

21

世纪高等院校教材

新编工科化学

姚秉华 主编

 科学出版社
www.sciencep.com

21 世纪高等院校教材

新编工科化学

姚秉华 主编

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是参照教育部高等学校化学基础课教学指导委员会制订的“高等学校普通化学教学基本内容”，贯彻我国法定计量单位标准和国际纯粹与应用化学联合会的有关规定，为高等工科院校非化学化工类专业组织编写的基础化学教材。本书内容包括：物质结构基础、化学热力学基础、溶液平衡理论、应用电化学、材料化学基础、表面活性剂化学、环境与化学、能源化学、纳米材料化学、实验数据处理和分析测试技术，并结合工程实际，介绍了一些新材料、新技术和新方法。在整个内容体系上，尽可能拓宽知识面，增加信息量，保证基础化学知识结构和理论体系的完整性，对一些陈旧内容或者与后续课程重复的内容进行适当压缩，充实一些最新研究成果和技术。各章节既有一定的系统性和先进性，又有相对的独立性和综合性。授课时可根据各专业的特点和具体要求，灵活掌握，选择讲授。阅读材料集知识性、趣味性和前瞻性于一体，供扩展视野之用。

本书可作为高等工科院校非化学化工类专业普通化学或工程化学教材，也可供工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

新编工科化学/姚秉华主编. —北京:科学出版社, 2009
(21世纪高等院校教材)

ISBN 978-7-03-024091-0

I. 新… II. 姚… III. 化学—高等学校—教材 IV. O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 022267 号

责任编辑:杨向萍 陈雅娴 / 责任校对:刘小梅
责任印制:张克忠 / 封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

骏立印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2009 年 3 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2009 年 3 月第一次印刷 印张: 21 3/4 插页 1

印数: 1—4 500 字数: 420 000

定价: 32.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈环伟〉)

前 言

化学作为自然科学的一个基础学科,内容丰富,涉及面广,它既为人类最初的文明提供基础,也给人类今天的文明以动力。科学技术发展到今天,学科之间的交叉使工程技术的各个领域无不与化学有关,特别是信息技术、材料工程、能源开发、环境治理、医药保健、食品卫生等领域,更离不开化学知识与技术。因此,作为培养 21 世纪技术创新人才的高等工科院校开设基础化学课程,使学生了解当代化学学科的基本理论和框架,能应用化学的理论、观点和方法考虑问题,审视环境、能源、材料和生命等当前的社会热点论题,培养正确的科学观,是非常必要的。

本书是参照教育部高等学校化学基础课教学指导委员会制订的“高等学校普通化学教学基本内容”组织编写的,是“面向 21 世纪工科化学教学内容和课程体系改革与实践”教学成果之一。作为传递化学知识与工程实践之间“桥梁信息”的一门基础化学教材,为适应少学时(40~50 学时)的教学基本要求,本书选材以基础知识和基本理论为主,涵盖本学科发展的新领域和新知识,力求少而精,强调工科特色,保证知识结构和理论体系的系统性和完整性,注重知识的前沿性和实践性。其主要目的是在极为有限的教学时数内,将化学的一些基本理论、基本知识、基本技能以及一些新兴学科、边缘学科、应用学科的前沿信息传授给学生,使学生通过学习化学基本规律和原理,接受必备的基本操作和训练,树立正确的科学发展观和严谨求实的科学精神,掌握化学的思维和技能,正确认识和理解工程实践中存在的化学问题,为后续课程和专业知识的学习以及未来的工作奠定基础。

本书编写过程中认真贯彻我国法定计量单位标准和国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)的有关规定,总结多年的普通化学或工程化学课程教学改革和精品课程建设经验,尽最大努力使本书内容充实,通俗易懂,结构完整,既便于教,又利于学。本书共 11 章,前 4 章为基础理论部分,主要以近代物质结构理论和化学热力学为基础,分别讨论溶液中的平衡理论及电化学的基本原理,强化了酸碱质子理论和溶液酸度的计算,结合工程实际介绍了金属的腐蚀机理与防蚀原理和方法,对基于氧化还原机理的电化学加工如电镀、电铸、电化学蚀刻、电化学抛光以及电化学合成等作了重点阐述;第 5 章和第 9 章主要阐述材料(高分子材料、无机材料、金属材料 and 纳米材料)化学的基本知识和理论,从化学的角度着重介绍工程塑料、合成橡胶、合成纤维、高分子复合材料和功能高分子材料(如吸水性树脂、药物高分子、光敏高分子、导电高分子、液晶高分子、生物可降解高分子材料等)的组成、性质及其应用,进而介绍无机硅酸盐材料、新型非金属材料以及新型合金如记忆合金、储

氢合金、镁合金等,最后对纳米材料的发展、纳米材料的性质以及制备方法进行阐述,同时介绍纳米复合材料的组成及其应用;第6~8章介绍一些交叉学科及其应用领域,主要有表面活性剂的性质和应用、新能源的开发与展望、环境污染与保护,包括生态环境、大气环境、水体环境,特别是酸雨、温室效应、臭氧层空洞、现代污染物、生命科学等21世纪人们关注的热点问题;第10章主要包括有效数字、误差及偏差、实验数据的统计处理及优化等内容,作为科技工作者的必备知识加以介绍;第11章介绍现代分析测试技术的原理和应用。每章后都附有阅读材料,供扩展视野之用。在整个内容体系上,尽可能拓宽知识面,增加信息量,对一些陈旧内容或者后续课程重复的内容进行适当压缩,充实一些最新研究成果和技术。各章节既有一定的系统性和先进性,又有相对的独立性和综合性。授课时可根据各专业的特点和具体要求,调整章节顺序,选择讲授内容。

本书由杨蓉(第1章)、姚秉华(主编,第2、4、9章)、郑长征(第2、10章)、田萍(第3、7章)、钮金芬(第3章)、杜宝中(第5、6、11章)和吴小宁(第8、9章,附录)共同编写而成。全书由姚秉华统稿和定稿。西安理工大学应用化学系教师和研究生不同程度地参加了编写工作。

在本书的编写过程中,西安理工大学教务处和理学院、科学出版社给予了大力支持;西安交通大学蔡哲雄教授和西安理工大学邢慧莹副教授对全书内容进行了认真审阅,提出了许多宝贵意见和建议;本书还参考了部分兄弟院校同类教材以及有关专著、论文,在此致以深深的谢意。

鉴于本书内容涉及领域多,知识面广,编写时间仓促,编者水平有限,书中难免有疏漏和不妥之处,恳请读者提出批评和修改意见。

编 者

2008年11月于西安理工大学

目 录

前言

第1章 物质结构基础	1
1.1 原子结构的近代概念	1
1.1.1 微观粒子的波粒二象性	2
1.1.2 波函数与原子轨道	3
1.1.3 量子数	3
1.1.4 概率密度和电子云	6
1.1.5 波函数和电子云的图形	7
1.2 多电子原子结构和元素周期系	10
1.2.1 屏蔽效应和钻穿效应	10
1.2.2 原子轨道的能级	10
1.2.3 原子核外电子的分布	11
1.2.4 核外电子分布和元素周期系	13
1.3 化学键	18
1.3.1 离子键	18
1.3.2 共价键	18
1.4 分子间力和氢键	26
1.4.1 偶极矩	26
1.4.2 分子间力	27
1.4.3 氢键	28
1.5 晶体结构	29
1.5.1 典型晶体结构及其性质	29
1.5.2 过渡型晶体	32
阅读材料 晶体的缺陷	33
思考题与习题	34
第2章 化学热力学基础	37
2.1 化学反应中的能量变化	37
2.1.1 热力学第一定律	37
2.1.2 化学反应的热效应和焓变	39
2.1.3 赫斯定律	41

2.2 化学反应的方向和限度	45
2.2.1 自发过程的方向和推动力	45
2.2.2 熵和熵变	46
2.2.3 化学反应的方向与吉布斯函数变	48
2.2.4 化学平衡	51
2.3 化学反应速率	55
2.3.1 反应速率的概念	55
2.3.2 反应速率与浓度的关系	56
2.3.3 反应速率与温度的关系	57
2.3.4 反应速率与催化剂的关系	58
阅读材料 热力学之父——威廉·汤姆孙	60
思考题与习题	61
第3章 溶液平衡理论	65
3.1 稀溶液通性	65
3.1.1 溶液的蒸气压下降	65
3.1.2 溶液的沸点升高和凝固点下降	66
3.1.3 渗透压	66
3.2 酸碱溶液平衡	67
3.2.1 酸碱质子理论	67
3.2.2 酸碱平衡	69
3.2.3 酸碱缓冲溶液	79
3.3 难溶电解质溶液	82
3.3.1 溶度积常数	82
3.3.2 溶度积和溶解度的关系	83
3.3.3 溶度积规则及其应用	86
3.4 配合物溶液	87
3.4.1 配合物的组成	88
3.4.2 配合物的命名	89
3.4.3 配合平衡	89
3.4.4 配合物的应用	92
阅读材料 酸碱指示剂与酸碱滴定	93
思考题与习题	98
第4章 应用电化学	103
4.1 电化学基础	103
4.1.1 原电池	103

4.1.2 电极电势与能斯特方程	105
4.1.3 电极电势的应用	111
4.2 电解	113
4.2.1 电解池	113
4.2.2 分解电压和超电势	113
4.2.3 电解规律	115
4.3 金属的腐蚀与防护	115
4.3.1 化学腐蚀	116
4.3.2 电化学腐蚀	116
4.3.3 应力腐蚀	118
4.3.4 微生物腐蚀	119
4.3.5 金属的防护	120
4.4 电化学应用	125
4.4.1 电镀与电铸	125
4.4.2 电化学刻蚀	128
4.4.3 电化学抛光	131
4.4.4 电化学合成	133
阅读材料 电渗析方法介绍	135
思考题与习题	137
第5章 材料化学基础	139
5.1 高分子材料化学	139
5.1.1 高分子化合物概述	139
5.1.2 高分子结构与性能	146
5.1.3 工程塑料	152
5.1.4 合成橡胶	154
5.1.5 合成纤维	156
5.1.6 高分子复合材料	157
5.1.7 功能高分子材料	158
5.2 无机材料化学	165
5.2.1 硅酸盐材料	165
5.2.2 新型非金属材料	169
5.3 金属材料化学	172
5.3.1 金属概述	172
5.3.2 稀土金属	175
5.3.3 合金材料	177

阅读材料 新型陶瓷材料	181
思考题	182
第6章 表面活性剂化学	183
6.1 表面活性剂的结构特点和分类	183
6.1.1 表面活性剂的结构特点	183
6.1.2 表面活性剂的分类	183
6.2 表面活性剂的基本性质	190
6.2.1 表面张力和表面活性	191
6.2.2 临界胶束浓度	191
6.2.3 胶束增溶	193
6.3 表面活性剂结构对其性能的影响	193
6.3.1 亲水亲油平衡	193
6.3.2 憎水基种类的影响	195
6.3.3 亲水基相对位置的影响	195
6.3.4 憎水基结构中支链的影响	196
6.3.5 相对分子质量的影响	196
6.4 表面活性剂的基本作用	196
6.4.1 润湿和渗透作用	196
6.4.2 乳化和分散作用	197
6.4.3 起泡和消泡作用	199
6.4.4 洗涤作用	199
6.5 表面活性剂应用	200
6.5.1 金属清洗剂	200
6.5.2 电镀液添加剂	202
阅读材料 生物表面活性剂	203
思考题	204
第7章 环境与化学	205
7.1 环境污染与化学	205
7.1.1 生态平衡	205
7.1.2 大气环境	207
7.1.3 水体环境	214
7.2 环境保护与化学	217
7.2.1 大气污染的防治	217
7.2.2 生活用水的净化处理	218
7.2.3 废水处理	220

7.3 生命科学与化学	222
7.3.1 构成生命的重要物质	222
7.3.2 基因的表达与调控	223
7.3.3 生物膜	223
7.3.4 氧自由基与人体健康	224
7.3.5 微量元素与疾病	225
阅读材料 环境激素——人类生存的潜在威胁	227
思考题	228
第8章 能源化学	229
8.1 能源的分类	229
8.2 常规能源	230
8.2.1 煤炭	230
8.2.2 石油和天然气	232
8.3 化学电源	234
8.3.1 化学电源分类	234
8.3.2 一次电池	234
8.3.3 二次电池	236
8.4 新能源	241
8.4.1 太阳能	241
8.4.2 核能	242
8.4.3 氢能	245
8.4.4 生物质能	246
8.4.5 海洋能	248
8.4.6 地热能	250
阅读材料 生物柴油	250
思考题	251
第9章 纳米材料化学	253
9.1 纳米材料的发展	253
9.2 纳米材料的结构单元	255
9.2.1 团簇	255
9.2.2 人造原子	255
9.2.3 纳米微粒	256
9.3 纳米材料的性质	257
9.3.1 纳米材料的一般性质	257
9.3.2 纳米材料的光学性质	259

9.4 纳米材料的制备方法	263
9.4.1 气相法制备纳米微粒	263
9.4.2 液相法制备纳米微粒	264
9.4.3 固相法制备纳米微粒	266
9.5 纳米复合材料	269
9.5.1 纳米复合材料的定义	269
9.5.2 纳米复合材料的命名和分类	270
9.5.3 纳米复合材料的应用	271
阅读材料 纳米生物传感器	272
思考题	274
第10章 实验数据处理	275
10.1 有效数字	275
10.1.1 有效数字的概念	275
10.1.2 有效数字的运算规则	276
10.2 误差与偏差	277
10.2.1 误差与偏差的概念	277
10.2.2 系统误差及其传递	279
10.2.3 随机误差及其传递	280
10.3 实验数据的统计分析	281
10.3.1 t 分布曲线	281
10.3.2 平均值的置信区间	282
10.3.3 t 检验法	283
10.3.4 F 检验法	285
10.4 实验数据优化	286
10.4.1 回归分析	287
10.4.2 正交试验设计	289
阅读材料 实验数据的平滑	292
思考题与习题	293
第11章 分析测试技术	295
11.1 原子吸收光谱分析	295
11.1.1 基本原理	295
11.1.2 仪器设备	295
11.1.3 方法特点及其应用	296
11.2 原子发射光谱分析	296
11.2.1 基本原理	296

11.2.2 仪器设备	297
11.2.3 方法特点及其应用	298
11.3 红外光谱分析	299
11.3.1 基本原理	299
11.3.2 仪器设备	300
11.3.3 方法特点及其应用	300
11.4 核磁共振谱	301
11.4.1 基本原理	301
11.4.2 仪器设备	302
11.4.3 方法特点及其应用	303
11.5 质谱分析	303
11.5.1 基本原理	303
11.5.2 仪器设备	304
11.5.3 方法特点及其应用	304
11.6 色谱分析	305
11.6.1 气相色谱分析	305
11.6.2 高效液相色谱分析	307
11.7 电化学分析	308
11.7.1 电位分析法基本原理	309
11.7.2 电位法测定溶液 pH	309
11.7.3 方法特点及其应用	310
11.8 晶相分析	310
11.8.1 扫描电子显微镜	310
11.8.2 扫描隧道显微镜	311
11.8.3 X 射线衍射分析	312
11.8.4 X 射线光电子能谱法	313
阅读材料 原子力显微镜	313
思考题	314
参考答案	315
主要参考文献	318
附录	321

第 1 章 物质结构基础

世界是物质的,物质是由原子、分子或晶体组成的。原子是物质发生化学反应的基本微粒,物质的许多宏观性质很大程度上取决于原子内部结构。为了研究物质宏观性质的差异性及其变化规律,必须深入了解物质的微观结构。本章将从原子结构入手,介绍原子结构的近代理论,解释核外电子的分布规律及元素性质的周期性,进而讨论共价键理论和分子间力,揭示物质的结构与性能之间的关系。

1.1 原子结构的近代概念

人类对原子结构的认识是逐步深入的。1803 年,道尔顿(Dalton)提出了第一个现代原子论,认为“一切物质都是由原子构成的”,这一理论合理地解释了当时许多化学现象和规律,标志着近代化学的开始,道尔顿因此被称为“近代化学之父”。1869 年,门捷列夫(Mendeleev)和迈耶尔(Meyer)发现了周期律。1897 年,汤姆孙(Thomson)发现电子,并测定了核质比,使原子不可再分的观点被永远摒弃。继电子的发现后,又发现了 α 粒子、质子和中子。1911 年,卢瑟福(Rutherford)创立了原子结构的“太阳-行星模型”,成功地解释了 α 粒子散射实验结果。

1913 年,为了解释氢原子光谱,丹麦物理学家玻尔(Bohr)在普朗克(Planck)的量子论和爱因斯坦(Einstein)的光子学说的基础上,提出了著名的原子结构模型(玻尔理论),该模型认为:

- (1) 电子只能在若干圆形的固定轨道上绕核运动,同时不辐射能量。
- (2) 原子中的电子通常处于基态,只有从外界获取能量时电子才处于激发态。
- (3) 电子尽可能处于能量最低的轨道,只有当电子在不同轨道上发生跃迁时才吸收或辐射能量。能量大小与光子的频率成正比:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu \quad (1-1)$$

式中, ν 为光子的频率; h 为普朗克常量。

玻尔理论成功地解释了氢原子(图 1-1)和类氢离子(He^+ 、 Li^{2+} 、 Be^{3+} 等)光谱。由于原子轨道的能量是量子化的,决定了谱线的频率也是量子化的,因此原子谱线是不连续的线状光谱。玻尔理论是人们认识原子世界的重大进步,是一个里程碑,玻尔因此获得 1922 年诺贝尔物理学奖。



图 1-1 氢原子光谱图

随着人们对物质结构的了解,科学家们对原子世界物质运动的基本规律有了崭新的认识,建立了量子力学。量子力学的研究表明,原子中并不存在玻尔所描述的确定的轨道,同时玻尔理论不能说明氢原子的精细光谱和多电子原子的光谱,也不能解释原子如何形成分子的化学键本质(如氢原子形成氢分子的化学键本质)。这是因为玻尔的原子模型是建立在牛顿的经典力学理论基础上,而原子、电子等微观粒子不同于宏观物体,遵循特有的运动特征和规律,即能量的量子化、波粒二象性和统计性。

1.1.1 微观粒子的波粒二象性

受光的波粒二象性的启发,1924 年德布罗意(de Broglie)提出了电子等微观粒子也具有波粒二象性的大胆假设。他认为:19 世纪对光的研究过分强调了光的波动性,忽视它的粒子性;而对实物的研究,是否存在另一种倾向,即过分强调了粒子性而忽视了其波动性。因而他提出微观粒子(如电子、质子、中子等)也具有波粒二象性的特征,并预言微观粒子的波长 λ 和质量 m 、运动速率 v 可通过普朗克常量 h ($6.625 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$) 联系起来:

$$\lambda = h/mv \quad (1-2)$$

这就是著名的德布罗意关系式。德布罗意的预言在 1927 年由戴维逊(Davisson)和革末(Germer)的电子衍射实验所证实。当一束电子通过 Ni 晶体时发生衍射,底片上就形成了衍射环纹(图 1-2),显示出电子的波动性,这种物质波称为德布罗意波(de Broglie's matter wave)。

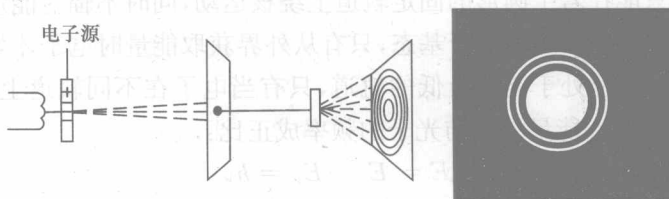


图 1-2 电子束的衍射花纹示意图和电子衍射图谱

具有波粒二象性的电子,已不再遵守经典牛顿力学定律,没有确定的运动轨道,只有概率分布的规律,又称概率波(probability wave)。显然,概率波不像电磁波、机械波那样直观,但它的确是反映微观粒子客观运动的一种波。就一个电子的

一次行为来说,不能确定它究竟落在哪一点,但若重复进行许多次相同的实验,就能显示出电子在空间位置上出现衍射环纹的规律。因此,电子的波动性是电子无数次行为的统计结果。从衍射图像可知,衍射强度大的区域表示电子出现的次数多,即电子出现的概率大;衍射强度较小的区域表示电子出现次数少,即电子出现的概率小。统计解释认为,在空间任一点物质波的强度与微观粒子出现的概率密度成正比,因此电子等微观粒子的物质波是具有统计性的概率波。

随后的衍射实验证实了质子、中子、原子等微观粒子也具有波动性。波粒二象性是微观粒子运动的基本属性。

1.1.2 波函数与原子轨道

在探求微观体系运动规律时,首先必须解决如何描述微观体系的运动规律。微观粒子具有波粒二象性,其运动行为不同于宏观物体,自然不能用经典力学理论来描述,而只能用量子力学理论来表达。

1926年,奥地利物理学家薛定谔(Schrödinger)根据波粒二象性的概念提出描述微观粒子运动的基本方程。对氢原子体系,薛定谔方程的基本形式是

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi \quad (1-3)$$

式中, m 为电子的质量; E 为轨道能量(动能与势能总和); V 为体系的势能; $\Psi(x, y, z)$ 称为波函数(wave function),它是空间直角坐标的函数,也可转化为球面坐标的函数 $\Psi(r, \theta, \varphi)$ 。

用变量分离法将薛定谔方程由含三个变量的偏微分方程转化为三个分别只含一个变量的常微分方程,可获得薛定谔方程的解。薛定谔方程解的结果(Ψ, E)对讨论原子结构和原子成键具有重要意义。

波函数是用薛定谔方程的解 $\Psi(n, l, m)$ 来描述核外电子在空间运动的数学函数式,又称为原子轨道(atomic orbital)。注意,这里所说的原子轨道属于量子力学的范畴,它不同于半径确定的玻尔轨道。对于基态氢原子,玻尔轨道是指半径为0.053nm的圆形轨道,而量子力学中的原子轨道则是一个波函数:

$$\Psi(1, 0, 0) = \sqrt{1/\pi a_0^3} e^{-r/a_0} \quad (1-4)$$

它是电子离核距离的函数。

1.1.3 量子数

在微观体系中,某些物理量不能连续变化,而只能以某一最小单位的整数倍发生变化。这一物理量的最小单位称为量子(quantum)。求解薛定谔方程不仅可得到氢原子中代表电子运动状态的波函数,而且可以自然地导出主量子数 n 、角量子数 l 和磁量子数 m 。下面介绍三个量子数的意义与取值。

1. 三个量子数的取值

在解薛定谔方程的过程中,引入了三个量子数 n, l 和 m , 它们的取值需按一定规则, 即

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

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

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

其中, l 的数值受 n 值限制, m 的数值又受 l 值制约。如表 1-1 所示, 对于任意一个 n 值, 三个量子数的组合 (n, l, m) 共有 n^2 个。例如, $n=1$ 时, 只有一种组合 $(1, 0, 0)$, 对应的波函数也只有一种, 即氢原子基态的波函数 $\Psi(1, 0, 0)$; $n=2$ 时, 共有四种合理的组合: $(2, 0, 0)$ 、 $(2, 1, -1)$ 、 $(2, 1, 0)$ 、 $(2, 1, 1)$, 对应的波函数也有四种(表 1-2)。

表 1-1 氢原子轨道与三个量子数的关系

主量子数(n)	角量子数(l)	磁量子数(m)	轨道符号	轨道数	轨道总数
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	0, +1, -1,	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	0, +1, -1,	3p	3	
	2	0, +1, +2, -1, -2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	0, +1, -1,	4p	3	
	2	0, +1, +2, -1, -2	4d	5	
	3	0, +1, +2, +3, -1, -2, -3	4f	7	

表 1-2 氢原子波函数

量子数取值			$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$	$R(r)$	$Y(\theta, \phi)$
n	l	m			
1	0	0	$\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{a_0}r}$	$2\left(\frac{1}{a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{a_0}r}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$
2	0	0	$\left(\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r}$	$\left(\frac{1}{8a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$
2	1	0	$\left(\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r} \cos\theta$	$\left(\frac{1}{24a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta$
2	1	± 1	$\left(\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r} \sin\theta \cos\phi$		$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\phi$
2	1	± 1	$\left(\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0}r\right) e^{-\frac{1}{2a_0}r} \sin\theta \sin\phi$		$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \sin\phi$

注: a_0 = 玻尔半径。

2. 各量子数的物理意义

1) 主量子数(n)

n 值反映电子离核的平均距离。 n 是确定电子出现概率最大处离核的距离(平均距离)和能级的主要参数。 $n=1$, 表示第一层(K 层), 离核最近。 n 值越大, 表示电子离核的平均距离越远, 所处状态的能级越高。

2) 角量子数(l)

l 值反映波函数即原子轨道的形状。通常把 l 值相同的原子轨道归属同一电子亚层。各电子亚层的光谱符号为

角量子数: $0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n-1)$

电子亚层: $s, p, d, f, g, \dots$

对于多电子原子, l 还影响原子轨道的能级。同一电子层中的 l 值越小, 该电子亚层的能级越低。例如, $2s$ 亚层的能级比 $2p$ 亚层的低。当 $n=4$ 时, l 有四种取值, 即核外第四层有四种形状不同的原子轨道: $l=0$, 表示 $4s$ 轨道, 形状为球形(图 1-3); $l=1$, 表示 $4p$ 轨道, 形状为哑铃形(图 1-4); $l=2$, 表示 $4d$ 轨道, 形状为花瓣形(图 1-5); $l=3$, 表示 $4f$ 轨道, 形状更复杂。

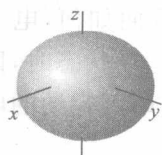


图 1-3 s 轨道的形状

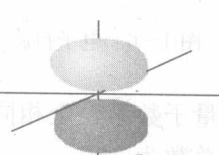
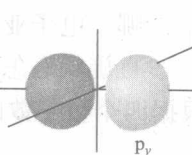
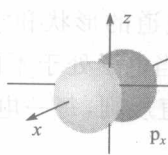


图 1-4 p 轨道的形状

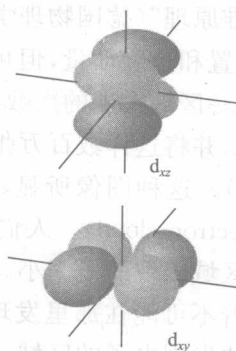
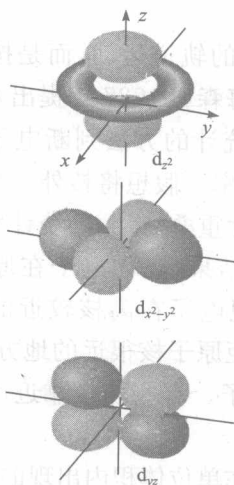


图 1-5 d 轨道的形状