

Započtení vlivu relativistických efektů na atomová spektra

Vedoucí projektu: doc. Mgr. Jaroslav Zamastil, Ph.D.
Katedra chemické fyziky a optiky

jaroslav.zamastil@mff.cuni.cz

Atomová fyzika je stále živý obor fyziky, který se rozvíjí a má význam pro jiné fyzikální obory jako je fyzika elementárních částic, molekulová fyzika, astrofyzika a fyzika plazmatu. Spektroskopická měření v některých případech dosáhla relativní přesnosti 1 díl v 10^{16} . Pro správnou teoretickou interpretaci těchto měření je nutné popisovat pohyb elektronů v atomu v rámci relativistické kvantové mechaniky a kvantové elektrodynamiky.

Jedna z obtíží, kterou s sebou přináší relativistický popis je, že tzv. jednočásticový Hamiltonův operátor, který určuje pohyb elektronu v atomu, nemá zespoda omezené spektrum. To způsobuje, že se zpřesňováním přibližného, tzv. variačního, výpočtu energie základního stavu atomu neklesá monotonně dolů, což znemožňuje věrohodnou extrapolaci přibližných výpočtů k přesným řešením.

Stávající metoda redukce relativistické vlnové funkce na nerelativistickou limitu, tzv. Foldy-Wouthuysenova transformace, má nevýhodu, že se při ní ztratí správné relativistické chování vlnové funkce v blízkosti atomového jádra. To způsobuje značnou nepřesnost při výpočtu efektů jako je např. hyperjemná struktura spektrálních čar těžkých atomů.

V nedávné práci [1] jsme vyvinuli nový přístup k relativistickému popisu elektronů v atomu. V rámci tohoto přístupu je možné dostat nerelativistickou limitu takovým způsobem, že se při ní neztratí správné chování vlnové funkce v blízkosti jádra. Cílem projektu by bylo tuto možnost systematicky prozkoumat.

Literatura:

- [1] T. Uhlířová, J. Zamastil and J. Benda, Calculation of Atomic Integrals between Relativistic Functions by means of Algebraic Methods, submitted to Computer Physics Communication