

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

Choć oddziaływanie jąder atomowych z zewnętrznym polem magnetycznym jest bardzo słabym oddziaływaniem w cząsteczkach, może dostarczyć wielu cennych informacji o atomach i cząsteczkach. Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (NMR), która mierzy te efekty ma szerokie zastosowanie - począwszy od określania dokładnych wzorów strukturalnych cząsteczek, aż po diagnostykę obrazową.

Rozwój techniki NMR ograniczony jest nie tylko przez aparaturę, ale również przez dokładność wartości referencyjnych używanych przy pomiarach. Za uniwersalny standard w spektroskopii NMR przyjmuje się stałą ekranowania atomu helu-3, która może być wyznaczona jedynie metodami teoretycznymi. Co ciekawe, aby obliczyć stałą ekranowania jak najdokładniej, tak aby sprostała wymaganiom współczesnej techniki nie wystarczy mechanika kwantowa w sformułowaniu Schrödingera. Choć przewiduje ona właściwości atomów całkiem dokładnie, nie jest to wystarczające dla tak precyzyjnej techniki jaką jest spektroskopia NMR. Dopiero poprzez stosowanie formalizmu elektrodynamiki kwantowej - najdokładniejszej znanej nam teorii - możliwe jest uzyskanie wyniku w pełni satysfakcjonującego. Szczególnym wyzwaniem w proponowanym projekcie jest uwzględnienie efektów spowodowanych obecnością dwóch elektronów w atomie helu. Opisanie oddziaływań wynikających z korelacji elektronowej jest nietrywialnym zadaniem, ponieważ do tej pory podobne obliczenia prowadzone były tylko dla układów jednoelektronowych.

Ostatecznym wynikiem projektu będzie ultraprecyzyjnie obliczona wartość stałej ekranowania dla atomu helu-3. Możliwość wykorzystania najbardziej fundamentalnych metod teoretycznych i wysokiej precyzji metod obliczeniowych pozwala uzyskać rezultat, który ustanowi nowe standardy dokładności i posłuży jako punkt odniesienia dla obliczeń z układami bardziej złożonymi.