6.2.2 主量子数和角量子数

天津大学

邱海霞

薛定谔方程

微观粒子运动特征之一

——波粒二象性

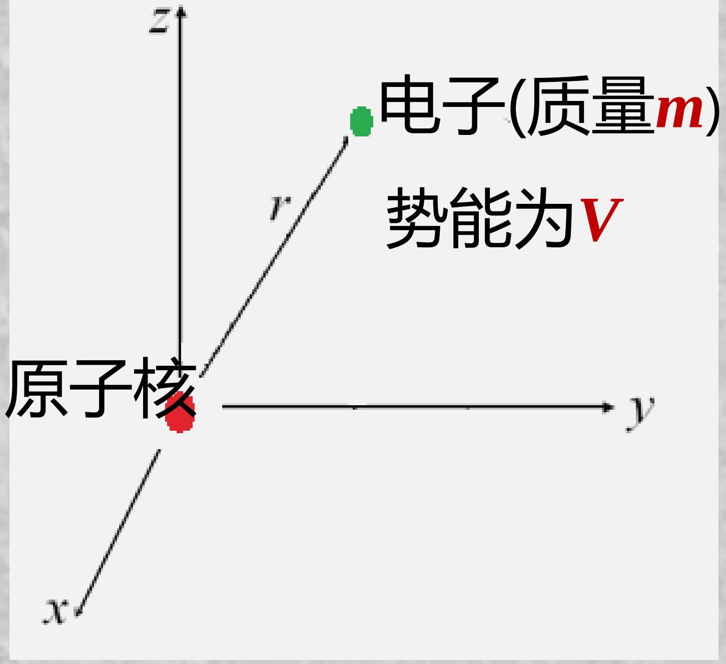
薛定谔（1887-1961）
奥地利物理学家

描述微观粒子波动性的波动方程(1926年)

薛定谔方程

为近代量子力学奠定了理论基础

薛定谔方程



核电场势能作用下电子的运动状态

Ψ：描述电子运动状态的波函数

E：系统总能量

波函数Ψ与系统总能量E的关系

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi=0$$

h:普朗克常数

已知条件：m,V

波函数ψ

解薛定谔方程

描述电子的运动状态

一系列波函数ψ 和相应的能量E

每个ψ： 核外电子的一种可能运动状态

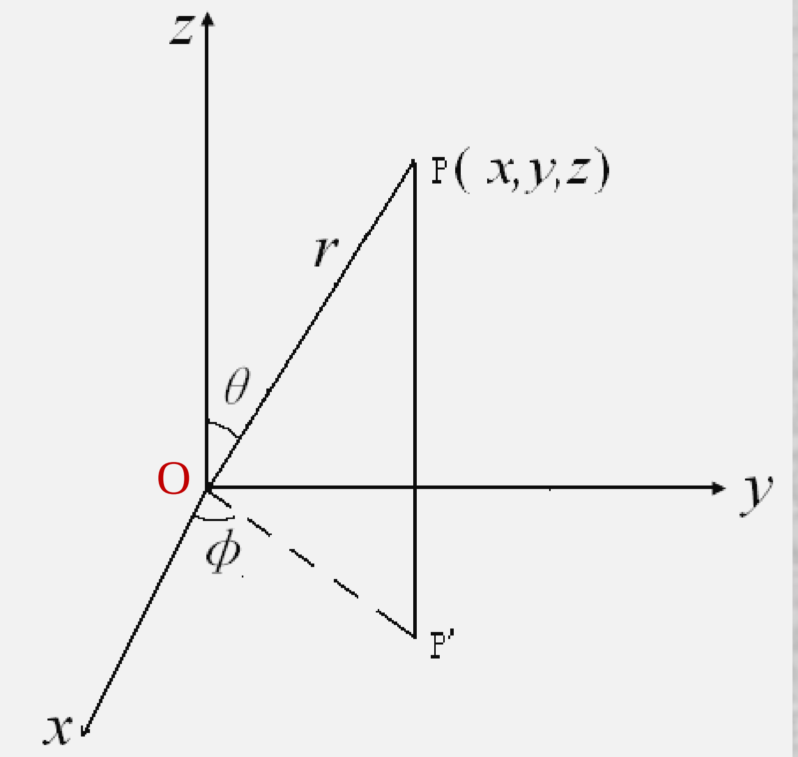
Ψ：无明确的物理意义

Ψ 习惯称呼为 原子轨道

并不是经典物理意义上的轨道

薛定谔方程的求解思路

波函数ψ是x,y,z的函数



1.直角坐标与球坐标的转换

势能V与r 有关 $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$

$$\Psi(x,y,z)\longrightarrow\Psi(r,\theta,\phi)$$

$$x=OP'\cos\phi\ =r\sin\theta\cos\phi$$

$$y=OP'\sin\phi=r\sin\theta\sin\phi$$

$$z=r\cos\theta$$

2.分离变量求解

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

量子数的引入

从数学的角度,解薛定谔方程可以得到很多解

但和核外电子的运动相结合，有些解不合理

为了有合理的解，需要引进参数n, l, m对波函数加以限制

n,l,m被称为量子数

量子数是微观世界量子化的标志

主量子数*n* (principal quantum number)

n =1，2，3.....正整数

- 决定电子离核的远近
- 决定电子能级的高低

*n*值越大，表示电子离核越远，其能级越高

*n*相同的轨道组成电子层，不同的*n* 值，对应不同的电子层

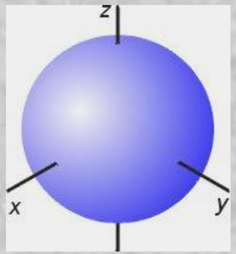
	1	2	3	4........
电子层符号	K	L	M	N ....

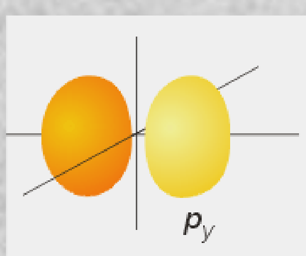
角量子数 *l* (angular quantum number)

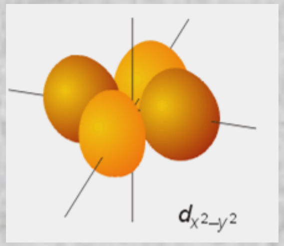
$l = 0，1，2，3……n\text{-}1$

l 相同的轨道组成电子亚层

	0	1	2	3
亚层符号	*s*	*p*	*d*	*f*







轨道形状　球形　　哑铃形　　花瓣形

◆*l* 决定原子轨道的形状

◆对于多电子原子, *l* 与能级有关，

*n*相同时，*l*越大，能级越高

原子轨道的名称

H原子: n=1, l=0 的轨道

$$\boxed{\psi(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}}$$

n、 l 一定

原子轨道离核的远近、能级、形状就确定

常用主量子数和角量子数的组合表示原子轨道的名称

1s	n =1,	l =0
3p	n =3,	l =1