POLSKIE TOWARZYSTWO PRZYRODNIKÓW IM. MIKOŁAJA KOPERNIKA
Oddział Warszawski

Konferencja „Okrągłego Stołu”, Pałac Staszica w Warszawie, 29 kwietnia 1987 r.

Deterministyczny model atomu – realna możliwość czy utopia?

Referat wstępny

Michał Gryziński

Pełny tekst, rysunki, zaproszenie i lista dyskutantów

Zredagował **Stanisław Plewako** z pomocą Claude (Anthropic)

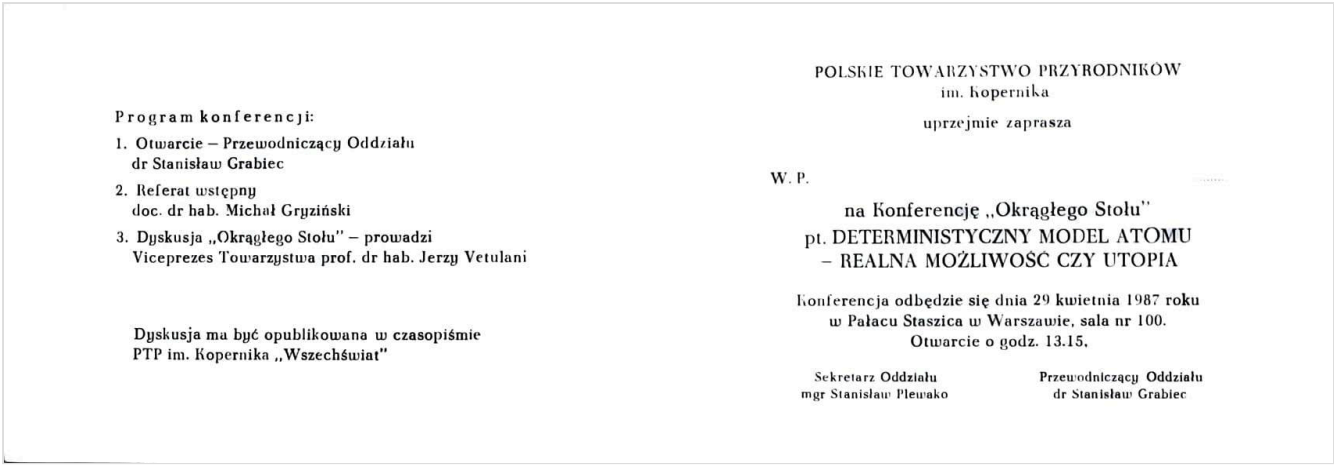
Źródło: maszynopis referatu i zaproszenie z archiwum organizatora konferencji, Stanisława Plewako. Tekst przepisany ze skanu maszynopisu i sprawdzony; zachowano pisownię oryginału, wzory zapisano w uproszczonej notacji tekstowej. Rysunki są skanami z maszynopisu. Wersja internetowa: https://plewako.pl/stanislaw/gryzinski-1987/. Wersja PDF z 22 października 2026 r.

Referat wstępny doc. dr. hab. **Michała Gryzińskiego** na Konferencję „Okrągłego Stołu” Polskiego Towarzystwa Przyrodników im. Mikołaja Kopernika.
Pałac Staszica w Warszawie, 29 kwietnia 1987 r.

> Tekst przepisany ze skanu maszynopisu i sprawdzony. Zachowano pisownię oryginału, a wzory zapisano w uproszczonej notacji tekstowej. Numeracja wzorów jest taka jak w maszynopisie (po wzorze (13) następuje (15)). Rysunki są skanami z maszynopisu.

Zaproszenie na konferencję

> Zaproszenie to karta składana: strona 1 (okładka), rozkładówka stron 2–3 poniżej oraz adnotacja drukarni na str. 4.



Program konferencji:

1. Otwarcie – Przewodniczący Oddziału dr Stanisław Grabiec
2. Referat wstępny doc. dr hab. Michał Gryziński
3. Dyskusja „Okrągłego Stołu" – prowadzi Viceprezes Towarzystwa prof. dr hab. Jerzy Vetulani

Dyskusja ma być opublikowana w czasopiśmie PTP im. Kopernika „Wszechświat"

POLSKIE TOWARZYSTWO PRZYRODNIKÓW
im. Kopernika
uprzejmie zaprasza

W. P. .....

na Konferencję „Okrągłego Stołu"
pt. DETERMINISTYCZNY MODEL ATOMU
– REALNA MOŻLIWOŚĆ CZY UTOPIA

Konferencja odbędzie się dnia 29 kwietnia 1987 roku
w Pałacu Staszica w Warszawie, sala nr 100.
Otwarcie o godz. 13.15.

Sekretarz Oddziału
mgr Stanisław Plewako

Przewodniczący Oddziału
dr Stanisław Grabiec

Zaproszenie, strony 2–3: program konferencji po lewej, treść zaproszenia po prawej.

Program konferencji:

1. Otwarcie – Przewodniczący Oddziału
   dr Stanisław Grabiec
2. Referat wstępny –
   doc. dr hab. Michał Gryziński
3. Dyskusja „Okrągłego Stołu” – prowadzi
   Viceprezes Towarzystwa prof. dr hab. Jerzy Vetulani

Dyskusja ma być opublikowana w czasopiśmie
PTP im. Kopernika „Wszechświat”.

Polskie Towarzystwo Przyrodników
im. Kopernika
uprzejmie zaprasza
W. P.
na Konferencję „Okrągłego Stołu”
pt. **DETERMINISTYCZNY MODEL ATOMU**
– REALNA MOŻLIWOŚĆ CZY UTOPIA.

Konferencja odbędzie się dnia 29 kwietnia 1987 roku
w Pałacu Staszica w Warszawie, sala nr 100.
Otwarcie o godz. 13.15.

Sekretarz Oddziału:
mgr Stanisław Plewako

Przewodniczący Oddziału:
dr Stanisław Grabiec

Referat

Polskie Towarzystwo Przyrodników
im. Mikołaja Kopernika
Michał Gryziński
Referat wstępny na
Konferencję Okrągłego Stołu pt.:

„DETERMINISTYCZNY MODEL ATOMU – REALNA MOŻLIWOŚĆ CZY UTOPIA?”

Pałac Staszica w Warszawie,
dnia 29 kwietnia 1987 roku

Referat wraz z dyskusją zostanie opublikowany
w czasopiśmie PTP im. M. Kopernika „WSZECHŚWIAT”.
(zob. Losy publikacji)

DETERMINISTYCZNY MODEL ATOMU – REALNA MOŻLIWOŚĆ CZY UTOPIA?

Michał Gryziński

Podejmując temat należy przede wszystkim zdać sobie sprawę z tego, że poznawanie świata sprowadza się do ciągłego poszukiwania odpowiedzi na dwa w istocie pytania: jak? i dlaczego? Jak przebiegają zjawiska? (jakie są fakty?) i dlaczego te zjawiska przebiegają tak a nie inaczej? (jakie są powiązania przyczynowe między faktami?).

Jedną z najbardziej skutecznych dróg do poznania struktury atomu (znalezienia odpowiedzi na pytanie, jak zbudowany jest atom) są zderzenia atomowe.

Zderzenia atomowe – metoda poznawcza mikroświata.

Pierwszy krok w kierunku rozszyfrowania struktury atomu został zrobiony w początkach naszego wieku przez Thomsona, który postulując, że w skład atomu wchodzą ujemnie naładowane lekkie cząstki (elektrony), opisał poprawnie hamowanie szybkich cząstek naładowanych w ośrodku. Rutherford, zakładając, że atom zawiera ciężkie, dodatnio naładowane centrum (jądro), opisał poprawnie rozpraszanie cząstek alfa przechodzących przez cienkie metalowe folie.

Uzyskana w oparciu o pojęcie punktowego ładunku i punktowej masy zgodność teorii z eksperymentem (Rys. 1) stanowiła dowód, że prawo Coulomba

$$(P.1)\quad F_{ij} = (q_i \cdot q_j / r_{ij}^2) \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij} \tag{1}$$

i dynamika newtonowska

$$(P.2)\quad m_i \cdot d^2\mathbf{r}_i/dt^2 = \mathbf{F}_i \tag{2}$$

opisują poprawnie podstawowe własności obu składników atomu (jądra i elektronów).

Logicznym następstwem rezultatów Thomsona i Rutherforda był planetarny model atomu zaproponowany przez Bohra. Niestety, w modelu tym błędnie określono ruch elektronu w stanie podstawowym, zakładając wbrew danym spektroskopowym, że orbita elektronu ma postać koła. Błąd ten, który w niemałym stopniu przyczynił się do zahamowania prac nad deterministyczną teorią atomu, wykryto dopiero w połowie lat sześćdziesiątych na gruncie fizyki zderzeń atomowych. Prawidłową odpowiedź na pytanie: jaką wartość mają nieokreślone w ramach postulatów (P.1) i (P.2) dwie stałe całkowania równań ruchu (energia wiązania E i orbitalny moment pędu L) uzyskano, rozwiązując eksperymentalno-teoretyczną równość

$$\sigma^{exp}(E_q) = \sigma^{theor}(E_q; E, L) \tag{3}$$

w której lewa strona równania przedstawia zbiór danych eksperymentalnych (na przykład przekrój czynny na jonizację w funkcji energii cząstki bombardującej E_q), a prawa strona stanowi jej odpowiednik teoretyczny (znaleziony na drodze całkowania równań ruchu dla trzech cząstek biorących udział w zderzeniu, protonu i elektronu tworzących atom wodoru oraz cząstki bombardującej).

Porównanie teorii z eksperymentem wykazało, że dla E=13.6 eV i L=0 równość (3) jest tożsamościowo spełniona dla dowolnych wartości E_q i dla wszystkich podstawowych procesów zderzeniowych (jonizacji, rozpraszania, wychwytu itp.) (Rys. 7). Wynik ten, z uwagi na jednoznaczność postulatów deterministycznego opisu należy traktować jako dowód, że trajektoria swobodnego spadku (L=0) odzwierciedla rzeczywisty ruch elektronów w atomie.

Analiza ogromnej liczby eksperymentów zderzeniowych, prowadzona w ciągu wielu lat badań, doprowadziła do wniosku, że wysoce radialny ruch elektronów jest cechą dominującą wszystkich atomów a konfiguracja swobodnego spadku (free-fall atomic model) dość poprawnie opisuje wieloelektronową powłokę – Rys. 2. Więcej, analiza eksperymentów zderzeniowych pozwoliła w wielu przypadkach na dość precyzyjne określenie przestrzennego rozkładu elektronów w atomie. I tak, stwierdzono, że dwa elektrony powłoki s, pozostając po dwu przeciwległych stronach jądra, poruszają się synchronicznie wzdłuż (lub prawie wzdłuż) promienia, tworząc konfigurację liniową (lub prawie liniową), a sześć elektronów powłoki p tworzy konfigurację przestrzenną z potrójną osią symetrii – Rys. 3.

Ponad wszelką wątpliwość udowodniono, że w atomie wieloelektronowym ma miejsce pełny synchronizm ruchu przy wysokiej symetrii rozmieszczenia elektronów (w ramach jednej powłoki wszystkie elektrony poruszają się w identyczny sposób, co z formalnego punktu widzenia oznacza, że ruch wielu elektronów w powłoce można opisać równaniem ruchu jednej cząstki). Rozwijając pole elektryczne zbioru ładunków na szeregi, pokazano, że na dużych odległościach od atomu jego własności można dostatecznie dobrze opisać zachowując dwa podstawowe człony szeregu

$$\Phi_{r\to\infty} \to A(\hat{r})/r^n \cdot \cos \omega t + B(\hat{r})/r^{n+1} \qquad (4)$$

określające statyczną i dynamiczną składową pola. Wartości współczynników A, B, n i ω, różniące atomy między sobą, są jednoznacznie określone formą kolektywnego ruchu elektronów, przy czym wartość wykładnika n wyrażającego się liczbą całkowitą jest dla pierwiastków określonej kolumny układu Mendelejewa taka sama, zaś A, B i ω zmieniają się monotonicznie wraz z numerem wiersza.

Niecentralny i oscylacyjny charakter pola elektrycznego atomu, będący konsekwencją traktowania atomu jako zbioru cząstek, wyjaśnia zarówno charakter sił Van der Waalsa, jak i charakter sił rezonansowych, a rotacja powłoki stanowi podstawę do opisu zależności temperaturowych wielu własności materii.

Należy podkreślić, że przybliżony model atomu wieloelektronowego oparty na idealnej konfiguracji swobodnego spadku pozwala obliczyć z zadziwiająco dużą dokładnością w oparciu o zwykłą arytmetykę (!) diamagnetyzm dowolnych atomów i wielu molekuł (jak na przykład związków jonowych typu KCl, NaCl, $CaCl_2$, ...). Przykładowo można podać, że zmierzone i obliczone wartości współczynnika przenikalności magnetycznej dla helu wynoszą odpowiednio 2.02 (eksp.) i 2.15 (teor.).

Spin i własności falowe elektronu.

Aby dać odpowiedź na pytanie, dlaczego elektron w atomie pozostaje na takiej, a nie innej orbicie, czy też, aby opisać dokładniej zachowanie się elektronu w polu jądra, należało poszerzyć zespół postulatów opisujących elektron. I tak należało uwzględnić spinowe własności elektronu, wprowadzone w 1926 r. przez Goudsmitha i Uhlenbecka dla wyjaśnienia rozszczepiania się wiązki atomów przechodzącej przez niejednorodne pole magnetyczne, a wywodzące się z postulatu opisującego oddziaływanie ładunków w ruchu.

Bezpośrednią konsekwencją przypisania elektronowi własności żyromagnetycznych było dokładne opisanie ruchu elektronu w bezpośrednim sąsiedztwie jądra. Okazało się, że swobodnie spadający na jądro elektron mija je na odległości rzędu komptonowskiej długości fali, a w szczególnym przypadku ruchu w płaszczyźnie równikowej dwie radialne gałęzie trajektorii swobodnego spadku mają asymptoty przecinające się niezależnie od ładunku jądra dokładnie pod kątem 120° (powiązanie orientacji radialnych „ramion" atomu z orientacją osi spinowej bąka jakim jest elektron stanowi klucz do zrozumienia stereochemicznych własności atomu).

W przypadku atomów wieloelektronowych przy synchronicznym ruchu radialnym oddziaływanie spin-spin i sprzężenie spin-orbita jest tak duże, że spiny elektronów odgrywają kluczową rolę przy formowaniu się powłok

elektronowych (maksymalna wartość energii oddziaływania magnetycznego jest rzędu mc^2, a jej wartość średnia stanowi istotną część energii wiązania elektronów w powłoce). Silne oddziaływanie magnetyczne, charakterystyczne dla trajektorii swobodnego spadku ujawnia sens fizyczny reguły Pauliego.

Przypisanie elektronowi własności żyromagnetycznych wymagało sformułowania równań ruchu dla współrzędnych spinowych. W szczególności należało odpowiedzieć na pytanie, jak zachowuje się oś spinowa elektronu przy jego swobodnym przemieszczaniu się w przestrzeni. Opierając się na pewnych analogiach hydrodynamicznych zapostulowano:

$$(P.3) \quad (\hbar/2) \cdot d\mathbf{s}/dt = (mv^2/2) \cdot [\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{v}}] \tag{5}$$

gdzie **s** jest wektorem określającym kierunek osi spinowej, **v** jest szybkością elektronu, a ħ – stałą Plancka. Postulat (P.3) oznaczał, że oś spinowa elektronu wraz z translacją elektronu w przestrzeni zmienia orientację, precesując wokół wektora **v** z szybkością kątową daną zależnością

$$d\psi/dt = mv^2/\hbar \tag{6}$$

Przy v = const postulat (P.3) staje się identyczny z postulatem de Broglie'a, jako że

$$\int_0^{2\pi} d\psi = (mv/\hbar) \int_0^{\lambda} dx \quad \rightarrow \quad \lambda = h/mv \tag{7}$$

Postulat (P.3) jest więc uogólnieniem postulatu de Broglie'a. Postulat ten z jednej strony rozszyfrowuje sens fizyczny fali de Broglie'a (oś spinowa po przebyciu odcinka drogi odpowiadającego długości fali de Broglie'a przyjmuje pierwotne położenie w przestrzeni), a z drugiej strony „materializuje" pole falowe elektronu (jest to pole elektromagnetyczne precesującego dipola magnetycznego). Zgodnie z postulatami Maxwellowskiej teorii pola,

$$(P.4) \quad \mathrm{rot}\, \mathbf{E}_S = -(1/c) \cdot \partial \mathbf{H}_S/\partial t \tag{8}$$

składowa elektryczna tego pola wyraża się w sposób następujący

$$\mathbf{E}_S = (1/2) \cdot (e/r^2) \cdot (v^2/c^2) \cdot [[\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{v}}] \times \hat{\mathbf{r}}] \tag{9}$$

Pole to, przy przemieszczaniu się elektronu pomiędzy periodycznie usytuowanymi w przestrzeni ładunkami elektrycznymi, np. pomiędzy atomami sieci krystalicznej, powoduje, że jedynie w niektórych kierunkach elektron może się poruszać bez rozpraszania. Rachunek pokazuje, że kierunki te są zgodne z formułą Bragga.

Analizując proces rozpraszania elektronów na krawędzi, szczelinie, czy zespole szczelin, należy pamiętać o fizycznej strukturze krawędzi, która jest niczym innym, jak zaburzeniem w jednorodnym rozkładzie dodatnich i ujemnych ładunków. Niezrównoważony ładunek istniejący na krawędzi, oddziałujący ze spinowym polem elektrycznym prowadzi do powstania dyfrakcyjnego obrazu rozproszeniowego. Długozasięgowy charakter tego oddziaływania daje w przypadku istnienia kilku krawędzi (szczelin) obraz interferencyjny – elektron przechodząc przez jedną ze szczelin „czuje" liniowe ładunki pozostałych szczelin. Zidentyfikowanie sił odpowiedzialnych za „interferencję" i „dyfrakcję" pozwala na dynamiczny opis procesu i obliczenie nie tylko położenia prążków, ale również ich profilu. (Rys. 4)

W podobny sposób translacyjna precesja pozwala na opisanie dyfrakcji i interferencji występującej na granicach domen magnetycznych.

Widmo liniowe a orbity stacjonarne elektronów

Wiekopomną zasługą Bohra było powiązanie widma liniowego atomu z ruchem elektronu w atomie. Bohr, analizując reguły spektroskopowe systematyzujące położenia prążków widma liniowego, podane przez Balmera, Lymana i innych, powiązał emisję światła ze zmianami orbity elektronowej i doszedł do wniosku, że istnieje zbiór wyróżnionych orbit, które określają obraz spektroskopowy promieniującego atomu.

Cechą charakterystyczną postulatu Bohra, mającego postać

$$\text{(P. Bohr)} \quad \oint p_q \, dq = nh \quad \rightarrow \quad E_n = -2\pi^2 m Z^2 e^4 / (n^2 h^2) \tag{10}$$

było pojawienie się stałej Plancka h, dla której w równaniach ruchu elektronu nie było odpowiednika. Odpowiednik ten pojawił się wraz ze sformułowaniem postulatu (P.3).

> [Przypis do transkrypcji: w maszynopisie przed $2\pi^2$ w (10) pominięto znak minus. Wpisano go tutaj, ponieważ energia stanu związanego jest ujemna: $E_n = -2\pi^2 m Z^2 e^4/(n^2 h^2)$.]

Aczkolwiek siły związane z translacyjną precesją, towarzyszące ruchowi elektronu na eliptycznej orbicie mają w porównaniu do sił coulombowskich znikomą wartość

$$F_s \approx \alpha^2 \cdot F_c \tag{11}$$

gdzie α jest stałą struktury subtelnej, to nie można ich pominąć przy analizie stanów stacjonarnych. W pierwszym przybliżeniu rachunku zaburzeń eliptyczna orbita może być stacjonarna, o ile

$$\delta E = \oint \mathbf{f}_p(l) \cdot d\mathbf{l} = 0 \tag{12}$$

$$\delta L = \oint [\mathbf{f}_p(l) \times \mathbf{r}] \cdot \hat{\mathbf{L}} \, dl = 0 \tag{13}$$

gdzie $\mathbf{f}_p(l)$ reprezentuje siłę perturbacyjną, a całkowanie odbywa się wzdłuż trajektorii ruchu niezaburzonego. Jeżeli wstawić do tego równania siły związane z elektrycznym polem spinowym, to okaże się, że warunek stacjonarności ruchu może być spełniony tylko dla dyskretnego ciągu orbit określonego postulatem Bohra. W ogólności jednak zmiany energii δE oraz momentu pędu δL są różne od zera i po dostatecznie długim czasie może nastąpić istotna zmiana parametrów orbity eliptycznej. Minimalny czas, jaki jest potrzebny do przejścia elektronu z orbity n na orbitę m jest rzędu

$$t_{n \to m} \approx (T_0/\pi) \cdot (1/(Z\alpha)^2) \cdot (1/n^2 - 1/m^2) \cdot m^7 \tag{15}$$

Jeżeli w ciągu tego czasu, który można w jakiejś mierze identyfikować z czasem wypromieniowania kwantu energii, atom zderzy się z jakąś cząstką, promieniujący elektron może bądź to utracić, bądź to zyskać pewną energię, powodując zmianę energii kwantu. Proces promieniowania może być również całkowicie przerwany wybiciem elektronu z atomu. Procesy te dają się obliczać i można określić profil linii spektralnych w zależności od warunków fizycznych, w jakich znajdują się promieniujące atomy.

Na zakończenie tego punktu warto zauważyć, że w atomach wieloelektronowych przesunięcie poziomów energetycznych promieniującego elektronu określone jest niecentralnym polem rdzenia atomu, a względna intensywność linii w multipletach określona jest symetrią rdzenia – słynny dublet sodowy, którego intensywność względna dana jest stosunkiem 2:1 wynika z potrójnej osi symetrii powłoki sześcioelektronowej, jako że prawdopodobieństwo schwytania elektronu przez dwa sektory, w których zlokalizowane są dwa elektrony powłoki s jest dwukrotnie większe, niż dla schwytania elektronu w trzeci sektor (w rzeczywistości stosunek intensywności linii

jest nieco różny od 2:1, gdyż dwuelektronowa powłoka s powoduje pewną deformację struktury o potrójnej osi symetrii) – Rys. 5.

Wiązania molekularne

Punktem wyjścia dla zrozumienia istoty wiązań molekularnych, a to z uwagi na istotną różnicę mas elektronu i jądra, jest zagadnienie dwu nieruchomych centrów – odpowiednik najprostszej molekuły, jaką jest zjonizowana molekuła wodoru. Zagadnienie dwu nieruchomych centrów posiada całą klasę rozwiązań, ale pomiędzy nimi tylko te, które opisują ruch na trajektoriach zamkniętych (tylko wówczas ruch jest stacjonarny) i przechodzących przez centra (a więc będące odpowiednikami trajektorii swobodnego spadku) mogą reprezentować rzeczywistą molekułę. Oczywiście, przy skończonych masach centrów, jakimi są jądra atomów, układ nie będzie ewoluował tylko wówczas, gdy średnia wartość siły wiążącej a mającej swe źródło w oddziaływaniu jądra z elektronem, będzie równa sile odpychania między jądrami.

Szczegółowa analiza tak postawionego problemu przeprowadzona z uwzględnieniem spinowych własności elektronu doprowadziła do jednoznacznego określenia orbity elektronu w molekule H_2^+. Stała strukturalna charakteryzująca rozpatrywaną molekułę, definiowana przez energię wiązania W i odległość między jądrami d, uzyskana teoretycznie dokładnie odpowiada wartości eksperymentalnej

$$a = 2e^2/(dW) = 0.905 \text{ (wart. teoret.)}, \quad 0.905 \text{ (wart. eksper.)}$$

W świetle tak wysokiej dokładności uzyskanej z teorii pozbawionej jakichkolwiek „fitujących” parametrów należy uznać, że pokazana na Rys. 6 orbita reprezentuje realny ruch elektronu w zjonizowanej cząsteczce wodoru.

Z analizy zagadnienia dla dwu nieruchomych centrów wynika, że istnieją dwie zasadniczo różne klasy rozwiązań – klasa rozwiązań jednocentrowych, w których elektron jest związany z jednym z centrów i nigdy nie przechodzi przez płaszczyznę symetrii prostopadłą do osi łączącej oba centra, oraz – klasa rozwiązań dwucentrowych, w których elektron może poruszać się od jednego jądra do drugiego. Ten podział odpowiada dwu podstawowym typom wiązań: wiązaniu typu σ i typu π.

Analiza eksperymentów zderzeniowych z udziałem różnego rodzaju molekuł pozwoliła na ustalenie zasadniczych cech ruchu elektronów potwierdzając ogólność wniosków odnośnie wiązań typu σ i typu π, a także na identyfikację symetrii rozmieszczenia elektronów w łańcuchach atomów. Tak jak i w przypadku pojedynczych atomów, cechą charakterystyczną tego ruchu jest pełny synchronizm w całej cząsteczce.

Deterministyczna interpretacja równania Schroedingera

Analizując motywacje odejścia na początku lat dwudziestych od deterministycznego opisu procesów atomowych, należy pamiętać o tym, że równanie Schroedingera zostało zapostulowane dla opisu widma promieniowania liniowego atomów. Można je traktować jako sformułowaną w postaci różniczkowej regułę określania stanów stacjonarnych w układach atomowych. Jak ostatnio pokazano, równanie Schroedingera można wyprowadzić w oparciu o teorię stabilności układów mechanicznych Czetajewa i postulatu translacyjnej precesji – funkcja Ψ reprezentuje wówczas kąt fazowy precesującej osi spinowej.

Zastosowanie równania Schroedingera do opisu procesów zderzeniowych, zapoczątkowane przez Borna w 1926 roku wydaje się być co najmniej wątpliwe, jako że do dziś nie udało się poprawnie opisać fundamentalnego problemu zderzeń atomowych, jakim jest zderzenie pojedynczej cząstki (elektronu, czy też protonu) z atomem wodoru.

Odnośniki do kluczowych prac oryginalnych

1. M. Gryziński, Phys. Rev. **138A** (1965) 305, 322, 359 [w maszynopisie 359; w bibliografii książki „Sprawa Atomu" 305, 322, 336].
2. M. Gryziński, J. Kunc, M. Zgorzelski, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **6** (1973) 2292.
3. M. Gryziński, J. Chem. Phys. **62** (1975) 2610, 2620, 2629.
4. M. Gryziński, Phys. Lett. **41A** (1972) 69, **44A** (1973) 131, **76A** (1980) 28.
5. M. Gryziński, J. Kunc, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **19** (1986) 2479.

Wstępne tezy do dyskusji

1. Czy istnieje, a jeśli tak, to gdzie leży granica stosowalności deterministycznego opisu zjawisk fizycznych?
2. Czy wyjściowe argumenty za wprowadzeniem formalizmu kwantowo-mechanicznego nie zdezaktualizowały się?
3. Czy pogląd o doskonałości kwantowo-mechanicznego opisu zjawisk atomowych jest prawdziwy?

Dyskusja na konferencji

> Treść dyskusji nie została opublikowana (zob. Losy publikacji). Poniższa lista wypowiadających się pochodzi z odręcznej notatki organizatora na odwrocie ostatniej strony maszynopisu referatu, w kolejności wystąpień. Znak „G” przy pozycji oznacza, że w notatce zaznaczono odpowiedź doc. Gryzińskiego. Nazwiska i tytuły podano tak, jak zapisano w notatce; znak „(?)” oznacza odczyt niepewny, a „×” wypowiedź osoby, której nie zidentyfikowano. Przewodniczył obradom prof. Jerzy Vetulani.

1. prof. Góral
2. prof. Namysłowski
3. Krzysztof Heller (UJ); przy wpisie dopisek o nierówności (Bella?) i o doświadczeniu Sterna–Gerlacha (odczyt dopisku niepewny)
   G – odpowiedź Gryzińskiego
4. × (osoba niezidentyfikowana; w notatce „X-2”); uwaga: „Postulat P3 … sprzeczny z mech. kw.”
5. doc. Infeld
   G – odpowiedź Gryzińskiego
6. prof. Namysłowski (druga wypowiedź)
7. prof. Jerzy Vetulani (przewodniczący obrad)
8. Krzysztof Heller (druga wypowiedź)
9. doc. Fidelis, w związku z pytaniem o doświadczenie Sterna–Gerlacha
   G – odpowiedź Gryzińskiego, „o fitowaniu”
10. Tomasz Plewicki – o szczelinie
11. doc. Piela
    G – odpowiedź Gryzińskiego

12. × Czesław Czernii (?) (imię i nazwisko niepewne)
13. Ryszard Wojna (?) (nazwisko niepewne)
14. × (osoba niezidentyfikowana)
15. doc. Infeld (druga wypowiedź)

Losy publikacji

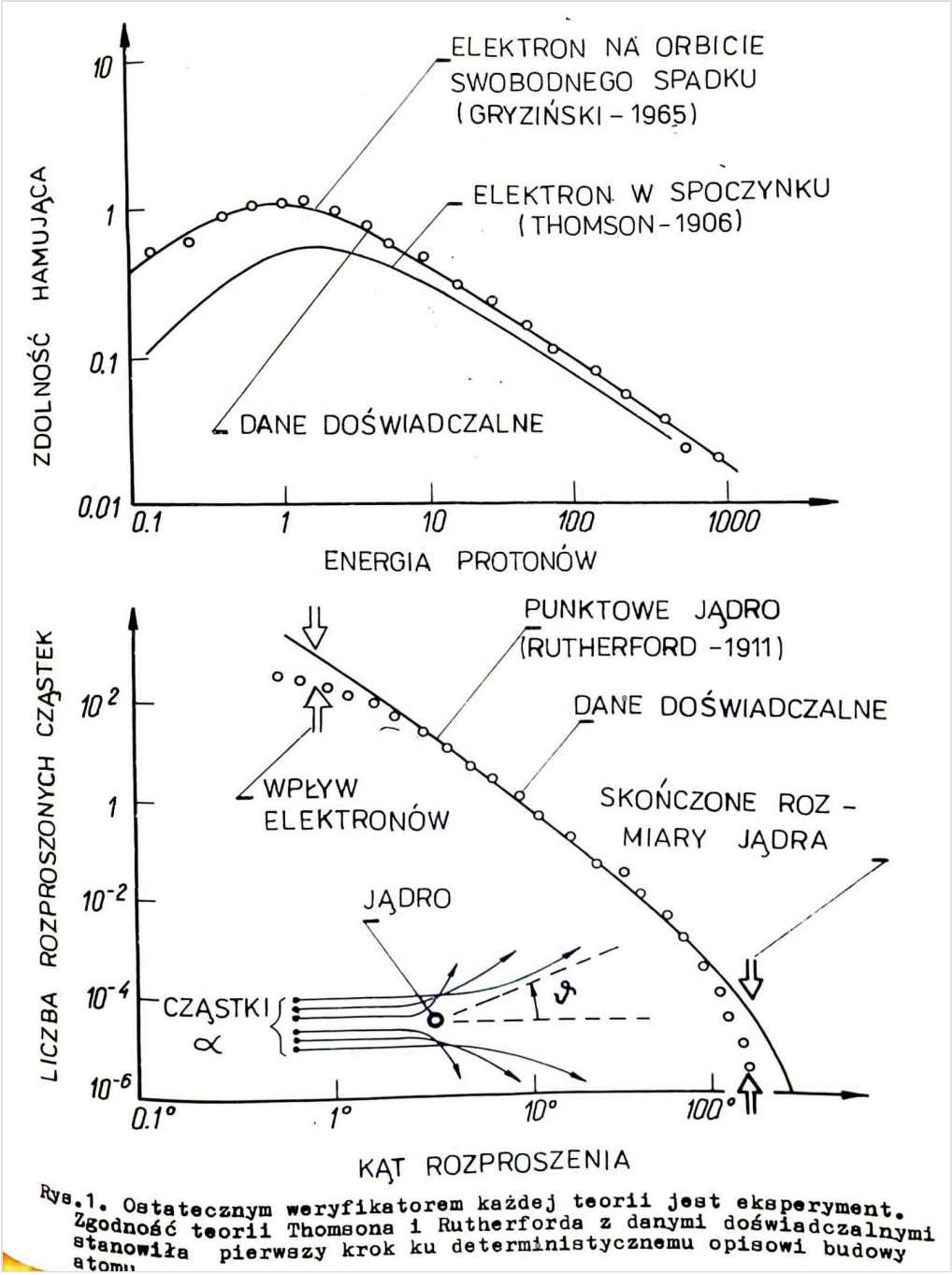
Zaproszenie zapowiadało opublikowanie referatu i dyskusji we „Wszechświecie”. Publikacja nie nastąpiła. Powód wyjaśnił redaktor naczelny „Wszechświata”, prof. Jerzy Vetulani (który prowadził też dyskusję na konferencji), w komentarzu do polemiki w innej sprawie, w numerze 7–8 z 1988 r., s. 177 (pełny numer, PDF):

> „Czy i jakie polemiki drukować na łamach Wszechświata? Profesor Łomnicki słusznie sugeruje, że najcenniejsze nawet teorie publikowane wyłącznie w naszym czasopiśmie nie spotkają się z odzewem ze strony świata naukowego, i że im większa ranga odkrycia lub głębsze implikacje proponowanych hipotez, tym wyższy musi być prestiż czasopisma, w którym się je publikuje. Dotyczy to zwłaszcza teorii, w których zastosowany aparat pojęciowy, np. matematyczny, przekracza możliwości zrozumienia sprawy przez czytelnika, do którego nasze pismo jest w zasadzie adresowane. Stąd też Wszechświat nie zdecydował się np. na publikację materiałów dyskusji zorganizowanej przez warszawski oddział PTP im. Kopernika, w której doc. Michał Gryziński przedstawiał argumenty za możliwością stworzenia deterministycznego modelu atomu.”

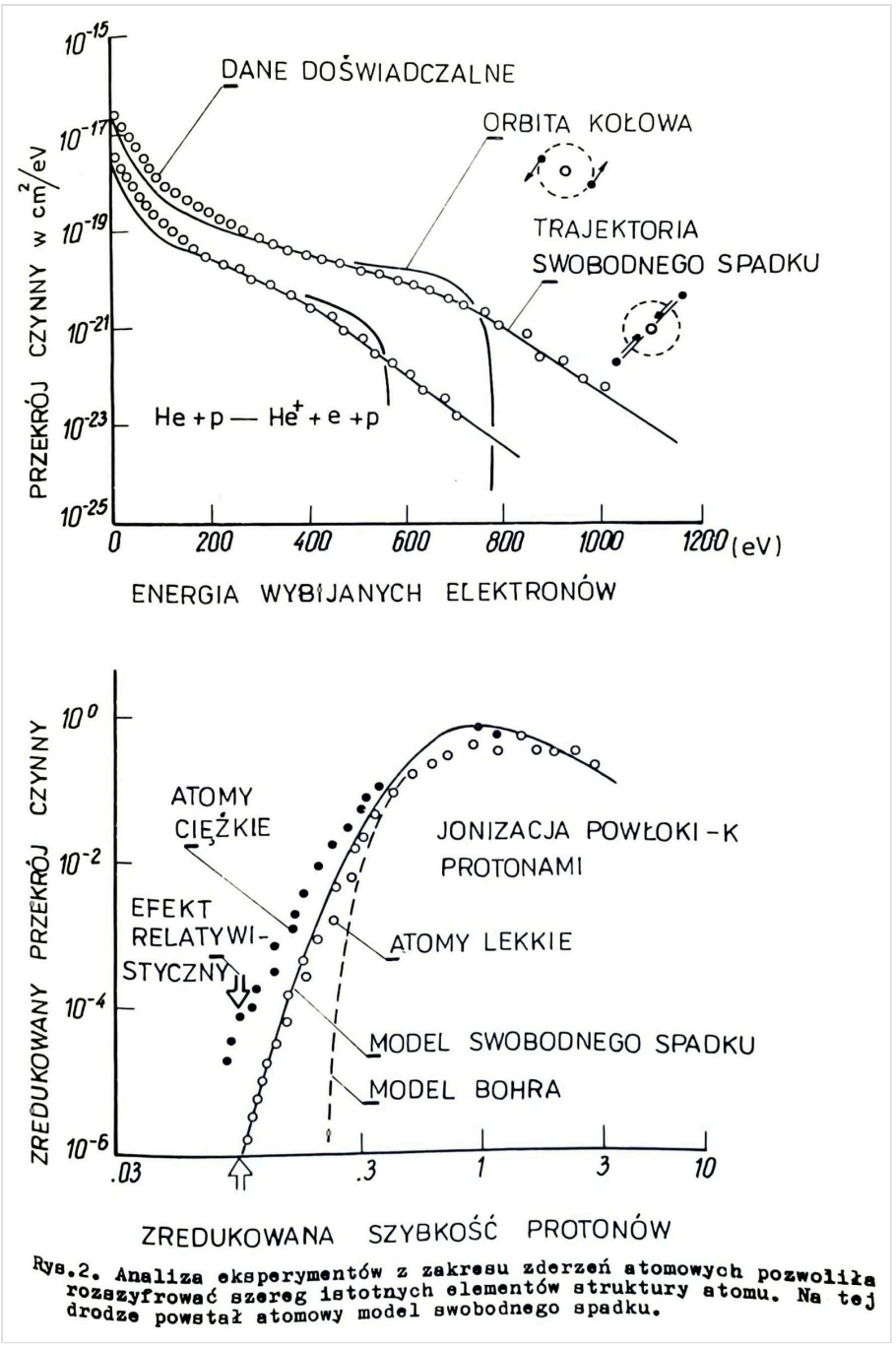
> Komentarz zamyka polemikę Jana Koteji z Adamem Łomnickim o strategiach ewolucyjnie stabilnych i jest podpisany „Redaktor Naczelny”; w stopce numeru redaktorem naczelnym jest Jerzy Vetulani. Podane powody to ranga czasopisma i poziom jego czytelników; w komentarzu nie ma oceny merytorycznej referatu. To jedyna wzmianka o konferencji i referacie w całym numerze 7–8/1988.

Rysunki

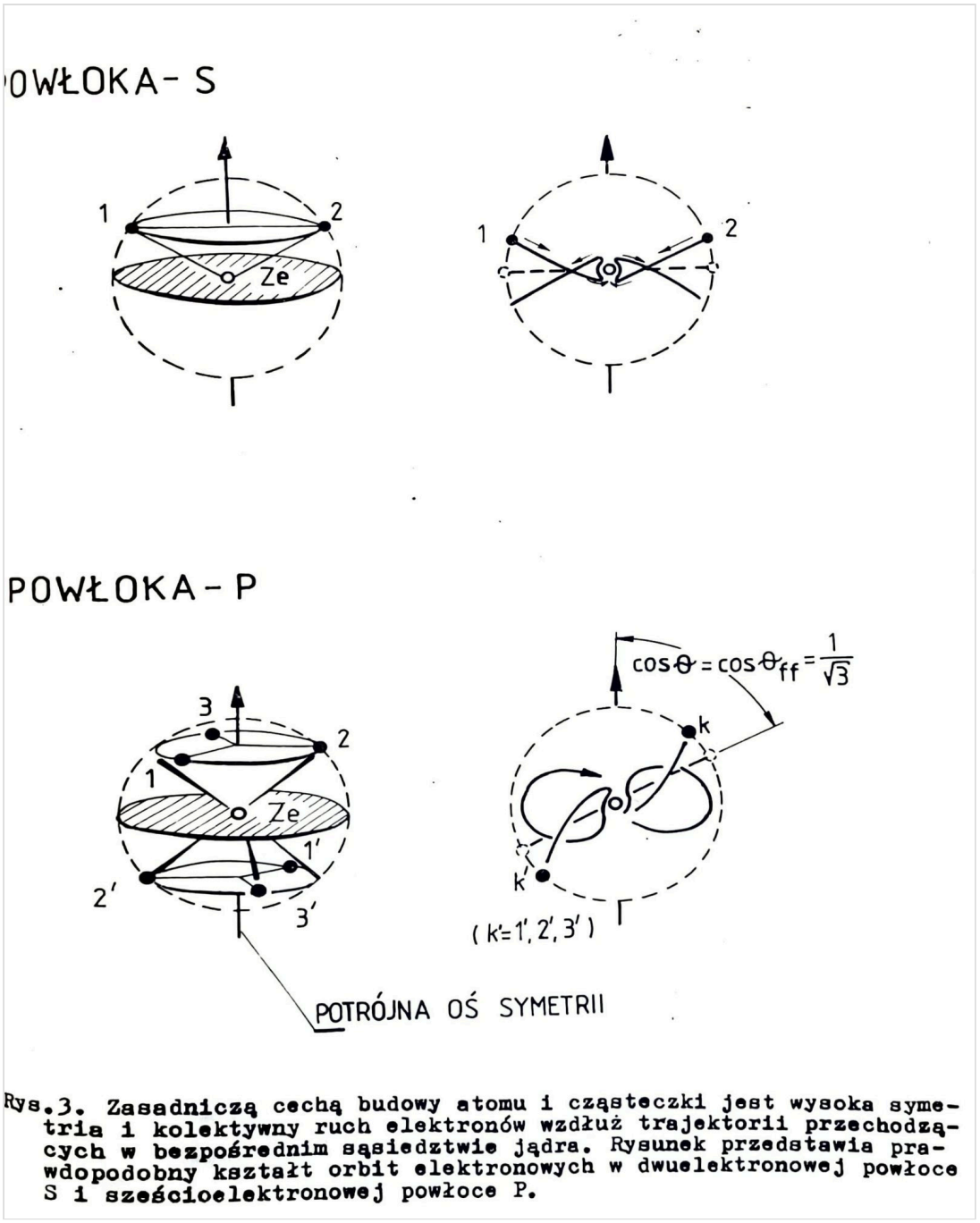
> Skany rysunków z maszynopisu.



Rys. 1. Ostatecznym weryfikatorem każdej teorii jest eksperyment. Zgodność teorii Thomsona i Rutherforda z danymi doświadczalnymi stanowiła pierwszy krok ku deterministycznemu opisowi budowy atomu.

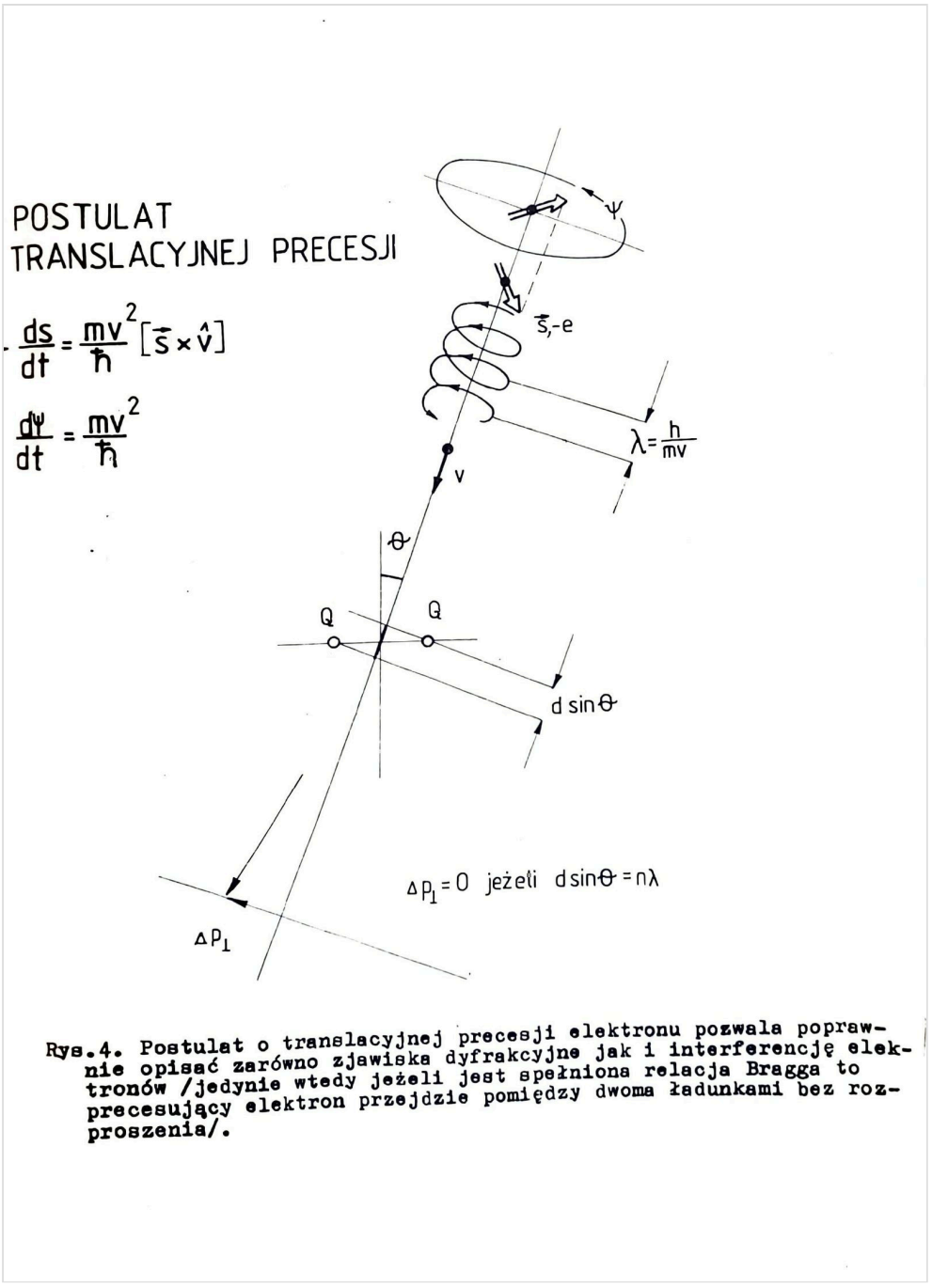


Rys. 2. Analiza eksperymentów z zakresu zderzeń atomowych pozwoliła rozszyfrować szereg istotnych elementów struktury atomu. Na tej drodze powstał atomowy model swobodnego spadku.



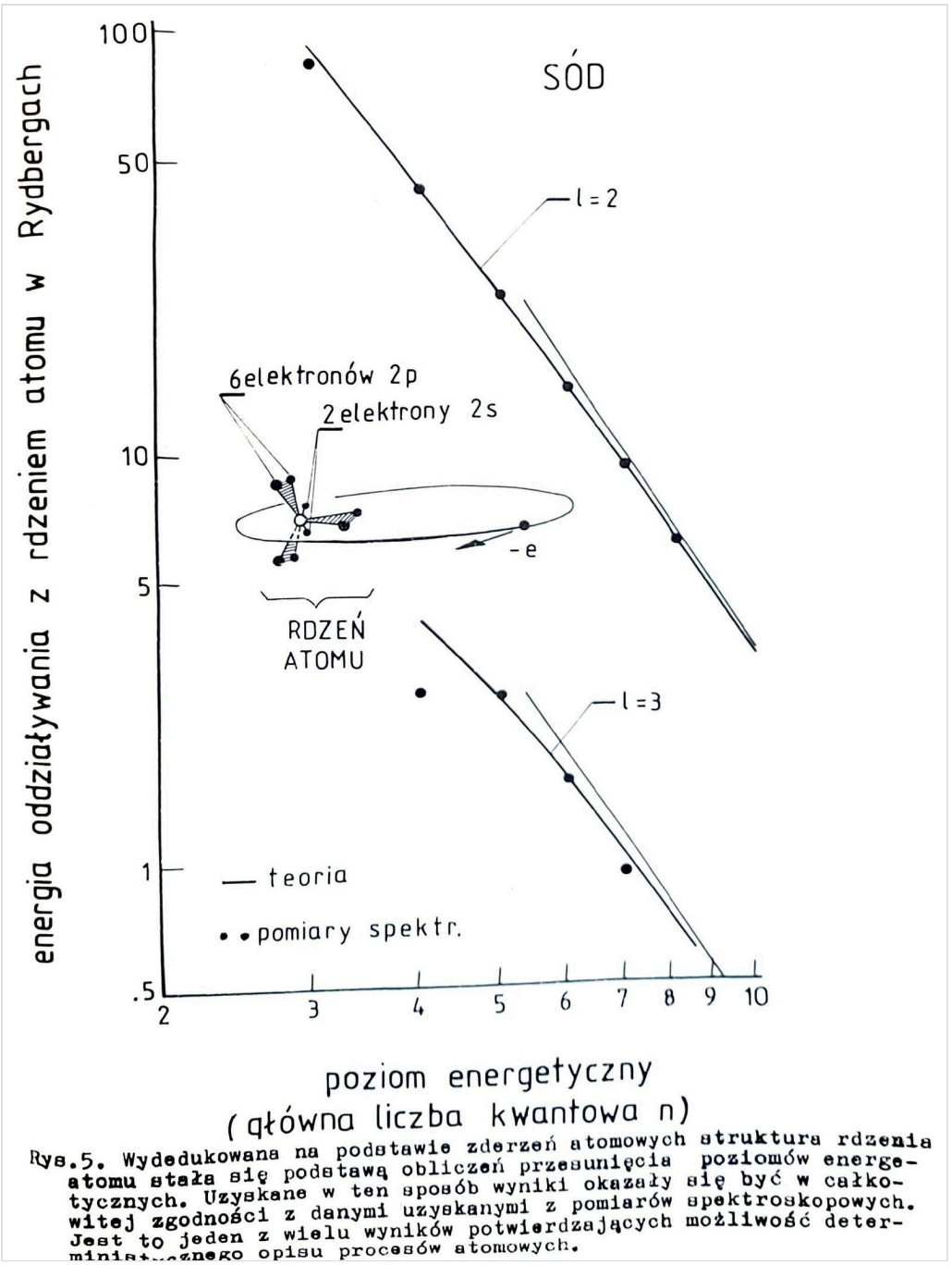
Rys.3. Zasadniczą cechą budowy atomu i cząsteczki jest wysoka symetria i kolektywny ruch elektronów wzdłuż trajektorii przechodzących w bezpośrednim sąsiedztwie jądra. Rysunek przedstawia prawdopodobny kształt orbit elektronowych w dwuelektronowej powłoce S i sześcioelektronowej powłoce P.

Rys. 3. Zasadniczą cechą budowy atomu i cząsteczki jest wysoka symetria i kolektywny ruch elektronów wzdłuż trajektorii przechodzących w bezpośrednim sąsiedztwie jądra. Rysunek przedstawia prawdopodobny kształt orbit elektronowych w dwuelektronowej powłoce S i sześcioelektronowej powłoce P.



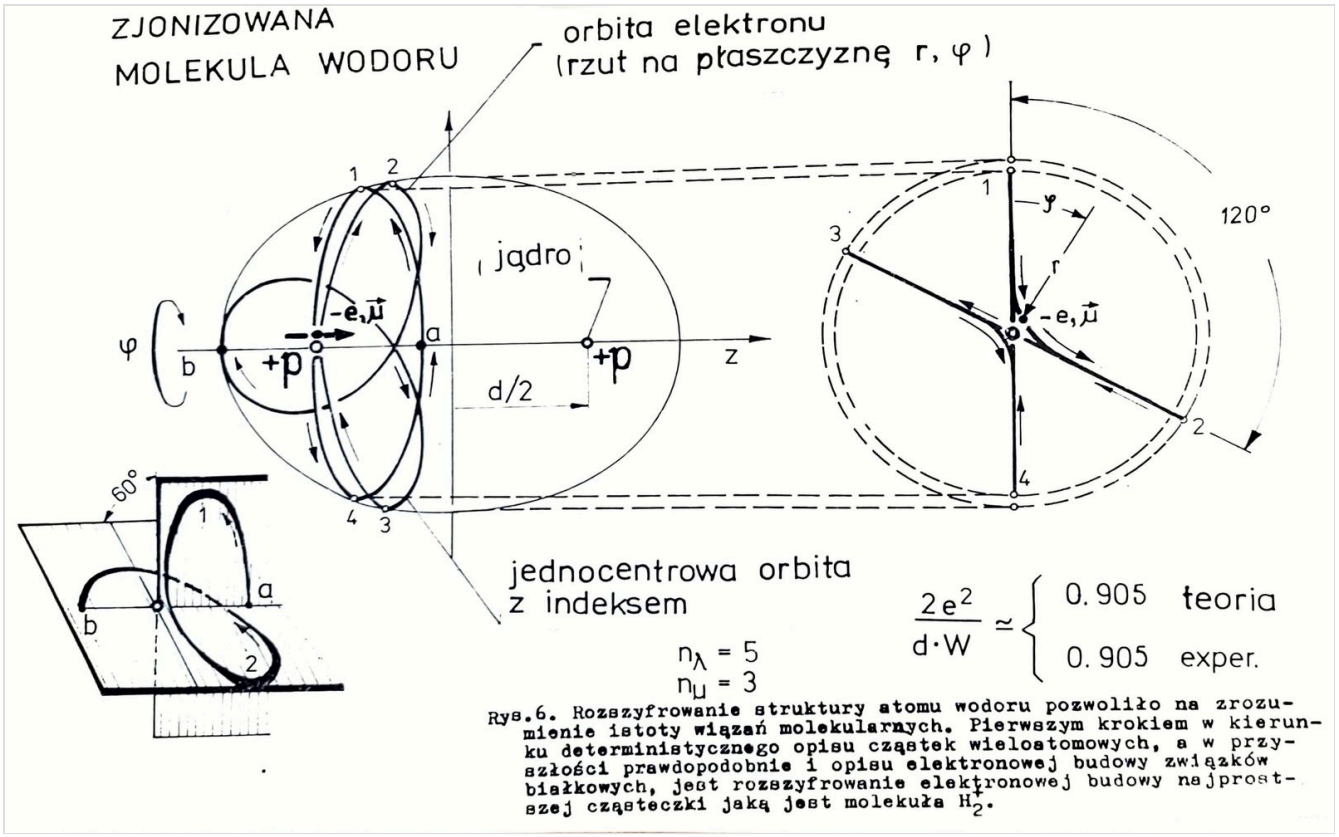
Rys.4. Postulat o translacyjnej precesji elektronu pozwala poprawnie opisać zarówno zjawiska dyfrakcyjne jak i interferencję elektronów /jedynie wtedy jeżeli jest spełniona relacja Bragga to precesujący elektron przejdzie pomiędzy dwoma ładunkami bez rozproszenia/.

Rys. 4. Postulat o translacyjnej precesji elektronu pozwala poprawnie opisać zarówno zjawiska dyfrakcyjne jak i interferencję elektronów (jedynie wtedy jeżeli jest spełniona relacja Bragga to precesujący elektron przejdzie pomiędzy dwoma ładunkami bez rozproszenia).



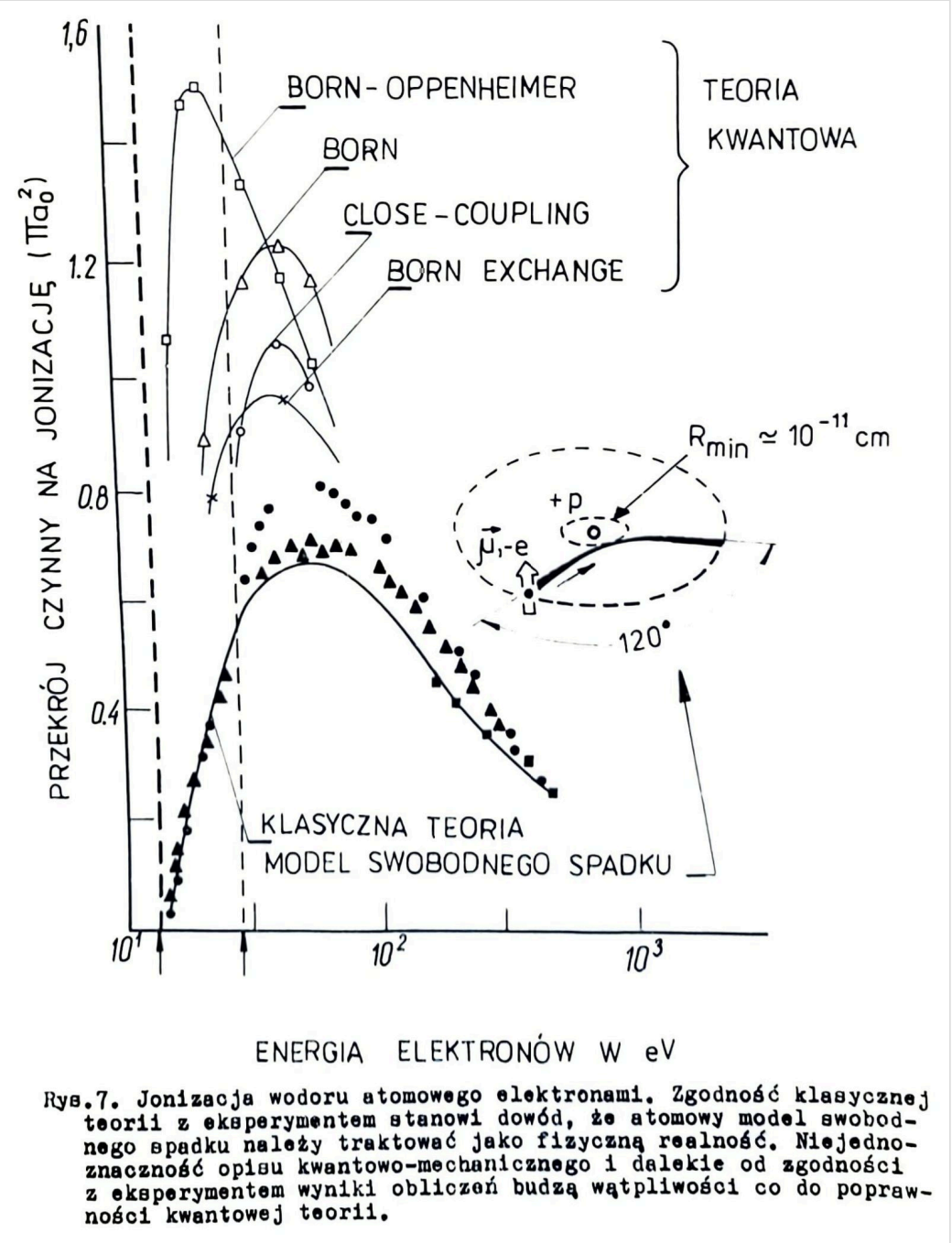
Rys.5. Wydedukowana na podstawie zderzeń atomowych struktura rdzenia atomu stała się podstawą obliczeń przesunięcia poziomów energetycznych. Uzyskane w ten sposób wyniki okazały się być w całkowitej zgodności z danymi uzyskanymi z pomiarów spektroskopowych. Jest to jeden z wielu wyników potwierdzających możliwość deterministycznego opisu procesów atomowych.

Rys. 5. Wydedukowana na podstawie zderzeń atomowych struktura rdzenia atomu stała się podstawą obliczeń przesunięcia poziomów energetycznych. Uzyskane w ten sposób wyniki okazały się być w całkowitej zgodności z danymi uzyskanymi z pomiarów spektroskopowych. Jest to jeden z wielu wyników potwierdzających możliwość deterministycznego opisu procesów atomowych.



Rys. 6. Rozszyfrowanie struktury atomu wodoru pozwoliło na zrozumienie istoty wiązań molekularnych. Pierwszym krokiem w kierunku deterministycznego opisu cząstek wieloatomowych, a w przyszłości prawdopodobnie i opisu elektronowej budowy związków białkowych, jest rozszyfrowanie elektronowej budowy najprostszej cząsteczki jaką jest molekuła H_2^+.

> [Przypis do transkrypcji: w podpisie maszynopisu stoi „cząstek wieloatomowych”; zachowano brzmienie oryginału.]



Rys.7. Jonizacja wodoru atomowego elektronami. Zgodność klasycznej teorii z eksperymentem stanowi dowód, że atomowy model swobodnego spadku należy traktować jako fizyczną realność. Niejednoznaczność opisu kwantowo-mechanicznego i dalekie od zgodności z eksperymentem wyniki obliczeń budzą wątpliwości co do poprawności kwantowej teorii.

Rys. 7. Jonizacja wodoru atomowego elektronami. Zgodność klasycznej teorii z eksperymentem stanowi dowód, że atomowy model swobodnego spadku należy traktować jako fizyczną realność. Niejednoznaczność opisu kwantowo-mechanicznego i dalekie od zgodności z eksperymentem wyniki obliczeń budzą wątpliwości co do poprawności kwantowej teorii.

Materiały: maszynopis referatu i zaproszenie z 29 kwietnia 1987 r. z archiwum organizatora konferencji, którym był Stanisław Plewako.

Odczyt i adiustację tekstu referatu prof. Michała Gryzińskiego (1930–2004) oraz przygotowanie tej strony wykonano z pomocą Claude by Anthropic.