

Существует ли объективная необходимость скорейшего переопределения килограмма и моля?

Т. П. ХИЛЛ*, В. В. ХРУЩЕВ**

* Школа математики, Технологический институт штата Джорджия, Атланта, США, e-mail: hill@math.gatech.edu

** Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, Москва, Россия, e-mail: khkon@vniims.ru

Рассмотрены причины отсрочки принятия новых определений килограмма и моля СИ на основе Резолюции 1, принятой на 24-й Генеральной Конференции по мерам и весам.

Ключевые слова: переопределение основных единиц СИ, постоянные Авогадро и Планка, моль, килограмм, реализация определений единицы массы.

The reasons for postponing the confirmation of new definitions for the kilogram and mole of SI based on the Resolution 1 taken by the 24 CGPM are considered.

Key words: redefinition of basic SI units, Avogadro and Planck constants, mole, kilogram, realization of the mass definitions.

В настоящее время существует общее мнение, что система измерений (СИ) нуждается в модернизации [1], в первую очередь, в отношении определений килограмма и моля. При этом имеются разногласия по поводу, как именно и в какие сроки должна проходить модернизация СИ. Предлагалось принять новые определения четырех основных единиц — килограмма, моля, ампера и кельвина — на 24-й Генеральной конференции по мерам и весам (ГКМВ). Однако из-за расхождений результатов по определению значений постоянных Планка и Авогадро двумя разными методами — методом ватт-весов [2] и кристаллических кремниевых шаров [3], принятие новых определений было отложено, по крайней мере, до 2014 г., когда должна состояться 25-я ГКМВ.

Международное Бюро мер и весов (МБМВ) и Консультативный комитет по количеству вещества: метрология в химии, в частности, подтвердили свою приверженность поощрять изучение и обсуждение возможных вариантов пересмотра СИ, как указано в Резолюции 1 [1]. Покажем, что некоторые важные вопросы остаются нерешенными и даже без внимания, и поддержим мнение, что лучше проявить сдержанность и преемственность при принятии новых определений единиц массы и количества вещества СИ. В этой связи рассмотрим три веские причины отсрочки принятия новых определений килограмма и моля: первая — за время, прошедшее после опубликования новых определений, были достигнуты значительные успехи в области физики и техники эксперимента, обработке экспериментальных данных, которые могут быть использованы для переопределения единиц СИ; вторая — научная критика новой СИ, высказанная рядом авторов и экспертов международных метрологических организаций, осталась без ответа архитекторов новой СИ и МКМВ; третья — исправление недостатков новой СИ, если она будет принята в 2014 г., потребует больших затрат времени и средств, поэтому лучше внести необходимые исправления до принятия новой СИ.

Новые достижения в физике и технике эксперимента, обработке экспериментальных данных. После того, как предлагаемые переопределения базовых единиц СИ были введены в 2005 и 2006 гг. [4, 5], появились несколько ключевых достижений в области физики и обработки экспериментальных данных, что непосредственно влияет на основные принципы предлагаемой новой СИ.

Во-первых, были получены дополнительные доказательства, что постоянная тонкой структуры, а следовательно, и постоянная Планка, могут меняться во времени и в пространстве [6]. Авторы этого исследования были удостоены научной премии Eureka Science Award в 2012 г. Известно, что такие изменения констант могут вызвать проблемы для фундаментальной метрологии [7], и существующее предложение определять килограмм с помощью фиксированного значения постоянной Планка следует дополнительно изучить в свете этого нового обстоятельства.

Во-вторых, теоретические достижения в области статистики привели к новым математическим методам объединения данных различных экспериментов [8]. В частности, CODATA использует линейный метод и предположение о нормальных распределениях данных при согласовании значений фундаментальных физических констант. В [8] был предложен более общий уникальный метод «слияния», который позволяет легко проводить вычисления и сводит к минимуму потери информации Шеннона при объединении данных принципиально различных экспериментов. Предложенная новая статистическая методика может помочь минимизировать существующие расхождения в результатах экспериментов по определению постоянных Планка и Авогадро с помощью ватт-весов и кремниевых шаров и, таким образом, повлиять на решения, касающиеся выбора вариантов переопределения четырех основных единиц СИ.

В-третьих, что, вероятно, имеет самое непосредственное отношение к существующей и новой или модифицированной

СИ, это последние открытия в физике и технике эксперимента. Прежде всего, повышение точности результатов Международного проекта «Авогадро» по определению постоянной Авогадро методом кремниевых шаров [3], что делает его самым точным методом по определению постоянных Авогадро и Планка. Таким образом, выбор определения килограмма на основе фиксации постоянной Авогадро и массы атома углерода-12 является наиболее естественным. Причем реализовать это определение можно не только с помощью шаров из кристаллического кремния, но и, например, призм, составленных из листов графена [9].

Еще одним фактом, который ставит под сомнение выбор определения килограмма на основе постоянной Планка, является эксперимент, в котором исследователи из Университета Калифорнии и Национальной лаборатории Лоуренса Беркли применили импульс-спектроскопию на атомах отдачи для стабилизации генератора, тем самым обеспечив прямую связь между временем и массой. В отличие от используемых в методе ватт-весов вспомогательных измерений и дополнительных теоретических предположений метод отдачи основан на простых физических принципах и, как сообщается, является «в 10 раз более точным, чем методы действующей СИ» [10]. Недавно исследователи из NIST построили оптические часы на основе спектроскопии иона Al^+ с квантовой логикой, которые могут быть более чем в 100 раз точнее цезиевых часов [11]. Каждое из этих открытий требует глубокого анализа со стороны МБМВ до принятия окончательного решения в отношении переопределения килограмма, а также, возможно, нового переопределения секунды [12].

Вопросы без ответа относительно недостатков новой СИ. Утверждения о серьезных недостатках предлагаемой новой СИ появились в последнее время, например [13—19]. Авторы [16] при освещении запланированного перехода к новым определениям единиц СИ заключили, что «все необходимые условия для такого перехода еще не удовлетворены». Среди наиболее важных критических замечаний следующие: предлагаемое переопределение килограмма требует введения нового квантового стандарта тока [13]; физически нереальные порядки 10^{41} некоторых постоянных, входящих в предлагаемое новое определение для килограмма [14], и несоответствия и (или) циклические аргументы в предлагаемых новых определениях [15, 17, 20] (например, в определении секунды используется температура в кельвинах для атомов цезия, а определение кельвина зависит от значения постоянной Больцмана, выраженной в единицах с участием секунды [1], см. также [21]).

Об использовании нового определения килограмма в образовательном процессе. Президент Консультативного комитета по единицам и другие архитекторы новой СИ заявили, что «поскольку важно, чтобы основы нашей системы измерений преподавались в школах и университетах, предпочтительно, насколько это позволяет современная наука, чтобы определения основных единиц были понятными для студентов по всем дисциплинам» [5, стр. 228]. Однако за семь лет, прошедших после предложения новой СИ, до сих пор не принято определение предлагаемого на основе постоянной Планка килограмма, которое подходило бы для публикации в учебнике.

Существуют следующие варианты нового определения килограмма на основе постоянной Планка [5]:

килограмм — это масса тела, которая эквивалентна энергии, равной энергии определенного числа фотонов, чьи частоты в сумме дают $(299792458^2/66260693) \cdot 10^{41}$ Гц;

килограмм — это масса тела, чья частота де Бройля—Комптона точно равна $(299792458^2/6,6260693 \cdot 10^{-34})$ Гц;

килограмм — это такая единица массы тела, при которой постоянная Планка точно равна $6,6260693 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Приведенные определения трудно понять не только «студентам по всем дисциплинам», детальное объяснение этих определений является также сложной задачей даже для студентов университетов по специальности физика, тем более, если они еще не владеют квантовой механикой.

Скрытая новая фундаментальная постоянная. Вопросы, связанные с переопределением моля, также запутаны, как и те, что связаны с переопределением килограмма. «Новая постоянная молярной массы» M_u [1] в предлагаемой новой СИ связана с величиной $1 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ таким образом, что разница между ними «несет ту же информацию, которую несет коэффициент $(1 + \kappa)$ » [22, стр. L19], где κ была введена в [5]. На самом деле, κ можно было бы назвать новой константой, так что новая СИ зависит от введения новой или дополнительной постоянной $M_u = (1 + \kappa) \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$.

В [20] было также отмечено, что в новой СИ остаются необъясненными «запутанные привнесенные неточные поправочные факторы, такие как $(1 + \kappa)$ или предлагаемая «постоянная модифицированной молярной массы». Вопрос об изменении статуса постоянной молярной массы обсуждался в [13]. Разработчиками новой СИ предлагается просто скрыть постоянную κ внутри модифицированной постоянной молярной массы, установив $M_u = (1 + \kappa) \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ [4, 5, 20]. Таким образом, новая СИ основывается на введении специальной новой постоянной M_u , которая однако время от времени должна меняться с учетом изменения входящих в нее констант. Более того, изменение постоянной молярной массы

$$M'_u = M_u (1 + \kappa), \quad (1)$$

где $M_u = 1 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$, приводит к тому, что молярная масса углерода-12 теперь становится зависимой от значений других фундаментальных физических констант, таких как постоянные тонкой структуры α и Планка h . Такая зависимость для M'_u приведет к необходимости многократного изменения огромного числа значений молярных масс, занесенных в многочисленные справочники, методические руководства, инструкции, базы данных различного типа. С физической точки зрения, это приводит к неверному выводу о непостоянстве массы любого атома или молекулы и ее зависимости, например, от знания значения α . Действительно, например, для массы атома углерода должно выполняться соотношение

$$m(^{12}\text{C})N_A = 12M_u(1 + \kappa), \quad (2)$$

так как в рамках новой СИ при определении килограмма на основе фиксированного значения постоянной Планка и независимого определения моля на основе фиксированного значения постоянной Авогадро необходимо отказаться от

постоянной M_U и ввести вместо нее переменную M'_U из (1), в которой содержится

$$\kappa = 2R_\infty h N_A I(A_r(e)\alpha^2 c M_U) - 1.$$

Это связано с тем, что существует известное соотношение между скоростью света в вакууме c , молярной постоянной M_U , относительной атомной массой электрона $A_r(e)$, постоянными тонкой структуры α , Авогадро N_A и Ридберга R_∞ :

$$R_\infty I(A_r(e)\alpha^2) = M_U c / (2h N_A).$$

Здесь $M_U = 10^{-3}$ кг/моль и $M_U = M(^{12}\text{C})/12$, где $M(^{12}\text{C})$ — молярная масса углерода. В настоящее время константы c и M_U зафиксированы, тогда как $A_r(e)$, R_∞ и α определяются из опыта с высокой точностью (порядка 10^9 и выше). Если фиксируется значение N_A , то получается определенным образом заданная переменная масса атома углерода. Кроме того, изменение статуса M_U , которое произойдет при реализации определения килограмма на основе постоянной Планка h , приведет к усложнению сложившейся практики точных измерений количества вещества в различных областях науки и промышленности, так как молярная масса любого элемента X равна

$$M(X) = A_r(X) M'_U, \quad (3)$$

где M'_U , введенная в (1) переменная «постоянная» молярной массы, которая теперь будет зависеть от относительных экспериментальных неопределенностей на уровне 10^{-9} . Причем этими поправками нельзя пренебречь, поскольку значения $A_r(X)$ известны с точностью порядка 10^{10} и выше. Такое положение дел неудовлетворительно.

Однако можно воспользоваться другим вариантом переопределения килограмма, который сохраняет преемственность с действующей СИ. Этот вариант основан на фиксированных значениях постоянных Авогадро и молярной массы. При этом желательно, чтобы выполнялись следующие количественные критерии преемственности и возможной временной нестабильности [23]: для новых прототипов должна быть подтверждена их согласованность с международным прототипом килограмма (МПК) с относительной стандартной неопределенностью на уровне $2 \cdot 10^{-9}$ и возможная временная нестабильность за год на уровне $5 \cdot 10^{-10}$ или менее. Эти количественные критерии согласованности новых прототипов килограмма с МПК и их стабильности получены исходя из требуемой максимальной точности определения постоянных Планка и Авогадро и сохранения преемственности с действующей СИ, а также зафиксированной временной нестабильности копий МПК за 100 лет [24].

Тогда новый килограмм 1 кг^* (здесь и далее * будут отмечены единицы, определяемые при фиксированном значении N_A) согласно введенному критерию может отличаться от МПК не более чем на $2 \cdot 10^{-9}$ по относительной стандартной неопределенности, поэтому в соотношениях, куда входят постоянная Авогадро, определенная с точностью порядка 10^8 , и новый килограмм, можно положить $1 \text{ кг}^* = 1 \text{ кг}$. В отличие от (3) для вычисления молярных масс это допустимо, поскольку в следующем соотношении участвует величина,

определенная с точностью порядка 10^8 , и в данном случае в отличие от (2) имеем

$$m(^{12}\text{C}) N_A = 12 M_U, \quad (4)$$

где M_U — известная постоянная молярной массы, равная 10^{-3} кг/моль, которая определена в рамках действующей СИ.

Из (4) можно сделать вывод, что при фиксированных значениях M_U и N_A получают также фиксированное значение $m(^{12}\text{C}) = m(^{12}\text{C})^*$. Этот вывод вполне приемлем с физической точки зрения, так как масса атома углерода является природным инвариантом. Таким образом, получаем следующее определение единицы массы:

*килограмм**, единица массы, является точной массой $\{N_A^*\} / 0,012$ свободных атомов углерода-12 в состоянии покоя и в основном квантовом состоянии.

Большим преимуществом этого определения единицы массы является то, что оно одновременно приводит к новому определению единицы количества вещества:

*моль**, единица количества вещества, содержит $\{N_A^*\}$ структурных элементов данного вещества.

В качестве N_A^* следует взять наиболее точное экспериментальное значение N_A , например, полученное в рамках Международного проекта «Авогадро», которое на уровне достоверности 68 % (1 σ -интервал) лежит в пределах [3]:

$$\{N_A\} = (6,02214066 \dots 6,02214102) \cdot 10^{23}.$$

С учетом, что фиксированное число Авогадро $\{N_A^*\}$ должно делиться на 12 [23], можно выбрать

$$\{N_A^*\} = 602214087869325727188096.$$

Такие определения килограмма и моля согласуются с существующими определениями этих единиц в рамках СИ и той связью, которая между ними существует. Следовательно, в этом случае можно сохранить существующие значения $M(^{12}\text{C}) = 12$ г/моль и $M_U = 1$ г/моль. Поэтому с учетом условия, что моль уже определен, можно при сохранении существующей связи между молем и килограммом в действующей СИ представить краткое определение килограмма [23]:

*Килограмм** — это такая единица массы, при которой молярная масса углерода-12 равна 12 г/моль.

Заметим, что согласованная фиксация постоянных Авогадро N_A и молярной массы M_U , которая приводит к связи между числом атомов углерода, задающим килограмм, и числом этих атомов, задающим моль, имеет своим следствием фиксацию еще двух констант, а именно: массы атома углерода m_C^* и естественной единицы количества вещества [20]:

$$1 \text{ ent} = \{N_A^*\}^{-1} \text{ моль}.$$

Таким образом, когда фиксируем постоянную Авогадро $N_A = N_A^*$, получаем взаимно-однозначное соответствие между молем и новой единицей количества вещества 1 ent , которая в этом случае является дольной единицей количества вещества. Аналогично при фиксации $M(^{12}\text{C})$ и N_A имеем одно фиксированное значение $m(^{12}\text{C})^*$, а значит и фиксированное значение а.е.м. или дальтона:

$$\text{Da}^* = m(^{12}\text{C})^*/12.$$

Заметим, что в [25] также предлагалось сохранить фиксированное значение $M(^{12}\text{C})$, однако при одновременной фиксации постоянной Планка h . Тогда постоянная Авогадро остается нефиксированной и сохраняется действующее в настоящее время определение моля. Тем не менее, существует другая возможность — одновременная фиксация N_A и $M(^{12}\text{C})$ [23]. В этом случае постоянная Планка должна быть включена в класс электромагнитных квантовых констант, куда кроме нее входят постоянные электрического заряда электрона e , Джозефсона K_J и фон Клитцинга R_K . Причем согласованное определение точных значений этих констант может быть осуществлено только после создания квантового стандарта силы тока [13] и переопределения кельвина, килограмма и моля.

Выводы. Разработчики новой СИ признают, что ключевые аспекты этой системы весьма запутаны. Вместе с непроясненными вопросами, связанными с опубликованной научной критикой новой СИ и последними научными открытиями, способными значительно улучшить предполагаемые изменения, это, безусловно, ставит под сомнение правильность решения о ее скорейшей реструктуризации в предлагаемом виде.

Таким образом, предлагается на 25-й ГКМВ уточнить Резолюцию 1, принятую на 24-й ГКМВ, а Консультативному комитету по единицам (ККЕ) — возобновить дискуссии по пересмотру СИ с учетом альтернативных точек зрения, чтобы исправить замеченные недостатки. Желательно, чтобы на заседания ККЕ, посвященные этим вопросам, были допущены наблюдатели и дополнительные эксперты [26]. Не существует жесткой необходимости в скорейшем принятии новой СИ, для которой, в частности, требуется введение искусственной новой константы k и где присутствуют некоторые недостаточно продуманные определения. Если этого не сделать, то последующие исправления новой СИ повлекут за собой большие затраты времени и средств.

Литература

1. **BIPM 2011.** 24 CGPM Resolutions [Официальный сайт]. http://www.bipm.org/utls/common/pdf/24_CGPM_Resolutions.pdf (дата обращения 24.10.2012 г.).
2. **Steiner R.** History and progress on accurate measurements of the Planck constant // *Rep. Prog. Phys.* 2013. V. 76. P. 016101(1—46).
3. **Andreas B. e. a.** (IAC) Counting the atoms in a ^{28}Si crystal for a new kilogram definition // *Metrologia*. 2011. V. 48. P. S1—13.
4. **Mills I. M. e. a.** Redefinition of the kilogram: a decision whose time has come // *Metrologia*. 2005. V. 42. P. 1—80.
5. **Mills I. M. e. a.** Redefinition of the kilogram, ampere, kelvin and mole: a proposed approach to implementing CIPM Recommendation 1 (CI-2005) // *Metrologia*. 2006. V. 43. P. 227—246.
6. **Berengut J. C. e. a.** Atomic transition frequencies, isotope shifts, and sensibility to variation of the fine structure constant // *arXiv*: 1011.4136. 2011. P. 1—24.
7. **Ивашук В. Д., Кононогов С. А., Мельников В. Н.** Анализ результатов измерений постоянной тонкой структуры и их влияния на новые определения единиц СИ // *Измерительная техника*. 2011. № 8. С. 25—28; **Ivashchuk V. D., Kononogov S. A., Melnikov V. N.** An analysis of the results of measurements of the fine-structure constant and their effect on the new definitions of the SI units // *Measurement Techniques*. 2011. V. 54. N 8. P. 887—892.

8. **Hill T. P., Miller J.** How to combine independent data sets for the same quantity // *Chaos*. 2011. V. 21. P. 3.
9. **Fraundorf P.** A multiple of 12 for Avogadro // *arXiv*. 2012. 1201.5537. P. 1—3.
10. **Lan S-Y. e. a.** A Clock Directly Linking Time to a Particle's Mass // *Sci*. 2013. N 1. P. 554—557.
11. **Chou C-W. e. a.** Frequency Comparison of Two High-Accuracy Al + Optical Clocks // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104(7).
12. **Gill P.** When should we change the definition of the second? // *Phil. Trans. R. Soc. A*. 2011. V. 369. P. 4063—4078.
13. **Хрущев В. В.** Об оптимальном наборе фундаментальных физических констант с фиксированными значениями для переопределения единиц СИ // *Измерительная техника*. 2011. № 10. С. 3—8; **Khruschov V. V.** Optimum choice of fundamental physical constants with fixed values for redefinition of SI units // *Measurement Techniques*. 2011. V. 54. N 10. P. 1103—1110.
14. **Hill T. P., Miller J., Censullo A. P.** Towards a Better Definition of the Kilogram // *Metrologia* 2011. V. 48. P. 83—86.
15. **Chyla W. T.** On the proposed redefinition of the mole // *Metrologia*. 2012. V. 49. P. L11—13.
16. **Бронников К. А., Мельников В. Н.** Фундаментальные константы и переход на новые определения единиц СИ // *Измерительная техника*. 2010. № 11. С. 3—9; **Bronnikov K. A., Melnikov V. N.** The fundamental constants and the transition to the new definitions of the SI units // *Measurement Techniques*. 2010. V. 53. N 11. P. 1196—1203.
17. **Hill T. P.** Criticisms of the proposed «New SI» // *Accreditation and Quality Assurance*. 2011. V. 16 (8—9). P. 471—472.
18. **BIPM.** New SI: Discussion in the Scientific Literature [Официальный сайт]. http://www.bipm.org/en/si/new_si/ (дата обращения 10.04.2013 г.).
19. **De Bièvre P.** // *Accreditation and Quality Assurance*. 2011. V. 16(3).
20. **Leonard B. P.** Why the Dalton should be redefined exactly in terms of the kilogram // *Metrologia*. 2012. V. 49. P. 487.
21. **Калинин М. И., Кононогов С. А.** Переопределение единицы термодинамической температуры и международная система единиц (СИ) // *Теплофизика высоких температур*. 2010. Т. 48. №1. С. 26—29; **Kalinin M. I., Kononogov S. A.** Redefinition of the Unit of Thermodynamic Temperature in the SI System // *High Temperat.* 2010. V. 48. P. 23—28.
22. **Taylor B. N.** Molar mass and related quantities in the New SI // *Metrologia*. 2009. V. 46. P. L16—19.
23. **Исаев Л. К., Кононогов С. А., Хрущев В. В.** О переопределении четырех основных единиц СИ // *Измерительная техника*. 2013. № 2. С. 3—8.
24. **Davis R. S.** Possible new definitions of the kilogram // *Phil. Trans. R. Soc. London*. 2005. V. A363. P. 2249—2264.
25. **Jeannin Y.** What is a mole?: old concepts and new (continued) // *Chem. Int.* 2010. V. 32. N1. P. 8—11.
26. **CCU Membership.** [Официальный сайт]. http://www.bipm.org/en/committees/cc/ccu/ccu_criteria.html (дата обращения 10.04.2013 г.).

Дата принятия 19.04.2013 г.