

量子数——主量子数n

2020年10月27日 19:06

量子数的概念

$$\psi_{n, l, m}(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

$$\psi_{2, 1, 0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} r e^{-\frac{zr}{2a_0}} \cos\theta$$

波函数 ψ 的下标 1, 0, 0; 2, 1, 0
所对应的 n, l, m 称为量子数。它们决定
着一个波函数所描述的电子及其所在原子轨
道的某些物理量的量子化情况。

主量子数 n

n 称为主量子数

取值 1, 2, 3, 4, ..., n 为正整数

光谱学上依次用 K, L, M, N... 表示

单电子体系（原子核外只有一个电子），电子的能量由 n 决定

$$E = -13.6 \text{ eV} \times \frac{Z^2}{n^2}$$

E: 电子能量 Z: 原子序数 eV: 电子伏特

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

n 的数值越大，电子具有的能量越高（单电子体系中）

对于氢原子：

$$n = 1 \quad E = -13.6 \text{ eV}$$

$$n = 2 \quad E = -3.40 \text{ eV}$$

... ..

$$n \rightarrow \infty \quad E = 0$$

即自由电子，其能量最大，为 0。

主量子数 n 只能取 1, 2, 3, 4 等正整数，故能量只有不连续的几种取值，即能量是量子化的。

所以 n 称为量子数

单电子体系，能量完全由 n 决定

但多电子体系的能量，同时受到其他量子数的影响，不完全取决于 n

主量子数 n 的意义，还表示核外电子离核的远近，或者电子所在的电子层数

n=1 表示第一层（K 层），离核最近

n=2 表示第二层；n 越大离核越远

n 的数值越大，电子离核越远，其具有的能量越高