

Задача:

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

$$Y(r, t) = A \exp(-r/a) \exp(-i(E/\hbar)t)$$

Здесь:

r - расстояние силового центра;

a - известная константа ($a = 0.529177 \cdot 10^{-10}$);

E - полная энергия яастицы независящая от времени.

1) Определить занечение постоянной A .

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

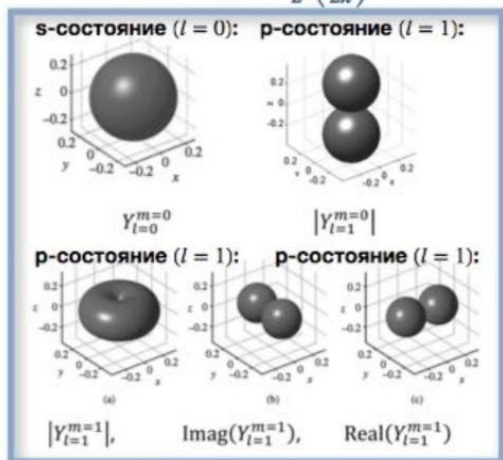
Фото задания:

Сферические гармоник. 3d-графика в MATLAB

s-состояние: $Y_{l=0}^{m=0} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$

p-состояние: $Y_{l=1}^{m=0} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$

$Y_{l=1}^{m=1} = -\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/2} \sin(\theta) e^{+i\phi}$



Упражнение

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

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

здесь:

r - расстояние от силового центра;

a - известная константа

$$(a_{Bohr} = 0.529177 \cdot 10^{-10});$$

E - полная энергия частицы, независящая от времени.

Определить значение постоянной A .

Построить графики

(действительной, мнимой частей и модуля) нормированной

сферической гармоник ВФ

для s - и p -квантовых состояний.

Функции: linspace, meshgrid, sph2cart, surf, xlabel



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 водородоподобных атомов определяет возможные значения энергии. Главное квантовое число обозначается как n . Главное квантовое число связано с радиальным квантовым числом, n_r , выражением:

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

где ℓ — Орбитальное квантовое число и n_r равно числу узлов радиальной части волновой функции.

Орбитальное 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 коэффициент A :

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1$$

Раскрываем в сферических координатах:

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

Сокращаем:

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

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

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

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

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

, тогда:

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

это

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

$$4 * \pi * |A|^2 * \left(-\frac{a}{2} * e^{\frac{-2 * \infty}{a}} + \frac{a}{2} * e^{\frac{-2 * 0}{a}} \right) = 1$$

$$4 * \pi * |A|^2 * \frac{a}{2} = 1$$

$$2 * \pi * |A|^2 * a = 1$$

Преобразуем:

$$A = \sqrt{\frac{1}{2 * \pi * a}}$$

Так как $a = 0.529177 * 10^{-10}$, то A равно $\approx 5,48 * 10^4$

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),0, inf)));
A = double(A)
```

```
A = 5.4855e+04
```

2) Построим графики:

Код Matlab:

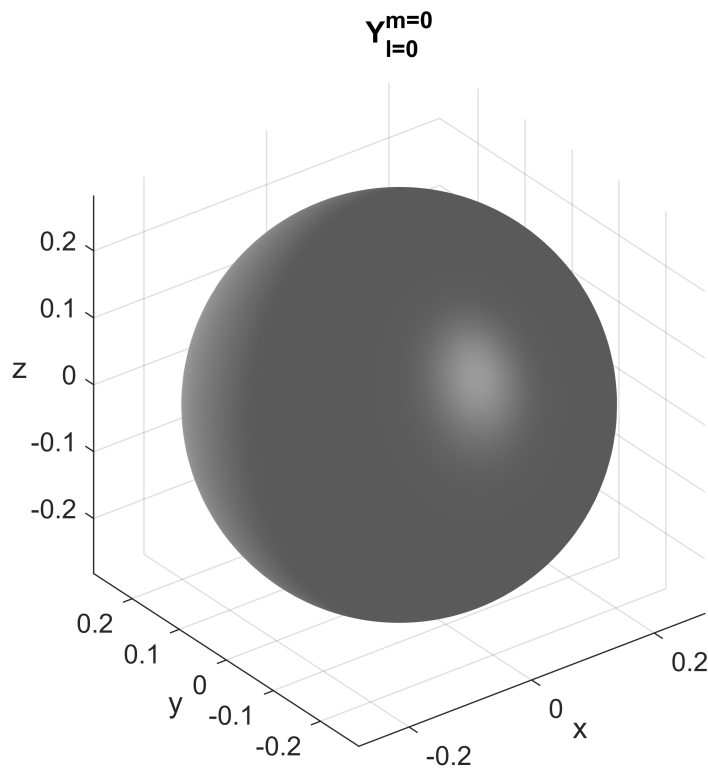
Постоянные значения:

```
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);
```

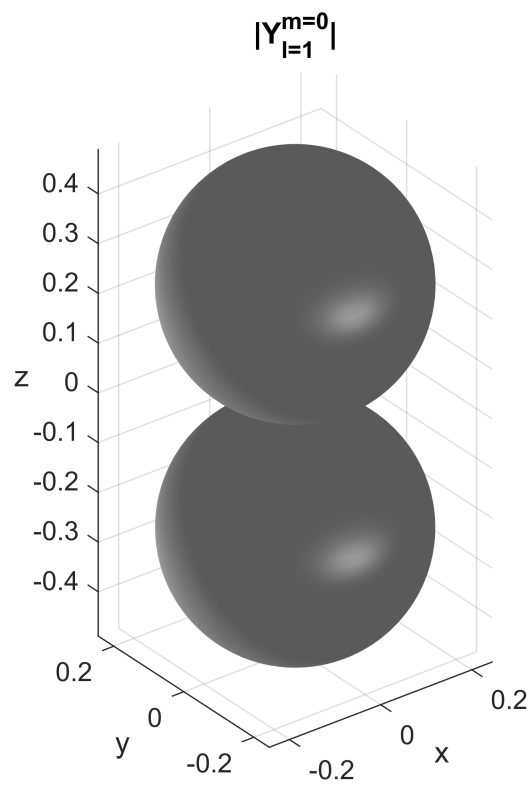
График для **s-состояния** $Y_{l=0}^{m=0}$:

```
plot(Azimuth,Elevation,rSstatus); %*(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);
```



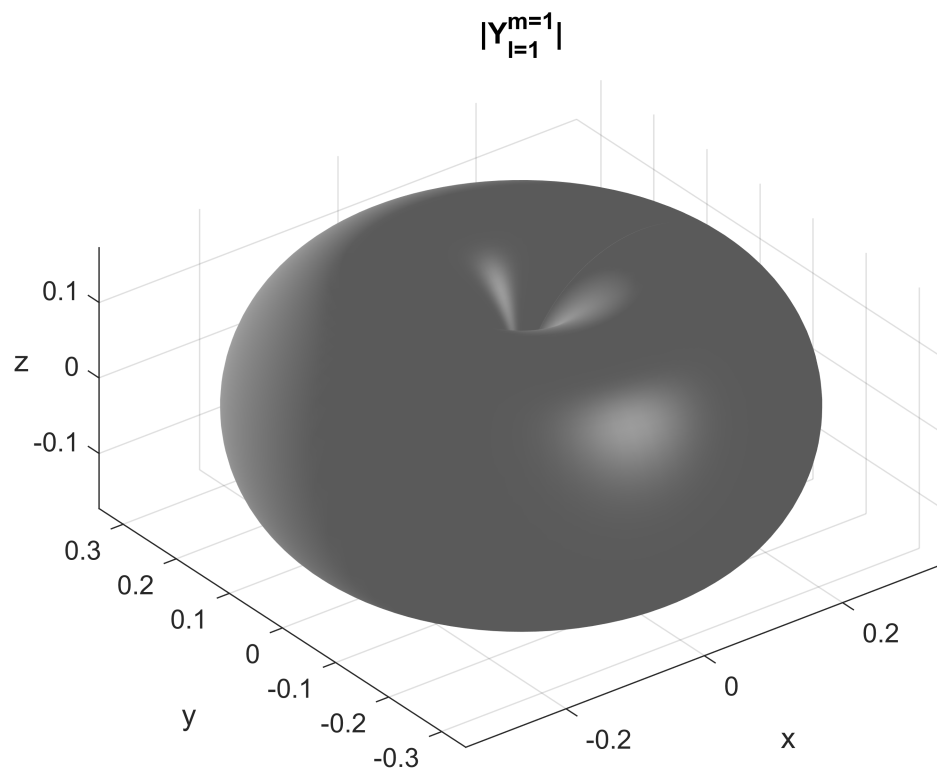
Графики для **p-состояния** $|Y_{l=1}^{m=0}|$:

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



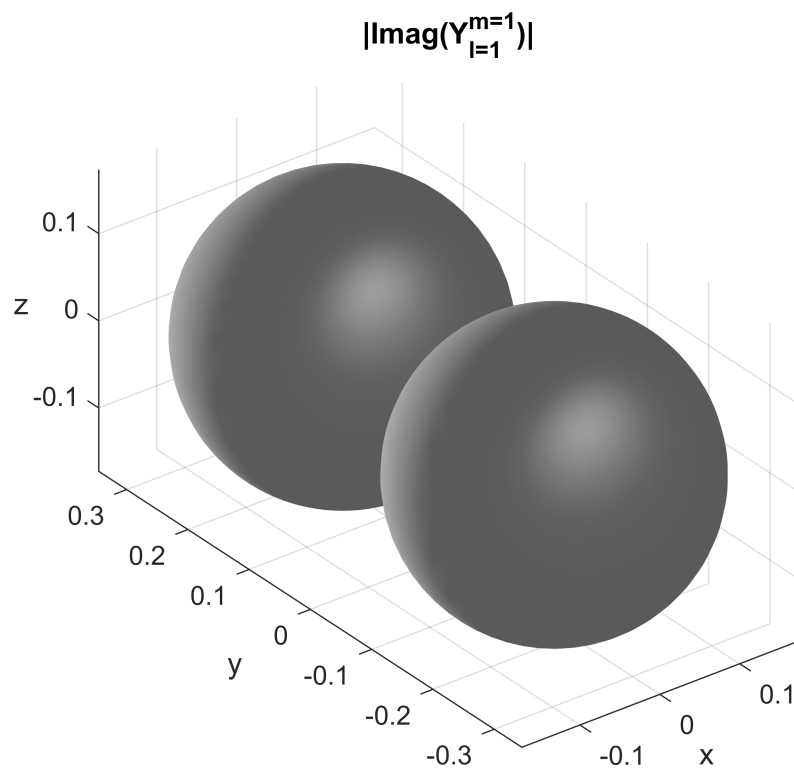
Графики для ***p*-состояния** $|Y_{l=1}^{m=1}|$:

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



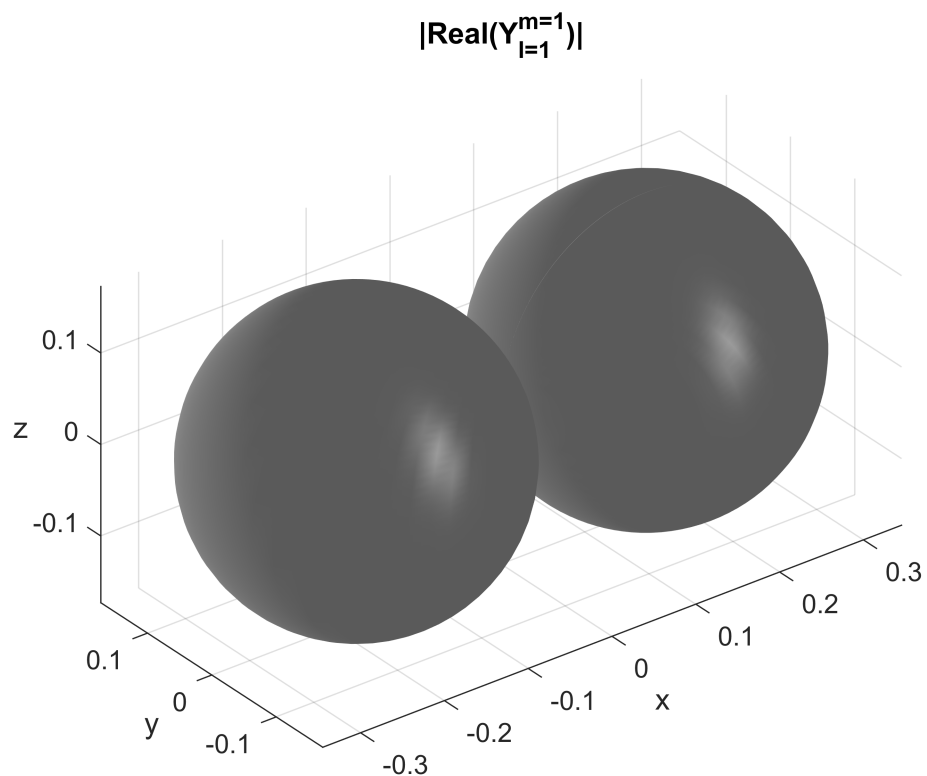
Графики для ***p*-состояния** $|\text{imag}(Y_{l=1}^{m=1})|$:

```
plot(Azimuth,Elevation,abs(imag(rPm1status)));
title(' |Imag(Y_{l=1}^{m=1})| ');
xlabel('x',"Position",[-0.2, -0.67]);
ylabel('y',"Position",[-0.45, -0.25]);
zlabel('z','Rotation',0);
```



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

```
plot(Azimuth,Elevation,abs(real(rPm1status)));
title(' |Real(Y_{l=1}^{m=1})| ');
xlabel('x',"Position",[-0.2, -0.5]);
ylabel('y',"Position",[-0.6, -0.25]);
zlabel('z','Rotation',0);
```



Время:

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

```
ans = datetime
      29-Sep-2021 12:55:04
```

*Функция создания графика:

```
function plot(Azimuth,Elevation,r)
[X,Y,Z] = sph2cart(Azimuth,Elevation,r);
surf1(X,Y,Z);
axis('equal');
colormap("gray");
shading interp;
end
```