

СПЕКТРОСКОПИЯ HD^+ : ЗАРЯДОВЫЙ РАДИУС ПРОТОНА И КОНСТАНТА РИДБЕРГА

В. И. Коробов *

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Обсуждается проблема зарядового радиуса протона, его корреляция с константой Ридберга, сложности определения константы Ридберга из спектроскопии атома водорода, переопределение фундаментальных констант в новой редакции CODATA18. Далее рассматриваются теоретические и экспериментальные аспекты прецизионной спектроскопии молекулярного иона водорода HD^+ . Показано, что новые эксперименты позволяют убрать доплеровское уширение спектральных линий и достичь относительной погрешности $\sim 10^{-11}$ при измерении частоты перехода. Сравнение этих данных экспериментов с теоретическими расчетами приводит к однозначному выводу о том, что зарядовый радиус протона должен определяться из эксперимента по мюонному водороду, а константа Ридберга — из $1S-2S$ -перехода в атоме обычного водорода. Только в этом случае экспериментальные и теоретические данные в HD^+ разумно согласуются.

The problem of the proton charge radius, its correlation with the Rydberg constant, the difficulties of determining the Rydberg constant from the spectroscopy of a hydrogen atom, and the redefinition of fundamental constants in the new edition of CODATA18 are discussed. Further, theoretical and experimental aspects of the precision spectroscopy of the molecular hydrogen ion HD^+ are considered. It is shown that new experiments make it possible to remove the Doppler broadening of spectral lines and achieve a relative uncertainty of $\sim 10^{-11}$ in the transition frequency. Comparison of these experiments with theoretical calculations leads to the unambiguous conclusion that the proton charge radius should be determined from muon hydrogen experiment, and the Rydberg constant — from $1S-2S$ transition in an ordinary hydrogen atom. Only in this case the experiment and theory in HD^+ reasonably agree with each other.

PACS: 14.20.Dh

ВВЕДЕНИЕ

Вся эта история началась с эксперимента по измерению лэмбовского сдвига в мюонном атоме водорода [1, 2]. Если верить теории [3–6], то величина лэмбовского сдвига в мюонном водороде равна

$$\Delta E_L^{\text{th}} = E_{2P_{1/2}} - E_{2S_{1/2}} = 206,0573(49) - 5,2262r_p^2 + 0,0347r_p^3 \text{ МэВ.} \quad (1)$$

*E-mail: korobov@theor.jinr.ru

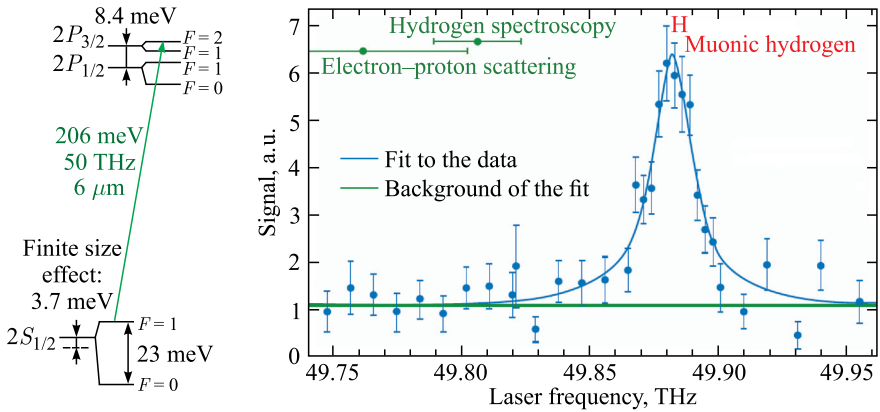


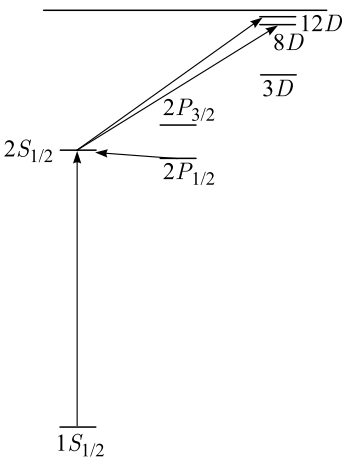
Рис. 1. Эксперимент по лэмбовскому сдвигу в мюонном атоме водорода

Из полученной формулы и экспериментальных данных [1, 2] следует, что зарядовый радиус протона нужно принять равным $r_p = 0,84184(67)$ фм, что отличается на 5σ от значения $r_p = 0,8768(69)$ фм, рекомендованного CODATA06 [7] в 2006 г.

Схема первого эксперимента [1] и спектральная линия перехода $2S_{1/2}^{F=1} \rightarrow 2P_{3/2}^{F=2}$ показаны на рис. 1. Реализация эксперимента достаточно сложна. Во-первых, мюонные атомы являются короткоживущими (время жизни мюона $\sim 2,2$ мкс), мюоны останавливаются в мишени с разреженным газом H_2^+ , образуя $p\mu$ -атомы в возбужденном состоянии ($n \approx 14$), и быстро девозбуждаются, переходя в основное $1S$ -состояние мюонного атома. Вместе с тем в эксперименте должен индуцироваться лазерный переход из $2S$ -состояния атома, что требует очень точной настройки параметров мишени (давления, температуры, размеров камеры), чтобы обеспечить существование «долгоживущих» $2S$ -состояний в необходимом количестве ($\sim 1\%$) и с достаточным временем жизни (~ 1 мкс). Изначально сигнал долгое время не был виден, так как его поиски велись в области частот, определяемых из спектроскопии обычного атома водорода и данных рассеяния электрона на протоне. В то же время получение профиля спектральной линии, который позволил с высокой точностью фитировать узкий пик спектра сигнала и определить частоту перехода, не оставляет сомнений в значимости полученных результатов.

1. ЗАРЯДОВЫЙ РАДИУС ПРОТОНА И КОНСТАНТА РИДБЕРГА

Прежде чем перейти к дальнейшему обсуждению, необходимо рассмотреть причины, породившие парадокс с зарядовым радиусом протона. Как уже отмечалось выше, зарядовый радиус протона определялся ранее из преци-



зионной спектроскопии атома обычного водорода. С этими экспериментами связана еще одна фундаментальная константа атомной физики — константа Ридберга. Схема экспериментов представлена на рис. 2, однако при кажущейся простоте измерения переходов в атоме водорода следует учитывать тот факт, что радиационное время жизни возбужденных состояний очень мало (~ 10 нс для $2P$ -состояния) и лишь один переход $1S_{1/2} \rightarrow 2S_{1/2}$ имеет конечное возбужденное состояние со временем жизни $1/7$ с, определяемым двухфотонным распадом. По этой причине только этот переход был измерен в эксперименте с ультравысокой точностью [8]:

Рис. 2. Определение константы Ридберга из спектроскопии атома водорода

$$\nu(1S_{1/2} - 2S_{1/2}) = 2\,466\,061\,413,187\,035(10) \text{ МГц.} \quad (2)$$

Но, как известно, из одного уравнения нельзя определить сразу две неизвестные величины. Ситуацию с другими переходами хорошо иллюстрируют следующие два недавних эксперимента.

1. Эксперимент в Институте квантовой оптики Общества им. Макса Планка (Гархинг) [9]. Переход $2S-4P$ (рис. 3). Ширина спектральной линии 20 МГц, точность измерения 3 кГц, четыре порядка по отношению к ширине линии. Основные выводы:

константа Ридберга

$$R_\infty = 10973731,568076(96) \text{ м}^{-1},$$

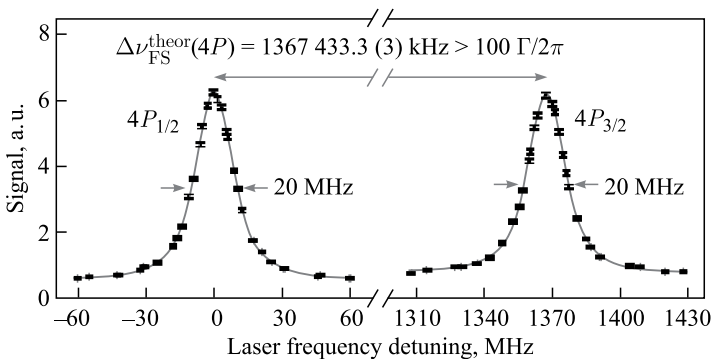


Рис. 3. Переход $2S-4P$. Наблюдаемая ширина линий ~ 20 МГц. Заявленная точность измерения частоты перехода 3 кГц

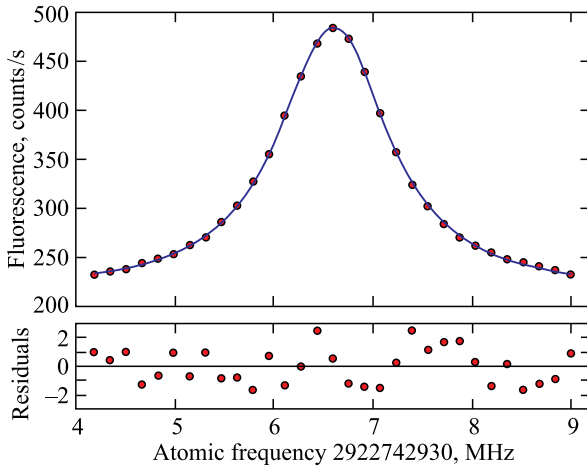


Рис. 4. Переход $1S-3S$. Наблюдаемая ширина линий 1,35 МГц. Заявленная точность измерения частоты перехода 2,6 кГц

радиус протона

$$r_p = 0,8335(95) \text{ фм.}$$

2. Эксперимент в Лаборатории Каствлера–Бросселя (Париж) [10]. Переход $1S-3S$ (рис. 4). Ширина спектральной линии 1,34 МГц, точность измерения 2,6 кГц. Основные выводы:

константа Ридберга

$$R_\infty = 10973731,56853(14) \text{ м}^{-1},$$

радиус протона

$$r_p = 0,877(13) \text{ фм.}$$

Как видно, несмотря на высокий профессионализм обеих групп — признанных лидеров в прецизионной спектроскопии атома водорода, результаты находятся в прямом противоречии друг с другом. И как видно из приведенных данных, главное препятствие — отсутствие узких резонансов.

2. CODATA14 И CODATA18

Группа CODATA была создана для выработки рекомендаций по согласованному набору значений фундаментальных физических констант [11] для использования научным и технологическим сообществами во всем мире. Рабочая группа публикует свои отчеты раз в четыре года, последний опубликованный отчет [12] содержит рекомендации 2014 г.

В прежние годы CODATA придерживалась строго консервативной политики при выборе экспериментов для вычисления новых рекомендованных значений констант, стараясь избегать экспериментов, выпадающих из основного

Таблица 1. Переопределение фундаментальных констант атомной физики группой CODATA в 2018 г. Верхнее значение соответствует определению CODATA14, нижнее — CODATA18

Величина	Значение	Погрешность
Зарядовый радиус протона r_p	$0,8751(61) \cdot 10^{-15}$ м	$7,0 \cdot 10^{-3}$
	$0,8414(19) \cdot 10^{-15}$ м	$2,2 \cdot 10^{-3}$
Константа Ридберга $R_\infty = \alpha^2 m_e c / 2h$	$10\,973\,731,568\,508(65)$ м ⁻¹	$5,9 \cdot 10^{-12}$
	$10\,973\,731,568\,160(21)$ м ⁻¹	$1,9 \cdot 10^{-12}$
Отношение масс протона и электрона $\mu = m_p/m_e$	1836,152 673 89(17)	$9,5 \cdot 10^{-11}$
	1836,152 673 43(11)	$6,0 \cdot 10^{-11}$

тренда, которые превышают значение установленное правилами CODATA порога. При этом в последнем обновлении CODATA18 произошли существенные изменения, связанные с заменой критерия выбора «значимости» результатов экспериментов, а именно: чем точнее, тем лучше. Это имело весьма серьезные последствия для прецизионной физики. Если в CODATA14 зарядовый радиус протона определялся из экспериментов по спектроскопии обычного атома водорода и экспериментов по рассеянию электрона на протоне, а эксперимент с мюонным водородом просто отбрасывался, то в новой редакции за основу был принят прежде всего эксперимент по спектроскопии мюонного атома водорода, а константа Ридберга находилась из сравнения с прецизионным измерением $1S-2S$ -перехода (уравнение (2)) в обычном водороде с использованием нового значения зарядового радиуса протона как известной величины. И, наконец, последнее и также очень важное изменение связано с массой протона, которая выбиралась из прецизионного эксперимента [13] по измерению циклотронной частоты протона в ловушке Пеннинга:

$$m_p = 1,007\,276\,466\,583(32)u.$$

Погрешность измерения в этом эксперименте в три раза меньше значения, рекомендованного CODATA14, однако величина массы протона отличается на 3σ от старого значения!

Результаты полученных изменений приведены в табл. 1, из которой хорошо видно, что новые значения не только не согласуются в пределах 3σ с предыдущими, но и имеют погрешности рекомендованных значений существенно ниже, чем в предыдущем выпуске CODATA.

3. ПРЕЦИЗИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ HD⁺

3.1. Чисто ротационный переход: ($N = 0, v = 0$) \rightarrow ($1, 0$). Чисто ротационный переход в молекуле реализуется без возбуждения вибрационного квантового числа и в случае с ионом HD⁺ имеет частоту перехода порядка

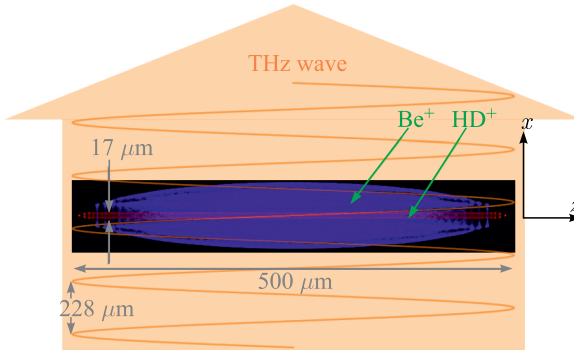


Рис. 5. Реализация режима Лэмба–Дикке в ионной ловушке. Ионы HD^+ охлаждаются ионами бериллия (sympathetic cooling), локализуются в пространстве ловушки с поперечным размером 17 мкм и облучаются лазером с длиной волны 228 мкм

1,3 ТГц (длина волны 228 мкм). В этом случае возможна реализация режима Лэмба–Дикке [14], при котором размер ловушки много меньше длины волны лазерного облучения (рис. 5), и ионы в ловушке имеют квантовое поведение: дискретный спектр возбуждения движения иона. Это приводит к тому, что широкий спектр доплеровского уширения переходит в линейчатый спектр, в котором спутниковые линии тем дальше друг от друга, чем меньше размеры ловушки по отношению к длине волны. При этом ширина линии перехода зависит от интенсивности лазерного облучения, что хорошо видно на рис. 6. Время жизни верхнего ротационно-возбужденного состояния — порядка 100 с.

Этот эксперимент был реализован в Дюссельдорфском университете им. Г. Гейне [15]. Было измерено шесть линий сверхтонкой структуры перехода со статистической погрешностью порядка 30 Гц, из них с использованием взвешенной суммы всех переходов, минимизирующей погрешность, была выделена спин-усредненная частота перехода:

$$\nu_{\text{sp-av}}^{\text{exp}} = 1\,314\,925\,752\,889(17) \text{ Гц.}$$

3.2. Чисто вибрационный переход: ($N = 3, v = 0$) \rightarrow (3, 9). Второй эксперимент проводился в Амстердаме [16]. В этот раз для решения проблемы доплеровского уширения использовалась двухфотонная спектроскопия, когда мишень облучается встречными лазерными пучками одинаковой (или почти одинаковой) частоты (рис. 7). Частота вибрационного перехода — 415 ТГц, ширина спектральной линии — 7,6 кГц, погрешность измерения — 1 кГц, относительная погрешность измерения — $2,4 \cdot 10^{-12}$. Определены две линии сверхтонкой структуры перехода, получена спин-усредненная частота

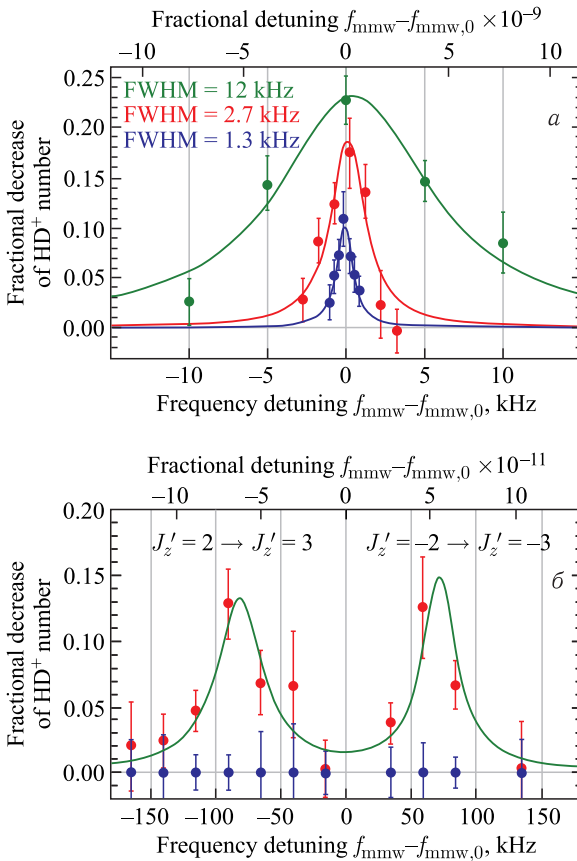


Рис. 6. Чисто ротационный переход ($N = 0, v = 0$) \rightarrow (1, 0) в HD⁺. а) Зависимость ширины спектральной линии от интенсивности лазерного излучения. б) Зеемановское расщепление перехода с шириной спектральной линии 40 Гц

перехода:

$$\nu_{\text{sp-av}}^{\text{exp}} = 415\,264\,925\,498,8(1,0) \text{ кГц.}$$

Результаты обеих работ предварительные, поэтому в формулах используются результаты усреднения по спиновым переменным, полученные автором работы [16], и они могут отличаться от окончательных результатов. Работы направлены в журналы «Nature» (Дюссельдорф) и «Science» (Амстердам).

3.3. Сравнение с теорией. Последовательно теория спектра молекулярных ионов водорода H₂⁺, HD⁺ и др. развивалась нами в серии работ [17–20]: начиная с нерелятивистских уровней энергии, с использованием формализма

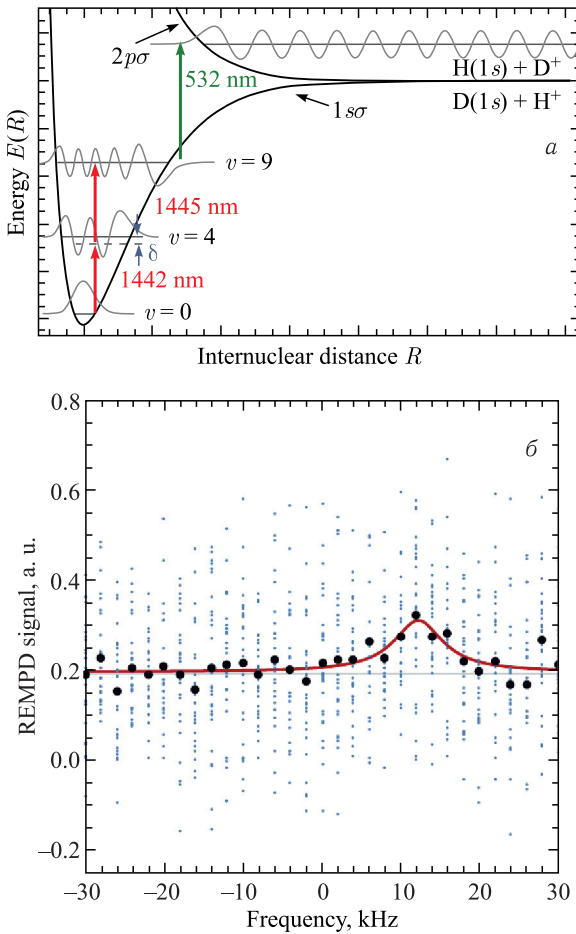


Рис. 7. Чисто вибрационный переход: $(N = 3, v = 0) \rightarrow (3, 9)$. а) Схема двухфотонной спектроскопии без доплеровского уширения. б) Профиль спектральной линии с шириной пика 7,6 кГц

нерелятивистской КЭД последовательно вычислялись все поправки к энергиям, включая сверхтонкое расщепление уровней, в порядках $R_\infty \alpha^2$, $R_\infty \alpha^3$ и выше — вплоть до $R_\infty \alpha^6$. При этом в высших порядках использовался адиабатический подход, когда поправки к энергии связанного электрона вычислялись в приближении внешнего поля задачи двух центров [18, 19]. Последнее существенно упростило их вычисление, так как поправки на конечную массу ядер оказались пренебрежимо малы для целевой точности относительной погрешности 10^{-12} . Результаты расчетов и их сравнение с экспериментальными данными представлены в табл. 2, 3 и 4, 5.

Таблица 2. Чисто ротационный переход ($N = 0, v = 0$) \rightarrow (1, 0) в HD^+ . Теоретические расчеты с учетом вкладов высших порядков по α (в килогерцах), используются рекомендуемые CODATA18 значения констант

ΔE_{nr}	1 314 886 776,526
ΔE_{α^2}	48 416,268
ΔE_{α^3}	-9 378,125
ΔE_{α^4}	-65,631(2)
ΔE_{α^5}	3,923(3)
ΔE_{α^6}	-0,070(18)
ΔE_{tot}	1 314 925 752,896(18)

Таблица 4. Чисто вибрационный переход ($N = 3, v = 0$) \rightarrow (3, 9) в HD^+ . Теоретические расчеты с учетом вкладов высших порядков по α (в килогерцах), используются рекомендуемые CODATA18 значения констант

ΔE_{nr}	415 260 910 672,1
ΔE_{α^2}	5666 221,6
ΔE_{α^3}	-1640 449,4
ΔE_{α^4}	-11 666,7(4)
ΔE_{α^5}	731,2(5)
ΔE_{α^6}	-14,8(3,1)
ΔE_{tot}	415 264 925 496,1(3,1)

Таблица 3. Чисто ротационный переход ($N = 0, v = 0$) \rightarrow (1, 0) в HD^+ . Сравнение расчетов с CODATA14 и вклады в энергию, соответствующие изменению ключевых констант (в герцах). Относительная теоретическая погрешность $u_r(\nu) = u_r(\mu) = 1,35 \cdot 10^{-11}$

CODATA14	1 314 925 752 620(18)
Ry	-42
r_p	104
m_p	213
CODATA18	1 314 925 752 896(18)
Эксперимент	1 314 925 752 889(17)

Таблица 5. Чисто вибрационный переход ($N = 3, v = 0$) \rightarrow (3, 9) в HD^+ . Сравнение расчетов с CODATA14 и вклады в энергию, соответствующие изменению ключевых констант (в килогерцах). Относительная теоретическая погрешность $u_r(\nu) = 7,5 \cdot 10^{-12}$

CODATA14	415 264 925 467,0(3,1)
Ry	-13,2
r_p	18,2
m_p	24,0
CODATA18	415 264 925 496,1(3,1)
Эксперимент	415 264 925 498,8(1,0)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение сформулируем три основных вывода, которые следуют из результатов прецизионной спектроскопии молекулярных ионов водорода HD^+ , рассмотренных в данной работе.

Во-первых, изменения, которые были предложены в последней редакции рекомендуемых значений CODATA18, выглядят оправданными. Во-вторых, проблема зарядового радиуса протона, точнее, противоречия в данных различных экспериментов разрешаются без привлечения новой физики за пределами Стандартной модели. И, в третьих, предсказания квантовой электродинамики в секторе трехчастичных связанных кулоновских систем подтверждаются с высокой относительной точностью — порядка 10^{-11} .

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 18-12-00128).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pohl R. et al.* The Size of the Proton // *Nature*. 2010. V. 466. P. 213.
2. *Antognini A. et al.* Proton Structure from the Measurement of $2S-2P$ Transition Frequencies of Muonic Hydrogen // *Science*. 2013. V. 339. P. 417.
3. *Pachucki K.* Theory of the Lamb Shift in Muonic Hydrogen // *Phys. Rev. A*. 1996. V. 53. P. 2092–2100.
4. *Jentschura U. D.* Lamb Shift in Muonic Hydrogen // *Ann. Phys.* 2011. V. 326. P. 500.
5. *Borie E.* Lamb Shift in Light Muonic Atoms // *Ann. Phys.* 2012. V. 327. P. 733.
6. *Pohl R., Gilman R., Miller G. A., Pachucki K.* Muonic Hydrogen and the Proton Radius Puzzle // *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* 2013. V. 63. P. 175.
7. *Mohr P. J., Taylor B. N., Newell D. B.* CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants 2006 // *Rev. Mod. Phys.* 2008. V. 80. P. 633–730.
8. *Partney C. G. et al.* Improved Measurement of the Hydrogen $1S-2S$ Transition Frequency // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107. P. 203001.
9. *Beyer A., Maisenbacher L., Matveev A., Pohl R., Khabarova K., Grinin A., Lamour T., Yost D. C., Hänsch T. W., Kolachevsky N. N., Udem T.* The Rydberg Constant and Proton Size from Atomic Hydrogen // *Science*. 2017. V. 358. P. 79.
10. *Fleurbay H., Galtier S., Thomas S., Bonnaud M., Julien L., Biraben F., Nez F., Abgrall M., Guéna J.* New Measurement of the $1S-3S$ Transition Frequency of Hydrogen: Contribution to the Proton Charge Radius Puzzle // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120. P. 183001.
11. <https://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>
12. *Mohr P. J., Taylor B. N., Newell D. B.* CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2014 // *Rev. Mod. Phys.* 2016. V. 88. P. 035009.
13. *Heiße F., Köhler-Langes F., Rau S., Hou J., Junck S., Kracke A., Mooser A., Quint W., Ulmer S., Werth G., Blaum K., Sturm S.* High-Precision Measurement of the Protons Atomic Mass // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119. P. 033001.
14. *Dicke R. H.* The Effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines // *Phys. Rev.* 1953. V. 89. P. 472.
15. *Alighanbari S., Hansen M., Korobov V. I., Schiller S.* Rotational Spectroscopy of Cold and Trapped Molecular Ions in the Lamb–Dicke Regime // *Nature Phys.* 2018. V. 14. P. 555.
16. *Sayan Patra.* Towards Doppler-Free Two-Photon Spectroscopy of Trapped and Cooled HD⁺ Ions. Ph.D. Thesis. Vrije Universiteit. Amsterdam, 2019.
17. *Korobov V. I.* Leading-Order Relativistic and Radiative Corrections to the Rovibrational Spectrum of H₂⁺ and HD⁺ Molecular Ions // *Phys. Rev. A*. 2006. V. 74. P. 052506.
18. *Korobov V. I., Hilico L., Karr J.-Ph.* Calculation of the Relativistic Bethe Logarithm in the Two-Center Problem // *Phys. Rev. A*. 2013. V. 87. P. 062506.
19. *Korobov V. I., Hilico L., Karr J.-Ph.* Fundamental Transitions and Ionization Energies of the Hydrogen Molecular Ions with Few ppt Uncertainty // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118. P. 233001.
20. *Korobov V. I., Koelemeij J. C. J., Karr J.-Ph., Hilico L.* Theoretical Hyperfine Structure of the Molecular Hydrogen Ion at the 1 ppm Level // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 116. P. 053003.