Филимонов Степан РЛ6-31

Лабараторная номер 2

Задача:

Волновая функция, описывающая *состояние микрочастицы движущейся в сферически симметричном силовом поле* с расстоянием r до центра имеет вид:

`Y(r, t) = A*exp(-r/a)*exp(-i*(E/h)*t)`

Здесь:

r - расстояние силового центра;

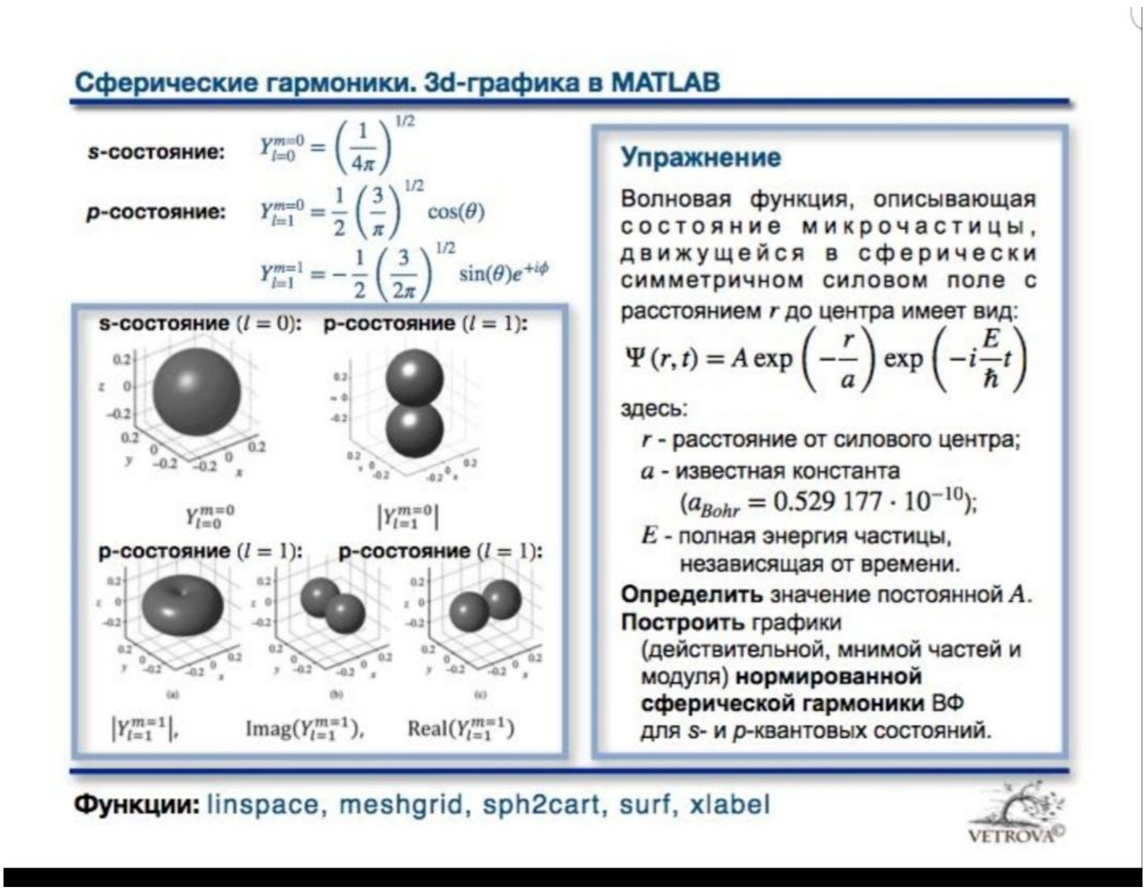
a - известная константа(a = 0.529177*10^(-10));

E - полная энергия частицы независящая от времени.

1) Определить занечение постоянной А.

2) Построить графики (действительной, мнимой частей и модуля) **нормиравнной сферической гармоники** ВФ для ***s-*** и ***p-*** квантовых состояний.

Фото задания:



Теория:

Сферические функции — представляют собой угловую часть семейства ортогональных решений уравнения Лапласа, записанную в сферических координатах.

Квантовое состояние — любое возможное состояние, в котором может находиться квантовая система*. Чистое квантовое состояние может быть описано:

- *В волновой механике* — волновой функцией,
- *В матричной механике* — вектором состояния, или полным набором квантовых чисел для определённой системы.

Эти описания математически эквивалентны.

Главное квантовое число — целое число, для водорода и водородобододных атомов определяет возможные значения энергии.Главное квантовое число обозначается как n. Главное квантовое число связано с радиальным квантовым числом, nr, выражением:

$$n = n_r + \ell + 1$$

где ℓ — Оробитальное квантовое число и *nr* равно числу узлов радиальной части волновой функции.

Оробитальное квантовое число (*ℓ)* - число определяющие форму электронного облака.

Магнитное квантовое число (*m*) - характеризует ориентацию в пространстве орбитального момента импульса электрона или пространственное расположение атомной орбитали.

**квантовая система - Реальные или модельные системы, подчиняющиеся законам квантовой физики, называют квантовыми системами. Пример: электрон в атоме водорода.*

1) Найдем коэфициент А:

$$\int_V |\psi|^2 \mathrm{dV} = 1$$

Раскрываем в сферических кординатах:

$$\int_{r=0}^{\infty}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_0^{\pi} |\Psi|^2 * r^2 * a^3 * \sin\theta \,\mathrm{dr}\, d\phi\, d\theta = 1$$

Сокращаем:

$$\int_{r=0}^{\infty} |\Psi|^2 * 4 * \pi * a^3 \mathrm{dr} = 1$$

Подставим уравненние $\Psi = A * \exp\left(-\frac{r}{a}\right) * \exp\left(-i * \frac{E}{\hbar} * t\right)$:

$$\int_0^{\infty} |A * \exp\left(-\frac{r}{a}\right) * \exp\left(-i * \frac{E}{\hbar} * t\right)|^2 * 4 * \pi * a^3 \mathrm{dr} = 1$$

Преобразуем и вынесем $4 * \pi * |A|^2$, а так же подставим мнимую часть без минуса, чтобы сократить ее:

$$4 * \pi * |A|^2 * a^3 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r}{a}\right) * \exp\left(-i * \frac{E}{\hbar} * t\right) * \exp\left(-\frac{r}{a}\right) * \exp\left(i * \frac{E}{\hbar} * t\right) \mathrm{dr} = 1$$

, тогда:

$$4 * \pi * |A|^2 * a^3 \int_0^\infty \frac{a^2}{2} * \exp\left(-\frac{2 * r}{a}\right) \mathrm{dr} = 1$$

это

$$4\pi |A|^2 \frac{a^3}{-4} e^{\frac{-2r}{a}} |_0^\infty = 1$$

Преобразуем:

$$A = \sqrt{\frac{1}{4\pi a^3}}$$

Так как a = 0.529177*10^(-10) , то A равно $\approx 1,465 \cdot 10^{15}$

Проведем проверку, решим интеграл в MATLAB, используем библиотеку Math Toolbox

Код Matlab:

```
syms x;
a = 0.529177*1e-10;
A = sqrt(1 /( 4*pi*int(exp(-2*x/a)*x.^2,0, inf)));
A = double(A)
```

```
A = 1.4656e+15
```

2) Построим графики:

Код Matlab:

Постоянные значения:

```
cla reset;
i = sqrt(-1);
phi = linspace(0, 2*pi);
theta = linspace(0, pi);
[Phi, Theta] = meshgrid(phi, theta);
Azimuth = Phi;
Elevation = (pi/2) - Theta;
rSstatus = sqrt(1/(4*pi));
rPm0status = (1/2)*sqrt(3/pi)*cos(Theta);
rPm1status = (-1/2)*sqrt(3/(2*pi)).*sin(Theta).*exp(i.*Phi);
```

График для ***s-состояния*** $Y_{l=0}^{m=0}$:

```
plot(Azimuth, Elevation, rSstatus, 1); %*(см. ниже)
title('Y_{l=0}^{m=0}');
xlabel('x',"Position",[-0.3, -0.76]);
```

```
ylabel('y',"Position",[-0.66, -0.4]);
zlabel('z','Rotation',0);
```

Графики для ***p-состояния*** $|Y_{l=1}^{m=0}|$:

```
plot(Azimuth, Elevation, abs(rPm0status), 2);
title('|Y_{l=1}^{m=0}|')
xlabel('x',"Position",[-0.5, -1.05]);
ylabel('y',"Position",[-0.9, -0.7]);
zlabel('z','Rotation',0);
```

Графики для ***p-состояния*** $|Y_{l=1}^{m=1}|$:

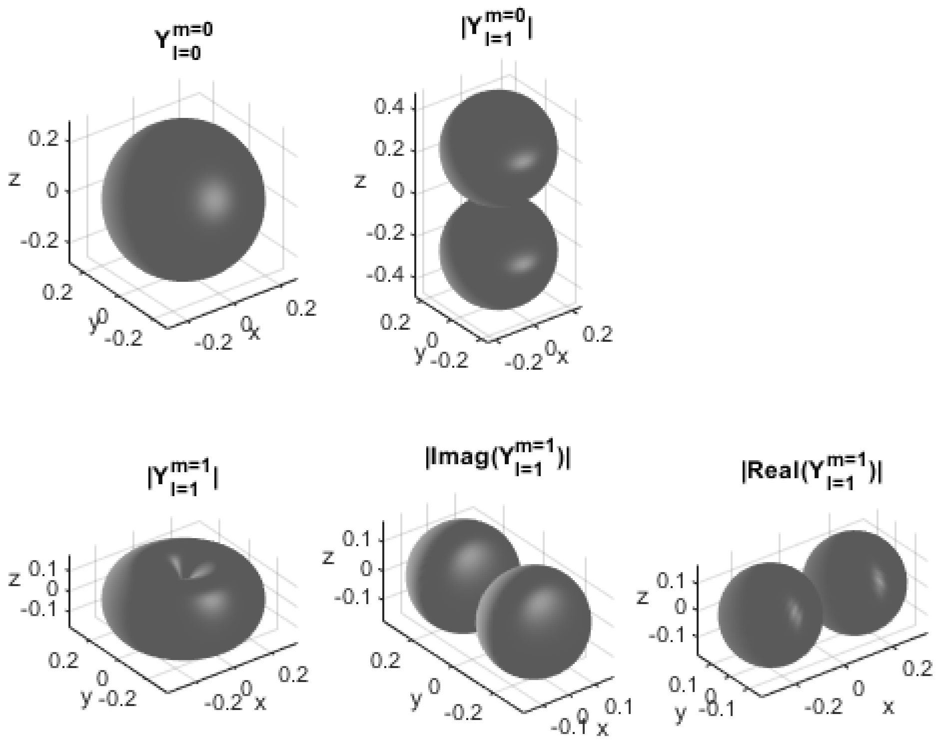
```
plot(Azimuth, Elevation, abs(rPm1status), 4);
title('|Y_{l=1}^{m=1}|');
xlabel('x',"Position",[-0.2, -0.75]);
ylabel('y',"Position",[-0.7, -0.3]);
zlabel('z','Rotation',0);
```

Графики для ***p-состояния*** $|\mathrm{imag}(Y_{l=1}^{m=1})|$:

```
plot(Azimuth, Elevation, abs(imag(rPm1status)), 5);
title('|Imag(Y_{l=1}^{m=1})|');
xlabel('x',"Position",[-0.17, -0.7]);
ylabel('y',"Position",[-0.47, -0.25]);
zlabel('z','Rotation',0);
```

Графики для ***p-состояния*** $|\mathrm{real}(Y_{l=1}^{m=1})|$:

```
plot(Azimuth, Elevation, abs(real(rPm1status)), 6);
title('|Real(Y_{l=1}^{m=1})|');
xlabel('x',"Position",[-0.17, -0.6]);
ylabel('y',"Position",[-0.7, -0.25]);
zlabel('z','Rotation',0);
```



Время:

```
datetime('now')
```

```
ans = datetime
   11-Nov-2021 10:13:46
```

*Функция создания графика:

```
function plot(Azimuth, Elevation, r, num)
  subplot(2, 3, num)
  [X,Y,Z] = sph2cart(Azimuth,Elevation,r);
  surfl(X,Y,Z);
  axis('equal');
  colormap("gray");
  shading interp;
end
```