Polecenia programu **wxMaxima**

potrzebne do zajęć *Wstęp do chemii kwantowej*

Część II. Funkcje specjalne.

Posługiwanie się funkcjami specjalnymi w programie wxMaxima możliwe jest po wykonaniu polecenia:

`load(orthopoly);`

powodującego załadowanie odpowiedniego pakietu (o nazwie `orthopoly`).

- **harmoniki sferyczne** (inaczej **funkcje kuliste**)

  `spherical_harmonic(l,m,theta,phi)`

  oznacza jedną z funkcji o nazwie harmoniki sferyczne, czyli funkcję $Y_l^m(\theta, \varphi)$ postaci:

  $$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{l,m} P_l^m(cos\theta) \mathrm{e}^{im\varphi} \quad \text{dla } m \geq 0 \tag{1}$$

  i

  $$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{l,|m|} P_l^{-m}(cos\theta) \mathrm{e}^{im\varphi} \quad \text{dla } m < 0 \tag{2}$$

  gdzie $P_l^m(cos\theta)$ oznacza stowarzyszony wielomian Legendre'a (*definicja - patrz niżej*), $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, natomiast czynnik normalizacyjny $N_{l,m}$ wyraża się wzorem:

  $$N_{l,m} = \left[\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} \tag{3}$$

- **stowarzyszone wielomiany Legendre'a**

  `assoc_legendre_p(l,m,u)`

  oznacza stowarzyszony wielomian Legendre'a $P_l^m(u)$, czyli wielomian zdefiniowany dla $m > 0$ jako:

  $$P_l^m(u) = (-1)^m (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_n(u) \tag{4}$$

  gdzie $P_l(u)$ oznacza wielomian Legendre'a (zwykły, *definicja - patrz niżej*).

- **wielomiany Hermite'a**

  `hermite(n,u)`

  oznacza wielomian Hermite'a stopnia n, czyli wielomian $\mathcal{H}_n(u)$, który można uzyskać przy pomocy następującego wzoru:

  $$\mathcal{H}_n(u) = (-1)^n \mathrm{e}^{u^2} \frac{d^n}{du^n} \mathrm{e}^{-u^2} \tag{5}$$

- **wielomiany Laguerre'a**

  `laguerre(n,u)`

  oznacza wielomian Laguerre'a, czyli wielomian $L_n(u)$ zdefiniowany jako:

$$L_n(u) = \frac{\mathrm{e}^u}{n!} \frac{d^n}{du^n} (u^n \mathrm{e}^{-u}) \tag{6}$$

- **wielomiany Legendre'a**

  `legendre_p(l,u)`

  oznacza wielomian Legendre'a stopnia l, czyli wielomian $P_l(u)$, który można uzyskać przy pomocy następującego wzoru:

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \tag{7}$$