

1. Wprowadzenie:

Równanie Schrödingera dla atomu wodoropodobnego (atomu z jednym elektronem) jest wersją ogólnego równania Schrödingera postulowanego w 1926 przez austriackiego fizyka Erwina Schrödingera. Równanie to pełni fundamentalną rolę w fizyce kwantowej, porównywalną do roli zasad dynamiki Newtona w fizyce klasycznej gdyż opisuje zachowanie układu kwantowego nierelatywistycznego w czasie. Poniżej przedstawione zostanie rozwiązanie równania w jednolitym polu potencjału, dla poszczególnych stanów kwantowych opisywanych przez 3 liczby kwantowe. Zostanie również pokazana korelacja względem modelu Bohra co potwierdzi poprawność zaproponowanych równań.

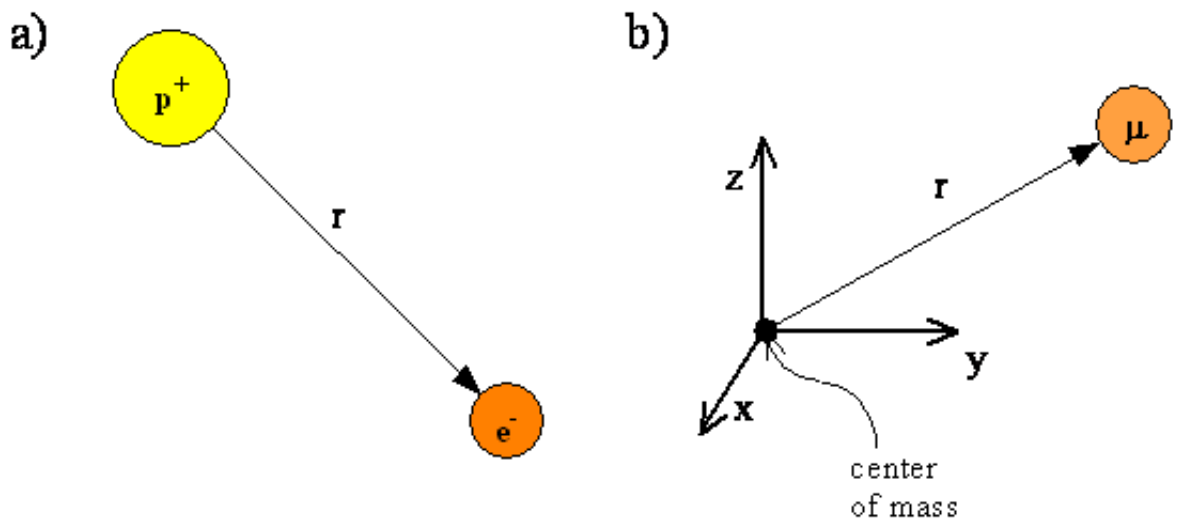


Erwin Schrödinger

2. Kilka słów teorii: [1]

2.1 Założenia użyte w modelu:

Atom wodoru, składający się z elektronu i protonu, jest układem dwucząstkowym, a ruch wewnętrzny dwóch cząstek wokół ich środka masy jest równoważny ruchowi pojedynczej cząstki o zredukowanej masie. Ta zredukowana cząstka znajduje się w punkcie r , gdzie r jest wektorem określającym położenie elektronu w stosunku do protonu. Długość r jest odległością między protonem a elektronem, a kierunek r określa orientację wektora skierowanego od protonu do elektronu. Ponieważ proton jest znacznie masywniejszy niż elektron, w tym rozdziale przyjmujemy, że masa zredukowana jest równa masie elektronu, a proton znajduje się w środku masy.



a) Proton (p^+) i elektron (e^-) atomu wodoru.

b) Równoważna zredukowana cząstka o zredukowanej masie μ w odległości r

Ponieważ ruch wewnętrzny dowolnego układu dwuatomowego można przedstawić ruchem pojedynczej cząstki o zredukowanej masie, opis atomu wodoru ma wiele wspólnego z omówionym wcześniej opisem cząsteczki dwuatomowej. Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

$$\hat{H}(r, \theta, \varphi)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$$

wykorzystuje ten sam operator energii kinetycznej \hat{T} , zapisany we współrzędnych sferycznych. Jednak w przypadku atomu wodoru odległość r między dwiema cząstkami może się zmieniać, w przeciwieństwie do cząsteczki dwuatomowej, w której ustalono długość wiązania i zastosowano model sztywnego wirnika. Hamiltonian atomu wodoru zawiera również termin energii potencjalnej, \hat{V} , opisujący przyciąganie między protonem i elektronem. Ten termin to energia potencjalna Coulomba:

$$\hat{V}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

gdzie r jest odległością między elektronem a protonem. Energia potencjalna Coulomba zależy odwrotnie od odległości między elektronem a jądrem i nie zależy od żadnych kątów. Taki potencjał nazywany jest potencjałem centralnym.

Wygodne jest przełączanie się ze współrzędnych kartezjańskich x, y, z na współrzędne sferyczne pod względem promienia r , a także kątów ϕ , które są mierzone od dodatniej osi x w płaszczyźnie xy i mogą wynosić od 0 do 2π , oraz θ , który jest mierzony od dodatniej osi z w kierunku płaszczyzny xy i może znajdować się między 0 a π .

2.2 Pochodzenie równania Schrödingera:

Aby uzyskać równanie dla atomu wodoru należy zacząć od równania falowego cząstki swobodnej.

$$\psi = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (2.1)$$

Korzystając z paru przekształceń wzorów fizycznych:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi\nu, E = h\nu, p = \frac{h}{\lambda}, \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.2)$$

Otrzymujemy postać:

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (2.3)$$

Różniczkując równanie po czasie, aby wyliczyć E otrzymujemy:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} E \psi \quad (2.4)$$

$$E = \frac{i\hbar}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.5)$$

Różniczkując równanie (2.3) podwójnie względem zmiennej położenia otrzymujemy wzór na pęd:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (2.6)$$

$$p^2 = \frac{\hbar}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

Wykorzystując $E = \frac{\mu v^2}{2} + V$ oraz $p = \mu v$ otrzymujemy zależność:

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V \quad (2.8)$$

Po podstawieniu (2.5) i (2.7) równanie wygląda następująco:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \quad (2.9)$$

Wiedząc że energia potencjalna opisana jest wzorem $\hat{V}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ oraz korzystając z operatora Laplace'a dla współrzędnych biegunowych, który odpowiada podwójnej pochodnej po zmiennej położenia:

$$\delta = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (2.1)$$

Finalnie równanie Schrödingera można zapisać jako:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi$$

3. Rozwiązanie równania Schrödingera dla atomu wodoru. [2]

W przedstawionych poniżej krokach, pokażemy w jaki sposób rozwiązać równanie Schrödingera dla atomu wodoru, oraz przedstawimy wnioski wynikające z naszego rozwiązania.

3.1 Rozdzielenie części kątowej od radialnej.

We współrzędnych biegunowych równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi$$

Wykonując podstawowe przekształcenia algebraiczne, otrzymujemy:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Zastosujemy rozdzielenie zmiennych. Zakładamy, że rozwiązanie naszego równania jest zależne od funkcji radialnej i kątowej.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi) \quad (3.3)$$

Ponieważ funkcja kątowa Y nie zależy od r , podobnie jak funkcja radialna R nie zależy ani od θ ani od ϕ , możemy zauważyć następujące zależności:

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} RY = Y \frac{dR}{dr} \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta} RY = R \frac{\partial Y}{\partial \theta} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \frac{\partial}{\partial \phi} RY = R \frac{\partial Y}{\partial \phi} \quad (3.6)$$

Podstawiając równania (3.4), (3.5), (3.6) do równania (3.2) otrzymujemy:

$$\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \right) RY = 0$$

Mnożymy obustronnie przez r^2 i dzielimy przez RY aby rozdzielić części kątowe i radialne:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Z}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = 0$$

Zauważamy, że pierwsze i 4 wyrażenie zależy tylko od r , a pozostałe wyrażenia, zależą tylko od kątów. Wyrazy te, równoważą się dla wszystkich punktów w przestrzeni, tylko wtedy gdy warunki promieniowe i kątowe są takie same, ale mają przeciwny znak. Korzystając z tej zależności, możemy podzielić nasze równanie na dwa równania (odpowiednio: równanie **radialne** i **kątowe**):

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R - AR = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + AY = 0 \quad (3.10)$$

gdzie A oznacza pewną stałą.

3.2 Rozdzielenie części kątowej na część biegunową i azymutalną.

Część kątowa naszego równania, nadal posiada wyrażenia zależne od θ i ϕ . Musimy zatem zastosować kolejne rozdzielenie zmiennych. W tym wypadku, zastąpimy naszą funkcję Y , iloczynem dwóch funkcji 1 zmiennej:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) \quad (3.11)$$

Podstawiając równanie (3.11) do równania (3.10) otrzymujemy:

$$\frac{\Phi}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{\Theta}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + A\Phi\Theta = 0 \quad (3.12)$$

Przekształcając równanie dostajemy:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + A \sin^2 \theta = 0 \quad (3.13)$$

Rozdzielamy nasze równanie na dwa osobne równania (odpowiednio: równanie **biegunowe** i **azymutalne**)

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + A \sin^2 \theta - B = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + B = 0 \quad (3.15)$$

Gdzie B oznacza pewną stałą

3.3 Rozwiązanie równania azymutalnego.

Równanie azymutalne:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + B\Phi = 0 \quad (3.16)$$

Jest równaniem różniczkowym 2 rzędu o stałych współczynnikach. Rozwiązaniem takiego równania są funkcje postaci:

$$\Phi(\phi) = c_1 e^{im\phi} + c_2 e^{-im\phi} \quad (3.17)$$

Gdzie $B = m^2$, a c_1 i c_2 to dowolne stałe.

Kąt ϕ jest azymutem. Jeśli pomyślisz o elektronie jako o kuli ziemskiej, to kąt ϕ oznacza długość geograficzną położenia elektronu. Jeśli nie mamy powodu by postąpić inaczej, możemy wybrać "południk zerowy" elektronu w wygodny dla nas sposób - przyjmując $c_2 = 0$.

Zauważmy, że m musi być liczbą całkowitą. W przeciwnym wypadku, wartość funkcji falowej azymutu dla $\phi = 0^\circ$ i $\phi = 360^\circ$ byłyby różne. W terminologii kwantowej, liczba m nazywana jest **liczbą kwantową** ponieważ ogranicza możliwe wartości funkcji falowej do całkowitych wielokrotności jednostki podstawowej.

Wobec tego, azymutalna część naszej funkcji falowej przyjmuje ostateczną postać:

$$\Phi_m(\phi) = c_1 e^{im\phi} \quad (3.18)$$

3.4 Rozwiązanie równania biegunowego.

Podstawiając $B = m^2$ w równaniu (3.14) otrzymujemy:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + A \sin^2 \theta - m^2 = 0 \quad (3.19)$$

Upraszczamy równanie:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(A - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (3.20)$$

Możemy wyrazić naszą funkcję falową jako zależną od $\cos \theta$ zamiast od θ .

Zastosujemy podstawienie $P(\cos \theta) := \Theta(\theta)$, (gdzie $:=$ oznacza operator przypisania). Łatwo zauważyć, że przy takim podstawieniu, dostajemy następującą zależność:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} = -\sin \theta \frac{d}{dx} \quad (3.21)$$

Korzystając z tego faktu, nasze równanie przyjmuje postać:

$$\frac{1}{\sin \theta} (-\sin \theta) \frac{d}{dx} \left(\sin \theta (-\sin \theta) \frac{dP}{dx} \right) + \left(A - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0 \quad (3.22)$$

Upraszczając powyższe równanie oraz dokonując podstawienia $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - x^2$ dostajemy:

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{dP}{dx} \right) + \left(A - \frac{m^2}{1 - x^2} \right) P = 0 \quad (3.23)$$

Co można zapisać jako:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P}{dx^2} - 2x \frac{dP}{dx} + \left(A - \frac{m^2}{1 - x^2} \right) P = 0 \quad (3.24)$$

Niestety, współczynniki w naszym równaniu nie są stałe, a zależne od x . Jednakże jest to znany typ równania różniczkowego (ściśle związany z równaniem różniczkowym Legendre'a), którego rozwiązanie jest znane w literaturze matematycznej. Rozwiązania są znane jako powiązane wielomiany Legendre'a i zawierają szereg potęgowy ze współczynnikami rekurencyjnymi.

Wielomiany Legendre'a przyjmują postać:

$$\begin{cases} P_l^m = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \left(a_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{2n}}{a_0} x^{2n} + a_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_{2n+1}}{a_1} x^{2n+1} \right) \\ a_{n+2} = \frac{(n+m)(n+m+1)-A}{(n+1)(n+2)} a_n \end{cases}$$

Oznacza to, że istnieją dwa szeregi potęgowe (odpowiednio dla wyrazów parzystych i nieparzystych) i że współczynniki wyższych składników można obliczyć rekurencyjnie, jeśli znany jest pierwszy współczynnik każdego szeregu, a_0 i a_1 . We wzorze rekurencyjnym A i m to stałe, które mamy z poprzednich części strategii rozwiązania, podczas gdy n jest zmienną indeksową dwóch szeregów potęg.

Rozwiązanie szeregowe jest przydatne tylko wtedy, gdy szereg jest zbieżny, tak że można go skrócić, gdy tylko rozwiązanie jest wystarczająco dokładne. W powyższym wzorze rekurencyjnym szereg jest zbieżny, jeśli $A = l(l + 1)$, gdzie l jest liczbą całkowitą. Współczynniki pierwiastka dwóch szeregów, a_0 i a_1 , są wybierane w zależności od określonej wartości l , aby zapewnić przetrwanie tylko zbieżnego szeregu.

Wartość l ogranicza wybór m ; m musi mieć wartość między $-l$ a l . Jeśli chodzi o część biegunową, rozwiązania $\pm m$ są równoważne, ale znak m robi różnicę w części azymutalnej.

Przykładowe rozwiązania funkcji Legendre'a:

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$
$m = 0$	$P_0^0(x) = 1$	$P_1^0(x) = x$	$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$m = 1$	--	$P_1^1(x) = \sqrt{1 - x^2}$	$P_2^1(x) = 3x\sqrt{1 - x^2}$
$m = 2$	--	--	$P_2^2(x) = 3 - 3x^2$

3.5 Rozwiązanie równania radialnego.

Z poprzednich rozważań wiemy, że stałą A możemy zapisać jako $l(l + 1)$. Korzystając z tego faktu, zapisujemy nasze równanie (3.9) w następujący sposób:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R - l(l + 1)R = 0 \quad (3.25)$$

Następnie, posługując się regułą pochodnej iloczynu funkcji, oraz dzieląc nasze uzyskane wyrażenie przez r^2 otrzymujemy:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l + 1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (3.26)$$

Równanie takie, da się rozwiązać jedynie dla bardzo dużych wartości r . Zauważamy, że niektóre wyrażenia w naszym równaniu (przy $r \rightarrow \infty$) będą się zerować. Dzięki temu, dostaniemy równanie asymptotyczne w postaci:

$$\frac{d^2 R_\infty}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R_\infty = 0 \quad (3.27)$$

Jak łatwo zauważyć, jest to równanie różniczkowe liniowe jednorodne, 2 rzędu, o stałych współczynnikach. Wiemy zatem, że rozwiązanie takiego równania będzie miało postać:

$$R_\infty = c_3 \exp \left(i \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) + c_4 \exp \left(-i \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) \quad (3.28)$$

Sensownym będzie użycie, jako punktu zerowego, energii potencjalnej swobodnego elektronu, tj. W tym asymptotycznym przypadku $E \rightarrow 0$ dla elektronu znacznie oddalonego od jądra, ponieważ jest on praktycznie wolny. Ponieważ obecność dodatniego ładunku w jądrze stabilizuje atom, musimy szukać rozwiązań, w których E staje się ujemne, gdy elektron zbliża się do jądra. Te dwa warunki są spełnione, jeśli wybierzemy $c_4 = 0$ i wykorzystamy fakt, że $E < 0$, aby pozbyć się jednostki urojonej.

W takim wypadku, równanie przyjmuje postać:

$$R_{\infty} = c_3 \exp - \left(\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}} r \right) \quad (3.29)$$

Szczególnie, bliżej jądra, rozszerzany jest w następujący szereg potęgowy:

$$R = R_{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} b_q r^q \quad (3.30)$$

Powoduje to szereg potęg r , których wszystkie współczynniki muszą wynosić zero, aby pasowały do prawej strony równania różniczkowego. Z tego wyprowadza się wzór rekurencji dla b_q , a wymóg zbieżności szeregu daje kolejną liczbę kwantową, n .

Daje nam to rozwiązanie radialne:

$$R_{n,l}(r) = R_{\infty}(r) b_0 \exp \left(\frac{\mu Z e^2 r}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 n} \right) \quad (3.31)$$

Gdzie współczynnik b_0 jest zależny od l . Jednocześnie rozwiązanie części radialnej ustala również możliwe poziomy energii, łącząc je z liczbą kwantową n . Poziomy energii atomu wodoru określone są następującym równaniem:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad (3.32)$$

3.6 Ostateczne rozwiązanie równania.

Po wykonaniu wszystkich poprzednich kroków oraz uporządkowaniu ich, ostateczne równanie Schrödingera dla atomu wodoru przyjmuje następującą postać:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = N R_{n,l}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (3.33)$$

gdzie N jest otrzymywane przez normalizację i obejmuje współczynniki każdego rozwiązania cząstkowego.

4. Wnioski i obserwacje wynikające z rozwiązania równania Schrödingera.

4.1 Liczby kwantowe. [3]

Podczas rozwiązywania naszego równania, napotkaliśmy po drodze trzy **liczby kwantowe**. Dwie z nich, (m oraz l) powstają na skutek rozdzielenia zmiennej radialnej od kątowej, a następnie biegunowej od azymutalnej w części kątowej. Trzecia liczba kwantowa, n (znana jako **główna liczba kwantowa**), wynika natomiast z potrzeby posiadania zbieżnego szeregu reprezentującego nieasymptotyczną część

funkcji radialnej. Liczby kwantowe nie są niezależne; wybór n ogranicza wybór l , co z kolei ogranicza wybór m . Zauważmy, że w równaniu (3.32) energia zależy jedynie od n , ale nie od pozostałych liczb kwantowych. a degeneracja jest ściśle prawdziwa tylko dla atomu wodoru; wszelkie przybliżone rozwiązania dla wyższych atomów powodują zależność wartości własnej energii stanu od wszystkich liczb kwantowych.

Przykładowa tabela wraz z możliwymi wartościami liczb kwantowych:

Symbol	Nazwa	Dozwolone wartości
n	Główna liczba kwantowa	1, 2, 3...
l	Orbitalna liczba kwantowa	0, 1, 2, 3, ..., $n - 1$
m_l	Magnetyczna liczba kwantowa	$-l, -(l - 1), \dots, l - 1, l$

Matematycznie rzecz biorąc, główna liczba kwantowa związana jest z odległością elektronu od jądra, orbitalna z orbitalnym momentem pędu, natomiast magnetyczna, określa nam składową z-ową momentu pędu.

4.3 Pare słów więcej o naturze zmiany stanów kwantowych.

Model Bohra jest wynikiem interpretacji danych i wysunięcia wniosków z pracy Maxa Planca z 1901. roku dotyczącej tzw. "Black Body Spectrum" - światła emitowanego poprzez podgrzany przedmiot. Planck założył, że specyficzne widma danych cząsteczek są wynikiem zkwantyfikowanej natury fotonów, które miały by przyjmować tylko określony poziom energetyczny.

Bohr w 1913. roku te same założenia zastosował w modelowaniu poziomów energetycznych elektronów w atomie. Jego zdaniem zmiana stanu elektronu jest wynikiem wyemitowania lub absorpcji fotonu o energii dokładnie odpowiadającej różnicy między dwoma poziomami energetycznymi elektronu. Model ten idealnie wyjaśnił spektrum emitowane przez wodór.[4]

Erwin Schrödinger wraz z Wernerem Heisenbergiem, w 1925. roku, zainspirowani sukcesem Bohra objaśnili specyficzne spektra światła dla bardziej skomplikowanych cząsteczek.

Mimo wspólnie zaakceptowanej koncepcji fotonu jako cząsteczki o specyficznym poziomie energii, Schrödinger nie zgadzał się z Bohrem co do natury samego procesu zmiany poziomów energetycznych zajmowanych przez elektrony. Bohr zapostulował jakoby elektron miał zmieniać swój stan w sposób natychmiastowy, miało by być to wynikiem załamania funkcji probabilistycznej, której autorem był sam Erwin Schrödinger. Dzisiaj stanowisko to jest znane jako interpretacja Kopenhaska.

Schrödinger zarzucał Bohrowi badanie zachowania pojedynczej cząsteczki przy użyciu systemu składającego się z dużej ilości tych cząsteczek. Uważał, że rezultaty takiego podejścia są katastrofalne przy wysuwaniu wniosków. Ówcześniejsze metody badawcze uniemożliwiały jednak zbadanie pojedynczego skoku kwantowego.

W roku 1986 zaprojektowano eksperyment dzięki któremu udało się uwięzić pojedynczy atom rtęci lub baru w wiązce lasera o energii identycznej z różnicą między dwoma stanami energetycznymi tych atomów. Elektron, zaopatrzony w ciągle nadciągające fotony o perfekcyjnie wymierzonej energii zaczął się poruszać między pierwszym a drugim poziomem energetycznym emitując w losowych kierunkach fotony identyczne do tych produkowanych przez laser. Jednakże zmiana ta następowała tak szybko, że niemożliwe było zbadanie jej dokładnej natury, a w efekcie atom poddany eksperymentowi zaczął emitować światło we wszystkie strony jednocześnie. Potrzeba było wprowadzić dodatkowe źródło energii, które ustabilizowało by elektron na bardziej stałej orbicie. [6]

Po użyciu drugiego lasera zaobserwowano, że atom przestał emitować światło. Uzyskano porządany efekt powstrzymania elektronu od ciągłej zmiany stanu. Pierwszy raz w historii zaobserwowano wtedy pojedynczy skok kwantowy. Skoki te odbywały się, zgodnie z przewidywaniami Bohra, w losowych interwałach czasowych, jednak eksperyment ten nie rozstrzygnął ostatecznie sporu co do ciągłości skoku.

W 2019 roku na Yale University przeprowadzono kolejny eksperyment polegający na symulacji stanów kwantowych poprzez dwa systemy nadprzewodników zamkniętych w komorze mikrofalowej. Dopiero ten eksperyment dowiódł, że skok kwantowy odbywa się w czasie $t > 0$. [7]

Podsumowując, oba modele znajdują poparcie w świecie rzeczywistym. Spór między interpretacją Kopenhaską a anty-Kopenhaską nadal nie został rozwiązany. Coraz większe poparcie znajduje jednak "Quantum Trajectory Theory" (QTT), która idealnie opisuje losowość skoków przewidzianą przez Neilsa Bohra oraz ciągłość tej zmiany przewidzianą przez Erwina Schrödingera.

5. Bibliografia:

- [1]https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD_Chem_107B%3A%20Thermodynamics_and_Chemical_Equilibrium/Chapter_16%3A%20Chemical_Equilibrium/16.3%3A%20Le_Chatelier's_Principle
- [2]<https://users.aber.ac.uk/ruw/teach/327/hatom.php>
(<https://users.aber.ac.uk/ruw/teach/327/hatom.php>)
- [3]<http://home.agh.edu.pl/~zak/downloads/FCS-6-2016.pdf>
(<http://home.agh.edu.pl/~zak/downloads/FCS-6-2016.pdf>)
- [4]N. Bohr: On the Constitution of Atoms and Molecules, Philosophical Magazine 26, 1–25 (1913)
- [5]"Are there quantum jumps?" - Erwin Schrödinger 1952
- [6]W. Nagourney, J. Sandberg, H. Dehmelt: Shelved Optical Electron Amplifier: Observation of Quantum Jumps. Physical Review Letters 56, 2797–2799 (1986)
- [7]https://www.nature.com/articles/s41586-019-1287-z.epdf?sharing_token=R_5Ww4SZz7EMhMwhNIqNPtRgN0jAjWel9jnR3ZoTv0PJMc77vB6TCr-Y7EVxz0mo5fo-djhfuSbfuMKOtTrbpQRCCMK_NQJSHrgq0bQBRRFmAktJ9ONUGSmj_SfVdy4-XrGiMecSFaSN-NGQGtp0K2YybX2ExFAnIXbyH8ViQUIOymoQOJGQcFXiTuX_2_4FLGEnXScRHeHe7GzDeiET7W8xAit_&tracking_referrer=physicsworld.com
(https://www.nature.com/articles/s41586-019-1287-z.epdf?sharing_token=R_5Ww4SZz7EMhMwhNIqNPtRgN0jAjWel9jnR3ZoTv0PJMc77vB6TCr-Y7EVxz0mo5fo-djhfuSbfuMKOtTrbpQRCCMK_NQJSHrgq0bQBRRFmAktJ9ONUGSmj_SfVdy4-XrGiMecSFaSN-NGQGtp0K2YybX2ExFAnIXbyH8ViQUIOymoQOJGQcFXiTuX_2_4FLGEnXScRHeHe7GzDeiET7W8xAit_&tracking_referrer=physicsworld.com)