

# 学习资料整理汇编

(考点或配套习题突击训练)

可以说物质的运动是具有统计意义的概率波；在空间某个区域波强度（即衍射强度）大的地方，粒子出现的机会多，波强度小的地方粒子出现的机会少。从数学角度看，这里说的机会是概率，也就是说，在空间区域内任一点波的强度与粒子出现的概率成正比。

### 第三节 氢原子结构的量子力学描述

1、*Schrödinger* 方程：
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$
式中 $\psi$ 是坐标 $x, y, z$ 的函数， $E$ 是系统总能量， $V$ 是势能， $m$ 是微观粒子质量， $h$ 是Planck常量。

2、(1)主量子数 $n$  在原子电子中最重要的量子化性质是能量。原子轨道的能量主要取决于主量子数 $n$ ，对于氢原子和类氢原子，电子的能量值取决于 $n$ 。 $n$ 的取值为1, 2, 3, 4, 5等正整数。 $n$ 越大电子离核的平均距离越远，能量越高。因此，可将 $n$ 值所表示的电子运动状态对应于K, L, M, N, O...电子层

(2)角量子数 $l$  原子轨道的角动量有角量子数 $l$ 决定。在多原子电子中原子轨道的能量不仅取决于主量子数 $n$ ，还受角量子数 $l$ 的影响。 $l$ 受 $n$ 限制， $l$ 只能取0到 $(n-1)$ 的整数，按照光谱学的规定，对应的符号为s, p, d, f, g...。 $n$ 一定， $l$ 取不同值代表同一电子层中不同状态的亚层。角量子数 $l$ 还表明了原子轨道的分布角度形状不同。 $l=0$ ，为s轨道，其角度分布为球形对称； $l=1$ ，为p轨道，其角度分布为哑铃型； $l=2$ 为d轨道，其角度分布为花瓣形。对多电子原子来说， $n$ 相同， $l$ 越大，其能量越大。

(3)磁量子数 $m$   $m$ 决定角动量在磁场方向的分量。其取值受角量子数 $l$ 的限制，从 $-l, \dots, 0, \dots, +l$ ，共有 $(2l+1)$ 个取值。磁量子数 $m$ 决定原子轨道在核外空间的取向。

$l=0$ ， $m$ 只有0一个取值，表示s轨道在核外空间只有一种分布方向，即以核为球心的球形。

$l=1$ ， $m$ 有+1, -1, 0三个取值，表示p亚层在空间有三个分别沿x轴，y轴，z轴的取向轨道，即轨道 $p_x, p_y, p_z$ 。

$l=2$ ， $m$ 有0, -1, +1, -2, +2五个取值，表示d亚层有五个取向的轨道，分别是轨道 $d_{z^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}, d_{x^2-y^2}$ 。

(4)自旋量子数 $m_s$  电子除轨道运动外，还有自旋运动。电子自旋运动的自旋角动量有自旋量子数 $m_s$ 决定。处于同一轨道上的电子自旋状态只能有两种，分别用自旋磁量子数

$-1/2$  和  $+1/2$  来确定。正是由于电子具有自旋角动量，使氢原子光谱在没有外磁场时会发生微小的分裂，得到了靠的很近的谱线。

- 3、一个原子轨道可以用  $n, l, m$  一组三个量子数来确定，但是原子层中每个电子的运动状态必须用  $n, l, m, m_s$  四个量子数来确定。四个量子数确定之后，电子在核外空间的运动状态就确定了。
- 4、概率密度是空间某单位体积内电子出现的概率。电子在核外空间某区域内出现的概率等于概率密度与该区域体体积的乘积。
- 5、电子云是概率密度的形象化描述。黑点密的地方电子出现的概率大；黑点稀疏的地方电子出现的概率小。
- 6、电子云有等密度图和界面图两种图示。在电子云等密度图中，每一个球面上的数字表示概率密度的相对大小。在电子云界面图中，界面实际上是一个等密度面，电子在此界面内出现的概率高于 90%，在此界面外出现的概率低于 10%，通常认为在界面外发现电子的

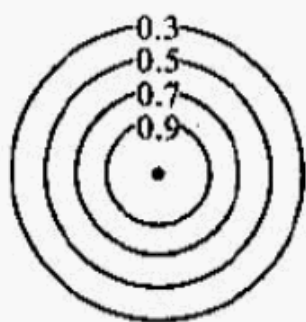


图 8-11 1s 电子云的等密度图

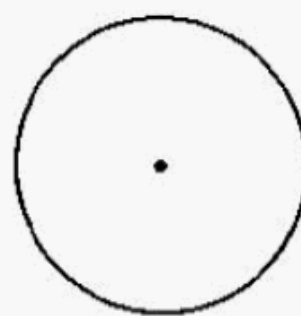


图 8-12 1s 电子云的界面图

概率可忽略不计。

- 7、氢原子各种状态的径向分布函数图中峰数  $N$  等于主量子数与角量子数之差，即  $N = n - l$ 。

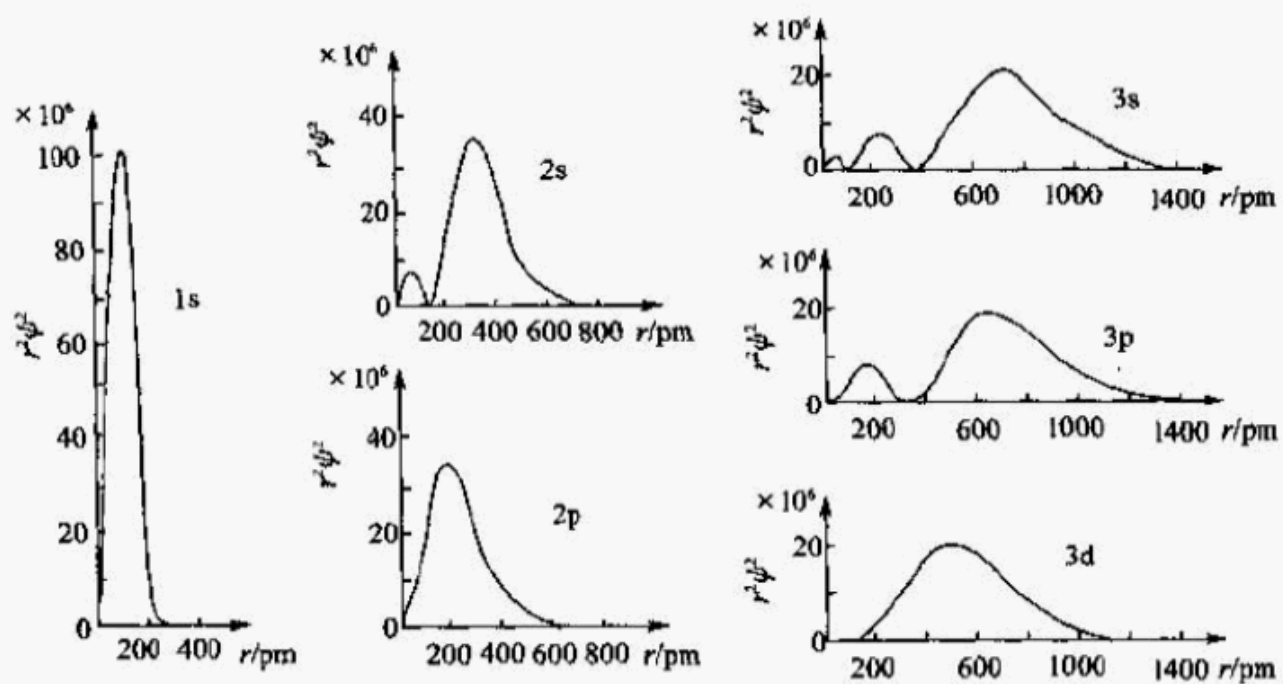


图 8-13 氢原子各种状态的径向分布图

1、原子轨道角度分布图与电子云角度分布图。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/848001056101006124>