

多电子体系中电子的能量

2020年10月29日 14:58

单电子体系中电子的能量

对于单电子体系，其能量为

$$E = -13.6 \text{ eV} \times \frac{Z^2}{n^2}$$

即单电子体系中，轨道（或轨道上的电子）的能量，只由主量子数 n 决定。

Z 为原子序数

以上公式只针对单电子体系

多电子体系中电子的能量

在多电子原子中，主量子数 n 相同，角量子数 l 不同的原子轨道， l 越大，其能量越大

即 $E_{4s} < E_{4p} < E_{4d} < E_{4f}$

这种现象叫做能级分裂

在多电子原子中，有时主量子数 n 小的原子轨道，由于角量子数 l 较大，其能量 E 却比 n 大的原子轨道大。

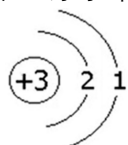
如 $E_{3d} > E_{4s}$ ， $E_{4d} > E_{5s}$

这种现象叫做能级交错

故多电子体系中能量关系复杂，能量不只由主量子数 n 决定

在多电子体系中，电子不仅受到原子核的作用，还受到其余电子的作用

如Li原子第二层的一个电子



它除了受到原子核的引力，同时还受到第一层两个电子对它的排斥力
这两个内层电子的排斥作用可以考虑成对核电荷 Z 的抵消或屏蔽，使核电荷 Z 减小，变成了有效核电荷 Z^*

即 $Z^* = Z - \sigma$

式中 σ 为屏蔽常数，代表其他所有电子对所研究的那个电子得到排斥

于是，多电子体系中的一个电子的能量为

$$\begin{aligned} E &= -13.6 \text{ eV} \times \frac{Z^{*2}}{n^2} \\ &= -13.6 \text{ eV} \times \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} \end{aligned}$$