


Title/标题 波函数及原子轨道


8 班 12 号

Name/姓名 王天一 Student ID/学号 2023511044 Date/日期 2024/10/25 页码 1

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 traveling_wave.avi.m 程序文件。

2. 点击程序编辑器中的图标  运行程序。

3. 程序运行后会弹出对话框提示选择保存 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系列行波的运动图像, 持续约 5 秒后停止, 运动图像保存为 traveling_wave.avi 文件。

5. 在文件浏览器中双击 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 $A = 1$ 、波长 $\lambda = 10$ 、频率 $\nu = \frac{1}{2}$ 和波速 $s = 5$ 。

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。找到表示行波运动的关键语句:

$$y = A * \sin(2 * \pi * (x / \lambda - t / T))$$

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:

$$y = A * \sin(2 * \pi * (x / \lambda + t / T))$$

将动画保存为 traveling_wave2.avi 文件, 观察行波运动发生的变化: 行波向相反方向运动

原因为: 波动方程中的正负号控制了行波的传播方向。负号代表波沿正方向传播, 正号则代表波沿反方向传播。通过改变符号, 可以改变波的传播方向。

(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系列驻波的运动图像, 持续约 5 秒后停止, 运动图像保存为 standing_wave.avi 文件。

3. 在文件浏览器中双击 standing_wave.avi 文件观看驻波的运动图像。使用秒表并根据图中显示的坐标, 确定此驻波的波长 $\lambda = 10$ 、频率 $\nu = \frac{1}{2}$ 、各个节点的位置: 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45。

振幅 A 随横坐标 x 变化的规律: 在腹点处振幅最大, 在节点处振幅最小。

4. 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, 并找到表示驻波运动的关键语句:

$$y = A * \sin(2 * \pi * (x / \lambda)) * \cos(2 * \pi * (t / T));$$

将其中的 sin 函数改为 cos, 并重新运行程序:

$$y = A * \cos(2 * \pi * (x / \lambda)) * \cos(2 * \pi * (t / T));$$

将动画保存为 standing_wave2.avi 文件, 观察驻波运动发生的变化: 驻波节点和腹点与原来相反

原因为: 正弦函数会在 $x=0$ 及其整数倍半波长处形成节点, 而余弦函数则会在 $y=0$ 处形成腹点, 从而使修改后的驻波节点和腹点位置互换。

(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：

$$\psi_1 = \sin\left(\frac{\pi x}{10}\right)$$

$$\psi_2 = \sin\left(\frac{3\pi x}{10}\right)$$

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： $|\psi_1|^2$ 和 $|\psi_2|^2$ 是两个波函数对应的概率密度，它们表示粒子在不同位置的概率分布。由于 ψ_2 的波数较大，所以概率密度有更多的波动。

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：

$$S_1 = \int_0^L |\psi_1|^2 dx$$

根据积分的几何意义，无需经过计算，求出 S_1 的值。

$$S_1 = 5$$

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 $S_2 = \int_0^L |\psi_2|^2 dx$ 的值。

$$S_2 = 5$$

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。

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.4472$$

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.4472$$

C_1 和 C_2 与 S_1 和 S_2 分别是什么关系？归一化系数 C_1 和 C_2 是为了使波函数的模方积分等于 1，因此

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{S_1}}, C_2 = \frac{1}{\sqrt{S_2}}$$

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：粒子在势阱中的概率分布。经过归一化处理后，它们的总概率为 1，符合量子力学的归一化条件。

8. 按空格或回车键继续，分别求出红色部分阴影面积 $S_3 = \int_0^L |\psi_3|^2 dx$ 和蓝色部分阴影面积 $S_4 = \int_0^L |\psi_4|^2 dx$ 。

$$S_3 = 1$$

$$S_4 = 1$$

9. 按空格或回车键继续，从上至下 3 幅图分别显示的是波函数 ψ_3 本身的值，以及其对横坐标 x 的一次和二次导数：

$$\psi_3' = \frac{d\psi_3}{dx}, \quad \psi_3'' = \frac{d^2\psi_3}{dx^2}$$

无需计算，观察 ψ_3' 与 ψ_3'' 的函数形式并解释 ψ_3 、 ψ_3' 、 ψ_3'' 之间的关系：均为三角函数形式。 ψ_3 是波函数的变化率，表示粒子在位置 x 的概率密度的变化情况。 ψ_3'' 表示波函数的二次变化率，根据薛定谔方程，二阶导数与能量有关。

附知商 自 五

Student ID: 2023010101

DATE FILED 3/27/77

HH HH

解法二 由 $\frac{1}{a} = \frac{1}{b} + \frac{1}{c}$ 得 $\frac{1}{a} = \frac{1}{b} + \frac{1}{c}$

外例 □ □ 出

$$= \frac{a^2}{b^2} \cdot \frac{b^2}{a^2} = 1$$

81 000125

[illegible]

(4) 极限干土抗拉能雨地


1. 在 Matlab 命令窗口输入 `[pbl,r]=HydF8888n_1b;` (作坐标轴) 并回车, 在 `cc [pbl,r]=HydF8888n_1b;` 程序运行完毕并弹出画面下 1b 轨道的剖面图, 并以回计算结果 `pbl` 和 `r`, 在 Matlab 命令窗口的 `Workspace` 窗口中显示 `pbl` 和 `r` 为三维数组, 每一个维度只有 301 个数据点, 该图就把 3 维空间中的 `xyz` 坐标从 3 个轴 `x` 的范围分为 `-2, -1.98, -1.96, ..., 1.96, 1.98, 2` 轴坐标, 原点在 `xyz` 轴上, 对应的轴用下标法 `(101,101,101)`, 数组 `pbl` 中包括了 1b 轨道在每一个坐标轴上的数据, 在显示时若用 `plot` 命令画出 `pbl` 的剖面图, 观察并描述画面下 1b 轨道的形状和剖面图的特征, 轨道呈球形, 剖面图表示为从原点开始的直线。

2. 输入 $x = -2:0.02:2$ (半圆坐标) 并回车, 在 $y = 2:0.02:2$ 尽管没有回车结束, 该坐标轴上的 x 轴坐标值, 从 -2 到 2 每隔 0.02 有一个坐标点;

3. 输入 `plot(x, beta(101:n, 101))`; 并回车, 显示 `beta(101:n, 101)` 在作图窗口显示的结果当 $y = 0$ 时, 该函数沿 x 轴变化的规律。这幅图与教材上的哪幅图是对应的 (请写出图号, 下同)? 图 7.7(b)

4. 输入 `plot(x, psi(101:i, 101), 'A9');` (将 A 之前的点) 并回车, 你会发现 $B \pm 0.01$, $B \pm 1.01$, $B \pm 2.01$ 在作图时显示的是当 $y = z = 0$ 时, 10 轨道波函数的平方沿 x 轴变化的规律, 该幅图与教材上的幅图是相应的。 6-7 (2)

5. 输入 `plot(x, x.^2 * poly(101,i,101).^2)` (注意语句中的点)回车, 在 `plot(x, x.^2 * poly(101,i,101).^2)` 在作图窗口显示的是当 $y = z = 0$ 时, $x^2 \psi(x)^2$ 沿 x 轴变化的规律, 该幅图与教材上的哪幅图是相对应的? 图 5.18(c)

由工具栏上的按钮，用十字形鼠标在曲线上选择数据点，片侧有曲线上的点而也可得出数据点值，图中 $\psi(x)$ 的最大值所对应的横坐标 x 是多少，凡有什么物理意义？对应的横坐标为0.54

物理意义为电子出现在该位置的概率大小

6. 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{pow}(2, i))) * 0.01^i)$ (注圆括号有分号) 并回车, 此时 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{pow}(2, i))) * 0.01^i)$ 的结果 (即结果) 是, 0.9929

这条输入语句的含义是求二重积分 $\iiint_V |\varphi| dx dy dz$ ，按照程序的坐标变换，此外 $dx = dy = dz = 0.01$ ，此二重积

分的物理含义是：电子出现在整个空间中的概率总和

无需计算，理论积分值应该为：1

7. 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2 .* r))) * 0.02^3$ 并回车， $\text{fx} >> \text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2 .* x))) * 0.02^3$ ，返回的计算结果 (ans =) 是：0.7767

这条输入语句的含义是求三维积分 $\bar{r} = \iiint |\psi|^2 r \, dx \, dy \, dz$ ，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 \bar{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： $\bar{r}_{1s} = \frac{3}{2} a_0$

(5) 氢原子 2p, 3d 轨道波函数

1. 输入 $[\text{psi}, r] = \text{Hydrogen_2p}$; (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：哑铃形，有两个对称叶瓣，中间有一个点

(3) 输入 $\text{plot}(x, \text{psi}(101, :, 101))$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.10 图 1

(4) 输入 $\text{plot}(x, \text{psi}(101, :, 101).^2)$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.10 图 3 无

(5) 输入 $\text{plot}(x, x.^2 .* \text{psi}(101, :, 101).^2)$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.10 图 3

图中 $x^2 \psi(x)^2$ 的最大值所对应的横坐标 x 是多少，具有什么物理意义？ $x = 2.1$ 电子出现在 $x = 2.1$ 处概率最大

(6) 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2))) * 0.05^3$ 并回车，返回的计算结果 (ans =) 是：0.9852

此处 $dx = dy = dz = 0.05$ 。此三维积分的物理含义是：电子在整个空间中出现的总概率

无需计算，理论积分值应该为：1

(7) 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2 .* r))) * 0.05^3$ 并回车，返回的计算结果 (ans =) 是：2.5557

2p 轨道的平均轨道半径理论值是多少？请计算： $\bar{r} = 5 a_0$

2. 输入 $[\text{psi}, r] = \text{Hydrogen_3d}$; (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：四叶瓣形，波函数在空间中有多个节点面和变号交替区域

(3) 输入 $\text{plot}(x, \text{psi}(101, :, 101))$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.14 图 6

(4) 输入 $\text{plot}(x, \text{psi}(101, :, 101).^2)$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.14 图 6 无

(5) 输入 $\text{plot}(x, x.^2 .* \text{psi}(101, :, 101).^2)$ ；这幅图与教材上的哪幅图是对应的？5.1.6

图中 $x^2 \psi(x)^2$ 的最大值所对应的横坐标 x 是多少，具有什么物理意义？ $x = 4.8$ 电子出现在 4.8 处的概率最大

(6) 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2))) * 0.1^3$ 并回车，返回的计算结果 (ans =) 是：0.9842

此处 $dx = dy = dz = 0.1$ 。此三维积分的物理含义是：电子存在于整个空间中的总概率

无需计算，理论积分值应该为：1

(7) 输入 $\text{sum}(\text{sum}(\text{sum}(\text{psi}.^2 .* r))) * 0.1^3$ 并回车，返回的计算结果 (ans =) 是：5.3761

3d 轨道的平均轨道半径理论值是多少？请计算： $\bar{r} = \frac{1}{2} a_0 (3 \times 9 - 2(2+1)) = \frac{7}{2} a_0$