

原子结构与元素性质 · 一 · 「核外电子排布方式」

1. 能层与能级

- 能层：**多电子原子的核外电子的能量是不同的，离核近的电子能量较低，离核越远，电子的能量越高。可以将核外电子分成不同的能层，并用符号 K 、 L 、 M 、 N 、 O 、 P 、 Q ... 表示相应离核最近的第一能层，次之的第二能层，以此类推三、四、五、六、七能层

电子层序数(n)	1	2	3	4	5	6	7
符号表示	K	L	M	N	O	P	Q
能量大小	小	→	→	→	→	→	大
距核远近	近	→	→	→	→	→	远

Table 1-1

- 实验和量子力学研究表明，多电子原子中，同一能层的电子，能量可能不同，因此还能再将它们分成若干能级。在每一个能层中，能级符号的顺序是 ns 、 np 、 nd 、 nf ... (n 表示能层)

能层	$n = 1$	$n = 2$		$n = 3$			$n = 4$			
	K	L		M			N			
能级种类	s	s	p	s	p	d	s	p	d	f
原子轨道	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
原子轨道数	1	$1+3 = 4$		$1+3+5 = 9$			$1+3+5+7 = 16$			

原子轨道数为 n^2
每一电子层所容纳的电子数最多为 $2n^2$ 个

2. 电子云与原子轨道

2.1 概率密度

1913 年，**玻尔** 提出氢原子模型，电子在 **线性轨道** 上绕核运行。量子力学指出，一定空间运动状态的电子在核外空间各处都可能出现，但出现的 **概率** 不同，可用概率密度 (ρ) 表示，即

$$\rho = \frac{P}{V} \text{ (} P \text{ 表示电子在某处出现的概率, } V \text{ 表示该处的体积)}$$

2.2 电子云

- 定义：处于一定空间 **运动状态** 的电子在原子核外空间的概率密度分布的形象化描述
- 含义：用单位体积内小黑点的疏密程度表示电子在原子核外出现概率大小，小黑点越 **密**，表示概率密度越 **大**

[×] 4s 电子能量较高，总是在比 3s 电子离核更远的地方运动

2.3 原子轨道

量子力学把电子在原子核外的一个 **空间运动状态** 称为一个原子轨道

形状 $\begin{cases} s \text{ 电子云:} & \text{球形} & \text{只有一种空间伸展方向} \\ p \text{ 电子云:} & \text{哑铃形} & \text{有3种空间伸展方向分别相对于 } x, y, z \text{ 轴对称} \end{cases}$

空间运动状态种数 = 轨道数；电子运动状态种数 = 电子数

eg: 基态 C 原子核外共有 4 种不同的空间运动状态，共有 6 个运动状态不同的电子

2.4 原子轨道与能层序数的关系

1. 不同能层的同种能级的原子轨道形状 **相同**，只是半径 **不同**。能层序数 n 越 **大**，原子轨道的半径越 **大**
2. s 能级只有 1 个原子轨道。 p 能级有 3 个原子轨道，它们互相垂直，分别以 p_x 、 p_y 、 p_z 表示
3. 原子轨道数与能层序数 (n) 的关系：原子轨道数目 = n^2

2.5 原子轨道能量高低

1. 相同能层上原子轨道能量的高低： $ns < np < nd < nf$
2. 形状相同的原子轨道能量的高低： $1s < 2s < 3s < 4s < \dots$
3. 同一能层内形状相同而伸展方向不同的原子轨道的能量相等，如 np_x, np_y, np_z 轨道的能量相等