

Dzięki rozwojowi nowoczesnych technik pomiarowych precyzja z jaką współczesna spektroskopia pozwala określić energię dysocjacji i energię przejść w cząsteczce wodoru i jej odmianach izotopowych przekroczyła próg 10^{-4} cm^{-1} . Nakłada to również na metody teoretyczne konieczność zwiększenia dokładności przewidywanych przez nie wyników. W ramach projektu zamierzamy zastosować nową metodę bardzo dokładnego rozwiązywania równania Schrödingera. Pozwoli ona dla H_2 obliczyć nierelatywistyczną energię dysocjacji poziomów rotacyjno-wibracyjnych z nieosiągalną dotąd dokładnością rzędu 10^{-7} cm^{-1} . Zastosowanie tej metody do wszystkich stanów związanych różnych odmian izotopowych cząsteczki wodoru przyniesie efekt w postaci pełnego zestawu wyników o znaczeniu referencyjnym.

Realizacja badań zaplanowanych w niniejszym projekcie, w zestawieniu z nowymi wynikami badań eksperymentalnych, umożliwi w przyszłości wyznaczenie z wyższą niż dostępna dzisiaj precyzją takich stałych fizycznych jak stała Rydberga czy stosunek masy protonu do elektronu. Pomoże też w rozstrzygnięciu zagadki promienia ładunkowego protonu oraz w zawężeniu ograniczeń na parametry hipotetycznej piątej siły.

Precyzja z jaką potrafimy obecnie wyznaczyć teoretycznie energię dysocjacji poziomu podstawowego H_2 jest ograniczona przez nieznaną naturę efektów skończonej masy jąder w poprawce relatywistycznej i QED. Mając do dyspozycji otrzymane w ramach niniejszego projektu funkcje falowe będziemy w stanie precyzyjnie określić te efekty i znieść to ograniczenie dokładności. Funkcje takie będą również użyte w przyszłości do precyzyjnego wyznaczania innych własności molekularnych (np. elektrycznych czy magnetycznych).