

W zestawieniu z chwytliwymi i (faktycznie przecież ciekawymi) problemami na froncie badań fizycznych, takimi jak teoria strun, kwantowa grawitacja czy informatyka kwantowa, walka o kolejne miejsca po przecinku w energii dysocjacji cząsteczki wodoru wydać się może wręcz rodzajem nudnej księgowości. Może nawet „sztuką dla sztuki”, praktykowaną przez grono zapaleńców. Pod tym płaszczykiem kryje się jednakże bardzo interesująca klasa problemów czekających na rozwiązanie.

Współczesna spektroskopia pozwala z dużą dokładnością mierzyć własności atomów i cząsteczek chemicznych, takie jak energie przejść pomiędzy poziomami energetycznymi układu czy energia potrzebna do rozerwania wiązania chemicznego. Daje to całkiem niezły wgląd w strukturę materii, z jakiej zbudowany jest nasz świat. Próbując odtworzyć te wyniki na drodze teoretycznej jesteśmy w stanie zweryfikować, na ile rzeczywiście rozumiemy prawa fizyki. Uzyskanie wyniku zgodnego w wielu cyfrach znaczących z doświadczeniem sprawia wielką satysfakcję i jednocześnie wprawia w podziw dla elegancji z jaką działa Przyroda. Jeżeli pojawia się rozbieżność, która nie znika pomimo ulepszania technik obliczeń i zwiększania ich precyzji, tym lepiej – oznacza to, że jest coś nowego do zbadania i zrozumienia. Jest to pasjonującą łamigłówką, a do tego ma jeszcze ważne praktyczne zastosowanie. Zestawiając bowiem wyniki dokładnych pomiarów z liczbami uzyskanymi teoretycznie jesteśmy w stanie wyznaczać wielkość stałych fizycznych, jak na przykład stała  $R_{\infty}$  Rydberga, czy promień ładunku protonu. Zwłaszcza ten drugi cieszy się ostatnimi czasy popularnością z powodu pojawienia się rozbieżności pomiędzy teorią a eksperymentem. Bywa też, że to bardzo dokładny wynik teoretyczny pozwala na znalezienie błędu w eksperymencie, czego słynnym przykładem jest wartość energii dysocjacji  $H_2$  obliczona przez Kołosa i Wolniewicza dokładniej niż pomiary przyszłego noblisty Herzberga.

Aby odtworzyć wyniki spektroskopowe na drodze obliczeń teoretycznych, niezbędna jest znajomość nie tylko „standardowej”, nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, ale także efektów pochodzących od szczególnej teorii względności oraz elektrodynamiki kwantowej (QED, uznawanej za najlepiej zweryfikowaną teorię fizyczną). Co więcej, dochodzi do tego jeszcze konieczność uwzględnienia, że wbrew często przyjmowanym przybliżeniom (adiabatycznemu i Born-Oppenheimera) elektrony w atomach i cząsteczkach nie krążą wokół jąder, ale to wszystkie elementy układu poruszają się. To trochę podobne do przybliżenia, że Ziemia krąży wokół nieruchomego Słońca – w codziennych zastosowaniach to w zupełności wystarczające, a jednak nie do końca prawdziwe. Poprawek tych zaczyna być na tyle dużo, że konieczne staje się wprowadzenie jakiegoś systematycznego podejścia do ich uwzględniania. Z pomocą przychodzą tu formalizmy „nierelatywistycznej elektrodynamiki kwantowej” (NRQED), który uwzględnia efekty relatywistyczne i kwantowo-elektrodynamiczne oraz „nieadiabatycznego rachunku zaburzeń” (NAPT), który pozwala na wyjście poza wspomniane przybliżenia dotyczące jąder. Razem tworzy to dwuwymiarową siatkę poprawek, które można obliczać. Obecnie bardzo wiele spośród tych wielkości jest znanych z dobrą dokładnością. Jednakże wciąż występuje niezgodność teorii z doświadczeniem – na 8 cyfrze znaczącej. Może wydawać się to nieistotną różnicą, ale co ciekawe, ostatnie dokładne obliczenia *powiększyły* rozbieżność, zamiast ją zmniejszyć. Głównym podejrzanym spowodowania takiego stanu rzeczy jest tzw. wiodąca relatywistyczna poprawka nieadiabatyczna, czyli pierwszy z członów mieszanych (NRQED-NAPT), którego to nie znamy wystarczająco dokładnie.

Dokładne obliczenie tej poprawki jest celem niniejszego projektu. Znając jej wartość nie tylko sprawdzimy, czy używana przez nas teoria dobrze działa, ale, jak wspomniano wcześniej, odblokujemy drogę do lepszego zmierzenia niektórych fundamentalnych stałych. Co może nieco mniej istotne dla szerokiej publikacji, ale niewątpliwie jednakowo ważne dla nas, będzie to zadanie wymagające zastosowania i przetestowania ciekawych metod i sztuczek obliczeniowych, a zatem tego, co osoba zajmująca się fizyką lub chemią teoretyczną byłaby skłonna nazwać dobrą zabawą!