

МРНТИ 29.29.25; 29.29.39; 29.29.41

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v89i2-02>Д.Т. Азнабаев<sup>1,2</sup> , А.К. Бекбаев<sup>1,2</sup> , В.И.Коробов<sup>3</sup> <sup>1</sup>Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан<sup>2</sup>Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан<sup>3</sup>Лаборатория теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова,  
Объединенный институт ядерных исследований, г.Дубна, Россия\*e-mail: [bekbaev-askhat@mail.ru](mailto:bekbaev-askhat@mail.ru)

## МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ИОН ВОДОРОДА $H_2^+$ . МАГНИТНЫЕ M1 ПЕРЕХОДЫ

Получены данные о магнитных дипольных переходах в молекулярном ионе  $H_2^+$  для широкого диапазона  $\nu$  и  $L$ , квантовых чисел колебательного и полного орбитального момента. Расчеты выполнены в нерелятивистском приближении. Рассматриваются также эффекты спиновой структуры иона на M1 переходы. Численные расчеты проводились на основе «экспоненциального» вариационного разложения. Одной из простых и наиболее полно разработанных областей применения квантовой механики является теория атомов с одним или двумя электронами. Для водорода и водородоподобных ионов вычисления могут быть выполнены строго как в нерелятивистской волновой механике Шредингера, так и в релятивистской теории электрона Дирака. Точные вычисления являются строгими для электрона в фиксированном кулоновском потенциале. Поэтому водородоподобный атом дает отличный материал для проверки справедливости квантовой механики. Для такого атома поправочные члены, учитывающие движение и структуру атомного ядра, а также квантовоэлектродинамические эффекты, малы и могут быть вычислены с большой точностью. Так как энергетические уровни водорода и водородоподобных атомов можно экспериментально исследовать с поразительной степенью точностью, то оказывается возможной и в какой-то степени точной проверки правильности квантовой электродинамики.

**Ключевые слова:** молекулярный ион водорода, экзотические атомы, вариационный метод, прецизионные вычисления.

Д.Т. Азнабаев<sup>1,2</sup>, А.К. Бекбаев<sup>1,2</sup>, В.И. Коробов<sup>3</sup><sup>1</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан<sup>2</sup>Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан<sup>3</sup>Н.Н. Боголюбов атындағы Теориялық физика лабораториясы,

Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна қ., Ресей

\*e-mail: [bekbaev-askhat@mail.ru](mailto:bekbaev-askhat@mail.ru)

## $H_2^+$ сутегі молекулалық ионы. M1 магниттік ауысулар

Бұл жұмыста кең диапазонды  $\nu$  және  $L$ , тербеліс және толық орбиталық моменттің кванттық сандары үшін  $H_2^+$  молекулалық иондағы магниттік дипольді ауысулар туралы деректер алынды. Есептеулер релятивистік емес жуықтауда орындалды. M1 ауысуларына иондық спин құрылымының әсері де қарастырылады. Сандық есептеулер «экспоненциалды» вариациялық кеңею негізінде жүргізілді. Кванттық механиканы қолданудың қарапайым және толық жетілген салаларының бірі – бір немесе екі электроны бар атомдар теориясы болып табылады. Сутегі және сутегі тәрізді иондар үшін есептеулерді Шредингердің релятивистік емес толқындық механикасында да, Дирактың релятивистік электронды теориясында да қатаң түрде орындауға болады. Дәл есептеулер тіркелген кулондық потенциалдағы электрон үшін қатаң. Сондықтан, сутегі тәрізді атом кванттық механиканың дұрыстығын тексеру үшін табылмас құрал болып табылады. Мұндай атом үшін атом ядросының қозғалысы мен құрылымын, сондай-ақ кванттық электродинамиканың әсерлерді ескеретін түзетулер шағын және өте жоғары дәлдікпен есептелуі мүмкін. Сутегі және сутегі тәрізді атомдардың энергетикалық деңгейлерін эксперименттік түрде жоғары дәлдікпен зерттеуге болатындықтан, кванттық электродинамиканың дұрыстығын белгілі бір дәрежеде тексеруге болатыны белгілі болды.

**Түйін сөздер:** сутегі молекулалық ионы, экзотикалық атомдар, вариациялық әдіс, дәлдік есептеулер.

D.T. Aznabayev<sup>1,2</sup>, A.K. Bekbaev<sup>1,2</sup>, V.I. Korobov<sup>3</sup><sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan<sup>2</sup>Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan<sup>3</sup>Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna Russia\*e-mail: [bekbaev-askhat@mail.ru](mailto:bekbaev-askhat@mail.ru)**Hydrogen molecular ion  $H_2^+$ . Magnetic M1 transitions**

The magnetic dipole transitions in the homonuclear molecular ion  $H_2^+$  are obtained for a range of  $\nu$  and  $L$ , vibrational and total orbital momentum quantum numbers, respectively. Calculations are performed in the nonrelativistic approximation. The effects of the ion spin structure on M1 transitions are also considered. Numerical calculations were carried out on the basis of “exponential” variational expansion. One of the simplest and most fully developed areas of application of quantum mechanics is the theory of atoms with one or two electrons. For hydrogen and hydrogen-like ions, calculations can be performed strictly in both Schrödinger's non-relativistic wave mechanics and Dirac's relativistic electron theory. The exact calculations are rigorous for an electron at a fixed Coulomb potential. Therefore, the hydrogen-like atom provides an excellent material for testing the validity of quantum mechanics. For such an atom, the correction terms that take into account the motion and structure of the atomic nucleus, as well as quantum electrodynamic effects, are small and can be calculated with great accuracy. Since the energy levels of hydrogen and hydrogen-like atoms can be experimentally studied with an amazing degree of accuracy, it turns out that it is possible to test the correctness of quantum electrodynamics to some extent accurately.

**Key words:** molecular hydrogen ion, exotic atoms, variational method, precision calculations.

**Введение**

Молекулярный ион водорода представляет собой простейшую стабильную молекулу, которая может быть изучена как теоретически, так и экспериментально с высокой точностью. В последние годы лазерная спектроскопия гетероядерных молекулярных ионов водорода  $HD^+$  достигла впечатляющих успехов [1–3]. Это позволило получить ценную информацию о фундаментальных константах, таких как отношение масс протона к электрону, и установить новые ограничения на возможные проявления новых взаимодействий между адронами, на гипотетическую «пятую силу».

$H_2^+$  трудно изучать экспериментально из-за отсутствия разрешенных электрических дипольных переходов, тем не менее, новые эксперименты, использующие спектроскопию квантовой логики (QLS), планируются в ближайшее время для решения этой проблемы. [4,5]. Во всех случаях очень важно знать силу различных переходов, которые могут быть вызваны лазерным излучением. В наших предыдущих работах [6,7] исследовались квадрупольные и запрещенные E1-переходы. В настоящей работе мы намерены провести расчеты переходов M1 для молекулярного иона водорода  $H_2^+$  при малых  $\nu$  и  $L$  в нерелятивистском приближении. Квадрупольные переходы также изучались в работах [8-10]

Переходы M1 в молекуле  $H_2$  изучались в [11] в адиабатическом приближении; было обнаружено, что они существенно слабее, чем квадрупольные переходы для низковращательных состояний. Ионы  $H_2^+$  отличаются по магнитным свойствам от молекулы  $H_2$ , поскольку для случая  $H_2$  суммарный спин электрона  $S$  равен нулю. Тем не менее, к аналогичному выводу о слабости магнитных переходов мы приходим и для молекулярного иона  $H_2^+$ . Наш расчет основан на ab initio трехчастичной вариационной аппроксимации нерелятивистской волновой функции связанного состояния и прямом вычислении оператора орбитального магнитного момента; см. уравнение (3) ниже. Адиабатическое приближение не используется.

В дальнейшем мы будем использовать атомные единицы:  $\hbar = |e| = m_e = 1$ .

**Методика исследования**

В данной работе мы придерживаемся обозначений [12]:  $\nu$  – колебательное квантовое число,  $L$  – полный орбитальный угловой момент нерелятивистской волновой функции. Спиновая часть описывается операторами спина двух протонов,  $I_1$ ,  $I_2$  и спина электрона  $s_e$ ,  $\mathbf{I} = \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2$  полный ядерный спин,  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + s_e$  полный спин иона  $H_2^+$ , и  $\mathbf{J} = \mathbf{F} + \mathbf{L}$  полный угловой момент. Поскольку переход M1 сохраняет

пространственную четность, мы будем рассматривать пространственную волновую функцию только в нерелятивистском приближении, таким образом, правило отбора для этих состояний:  $L \rightarrow L' = L$ .

Нерелятивистский гамильтониан в системе центра масс может быть записан как:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{Z^2}{R}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_e - \mathbf{R}_i$  и  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$  – координаты электронов относительно ядер и вектор межъядерного положения в обозначениях молекулярных координат,  $(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_e \equiv \mathbf{R}_3)$  и  $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_e \equiv \mathbf{p}_3)$  – положение векторов и импульсов частиц в системе центра масс,  $M = m_p$  – масса протона,  $Z = 1$  – заряд протона.

Магнитный момент перехода  $\mu_{mn'}$  для связанной системы частиц выражается (см. [13], §47):

$$\mu_{mn'} = \langle \psi_n | \hat{\mu} | \psi_{n'} \rangle = \mu_B \left\langle \psi_n \left| g_L(v, v') \mathbf{L} + g_e \mathbf{s}_e + \frac{g_p}{m_p} \mathbf{I} \right| \psi_{n'} \right\rangle, \quad (2)$$

где  $\hat{\mu}$  оператор магнитного момента связанной системы,  $g_L(v, v')$  орбитальный  $g$  – фактор

перехода, определяемый через равенство

$$g_L(v, v') \mu_B \langle L \| \mathbf{L} \| L \rangle = \sum_a \left\langle \psi_n \left| \frac{z_a |e|}{m_a} [\mathbf{R}_a \times \mathbf{p}_a] \right| \psi_{n'} \right\rangle, \quad (3)$$

$g_e = -2.002319$   $g$  – фактор электрона,  $g_p = 5.585694$  –  $g$  фактор протона,  $\mu_B = |e| \hbar / (2m_e c)$  – магнетон Бора.

Когда  $n \neq n'$ , функции начального и конечного состояния ортогональны, тогда

спиновые вклады в (2) точно равны нулю. Таким образом, амплитуды перехода определяются исключительно  $g_L$ , орбитальным  $g$  – фактором перехода. Тогда амплитуды зависимых от спина переходов между сверхтонкими состояниями выражаются:

$$\langle v F L J \| \hat{\mu} \| v' F' L J' \rangle = \delta_{FF'} (-1)^{J+F+L+1} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} L & 1 & L \\ J' & F & J \end{Bmatrix} \langle v L \| \hat{\mu} \| v' L \rangle \quad (4)$$

и у нас есть дополнительное правило отбора для сверхтонких линий перехода:  $F \rightarrow F' = F$ .

Полная вероятность перехода для спонтанного излучения из состояния  $n$  в

состояние  $n'$  выражается из амплитуды перехода следующим образом

$$A_{nn'} = \frac{1}{\tau} \frac{4\alpha^3}{3} \omega_{nn'}^3 \frac{|\langle \psi_n \| \hat{\mu} \| \psi_{n'} \rangle|^2}{2J_n + 1} = \frac{1}{\tau} \frac{\alpha^5}{3} \omega_{nn'}^3 \frac{g_L^2(v, v')}{2J_n + 1}, \quad (5)$$

здесь  $\tau$  — единица времени (в атомных единицах:  $\tau = 2.41888 \times 10^{-17} c$ ).

спонтанного испускания перехода фотона из состояния  $n = (v, L, F, J)$  в состояние  $n' = (v', L', F', J')$  см. уравнение (5). В таблице 1 представлены результаты наших численных расчетов для переходов  $L = 0 \rightarrow 1$ . Изменение матричных элементов магнитного диполя при изменении  $L$  ожидаемо мало из-за адиабатичности системы, что численно подтверждается в таблице 2.

## Результаты и обсуждение

Численные расчеты проводились на основе «экспоненциального» вариационного разложения [14]. Усредняя уравнение (3) по пространственным степеням свободы получаем орбитальные  $g$  – факторы перехода, в конечном итоге, коэффициенты Эйнштейна  $A_{nn'}$  для

**Таблица 1.** Орбитальный  $g$  – фактор перехода,  $g_L(\nu, \nu')$   
для орбитальных состояний  $L = 1$  и  $L = 2$  ( $a(b) = a \times 10^b$ )

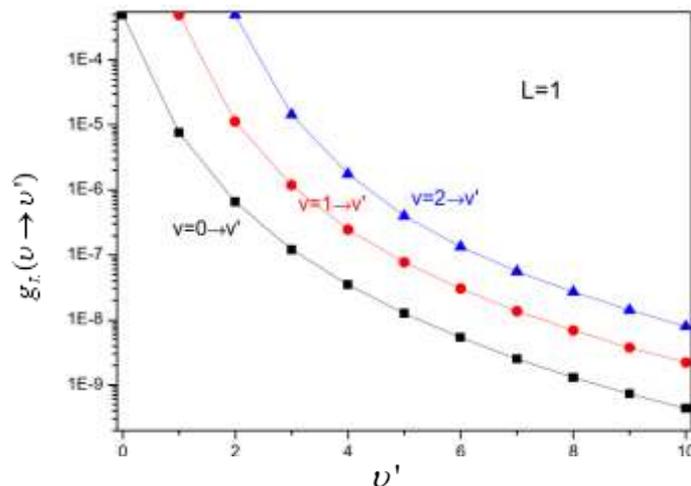
$\nu \rightarrow \nu'$	$L = 1$			$L = 2$		
	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 2$
$\nu' = 0$	5.0113(-4)	-	-	5.0095(-4)	-	-
1	7.6094(-6)	4.9606(-4)	-	7.6324(-6)	4.9587(-4)	-
2	6.5530(-7)	1.1257(-5)	4.9060(-4)	6.5775(-7)	1.1291(-5)	4.9039(-4)
3	1.2180(-7)	1.1844(-6)	1.4421(-5)	1.2221(-7)	1.1892(-6)	1.4465(-5)
4	3.4906(-8)	2.4674(-7)	1.7594(-6)	3.5029(-8)	2.4765(-7)	1.7670(-6)
5	1.2655(-8)	7.7464(-8)	3.9817(-7)	1.2705(-8)	7.7754(-8)	3.9977(-7)
6	5.3465(-9)	3.0371(-8)	1.3402(-7)	5.3693(-9)	3.0498(-8)	1.3456(-7)
7	2.5135(-9)	1.3718(-8)	5.6022(-8)	2.5417(-9)	1.3783(-8)	5.6268(-8)
8	1.3084(-9)	6.8817(-9)	2.6810(-8)	1.3164(-9)	6.9173(-9)	2.6953(-8)
9	7.3091(-10)	3.7398(-9)	1.4170(-8)	7.3522(-10)	3.7732(-9)	1.4225(-8)
10	4.3382(-10)	2.2204(-9)	7.9503(-9)	4.3783(-10)	2.2064(-9)	8.0930(-9)

**Таблица 2** - Зависимость  $g_L$  от орбитального момента  $L$  для двух колебательных переходов.

$\nu \rightarrow \nu'$	$L = 1$	$L = 2$	$L = 3$	$L = 4$
$0 \rightarrow 1$	7.6094(-6)	7.6324(-6)	7.6670(-6)	7.7132(-6)
$0 \rightarrow 9$	7.3091(-10)	7.3522(-10)	7.4243(-10)	7.5216(-10)

Поскольку зависимость от  $L$  мала, мы не приводим расчеты для более высоких состояний  $L$ . С другой стороны, орбитальный магнитный момент пропорционален  $\sqrt{L(L+1)(2L+1)}$  и вероятность перехода  $A_{m'}$  увеличивается с ростом

$L$ , как и в случае молекулы  $H_2$  (см. рис. 1, [14])) и при некотором  $L > 20$  переход M1 становится доминирующим. На рисунке 1 изображены три серии колебательных переходов для состояний  $L = 1$ .



**Рисунок 1.**  $g_L$  для различных переходов  $\nu \rightarrow \nu'$

### Заключение

В результате проделанной работы нами получены силы M1 переходов для молекулярного иона водорода  $H_2^+$ . Наряду с нашими предыдущими расчетами квадрупольных переходов E2 и запрещенных дипольных

переходов E1 это завершает исследование скоростей переходов, необходимых для планирования будущих экспериментов и позволяющих оценить интенсивность лазерного излучения, необходимую для прецизионной спектроскопии иона  $H_2^+$ .

## Благодарности

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего

образования Республики Казахстан грант, № BR21881941, и В.К. выражает благодарность Российскому научному фонду за поддержку в рамках гранта, № 23-22-00143.

## Литература

- 1 Alighanbari S., Giri G.S., Constantin F.L., Korobov V.I., and Schiller S. Precise test of quantum electrodynamics and determination of fundamental constants with  $\text{HD}^+$  ions // *Nature*. – 2020. – Vol.581. – P.152.
- 2 Patra S., Germann M., Karr J.-Ph., Haidar M., Hilico L., Korobov V.I., Cozijn F.M.J., Eikema K.S.E., Ubachs W., and Koelemeij J.C.J. Proton-electron mass ratio from laser spectroscopy of  $\text{HD}^+$  at the part-per-trillion level // *Science*. – 2020. – Vol.369. – P.1238.
- 3 Kortunov I., Alighanbari S., Hansen M.G., Giri G.S., Schiller S., and Korobov V.I. Proton-electron mass ratio by high-resolution optical spectroscopy of ion ensemble in the resolved-carrier regime // *Nature Phys.* – 2021. – Vol.17. – P.569.
- 4 Alighanbari S., Kortunov I.V., Giri G.S., and Schiller S. Test of charged baryon interaction with high-resolution vibrational spectroscopy of molecular hydrogen ions // *Nat. Phys.* – 2023. – Vol.19. – P.1263.
- 5 Schwegler N., Holzzapfel D., Stadler M., Mitjans A., Sergachev I., Home J.P., and Kienzler D. Trapping and ground-state cooling of  $\text{H}_2^+$  // *Phys. Rev. Lett.* – 2023. – Vol.131. – Art.No 133003.
- 6 Korobov V.I., Danev P., Bakalov D., and Schiller S. Laser-stimulated electric quadrupole transitions in the molecular hydrogen ion  $\text{H}_2^+$  // *Phys. Rev. A* – 2018. – Vol.97. – Art.No 032505.
- 7 Korobov V.I. and Bakalov D. Forbidden ortho-para electric dipole transitions in the  $\text{H}_2^+$  ion // *Phys. Rev. A* 107. – 2023. – Art.No 022812.
- 8 Bates D.R. and Poots G. Properties of the hydrogen molecular ion I: quadrupole transitions in the ground electronic state and dipole transitions of the isotopic ions // *Proc. Phys. Soc. A*. – 1953. – Vol.66. – P.784.
- 9 Posen A.G., Dalgarno A., and Peek J.M. The quadrupole vibration-rotation transition probabilities of the molecular hydrogen ion // *At. Data Nucl. Data Tables*. – 1983. – Vol. 28. – P.265.
- 10 Pilón H.O. and Baye D. Quadrupole transitions in  $\text{H}_2^+$  // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2012. – Vol.45. – Art.No 065101.
- 11 Pachucki K. and Komasa J. Magnetic dipole transitions in the hydrogen molecule // *Phys. Rev. A*. – 2011. – Vol.83. – Art.No 032501.
- 12 Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-Ph. Hyperfine structure in the hydrogen molecular ion // *Phys. Rev. A*. – 2006. – Vol.74. – Art.No 040502(R).
- 13 Berestetsky V.B., Lifshitz E.M., and Pitaevskii L.P. *Theoretical Physics IV, Quantum Electrodynamics*. Pergamon Press, 1982. – 652 p.
- 14 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A*. – 2000. – Vol.61. – Art.No 064503.

## References

- 1 S. Alighanbari, G.S. Giri, F.L. Constantin, V.I. Korobov, and S. Schiller, *Nature* **581**, 152 (2020).
- 2 S. Patra, M. Germann, J.-Ph. Karr, M. Haidar, L. Hilico, V.I. Korobov, F.M.J. Cozijn, K.S.E. Eikema, W. Ubachs, and J.C.J. Koelemeij, *Science* **369**, 1238 (2020).
- 3 I. Kortunov, S. Alighanbari, M.G. Hansen, G.S. Giri, S. Schiller, and V.I. Korobov, *Nature Phys.* **17**, 569 (2021).
- 4 S. Alighanbari, I. V. Kortunov, G. S. Giri, and S. Schiller, *Nat. Phys.* **19**, 1263 (2023).
- 5 N. Schwegler, D. Holzzapfel, M. Stadler, A. Mitjans, I. Sergachev, J.P. Home, and D. Kienzler, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 133003 (2023).
- 6 V.I. Korobov, P. Danev, D. Bakalov, and S. Schiller, *Phys. Rev. A* **97**, 032505 (2018).
- 7 V.I. Korobov and D. Bakalov, *Phys. Rev. A* **107**, 022812 (2023).
- 8 D. R. Bates and G. Poots, *Proc. Phys. Soc. A* **66**, 784 (1953).
- 9 A. G. Posen, A. Dalgarno, and J. M. Peek, *At. Data Nucl. Data Tables* **28**, 265 (1983).
- 10 H. O. Pilón and D. Baye, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 065101 (2012).
- 11 K. Pachucki and J. Komasa, *Phys. Rev. A* **83**, 032501 (2011).
- 12 V.I. Korobov, L. Hilico, and J.-Ph. Karr, *Phys. Rev. A* **74**, 040502(R) (2006).
- 13 V.B. Berestetsky, E.M. Lifshitz, and L.P. Pitaevskii, *Theoretical Physics IV, Quantum Electrodynamics*, (Pergamon Press, 1982), 652 p.
- 14 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* **61**, 064503 (2000).

**История статьи:**

Поступила 09 февраля 2024 г.  
Поступила в доработанном виде 26 марта 2024  
Принята 10 апреля 2024 г.

**Article history:**

Received 09 February 2023  
Received in revised form 26 March 2024  
Accepted 10 April 2024

**Информация об авторах:**

1. **Дамир Азнабаев** – PhD, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Институт ядерной физики (г.Алматы, Казахстан, email: [buski\\_dn@mail.ru](mailto:buski_dn@mail.ru))

2. **Асхат Бекбаев** (автор корреспондент) – PhD, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: [bekbaev-askhat@mail.ru](mailto:bekbaev-askhat@mail.ru))

3. **Владимир Коробов** – докт.физ.-мат.наук, проф., Лаборатория теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований (Россия, г.Дубна, email: [korobov@theor.jinr.ru](mailto:korobov@theor.jinr.ru))

**Information about authors:**

1. **Damir Aznabayev** – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: [buski\\_dn@mail.ru](mailto:buski_dn@mail.ru)).

2. **Askhat Bekbaev** (corresponding author) – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: [email:bekbaev-askhat@mail.ru](mailto:email:bekbaev-askhat@mail.ru)).

3. **Vladimir Korobov** – Dr. of Phys. and Math. Sc., Prof., Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research (Russia, Dubna, email: [korobov@theor.jinr.ru](mailto:korobov@theor.jinr.ru)).