



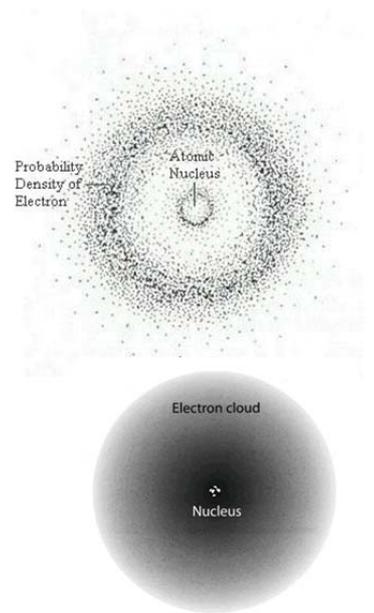
軌域與量子力學

1.波耳的氫原子模型的缺點：

- 波耳的原子模型仍不夠完美，因其僅能適用於氫原子或似氫離子，對於多電子原子的能階卻無法準確的預測。
- 拉塞福與波耳的原子模型均認為原子內的電子沿一定_____，作圓周運動。事實上並不是在核外循著一定軌道作圓周運動。

2.量子力學的原子模型：(Quantum mechanics)

- 量子力學理論認為原子核外的電子並不像行星繞太陽一樣有固定的軌道，因核外電子運動的速度極快，且運動的空間又小，因此_____正確預測電子的位置與運行軌跡，只能知道電子在空間中某點出現機率的大小。
- 假想實驗:對一個具有特定能量且圍繞原子核運動的電子拍攝一系列瞬間高速快門照片，在每張照片中，電子呈現一個小點，再把一系列的圖片疊起來，就會變成一張雲狀圖(稱為**電子雲圖**)。
- 圖中某一空間的小點密度代表該區域的電子_____。
- 電子出現機率和為90%~95%的區域稱為_____。



3.軌道與軌域的比較:

	軌道	軌域
科學家		
理論	電子循著一定軌道，繞核作圓周運動。	無法預測電子的位置與運行軌跡，只能知道電子在空間中某點出現機率的大小。
半徑		

下列有關量子力學的敘述何者正確?

- 在原子軌域中，有某些區域電子出現的機率為零
- 軌域可得知電子運動速度與軌跡
- 原子有明顯界面
- 軌域形狀為電子在某區域出現機率的分布圖
- 電子出現機率愈大，則電子雲愈密
- 以電子分布機率取代軌道



量子數(Quantum numbers)

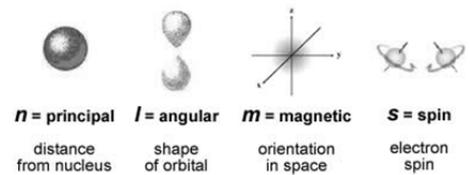
1. 意義: 描述電子在原子中之定態所用的數字。

2. 種類:

a. 波耳只用 n 來描述_____。

b. 量子力學用 n, l, m 來描述_____。

c. 要完整描述電子的運動，必須使用四種量子數: _____。



3. 主量子數 (n) principal quantum number : 決定軌域的能量與大小。

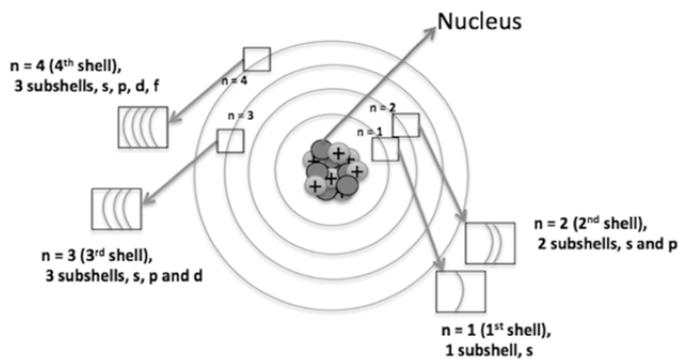
a. 電子所具有的能量可由主量子數 (n) 決定， n 為任何正整數。

b. 當 n 值愈大時，電子所具有的能量_____，相對應的軌域體積也_____，電子距離原子核的平均半徑_____，代表電子可以出現的空間愈廣。

➤ 單電子原子:

➤ 多電子原子: 任一 n 值的所有軌域之能量_____。

c. 依 n 等於 1、2、3、4、... 區分為 K、L、M、N、... 等殼層。



4.角（動量）量子數（ l ） angular momentum quantum number：決定軌域的種類與形狀。

a. l 值由 n 決定，對一個 n 值， $l = \underline{\hspace{2cm}}$ ，即在第 n 層就有 種軌域。

$n=1$ 有 種軌域，有 個軌域

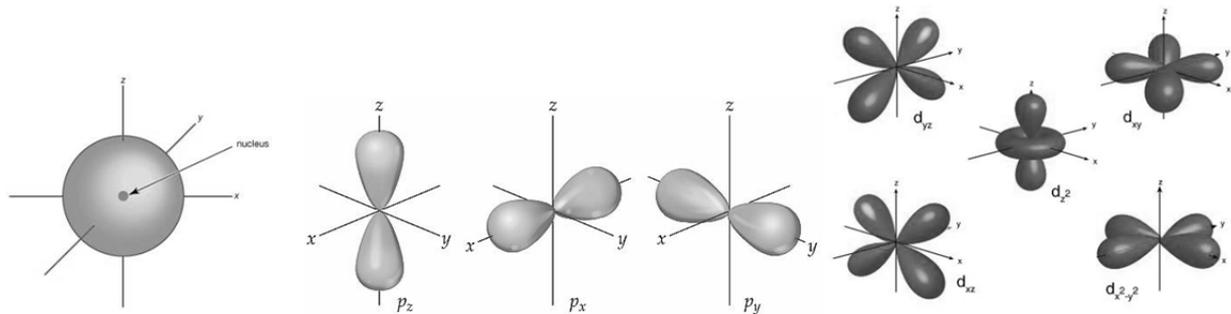
$n=2$ 有 種軌域，有 個軌域

$n=3$ 有 種軌域，有 個軌域

$n=4$ 有 種軌域，有 個軌域

b. l 為 0、1、2、3、... ($n-1$) 的正整數，依次稱為 s、p、d、f、... 等軌域種類。

s 軌域的形狀均為球形對稱，p 軌域的形狀為啞鈴形，d 軌域的形狀為雙啞鈴形或花瓣形。



c. 對單電子原子， l 值不影響軌域能量大小，即同一主殼層，其副殼層軌域能量大小： 。

d. 對多電子原子， l 值會影響軌域能量大小，即同一主殼層，其副殼層軌域能量大小： 。

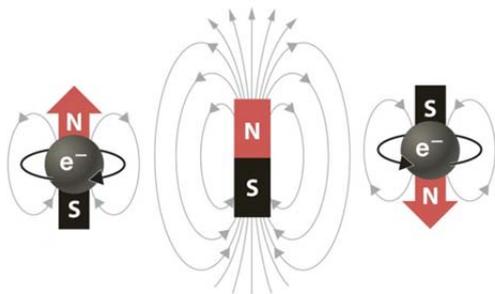
5.磁量子數（ m ） magnetic quantum number：決定軌域在空間的方向，即軌域的個數。

a. m 值由 l 值決定，對一個 l 值， m 值 = ，即有 個。

b. l 值不影響軌域能量大小，即 n 值與 l 值相同之每一個 m 值其軌域均 。

6.自旋量子數（ s ） spin quantum number：決定一個軌域最多可容納的電子數。

電子除了在核外運動，自身還會有順時鐘與逆時鐘兩種不同方式的自旋。S 只有二個值，表示每一個軌域最多只能容納 個電子。



每一個原子中的每一個電子均由 4 種量子數區別，即在相同原子中沒有兩個電子會有完全相同的 4 種量子數。

7.各殼層所含的軌域及容納的電子總數：

主量子數 (主殼層)(n)	軌域的 標示	副殼層中軌 域的總數	可容納的 電子數	主殼層中軌域 的總數	各主殼層中最 多的電子數
1 (K)					
2 (L)					
3 (M)					
4 (N)					

每一個 n 值有__個 s 軌域，有__種軌域，有__個軌域，有__個電子

- 下列哪幾組的四個量子數 (n, l, m_l, s) 為 3d 軌域？ (A) $(3, 1, 0, +\frac{1}{2})$
 (B) $(3, 1, +1, +\frac{1}{2})$ (C) $(3, 2, +2, -\frac{1}{2})$ (D) $(3, 0, 0, +\frac{1}{2})$
 (E) $(3, 2, -1, +\frac{1}{2})$

對 $n=5$ 之軌域而言，下列敘述何者正確？ (A)共有 25 個軌域 (B)共有 s、p、d、f 等共 4 種副殼層 (C)最大電子容量共有 50 個 (D)對氫原子而言，此層所有軌域之能階皆相同 (E)對氫原子而言，此層軌域之能階大小順序為 $s < p < d < f$

軌域 5f 共有幾種定態數?

$n=3, \ell=2$ 之軌域? (A)3s (B)2p (C)3p (D)3d

下列哪一原子軌域不存在? (A)8s (B)3p (C)4d (D)3f (E)2p (F)3d (G)7p (H)4f (I)8d (J)9p (K)4g

下列 (n, ℓ, m, s) 何者不存在? (A) $(2, 0, 0, -\frac{1}{2})$ (B) $(4, 1, -2, \frac{1}{2})$
(C) $(3, 2, 0, -\frac{1}{2})$ (D) $(1, 0, 0, \frac{1}{2})$

量子力學模型引用三個量子數 (n, ℓ, m_ℓ) 描述一個軌域，下列何者是 d 軌域的代表法?
(A) $(2, 1, 0)$ (B) $(3, 2, 0)$ (C) $(2, 2, -1)$ (D) $(4, 2, +3)$ (E) $(4, 3, +2)$

何組為 3s 軌域之電子?

- (A) $(3, 0, 0, \frac{1}{2})$ (B) $(3, 1, 0, -\frac{1}{2})$ (C) $(3, 0, 1, \frac{1}{2})$ (D) $(4, 0, 0, -\frac{1}{2})$

何組為 4P 軌域之電子?

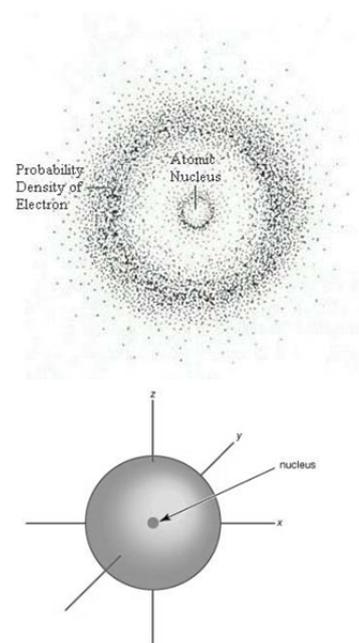
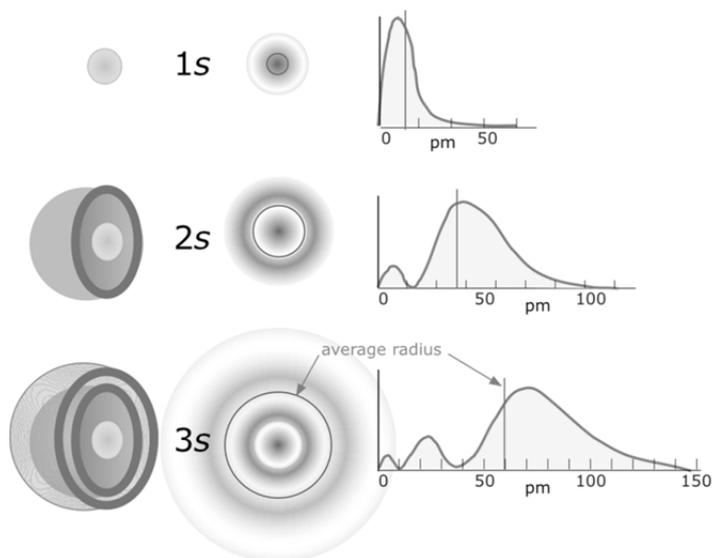
- (A) $(4, 2, -1, \frac{1}{2})$ (B) $(4, 3, 0, \frac{1}{2})$ (C) $(4, 2, 2, -\frac{1}{2})$
(D) $(4, 1, -1, -\frac{1}{2})$



軌域的種類

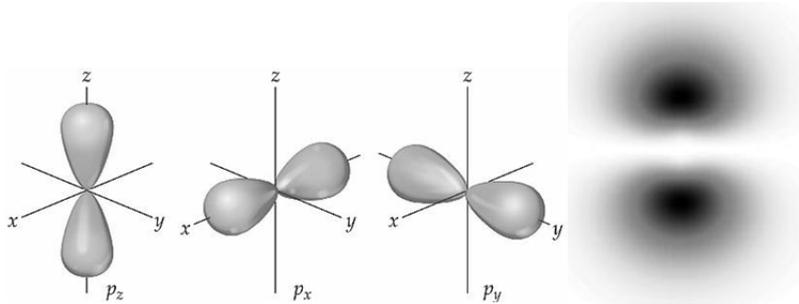
1.s 軌域:

- (1)任一 n 值，皆有一 l 值=0。
- (2) s 軌域上的電子成____分佈，_____。
- (3)以原子核為球心， r_1 為半徑之球面各點，電子出現機率____，而不同半徑 r_2 ，在 r_1 與 r_2 之球面上電子出現機率_____。
- (4)ns 軌域之 n 值愈大，電子離原子核____，能量_____。
- (5)1s 電子可能出現的範圍極大，在距核約____處機率最大。



2.p 軌域:

(1) 對於 $n \geq \underline{\quad}$ ，皆有 l 值=1，且 $m = \underline{\quad}$ ，表示有三個互相垂直的啞鈴形 p 軌域，具 $\underline{\quad}$ ，以 $\underline{\quad}$ 表示。



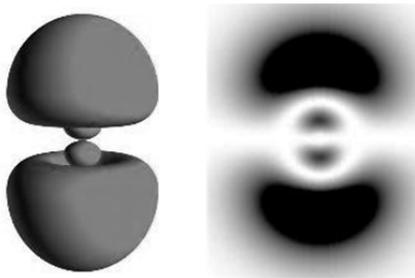
(2) p 軌域之電子最常出現於以原子核為中心的兩側區。

a. P_x 軌域密集於 x 方向，在 yz 平面電子出現機率= $\underline{\quad}$ 。

b. P_y 軌域密集於 y 方向，在 xz 平面電子出現機率= $\underline{\quad}$ 。

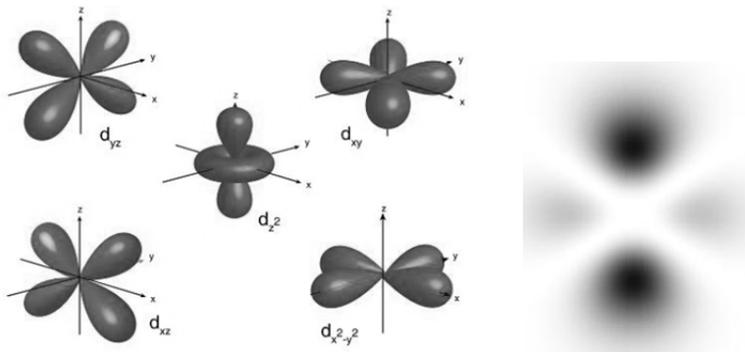
c. P_z 軌域密集於 z 方向，在 xy 平面電子出現機率= $\underline{\quad}$ 。

(3) $n \geq 2$ 之能階都有 p 軌域，稱為 nP_x 、 nP_y 、 nP_z ，而 n 值愈大，電子離原子核愈遠，但軌域形狀與方向 $\underline{\quad}$ 。



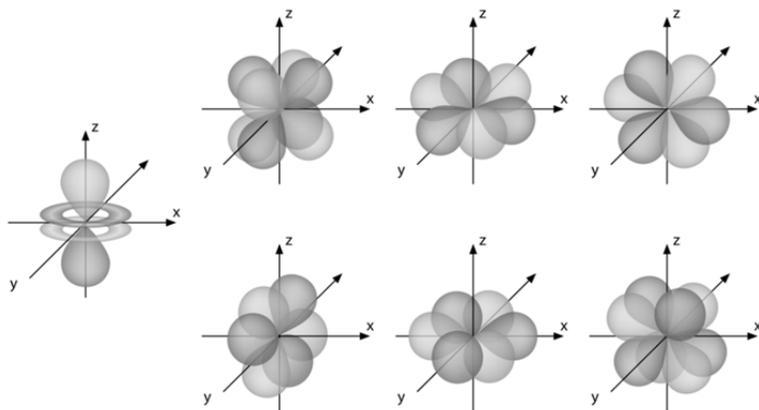
3.d 軌域:

(1) 對於 $n \geq \underline{\quad}$ ，皆有 l 值=2，且 $m = \underline{\quad}$ ，表示有五個雙啞鈴形 d 軌域，具 $\underline{\quad}$ 。



4.f 軌域:

(1)對於 $n \geq \underline{\quad}$ ，皆有 l 值=3，且 $m = \underline{\quad}$ ，表示有七個軌域，具 $\underline{\quad}$ ，形狀複雜。



依據原子軌域理論，當氫原子為基態時，下列何者正確？ (A)電子只能在半徑為 0.53 \AA 的圓周上運轉 (B)電子只能在半徑為 0.53 \AA 的球面上運轉 (C)電子只能在半徑為 0.53 \AA 的球面之內運轉 (D)電子可以出現在距原子核 0.53 \AA 以外的空間

下列關於 s 軌域的敘述，何項錯誤？ (A)為球形對稱 (B)電子運行於圓形的軌道 (C)主量子數愈大，s 軌域的半徑愈大 (D)同一球面上各點，電子出現的機率相等，與電子在空間的方向無關 (E)電子可運行於球形之外的區域 (F)具有方向性 (G)每一個主層(n 值)只有一個 s 軌域

3p 表示 (A)p 軌域有三個副殼層 (B)第三層的 p 副殼層 (C)p 副殼層的電子有三個伸展方向： p_x 、 p_y 、 p_z (D)可以容納六個伸展方向不同的電子 (E)軌域間均互相垂直 (F)2p 軌域能量高於 3p (G)各個軌域能量均相同

下列有關軌域的敘述，何者錯誤？ (A)量子力學的原子理論中引用了四個量子數 (n, l, m_l, m_s) 來描述電子 (B)每一 n 層都有 s 軌域，呈球形對稱分布且無方向性 (C) p 軌域有 p_x, p_y, p_z 三個互相垂直且能量相同的軌域 (D) f 軌域出現在 $n \geq 6$ 的主殼層上，最多可填 14 個電子

下列有關原子軌域的敘述，何者正確？ (A)氫原子的 $3s$ 軌域能量較 $3p$ 軌域能量低 (B)鋰原子的 $2s$ 與 $5s$ 軌域皆為球形分布，只是個數不同 (C) $3d$ 表示有 3 個互相垂直的 d 軌域 (D) 主層 $n=4$ 的原子軌域最多可容納 14 個電子 (E)對 p_x 軌域而言， yz 平面上，電子出現的機率為零

- (1)若原子核位在 $X=Y=Z=0$ 之原點坐標上，發現 s 軌域之電子出現在 $X=a, Y=Z=0$ 處的機率為 1×10^{-5} ，則在 $Y=a, X=Z=0$ 處發現 s 軌域之電子出現的機率為_____
- (2)若原子核位在 $X=Y=Z=0$ 之原點坐標上，發現 p_x 軌域之電子出現在 $X=a, Y=Z=0$ 處的機率為 1×10^{-3} ，則 p_y 軌域之電子在 $Z=a, X=Y=0$ 處出現的機率為_____
- (3)承上題， p_z 軌域之電子在 $Z=a, X=Y=0$ 處出現的機率為_____

若原子核位在原點，發現 $2s$ 軌域之電子出現在 $x=a, y=z=0$ 處的機率為 1×10^{-5} ， $2p_x$ 軌域之電子出現在 $x=b, y=z=0$ 處的機率為 1×10^{-5} ，下列關於原子軌域和電子組態的敘述，何者正確？

(A) 放射性同位素發生衰變的原因是因為其電子組態不安定
 (B) 在 $y=a, x=z=0$ 處發現 $2s$ 軌域之電子出現機率為 0
 (C) 在 $x=-b, y=z=0$ 處發現 $2p_x$ 軌域之電子出現機率為 1×10^{-5}
 (D) 在 M 層中，最多可容納 10 個電子
 (E) 主量子數 $n=4$ ，角量子數 $\ell=1$ 的軌域是 $4s$ 軌域

下列何者正確？

- (A) 電子以球形軌道運動
- (B) $1s$ 電子只能在半徑為 0.53 \AA 的圓周上運轉
- (C) 任何軌域在距核等距離之同一球面上各點，電子出現的機率相等
- (D) n 值愈大表示電子雲愈遠離核
- (E) d 軌域有 5 個不同的軌域
- (F) n 值相同，則各軌域能量亦相同
- (G) 氫原子的 $2S$ 軌域能量比 $2P$ 軌域能量大
- (H) $2S$ 軌域為球形分佈， $3S$ 為啞鈴形分佈
- (I) $n=5$ 會有 5 種軌域，25 個軌域
- (J) 任一 n 值最多可容納 $2n^2$ 個電子
- (K) $n \geq 4$ 以後會有 f 軌域
- (L) P 軌域電子會出現在原子核中心
- (M) 描述一個定態電子需要 3 個量子數
- (N) 描述一個軌域電子需要 3 個量子數
- (O) 科學家可以用儀器測定出電子運動軌跡
- (P) $2P$ 軌域與 $3P$ 軌域之方向性不同
- (Q) $n=3$ 時存在有 5 個互相垂直的 $3d$ 軌域
- (R) $n=0$ 的軌域為球形， $n=1$ 的軌域為啞鈴形
- (S) 電子除了位移運動也會自轉運動
- (T) P 軌域電子分佈機率與空間方位無關
- (U) $2d$ 與 $3f$ 軌域不存在



單電子原子的能階

1. 氫原子和似氫離子皆屬於單電子系統，其能階高低亦以主量子數 n 決定， n 值___，能階___。

$$\text{能階公式: } E_n = \frac{-1312}{n^2} \times Z^2 \text{ kJ/mol} \quad (Z:\text{原子序})$$

2. 當 Z 相同

- (1) 能階之能量由___決定。但不成___。
 (2) $1s < 2s = 2p_x = 2p_y = 2p_z < 3s = 3p = 3d < \dots$ (不需要考慮電子間的___)

3. 當 Z 不同，但 n 相同

- (1) 能階之能量由___決定。
 (2) Z 愈大，能量___。



多電子原子的能階

1. 多電子原子能階高低可由主量子數與角動量量子數的和判定:

(1) $n + \ell$ ，其值___，能階___。

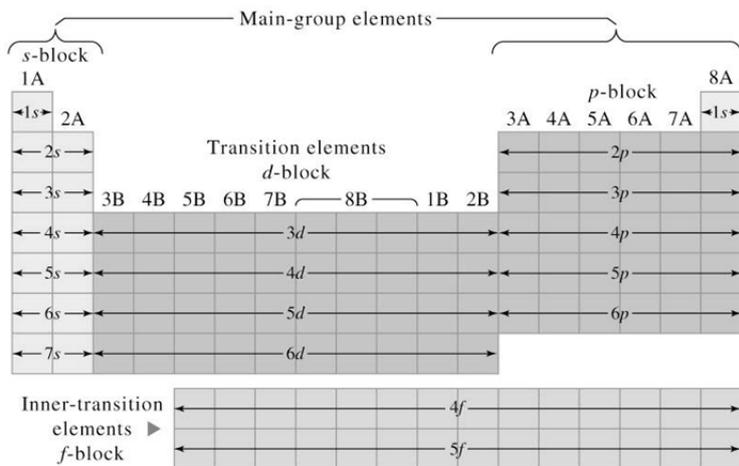
說明: $3d$ 和 $4s$ 能階高低

(2) 若 $(n + \ell)$ 值相等時，則由 n 值決定， n 大者，能階___。

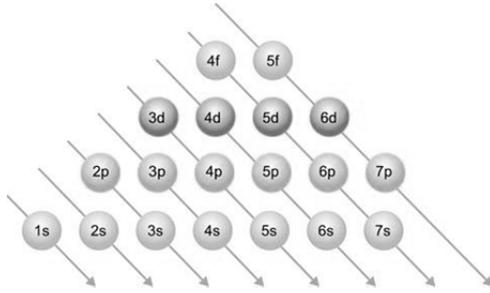
說明: $4d$ 和 $5p$ 能階高低

2. 由上述原則可知: 同層能量_____，外層_____高於內層。

3. 週期表軌域能量圖:



4.能階高低之對角線記憶法:



5.能階大小:

鋰原子的線光譜較氫原子的線光譜複雜，原因為何？

- (A) 鋰原子所含的價電子數比氫原子多 (B) 氫原子的軌域數目較少 (C) 電子位於氫原子的 ns ， np ， nd 軌域時，能量相同，但在鋰原子中卻不相同 (D) 電子位於氫原子 $1s$ 軌域的位能比位於鋰原子 $1s$ 軌域的位能高

下列能階的能量比較關係，何者對 H 原子及 He 原子均適用？

- (A) $4s = 4p$ (B) $3s > 4s$ (C) $3p > 3s$ (D) $4p > 3s$ (E) $3d > 4s$ (F) $5d > 4f$ (G) $6p > 5f$
(H) $6s > 4p$ (I) $7s > 5f$ (J) $6d > 6f$

對氧原子來說，下列能階大小順序何者錯誤？

- (A) $5p > 4f$ (B) $4p > 3p$ (C) $3d > 4s$ (D) $4p > 3d$

下列多電子原子能階高低順序，何者正確？ (A) $(n+1)s > (n-1)f > np$
(B) $(n-2)f > (n-1)p > ns > (n-1)d$ (C) $(n-2)f > (n-1)d > np > ns$
(D) $np > (n-1)d > (n-2)f > ns$

下列有關各原子或離子軌域能量高低的敘述，何者正確？

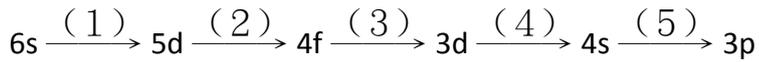
(A) H : $3p < 3d$ (B) Li : $3d < 4s$ (C) Li^{2+} : $4s < 3d$ (D) N : $3d < 4s$
(E) H : $3d < 4s$

下列關於多電子原子的軌域能量高低，何者正確？ (A) $3p < 3d < 4s$ (B) $5s < 4d < 5p$
(C) $3d < 4d < 5d$ (D) $4f < 4d < 5s$ (E) $4f < 5d < 6p < 7s$

在多電子的原子中，某一電子由 5p 能階躍遷至 3d 能階的過程，可產生不同頻率的光譜線最多有幾條？ (A) 10 (B) 9 (C) 8 (D) 6

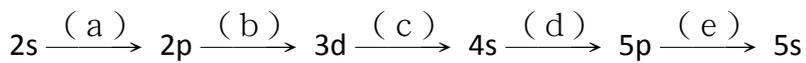
多電子原子中電子自 4p 向 1s 躍遷時，可能發出幾種頻率之光？
(A) 28 (B) 10 (C) 6 (D) 3

對氫原子而言，當其電子存在之軌域改變如下時，哪一步驟會釋放出能量？



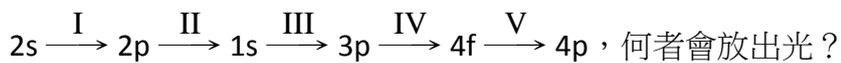
(A)(1) (B)(2) (C)(3) (D)(4) (E)(5)

對氫原子與氧原子而言，其電子在下列哪些能階的轉移皆需要吸收能量？



(A)(a) (B)(b) (C)(c) (D)(d) (E)(e)

當鈹原子在火焰上受熱被激發時，會放出發射光譜，下列各步驟的電子躍遷



(A) I (B) II (C) III (D) IV (E) V

若下列各軌域都可存在:(甲)ns (乙)(n-1)s (丙)(n-1)p (丁)(n-3)d (戊)(n-2)f

(1)n 之最小值?

(2)在多電子原子中的能階高低順序?

(3)在單電子原子中的能階高低順序?