

虽然 R 是一个与任何实验测量值都没有直接联系的函数, 但是 R^2 却与电子密度成正比, 因而具有重要的物理意义。图 1-2 给出了 $1s$ 、 $2s$ 和 $3s$ 电子的 R^2 对 r 的曲线。注意这里的 R^2 与 R 相似, 也在原子核处有极大值, 并在 $n > 1$ 时出现节面。当然, R^2 不会有负值, 因为负的电子密度是没有物理意义的。在图 1-1 和图 1-2 中没有表示出来的任何 s 电子分布都具有的一个重要特征是: 其分布与 θ 和 ϕ 无关; 即呈球形对称分布。用图象来表示这种特征将是非常困难的; 但是, 虽然不是最理想, 我们仍试图将这种特

征在图 1-3 中表示出来。图中表示出 $1s$ 、 $2s$ 和 $3s$ 电子在通过原子核的一个平面上电子密度按位置的分布。电子密度用黑点表示; 暗区对应于高电子密度, 亮区对应于低电子密度。从图 1-3 中易于理解到在 $2s$ 和 $3s$ 波函数中的“节面”实际上是一个球面。

对 $2p$ 和 $3p$ 电子也可以画出类似的图形。图 1-4 是 R 对 r 的曲线, 图 1-5 是 R^2 对 r 的曲线。但 p 电子的角度分布与 s 电子的角度分布很不一样。有一个节面通过原子核, 且电子密度集中分布在节面两侧的叶瓣中。 $2p$ 和 $3p$ 电子的电子密度界面图见图

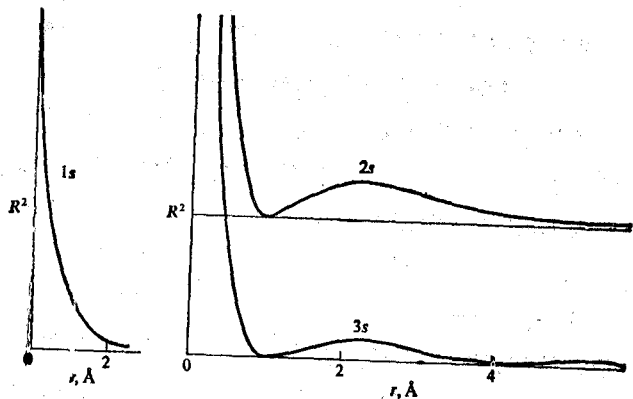


图 1-2 氢原子的 $1s$ 、 $2s$ 、 $3s$ 轨道的 R^2 随 r 变化的曲线。在各图中半径的标尺是相同的, 但各轨道的密度标尺并不相同

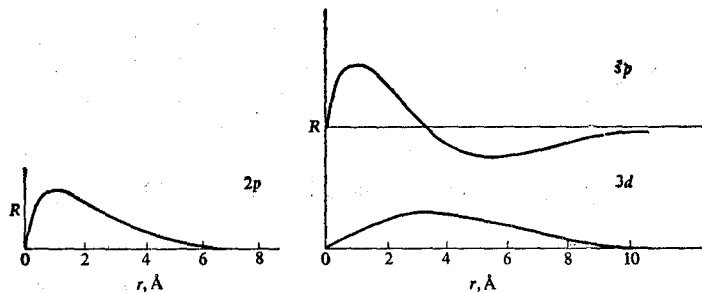


图 1-4 氢原子的 $2p$ 、 $3p$ 和 $3d$ 轨道的 R 随 r 变化曲线。各图上的半径标尺是相同的, 但各轨道的 R 标尺并不相同

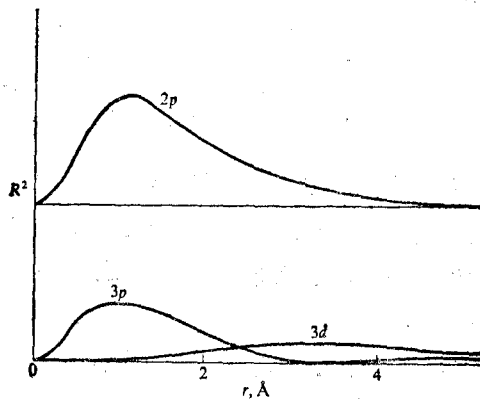


图 1-5 氢原子的 $2p$ 、 $3p$ 和 $3d$ 轨道的 R^2 对 r 的曲线。两种曲线的密度标尺不同

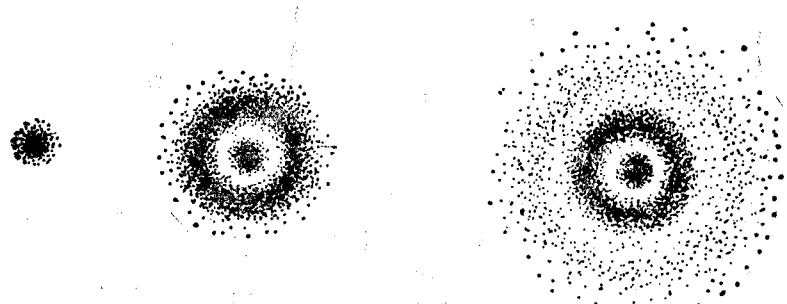


图 1-3 在通过氢原子的一个平面上 $1s$ 、 $2s$ 、 $3s$ 电子的电子密度