

原子结构与元素性质 · 二 · 「构造原理、泡利原理、洪特规则」

1. 原子轨道

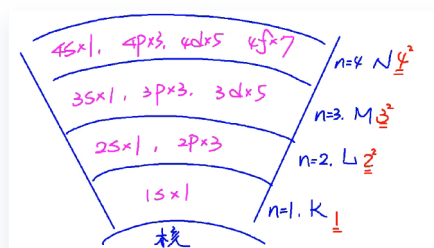


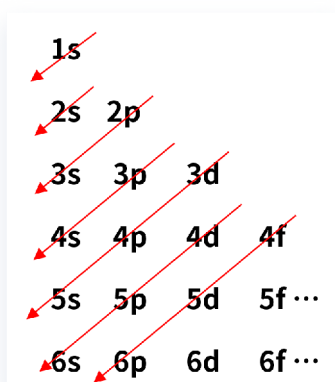
Figure 1-1

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^-

2. 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。



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。

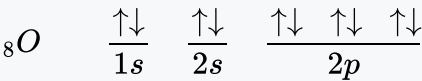
能级组序号	一	二	三	四	五	六	七
能级	1s	2s 2p	3s 3p	4s 3d 4p	5s 4d 5p	6s 4f 5d 6p	7s 5f 6d 7p
最大电子容纳量	2	8	8	18	18	32	32

Table 2-1

3. 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**

${}_8\text{O}$ 的轨道表示式如下：



- 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

4. 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

$$\text{相对稳定的状态} \begin{cases} \text{全充满} & s^2, p^6, d^{10}, f^{14} \\ \text{半充满} & s^1, p^3, d^5, f^7 \\ \text{全空} & s^0, p^0, d^0, f^0 \end{cases}$$

${}_{24}\text{Cr}$ 的电子排布式为 $[\text{Ar}]3d^5 4s^1$ ，为半充满状态，易错写为 $[\text{Ar}]3d^4 4s^2$
 ${}_{29}\text{Cu}$ 的电子排布式为 $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$ ，为全充满状态，易错写为 $[\text{Ar}]3d^9 4s^2$

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**

5. 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

6. 原子光谱

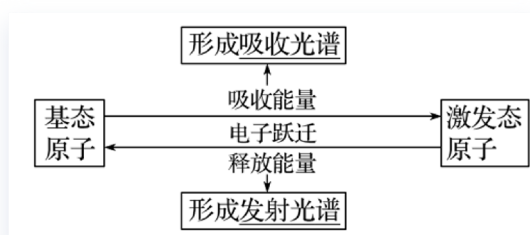


Figure 6-1

6.1 焰色反应

物理反应，进行焰色反应应使用 **铂丝**（镍丝、无锈铁丝）。把嵌在玻璃棒上的金属丝在 **稀盐酸** 里蘸洗后，放在酒精灯的火焰里灼烧，不同金属元素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

详见 [06 元素及其化合物 - 01 钠及其化合物](#)

6.2 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