

Obserwacja rozszczepienia poziomów energetycznych w atomie wodoru, nazwana od jednego z odkrywców przesunięciem Lamba, zaowocowała swoistą rewolucją w postrzeganiu rzeczywistości. W ramach elektrodynamiki kwantowej (QED), kwantowej teorii pola opisującej wszystkie znane nam zjawiska elektromagnetyczne, w której składniki materii i ich oddziaływania reprezentowane są przez pola, a nie punktowe cząstki, możliwe jest zrozumienie i precyzyjne obliczenie wszelkich obserwowanych eksperymentalnie zjawisk w fizyce atomowej z niebywałą precyzją i zgodnością z eksperymentem.

Specyficznym i jednocześnie przełomowym momentem w chemii i fizyce były numeryczne obliczenia energii dysocjacji molekuly wodoru wykonane przez Kołosa i Wolniewicza, gdyż po raz pierwszy wynik teoretyczny dla układu, który nie jest rozwiązywalny analitycznie, okazał się dokładniejszy niż ówczesne pomiary spektroskopowe. W następstwie rozpoczęła się, trwająca obecnie ponad pół wieku, swoista rywalizacja między teorią a eksperymentem o lepszą precyzję wyniku. Owocem tej gonitwy, jest wciąż postępująca weryfikacja wiedzy o najbardziej fundamentalnych własnościach otaczającego nas świata. Podważanie dobrze ugruntowanych praw i teorii oraz zestawianie przewidywań teoretycznych z doświadczeniem jest właściwie esencją metody naukowej, która to nieustannie stara się znaleźć odstępstwa od powszechnie akceptowanego modelu i poszukiwać luk w naszym rozumieniu.

Współcześnie, szybki postęp technologii laserowej, w połączeniu z rozwojem wysublimowanych i najnowocześniejszych technik pomiarowych umożliwia pomiary spektroskopowe z dokładnością lepszą niż jedna część na miliard. Z drugiej strony, interpretacja takiego rezultatu wymaga wykonania złożonych obliczeń numerycznych, które bazują na powszechnie uznawanym modelu teoretycznym, uwzględniających liczne subtelne efekty związane z relatywistką oraz kwantową strukturą układu.

Jednym z celów badań prowadzonych w ramach mojej rozprawy doktorskiej jest wykonanie obliczeń numerycznych struktury elektronowej molekuly wodoru, z uwzględnieniem poprawek wynikających z elektrodynamiki kwantowej oraz skończonej masy jąder atomowych. Najnowsze pomiary wskazują na rozbieżność energii przejścia rowibracyjnego tonu podstawowego w cząsteczce HD o około 2σ (czyli z około 95% pewnością) w stosunku do najdokładniejszych obliczeń numerycznych. Używanie dokładniejszego wyniku na podstawie obecnej teorii umożliwi dalszą weryfikację. Jeśli nowe obliczenia przyczynią się do powiększenia tej rozbieżności, poza granicę błędu pomiarowego, to będzie to potencjalny sygnał braku zrozumienia modelu teoretycznego.

Od strony teoretycznej, precyzja z jaką mogą zostać wyznaczone energie przejść rowibracyjnych jest ograniczona nieznanymi efektami, związanymi z wpływem skończonej masy jąder na poprawki wynikające z elektrodynamiki kwantowej. W ramach sformułowanej niedawno, Nieadiabatycznej Teorii Zaburzeń (NAPT), możliwe jest systematyczne obliczenie takich poprawek, uzyskując precyzję dorównującą najnowszym eksperymentom.

Równolegle badanym przeze mnie zagadnieniem są obliczenia struktury elektronowej dla trójelektronowego atomu litu, z uwzględnieniem poprawek QED rzędu wyższego niż wiodący. Obliczenia te mogą przyczynić się do lepszego zrozumienia systematyki efektów tak zwanego przesunięcia izotopowego, w szczególności dla izotopów litu, charakteryzujących się tak zwanym halo neutronowym. Precyzyjna spektroskopia i dorównujące jej obliczenia umożliwią prześledzenie tych efektów z dokładnością nieosiągalną przez inne metody.