

Streszczenie pracy doktorskiej

mgr inż. Małgorzata Wołczyr

„Teoretyczne badania stanów związanych pozytonu i asymetrycznych izotopomerów jonu H_2^+ , w formalizmie zmodyfikowanego przybliżenia adiabatyicznego”

Przybliżenie adiabatyiczne jest podstawą niemal wszystkich przeprowadzanych obecnie obliczeń kwantowomechanicznych. Opiera się ono na założeniu, że cięższe jądra atomowe ze względu na większą masę poruszają się znacznie wolniej niż elektrony. Pozwala to na przedstawienie funkcji falowej w postaci iloczynu funkcji jądrowej, zależnej tylko od położenia jąder, oraz elektronowej, która od położenia jąder zależy parametrycznie, przy czym ta ostatnia jest konstruowana tak, jakby jądra miały nieskończoną masę. Dla cięższych atomów takie przybliżenie działa dobrze, jednak dla lekkich jąder, gdzie ruch odbywa się w krótszej skali czasowej, opis adiabatyiczny może być niewystarczający.

Celem pracy było włączenie efektu skończonej masy jąder do formalizmu przybliżenia adiabatyicznego na etapie rozwiązywania zagadnienia elektronowego - poprzez modyfikację ładunków jąder. Ma to umożliwić badanie zjawisk określanych jako nieadiabatyiczne w ramach opisu adiabatyicznego. Praca skupia się na dwóch potencjalnych zastosowaniach proponowanej metody – pozytonowych stanach związanych oraz asymetrii ładunku w heteroizotopowych cząsteczkach homojądrowych.

Przebadane zostały cztery atomy pozytonowe, różniące się mechanizmem i energią wiązania pozytonu – słabo związany pozytonowy beryl (e^+Be), silnie wiążący e^+ pozytonowy magnez (e^+Mg) oraz związki wodoru i litu z atomem pozytonium (PsH i LiPs). Dla wszystkich wymienionych układów istnieją dokładne wyniki odniesienia, pozwalające ocenić jakość zastosowanej metody. Dodatkowo w celu poprawy otrzymanych wartości, przetestowana została półempiryczna procedura, polegająca na wprowadzeniu masy efektywnej pozytonu.

Obliczenia wykonano także dla trzech układów molekularnych: pozytonowego wodoru litu (e^+LiH), dla którego znane są dokładne wartości energii wiązania i szybkości anihilacji, pozytonowego fluorowodoru (e^+HF) oraz pozytonowego cyjanowodoru (e^+HCN). Zmodyfikowane przybliżenie adiabatyiczne potwierdziło stabilność e^+HF , dla którego do tej pory istniały jedynie przewidywania teoretyczne, oraz pozwoliło na pierwsze w literaturze oszacowanie szybkości anihilacji e^+HCN .

Trzecią grupą badanych układów były heterojądrowe izotopomery jonu H_2^+ . Uzyskano tutaj pełne widmo stanów rowibracyjnych dla stanu podstawowego (HT^+ , DT^+) oraz pierwszego elektronowego stanu wzbudzonego (HD^+ , HT^+ , DT^+), przy czym wyniki dla stanów wzbudzonych jonów HT^+ i DT^+ są pierwszymi w literaturze.

Zmodyfikowane przybliżenie adiabatyiczne dla układów wiążących pozyton według pierwszego mechanizmu daje energie wiązania słabej jakości. Metoda nie nadaje się natomiast do badania związków z atomem pozytonium (PsH, LiPs). Niewątpliwą zaletą prezentowanego podejścia jest łatwe oszacowanie szybkości anihilacji pozytonowych cząsteczek, trudno dostępne dla innych metod. Wprowadzenie poprawki w postaci masy efektywnej poprawia otrzymane wartości w większości przypadków, jednak nie jest to podejście ściśle i przy braku teoretycznych podstaw prowadzi do wyników, które nie są ograniczone wariacyjnie.

Zmodyfikowane przybliżenie adiabatyiczne poprawnie odtwarza efekt asymetrii ładunku w heterojądrowych izotopomerach jonu H_2^+ , a także pozwala w łatwy sposób uzyskać widmo poziomów rowibracyjnych dla elektronowych stanów wzbudzonych, dostępnych do tej pory jedynie dla metod opartych na transformacjach Hamiltonianu oraz *coupled-states*.