

Anna Spyszkiewicz
annspy@amu.edu.pl

Dokładne wyznaczanie własności atomu helu i cząsteczki wodoru z wykorzystaniem funkcji jawnie skorelowanych

STRESZCZENIE

Rozprawa doktorska poświęcona jest wyznaczaniu dokładnych przewidywań teoretycznych własności atomowego helu i molekuly wodoru w ramach teorii NRQED oraz z wykorzystaniem funkcji jawnie skorelowanych. Wymagało to rozwinięcia metod obliczeniowych, zbudowania oprogramowania dedykowanego poszczególnym zagadnieniom, a następnie wykonania złożonych obliczeń numerycznych.

Obliczenia dotyczące molekuly wodoru zostały wykonane w podejściu w pełni nieadiabaticznym. Dla H_2 , HD oraz HT został wyznaczony wiodący rząd stałej ekranowania, który uwzględnia efekty skończonej masy jądra. Na podstawie otrzymanych wyników dla HD i HT oraz dostępnych pomiarów NMR zostały wyznaczone momenty magnetyczne deuteronu i trytonu. Jeśli przedstawiony w pracy wynik stałej ekranowania dla H_2 zostanie uzupełniony o poprawkę relatywistyczną, możliwe będzie ustalenie bezwzględnej skali przesunięć chemicznych w spektroskopii NMR protonu. W przypadku helu-3 została wyznaczona stała ekranowania razem z poprawką QED. Dokładność wyniku pozwala na ustanowienie nowego standardu dla absolutnej magnetometrii.

W pracy zostały przedstawione wyniki dotyczące poziomów energii cząsteczki wodoru. Po uwzględnieniu poprawki QED do energii dysocjacji HD otrzymano wynik, który był rozbieżny z dostępnym wówczas eksperymentem o 3.2σ . Po 4 latach ukazała się publikacja przedstawiająca wynik nowego pomiaru, który potwierdził nasze przewidywania. Przedstawione wyniki nieadiabaticznej poprawki relatywistycznej dla cząsteczek H_2 oraz HD w stanach wzbudzonych rotacyjno-wibracyjnie $J = 1, 2$, $v = 0, 1, 2$, mają potencjał zostać wykorzystane do wyznaczenia energii przejść, wychodząc naprzeciw najdokładniejszym obecnie eksperymentom.

Accurate determination of helium atom and hydrogen molecule properties using explicitly correlated functions

ABSTRACT

The doctoral dissertation concerns accurate theoretical predictions of atomic helium and hydrogen molecule properties. The calculations were performed with the use of explicitly correlated functions and the NRQED theory, that required development of computational methods, and dedicated software for each task.

The direct nonadiabatic approach was used in all calculations regarding the hydrogen molecule. The leading order of the shielding constant was determined for the H₂, HD and HT molecules. The obtained HD and HT shielding constant values were used for determination of deuteron and triton magnetic moment. Moreover, supplementing the H₂ shielding constant with a relativistic correction, may result in determination of the absolute scale of chemical shifts in the proton NMR spectroscopy. In case of the helium-3 shielding constant, the QED correction was determined. The accuracy of obtained value permits establishing a new standard for absolute magnetometry.

Moreover, the results of the hydrogen molecule energy levels were presented. Applying the determined QED correction to the HD dissociation energy led to acquiring results that diverged over 3σ from those obtained in experiment. Four years later, the result of a new experiment was published confirming our predictions. The presented results of the nonadiabatic relativistic correction for H₂ and HD molecules in rovibrational excited states $J = 1, 2$, $v = 0, 1, 2$ have the potential to be used for determination of the transition energies and thus verifying experimental data.