



## 6.2.4 波函数的图形描述

天津大学

邱海霞



# 波函数的图形描述

波函数 $\psi$ 数学表达式复杂

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

径向部分    角度部分

$Y(\theta, \varphi)$ 对 $\theta, \varphi$ 做图

波函数(原子轨道)的角度分布图

影响化学键的形成





# s轨道的角度分布图

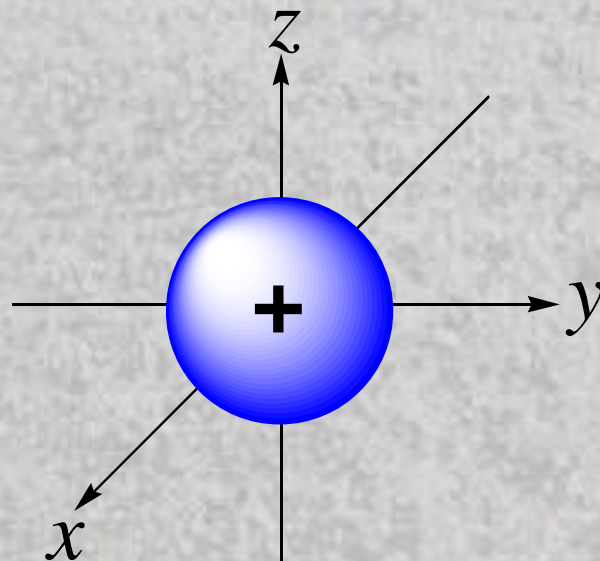
H原子的1s轨道

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

$a_0$ :玻尔半径

角度部分：

$$Y(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$



球形对称分布



# $p$ 轨道的角度分布图

$p$ 轨道：  $l=1$  ,  $m = +1, 0, -1$

H原子的  $2p_z (m=0)$

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0^3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

角度部分

$$Y(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = A \cos \theta$$

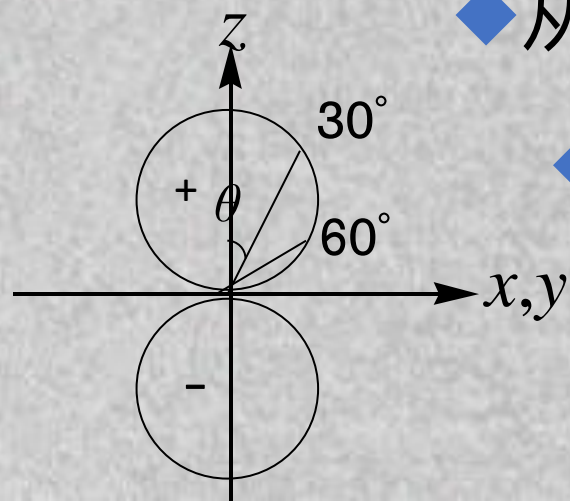




# p轨道的角度分布图

$$Y(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = A \cos \theta$$

$\theta$	$0^\circ$	$30^\circ$	$60^\circ$	$90^\circ$	$120^\circ$	$180^\circ$
$\cos \theta$	1	0.866	0.5	0	-0.5	-1
$Y_{2p_z}$	A	0.866A	0.5A	0	-0.5A	-A



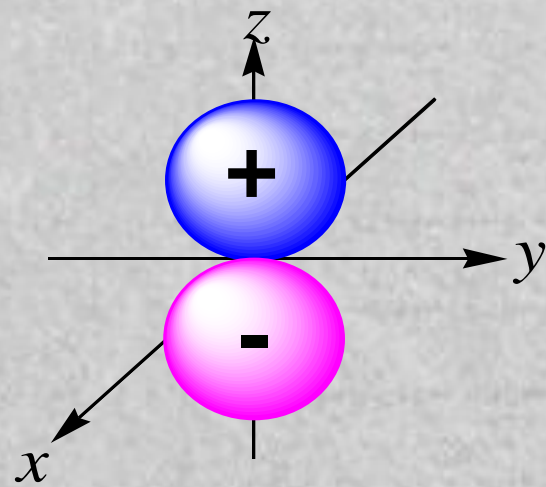
◆从原点出发，引出一条与 $z$ 轴成 $\theta$ 角的线段

◆令线段的长度等于 $Y$

◆连接所有线段的端点

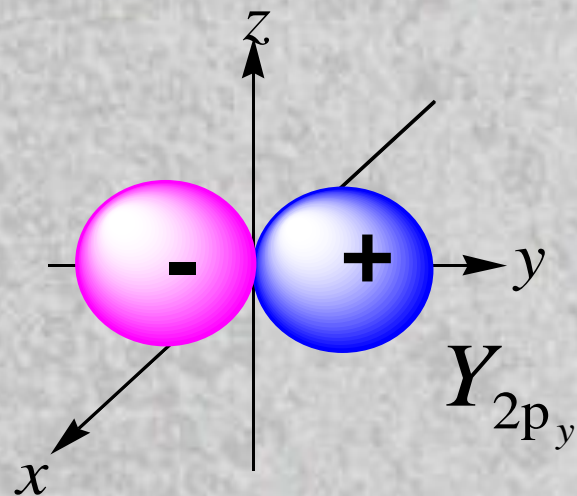
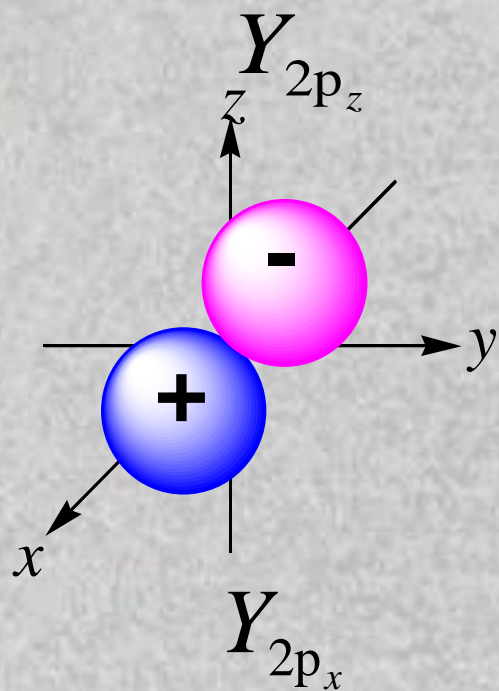


# $p$ 轨道的角度分布图



正负号代表原子轨道  
角度部分取值的正负

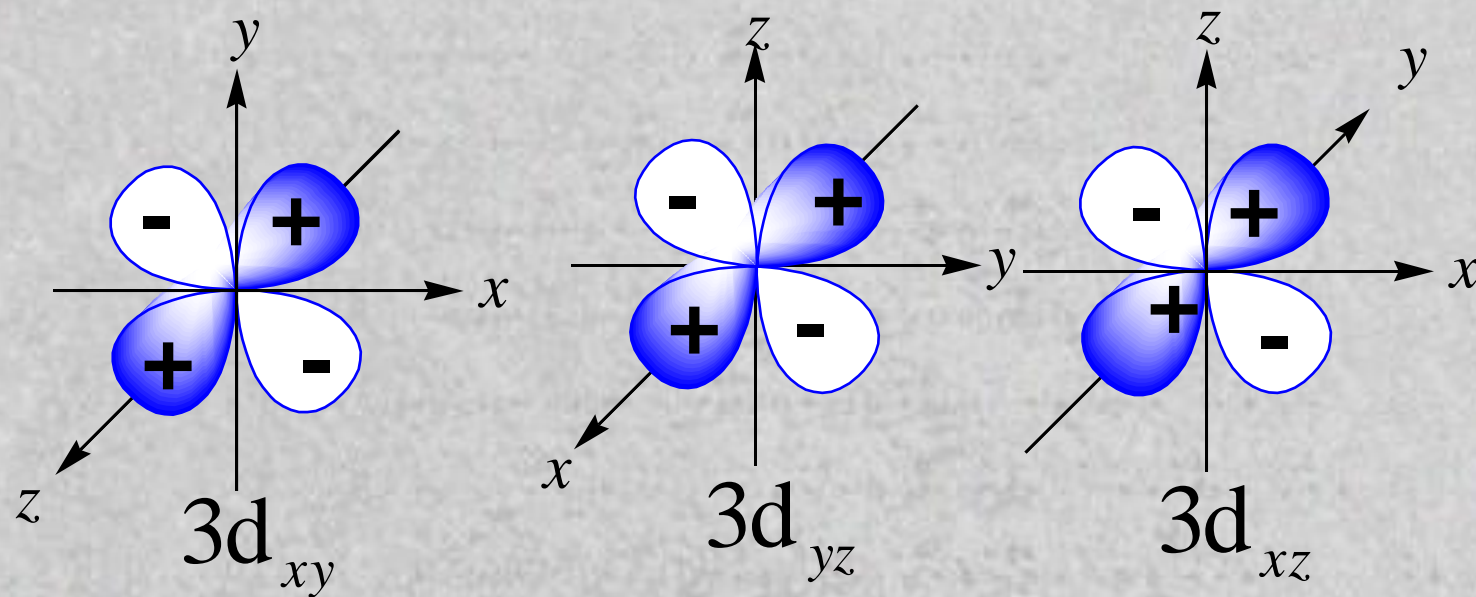
在 $z$ 轴上出现极大值，  
称为 $p_z$ 轨道



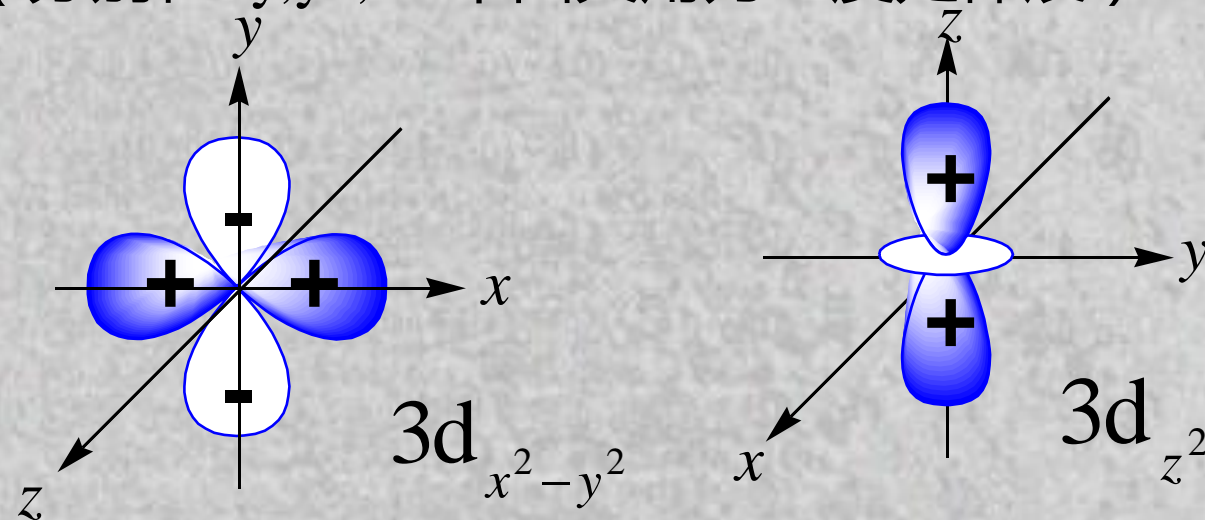




# d轨道的角度分布图



( 分别在xy,yz,xz 平面夹角为45度处伸展 )





# 原子轨道的角度分布图

## 原子轨道的角度分布图

不是电子运动的具体轨迹

反映波函数在空间不同方向上的变化情况

**正负号 极大值方向**

在能否形成化学键以及成键方向上有重要意义