



HomeWork №3

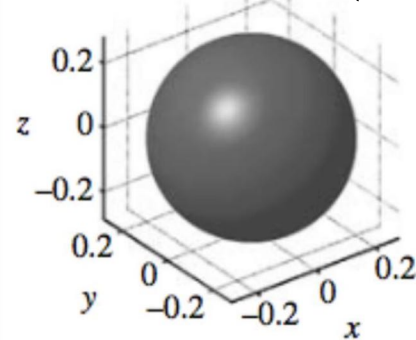
Сферические гармоники. 3d-графика в MATLAB

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

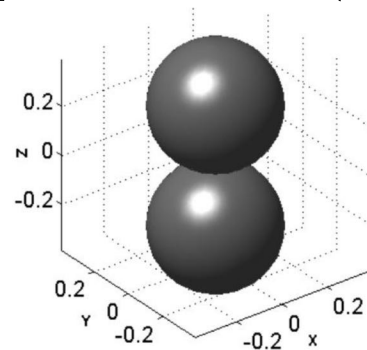
p-состояние: $Y_{l=1}^{m=0} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$

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

s-состояние ($l = 0$): **p-состояние ($l = 1$):**

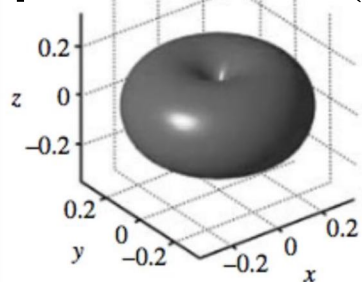


$Y_{l=0}^{m=0}$



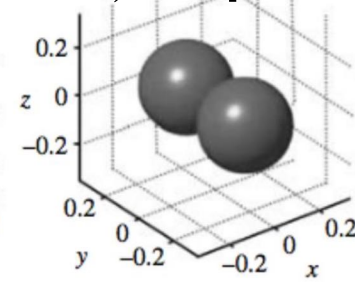
$|Y_{l=1}^{m=0}|$

p-состояние ($l = 1$):

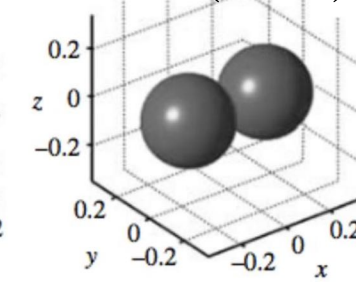


$|Y_{l=1}^{m=1}|$

p-состояние ($l = 1$):



$\text{Imag}(Y_{l=1}^{m=1})$



$\text{Real}(Y_{l=1}^{m=1})$

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

$$(a_{Bohr} = 0.529\,177 \cdot 10^{-10});$$

E - полная энергия частицы, независящая от времени.

Определить значение постоянной A .

Построить графики

(действительной, мнимой частей и модуля) **нормированной сферической гармоники ВФ** для s- и p-квантовых состояний.

Функции: linspace, meshgrid, sph2cart, surf, xlabel

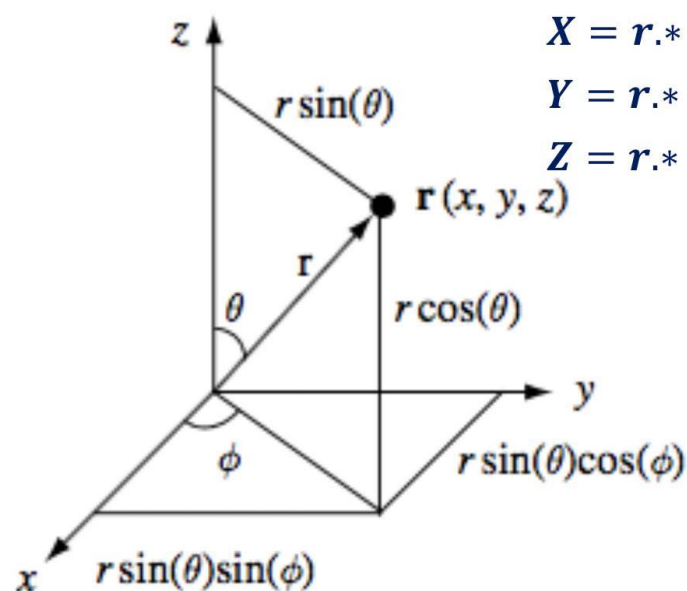
ВФ для квантовых состояний водородоподобных атомов

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Нормированная радиальная ВФ

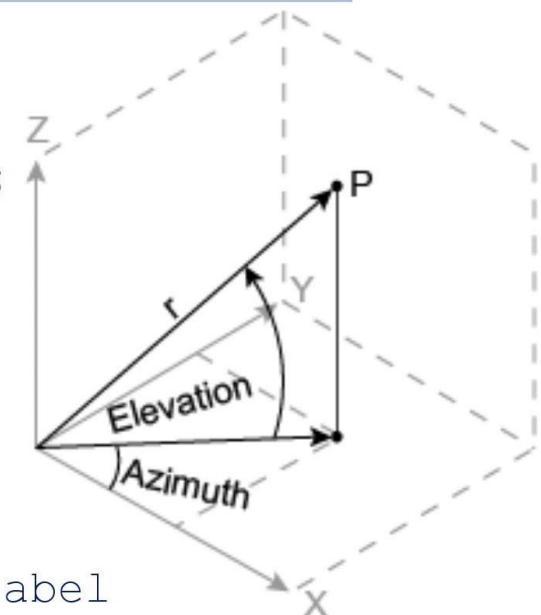
Сферические гармоники

| | | |
|----|---|--|
| 1s | $R_{n=1, l=0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Z}{a}r\right)$ | $Y_{l=0}^{m=0}(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$ |
| 2s | $R_{n=2, l=0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Z}{2a}r\right) \exp\left(-\frac{Z}{2a}r\right)$ | |
| 2p | $R_{n=2, l=1}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \left(\frac{Z}{2a}r\right) \exp\left(-\frac{Z}{2a}r\right)$ | $Y_{l=1}^{m=0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$ $Y_{l=1}^{m=1}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/2} \sin(\theta) e^{+i\varphi}$ |



$$\begin{aligned} X &= r \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi) \\ Y &= r \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi) \\ Z &= r \cdot \cos(\theta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [X, Y, Z] &= \text{sph2cart}\left(\phi, \frac{\pi}{2} - \theta, r\right) \\ \text{Azimuth} &= \phi; \text{Elevation} = \frac{\pi}{2} - \theta; \\ X &= r \cdot \cos(\text{Elevation}) \cdot \cos(\text{Azimuth}) \\ Y &= r \cdot \cos(\text{Elevation}) \cdot \sin(\text{Azimuth}) \\ Z &= r \cdot \sin(\text{Elevation}) \end{aligned}$$



Функции: linspace, meshgrid, sph2cart, surf, xlabel

