非同科电子

**同科电子**

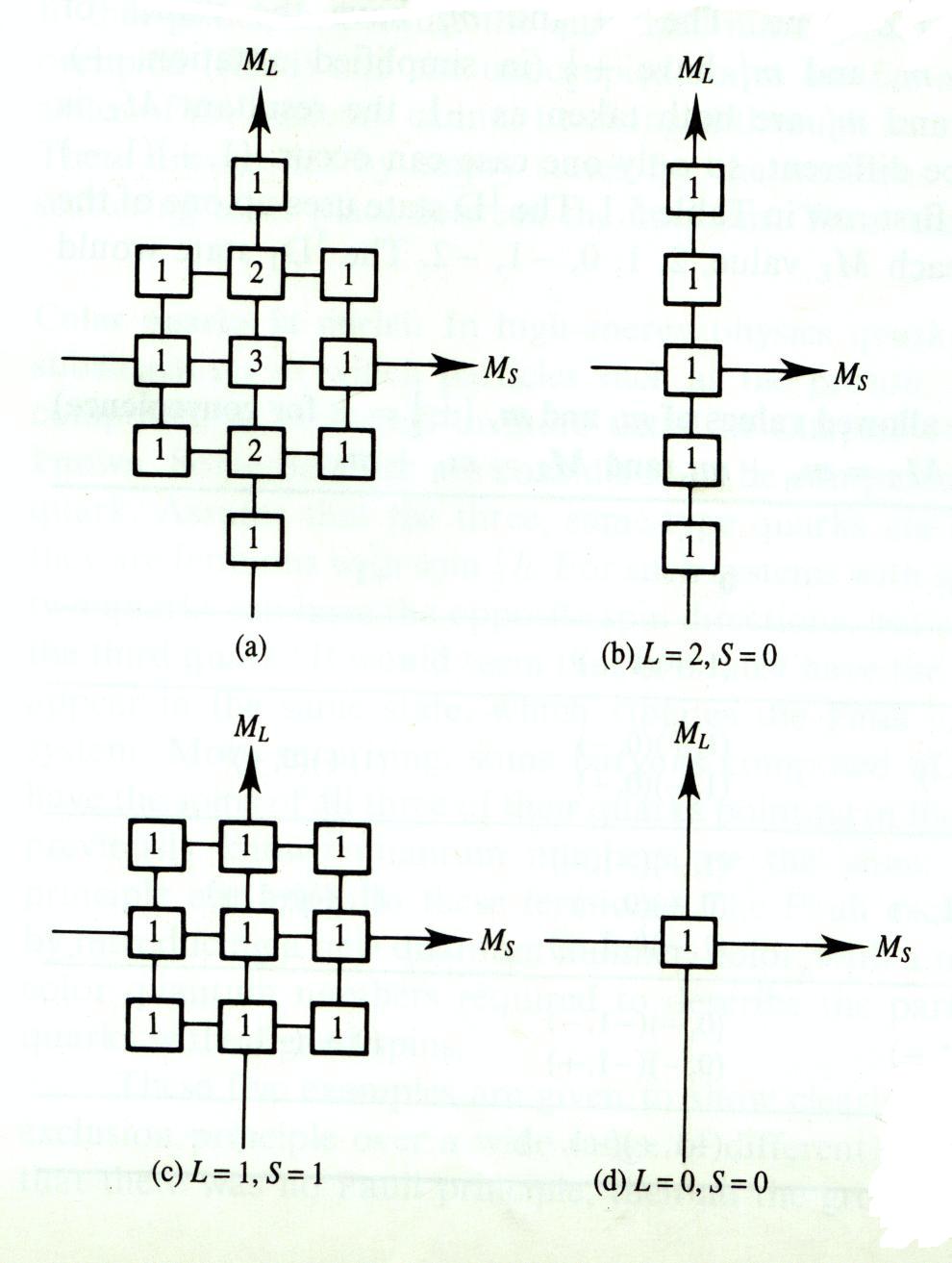
和量子数相同的电子

电子组态

原子态

同科电子合成的状态

1.Slater法



2.偶数定则（只对两个同科电子）

偶数

原子基态

**洪特定则**

原子态能级次序

对一个给定电子组态形成的原子态，当某原子态具有的最大时，它处的能级最低；对同一个，又以值最大的为最低。

附加规则，只对同科电子：

关于同一值，而值不同的诸能级次序，

当同科电子数小于或等于闭壳层占有数的一半，具有最小值（）的能级处在最低，**正常次序**；

当同科电子数大于闭壳层占有数的一半，具有最大值（）的能级处在最低，**倒转次序**；

Hund's Rules

Multiplicity is given by the formula .

The Ground Terms are deduced by using Hund's Rules. The two rules are:

1. The Ground Term will have the maximum multiplicity

2. If there is more than Term with maximum multiplicity, then the Ground Term will have the largest value of .

A simple graphical method for determining just the ground term alone for the free-ions uses a "fill in the boxes" arrangement.

Ground Term

To calculate , simply sum the unpaired electrons using a value of for each. To calculate , use the labels for each column to determine the value of for that box, then add all the individual box values together.

Example:

Configuration

For a configuration, then:

in the box are electrons, so for that box is

in the box are electrons, so for that box is

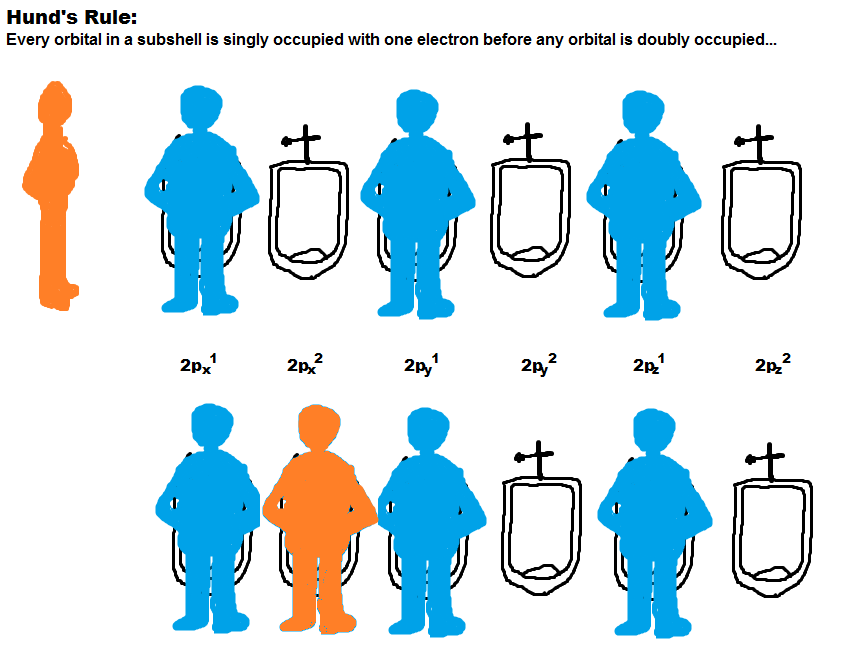
in the box is electron, is

in the box is electron, is

in the box is 1 electron, is

Total value of is therefore or .

Note that for electrons with electron in each box then the total value of is . This is why for a configuration is the same as for a .



**郎德间隔定则**

在三重态中，一对相邻的能级之间的间隔与两个值中较大的那个值成正比。

亚稳态

不能独自自发地过渡到任何一个更低能级的状态

使亚稳态向基态跃迁的方法：

1. 用碰撞激发使原子由亚稳态激发到非亚稳态；
2. 无辐射跃迁（第二类碰撞）：与另一个原子碰撞，把能量直接传递给另一个原子，不经辐射回到基态。

元素周期表

主量子数：电子距核远近，轨道大小

轨道角动量量子数：轨道形状

轨道取向量子数（磁量子数）：轨道的空间取向

自旋取向量子数：电子自旋取向

壳层

主量子数相同的电子构成壳层；

主量子数为的壳层中最多可以有个电子

，分别称为

支壳层、次壳层

角量子数相同的电子，构成次壳层；

每一个次壳层中，可以有个轨道；

，分别称为

每一个轨道上，可以有个自旋方向相反的电子；

决定电子所处状态：

1.泡利不相容原理；2.能量最小原理

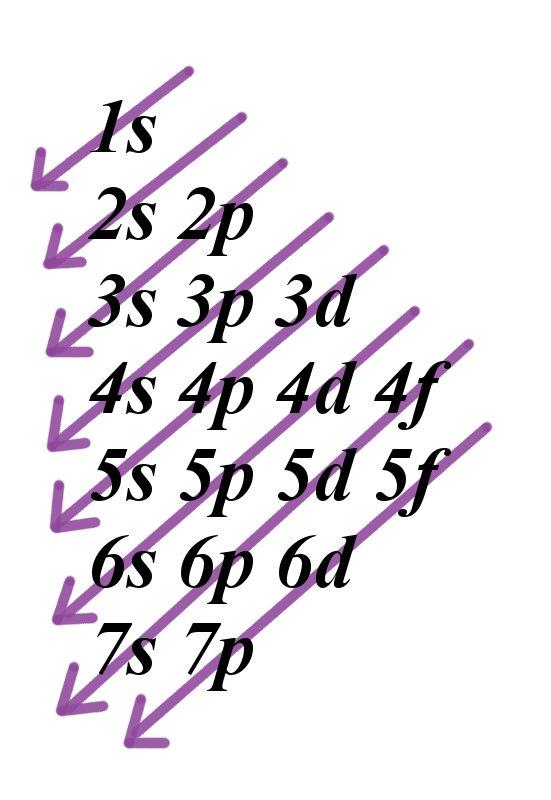
电子组态的能量壳层的次序

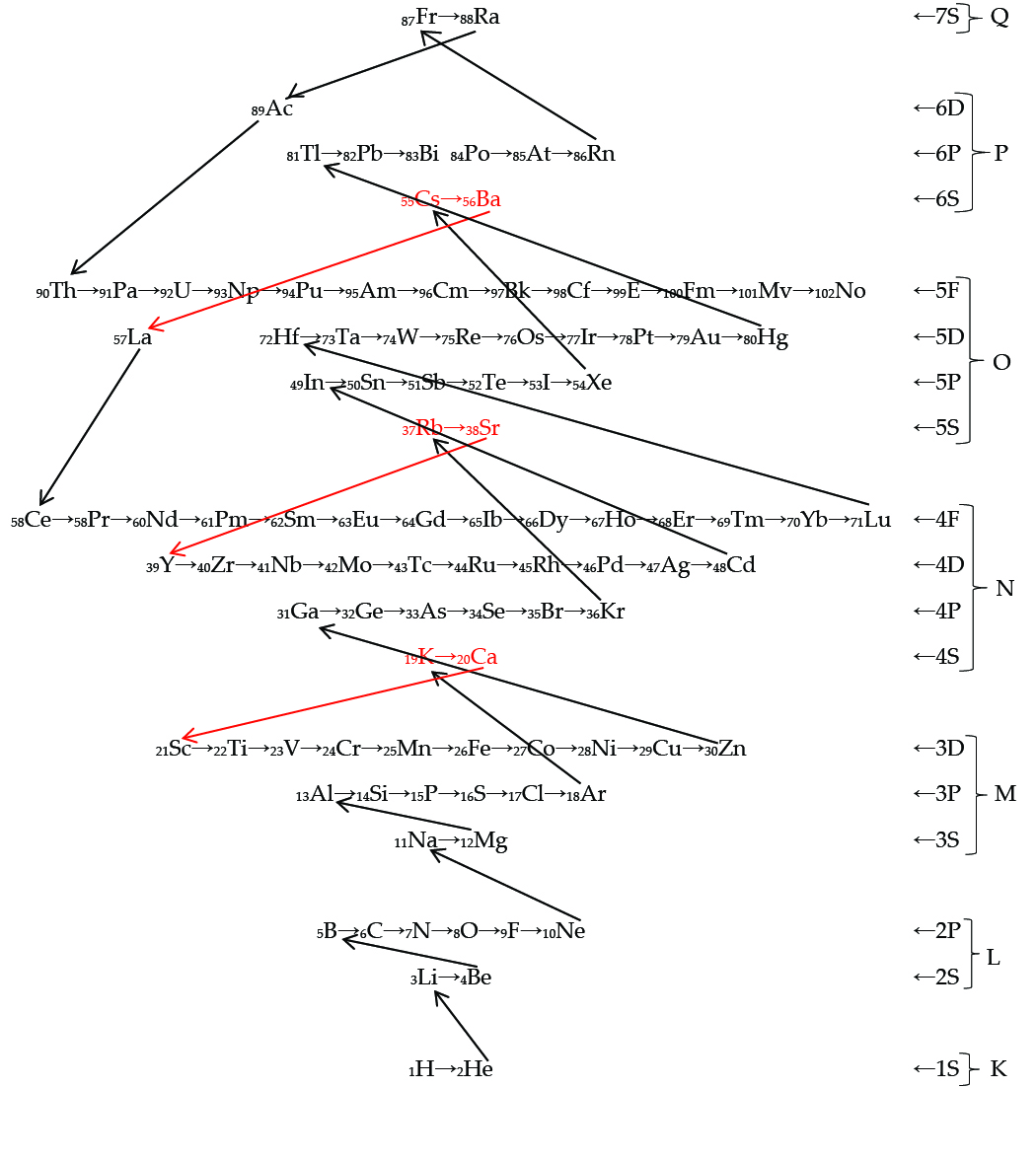
决定壳层次序的是能量最小原理

电子填充壳层次序：

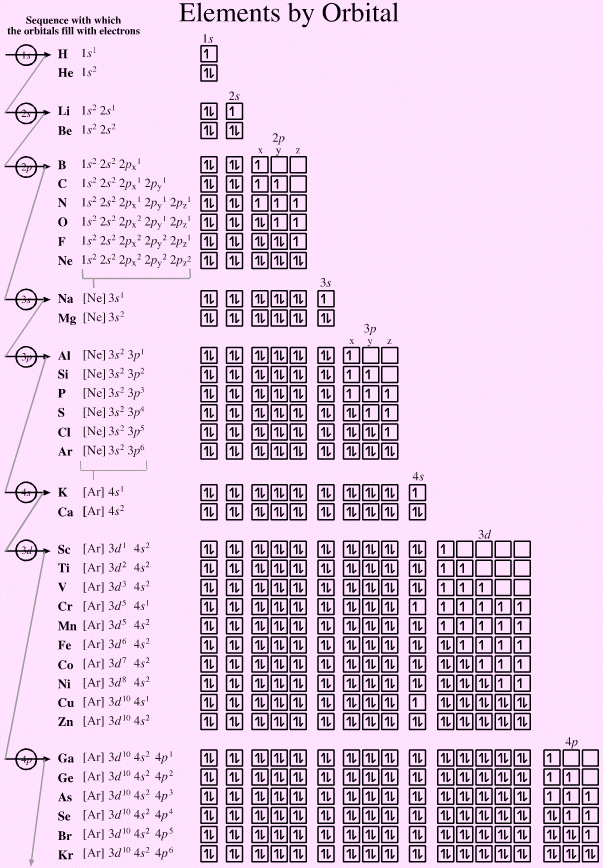
的最低值先填满；

相同时，先填小的；不同时，若相同，先填小的；若不同，先填大的；





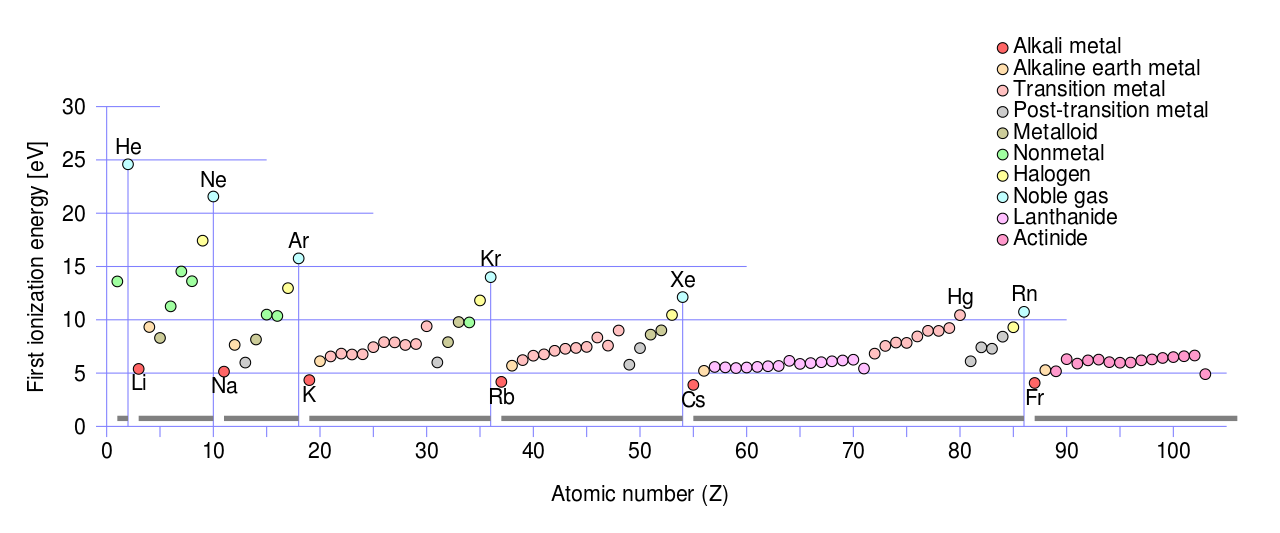
The Madelung energy ordering rule, **Aufbau Principle**



第一电离能

气态电中性基态原子失去一个电子转化为气态基态正离子所需要的能量；

第一电离能（原子失去最外层的一个电子所需能量）数值越小，原子越容易失去一个电子, 其金属性越强；第一电离能数值越大，原子越难失去一个电子，其还原性越弱

****

First Ionization Energy

1)随着核电荷数的递增，元素的第一电离能呈现周期性变化；

2)总体上金属元素第一电离能较小，[非金属元素](http://baike.baidu.com/view/607019.htm" \t "_blank)第一电离能较大；

3)同周期元素第一电离能从左到右有增大的趋势。所以同一周期第一电离能最小的是碱金属元素,最大的是[稀有气体](http://baike.baidu.com/view/30601.htm" \t "_blank)元素；

4)同一周期内元素的第一电离能在总体增大的趋势中有些曲折。当外围电子在能量相等的轨道上形成全空、半满或全满结构时，原子的能量较低，元素的第一电离能较大；特例是第二主族的第一电离能大于第三主族，第五主族的第一电离能大于第六主族；

5)同一[主族元素](http://baike.baidu.com/view/203619.htm" \t "_blank)从上到下，原子半径增加，[有效核电荷](http://baike.baidu.com/view/1701185.htm" \t "_blank)增加不多，则原子半径增大的影响起主要作用，第一电离能由大变小，元素的金属性逐渐增强；

6)同一副族第一电离能变化不规则