



Title/标题 _____ 波函数及原子轨道 _____ 班 _____ 号

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 `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 $A =$ _____、波长 $\lambda =$ _____、频率 $\nu =$ _____ 和波速 $s =$ _____。
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： _____

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 $\lambda =$ _____、频率 $\nu =$ _____、各个节点的位置： _____，振幅 A 随横坐标 x 变化的规律： _____

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为： _____

原因为： _____

(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： $\psi_1 =$ _____

$\psi_2 =$ _____

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：

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

根据积分的几何意义，无需经过计算，求出 S_1 的值。

$S_1 =$ _____

5. 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。

$S_2 =$ _____

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 $S_3 = \int_0^L |\psi_3|^2 dx$ 和蓝色部分阴影面积 $S_4 = \int_0^L |\psi_4|^2 dx$ 。

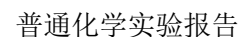
$S_3 =$ _____ $S_4 =$ _____

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

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：_____

SIGNATURE/签字

DATE/日期



Name/姓名 Student ID/学号 Date/日期 页码

$$H\psi_3 = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi_3}{dx^2}$$
$$H\psi_3 = -\frac{\psi_3''}{8\pi^2}$$
$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\frac{d^2\psi_3}{dx^2}=E_3\psi_3$$

根据 OGC 教材第 4.37 式, E_3 的计算值是多少 (写出计算过程)?

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，`fx >> 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 $\bar{r} = \iiint |\psi|^2 r \, dx dy dz$ ，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：_____

（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 $x^2\psi(x)^2$ 的最大值所对应的横坐标 x 是多少，具有什么物理意义？_____

（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 $x^2\psi(x)^2$ 的最大值所对应的横坐标 x 是多少，具有什么物理意义？_____

（6）输入 `sum(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

