

第二章 原子结构

- ✿ 2.1 微观粒子的运动特征
- ✿ 2.2 波函数与原子轨道的描述
- ✿ 2.3 四个量子数与电子运动状态
- ✿ 2.4 多电子原子的电子层结构
- ✿ 2.5 元素性质的周期性

无机化学

2.3 四个量子数与电子运动状态

★ 2.3.1 四个量子数

★ 2.3.2 核外电子的运动状态

无机化学

← BACK

2.3.1 四个量子数

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副主编 卢俊英 万 露 李志明 钟喜亮 吴云影

1. 主量子数 (n)

主量子数 n 是决定原子中电子能量以及离核的平均距离的主要因素(即与能层对应的量子数, 又称电子层数)。它只能取1, 2, 3, ...等正整数。 n 越大, 表示电子离核越远, 能量越高。

无机化学

层数	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6	n=7	...
符号	K	L	M	N	O	P	Q	...

主 编 章伟光
副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

n相同的电子处于同一个电子层内，即主量子数相同的电子构成同一层。也就是说电子层由一个量子数(n)决定。

对于氢原子，因核外只有1个电子，其电子的能量完全由n决定。

2. 角量子数 (l)

21世纪高等院校教材

角量子数 l 是确定原子轨道的形状并在多电子原子中和 n 一起决定电子能级的量子数. l 只能取小于等于 $(n-1)$ 的正整数.

l	0	1	2	3	4	...	$(n-1)$
相应符号	s	p	d	f	g		

无机化学

副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

当 l 不同时, 原子轨道的形状就不同. 如 s 轨道呈球形, p 轨道呈哑铃形, d 轨道主要呈四瓣梅花状.

对于多电子原子, l 还与能量有关. n 和 l 都相同的电子具有相同的能量, 构成一个能级 (又称亚层). 常用符号 $n l$ 表示, 如 $3s$, $2p$, $3d$, $5f$ 等能级.

除第一层外，每一层中都有几种不同形状的原子轨道存在。且 n 是几，就有几种形状。

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

结论

n 和 l 相同的电子处在同一能级，即能级是由两个量子数 (n, l) 共同决定。而且 n 等于几，这层就有几个能级。

练习题

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副 编 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

2.14 请指出 $n=4$ 的电子层中包含有哪几个能级?其能量是否相等?

2.15 请指出 $n=4$ 的电子层中有几种形状的原子轨道或电子云?它们分别是什么形状?

3. 磁量子数 (m)

21世纪高等院校教材

磁量子数 m 表示原子轨道或电子云在空间的伸展方向(或取向), 每一个磁量子数代表一个伸展方向. m 的取值要求:

$$m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

每种形状的原子轨道或电子云共有 $(2l + 1)$ 个空间取向, 而每一种空间取向就是一条原子轨道, 即有 $(2l + 1)$ 条原子轨道.

l 与m的关系表

l	m	轨道类型	轨道形状	空间取向数
0	0	s轨道	球形	一种
1	-1, 0, +1	p轨道	哑铃形	三种
2	-2, -1, 0, +1, +2	d轨道	四瓣梅花形	五种
3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	f轨道	复杂	七种

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

结论

n , l 和 m 相同的电子处在同一条原子轨道上, 即每条原子轨道由 n , l 和 m 三个量子数共同决定.

科学出版社

例题

21世纪高等院校教材

无机化学

主编 章伟光

副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

2.16 “主量子数为3时, 有3s, 3p, 3d, 3f四条轨道”这种说法对吗?为什么?

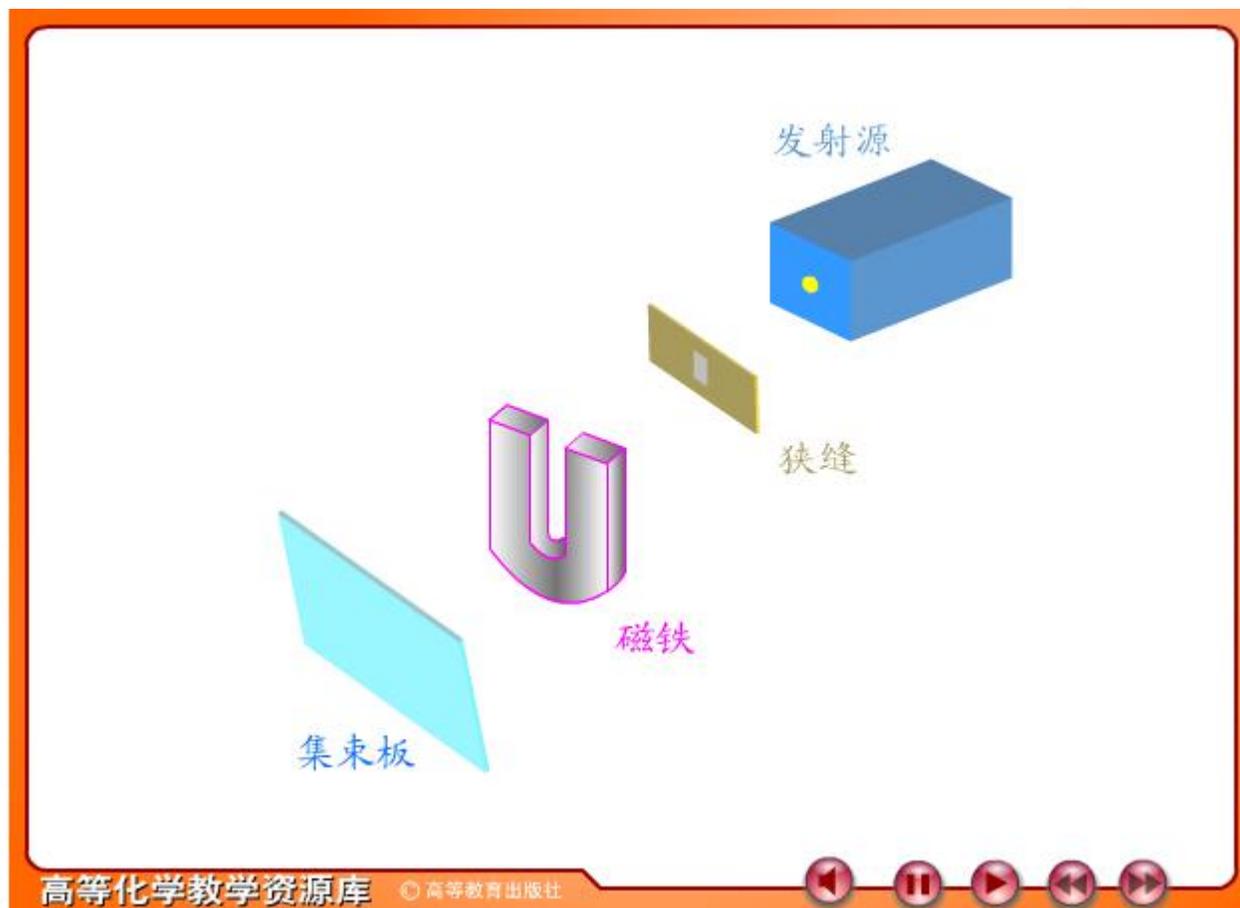
2.17 当角量子数是5时, 可能有的轨道空间取向数是10, 这种说法对吗?

4. 自旋量子数 (m_s)

21世纪高等院校教材

化学

志强 钟声亮 吴云影



电子自旋现象的实验证明

科学出版社

自旋量子数 m_s 表示电子的两种不同自旋运动状态,这两种状态产生不同的“自旋”角动量,其值只能取 $+1/2$ 或 $-1/2$,或者用箭头 \uparrow 和 \downarrow 来表示。

由此,一条轨道中同时容纳两个电子时需自旋方向相反,即一个电子的 $m_s=+1/2$,另一个电子的 $m_s=-1/2$ 。

自旋量子数 m_s 不是解薛定谔方程时引入的常量，它与 n 、 l 、 m 量子数无关，与能量关系不大，是电子自身运动的一个基本性质。

结论

n ， l ， m 和 m_s 四个量子数共同决定一个电子的运动状态，而且是唯一的运动状态。

例题

21世纪高等院校教材

无机化学

主编 章伟光

副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

2.18 "主量子数为1时, 有自旋相反的两条轨道" 这种说法对吗? 为什么?

2.19 判断下列各组量子数是否合理? 错误的请改正。

(A) $n = 3, l = 3, m = 2, m_s = -1/2$

(B) $n = 2, l = 0, m = 1, m_s = +1/2$

(C) $n = 1, l = 0, m = 0, m_s = +1/2$

(D) $n = 5, l = 4, m = -3, m_s = -1/2$

四个量子数的用途

21世纪高等院校教材

无机化学

副主编 李俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

n 用于描述电子所处的层， l 用于描述电子所处的不同形状轨道， m 用于描述不同对称性轨道在空间的取向，而 m_s 描述电子自身运动的性质。不同量子数组合，可以获得不同的信息。同时使用四个量子数就可以描述核外电子的唯一一种运动状态。

由解薛定谔方程获得的每一个确定解(复杂的三维函数解)也可以获得上述信息(自旋量子数除外)。但因三维函数复杂,难以直观描述。而使用四个量子数来描述比用三维函数直观,状态明确,容易掌握。

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

结论

电子层数为 n , 这一层就有 n 个能级, 而这层内的原子轨道总数等于 n^2 , 而每一条原子轨道最多可容纳两个电子, 所以 n 层中总的电子运动状态数应为 $2n^2$.

科学出版社

BACK

2.3.2 核外电子的运动状态

高等院校教材

无机化学

核外电子运动状态的描述方法

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

用 n 来描述电子所处的电子层，用 n 和 l 来描述电子所处的能级，用 n ， l 和 m 来描述电子所在的原子轨道，用 n ， l ， m 和 m_s 来描述电子的唯一运动状态。

练习题

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副主编 申 英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

2. 20 判断下列各组量子数是否正确, 错误的请改正.

A: 3, 0, 1, +1/2

B: 3, 2, -1, +1/2

C: 3, 1, -1, 0

D: 4, 3, 0, -1/2

E: 4, 4, -2, +1/2

F: 4, -1, 1, -1/2

2. 21 3d能级的主量子数为____, 角量子数为____, 可能的磁量子数为____, 包括____条原子轨道, 自旋量子数为____, 该电子亚层最多可容纳____个电子。

科学出版社

2. 22 按要求填写下表

21世纪高等院校教材

主量子数	角量子数	原子轨道符号	磁量子数	自旋量子数	可能的状态数
5	3			+1/2	7
		3p			
4					
	2				

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

科学出版社

练习题

21世纪高等院校教材

无机化学

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万 霞 李志强 钟声亮 吴云影

2.23 用4个量子数来正确描述 $5d^1$ 电子的运动状态。

2.24 波函数 ψ 是描述_____数学函数式，它和_____是同义词。 $|\psi|^2$ 的物理意义是_____，电子云是_____的形象化表示。