径向分布图

2020年10月28日　　9:14

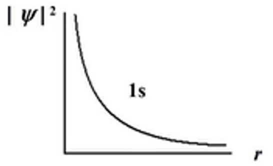
ψ（r，θ，φ）或 ψ（x，y，z）均有三个自变量，所以波函数 ψ 的图像无法在三维空间中画出，只好从各个不同的侧面去认识波函数 ψ 的图像。

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\cdot Y(\theta,\varphi)$$

可以从波函数的径向部分和角度部分，分别讨论其图像与 r 及 θ，φ 的关系。

径向概率密度分布图

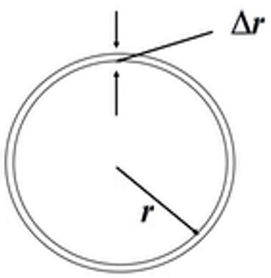
以概率密度$|\Psi|^2$为纵坐标，半径r为横坐标作图。下面曲线表明1s电子的概率密度$|\Psi|^2$随半径r的增大而减小



径向概率分度图

径向概率分布应体现随着r的变化，或者说随着离原子核远近的变化，在如图所示的单位厚度的球壳中，电子出现的概率的变化规律

这是一系列离核距离为 r，厚度为 Δr 的薄层球壳。



半径为 r 的球面，表面积为 $4\pi r^2$，由于球壳极薄，故球壳的体积近似为表面积与厚度之积，

即　　　$V=4\pi r^2\times\Delta r$

用 $|\psi|^2$ 表示球壳内的概率密度，由于球壳极薄，概率密度随 r 变化极小。故可以认为薄球壳中各处的概率密度一致。

用 $|\psi|^2$ 表示球壳内的概率密度，由于球壳极薄，概率密度随 r 变化极小。故可以认为薄球壳中各处的概率密度一致。

于是有 $W = |\psi|^2 \times V$

即厚度为 Δr 的球壳内电子出现的概率为

$$W = |\psi|^2 \times 4\pi r^2 \times \Delta r$$

故单位厚度球壳内概率为

$$\frac{W}{\Delta r} = \frac{4\pi r^2 \Delta r |\psi|^2}{\Delta r} = 4\pi r^2 |\psi|^2$$

令 $D(r) = 4\pi r^2 |R|^2$

$D(r)$ 称为径向分布函数，它表示径向概率随半径变化的情况。

用 $D(r)$ 对 r 作图，考察单位厚度球壳内的概率随 r 的变化情况，即得到径向概率分布图。

单位厚度球壳内概率为

$$D(r) = \underset{\text{体积}}{4\pi r^2}\ \underset{\text{密度}}{|\psi|^2}$$

离核近的球壳中概率密度大，但由于半径小，故球壳的体积小；

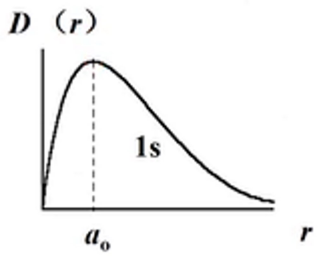
单位厚度球壳内概率为

$$D(r) = \underset{\text{体积}}{4\pi r^2}\ \underset{\text{密度}}{|\psi|^2}$$

而离核远的球壳中概率密度小，但由于半径大，故球壳的体积大。

所以径向分布函数 $D(r)$ 不是 r 的单调函数，其图像是有极值的曲线。

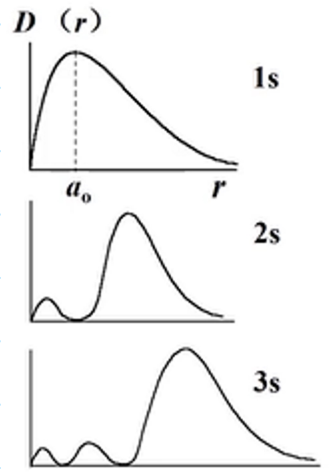
1s 的径向概率分布图如下



1s 在 $r = a_0$ 处概率最大，这是电子按层分布的第一层。

$a_0 = 53$ pm，a_0 称玻尔半径。

2s比1s在近核处



概率峰的数目等于（n-1）
最大的概率峰出现的次数与主量子数n和角量子数l有关

概率峰与概率峰之间，曲线与坐标轴相切处表示一个球面。在这个球面上电子出现的概率为零，这个球面称为**节面**。
节面的数目等于（n-l-1）