



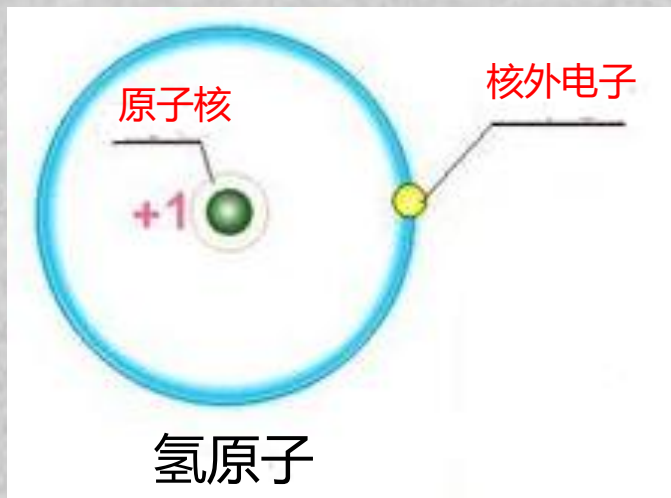
## 6.3.1 多电子原子轨道能级

天津大学

邱海霞



# 氢原子和类氢离子原子轨道能级



$$E = -2.18 \times 10^{-18} \frac{1}{n^2} \text{ (J)} \quad n: \text{主量子数}$$

原子轨道的能量仅和主量子数有关

$$\text{氢原子 } E_{2s} = E_{2p} \quad E_{3s} = E_{3p} = E_{3d}$$

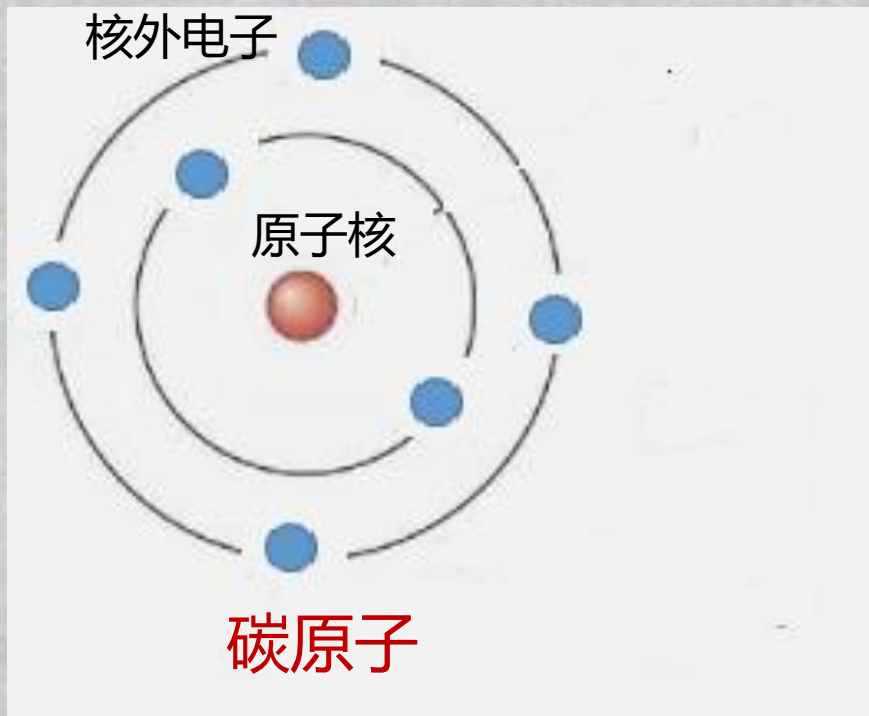
主量子数越大，能量越高

$$E_{1s} < E_{2s} < E_{3s}$$





# 多电子原子轨道能级



核的吸引

内层电子的排斥

同层电子的排斥

薛定谔方程无法求解

原子轨道能级：

原子光谱数据和近似理论计算获得



# 多电子原子轨道能级



多电子原子轨道能级

除了和主量子数有关，  
还和角量子数有关

给出了近似能级图

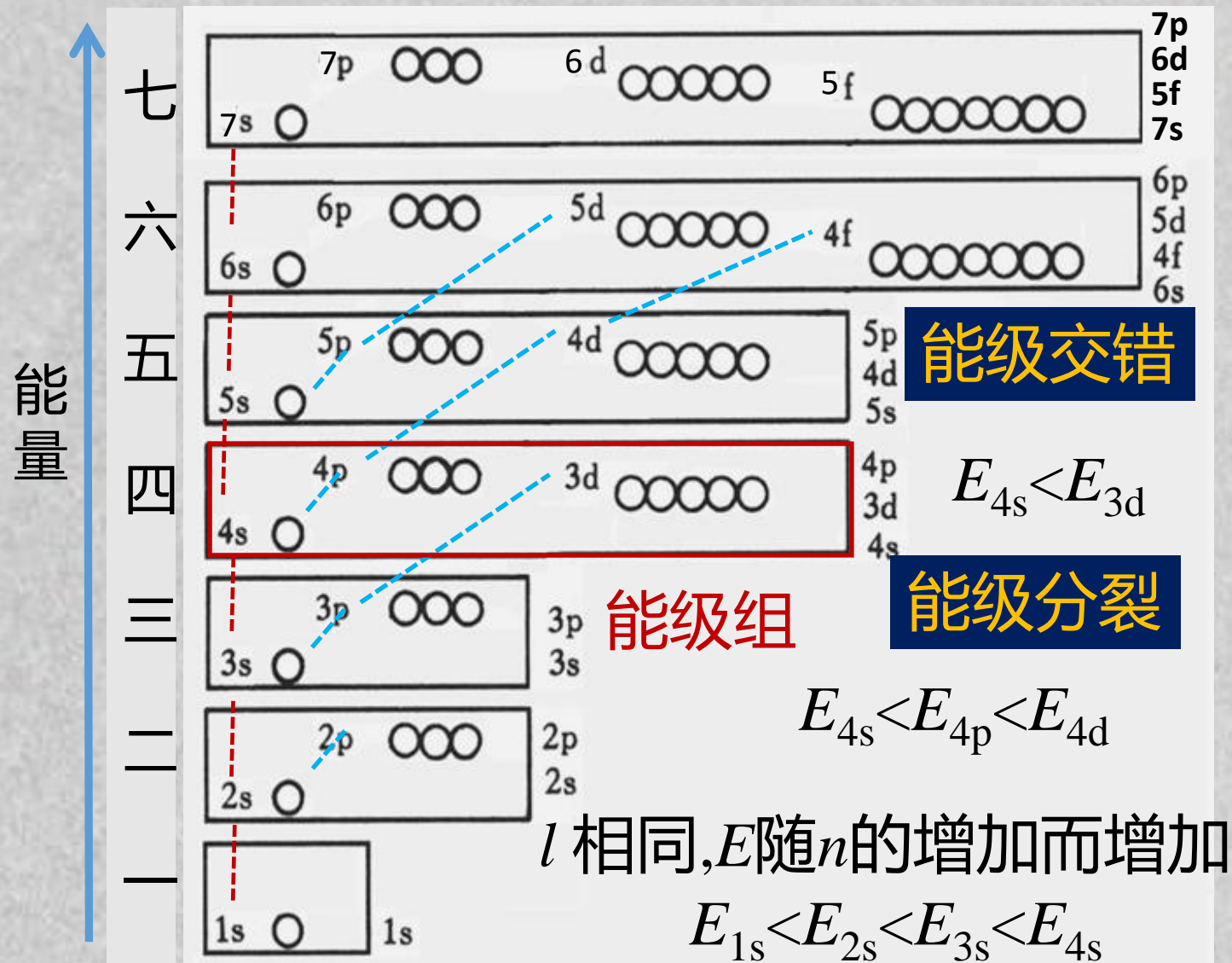
鲍林 ( 1901-1994 )  
获1954年诺贝尔化学奖

量子化学和结构生物学的先驱者之一





# 鲍林的近似能级图





# 鲍林的近似能级图



- ◆ 只有近似意义，不能反映每种元素原子原子轨道能级的高低
- ◆ 随着原子序数的增加，原子核对电子的引力增加，轨道能量下降，由于下降程度不同，能级的相对位置会改变