

Dokumentacja projektu

Mikołaj Suszek, Hubert Rączkiewicz

8 grudnia 2025

1 Wstęp

Odkryte przez Erwina Schrödingera równanie falowe legło u podstaw nowego działu fizyki – mechaniki kwantowej. Dokonany przełom znalazł zastosowanie w wielu dziedzinach nauk ścisłych.

2 Cel projektu

Celem projektu jest utworzenie interaktywnej animacji wizualizującej poszczególne stany energetyczne w atomie wodoru, zarówno dla ustalonych liczb kwantowych jak i stanów przejściowych. Pozwoli to na lepsze zrozumienie konfiguracji elektronowych i wynikających z nich właściwości chemicznych i fizycznych wodoru.

3 Opis modelowania zjawiska fizycznego

Mianem chmury elektronowej w atomie określa się zagęszczenie prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym punkcie w przestrzeni. Jej kształt uzależniony jest od trzech liczb kwantowych: głównej, pobocznej i magnetycznej. Przy czym, liczby główna i poboczna wpływają na radialny rozkład prawdopodobieństwa, zaś na rozkład kątowy określają liczby poboczna i magnetyczna. Ilościowo prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w danym punkcie opisuje kwadrat modułu funkcji falowej elektronu. Istotą problemu jest analityczne lub numeryczne wyznaczenie funkcji falowej, będącej rozwiązaniem równania Schrödingera. Obecnie, równania Schrödingera zostało rozwiązane analitycznie wyłącznie dla atomu wodoru. Otrzymana funkcja falowa dana jest wzorem:

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = r^l \left(\frac{2}{na_0} \right)^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) e^{-r/na_0} \cdot (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{l,m}(\cos \theta) e^{im\varphi} \cdot e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (1)$$

4 Opis wykorzystywanych narzędzi

wersja języka Python: 3.9, IDE: PyCharm, wstępnie wytypowane do użycia biblioteki: NumPy, SymPy, SciPy, Matplotlib, PyVista

5 Ogólny opis projektu i możliwe alternatywy

Elementy bazowe:

- Moduł obliczający wartości funkcji falowej atomu wodoru w stanie stacjonarnym dla danych liczb kwantowych i na ich podstawie wyznaczający rozkład prawdopodobieństwa znalezienia elektronu.
- Moduł generujący siatkę przestrzeni do wizualizacji wartości.
- Zestaw funkcji pomocniczych m.in. konwertujących wartości między układami współrzędnych przestrzennych.
- Interaktywny moduł wizualizujący obliczone wartości.

Elementy dodatkowe:

- Moduł obliczający wartości funkcji falowej atomu wodoru w superpozycji stanów energetycznych (w trakcie przejścia elektronowych).
- Zestaw funkcji optymalizujących szybkość działania programu.
- Plik wykonywalny uruchamiający program poza konsolą.

6 Specyficzne wymagania

a) wymagania funkcjonalne:

- Program oblicza wartości funkcji falowej atomu wodoru dla danej siatki przestrzennej oraz określonych liczb kwantowych.
- Na podstawie wcześniej wyliczonych wartości funkcji falowej wyznacza lokalną gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w punkcie przestrzeni.
- Wizualizuje gęstość prawdopodobieństwa na trójwymiarowym wykresie.

b) wymagania niefunkcjonalne:

- Przy użyciu wielorakich metod optymalizuje czas obliczeń.
- Umożliwia zmianę parametrów wejściowych z poziomu programu.
- Pakuje zawarte funkcjonalności w pojedynczy plik wykonywalny.

7 Harmonogram pracy z zadaniami do wykonania

| | |
|-------------------------------------|--|
| Tydzień 1 (8.12.2025 - 14.12.2025) | Opracowanie szkieletu projektu. Utworzenie repozytorium Git, poszczególnych modułów wraz z szkicem ich funkcjonalności. |
| Tydzień 2 (15.12.2025 - 4.01.2026) | Praca nad modułem wyliczającym wartości funkcji falowej dla poszczególnych liczb kwantowych atomu wodoru. Opracowanie modułu liczącego gęstość prawdopodobieństwa na podstawie wejściowych wartości funkcji falowej. |
| Tydzień 3 (5.01.2026 - 11.01.2026) | Praca nad wizualizacją danych.= Dodanie możliwości zmiany parametrów danych wejściowych w trakcie wykonywania programu. |
| Tydzień 4 (12.01.2026 - 18.01.2026) | Optymalizacja kodu. Podniesienie niezawodności na błędy numeryczne. Utworzenie pliku wykonywalnego programu. |