



# 格点量子色动力学与高精度原子光谱学

傅杨<sup>1\*</sup>, 冯旭<sup>1,2\*</sup>, 靳路昶<sup>3\*</sup>

1. 北京大学物理学院, 北京 100871;

2. 北京大学高能物理中心, 北京 100871;

3. 康涅狄格大学物理系, 斯托斯 06269, 美国

\*联系人, 傅杨, E-mail: [fy\\_deg@pku.edu.cn](mailto:fy_deg@pku.edu.cn); 冯旭, E-mail: [xu.feng@pku.edu.cn](mailto:xu.feng@pku.edu.cn); 靳路昶, E-mail: [ljin.luchang@gmail.com](mailto:ljin.luchang@gmail.com)

收稿日期: 2022-12-19; 接受日期: 2023-02-03; 网络出版日期: 2023-09-12

国家自然科学基金(编号: 12125501, 12070131001, 12141501)和国家重点研发计划(编号: 2020YFA0406400)资助项目

**摘要** 格点量子色动力学(Lattice Quantum Chromodynamics, QCD)作为目前已知的最系统地研究非微扰强相互作用的方法, 在高能物理和核物理前沿起着不可或缺的作用. 随着格点计算精度的提高和研究方法的突破, 格点QCD的研究前沿大为拓展, 一些新的交叉领域开始出现. 其中一个重要的领域是原子光谱学. 随着原子光谱学观测精度的不断提高, 核子结构相关的强相互作用效应需要被考虑, 其中双光子交换导致的修正尤为重要, 并且在近期受到理论和实验学界的广泛关注. 本文简要介绍了格点QCD的方法和原子光谱学中的两个重要观测量: 兰姆位移和超精细劈裂, 以及双光子交换对它们产生的修正, 进而展示格点QCD理论方法在这一领域的最新进展以及将来可能产生的重要影响.

**关键词** 格点量子色动力学, 兰姆位移, 超精细劈裂, 缪氢原子, 双光子交换

**PACS:** 12.38.Gc, 32.30.-r, 32.10.Fn

## 1 引言

近一个世纪以来, 有关原子光谱的认识对物理学的发展起到了至关重要的作用. 从巴尔末经验公式, 到精细结构, 再到兰姆位移和超精细劈裂, 人们先后经历了以玻尔模型为代表的早期量子论, 薛定谔和海森堡的非相对论量子力学, 狄拉克的相对论性量子力学, 以及最早的量子场论-量子电动力学(Quantum Electrodynamics, QED). 理论与实验的共同进步, 使得原子光谱学中的诸多物理量的实验测量与理论预言达到了惊人的匹配度.

在实验与理论的互相促进过程中, 现代原子光谱学与量子场论产生了紧密的联系. 量子场论建立在20世纪物理学的两个伟大成就——量子力学和狭义相对论基础上. 量子力学的海森堡不确定性原理告诉我们, 能量可以在短时间内大幅涨落; 狭义相对论告诉我们, 能量和质量可以互相转化. 在能量守恒允许的情况下, 当大幅能量转变为质量, 就会从真空中诞生新粒子. 如果在满足不确定性原理给出的最短时间内把能量还回去, 这时新产生的粒子会迅速湮灭掉, 就不会有破坏能量守恒的事情被观测到. 粒子不断地产生和湮灭, 这样一个过程, 被称为量子涨落, 它会在许多

**引用格式:** 傅杨, 冯旭, 靳路昶. 格点量子色动力学与高精度原子光谱学. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2023, 53: 100005

Fu Y, Feng X, Jin L-C. Lattice quantum chromodynamics and high-precision atomic spectroscopy (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2023, 53: 100005, doi: [10.1360/SSPMA-2022-0440](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2022-0440)

物理观测量中留下蛛丝马迹. 量子涨落对原子光谱造成的影响, 大部分源于电磁相互作用, 可以通过量子电动力学来解释. 但当原子光谱的实验测量超过一定精度后, 原子核的结构信息就需要被考虑. 从物理图像上来说, 原子中电子的运动由波函数来描述, 而波函数在原子核有限尺寸处的取值非零, 意味着电子有穿过原子核的可能, 因此导致了原子核的动力学对电子波函数的修正. 原子核是由质子、中子组成的束缚体系, 具有复杂的内部结构, 其底层机制由描述夸克、胶子强相互作用的量子色动力学(Quantum Chromodynamics, QCD)给出. 由于QCD具有高能区渐近自由、低能区(GeV以下)强非微扰的性质, 因此, 研究低能区的物理必须利用非微扰的量子场论方法. 格点量子色动力学(格点QCD)是目前研究QCD非微扰性质的最系统有效的理论手段.

在原子光谱学的研究中, 有一类奇特的原子, 其原子核外的部分电子被缪子所取代. 早在1947年, 我国物理学家张文裕先生就用实验证明了缪子可以被原子俘获形成缪子原子. 由于缪子质量大约是电子质量的200倍, 缪氢原子的玻尔半径约是普通氢原子的1/200, 因此缪氢原子会对其原子核的结构, 也就是对质子的结构更加敏感. 事实上, 目前最为精确的质子电荷半径值就是从缪氢原子光谱中提取的<sup>[1,2]</sup>, 这对于精确确定原子光谱学的基本常数——里德堡常数(Rydberg Constant)  $R$ 具有重要的意义. 里德堡常数直接决定了氢原子能级的基本结构 $E_n = R/n^2$  ( $n$ 为主量子数, 这也是人们熟知的玻尔模型的解). 这一常数在2018年由科学技术数据委员会(Committee on Data for Science and Technology, CODATA)给出的推荐值精度已经超过了12位有效数字<sup>[3]</sup>, 是物理学中最精确测定的常数之一. 真实的氢原子能级还需要考虑各种复杂的修正, 由于人们对质子复杂的结构了解并不充分, 很长一段时间里德堡常数的误差是被氢原子的原子核(也就是质子)的电荷半径所主导. 一方面, 质子电荷半径作为一个典型的非微扰物理量, 是可以由格点QCD来计算的. 另一方面, 在可预见的未来, 最精确的质子电荷半径值依然将由缪氢原子实验给出, 其中最大的理论误差来源于双光子交换(Two-Photon Exchange, TPE)修正<sup>[4]</sup>(其费曼图如图1所示), 因此也可以另辟蹊径, 利用格点QCD改善双光子交换的理论计算, 从而获得更精确的质子电荷半径测量值. 此外,

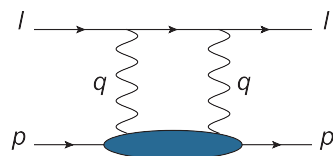


图1 (网络版彩图)双光子交换费曼图

Figure 1 (Color online) Feynman diagram for the TPE.

中性氢原子1S态的超精细劈裂导致了著名的21 cm线. 由于星际介质中的氢原子含量巨大, 这一谱线提供了天然的观测宇宙的手段, 在天文学和宇宙学中有重要的作用. 1952年, 奥尔特等人(J. Oort)正是利用21 cm谱线首次证实了银河系的旋臂结构, 极大地推动了射电天文学的发展. 实验上对21 cm线的测量精度早在20世纪70年代就已经达到了12位有效数字<sup>[5]</sup>, 而理论预言至今依然落后了6个数量级, 且也是由双光子交换修正主导误差<sup>[6]</sup>. 由于这部分贡献误差很大, 对其进行有效改进将大幅提高理论预言的精度, 则理论和实验可以更好地进行对比.

双光子交换修正与质子复杂的结构, 尤其是低能下的非弹性结构(如质子电磁极化率等)相关, 但过往计算这一修正的方法难以被持续改进. 格点QCD可以为其提供来自第一性原理的计算, 进而为高精度的原子光谱学和以夸克、胶子为基本自由度的高能物理学构建跨学科的桥梁. 本文首先对格点QCD方法进行简单的介绍, 之后对兰姆位移和超精细劈裂, 以及双光子交换效应所产生的修正进行介绍, 最后展示格点QCD计算这一物理量的进展, 并简要讨论未来可能的改进和产生的影响.

## 2 格点QCD方法简介

如前所述, QCD是描述夸克、胶子之间强相互作用的基本理论, 其拉氏量可以写为

$$\mathcal{L} = -G^2/4g + \sum_q \bar{\psi}_q(D + m_q)\psi_q, \quad (1)$$

其中 $\psi_q$ 是夸克场, 包括了多种不同的味(Flavor)  $q = \{u, d, s, \dots\}$ 且具有不同的质量 $m_q = \{m_u, m_d, m_s, \dots\}$ ,  $D$ 包含了夸克、胶子之间的相互作用, 而 $G^2$ 描述了胶子之间复杂且非线性的自相互作用, 它们的强度都由耦合常数 $g$ 来决定. 当夸克质量和耦合常数这些参数给定以后, 人们可以基于QCD来预言与强相互

作用相关的物理. 事实上, 当我们考虑的物理过程具有非常大的能标时, 如各种强子对撞机上的物理(上百 GeV 至 TeV 级别), 耦合常数  $g$  将非常小, 从而微扰论适用. 然而对低能标下的物理(1 个 GeV 或更低), 耦合常数将变得很大, 以至于破坏微扰展开的收敛性, 此时必须使用非微扰的方法来进行研究. 原子核相关的物理其能标一般远小于 1 个 GeV, 我们需要的正是一种基于 QCD 的非微扰的方法.

格点 QCD 是目前最系统研究非微扰 QCD 的方法, 由诺贝尔奖得主威尔逊(K. G. Wilson)<sup>[7]</sup> 在 20 世纪 70 年代提出. 其基本思想是将 QCD 的基本自由度定义在离散的四维欧氏时空格子上, 利用路径积分量子化的表述进行蒙特卡罗(Monte Carlo)数值模拟. 格点 QCD 在形式上非常类似于统计物理模型, 即对于我们感兴趣的物理量  $O$ , 它的期望值  $\langle O \rangle$  可以表示为

$$\langle O \rangle = \frac{\int D\phi O[\phi] P[\phi]}{\int D\phi P[\phi]}, \quad (2)$$

$$P[\phi] = \frac{1}{Z} \exp(-S[\phi]), \quad Z = \int D\phi \exp(-S[\phi]),$$

其中  $\phi$  是对所有场变量的简记,  $P[\phi]$  是这些场变量应当满足的分布,  $S[\phi]$  和  $Z$  是相应的有效作用量和配分函数. 因此, 一个典型的格点 QCD 计算过程将分为两步:

(1) 利用重点抽样和蒙特卡罗算法产生正确分布的规范场组态;

(2) 从正确分布的组态中取样, 对感兴趣的物理量  $O[\phi]$  进行测量.

由于定义在离散的时空格子上, 因此格点 QCD 模拟的系统具有有限的尺寸  $L$  和非零的格距  $a$ . 一方面, 由于量子系统中存在粒子的产生和湮灭, 而产生、湮灭的最轻的强子为  $\pi$  介子, 因此尺寸  $L$  需要远大于  $\pi$  的康普顿波长  $1/m_\pi$ , 其中  $m_\pi$  为  $\pi$  介子质量. 另一方面, 如果我们要模拟一个包含重夸克的系统, 比如约 1 GeV 的粲夸克, 那么就需要格距  $a$  足够小, 使得  $am_c$  是一个小量, 其中  $m_c$  为粲夸克质量. 由此格点模拟的典型尺寸将达到  $L/a \sim 64$  甚至更高. 以四维离散时空尺寸  $64^4$  来估计, 再考虑自旋和色空间自由度, 路径积分相当于进行一个亿维的数值积分, 这样高维的计算必须依托于超级计算机来实现. 近些年, 随着硬件资源的发展和算法的改进, 数值模拟的规模越来越大, 各种参数也已经接近真实的物理世界, 并且产生了一大批可以与实验进行对比的计算结果.

### 3 原子光谱与双光子交换

#### 3.1 兰姆位移

1947 年, 兰姆(W. Lamb)等人<sup>[8]</sup>发现, 原本在狄拉克相对论性量子力学下简并的氢原子  $2S_{1/2}$  和  $2P_{1/2}$  能级在实验上并不简并, 存在一个约 1047 MHz 的能级差, 这一极不平凡的结果后来成为了奠定量子电动力学巨大成功的基石之一. 该能级差也被命名为兰姆位移, 而兰姆本人因此获得 1955 年的诺贝尔物理学奖. 至今, 兰姆位移已经被测量到了百万分之一的精度<sup>[9]</sup>, 而质子电荷半径对兰姆位移的修正在万分之一的量级, 因此通过测量兰姆位移, 可以反过来得到质子电荷半径的值, 精度约在  $O(1\%)$ .

2010 年, 保罗谢尔研究所(PSI)的 CREMA 合作组<sup>[1]</sup>首次通过测量缪氢原子的兰姆位移获取了质子的电荷半径值. 由于缪氢原子对质子的结构更加敏感, 这一实验测得的质子电荷半径比过往精确了 10 倍以上, 但意外地与当时基于电子的测量的世界平均值(包括氢原子光谱以及质子电子散射)有着超过  $5\sigma$  的偏差<sup>[10]</sup>, 这便是著名的质子大小之谜. 考虑到里德堡常数与质子电荷半径高度相关, 这事实上还意味着里德堡常数也将发生超过  $5\sigma$  的偏移. 2013 年, CREMA 合作组<sup>[2]</sup>进一步的实验验证了这一事实. 图 2 展示了近年来质子电荷半径的实验结果<sup>[1,2,9,11-16]</sup>, 以及 CODATA 在 2010 和 2018 年的推荐值<sup>[3,10]</sup>. 近年来数个基于电子的高精度实验重新给出了与缪氢原子结果符合的结果<sup>[9,11-13]</sup>, 意味着这一谜题也许只是来源于对实验误差的低估. 目前最新的实验结果依然存在着分歧, 预示着这一谜题尚未得到彻底的解决.

2013 年的缪氢原子兰姆位移实验是迄今为止对质子电荷半径的最精确测量, 它使用了如下公式(单位为  $\mu\text{eV}$  和 fm)<sup>[2,4]</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta E_{2S-2P} &= \Delta E_{\text{structure indep.}} + \Delta E_{\text{proton size}} + \Delta E_{\text{TPE}} \\ &= 206033.6(1.5) - 5227.5(1.0) \langle r_p^2 \rangle + 33.2(2.0), \end{aligned} \quad (3)$$

其中, 第一项质子结构无关的部分包括了来自 QED 以及弱相互作用等的修正, 第二项是质子有限尺寸的修正, 因此正比于质子电荷半径平方  $\langle r_p^2 \rangle$ , 第三项则是双光子交换修正, 其对于氢原子兰姆位移的贡献是可以

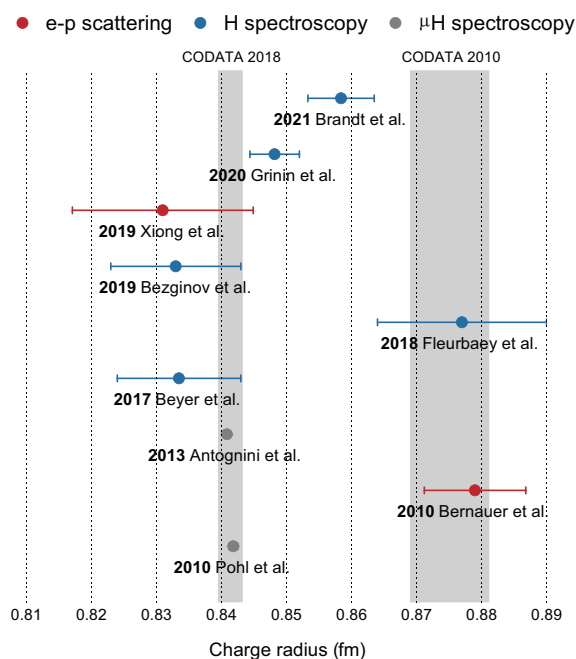


图2 (网络版彩图)近年来质子电荷半径的实验结果

Figure 2 (Color online) Experimental results of the proton charge radius in recent years.

忽略的, 然而在缪氢原子中被放大而需要考虑, 并且误差是整个理论公式里最大的. 实验测量值为  $202370.6(2.3) \mu\text{eV}$ , 由此得到质子电荷半径的测量值为  $\sqrt{\langle r_p^2 \rangle} = 0.84087(39) \text{ fm}$ .

2022年的综述文章<sup>[17]</sup>指出, 结构无关部分的计算已经被改进为  $206034.7(0.3) \mu\text{eV}$ , 误差缩小到了原先的1/5, 并且CREMA合作组计划将实验精度提高5倍, 由此双光子交换将成为最大的不确定度来源. 过往计算双光子交换的方法多利用色散关系, 如图3所示, 这一方法的成立需要如下三步.

(1) 利用柯西围道积分公式以及振幅的解析性, 由奇点和割线附近的信息重构振幅;

(2) 光学定理使得奇点和割线附近的信息可以从散射实验的数据(形状因子、结构函数等)来获得;

(3) 无穷围道积分(大动量, 紫外)没有贡献, 否则色散关系需要作减除来压低紫外贡献.

不幸的是, 对于这里的双光子交换计算, 色散关系是需要一次减除的. 这导致计算中将遇到一个有动量依赖的减除函数(Subtraction Function), 并且该函数难以从实验上获得输入, 理论上计算也依赖于唯象模型

假设, 因此导致了很大的不确定度. 近年来对兰姆位移中双光子交换贡献的计算结果<sup>[18–23]</sup>展示在图4, 可以看到这些结果相对比较符合, 但由于误差的范围很大, 依然是分布在20–50  $\mu\text{eV}$ 的一个广泛的区间.

### 3.2 超精细劈裂

氢原子的超精细劈裂(Hyperfine Splitting, HFS)是由原子核与绕核电子的磁矩之间相互作用导致的修正. 前已述及, 对氢原子1S态的超精细劈裂(也即21 cm线)的测量早在20世纪70年代就已经达到了惊人的精度, 具有12位有效数字<sup>[5]</sup>:

$$\nu_{1S\text{-HFS}}^{\text{exp}} = 1420405.751768(1) \text{ kHz}. \quad (4)$$

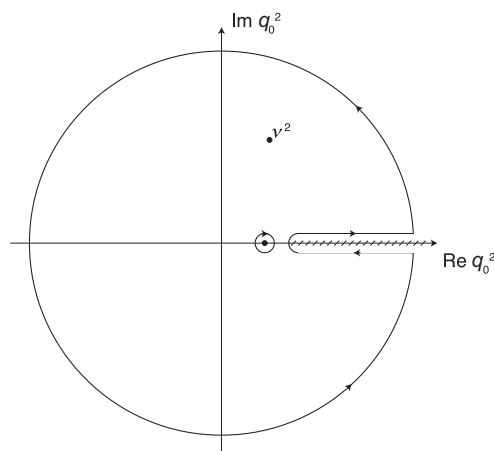


图3 色散关系的柯西围道积分

Figure 3 Cauchy contour integral in dispersion relation.

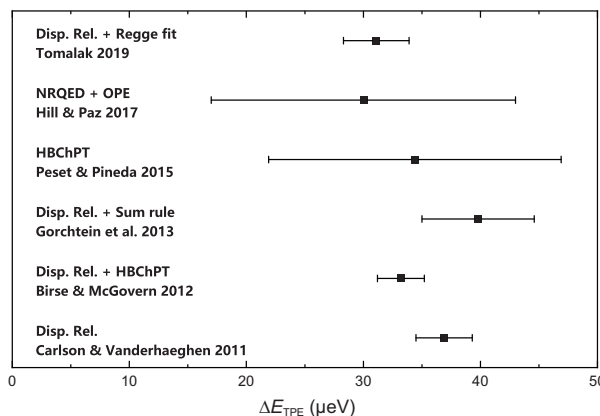


图4 近年来对兰姆位移中双光子交换贡献的计算结果

Figure 4 Results of TPE contribution to Lamb shift in recent years.

理论上计算这一物理量, 误差则落后了6个数量级 [6, 17, 24]:

$$\begin{aligned} \nu_{1S-HFS} &= (1 + \Delta_{\text{structure indep.}} + \Delta_{\text{TPE}}) \times E_{\text{Fermi}}(1S) \\ &= (1 + 1136.861(2) \times 10^{-6} - 32.2(6) \times 10^{-6}) \\ &\quad \times 1418840.08 \text{ kHz} \\ &= 1420407(1) \text{ kHz}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $E_{\text{Fermi}}(1S)$ 为费米能级. 式(5)同样考虑了质子结构无关的修正以及双光子交换效应. 可以看到, 这里依然是双光子交换主导了最终的理论误差.

除了自然界中天然存在的氢原子, 人们也在尝试测量对质子结构更加敏感的缪氢原子超精细劈裂. 至今已经有三个实验合作组(CREMA [25], FAMU [26, 27], J-PARC/RIKEN [28])在开展相关实验, 计划实验精度达到 $O(10^{-6})$ 的相对误差, 并提取双光子交换等质子结构信息. 对比实验的目标精度, 理论上对缪氢原子HFS的计算落后了两个数量级, 并且误差也是由双光子交换主导 [6].

计算这一修正的传统方法依然是使用色散关系. 与兰姆位移的情况不同的是, 这里有很强的理由认为色散关系不需要作减除 [29]¹, 但是色散关系仍需要实验提供小动量转移下自旋相关的结构函数, 这部分数据的测量相对困难并且具有很大的误差. 图5展示了对氢原子HFS双光子交换计算的结果 [24, 35, 36], 可以看到它们的结果有着相近的不确定度. 在杰斐逊实验室(JLab)进行的g2p实验也许有望改善这一现状 [37].

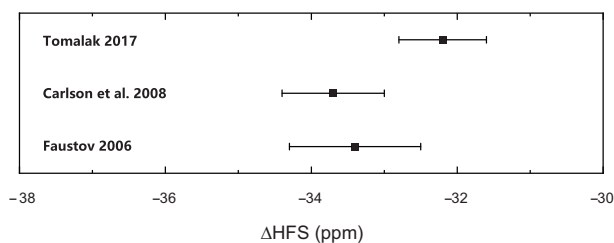


图5 近年对超精细劈裂中双光子交换贡献的计算结果

Figure 5 Results of TPE contribution to HFS in recent years.

### 3.3 双光子交换

这里对双光子交换的引入和计算做更为详细的介绍. 对原子光谱的计算通常在束缚态量子电动力学(Bound-State QED, BSQED)下进行 [38–40]. 在这一框架内, 质子被处理为点粒子, 并加上一些简单的电荷与磁矩分布. 由于束缚能提供了天然的红外截断, 因此在BSQED的计算中并不会出现红外发散. 然而质子具有更加复杂的结构, 尤其是非弹性的结构. 从图像上来说, 由于量子涨落的存在, 质子并不总是保持为质子, 而是可以变成任何满足量子数要求的激发态, 比如质子加上 $\pi$ 介子, 或是 $\Delta$ 共振态等. 这种复杂的效应在BSQED的框架下是缺失的.

双光子交换的贡献则包括了所需的这种非弹性结构效应, 图中蓝色椭圆部分表示质子可能的各种中间激发态. 然而对于这一圈图的贡献, 轻子(电子或缪子)部分并不束缚, 因此导致了红外发散. 由于质子有限尺寸的领头阶修正正比于电荷半径( $r_p^2$ ), 它是自旋无关的, 因此完全进入到兰姆位移的修正里, 但却不会进入到超精细劈裂中. 有限尺寸的次领头阶修正则正是双光子交换. 对于兰姆位移中的双光子交换, 对红外发散的處理是减除掉点粒子的贡献和Zemach moment中的电荷半径项, 它们都是解析已知的 [18]. 这样同时也防止和BSQED的结果存在重复(Double-Counting). 对于超精细劈裂的双光子交换, 情况则稍微简单一点, 我们只需要减除掉点粒子的贡献 [41].

## 4 格点QCD计算

### 4.1 红外发散与无穷体积重构

使用格点QCD来计算双光子交换的修正无疑具有重大的意义. 一个简单的计算思路是, 上述的双光子交换费曼图可以分为上下两部分: 上半部分是轻子部分, 由轻子的传播子和轻子-光子的相互作用顶点构成, 它的表达式是解析已知的; 下半部分是强子部分, 对应的强子函数可以由格点QCD来提供输入. 只要将这两部分结合起来, 就得到了这一费曼图所对应的贡献. 也

1) 首先Regge唯象理论支持振幅在趋于无穷围道时可以足够快速地趋于0 [30], 其次未减除的色散关系要求GDH求和规则的成立 [31–33], 这一求和规则极不平凡, 它要求质子的弹性结构和非弹性结构之间满足一个等式, 而这得到了实验方面的支持 [34].

就是说, 我们有如下形式的表达式:

$$\Delta E = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \omega(q) H(q) = \int d^4 x \omega(x) H(x), \quad (6)$$

其中 $\Delta E$ 是要计算的修正,  $\omega(q)$ 或 $\omega(x)$ 是对轻子部分的简记,  $H(q)$ 或 $H(x)$ 则对应需要在格点上计算的强子函数. 这里做了傅里叶变换将公式从动量 $p$ 空间转换到坐标 $x$ 空间, 因为格点上产生的强子函数一般是直接定义在坐标空间里的. 由于轻子部分在这里的作用十分类似于一个权重因子, 因此后面将统一称其为权重函数.

这一简单的思路并没有处理前述的红外发散, 因此在实际的格点QCD计算中, 会遇到巨大的问题. 一个经过蒙特卡罗随机算法计算出来的结果, 减去一个解析已知的结果, 由于两者随着红外截断的减小而发散, 那么即使中心值可以做到大数相消, 统计误差也依然会被红外截断放大, 最终掩盖掉所有的信号, 无法给出有意义的结果. 这要求我们必须保证红外发散能够自动相消. 式(6)的红外发散实际上相当复杂, 一方面由于轻子部分非常奇异, 因此权重函数 $\omega(x)$ 本身可能就是发散的(具体而言, 对于兰姆位移的TPE修正它是发散的, 对于HFS的TPE修正则不是). 另一方面, 公式中对整个四维时空的积分是发散的, 这一点我们将在下面解释.

对TPE计算中红外发散的处理可以在无穷体积分重建(Infinite-Volume Reconstruction, IVR)方法<sup>[42]</sup>下完成, 该方法利用了格点上计算的强子函数在长程时由基态主导的性质, 对应这里也就是由单质子态主导. 由于电荷半径和点粒子的贡献都是来自单质子态的性质, 因此处理红外相消的思路就自然是要将减除掉的点粒子和电荷半径贡献用格点上计算的强子函数来重构, 通过找到合适的表达式, 将要减除的项也表达为解析已知的权重函数与强子函数相结合, 从而在权重函数上直接完成减除, 保证红外发散的自动相消. IVR方法一方面提供了完成上述重构的途径, 另一方面还提供了一种能够自然分离红外发散的手段, 正是这一手段使得我们能够处理四维时空的积分发散.

在IVR方法下, 我们可以引入一个时间参量 $t_s$ , 把对时间的积分分为 $|t| < t_s$ 和 $|t| \geq t_s$ 两部分. 如图6所示, 对于 $|t| < t_s$ 的部分依然使用对应的格点数据作为输入来计算, 而对于 $|t| \geq t_s$ 的部分, 如果长程基态主导成立,

则可以完全由 $t = t_s$ 的数据重构. 因此

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E(|t| < t_s) + \Delta E(|t| \geq t_s) \\ &= \int_{|t| < t_s} d^4 x \omega(x) H(x) + \int d^3 x L(\mathbf{x}, t_s) H(\mathbf{x}, t_s). \end{aligned} \quad (7)$$

这里 $L(\mathbf{x}, t_s)$ 是一个定义在 $t = t_s$ 上且可以由 $\omega(x)$ 导出的权重函数. 由此 $t_s$ 在这里实际扮演了两个角色: 一是 $t_s$ 需要足够大, 以保证基态主导的成立; 二是作为红外截断, 将四维时空积分分离成两部分. 我们发现, 对于TPE的计算来说, 即使 $\omega(x)$ 有限, 导出的 $L(\mathbf{x}, t_s)$ 也是红外发散的. 幸运的是,  $|t| \geq t_s$ 的区域本身就假定了基态主导成立, 因此只存在单质子态的贡献. 以兰姆位移TPE的计算为例, 可以利用电荷守恒条件和电荷半径的计算公式:

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3 x L^p(\mathbf{x}, t_s) H(\mathbf{x}, t_s), \\ \langle r_p^2 \rangle &= \int d^3 x L^{\text{rad}}(\mathbf{x}, t_s) H(\mathbf{x}, t_s), \end{aligned} \quad (8)$$

消去 $L(\mathbf{x}, t_s)$ 中的红外发散. 这里,  $L^p$ 和 $L^{\text{rad}}$ 是两个已知的权重函数<sup>[43,44]</sup>.

## 4.2 有限体积与优化减除方案

当处理完红外发散之后, 原则上我们就可以使用格点QCD模拟得到的强子函数作为输入, 来计算TPE的修正. 然而格点QCD是在有限体积内进行的模拟, 因此如果权重函数随着距离变大而迅速变大, 那么我们将遇到很强的有限体积效应. 强子函数的信噪比会随着距离的增大而指数衰减, 具体的渐进行为是<sup>[45,46]</sup>

$$H(x)/\delta H(x) \sim \exp \left[ - \left( M_p - \frac{3}{2} m_\pi \right) |x| \right], \quad (9)$$

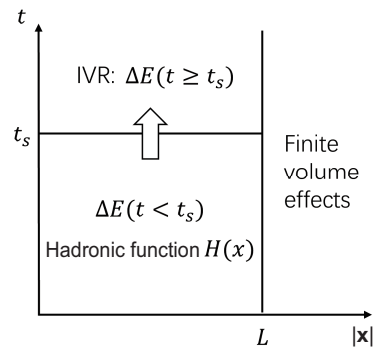


图6 IVR方法的示意图

Figure 6 Schematic for the IVR method.

其中 $M_p$ 和 $m_\pi$ 分别是质子和 $\pi$ 介子的质量,这也意味着即使有能力在足够大的格点体积下计算,也无法避免长程贡献统计误差的迅速增大.

为了解决这一问题,我们提出了优化的减除方案.这一方案的思路并不复杂,假设我们要计算的物理量是 $A$ ,直接计算它会导致较大的系统误差,而如果能找到一个已知的量 $B$ ,使得计算 $A - B$ 的系统误差很小,那么只需要计算 $A - B$ ,再将这个已知的量 $B$ 加回来即可.以兰姆位移TPE的计算为例,我们已知的性质正是前面提到的电荷守恒和电荷半径.由此可以定义约化的权重函数:

$$L^{(r)}(\mathbf{x}, t_s) = L(\mathbf{x}, t_s) - c_0 L^{pt}(\mathbf{x}, t_s) - c_r L^{rad}(\mathbf{x}, t_s). \quad (10)$$

利用这一约化的权重函数计算 $\Delta E^{(r)}$ 之后,再将减除的部分加回来:

$$\Delta E = \Delta E^{(r)} + c_0 + c_r \langle r_p^2 \rangle. \quad (11)$$

这一过程中, $c_0$ 和 $c_r$ 的选取原则上可以是任意的.我们使用一个模型估计了当权重函数和强子函数结合在一起的结果.如图7上半部分所示,黑线表示的是优化减除之前的结果,可以看到主要的贡献来自于1–3 fm,并且积分收敛需要 $|\mathbf{x}|$ 达到5 fm左右,意味着格点模拟的尺寸需要10 fm.尽管这个尺寸下的模拟不是不可能完成,然而信噪比的衰减无法避免.考虑到模型估计的结果,我们选取 $c_0$ 和 $c_r$ 的值,使得 $L^{(r)}$ 在1–3 fm的区间内最小化.红线表示的是优化后的结果,不仅绝大部分的贡献被提取了出去,积分收敛也只需要 $|\mathbf{x}|$ 达到2.5 fm,即格点模拟的尺寸只需要5 fm,这是当今格点QCD模拟能达到的典型尺寸.图7下半部分则是使用格点数据计算的结果随着积分范围 $R$ 变化的行为,它与模型预估的行为基本一致,并且我们发现约化前后的统计误差有约6倍的改善.

### 4.3 四点关联函数的产生

格点QCD计算强子函数需要产生相应的关联函数,这里需要的强子函数是 $\langle p | j_\mu(x) j_\nu(0) | p \rangle$ ,其中 $|p\rangle$ 代表质子态, $j(x)$ 是电磁流,因此需要产生初末态为质子,中间插入两个电磁流的四点关联函数.过往的格点QCD计算多基于两点和三点的关联函数.由于计算最终需要对全空间求和,四点关联函数相比三点函数将

多一次 $L^3$ 的求和,对计算量的提升大约在 $10^4$ – $10^5$ 级别,这无法只通过计算资源的增长解决.

这一难点在普适的稀疏场方法下解决[47,48].通过测试发现,格点计算的数据在不同坐标点之间存在强关联,因此将对全空间的求和替换为对随机点求和,不仅不会改变期望值,其精度下降也是可以忽略的.具体来说,对于点源(Point-Source)传播子,将求和数量减少为原先的 $\sim 1/100$ ,误差只会上升15%;对于涂摩源(Smeared-Source)传播子,由于涂摩的操作实际上增大了点与点之间的关联,在同样误差的上升幅度下,求和数量甚至可以减少为 $\sim 1/1000$ .在求和数量如此大幅度减少的情况下,四点关联函数计算量的提升就变得可以接受.

四点关联函数计算的另一个难点在于夸克收缩图的种类更多.如图8所示,对于兰姆位移和超精细裂变的TPE计算,两者所需要的夸克连通图就多达10种.我们对此做了两方面改进;一是我们发现两个流在两条

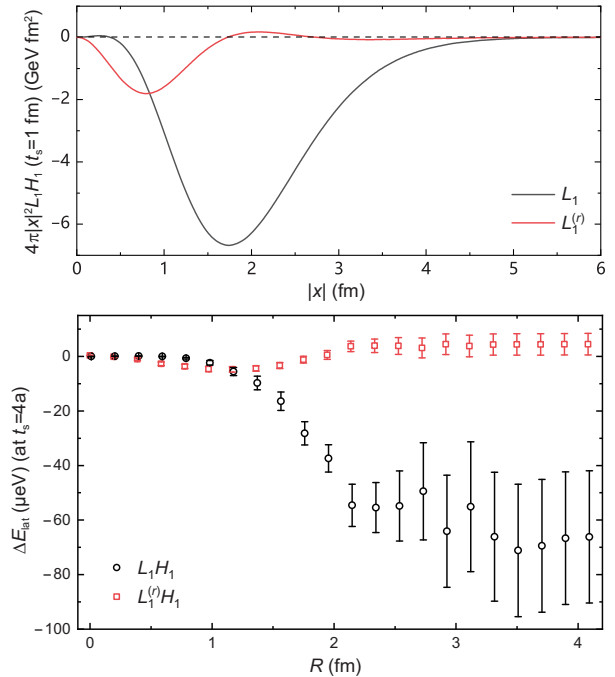


图7 (网络版彩图)上: 模型估计权重函数与强子部分结合的结果; 下: 格点计算的数值结果随积分范围 $R$ 的行为. 图引自文献[44]

Figure 7 (Color online) Upper: results of combining the weight function and the hadronic function estimated by model; bottom: the behavior of the numerical results from lattice calculation with the integration range  $R$ . Figure cited from ref. [44].

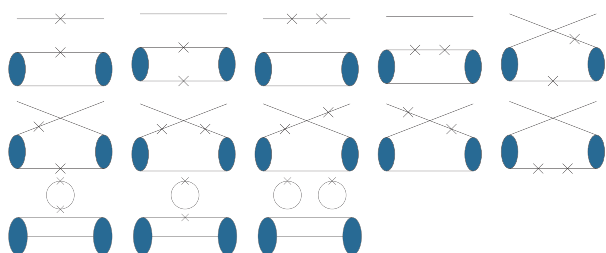


图 8 (网络版彩图) TPE计算中10种类型的夸克连通图和3种类型的夸克非连通图(×符号代表两个电磁流的位置). 其中前两行为夸克连通图, 第三行为非连通图. 我们计算了第一个也是最重要的非连通图, 后两个非连通图在严格SU(3)对称性下贡献为0

**Figure 8** (Color online) 10 types of quark-connected diagram and 3 types of quark-disconnected diagram in the calculation of TPE (× denotes the location of the two electromagnetic currents). The quark-connected diagrams are in the first two lines and the quark-disconnected ones are in the third line. We calculate the first quark-disconnected diagram which is the most important one and the other two vanish at the limit of exact flavor SU(3) symmetry.

不同夸克线上的种类其贡献很小, 而这一种图的计算却相对复杂, 占据了大多数的计算时间, 因此将这种图的统计量降低为完整统计量的1/4, 这对于最终结果的改变可以忽略, 但计算时长降低到了原先的30%左右; 二是在具体计算中, 我们尽可能寻找不同种夸克连通图之间存在的共同项, 这些共同项只需要计算一次, 从而减少了重复计算. 我们还对最终计算得到的10种夸克连通图一一验证了电荷守恒的条件, 确保了收缩代码的正确. 此外, 以计算量大、信噪比差著称的夸克非连通图也有3种, 我们计算了其中最重要的非连通图(没有被flavor SU(3)压低).

#### 4.4 数值结果

目前, 我们已经成功使用格点QCD在一个具有物理 $\pi$ 质量的组态下<sup>[49]</sup>计算了兰姆位移的TPE修正, 这一组态的具体信息在表1中给出, 具体结果则如图9所示, 其中上半部分是夸克连通图的贡献, 下半部分是非连通图的贡献. 我们使用了多个不同的时间间隔组合, 以保证计算所需的基态主导条件成立. 由于使用了约化的减除方案, 将减除掉的贡献补回来后, 最终得到<sup>[44]</sup>

$$\Delta E_{\text{TPE}} = -28.9(4.9) \mu\text{eV} + 93.72 \mu\text{eV}/\text{fm}^2 \cdot \langle r_p^2 \rangle. \quad (12)$$

表 1 组态信息

Table 1 Ensemble information

| $m_\pi$ (MeV) | $L/a$ | $T/a$ | $a$ (fm)  | $N_{\text{conf}}$ |
|---------------|-------|-------|-----------|-------------------|
| 142           | 24    | 64    | 0.1943(8) | 131               |

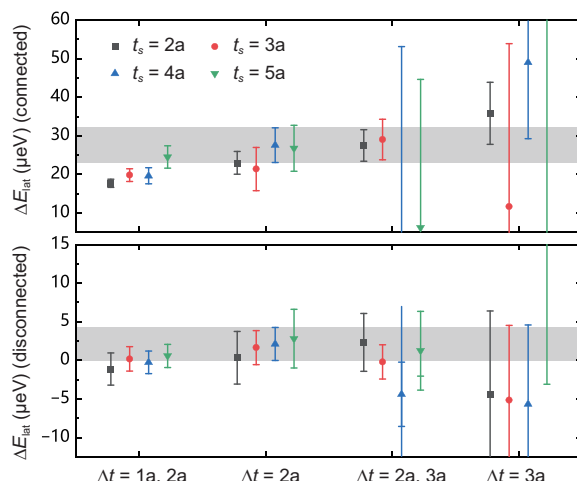


图 9 (网络版彩图)对兰姆位移TPE修正的格点计算结果. 图引自文献<sup>[44]</sup>

**Figure 9** (Color online) Results of lattice calculation of TPE correction to Lamb shift. Figure cited from ref. <sup>[44]</sup>.

一方面, 如果将这个结果代入式(3)中, 我们可以得到 $\sqrt{\langle r_p^2 \rangle} = 0.84136(65) \text{ fm}$ , 与缪氢原子实验原先的结果 $0.84087(39) \text{ fm}$ 符合. 另一方面, 如果将缪氢原子实验的电荷半径值代入, 我们可以得到 $\Delta E_{\text{TPE}} = 37.4(4.9) \mu\text{eV}$ , 这与之前的各种理论计算结果相符合, 误差也处于同一水平.

而对于超精细劈裂的TPE修正, 初步的计算结果表明, 这一物理量受到格点有限格距误差(Lattice Artifacts)的影响相比兰姆位移的TPE要更加明显. 从对称性上来理解, 在兰姆位移TPE的计算中, 零动量的强子函数满足瓦德恒等式导致的电荷守恒, 这一守恒性质在格点上通常能够被很好地保持(如果使用格点修正的守恒矢量流, 这一性质甚至能够被严格保持); 而对于超精细劈裂的TPE计算, 由于它是自旋相关的物理量, 因此零动量下对应的物理量就不再只是电荷守恒, 还包括质子的反常磁矩, 而这并不是一个守恒量. 具体的数值计算目前仍在进行当中.

## 4.5 展望

可以看到, 格点QCD已经开始在原子光谱学的领域内发挥巨大的作用. 随着计算资源的增加和新方法的提出, 格点QCD有望为缪氢原子兰姆位移的实验测量提供最精确的TPE修正计算结果, 进而改善对质子电荷半径大小的确定, 这也意味着能够提高对原子光谱学的基本常数——里德堡常数的测量精度. 对氢原子和缪氢原子超精细劈裂的计算目前仍在进行, 尽管暂时还难以达到实验对应的测量精度, 但追上甚至超过色散关系的计算精度是可以预期的.

原子光谱学中还存在大量强子相关的物理量, 例如, CREMA合作组还测量了缪氘<sup>[50]</sup>、缪氦<sup>[51]</sup>等的兰姆位移, 得到了这些原子核的电荷半径的高精度测量值, 这些结果的误差依然是由双光子交换主导<sup>[52,53]</sup>. 尽管格点QCD由于信噪比问题, 对多核子问题的计算会更加困难, 但考虑到这些双光子交换可以被分解为原子核相关以及内部核子(质子和中子)相关的部分,

前者可以在核物理的框架下利用有效势能来处理, 而后者则是单个核子的性质, 且这一部分的误差占据了主导, 那么使用格点QCD改善对后者的计算, 就变得尤为重要.

## 5 总结

原子光谱学中兰姆位移的发现奠定了现代量子电动力学, 21 cm谱线的探测也帮助射电天文学发现了银河系的旋臂结构. 由于光谱学测量的高精度, 使得量子色动力学的贡献在理论与实验的对比中变得举足轻重. 本文对原子光谱学中的这些重要观测量进行了回顾, 强调了双光子交换效应的重要性, 同时介绍了格点量子色动力学方法和其对双光子交换的计算结果, 并以此为契机, 对未来可能的发展进行了展望. 可以预见, 在这一领域的工作将为高精度的原子光谱学和以夸克、胶子为基本自由度的高能物理学构建跨学科的桥梁, 加深我们对丰富多彩的物质世界的理解.

致谢 谨以此文致敬北京大学物理学科建立110周年.

## 参考文献

- 1 Pohl R, Antognini A, Nez F, et al. The size of the proton. *Nature*, 2010, 466: 213–216
- 2 Antognini A, Nez F, Schuhmann K, et al. Proton structure from the measurement of 2S-2P transition frequencies of muonic hydrogen. *Science*, 2013, 339: 417–420
- 3 Tiesinga E, Mohr P J, Newell D B, et al. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018. *Rev Mod Phys*, 2021, 93: 025010
- 4 Antognini A, Kottmann F, Biraben F, et al. Theory of the 2S-2P Lamb shift and 2S hyperfine splitting in muonic hydrogen. *Ann Phys*, 2013, 331: 127–145
- 5 Hellwig H, Vessot R F C, Levine M W, et al. Measurement of the unperturbed hydrogen hyperfine transition frequency. *IEEE Trans Instrum Meas*, 1970, 19: 200–209
- 6 Tomalak O. Hyperfine splitting in ordinary and muonic hydrogen. *Eur Phys J A*, 2018, 54: 3
- 7 Wilson K G. Confinement of quarks. *Phys Rev D*, 1974, 10: 2445–2459
- 8 Lamb W E, Retherford R C. Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Phys Rev*, 1947, 72: 241–243
- 9 Bezginov N, Valdez T, Horbatsch M, et al. A measurement of the atomic hydrogen Lamb shift and the proton charge radius. *Science*, 2019, 365: 1007–1012
- 10 Mohr P J, Taylor B N, Newell D B. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010. *J Phys Chem Ref Data*, 2012, 41: 043109
- 11 Beyer A, Maisenbacher L, Matveev A, et al. The Rydberg constant and proton size from atomic hydrogen. *Science*, 2017, 358: 79–85
- 12 Xiong W, Gasparian A, Gao H, et al. A small proton charge radius from an electron-proton scattering experiment. *Nature*, 2019, 575: 147–150
- 13 Grinin A, Matveev A, Yost D C, et al. Two-photon frequency comb spectroscopy of atomic hydrogen. *Science*, 2020, 370: 1061–1066
- 14 Bernauer J C, Achenbach P, Ayerbe Gayoso C, et al. High-precision determination of the electric and magnetic form factors of the proton. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 242001

- 15 Fleurbaey H, Galtier S, Thomas S, et al. New measurement of the 1S-3S transition frequency of hydrogen: Contribution to the proton charge radius puzzle. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 183001
- 16 Brandt A, Cooper S F, Rasor C, et al. Measurement of the  $2S_{1/2}$ - $8D_{5/2}$  transition in hydrogen. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 023001
- 17 Antognini A, Hagelstein F, Pascalutsa V. The proton structure in and out of muonic hydrogen. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2022, 72: 389–418
- 18 Carlson C E, Vanderhaeghen M. Higher-order proton structure corrections to the Lamb shift in muonic hydrogen. *Phys Rev A*, 2011, 84: 020102
- 19 Birse M C, McGovern J A. Proton polarisability contribution to the Lamb shift in muonic hydrogen at fourth order in chiral perturbation theory. *Eur Phys J A*, 2012, 48: 120
- 20 Gorchtein M, Llanes-Estrada F J, Szczepaniak A P. Muonic-hydrogen Lamb shift: Dispersing the nucleon-excitation uncertainty with a finite-energy sum rule. *Phys Rev A*, 2013, 87: 052501
- 21 Peset C, Pineda A. The Lamb shift in muonic hydrogen and the proton radius from effective field theories. *Eur Phys J A*, 2015, 51: 156
- 22 Hill R J, Paz G. Nucleon spin-averaged forward virtual Compton tensor at large  $Q^2$ . *Phys Rev D*, 2017, 95: 094017
- 23 Tomalak O. Two-photon exchange correction to the Lamb shift and hyperfine splitting of S levels. *Eur Phys J A*, 2019, 55: 64
- 24 Tomalak O. Two-photon exchange correction to the hyperfine splitting in muonic hydrogen. *Eur Phys J C*, 2017, 77: 858
- 25 Amaro P, Adamczak A, Abdou Ahmed M, et al. Laser excitation of the 1s-hyperfine transition in muonic hydrogen. *SciPost Phys*, 2022, 13: 020
- 26 Pizzolotto C, Sbrizzi A, Adamczak A, et al. Measurement of the muon transfer rate from muonic hydrogen to oxygen in the range 70-336 K. *Phys Lett A*, 2021, 403: 127401
- 27 Pizzolotto C, Adamczak A, Bakalov D, et al. The FAMU experiment: Muonic hydrogen high precision spectroscopy studies. *Eur Phys J A*, 2020, 56: 1–5
- 28 Sato M, Ishida K, Iwasaki M, et al. Laser spectroscopy of the hyperfine splitting energy in the ground state of muonic hydrogen. In: Proceedings of 20th International Conference on Particles and Nuclei (PANIC 14). Hamburg, 2014
- 29 Carlson C E, Vanderhaeghen M. Two-photon physics in hadronic processes. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2007, 57: 171–204
- 30 Abarbanel H D I, Nussinov S. Implications of regge behavior for processes involving photons. *Phys Rev*, 1967, 158: 1462–1466
- 31 Gerasimov S B. A sum rule for magnetic moments and the damping of the nucleon magnetic moment in nuclei. *Sov J Nucl Phys*, 1966, 2: 430–433
- 32 Drell S D, Hearn A C. Exact sum rule for nucleon magnetic moments. *Phys Rev Lett*, 1966, 16: 908–911
- 33 Hosoda M, Yamamoto K. Sum rules for magnetic moments of spin 1 and 3/2 nuclei. *Prog Theor Phys*, 1966, 36: 426–427
- 34 Dutz H, Helbing K, Krimmer J, et al. Measurement of helicity-dependent photoabsorption cross sections on the neutron from 815 to 1825 MeV. *Phys Rev Lett*, 2005, 94: 162001
- 35 Faustov R N, Gorbacheva I V, Martynenko A P. Proton polarizability effect in the hyperfine splitting of the hydrogen atom. In: Proceedings of Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. New York: SPIE, 2006. 61650M
- 36 Carlson C E, Nazaryan V, Griffioen K. Proton structure corrections to electronic and muonic hydrogen hyperfine splitting. *Phys Rev A*, 2008, 78: 022517
- 37 Ruth D, Zielinski R, Gu C, et al. The proton spin structure function  $g_2$  and generalized polarizabilities in the strong QCD regime. arXiv: 2204.10224
- 38 Pachucki K. Theory of the Lamb shift in muonic hydrogen. *Phys Rev A*, 1996, 53: 2092–2100
- 39 Pachucki K. Proton structure effects in muonic hydrogen. *Phys Rev A*, 1999, 60: 3593–3598
- 40 Borie E. Lamb shift in muonic hydrogen. *Phys Rev A*, 2005, 71: 032508
- 41 Carlson C E, Nazaryan V, Griffioen K. Proton-structure corrections to hyperfine splitting in muonic hydrogen. *Phys Rev A*, 2011, 83: 042509
- 42 Feng X, Jin L. QED self-energies from lattice QCD without power-law finite-volume errors. *Phys Rev D*, 2019, 100: 094509
- 43 Feng X, Fu Y, Jin L C. Lattice QCD calculation of the pion charge radius using a model-independent method. *Phys Rev D*, 2020, 101: 051502
- 44 Fu Y, Feng X, Jin L C, et al. Lattice QCD calculation of the two-photon exchange contribution to the muonic-hydrogen Lamb shift. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 172002
- 45 Parisi G. The strategy for computing the hadronic mass spectrum. *Phys Rep*, 1984, 103: 203
- 46 Lepage G P. The analysis of algorithms for lattice field theory. From actions to answers. In: Proceedings of Theoretical Advanced Study Institute in Elementary-Particle Physics. Boulder, 1989. 97–120
- 47 Detmold W, Murphy D J, Pochinsky A V, et al. Sparsening algorithm for multihadron lattice QCD correlation functions. *Phys Rev D*, 2021, 104: 034502
- 48 Li Y, Xia S C, Feng X, et al. Field sparsening for the construction of the correlation functions in lattice QCD. *Phys Rev D*, 2021, 103: 014514
- 49 Blum T, Boyle P A, Christ N H, et al. Domain wall QCD with physical quark masses. *Phys Rev D*, 2016, 93: 074505
- 50 Pohl R, Nez F, Fernandes L M P, et al. Laser spectroscopy of muonic deuterium. *Science*, 2016, 353: 669–673

- 51 Krauth J J, Schuhmann K, Ahmed M A, et al. Measuring the  $\alpha$ -particle charge radius with muonic helium-4 ions. [Nature](#), 2021, 589: 527–531
- 52 Krauth J J, Diepold M, Franke B, et al. Theory of the  $n=2$  levels in muonic deuterium. [Ann Phys](#), 2016, 366: 168–196
- 53 Diepold M, Franke B, Krauth J J, et al. Theory of the Lamb shift and fine structure in muonic  $^4\text{He}$  ions and the muonic  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  isotope shift. [Ann Phys](#), 2018, 396: 220–244

## Lattice quantum chromodynamics and high-precision atomic spectroscopy

FU Yang<sup>1\*</sup>, FENG Xu<sup>1,2\*</sup> & JIN Lu-Chang<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>*School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China;*

<sup>2</sup>*Center for High Energy Physics, Peking University, Beijing 100871, China;*

<sup>3</sup>*Department of Physics, University of Connecticut, Storrs 06269, USA*

Lattice quantum chromodynamics (lattice QCD) provides a well-established approach to studying strong nonperturbative interactions. It plays an indispensable role in the frontiers of high-energy and nuclear physics. With the improvement in the precision of lattice QCD calculations and the development of theoretical methods, the frontier of lattice QCD has been greatly expanded, and some new interdisciplinary fields have emerged. An important field is atomic spectroscopy. With the increasing accuracy of the observables in atomic spectroscopy, the hadronic effects related to the nucleon structure must be considered, among which the two-photon exchange corrections are particularly important and have recently received much theoretical and experimental attention. This paper briefly introduces the lattice QCD approach and two important observables in atomic spectroscopy: the Lamb shift and hyperfine splitting, as well as their two-photon exchange corrections. We then report the recent progress of the lattice QCD study in this field and discuss the important impact it may have.

**lattice quantum chromodynamics, Lamb shift, hyperfine splitting, muonic-hydrogen, two-photon exchange**

**PACS:** 12.38.Gc, 32.30.-r, 32.10.Fn

**doi:** [10.1360/SSPMA-2022-0440](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2022-0440)