

Nieadiabatyczna poprawka relatywistyczna w cząsteczkach dwuelektronowych

Dzięki rozwojowi nowoczesnych technik pomiarowych precyzja z jaką współczesna spektroskopia pozwala określić energię dysocjacji i energię przejść między poziomami w cząsteczce wodoru i jej odmianach izotopowych przekroczyła próg 10^{-4} cm^{-1} . Tak precyzyjne pomiary są już czułe na drobne kwantowe efekty relatywistyczne i elektrodynamiczne. Aby zrozumieć i opisać ilościowo pochodzenie tych efektów konieczny jest równoległy rozwój metod teoretycznych wyjaśniających obserwowane zjawiska. Potrzeba wzajemnego dotrzymywania kroku przez teorię i eksperyment w zakresie uzyskiwanej precyzji wynika również z faktu, iż wiele parametrów atomowych i molekularnych oraz stałych fizycznych jest wyznaczana poprzez zestawienie wyników pochodzących z obu tych dziedzin nauki. A wtedy, o końcowej precyzji wyniku decyduje składnik o niższej precyzji.

Cel prowadzonych badań W przeciwieństwie do eksperymentu, na teoretyczny wynik energii dysocjacji danego poziomu energetycznego cząsteczki składa się kilka elementów. Wśród nich dominująca jest energia nierelatywistyczna, którą należy uzupełnić małymi poprawkami pochodzącymi od kwantowych efektów relatywistycznych i elektrodynamicznych. Niniejszy projekt poświęcony jest poprawce relatywistycznej do poziomów rotacyjno-oscylacyjnych w lekkich cząsteczkach dwuelektronowych takich jak cząsteczka wodoru i jej odmiany izotopowe czy kation wodoru helu. Cechą charakterystyczną projektu jest skupienie się na pełnym uwzględnieniu wpływu skończonej masy jąder atomowych na tę poprawkę. W planowanych obliczeniach nie będzie stosowane popularne przybliżenie Born-Oppenheimera związane z osobnym traktowaniem ruchu elektronów i jąder, dzięki czemu precyzja obliczeń tej poprawki wzrośnie nawet 10000 razy w stosunku do uzyskiwanej obecnie.

Zastosowana metoda badawcza Poprawka relatywistyczna będzie wyznaczana jako wartość oczekiwana hamiltonianu relatywistycznego. Aby skutecznie wykonać takie obliczenia, konieczne będzie znalezienie nowej, nie znanej dotąd klasy całek. Temu zadaniu poświęcona będzie najtrudniejsza i najbardziej czasochłonna część projektu. W dalszej części badań zastosowane będą najdokładniejsze znane obecnie nieadiabatyczne wykładnicze funkcje falowe. Dla uzyskania zamierzonych efektów konieczne będzie posługiwanie się macierzami o rozmiarach sięgających pół miliona. Uzyskanie planowanych wyników w rozsądnym czasie będzie wymagało zastosowania zaawansowanych metod programistycznych pozwalających na efektywne zrównoleglenie obliczeń.

Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki Otrzymane wyniki umożliwią praktycznie usunięcie z całkowitego budżetu błędów efektów relatywistycznych. Porównanie wyników teoretycznych z eksperymentalnymi będzie krytycznym testem teorii rozwijanej i stosowanej dla różnych układów molekularnych. Uzyskane wyniki można będzie wykorzystać do interpretacji, a nawet do korekty istniejących wyników pochodzących z ultra-precyzyjnych pomiarów spektroskopowych, przyczyniając się także do lepszego zrozumienia mechanizmów powstawania kształtów linii widmowych. Co więcej, realizacja niniejszego projektu będzie silną motywacją do przeprowadzenia kolejnych eksperymentów. Najdokładniejsze rezultaty jakie kiedykolwiek uzyskano dla cząsteczek dwuatomowych, będą służyły jako wartości referencyjne dla badań w różnych obszarach chemii i fizyki, a nawet do poszukiwania nowych zjawisk wychodzących poza Model Standardowy. Realizacja badań zaplanowanych w niniejszym projekcie, w zestawieniu z nowymi wynikami badań eksperymentalnych, umożliwi w przyszłości wyznaczenie z wyższą niż dostępna dzisiaj precyzją szeregu własności molekularnych (np. elektrycznych czy magnetycznych). Proponowany projekt jest kamieniem milowym w długofalowym planie zwiększenia dokładności przewidywań teoretycznych dla cząsteczki wodoru i innych cząsteczek dwuelektronowych.