

在编辑过程中，得到同事和学生们的直接或间接的帮助，特此致谢。并希望读者不吝提出批评和改进的建议。

W. L. 乔利

第一章 原子的电子构型和周期表

一种化合物的大多数化学性质都与构成此化合物的原子的电子构型有关。因此，认识和理解原子的电子结构的意义是很重要的。在本章中，我们将讨论推测电子结构的根据并将介绍如何应用周期表把各种原子的性质依照其电子结构相互联系起来。

虽然本章中的某些材料已见于一些基础化学书中，但这并不意味着这些材料易于理解。在此，仍对这些材料以极其简要的形式加以介绍，其原因是这些材料在学习无机化学中有根本的重要性，同时也给读者一个复习的机会。

§ 1-1 量子数

1926年 Schrödinger^[1] 提出一个表示体系能量与体系中粒子的空间坐标之间的关系的偏微分方程(现以他的名字命名)。对于三维坐标系中的一个粒子而言，方程式可以写成：

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

其中， ψ 是“波函数”， x 、 y 和 z 是粒子的笛卡尔坐标， m 是粒子的质量， E 是总能量， V 是位能。这个方程把粒子的波动性与测量的几率性二者联系起来。波函数 ψ 具有与波的振幅相类似的性质；波函数平方与一个粒子在坐标 x 、 y 、 z 上出现的几率成正比。

当把 Schrödinger 方程应用到氢原子、或具有一个电子和一个核的任意体系中时，其解包括三个“积分常数”。这些就是熟知的量子数 n 、 l 和 m_l 。“主”量子数 n 可具有从 1 到无穷大的任意整数值。