

$$n=1, 2, 3, \dots$$

“角”量子数或“轨道角动量”量子数 l 可具有从 0 到 $n-1$ 之间的任意整数值:

$$l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

然而由于历史原因, l 通常不采用这些整数来表示; 而常用字母 s, p, d, f, g, \dots (按字母顺序继续下去) 分别对应于 $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ 。一个电子的 n 和 l 值常用符号 nl 表示, 其中 l 值用相应的字母代表。例如一个 $2p$ 电子表示 $n=2$ 和 $l=1$ 。“磁”量子数 m_l 可以有从 $-l$ 到 $+l$ 之间的任意整数值:

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, +1, +2, \dots, l-1, +l$$

由于电子具有自旋, 从而有一个向上或是向下取向的磁矩, 因此必须规定第四个量子数, 即“自旋”量子数 m_s 。 m_s 的允许值为 $\pm \frac{1}{2}$ 。

表 1-1 氢原子量子数的一些允许值

n	l	m_l	m_s	组合数
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
2	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	6
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
3	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	6
3	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm \frac{1}{2}$	10
4	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
4	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	6
4	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm \frac{1}{2}$	10
4	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\pm \frac{1}{2}$	14

由于对量子数的限制, 一个氢原子的电子只能按量子数的某种组合来排布。对于 $n=1, 2, 3$ 和 4 时所允许的组合列于表 1-1 中。每一组 n, l 和 m_l 的允许组合对应于一个原子轨道, 就是说可以把电子“填入”或“排布”到一个特定的轨道中去。当然, 在任一轨道内, 量子数 m_s 可以是 $+\frac{1}{2}$ 或 $-\frac{1}{2}$ 。

§ 1-2 氢原子的轨道形状和轨道能

比较方便的是用极坐标 r, θ 和 ϕ 来表示氢原子的波函数, 并将波函数分解为三个独立的部分, 每一部分只是一个坐标的函数:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$$

这三个函数的值, 也就是氢原子电子的空间分布都显著地受到 n 和 l 值的影响。这种空间分布可以用几种图解的方法来表示。我们首先考虑 $l=0$, 即 s 电子的情况。在图 1-1 中是当 $n=1, 2$ 和 3 时, 以径向波函数 R 作为与原子核距离 r 的函数作图。有三点应当指出: 第一, 对于每一种情况, 波函数的数值在原子核处都具有极大值。第二, 当 $n>1$ 时, 在称作“节面”的某些区域中波函数为零。(作为一般规则, 在一个原子的波函数中有 $n-1$ 个节面)。第三, 径向波函数 R 通过节面时改变符号。

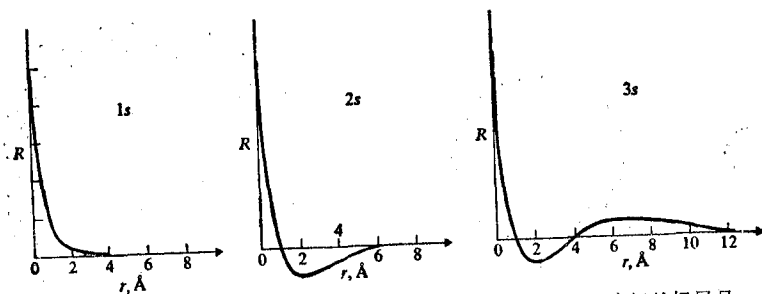


图 1-1 氢原子的 $1s, 2s$ 和 $3s$ 轨道的 $R-r$ 曲线。在各图中, 半径的标尺是相同的, 但各轨道的 R 标尺却是不同的