1. 径向电子云

类氢原子径向波函数有表达式



考察径向波函数模平方，也就是概率密度随半径变化。做出Z=1，n和l不同情况下的图像。再做出n=1，l=0，Z不同情况下的图像，此时概率密度有简单形式



随半径增大而减小，Z越大，在靠近原点处的值越大，随半径衰减越快，说明在靠近原子核的区域发现电子的概率更大。

1. 角向电子云

类氢原子角向波函数即相应的球谐函数，改变l,m,在球坐标系下做出其模平方的图像。l=0时有最好的对称性，是各向均匀的，。对一般的情况，考察球谐函数模平方，关于亦是均匀的，但随着l和m的不同，形状会有所改变，不一而足。绝对值的m，球谐函数仅有相位的差别。

1. 有限深势阱

势阱高度为，势阱两侧，外势为零，因此能量为负值。在势阱外，定义参数，满足，。在无穷远处，波函数趋于零，因此在势阱两侧，分别舍去B和A。在势阱内，定义参数，满足，。波函数及其导数在势阱边缘连续，给出四个边条件，加上波函数归一，共有五个条件。待求参数有四个线性系数和能量分立值，恰好也是五个。

考虑到势能的空间反演对称性，波函数可取为有确定宇称的形式。先考虑偶宇称情况，本征解在势阱内的形式为，左右两侧的系数相同，只需要考虑单侧边条件，有超越方程，只有数值解。式确定A的值。

奇宇称的情况，本征解在势阱内的形式为，左右两侧的系数符号相反，只需要考虑单侧边条件，有超越方程，只有数值解。式确定A的值。

注意到，与超越方程联立即可求解。做出两个方程的函数图象，解即是他们的交点。回代即得到A。做出分段函数图像，图像的间断解释为计算误差导致。

1. 薛定谔方程能量本征值

利用Schoroedinger.m，编写势函数，取能量下限值为零，上限值20，步长0.01，质量都取1。分别令N=0，L=0，基态能量E=3。令N=1，L=0，径向第一激发态能量E=7。

用变分法求解，试探波函数取作，对哈密顿量求期望值，得到，对求导并求导函数的实零点，得到，带回，得到基态本征能量限3.4641。与Schroedinger.m求得的准确值有一定差距，这是因为试探波函数直接取了库仑势的本征波函数，但是也符合能量限的含义。

再求径向第一激发态的能量，取正交归一的试探波函数，，代入哈密顿量，求得矩阵元，得到能量矩阵



求其本征值，得到



求导，解方程，再带入本征值表达式，得到能量上限值



基态本征能量限为3.08406，十分接近Schroedinger.nb的结果，第一激发态上限为9.19262，有一定差距，但是也符合能量限的含义。