –  $J'_K'$ . Чувствительность данного перехода к изменению  $\mu$

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ, №23-22-00124.

может быть представлена в виде отношения разности так называемых  $q$ -факторов, индивидуальных для каждого уровня, показывающих относительный сдвиг частоты в зависимости от изменения параметра  $\mu$ , к лабораторной частоте перехода  $f$  [7]:

$$Q = \frac{q'' - q'}{f}. \quad (3)$$

Для расчетов мы использовали модель эффективного Гамильтониана из работы [8], учитывающую 3 взаимодействия – спин-вращательное, спин-спиновое и спин-торсионное. Данная модель физически прозрачна и содержит всего 7 параметров, имеющих явный физический смысл – вращательные константы  $A, B, C$ , параметр взаимодействия внутреннего вращения с общим  $D$ , кинетический коэффициент  $F$ , высота потенциального барьера  $V_3$  и безразмерный коэффициент  $\rho$  – константа взаимодействия внутреннего вращения. В нашей работе [9] мы вычислили значения вращательных констант  $A, B, C$  и  $D$  для изотопологов метанола  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$  в соответствии со следующими формулами:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \hbar \left( \frac{I_a + I_b}{I_a I_b - I_{ab}^2} - \frac{I_b}{I_b^2 + I_{ab}^2} \right), \\ B &= \frac{1}{2} \hbar \frac{I_b}{I_b^2 + I_{ab}^2}, \\ C &= \frac{1}{2} \hbar \frac{1}{I_c}, \\ D &= \frac{1}{2} \hbar \frac{I_{ab}}{I_b^2 + I_{ab}^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

В этих формулах  $I_a, I_b, I_c, I_{ab}$  – моменты инерции, взятые из [10],  $\hbar = h/2\pi$ . Результаты расчета для вращательных констант занесены в табл. 1. Значения параметров  $F$  и  $V_3$  взяты из работ [11] для  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$  и из [12] для  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $\text{CH}_3\text{OH}$ .

ТАБЛИЦА I. ПАРАМЕТРЫ ГАМИЛЬТОНИАНА (В СМ-1)

| Параметр | $\text{CH}_3\text{OH}$ | $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ | $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ |
|----------|------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| $A$      | 4.25427                | 4.2479                      | 4.2555                      |
| $B$      | 0.82298                | 0.78840                     | 0.8030                      |
| $C$      | 0.75721                | 0.76028                     | 0.77410                     |
| $D$      | -0.0026                | -0.0056                     | -0.0029                     |
| $F$      | 27.646819              | 27.4284105                  | 27.641920                   |
| $V_3$    | 373.594                | 374.06655                   | 373.77677                   |

Необходимо отметить, что данная модель Гамильтониана является достаточно точной для расчетов коэффициентов чувствительности  $Q$ , в то время как более сложные модели [13] дают лучшую точность в определении частоты перехода, но большее количество параметров модели не влияет на значения коэффициентов чувствительности [7]. Помимо этого, в сложных моделях определение коэффициентов чувствительности имеет ограниченное понимание из-за отсутствия четкой интерпретации влияния параметров высоких порядков на изменение  $\mu$ .

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ДЛЯ ИЗОТОПОЛГОВ МЕТАНОЛА

Для основной молекулы метанола  $\text{CH}_3\text{OH}$  коэффициенты чувствительности  $Q$  были рассчитаны двумя независимыми методами [7, 13]. Результаты показали, что переходы метанола (в диапазоне 1–50 ГГц)

имеют высокие значения  $Q$  обоих знаков:  $-17 < Q < +43$ . Отметим, что коэффициенты чувствительности, рассчитанные для линий Лаймановской и Вернеровской полос молекулярного водорода  $\text{H}_2$ , наблюдаемых в спектрах квазаров на больших красных смещениях, имеют значения  $|Q| \sim 10^{-2}$  [6], что на несколько порядков ниже, чем для метанола.

Мы рассчитали коэффициенты чувствительности для двух изотопологов метанола –  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$  в диапазоне 1–100 ГГц. В расчете мы использовали только переходы с изменением квантового числа  $K$  на единицу, т.е.  $\Delta K = \pm 1$ , так как переходы с  $\Delta K = 0$  являются чисто вращательными, и имеют коэффициенты чувствительности  $Q \sim 1$ . Результаты расчета показали, что изотопологи метанола также имеют большие коэффициенты чувствительности обоих знаков. Для молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  значения ранжируются в диапазоне  $-32 < Q < +78$ , для  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$  –  $-109 < Q < +33$ . Более детально результаты представлены в нашей работе [9]. Большие разности в коэффициентах чувствительности делает эти молекулы наиболее перспективными для исследований гипотетических  $\mu$ -вариаций, см. (5).

Отметим, что в [13], где выполнялся расчет другим методом с использованием более сложной модели с большим количеством параметров, опубликованы значения коэффициентов чувствительности изотопологов метанола для небольшого количества переходов. При сравнении наших результатов с этими расчетами отмечается, что значения коэффициентов чувствительности находятся в хорошем согласии, что подтверждает точность расчета в рамках использования модели [8].

### IV. ВЕРХНИЙ ПРЕДЕЛ НА $\mu$ -ВАРИАЦИИ ПО НАБЛЮДЕНИЯМ ЛИНИЙ $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$

Известно, что сложные органические молекулы в межзвездной среде образуются в плотных холодных молекулярных облаках ( $n_{\text{H}} \sim 10^6 - 10^8 \text{ см}^{-3}$ ,  $T_{\text{kin}} \sim 10 - 30 \text{ K}$ ). При помощи радиоспектроскопических наблюдений таких астрономических объектов можно измерять относительные значения  $\mu$ . Астрофизические ограничения на  $\Delta\mu/\mu$  были получены ранее различными методами наблюдений как Галактических, например, [14, 15], так и внегалактических [16] объектов. Наиболее жесткий верхний предел  $\Delta\mu/\mu \leq 10^{-8}$  был получен по аммиаку [17] и метанолу [15]. Отметим, что основной проблемой при оценке пределов на вариации  $\mu$  являются неопределенности лабораторных частот и центров линий в астрономических спектрах. Поэтому в исследованиях необходимо использовать различные астрономические объекты и переходы различных молекул для нивелирования систематических эффектов. Мы применили наши расчеты коэффициентов чувствительности для изотопологов метанола к наблюдениям эмиссионных линий  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ , обнаруженных в области звездообразования NGC6334I, опубликованных в работе [18] и газо-пылевом комплексе Orion-KL, опубликованных в [19].

По определению, для оценки  $\Delta\mu/\mu$  используются молекулярные переходы с различными значениями коэффициентов чувствительности  $Q_i$  и  $Q_j$  с измеренными радиальными скоростями  $V_i$  и  $V_j$ , наблюдаемые в одном астрономическом объекте [7]:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{V_i - V_j}{c(Q_j - Q_i)}, \quad (5)$$

где  $c$  – скорость света. Из опубликованных спектров NGC6334I мы отобрали несколько переходов, имеющих отличающиеся коэффициенты чувствительности, чтобы  $\Delta Q = |Q_i - Q_j| \sim 20$ . В результате было получено ограничение на  $\Delta\mu/\mu = (4 \pm 3) \times 10^{-8}$ , что соответствует верхнему пределу на  $\Delta\mu/\mu < 3 \times 10^{-8}$ . Более подробный расчет представлен в нашей работе [9]. По измерениям линий, наблюдаемых в Oгion-KL, была проведена оценка на  $\Delta\mu/\mu$  двумя независимыми методами – по линиям  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и по комбинации линий этого изотополога и метанола  $\text{CH}_3\text{OH}$ . Полученный предел на относительное изменение  $\mu - \Delta\mu/\mu = (-2.3 \pm 1.1) \times 10^{-8}$ . Детали этих расчетов представлены в работе [20]. Эти значения верхних пределов являются одним из самых наиболее жестких ограничений на  $\mu$ -вариации по Галактическим наблюдениям и хорошо согласуются с ранее полученными значениями.

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы были рассчитаны коэффициенты чувствительности  $Q$  к изменениям фундаментальной физической константы  $\mu$  при применении ранее разработанной процедуры расчета [7] для торсионно-вращательных переходов двух молекул –  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ . Расчеты показывают, что переходы в изотопологах метанола имеют высокие коэффициенты чувствительности разных знаков:  $-32 < Q < +78$  для  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и  $-109 < Q < +33$  для  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$ . Путем анализа линий теплового излучения  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ , наблюдаемым в области звездообразования NGC6334I, был получен верхний предел на изменение  $\mu$  на уровне  $3 \times 10^{-8}$  ( $1\sigma$ ). Также по наблюдениям в Oгion-KL линий  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  и комбинации с метанольным переходом значение верхнего предела было установлено равным  $1.1 \times 10^{-8}$  ( $1\sigma$ ). В итоге, можно сделать вывод, что предполагаемые влияния Хиггсоподобных скалярных полей, связанных с гравитационным потенциалом Галактики, на массы элементарных частиц не превышает уровень  $10^{-8}$ , по сравнению с лабораторными измерениями. Полученный верхний предел накладывает ограничения на теоретические модели, в которых рассматриваются различные сценарии расширения Стандартной модели элементарных частиц.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарности своему руководителю Левшакову С.А. и профессору Козлову М.Г. за ценные комментарии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] R. Onofrio, 2010, Phys. Rev. D, 82, 065008.
- [2] F. D. Albareti et al., 2017, Phys. Rev. D, 95, 044030.
- [3] S. Alexander et al., 2016, CQD, 33, 14LT01.
- [4] R. I. Thompson, 1975, Astrophys. Lett., 16, 3.
- [5] M. G. Kozlov, S. A. Levshakov, 2013, Ann. Phys., 525, 452.
- [6] D.A. Varshalovich, S.A. Levshakov, 1993, J. Exp. Theor. Phys. Lett. 58, 237
- [7] S.A. Levshakov, M.G. Kozlov, D. Reimers, 2011, ApJ 738, 26
- [8] D. Rabli, D.R. Flower, 2010, MNRAS, 203, 2033.
- [9] J.S. Vorotyntseva, M.G. Kozlov, S.A. Levshakov, 2024, MNRAS 527, 2750.
- [10] R.M. Lees et al., 1973, J. Phys. Chem. Ref. Data, 2, 205.
- [11] J. Fisher et al., 2007, J. Mol. Spectrosc., 245, 7.
- [12] L.H. Xu, F.J. Lovas, 1997, J. Phys. Chem. Ref. Data, 26, 17.
- [13] P. Jansen et al., 2011, Phys. Rev. Lett. 106, 100801.
- [14] S.A. Levshakov et al., 2022, MNRAS 511, 413.
- [15] M. Daprà et al., 2017, MNRAS 472, 4434.
- [16] J. Bagdonaite et al., 2015, Phys. Rev. Lett. 114, 071301.
- [17] S.A. Levshakov et al., 2014, Mem. S. A. It. 85, 90
- [18] J.H. Wu et al., 2023, ApJS 265, 49.
- [19] X., Liu et al., 2024, ApJS, 106, 19.
- [20] J.S. Vorotyntseva, S.A. Levshakov, 2024, JETPL (in preparation).