

# Calculation and Prediction of the $^{40}\text{Ca}$ , $^{171}\text{Yb}$ and $^{171}\text{Yb}^+$

## Atomic/Ionic Transition Frequencies

Gang Chen<sup>†</sup>, Tianman Chen, Tianyi Chen

<sup>†</sup>Correspondence to: gang137.chen@connect.polyu.hk

### Abstract

In our previous paper, we calculated out and determined the atomic unit of time ( $t_{\text{au}}$ ) to be  $2.41888432658653284(45)\times 10^{-17}$  s. In this paper, using the BIPM recommended  $^{171}\text{Yb}$  atomic transition frequency which is  $518295836590863.63(10)$  Hz and its reciprocal in atomic units calculated from our corresponding formula, we once more calculate out and determine the atomic unit of time to be  $2.41888432658653280(46)\times 10^{-17}$  s. With this very slightly revised atomic unit of time and the reciprocal of  $^{40}\text{Ca}$  atomic transition frequency in atomic units calculated from our corresponding formula, we calculate out the  $^{40}\text{Ca}$  atomic transition frequency to be  $455986240494140.30(9)$  Hz, which is about 94 times more precise than the BIPM recommended value, i.e.,  $455986240494140(8)$  Hz. Employing the same method, we also calculate out two  $^{171}\text{Yb}^+$  ionic transition frequencies which are consistent with the BIPM recommended values.

**Keywords:** atomic unit of time,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{171}\text{Yb}$ ,  $^{171}\text{Yb}^+$ , atomic/ionic transition frequency, calculation, prediction.

### 摘要

在我们以前的文章中，我们计算出并确定了原子单位时间 ( $t_{\text{au}}$ ) 为  $2.41888432658653284\times 10^{-17}$  s。在本文中，利用 BIPM 推荐的  $^{171}\text{Yb}$  原子跃迁频率即  $518295836590863.63(10)$  Hz 和通过我们的相应公式计算出的其原子单位制中的倒数，我们再次计算出并确定了原子单位时间为  $2.41888432658653280\times 10^{-17}$  s。利用这个稍微修改的原子单位时间和通过我们的相应公式计算出的原子单位制中  $^{40}\text{Ca}$  原子跃迁频率的倒数，我们计算出  $^{40}\text{Ca}$  原子跃迁频率为  $455986240494140.30(8)$  Hz，其比 BIPM 的推荐值  $455986240494140(8)$  Hz 精确约

94倍。采用同样的方法，我们也计算出两个 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子跃迁频率，其与BIPM的推荐值一致。

**关键词:** 原子单位时间,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{171}\text{Yb}$ ,  $^{171}\text{Yb}^+$ , 原子跃迁频率, 计算, 预测。

## 1. 介绍

在我们以前的文章中，我们从 $^{87}\text{Sr}$ 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 $t_{\text{au}}$ 的更精确值即 $2.41888432658653284(45)\times 10^{-17}$  s，由后者也计算出 $^{27}\text{Al}^+$ 、 $^{199}\text{Hg}$ 、 $^{115}\text{In}^+$ 和 $^{199}\text{Hg}^+$ 原子跃迁频率[1]，另外还计算出更精确的H原子1S-2S跃迁频率[2]。本文中我们利用同样的方法，首先利用 $^{171}\text{Yb}$ 原子跃迁频率和通过我们的相应公式计算出的其原子单位制中的倒数，计算出原子单位时间为 $t_{\text{au}}$ 为 $2.41888432658653280(45)\times 10^{-17}$  s，然后利用这个稍微修改的原子单位时间和通过我们的相应公式计算出的原子单位制中 $^{40}\text{Ca}$ 原子跃迁频率的倒数，计算出 $^{40}\text{Ca}$ 原子跃迁频率，其比BIPM的推荐值精确约94倍，另外，我们也计算出两个 $^{171}\text{Yb}^+$ 原子跃迁频率，其与BIPM的推荐值一致。

## 2. 通过 $^{171}\text{Yb}$ 原子跃迁频率 $f(^{171}\text{Yb})$ 计算原子单位时间 $t_{\text{au}}$

我们通过BIPM推荐的 $^{171}\text{Yb}$ 原子 $6s^2\ ^1S_0 - 6s6p\ ^3P_0$ 跃迁频率（简称 $^{171}\text{Yb}$ 原子跃迁频率）的精密测量值即 $f(^{171}\text{Yb}) = 518295836590863.63(10)$  Hz[3]构建公式进行计算，关键是计算原子单位制中 $^{171}\text{Yb}$ 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（ $t_{\text{au}}$ ）。我们认为这个时间是有意义的，就像人跑100米的时间是多少秒，可根据人的体能估算出来。

我们以前文章[1]确定的原子单位时间(atomic unit of time)为:

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

$^{171}\text{Yb}$ 原子 $6s^2\ ^1S_0 - 6s6p\ ^3P_0$ 跃迁频率的BIPM推荐值为:

$$f_{^{171}\text{Yb-meas}} = 518295836590863.63(10)$$

在原子单位制(au)中此频率的倒数为:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{^{171}\text{Yb}/\text{au}}} &= \frac{1}{f_{^{171}\text{Yb-meas}} t_{\text{au}}} \\ &= \frac{1}{518295836590863.63(10)\times 2.41888432658653284(45)\times 10^{-17}} \\ &= 79.7640467403604700 \end{aligned}$$

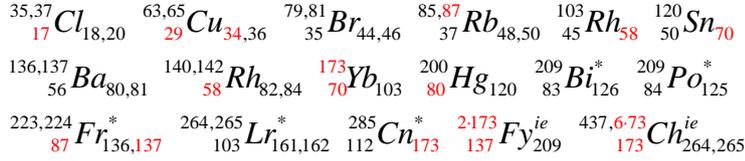
其物理意义为此频率的光传播一个周期所需多少 $t_{\text{au}}$

我们构建如下原子单位制中 $^{171}\text{Yb}$ 原子跃迁频率的倒数公式:

$$\frac{1}{f_{^{171}\text{Yb-calc/au}}} = 80 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{8(2 \cdot 9 \cdot 29 + 1)} + \frac{1}{17 \cdot 73^2(2 \cdot 173 + 1)}$$

$$= 79.7640467403604713$$

其中的因子与以下元素核素相关联:



这样我们反过来可计算新的原子单位时间 $t_{\text{au}}$  :

$$t_{\text{au}} = \frac{f_{^{171}\text{Yb-calc/au}}}{f_{^{171}\text{Yb-meas}}}$$

$$= \frac{1}{79.7640467403604713 \times 518295836590863.63(10)}$$

$$= 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17} \text{ s}$$

我们构建的  $1/f(^{171}\text{Yb-calc/au})$  的公式中出现了 173 因子和与它相配合的因子例如 70、73 等, 使它们与元素核素的关联非常有意义, 173 因子的重要性我们在以前的文章中有详细讨论[1, 2], 因此我们认为该公式是正确的和准确的。由此我们计算出新的原子单位时间  $t_{\text{au}}$  为  $2.41888432658653280(45) \times 10^{-17} \text{ s}$ , 其与以前文章中计算出的  $t_{\text{au}}$  只有微小的差别, 所以我们将  $t_{\text{au}}$  调整为此新的计算值。

### 3. $^{40}\text{Ca}$ 原子跃迁频率 $f(^{40}\text{Ca})$ 的计算和预测

我们通过 BIPM 推荐的  $^{40}\text{Ca}$  原子  $^1\text{S}_0 - ^3\text{P}_1$  跃迁频率 (简称  $^{40}\text{Ca}$  原子跃迁频率) 的测量值即  $f(^{40}\text{Ca})=455986240494140(8) \text{ Hz}$ [3] 构建公式进行如下计算。

BIPM 推荐的  $^{40}\text{Ca}$  原子的  $^1\text{S}_0 - ^3\text{P}_1$  跃迁频率:

$$f_{^{40}\text{Ca-meas}} = 455986240494140(8) \text{ Hz}$$

$$\frac{1}{f_{^{40}\text{Ca-meas/au}}} = \frac{1}{f_{^{40}\text{Ca-meas}} t_{\text{au}}}$$

$$= \frac{1}{455986240494140(8) \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}}$$

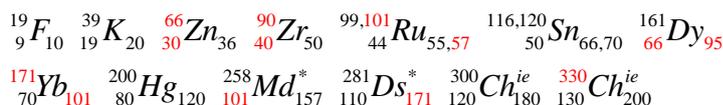
$$= 90.6636421536916(16)$$

我们构建如下原子单位制中 $^{40}\text{Ca}$ 原子跃迁频率的倒数公式:

$$\frac{1}{f_{^{40}\text{Ca-calc/au}}} = 90 + \frac{2}{3} - \frac{1}{330} + \frac{1}{2 \cdot 9 \cdot 5 \cdot 19 \cdot 101 - \frac{3}{40}}$$

$$= 90.6636421536915675$$

其中的因子与以下元素核素相关联:



由此计算出更精确的 ${}^{40}Ca$ 原子跃迁频率:

$$f_{Ca-calc}^{40} = \frac{f_{Ca-calc/au}^{40}}{t_{au}} = \frac{1}{90.6636421536915675 \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}} = 455986240494140.30(9) \text{ Hz}$$

相对标准不确定度(relative standard uncertainty)为:  $1.9 \times 10^{-16}$

即我们计算出的 ${}^{40}Ca$ 原子跃迁频率  $f({}^{40}Ca)$  为 455 986 240 494 140.30 (9) Hz, 比 BIPM 的推荐值 455 986 240 494 140 (8) Hz 更精确, 两者的相对标准不确定度 (RSU) 分别为  $1.9 \times 10^{-16}$  和  $1.8 \times 10^{-14}$ , 即更精确约 94 倍。

#### 4. ${}^{171}Yb^+$ 离子跃迁频率 $f({}^{171}Yb^+)$ 的计算

我们通过 BIPM 推荐的  ${}^{171}Yb^+$  离子  $6s^2S_{1/2} - 5d^2D_{3/2}$  跃迁频率 (简称  ${}^{171}Yb^+-1$  离子跃迁频率) 的测量值即  $f({}^{171}Yb^+-1) = 688358979309308.24(14) \text{ Hz}$  [3] 构建公式进行如下计算。

BIPM 推荐的  ${}^{171}Yb^+$  离子  $6s^2S_{1/2} - 5d^2D_{3/2}$  跃迁频率:

$$f_{Yb^+-1-meas}^{171} = 688358979309308.24(14) \text{ Hz}$$

$$\frac{1}{f_{Yb^+-1-meas/au}^{171}} = \frac{1}{f_{Yb^+-1-meas}^{171} t_{au}}$$

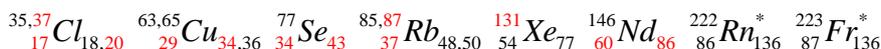
$$= \frac{1}{688358979309308.24(14) \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}} = 60.0578688995229710$$

我们构建如下原子单位制中  ${}^{171}Yb^+-1$  离子跃迁频率的倒数公式:

$$\frac{1}{f_{Yb^+-1-calc/au}^{171}} = 60 + \frac{1}{17} - \frac{1}{3(4 \cdot 3 \cdot 29 + 1)} + \frac{1}{5 \cdot 131(2 \cdot 37 \cdot 43 - 1)} + \frac{5}{12}$$

$$= 60.0578688995229708$$

公式中的因子与以下元素核素相关联:



由此计算出更精确的  ${}^{171}Yb^+-1$  离子跃迁频率:

$$f_{Yb^+-1-calc}^{171} = \frac{f_{Yb^+-1-calc/au}^{171}}{t_{au}}$$

$$= \frac{1}{60.0578688995229708 \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}}$$

$$= 688358979309308.24(13) \text{ Hz}$$

相对标准不确定度(relative standard uncertainty)为:  $1.9 \times 10^{-16}$

我们通过 BIPM 推荐的  $^{171}\text{Yb}^+$  离子  $6s^2 S_{1/2} - 4f^{13}6s^2 {}^2F_{7/2}$  跃迁频率 (简称  $^{171}\text{Yb}^+-2$  离子跃迁频率) 的测量值即  $f(^{171}\text{Yb}^+-2) = 642121496772645.12(12) \text{ Hz}$ [3] 构建公式进行如下计算。

BIPM推荐的 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子 $6s^2 S_{1/2} - 4f^{13}6s^2 {}^2F_{7/2}$ 跃迁频率:

$$f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{meas}} = 642121496772645.12(12) \text{ Hz}$$

$$\frac{1}{f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{meas}/2}} = \frac{1}{f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{meas}} t_{\text{au}}}$$

$$= \frac{1}{642121496772645.12(12) \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}}$$

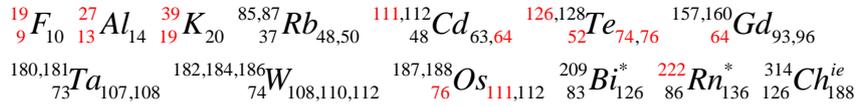
$$= 64.3824783050450501$$

我们构建如下原子单位制中 $^{171}\text{Yb}^+-2$ 离子跃迁频率的倒数公式:

$$\frac{1}{f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{calc}/\text{au}}} = 64 + \frac{7}{2 \cdot 9} - \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 13} - \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot 37(4 \cdot 19 \cdot 181 + 1) + \frac{13}{27}}$$

$$= 64.3824783050450500$$

公式中的因子与以下元素核素相关联:



由此计算出更精确的 $^{171}\text{Yb}^+-2$ 原子跃迁频率:

$$f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{calc}} = \frac{f_{^{171}\text{Yb}^+-2-\text{calc}/\text{au}}}{t_{\text{au}}}$$

$$= \frac{1}{64.3824783050450500 \times 2.41888432658653280(46) \times 10^{-17}}$$

$$= 642121496772645.12(12) \text{ Hz}$$

相对标准不确定度(relative standard uncertainty)为:  $1.9 \times 10^{-16}$

即我们计算出的  $^{171}\text{Yb}^+-1$  和  $^{171}\text{Yb}^+-2$  离子跃迁频率与 BIPM 的推荐值完全相同。

## 5. 总结与结论

我们通过 BIPM 推荐的  $^{171}\text{Yb}$  原子跃迁频率的精密测量值和我们构建的其原子单位制中的倒数公式计算出并确定原子单位时间 (atomic unit of time)  $t_{\text{au}}$ , 其

与 CODATA 的推荐值比较如下。

表 1. 原子单位时间  $t_{au}$  的计算值和 CODATA 推荐值比较

	CODATA recommended (s)	RSU	Calculated by this work (s)	RSU
$t_{au}$	$2.418\ 884\ 326\ 586\ 0(26)\times 10^{-17}$	$1.1\times 10^{-12}$	$2.418\ 884\ 326\ 586\ 532\ 80(46)\times 10^{-17}$	$1.9\times 10^{-16}$

RSU: relative standard uncertainty.

根据新确定的原子单位时间  $t_{au}$  的值和我们分别构建的原子单位制中  $^{40}\text{Ca}$ 、 $^{171}\text{Yb}$  和  $^{171}\text{Yb}^+$  原子/离子跃迁频率的倒数公式，我们计算出它们的跃迁频率，现将它们的 BIPM 推荐值和我们的计算值列表总结如下。

表 2. 原子/离子跃迁频率的 BIPM 推荐值和计算值的比较

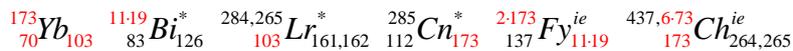
Atoms	Recommended by BIPM (Hz)	RSU	Calculated by this work(Hz)	RSU
$^{40}\text{Ca}$	455 986 240 494 140(8)	$1.8\times 10^{-14}$	455986240494140.30(9)	$1.9\times 10^{-16}$
$^{171}\text{Yb}$	518 295 836 590 863.63(10)	$1.9\times 10^{-16}$	518 295 836 590 863.63(10)	$1.9\times 10^{-16}$
$^{171}\text{Yb}^{+1}$	688 358 979 309 308.24(14)	$2.0\times 10^{-16}$	688 358 979 309 308.24(13)	$1.9\times 10^{-16}$
$^{171}\text{Yb}^{+2}$	642 121 496 772 645.12(12)	$1.9\times 10^{-16}$	642 121 496 772 645.12(12)	$1.9\times 10^{-16}$

可看到我们对  $^{40}\text{Ca}$  原子跃迁频率的计算值比 BIPM 的推荐值相对标准不确定度 (RSU) 降低约 94 倍，即精确度提高约 94 倍，其余原子或离子跃迁频率则计算值与 BIPM 推荐值相同。

在我们以前的文章中我们分别构建了原子单位制中  $^{229}\text{Th}$  核跃迁频率的倒数公式[1]和原子单位制中 H 原子 1S-2S 跃迁频率的倒数公式[2]，在本文中我们构建了原子单位制中  $^{171}\text{Yb}$  原子  $6s^2\ ^1S_0 - 6s6p\ ^3P_0$  跃迁频率的倒数公式，现将这些公式展示如下。

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_{^{229}\text{Th-calc/au}}} &= 20 + \frac{1}{2} - \frac{1}{26} + \frac{1}{16 \cdot 173 - \frac{1}{16 - \frac{1}{7-1}}} \\ &= 20.4618997414581433 \\ \frac{1}{f_{H\text{-calc/au}}} &= 17 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{37 \cdot 173} + \frac{1}{11 \cdot 47 \cdot 97 \cdot 103} \\ &= 16.7641296822937984 \\ \frac{1}{f_{^{171}\text{Yb-calc/ay}}} &= 80 - \frac{1}{4} + \frac{1}{70} - \frac{1}{8(2 \cdot 9 \cdot 29 + 1)} + \frac{1}{17 \cdot 73^2(2 \cdot 173 + 1)} \\ &= 79.7640467403604713 \end{aligned}$$

以上公式中都含有173因子，其与以下元素核素相关联：



这些原子单位制中频率倒数的物理意义是相应的光传播一个周期所需的原

子单位制时间（即多少  $t_{\text{au}}$ ），它们可以构建合理和精确的公式计算出来。这就像不同人跑 100 米所需的时间（多少秒），可以根据人的体能计算出来。

这些公式都含有神奇的 173 因子，其重要性在我们以前的文章中有详细的阐述和解释[1, 2]。简单来说，4f 元素的终点  ${}_{70}\text{Yb}$ 、稳定元素的终点和放射性元素的起点  ${}_{83}\text{Bi}^*$ 、6d 元素的终点也即我们认为的元素的自然终点  ${}_{112}\text{Cn}^*$ 、类氢元素的终点即 Feynman 终点  ${}_{137}\text{Fy}^{\text{ie}}$ （Richard Feynman 计算出的类氢元素的终点）和理想延伸元素的终点即 Dirac 终点  ${}_{173}\text{Fy}^{\text{ie}}$ （Dirac 方程计算出的延伸元素的终点）都与 173 有直接和间接的关系，所以我们认为这些公式都是正确的和准确的，我们的方法也是合理、科学和可行的。

## Reference

1. E-preprint: [vixra.org/abs/2501.0095](https://vixra.org/abs/2501.0095)
2. E-preprint: [vixra.org/abs/2502.0111](https://vixra.org/abs/2502.0111)
3. <https://www.bipm.org/en/publications/mises-en-pratique/standard-frequencies>