

Calculation and Prediction of the Hydrogen

Atomic 1S–2S Transition Frequency

Gang Chen[†], Tianman Chen, Tianyi Chen

[†]Correspondence to: gang137.chen@connect.polyu.hk

Abstract

In our last paper, we started with the ^{87}Sr atomic transition frequency which is 429228004229872.99(8) Hz, calculated out and predicted the ^{229}Th nuclear transition frequency which is 2020407384335167.11(38) Hz, and calculated out more precise value of the atomic unit of time t_{au} which is $2.41888432658653284(45)\times 10^{-17}$ s, and with the later calculated out the atomic transition frequencies of $^{27}\text{Al}^+$, ^{199}Hg , $^{115}\text{In}^+$ and $^{199}\text{Hg}^+$. In this paper, we employ this same method to calculate out and predict the hydrogen atomic 1S–2S transition frequency, which is 2466061413187017.96(46) Hz.

Keywords: H atom, transition, frequency, calculation, prediction.

摘要

在我们的前一篇文章中，我们从 ^{87}Sr 原子跃迁频率即 429228004229872.99(8) Hz 开始，计算和预测了 $^{229}\text{Th}^*$ 核跃迁频率即 2020407384335167.11(38) Hz，也计算出原子单位时间 t_{au} 的更精确值即 $2.41888432658653284(45)\times 10^{-17}$ s，由后者也计算出 $^{27}\text{Al}^+$ 、 ^{199}Hg 、 $^{115}\text{In}^+$ 和 $^{199}\text{Hg}^+$ 原子跃迁频率。本文中我们将用同样的方法计算和预测 H 原子 1S–2S 跃迁频率，即 2466061413187017.96(46) Hz。

关键词: H 原子，1S–2S，跃迁频率，计算，预测。

1. 介绍

H 原子 1S-2S 跃迁频率的精密测量涉及现代精密光谱测量学，包括激光、冷原子、光学频率梳和原子钟等技术，其理论计算则涉及狄拉克方程（Dirac equation）和量子电动力学（QED），理论计算值与测量值的高度吻合则是对狄拉克方程和 QED 等理论的验证。H 原子 1S-2S 跃迁频率的精确测量和计算还有助于确定 Rydberg 常数、精细结构常数（the fine-structure constant）等物理学基本常数。H 原子 1S-2S 跃迁频率应是所有原子跃迁频率中最重要、最基本的。

由于电偶极跃迁选择定则 ($\Delta l = \pm 1$), H 原子 1S ($l=0$) 到 2S ($l=0$) 的跃迁是禁止的, 实验值通过双光子跃迁测量实现, 吸收两个波长约 243nm 的光子, 每个光子的能量为跃迁能量的一半。

以下为人类对 H 原子 1S-2S 跃迁频率的最精密测量值和最精确的 QED 理论计算值 (表 1)。我们可看到理论计算值还未达到实验测量值的精度, 且不确定范围不能互相涵盖, 即理论计算值和实验测量值还有不可忽视的偏差。

表 1. H 原子 1S-2S 跃迁频率的实验值和理论值

H 1S-2S Frequency	Source	Time	Ref.
2 466 061 413 187 103(46) Hz	Experimental	2000	[1]
2 466 061 413 187 035(10) Hz	Experimental	2011	[2]
2 466 061 413 187 018(11) Hz	Experimental	2013	[3]
2 466 061 413 163.1(6.4) kHz	Theoretical	2018	[4]
$2 \times 1\,233\,030\,706\,593\,514(11)$ Hz	BIPM (two-photon)	2015	[5]

在前一篇文章中, 我们从 ^{87}Sr 原子跃迁频率即 429228004229872.99(8) Hz 开始, 计算和预测了 ^{229}Th 核跃迁频率即 2020407384335167.11(38) Hz, 也计算出原子单位时间 t_{au} 的更精确值即 $2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}$ s, 由后者也计算出 $^{27}\text{Al}^+$ 、 ^{199}Hg 、 $^{115}\text{In}^+$ 和 $^{199}\text{Hg}^+$ 原子跃迁频率[6]。本文中我们将用同样的方法计算和预测 H 原子 1S-2S 跃迁频率。

2. 基于 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S}) = 2466061413187035(10)$ Hz 的计算

我们先以表 1 中的精密测量值 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S}) = 2466061413187035(10)$ Hz 构筑公式进行计算, 关键是计算原子单位制中 H 原子跃迁频率的倒数, 其物理意义是此频率的光传播一个周期所需的原子单位时间 (t_{au})。我们认为这个时间是有意义的, 就像人类跑 100 米的时间, 可根据人的体形和体能计算出来。

我们前一篇文章[6]确定的原子单位时间(atomic unit of time)为:

$$t_{\text{au}} = 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17} \text{ s}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{H-\text{meas}/\text{au}}} &= \frac{1}{f_{H-\text{meas}} t_{\text{au}}} \\ &= \frac{1}{2466061413187035(10) \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\ &= 16.764129682293683(71) \end{aligned}$$

其物理意义为此频率的光传播一个周期所需多少 t_{au}

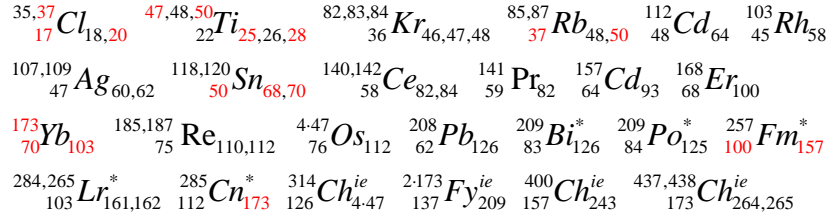
我们构建如下原子单位中 H 原子跃迁频率的倒数公式:

$$\frac{1}{f_{H-\text{calc}/\text{au}}} = 17 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{37.173} + \frac{1}{2 \cdot 25 \cdot (2 \cdot 7 \cdot 47 \cdot 157 + 1)}$$

$$= 17 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{37 \cdot 173} + \frac{1}{2 \cdot 25 \cdot (17 \cdot 59 \cdot 103 - 2)}$$

$$= 16.7641296822936860$$

以上公式中又出现了神奇的173因子，其重要性我们在前
一篇文章[6]中已经论述，所以我们觉得这种方法是正确的。
以上公式中的因子与以下元素核素相关联：



由此反过来可计算更精确的H原子1S-2S跃迁频率：

$$f_{H-calc} = \frac{f_{H-calc/au}}{t_{au}}$$

$$= \frac{1}{16.7641296822936860 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}}$$

$$= 2466061413187034.50(46) \text{ Hz}$$

还可以表 1 中 BIPM 推荐的频率即 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})/2=1233030706593514(11) \text{ Hz}$
构筑公式进行计算，这是激发 H 原子 1S-2S 跃迁的两个相同光子的频率。

$$\frac{1}{f_{H-meas/au} / 2} = \frac{1}{(f_{H-meas} / 2)t_{au}}$$

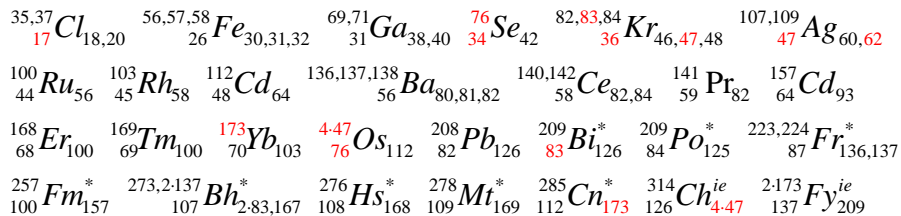
$$= \frac{1}{1233030706593514(11) \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}}$$

$$= 33.52825936458746(31)$$

$$\frac{1}{f_{H-calc/au} / 2} = 34 - \frac{17}{36} + \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 173} - \frac{1}{47 \cdot 83(4 \cdot 19 \cdot 31 + 1)}$$

$$= 33.5282593645873635$$

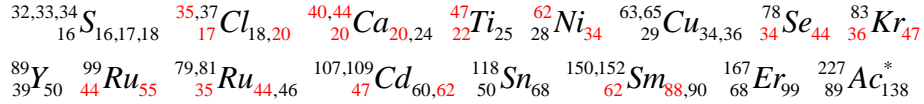
公式中再次出现了173因子，让我们更相信这种方法是正确的。
公式中的因子与以下元素核素相关联：



$$\frac{1}{f_{H-calc/au} / 2} = 34 - \frac{1}{2} + \frac{1}{35} - \frac{1}{4 \cdot 9 \cdot 89} + \frac{1}{4 \cdot 17(4 \cdot 5 \cdot 11 \cdot 31 \cdot 47 - 1) - 17 / 35}$$

$$= 33.5282593645873635$$

与以下元素核素相关联：



由此可计算更精确的H原子1S-2S跃迁频率:

$$\begin{aligned}
f_{H-calc} / 2 &= \frac{f_{H-calc/au}}{t_{au}} \\
&= \frac{1}{33.5282593645873635 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\
&= 1233030706593517.57(24) \text{ Hz} \\
f_{H-calc} &= 2466061413187035.14(46) \text{ Hz}
\end{aligned}$$

以上用两种方法计算出的 H 原子 1S-2S 跃迁频率比实验值多两位有效数字, 即更精确, 且两种方法的计算值只有非常微小的差别。

3. 基于 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})=2466061413187018(11) \text{ Hz}$ 的计算

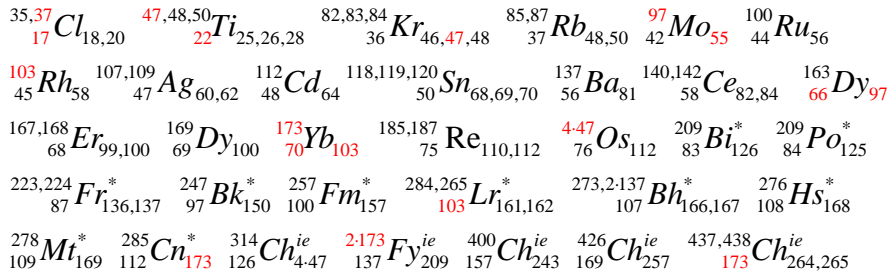
我们以表 1 中的精密测量值 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})=2466061413187018(11) \text{ Hz}$ 构筑公式进行计算。

$$\begin{aligned}
\frac{1}{f_{H-meas/au}} &= \frac{1}{f_{H-meas} t_{au}} \\
&= \frac{1}{2466061413187018(11) \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\
&= 16.764129682293798(78)
\end{aligned}$$

我们构建如下原子单位中H原子1S-2S跃迁频率的倒数公式:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{f_{H-calc/au}} &= 17 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{37 \cdot 173} + \frac{1}{11 \cdot 47 \cdot 97 \cdot 103} \\
&= 16.7641296822937984
\end{aligned}$$

与以下元素核素相关联:



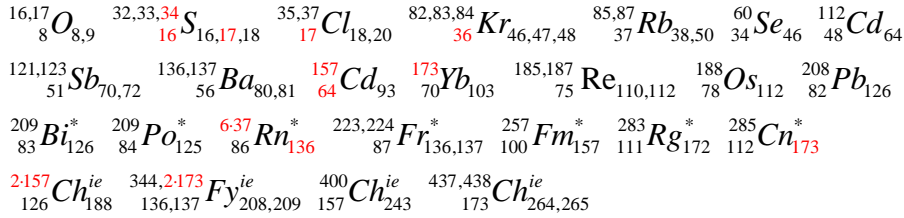
由此可计算更精确的H原子1S-2S跃迁频率:

$$\begin{aligned}
f_{H-calc} &= \frac{f_{H-calc/au}}{t_{au}} \\
&= \frac{1}{16.7641296822937984 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\
&= 2466061413187017.96(46) \text{ Hz}
\end{aligned}$$

还可以 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})/2=2466061413187018(11)/2 \text{ Hz}$ 构筑公式进行计算，这是激发 H 原子 1S-2S 跃迁的两个相同光子的频率。

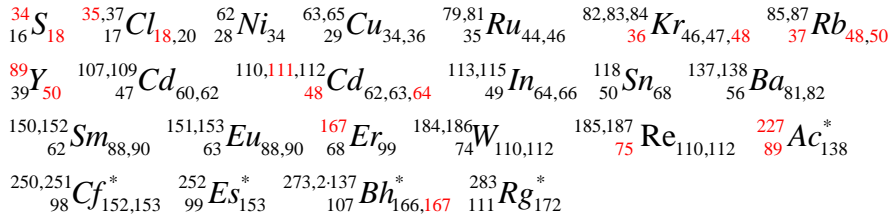
$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{H-\text{meas}/\text{au}} / 2} &= \frac{1}{(f_{H-\text{meas}} / 2)t_{\text{au}}} \\ &= \frac{1}{(2466061413187018(11)/2) \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\ &= 33.52825936458760(16) \\ \frac{1}{f_{H-\text{calc}/\text{au}} / 2} &= 34 - \frac{17}{36} + \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 173} - \frac{1}{4 \cdot 3(16 \cdot 9 \cdot 17(2 \cdot 157 - 1) - 1) + \frac{37}{3 \cdot 17}} \\ &= 33.5282593645875968 \end{aligned}$$

与以下元素核素相关联：



$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{H-\text{calc}/\text{au}} / 2} &= 34 - \frac{1}{2} + \frac{1}{35} - \frac{1}{4 \cdot 9 \cdot 89} + \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 227(64 \cdot 3 \cdot 25 + 1) + 3 \cdot 37 / 167} \\ &= 34 - \frac{1}{2} + \frac{1}{35} - \frac{1}{4 \cdot 9 \cdot 89} + \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 227(2 \cdot 7^4 - 1) + 3 \cdot 37 / 167} \\ &= 33.5282593645875968 \end{aligned}$$

与以下元素核素相关联：



注意： ${}_{89}^{227}\text{Ac}^*$ 是最重要、最神奇的关联，说明这种方法是正确的。

由此可计算更精确的 H 原子 1S-2S 跃迁频率：

$$\begin{aligned} f_{H-\text{calc}} / 2 &= \frac{f_{H-\text{calc}/\text{au}} / 2}{t_{\text{au}}} \\ &= \frac{1}{33.5282593645875968 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\ &= 1233030706593508.98(23) \text{ Hz} \\ f_{H-\text{calc}} &= 2466061413187017.96(46) \text{ Hz} \end{aligned}$$

以上用两种方法计算出的 H 原子跃迁频率比实验值多两位有效数字，即更精确，且两种方法的计算值完全相同。

4. 讨论与结论

我们可将所有的元素比作一条山脉，那么一个个的元素就是这条山脉上的一座座山。由于山脉和山都是分形结构，所以一座山的山形会与整个山脉的形状具有相似性，一座山上的山峰、山包可类比为山脉上的山。在元素的世界，这种类比会更纯粹、更直接，某一元素的特征（例如光谱特征）会与整个元素中的特征元素的核子数相关联，这应是合符逻辑、合理或科学的。在本文中，我们采用这种方法来计算和预测 H 原子 1S-2S 跃迁频率，具体来说，我们将 H 原子 1S-2S 跃迁频率转换为原子单位制中的倒数，其物理意义是相应的光传播一个周期所用的原子单位时间（ t_{au} ），再将其转换为分数公式，发现其中在关键的位置出现 173 因子，173 在元素核素中又是非常重要的核子数，这说明我们的方法和公式很可能是正确的，公式的准确性则需要根据实验值和我们的经验作一些计算和预测。

我们将 H 原子 1S-2S 跃迁频率与 173 因子的逻辑关系总结如下。

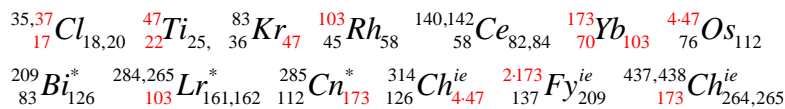
H 是原子序数排第 1 的元素，也是最重要的元素。通过元素的恒星合成，H 合成其它元素。所以，在元素的山脉中 H 可谓群山之首。H 原子 1S-2S 跃迁频率又是 H 这座大山上的最高、最特征的山峰，也是所有原子跃迁频率中最重要、最基本的，其测量和理论计算都非常有意义。

我们将 H 原子 1S-2S 跃迁频率在原子单位制中取倒数并构筑如下公式。

$$\frac{1}{f_{H-calc/au}} = 17 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{37 \cdot 173} + \frac{1}{11 \cdot 47 \cdot 97 \cdot 103}$$

$$= 16.7641296822937984$$

主要与以下元素核素相关联：



由此可计算更精确的 H 原子 1S-2S 跃迁频率：

$$f_{H-calc} = \frac{f_{H-calc/au}}{t_{au}}$$

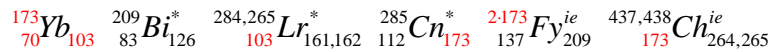
$$= \frac{1}{16.7641296822937984 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}}$$

$$= 2466061413187017.96(46) \text{ Hz}$$

我们看到公式中又出现了神奇的 173 因子，关于 173 因子在元素核素或原

子核中的重要性，我们论述如下。

- (1) 173 号元素是狄拉克方程 (Dirac equation) 预测的延伸元素的终点，也是我们的理论预测的理想延伸元素 (ideal extended element, ie) 的终点；我们的理论[7, 8]还认为 112 号元素 Cn^* 是元素的自然终点，而 Cn^* 的最稳定同位素的中子数 N 为 173；137 号元素是费曼 (Richard Feynman) 根据薛定谔方程 (Schrodinger equation) 预测的类氢元素的终点即 Fy^{ie} ，而我们的理论[7]则认为 Fy^{ie} 的总核子数 A 为 2×173 ；70 号元素 Yb 的稳定同位素之一中子数 N 为 103、总核子数 A 为 173，而且 Yb 为 4f 元素的终点，另外 103 号元素 Lr^* 为 5f 元素的终点；83 号元素 Bi^* 为稳定元素的终点和放射性元素的起点[9, 10]。这些终点元素之间的关系如下，可看到 173 是其中的关键因子。



- (2) 在我们以前的文章[11, 12]中我们已经论述了，在原子核中适用的数轴是百分度的自然数数轴 (NNA-100)，在其中根号 2、根号 3 和 π 的取值分别为 $141/100=3 \times 47/100$ 、 $173/100$ 和 $314/100=2 \times 157/100$ ，且 $141+173=314$ ，因此 173 因子是根号 3 在元素核素或原子核中的化身。
- (3) 在我们以前的文章[8]中我们已经论述了，在原子核中圆应分为 420° 、手性与 840° 相对应，此时 $\pi/3$ 弧度不再是 360° 中的 60° ，而是 420° 中的 70° ，且有如下的关系式，并与 70 号元素 Yb 的中子数 173 相对应。

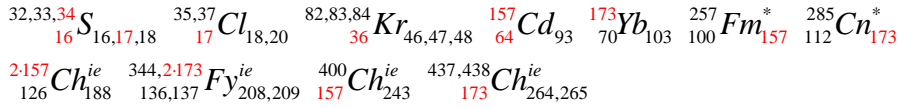
$$(2\pi)_{au} = 420^\circ, \quad (\sin \frac{\pi}{3})_{au} = (\sin 70^\circ)_{au} = \frac{173}{2 \cdot 100} \Leftrightarrow {}_{70}^{173}Yb_{103}$$

H 元素作为最重要的元素，H 原子 1S-2S 跃迁频率作为最重要、最基本的原子跃迁频率与 173 因子相关联就是合理的和可以理解的，这也说明我们的方法和公式很可能是正确的。另外，公式还包含 70、103 等重要因子，更进一步增加其正确的可能性。由此我们即可计算出更精确的 H 原子 1S-2S 跃迁频率。

如果我们以激发 H 原子 1S-2S 跃迁的两个相同光子的频率进行计算，则得到如下的公式。

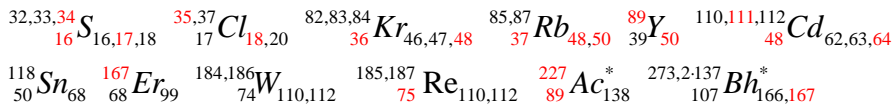
$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{H-calc/au} / 2} &= 34 - \frac{17}{36} + \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 173} - \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot (16 \cdot 9 \cdot 17 \cdot (2 \cdot 157 - 1) - 1) + \frac{37}{3 \cdot 17}} \\ &= 33.5282593645875968 \end{aligned}$$

与以下元素核素相关联:



$$\begin{aligned}
 \frac{1}{f_{H\text{-calc/au}}/2} &= 34 - \frac{1}{2} + \frac{1}{35} - \frac{1}{4 \cdot 9 \cdot 89} + \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 227(64 \cdot 3 \cdot 25 + 1) + 3 \cdot 37 / 167} \\
 &= 34 - \frac{1}{2} + \frac{1}{35} - \frac{1}{4 \cdot 9 \cdot 89} + \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 227(2 \cdot 7^4 - 1) + 3 \cdot 37 / 167} \\
 &= 33.5282593645875968
 \end{aligned}$$

与以下元素核素相关联:



由此可计算更精确的H原子1S-2S跃迁频率:

$$\begin{aligned}
 f_{H\text{-calc}}/2 &= \frac{f_{H\text{-calc/au}}/2}{t_{\text{au}}} \\
 &= \frac{1}{33.5282593645875968 \times 2.41888432658653284(45) \times 10^{-17}} \\
 &= 1233030706593508.98(24) \text{ Hz} \\
 f_{H\text{-calc}} &= 2466061413187017.96(46) \text{ Hz}
 \end{aligned}$$

以上第一个公式中再次出现了 173 因子, 另外还有 157 因子。第二个公式中则出现了 89、227 两个大的质数因子, 而 89 号元素 Ac^* , 其最稳定同位素的总核子数为 227, 这样小概率的巧合再次印证了我们的方法和公式的正确性。

我们还用另一个实验测量值即 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})=2466061413187035(10) \text{ Hz}$ 构筑公式进行计算, 但综合来看其与元素核素的相关性不如用 $f(^1\text{H } 1\text{S}-2\text{S})=2466061413187018(11) \text{ Hz}$ 进行的计算。所以我们以后者为计算和预测的最终结果。当然这也说明我们的方法和公式可评价哪一个测量值更合理。

由此, 我们将最精密和最合理的测量值、最精确的 QED 理论计算值和我们的计算值列表总结如下 (表 2)。

表 2. H 原子 1S-2S 跃迁频率的实验值、理论值和计算值

H 1S-2S Frequency	RSU	Source	Time	Ref.
2 466 061 413 187 018(11) Hz	4.5×10^{-15}	Experimental	2013	[3]
2 466 061 413 163.1(6.4) kHz	2.6×10^{-12}	Theoretical	2018	[4]
2 466 061 413 187 017.96(46) Hz	1.9×10^{-16}	Calculated	2025	This work

Note: RSU means relative standard uncertainty.

我们的计算虽然要以实验测量值为基础, 但采用了与 QED 理论计算不同的策略, 即在原子单位制中 H 原子 1S-2S 跃迁频率的倒数的分数表达式中找到与

元素核素相关联的特征因子（例如 173 等），以印证方法和公式的正确性，再结合我们确定的原子单位时间 t_{au} 的最精确值，从而计算出更精确的 H 原子 1S-2S 跃迁频率。如果说 QED 的方法是详细分析，那么我们的方法就像是形象类比，QED 的方法很复杂，我们的方法简洁且更精确。

Reference

1. M. Niering *et al.*, Phys. Rev. Lett. 84, 5496 (2000).
2. C. G. Pathey *et al.*, Phys. Rev. Lett. 107, 203001 (2011).
3. A. Matveev *et al.*, Phys. Rev. Lett. 110, 230801 (2013).
4. I. Kuzmenko *et al.*, arXiv:2211.05411
5. <https://www.bipm.org/en/publications/mises-en-pratique/standard-frequencies>
6. E-preprint: vixra.org/abs/2501.0095
7. E-preprint: vixra.org/abs/2002.0203
8. E-preprint: vixra.org/abs/2312.0055
9. E-preprint: vixra.org/abs/2401.0001
10. E-preprint: vixra.org/abs/2409.0055
11. E-preprint: vixra.org/abs/2212.0147
12. E-preprint: vixra.org/abs/2501.0003