

Title/标题波函	数及原子轨道					
Name/姓名	Student ID/学号	Date/日期	页码			
一、实验内容						
(1) 行波(可自行添	加坐标单位)					
1. 单击地址栏左侧 🍹	,选择本次实验所需的程序文	件所在的文件夹,使所有文件显示	在"当前文件夹"下。双击			
"当前文件夹"中的 t	raveling_wave_avi.m 程序文件。					
2. 点击程序编辑器中的	的图标▶运行程序。					
3. 程序运行后会弹出对话窗口提示选择保存 avi 文件的文件名,按回车使用默认文件名 traveling_wave.avi 即可。						
4. 程序继续运行,在	新出现的作图窗口中显示一列	行波的运动图像,持续约 5 秒后	停止,运动图像保存为			
traveling_wave.avi 文件	‡ 。					
5. 在文件浏览器中双语	告 traveling_wave.avi 文件观看行	波的运动图像。使用秒表并根据图	中显示的坐标,确定此行			
波的振幅 A =	、波长λ=、	频率 $v =$ 和波速 $s =$	= <u> </u>			
6. 回到 Matlab 软件,	在程序编辑器中滚动鼠标滚轮,	往下查看程序代码。找到表示行波	还运动的关键语句:			
$y = A * \sin(2 * pi * (x / $	lambda <mark>-</mark> t / T))					
7.在程序编辑器中将上	述关键语句中的负号改为正号,	并重新运行程序:				
y = A * sin(2 * pi * (x / pi * (x	lambda <mark>+</mark> t / T))					
将动画保存为 traveling	g_wave2.avi 文件,观察行波运动	发生的变化:				
原因为:						
(2) 驻波(可自行添	加坐标单位)					
1. 双击 standing_wave	_avi.m 文件并运行,按照与行波	部分类似的方法,使用默认文件名	standing_wave.avi。			
2. 程序继续运行,在	新出现的作图窗口中显示一列。	驻波的运动图像,持续约 5 秒后	停止,运动图像保存为			
standing_wave.avi 文件	- 0					
3. 在文件浏览器中双语	击 standing_wave.avi 文件观看驻	坡的运动图像。使用秒表并根据图成	中显示的坐标, 确定此驻			
波的波长 λ=	、频率 v=	、各个节点的位置:				
振幅 A 随横坐标 x 变体	と的规律:					
		往下查看程序代码,并找到表示驻	E波运动的关键语句:			
	lambda)) * cos(2 * pi * (t / T));					
	cos, 并重新运行程序: [lambda]) * cos(2 * pi * (t / T));					
		发生的变化为:				
_	-					



(3) 一维势阱中的定态波函数

1. 双击 Particle_In_A_Box.m 文件。此程序模拟的是 OGC 教材第 172 页的一维势阱问题,并设定势阱长度 $L=10$ 。
2. 程序运行,显示两个候选波函数 ψ_1 和 ψ_2 ,然后暂停,观察这两个波函数并根据图中的坐标写出它们的函数形
式: $\psi_1 = $ $\psi_2 = $
ψ_1^2 — 3. 按空格或回车键,程序继续。此时 ψ_1 和 ψ_2 变为虚线显示,而它们的模方 $ \psi_1 ^2$ 和 $ \psi_2 ^2$ 显示为实线,观察并解释 ψ_1 和 ψ_2 与它们的模方 $ \psi_1 ^2$ 和 $ \psi_2 ^2$ 之间的关系。
原因:
4. 按空格或回车键继续,红色阴影面积即为 $ \psi_1 ^2$ 对横坐标 x 的积分:
$S_1 = \int_0^L \psi_1 ^2 \mathrm{d}x$
根据积分的几何意义,无需经过计算,求出 S_1 的值。
S ₁ =
5. 按空格或回车键继续,同理求出蓝色阴影面积,也就是积分 $S_2 = \int_0^L \psi_2 ^2 \mathrm{d}x$ 的值。
S ₂ =
6. 按空格或回车键继续,此时 ψ_1 和 ψ_2 仍然为虚线显示,新出现的 ψ_3 和 ψ_4 分别为 ψ_1 和 ψ_2 归一化之后的波函
数: $\psi_3 = c_1 \psi_1$, $\psi_4 = c_2 \psi_2$, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}^+$.
根据图中函数形式以及归一化的含义,计算或估算 c_1 和 c_2 的数值。
c ₁ =c ₂ =
c ₁ 和 c ₂ 与 S ₁ 和 S ₂ 分别是什么关系?
7. 按空格或回车键继续,此时 ψ_3 和 ψ_4 变为虚线显示,而它们的模方 $ \psi_3 ^2$ 和 $ \psi_4 ^2$ 显示为实线,模方 $ \psi_3 ^2$ 和 $ \psi_4 ^2$
的物理意义是:
8. 按空格或回车键继续,分别求出红色部分阴影面积 $S_3=\int_0^L \psi_3 ^2\mathrm{d}x$ 和蓝色部分阴影面积 $S_4=\int_0^L \psi_4 ^2\mathrm{d}x$ 。
$S_3 =$
数: $\psi_3' = \frac{\mathrm{d}\psi_3}{\mathrm{d}x}$, $\psi_3'' = \frac{\mathrm{d}^2\psi_3}{\mathrm{d}x^2}$
无需计算,观察 ψ_3 '与 ψ_3 "的函数形式并解释 ψ_3 、 ψ_3 "之间的关系:



上海科技大 ShanghaiTech Univer			普通化学实验报告
Title/标题 <u>实验</u> [」 波函数及原子轨道		班号
Name/姓名	Student ID/学号	Date/日期	页码
10. 按空格或回车键	继续,左半幅显示的是薛定谔方程的	方左手边的函数形式:	
	$H\psi_3 = -\frac{1}{2}$	$h^2 \frac{d^2\psi_3}{dx^2}$	
为简洁起见,式中 n	п <i>h</i> 均取值为 1 。故	su-m ux-	
	$H\psi_3=$	$=-\frac{\psi_3''}{2}$	
右半幅显示的是 ///3 i	的函数形式。根据图中的纵坐标,为	On .	的構坐标 x 外外成立. 波函
数 ψ_3 对应的能量 E_3			
,		$\frac{\psi_3}{r^2} = E_3 \psi_3$	
-	$-\frac{1}{8\pi^2m}\frac{1}{dx}$	$\frac{1}{\chi^2} - E_3 \psi_3$	
E ₃ =		'社积) ?	
化始 OGC 软机	7 八、13 时间并且足少少(马田间开	· (人) (土) ·	
(4) 氢原子 1s 轨道			
1. 在 Matlab 命令窗	口的>>提示符后输入[psi,r]=Hydrogen	_1s; (注意分号) 并回车: 🍂 :	>> [psi,r]=Hydrogen_1s;
程序运行约半分钟后	弹出氢原子 1s 轨道的剖面图,并返	回计算结果 psi 和 r。在 Matlab	右上角的 Workspace 子窗
口中显示变量 psi 和	r 为三维数组,每一个维度具有 201	个数据点,这样就把三维空间	中的 x,y,z 坐标从−2 Å 到 2
Å 的范围分为-2, -1	98, -1.96,,1.96,1.98,2 等坐标点,	原子核位于坐标原点 x = y =	z = 0,对应的数组下标是
(101,101,101)。变	量 psi 中包括了 1s 轨道在每个三维坐	标点上的数值,在显示时数值	的大小以不同颜色来表示。
观察并描述氢原子 1	s 轨道的形状和剖面图的特征:		
2. 输入 x=-2:0.02:2;	(注意分号) 并回车: 🍂 >> x=-2:0.	02:2;尽管没有返回结果,这样	羊已经定义了一组 x 轴坐标
值,从-2到2每隔(0.02 具有一个坐标点。		
3. 输入 plot(x, psi(10	1,:,101));并回车: 🍂 >> plot(x, ps:	i(101,:,101));在作图窗口显	示的是当 y = z = 0 时,1s 轨
道波函数沿 x 轴变化	的规律。这幅图与教材上的哪幅图是	是对应的(请写出图号,下同)	?
4.输入 plot(x, psi(10:	1,:,101).^2); (注意^之前的点)并回	$ \stackrel{f_*}{=} \Rightarrow plot(x, psi(101, $:,101).^2);在作图窗口显
示的是当 y = z = 0 时	, 1s 轨道波函数的平方沿 x 轴变化的	的规律。这幅图与教材上的哪幅	福图是对应的?
- た) plot/y y A2 *	psi(101,:,101).^2); (注意语句中的点	i) 同左 fr >> plot/y y o3	* pg://101 - 101) 03)-
	:当 y = z = 0 时,x ² ψ(x) ² 沿 x 轴变化的		
压压时图 口邪幼朋友	, у - 2 - О н 1 , _ ^ Ψ(^) /日 ^ 畑又化印	J/ル 〒。 ~ 『田日 J 秋 小 工 ロ 『別 惟	151/CV1/77111 •
点击工具栏上的	安钮,用十字形鼠标在曲线上选择数	女据点,并配合键盘上的←→箭	5头寻找曲线最大值。图中
x²ψ(x)²的最大值所对	↑应的横坐标 x 是多少,具有什么物理	里意义?	_

6. 输入 sum(sum(psi.^2))) * 0.02^3 (注意没有分号)并回车, 🗲 >> sum(sum(psi.^2))) * 0.02^3 , 返 回的计算结果(ans =)是:__

这条输入语句的含义是求三维积分 $\iiint |\psi|^2 dx dy dz$,按照程序的坐标点设置,此处 dx = dy = dz = 0.02。此三维积



分的物理含义是:
无需计算,理论积分值应该为:
7. 输入 sum(sum(sum(psi.^2 .* r))) * 0.02^3 并回车,🍂 >> sum(sum(sum(psi.^2 .* r))) * 0.02^3 ,返回的计算
结果(ans =)是:
这条输入语句的含义是求三维积分 $ar r=\iiint oldsymbol{\psi} ^2 r \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$,也就是将轨道在空间各位置的半径 r 按照电子在此位
置出现的概率密度做加权平均,得到的是 1s 轨道的平均轨道半径 $ar{r}$ 。根据 OGC 教材第 5.7 式(第八版 OGC 教材第
5.9 式), 1s 轨道的平均轨道半径理论值是多少?请计算:
(5)氢原子 2p,3d 轨道波函数
1. 输入[psi,r]=Hydrogen_2p;(注意分号)并回车即可计算 2p 轨道的波函数。根据 2p 轨道的半径,x 轴的坐标点
定义为 x=-5:0.05:5;, 坐标微元 d=0.05。重复(4)氢原子 1s 轨道波函数中的相关步骤。
(1)观察并描述氢原子 2p 轨道的形状和剖面图的特征:
(3)输入 plot(x, psi(101,:,101)); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
(4) 输入 plot(x, psi(101,:,101).^2); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
(5) 输入 plot(x, x.^2.* psi(101,:,101).^2); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
图中 x²ψ(x)² 的最大值所对应的横坐标 x 是多少,具有什么物理意义?
(6) 输入 sum(sum(sum(psi.^2))) * 0.05^3 并回车,返回的计算结果(ans =)是:
此处 dx = dy = dz = 0.05。此三维积分的物理含义是:
无需计算,理论积分值应该为:
(7)输入 sum(sum(sum(psi.^2 .* r))) * 0.05^3 并回车,返回的计算结果(ans =)是:
2p 轨道的平均轨道半径理论值是多少?请计算:
2. 输入[psi,r]=Hydrogen_3d;(注意分号)并回车即可计算 3d 轨道的波函数。根据 3d 轨道的半径, x 轴的坐标点定义为 x=-10:0.1:10;, 坐标微元 d=0.1。重复(4) 氢原子 1s 轨道波函数中的相关步骤。
(1)观察并描述氢原子 3d 轨道的形状和剖面图的特征:
(3) 输入 plot(x, psi(101,:,101)); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
(4)输入 plot(x, psi(101,:,101).^2); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
(5)输入 plot(x, x.^2.* psi(101,:,101).^2); 这幅图与教材上的哪幅图是对应的?
图中 x²ψ(x)² 的最大值所对应的横坐标 x 是多少,具有什么物理意义?
(6) 输入 sum(sum(psi.^2))) * 0.1^3 并回车,返回的计算结果(ans =)是:
此处 dx = dy = dz = 0.1。此三维积分的物理含义是:
无需计算,理论积分值应该为:
(7) 输入 sum(sum(sum(psi.^2.* r))) * 0.1^3 并回车,返回的计算结果(ans =)是:
3d 轨道的平均轨道半径理论值是多少?请计算:
SIGNATURE/签字 DATE/日期

