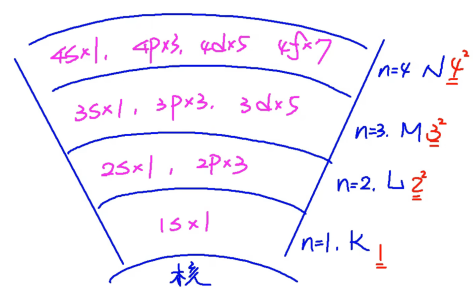


原子结构与元素性质 · 二 · 「构造原理、泡利原理、洪特规则」

原子轨道

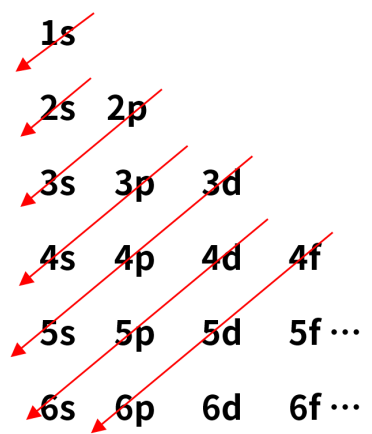


对每个 n 值而言：

- 有 n 种能级
- 有 n^2 个原子轨道
- 最多可容纳 $2n^2$ 个 e^-

构造原理

构造原理 (aufbau principle)：从氢开始，随核电荷数递增，新增电子填入能级的顺序称为构造原理。



顺序：1s - 2s - 2p - 3s - 3p - 4s - 3d - 4p - 5s - 4d - 5p - 6s - ...

$$E_{1l} < E_{2l} < E_{3l} < \dots < E_{nl}$$

$$E_{ns} < E_{np} < E_{nd} < E_{nf}$$

$$E_{ns} < E_{(n-2)f} < E_{(n-1)d} < E_{np}$$

我们把第三个不等式中涉及到的能级组成的集合称为能级组。

能级组序号	一	二	三	四	五	六	七
能级	1s	2s 2p	3s 3p	4s 3d 4p	5s 4d 5p	6s 4f 5d 6p	7s 5f 6d 7p
最大电子容纳量	2	8	8	18	18	32	32

泡利不相容原理

泡利原理：在一个原子轨道里，最多只能容纳 **2** 个电子，它们的自旋 **相反**，常用上下箭头(↑和↓)表示自旋相反的电子

${}_8O$ 的轨道表示式如下：

$${}_8O \quad \frac{\uparrow\downarrow}{1s} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{2s} \quad \frac{\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow}{2p}$$

- 简并轨道：能量相同的原子轨道
- 电子对：同一个原子轨道中，自旋方向相反的一对电子
- 单电子：一个原子轨道中若只有一个电子，则该电子称为单电子
- 自旋平行：箭头同向的单电子称为自旋平行
- 在氧原子中，有 3 对电子对，有 2 个单电子
- 在氧原子中，有 5 种空间运动状态，有 8 种运动状态不同的电子

洪特规则

- 1. 内容：基态原子中，填入简并轨道的电子总是先单独分占，且自旋平行
- 2. 特例：在简并轨道上的电子排布处于全充满、半充满和全空状态时，具有较低的能量和较大的稳定性

相对稳定的状态

全充满：

半充满：

全空：

s^2, p^6, d^{10}, f^{14}

s^1, p^3, d^5, f^7

s^0, p^0, d^0, f^0

${}_{24}Cr$ 的电子排布式为 $[Ar]3d^54s^1$ ，为半充满状态，易错写为 $[Ar]3d^44s^2$

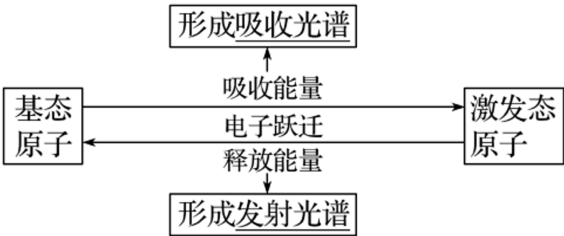
${}_{29}Cu$ 的电子排布式为 $[Ar]3d^{10}4s^1$ ，为全充满状态，易错写为 $[Ar]3d^94s^2$

- 1. 基态原子：处于最低能量状态的原子
- 2. 激发态原子：基态原子吸收能量，它的电子会跃迁到较高能级，变成激发态原子

能量最低原理

- 1. 内容：在构建基态原子时，电子将尽可能地占据能量最低的原子轨道，使整个原子的能量最低
- 2. 因素：整个原子的能量由核电荷数、电子数和电子状态三个因素共同决定

原子光谱



焰色反应

物理反应，不同金属元素在酒精灯火焰上灼烧时会使火焰变为各种颜色，这便是焰色反应。焰色反应的形成与原子光谱有关

离子	Li ⁺	Na ⁺	K ⁺	Rb ⁺	Cs ⁺	Ca ²⁺	Cr ²⁺	Ba ²⁺	Cu ²⁺
焰色	红	黄	紫	紫红	紫红	橙红	洋红	黄绿	绿

光谱分析

在现代化学中，常利用原子光谱上的 **特征谱线** 来鉴定元素，称为光谱分析