

Коэффициенты чувствительности к вариациям отношения массы электрона к массе протона в дейтерированном метаноле

Ю. С. Воротынцева

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН;

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

j.s.vorotyntseva@mail.ioffe.ru

Аннотация. Представлены результаты численных расчетов коэффициентов чувствительности Q микроволновых молекулярных переходов в основном торсионно-вращательном состоянии дейтерированного метанола (CH_3OD , CD_3OH и CD_3OD) к небольшим изменениям фундаментальной физической константы $\mu = m_e/m_p$ — отношения массы электрона к массе протона. Теоретическая мотивация изменений в μ исходит из множества моделей, выходящих за рамки стандартной модели физики элементарных частиц, которые используются для объяснения природы темной материи и темной энергии, доминирующих во Вселенной. Расчетные значения Q варьируются от -300 до $+73$ и, таким образом, делают дейтерированный метанол перспективным для поиска небольших пространственно-временных изменений μ . Также показано, что среди рассчитанных коэффициентов чувствительности Q с использованием различных гамильтонианов в настоящей и предыдущих работах есть несколько выраженных отклонений.

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

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в научном астрономическом обществе активно обсуждается вопрос о существовании темной материи — гипотетическая форма вещества, которая не взаимодействует с электромагнитным излучением, но участвует в гравитационных эффектах. Наблюдательными фактами темной материи являются плоские кривые вращения галактик, гравитационное линзирование и крупномасштабная структура пространственного распределения галактик [1]. На настоящий момент разработано множество теорий, расширяющих Стандартную Модель элементарных частиц, чтобы объяснить природу темной материи. Наиболее популярной является теория о Хиггсоподобных скалярных полях, которые могут гипотетически взаимодействовать с элементарными частицами — с электроном — непосредственно, и с протоном — через энергию связи кварков [2]–[4]. Такое взаимодействие, в свою очередь, привело бы к модуляции масс электрона и протона, и, как следствие, к изменению фундаментальной физической постоянной — отношению массы электрона к массе протона $\mu = m_e/m_p$ [5]. Таким образом достоверность Стандартной модели может быть проверена при помощи относительных измерений μ , а именно — путем

сравнения измеренного значения этой константы в лаборатории μ_{lab} и в космосе μ_{obs} :

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{\mu_{\text{obs}} - \mu_{\text{lab}}}{\mu_{\text{lab}}}, \quad (1)$$

В конце прошлого века было установлено, что электронно-колебательно-вращательные переходы в молекулярных спектрах зависят от значения μ [6], [7], причем такая зависимость для каждого перехода своя, и характеризуется безразмерным коэффициентом чувствительности Q к гипотетическим μ -вариациям, который определяется как

$$Q = \frac{df/f}{d\mu/\mu}, \quad (2)$$

где df/f — относительный сдвиг частоты, а $d\mu/\mu$ определяется формулой (1). Таким образом, реакция молекулярного перехода на изменение μ отображается в виде сдвига частоты.

В 2011 году было показано, что наибольшие коэффициенты чувствительности имеет молекула метанола (CH_3OH), причем разных знаков — от $-53 < Q < +42$ [8], [9], что по сравнению с коэффициентами чувствительности для молекулярного водорода H_2 [7] дает эффективность в оценках μ -вариаций в 1000 раз большую.

Относительно недавно, также были рассчитаны коэффициенты чувствительности для двух изотопологов метанола — с тяжелым углеродом $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ и тяжелым кислородом $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$. Для этих двух молекул значения ранжируются в диапазоне $-32 < Q < +78$ и $-109 < Q < +33$, соответственно [10]. Как видно из приведенных значений, коэффициенты чувствительности для изотопологов выше, чем для основной молекулы, поэтому, следующей перспективной задачей стал расчет для нескольких молекул метанола с тяжелым водородом D (дейтерием): CH_3OD , CD_3OH и CD_3OD .

II. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ КОНСТАНТЫ

Для вычисления коэффициента чувствительности данного перехода, нужно рассчитать уровни энергии молекулы, которые можно описать двумя квантовыми числами — полного углового момента J и его проекции K на главную ось молекулы для верхнего и нижнего уровней. Для каждого данного перехода коэффициент чувствительности Q вычисляется как разность

q -факторов (коэффициент, индивидуальный для каждого уровня энергии, показывающий реакцию на небольшое изменение μ) для верхнего q'' и q' нижнего уровней перехода, деленная на частоту f перехода [8]:

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

Для таких расчетов требуется физически прозрачная модель эффективного Гамильтониана, параметры которого имеют четкий физический смысл. Таким требованиям соответствует модель из работы [11], содержащая всего 7 параметров – вращательные константы A , B , C , параметр взаимодействия внутреннего вращения с общим D , кинетический коэффициент F , высота потенциального барьера V_3 и безразмерный коэффициент ρ – константа взаимодействия внутреннего вращения.

В нашей работе [12] мы вычислили значения всех 7 параметров по формулам (например [9]):

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \hbar \left(\frac{I_a + I_b}{I_a I_b - I_{ab}^2} - \frac{I_b}{I_b^2 + I_{ab}^2} \right), \\ B &= \frac{1}{2} \hbar \frac{I_b}{I_b^2 + I_{ab}^2}, \\ C &= \frac{1}{2} \hbar \frac{1}{I_c}, \\ D &= \frac{1}{2} \hbar \frac{I_{ab}}{I_b^2 + I_{ab}^2}, \\ F &= \frac{1}{2} \hbar^2 \frac{I_a I_b - I_{ab}^2}{I_{a2}(I_a I_b - I_{ab}^2)}, \\ \rho &= \frac{I_{ab} \sqrt{I_b^2 + I_{ab}^2}}{I_a I_b - I_{ab}^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

В формулах (4) I_a , I_b , I_c , I_{ab} – моменты инерции, $\hbar = h/2\pi$ – постоянная Планка. Моменты инерции для различных дейтерированных изотопологов взяты из работ [13] и [14]. Рассчитанные значения спектроскопических констант внесены в табл. 1 – для CH_3OD , CD_3OH , CD_3OD , по сравнению с метанолом CH_3OH . Также в этой Таблице отображен коэффициент асимметрии, которой вычисляется, исходя из значений вращательных констант A , B , C по формуле [15]

$$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}. \quad (5)$$

Значение $\kappa = -1$ соответствует полной симметрии; из табл. 1 видно, что наибольшей асимметрией обладает полностью дейтерированный метанол CD_3OD .

ТАБЛИЦА 1. ПАРАМЕТРЫ ГАМИЛЬТониАНА (в см^{-1} , КРОМЕ ПОСЛЕДНИХ ДВУХ БЕЗРАЗМЕРНЫХ ПАРАМЕТРОВ)

Параметр	CH_3OH	CH_3OD	CD_3OH	CD_3OD
A	4.2556	3.6794	2.3617	2.1699
B	0.8232	0.7819	0.6620	0.5988
C	0.7929	0.7333	0.6429	0.7929
D	-0.0026	0.0292	-0.0033	-0.0189
F	27.752	17.582	14.817	25.092
V_3	375.6	370.3	371.8	362.8
ρ	0.811	0.703	0.895	0.822
κ	-0.982	-0.967	-0.978	-0.960

III. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Расчет коэффициентов чувствительности Q для дейтерированных молекул метанола проводился в диапазоне частот 1–50 ГГц для переходов с квантовым числом $J \leq 13$, и с изменением квантового числа K на единицу (т. к. переходы с нулевым изменением K – чисто вращательные, для них $Q = 1$). Получены следующие результаты:

- для CH_3OD : $-32 < Q < +25$;
- для CD_3OH : $-300 < Q < +73$;
- для CD_3OD : $-44 < Q < +38$.

Чтобы оценить μ -вариации, необходимо использовать пары переходов с измеренными радиальными скоростями V_i и V_j , наблюдаемые в одном астрономическом объекте, и имеющие различные коэффициенты чувствительности Q_i и Q_j [8]:

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = \frac{V_i - V_j}{c(Q_j - Q_i)}, \quad (6)$$

где c – скорость света.

В настоящее время, наиболее жесткие верхние пределы на μ -вариации в Галактике установлены на уровне 10^{-8} , с использованием линий метанола CH_3OH , $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ [16]–[18] и инверсионного перехода аммиака в комбинации с чисто вращательными переходами HC_3N , HC_5N , HC_7N [19]. Формула (6) показывает, что, чем больше разность коэффициентов чувствительности используемой пары линий, тем выше уровень точности оценок $\Delta\mu/\mu$. Поэтому, исходя из полученных результатов расчета, дейтерированный метанол является наиболее перспективной молекулой для оценок μ -вариаций, в особенности, CD_3OH .

Отметим, что для CD_3OH два перехода с наибольшей разностью коэффициентов чувствительности ($Q = -300$ и $Q = +73$) находятся на близких частотах 1.2 ГГц и 4 ГГц, то же характерно и для CD_3OD – переход на частоте 2.2 ГГц имеет $Q = -44$, и переход на частоте 2.3 ГГц имеет $Q = +38$. Использование переходов одного спектрального диапазона исключает различные систематические ошибки при оценках $\Delta\mu/\mu$, связанные с различной приемной аппаратурой телескопа, или с пространственной сегрегацией.

Коэффициенты чувствительности для некоторых переходов молекул CH_3OD и CD_3OH ранее [20]. Мы сравнили наши результаты расчета с ранее опубликованными, и обнаружили существенные расхождения для небольшого количества переходов. На рис. 1 показаны результаты сравнения рассчитанных коэффициентов чувствительности для четырех молекул CH_3OH , CH_3OD , CD_3OH и CD_3OD : черными точками показаны рассчитанные нами значения Q , красными – расчет из работы [20]. Серым обозначены доверительные области. Из рисунка видно, что, хотя для основной молекулы метанола значения обоих расчетов примерно совпадают, для дейтерированных молекул наш расчет лучше попадает в доверительные области.

Кроме того, мы выполнили оценку возможных ошибок в нашем расчете. Частоты молекулярных переходов зависят от μ через параметры эффективного

гамильтониана. Пять из этих параметров, $A - F$, обратно пропорциональны моментам инерции, которые почти линейно изменяются с μ . Отклонение от линейности оценивалось на уровне 1–2 %, в основном это вызвано слабой зависимостью межъядерных расстояний от колебательных и центробежных искажений. Эти небольшие поправки, в свою очередь, изменяют коэффициенты чувствительности. Чтобы оценить погрешность масштабирования для коэффициентов чувствительности Q , мы независимо изменяем масштабирование каждого из параметров эффективного гамильтониана на 2 % и вычисляем коэффициенты чувствительности заново, и оцениваем ошибку как разность полученных значений. Относительные ошибки коэффициентов чувствительности в нашем расчете составляют не более 10 процентов.

Другой возможный источник теоретических ошибок связан с взаимодействием близко расположенных торсионно-вращательных уровней с одинаковыми квантовыми числами J . Такое взаимодействие приводит к хорошо известному отталкиванию уровней. μ -вариации изменяют расстояние между уровнями и, следовательно, отталкивание. Это может повлиять на коэффициенты чувствительности взаимодействующих уровней, поэтому важно, чтобы q -факторы изменялись в противоположных направлениях, оставляя их сумму неизменной. Чтобы оценить этот источник ошибки, мы вычислили q -факторы, используя небольшое изменение μ как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения, и оценили производную $dq/d\mu$. Наш анализ показывает, что этот источник ошибок является субдоминантным для всех уровней, рассмотренных в настоящей работе.

Так как в нашем расчете никаких серьезных отклонений не нашлось, можно предположить, что такие расхождения в результатах связаны со сложной моделью, которая используется в работе [20]. Эта модель содержит 119 параметров (в отличие от нашей простой с 7 параметрами). 119 параметров модели имеют различную зависимость от μ , и многие параметры более высокого порядка являются производными от операторов, и могут быть хорошо коррелированы. Следовательно, точная взаимосвязь между параметрами и моментами инерции более высокого порядка (и, следовательно, массами) плохо известна. Это может дать некоторые эффекты при расчете коэффициентов чувствительности, которые были протестированы для CH_3OH в работе [20], но не оценивались для дейтерированных молекул.

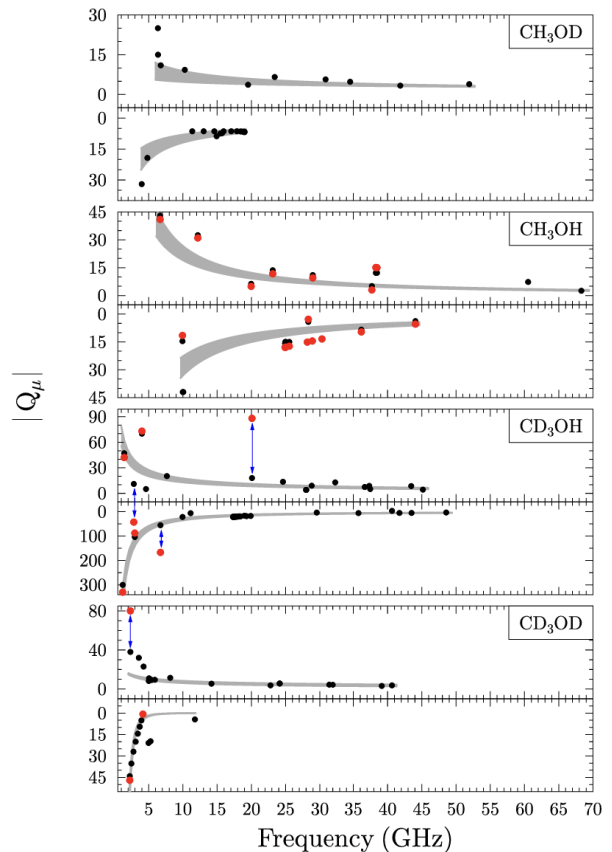


Рис. 1. Сравнение коэффициентов чувствительности для метанола и его дейтерированных изотопологов: красные точки – рассчитанные в работах [9], [20]; черные точки – текущие результаты. Затененная область показывает зону неопределенности $\pm 3\sigma$. Синие стрелки указывают на максимальные отклонения значений Q между первоначальными и текущими расчетами. В целом, Q уменьшается с увеличением частоты молекулярных переходов во всех четырех случаях.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассчитали коэффициенты чувствительности Q к вариациям отношения массы электрона к массе протона, $\mu = m_e/m_p$ для различных молекулярных переходов в микроволновом диапазоне частот 1–50 ГГц дейтерированных изотопологов метанола – CH_3OD , CD_3OH и CD_3OD . Получены следующие основные результаты:

- Для CH_3OD значения Q находятся в интервале от –32 до +25.
- Для CD_3OH коэффициенты чувствительности варьируются в широком диапазоне от –300 на 1.202 ГГц до +73 на 4.011 ГГц.
- Для CD_3OD два соседних перехода на 2.237 ($Q=-44$) и 2.328 ГГц ($Q=+38$) ограничивают значения Q от всей выборки в диапазоне частот 2–40 ГГц.
- Мы также обнаружили, что наряду с хорошим согласованием значений Q для основного метанола CH_3OH , рассчитанных с использованием разных гамильтонианов в настоящей и предыдущих работах, в изотопологах CD_3OH и CD_3OD имеется несколько выраженных отклонений неясной природы.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарности своему руководителю доктору физ.-мат. наук С.А. Левшакову и профессору М.Г. Козлову за ценные комментарии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Bertone G., Hooper D., Rev. Mod. Phys. 90, 045002 (2018)
- [2] R. Onofrio, 2010, Phys. Rev. D, 82, 065008.
- [3] F. D. Albareti et al., 2017, Phys. Rev. D, 95, 044030.
- [4] S. Alexander et al., 2016, CQD, 33, 14LT01.
- [5] Uzan J.-P., Fundamental constants: from measurement to the universe, a window on gravitation and cosmology (2024) arXiv:2410.07281
- [6] M. G. Kozlov, S. A. Levshakov, 2013, Ann. Phys., 525, 452.
- [7] D.A. Varshalovich, S.A. Levshakov, 1993, J. Exp. Theor. Phys. Lett. 58, 237
- [8] S.A. Levshakov, M.G. Kozlov, D. Reimers, 2011, ApJ 738, 26
- [9] P. Jansen, et al., Phys. Rev. A 84, 062505 (2011).
- [10] J.S. Vorotyntseva, M.G. Kozlov, S.A. Levshakov, 2024, MNRAS 527, 2750.
- [11] D. Rabli, D.R. Flower, 2010, MNRAS, 203, 2033.
- [12] J.S. Vorotyntseva, S.A. Levshakov, M.G. Kozlov, Phys. Rev. A, 110, 012802
- [13] R. M. Lees and J. G. Baker, Torsion-vibration-rotation interactions in methanol. I. Millimeter wave spectrum, J. Chem. Phys. 48, 5299 (1968).
- [14] R. M. Lees, Torsion-vibration-rotation interactions in methanol. II. Microwave spectrum of CD₃DO, J. Chem. Phys. 56, 5887 (1972).
- [15] C. Townes and A. Schawlow, Microwave Spectroscopy (McGraw-Hill, New York, 1955).
- [16] S.A. Levshakov et al., 2022, MNRAS 511, 413.
- [17] M. Daprà et al., 2017, MNRAS 472, 4434.
- [18] Vorotyntseva J.S., Levshakov S.A., JETP Letters, 119, 9, 649 (2024)
- [19] S.A. Levshakov et al., 2014, Mem. S. A. It. 85, 90
- [20] P. Jansen et al., 2011, Phys. Rev. Lett. 106, 100801.