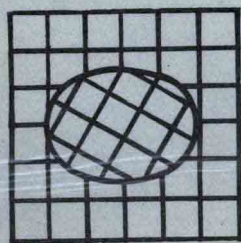
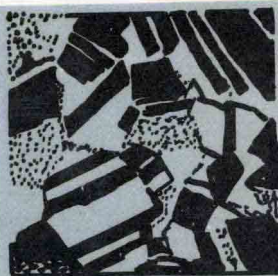
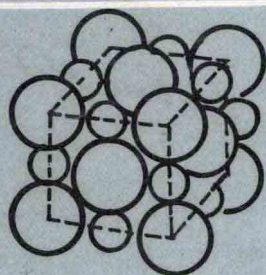
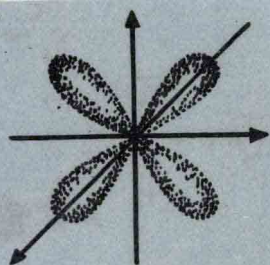


高等学校教学用书

金属学原理

李 见 主编



东北工学院出版社

金属学原理

李 见 主编

江苏工业学院图书馆
藏书章

东北工学院出版社

ISBN 7-81008-275-2/TQ·0 定价：2.50 元

内 容 提 要

根据冶金高等院校《金属学原理教学大纲》要求，结合近数年来的教学实践经验，为我院金属材料科学专业本科生新编了本教材。与以往教材相比，本教材在篇幅上有所缩减和调整。加强了新型金属材料，特别是功能材料、超高温及轻型金属材料的基础内容，增加了对材料性质有关物理现象的讲解。

金 属 学 原 理

李 见 主 编

金 属 学 原 理

李 见 主 编

东北工学院出版社出版发行 东北工学院印刷厂印刷
(沈阳·南湖) (辽新出许字 89084 号)

开本：787×1092 1/16 印张：20 字数：499 千字
1991 年 6 月第 1 版 1991 年 6 月第 1 次印刷
印数：1~1 000 册

责任编辑：刘长仁 责任校对：张德喜
封面设计：赫 林

ISBN 7-81006-273-5/TG·6 定价：5.56 元

前 言

本书是为材料科学系金属材料及热处理专业本科生新编的教材，其编写的主要依据是冶金高等院校制订的《金属学原理教学大纲》、本学科及专业的发展现状、以及东北工学院多年讲授本课程的实践经验。近几年来，新型金属与非金属材料，特别是各种功能材料、超高温以及轻型材料发展很快，作为金属材料专业的学生有必要为了解这类新材料准备必要的基本知识。为此，课程中应增加对各种重要的与材料性质有关的物理现象的讲解，另一方面，由于全国每年培养大量材料专业的研究生，考虑到新情况下对于本科生的要求和课程的配合，有理由对本课程内容作适当调整。编者认为，以往的、作为本科生教材的《金属学原理》一书，在篇幅和深度方面都偏大，不利于提高教学实效，本书力求在这一方面有所改进，切望能取得较好的效果。

为应急需，本书在匆忙中编成，难免存在不少问题，望读者指正，以利改进。

参加本书编写工作的有：李在先（第2章部分内容及第10章）；李春生（第4章及第7章）；郝士明（第5章部分内容）；白玉光（第6章及第12章）；宗亚平（第13章）；孙振岩（第14章）；孙旭东、赵镶（第17章）。其余各章由李见教授编写，并承担全书主编定稿工作。

编 者

1987.8

目 录

前 言

1. 原子的结构与键

- 1.1 原子的结构 (1)
- 1.2 周期表 (8)
- 1.3 电子结构的某些表现 (9)
- 1.4 原子间的键 (11)
- 1.5 能带理论 (18)

2. 原子集成体

- 2.1 前 言 (21)
- 2.2 晶体结构 (21)
- 2.3 晶面与晶向 (27)
- 2.4 晶格几何与原子半径 (29)
- 2.5 金属结构与多形性 (30)
- 2.6 多晶材料 (31)
- 2.7 晶体缺陷 (33)
- 2.8 合金相的结构 (36)

3. 材料的物理性能

- 3.1 能带理论 (43)
- 3.2 导体与绝缘体 (46)
- 3.3 超导性 (46)
- 3.4 半导体 (47)
- 3.5 光导性 (51)
- 3.6 光发射性 (52)
- 3.7 脉塞与激光 (52)
- 3.8 介电极化 (54)
- 3.9 磁 化 (56)
- 3.10 热学性能 (60)

4. 纯金属的凝固

- 4.1 形 核 (63)
- 4.2 纯固体的生长 (69)

5. 相图的基础知识与合金的凝固

5.1 平 衡	(75)
5.2 单元系的相平衡	(76)
5.3 相图的表示及测定方法	(80)
5.4 匀晶系相图的分析	(82)
5.5 二元溶体的热力学	(84)
5.6 固溶体合金的非平衡凝固	(90)
5.7 偏析现象在提纯中的应用	(92)
5.8 成分过冷在固溶体结晶中的作用	(94)
5.9 合金铸锭的凝固	(96)
5.10 共晶系相图	(98)
5.11 共晶体的金相结构	(101)
5.12 包晶系相图	(107)
5.13 偏晶系	(110)
5.14 二组元形成化合物的相图	(113)
5.15 有固态相变的相图	(114)
5.16 气体-金属的平衡	(116)
5.17 相图的热力学解释	(117)

6. 铁碳相图及碳钢

6.1 铁与铁碳合金相	(122)
6.2 Fe-Fe ₃ C 二元相图分析	(125)
6.3 典型铁碳合金平衡结晶过程分析	(128)
6.4 平衡状态下铁碳合金的成分、组织与性能	(135)
6.5 关于商品碳钢的知识	(137)

7. 三元合金相图

7.1 三元合金相图的几何特性	(143)
7.2 三元匀晶相图	(146)
7.3 组元在液态无限溶解, 固态完全不溶, 具有共晶反应的三元相图	(149)
7.4 固态有限溶解具有共晶转变的三元相图	(152)
7.5 三元相图实例	(157)

8. 塑性形变

8.1 滑 移	(161)
8.2 孪 变	(163)
8.3 多晶材料形变的特征	(164)

9. 位错理论概要

- 9.1 位错的基本类型(166)
- 9.2 位错的柏氏矢量(167)
- 9.3 位错的运动(167)
- 9.4 位错的弹性性质(169)
- 9.5 面心立方晶体中的堆垛层错与不全位错(171)
- 9.6 位错的增殖(174)

10. 晶体界面和显微结构

- 10.1 界面自由能(176)
- 10.2 固/气界面(177)
- 10.3 单相固体中的界面(179)
- 10.4 固体中的相界面(192)
- 10.5 界面迁移(202)

11. 工程力学性能与断裂

- 11.1 张力作用下的应力与应变(207)
- 11.2 真应力-真应变拉伸试验(208)
- 11.3 其他重要力学性能(209)
- 11.4 单纯静载下的断裂(210)
- 11.5 疲 劳(211)
- 11.6 冲击性能(213)
- 11.7 应力集中与缺口敏感度(215)
- 11.8 断裂力学概述(516)

12. 回复与再结晶

- 12.1 冷变形金属的储能(219)
- 12.2 退火时储能的释放(220)
- 12.3 回复动力学(223)
- 12.4 再结晶(224)
- 12.5 有关的一些话题(231)

13. 扩 散

- 13.1 扩散的原子机制(235)
- 13.2 间隙扩散(236)
- 13.3 代位式原子的扩散(242)
- 13.4 原子能动性(250)

14. 固体中的扩散相变

- 14.1 固体中的同质形核.....(252)
- 14.2 异质形核.....(254)
- 14.3 析出相长大.....(256)
- 14.4 综合的相变动力学——TTT 图.....(261)
- 14.5 时效硬化型析出反应.....(264)
- 14.6 铁素体由奥氏体的析出.....(270)
- 14.7 蜂窝状析出.....(271)

15. 马氏体相变概述

- 15.1 无扩散相变的特征.....(274)
- 15.2 马氏体的晶体学.....(278)

16. 环境对金属的作用

- 16.1 金属的腐蚀.....(282)
- 16.2 金属腐蚀的控制.....(289)
- 16.3 局部化的腐蚀.....(293)
- 16.4 金属的大气氧化.....(296)

17. 研究金属结构的主要方法

- 17.1 X射线衍射.....(299)
- 17.2 透射电子显微镜.....(302)
- 17.3 扫描电子显微镜.....(308)
- 17.4 电子探针X射线显微分析仪.....(310)

1. 原子的结构与键

1.1 原子的结构

所有实验事实都导致一个结论，一切物体都是由能量组成的，所以物质是不同形式的能量。假设质(M)与能(E)是可以互变的，其转换因子是光速(c)的平方；这就是说

$$E = Mc^2 \quad (1.1)$$

我们所关注的物质的建构基块是电子、质子与中子(见表 1-1)。这些都具有双重性质，这个观念往往造成一定困难。在某些情况下，喜欢把物质想像成粒子；在另一些情况下，把物质看成是服从波动力学的能量量子更方便。对于材料工作者来说，通常采用粒子观念就足够了。

表 1-1 物质的基础部件的重要性能

	电 荷		静止质量 (g)	“有效”半径 (cm)	静止质量相当的 能量 (MeV)
	esu	C			
电 子	-4.8×10^{-10}	-1.69×10^{-19}	9.1×10^{-28}	4.6×10^{-13}	0.59
质 子	4.8×10^{-10}	1.69×10^{-19}	1.67×10^{-24}	1.4×10^{-13}	938
中 子	0	0	1.67×10^{-24}	1.4×10^{-13}	938

电子是电能的最小单位。它可以看成是负电荷的一个微粒或能量波。点燃电灯或驱动马达的电能乃是通过导体的电子流。电子电荷为 4.8×10^{-10} esu，如果把自由电子看成粒子，那么它的静止质量是 9.1×10^{-28} g，有效半径为 4.6×10^{-13} cm。在能量术语中，电子是一个 0.51 MeV 的量子。

质子是物质的一个重粒子，是电子重量的 1836 倍，它带有一个单位正电荷，显然，质子上的电荷与电子上的电荷等量但符号相反。如果把自由质子描述成一个粒子，它的静止质量为 1.67×10^{-24} g，有效半径为 1.4×10^{-13} cm。一个自由质子也可看成是一个 938MeV 的能量量子。

中子也是物质的重粒子，是电子质量的 1838 倍，比质子稍重。是电中性的并且有时可视为由一个质子与一个电子组成。因为它不带电荷，因而当采用一个中子作蜕变实验的射弹时很容易穿过原子。然而，电子与质子因带电荷而受到靶核的静电排斥，因而不容易穿过。在正常原子中，中子没有电的或化学的效应，只贡献质量。某些化学元素有含中子个数不同的几种原子。各元素的多种同位素之间在某些方面有微妙差别，而化学性相同。对于所有实际问题，中子与质子的质量和半径可视为相同，或二者是相同能量的能量量子。

1.1.1 原子的概念

原子看成由电子、质子与中子组成的像太阳系一样的体系。事实上原子基本上是真空。例如，在氢中电子到核之间的最可能距离为 0.53×10^{-8} cm，而核的半径只是约 $1.4 \times$

10^{-13} cm。

在原子中心的带正电的核包含了全部质子与中子，为此构成了原子重量的 99.98%，可见核的密度极大。显然存在某种稳定化力或互作用力，使核中各质子结合在一起。因为按静电学理论，具有相同电荷的各质子应互相排斥，这种互作用力的本质还不完全清楚，但对我们来说这并不重要，应该注意到的是核内的中子造成了多种同位素的存在。

被看成粒子的电子被核所吸引，但各电子间互相排斥并靠一种离心力保持着与核的距离。它们可以被想像为在一系列轨道或壳层上绕核转动，好像我们这个星系的轨道。当把电子想像成粒子时，就只能将原子当成极小的星系才合适。然而，将电子看成“电荷的漫散球体”并用几率的术语进行处理则更为合理。这种处理是量子力学或波动力学的方法，它适用于所有粒子的运动。经典力学作为量子力学的简化近似，只能成功地应用于大尺寸事件。

1.1.2 Heisenberg 的测不准原理

波动力学的主要难点在于抛开经典力学的某些传统观念，经典力学认为可以同时测量给定粒子的位置与动量。实际上，这一假定是错误的，严密的分析表明，同时测量位置与动量在原理上是不可能的。不管哪一个量都可以按希望的精度测量，但这样作的实验精细性需要减小另一量的测量精度。这个现象称为 Heisenberg 测不准原理。这说明

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$$

此处 Δp 是动量中的不准度， Δx 是位置的不准度， h 是普朗克常数。当把它用于宏观物理时，这个原理就成为无足轻重的了，但是当应用到核粒子（如电子）时就是极重要的（即使在宏观尺度上也可发现这一原理的某种迹象，如流体流动中的一些测量因测量操作而受到扰乱或显示较小精度）。

1.1.3 电子能态

按波动力学，只能说明在原子的给定区域发现一个电子的几率。这种几率可用一个波函数代表，某点波函数的平方乃是在该点发现一个电子的几率的量度。在本讨论中，组成物质的各种基础件（尤其是电子）将被处理成位于最可能位置的粒子。在此基础上，一个原子中的电子在一系列壳层中组成电子云，这些壳层形成原子的外区，在其它原子中的电子受到这一电子云的排斥，这使得原子极像一个微小球体。

原子中的电子可占据不同能态，每个电子态有一特定电子云构形，并有一个特征性的固定能量。那末在这些主能量群（壳层）中各电子怎样分配？原子中一个电子的态用 4 个量子数 n, l, m_l, m_s 来描述。一般的方法中，量子数 n 是电子能量的量度。它也标明包函该电子的壳层，其它三个量子数，在某种意义上，是指出壳层的再细分。量子数 l 是电子角动量的量度，可以有由 0 到 $(n-1)$ 的任何整数。 $l=0$ 的态并不表明电子不动的态，而是电子运动不发生角动量的态。

量子数 m_l 是角动量在特定方向上的分量的量度。这个量子数可以取从 $+l$ 到 $-l$ 的任何整数，其中含零。第四个量子数 m_s 是因为电子行为在某些方面好像它绕本身的轴自旋而引出的。磁性与此种自旋相关，并且实验中发现两个反向自旋是可能的。这些自旋方向用

m_s 规定，其值为 $+\frac{1}{2}$ 或 $-\frac{1}{2}$ 。

通过规定电子的 4 个量子数，可以给出确定原子中电子态所需的全部信息。在任何给定原子中，每个电子态有一定的特定值能量。整个原子的能量取决于各电子在不同的可能电子态中的排布方式。每种排布都成为原子的一个态。最稳定的态是总能量最小的态，这叫基态，较高能量的态称激发态。

1.1.4 Pauli 不相容原理

可能想像原子的基态就是其中所有电子占据最低量子态，其实不然。按 Pauli 不相容原理，在一个原子中没有 2 个电子可以具有完全相同的 4 个量子数。 l 由 0 到 $(n-1)$ ， m_l 由 $+l$ 到 $-l$ 并且含 0，以及 $m_s = \pm \frac{1}{2}$ 这一事实表明主量子数为 n 的电子个数最多可达 $2n^2$ 。

能态与能级存在区别，能级是占据给定能态（或量子态）的一个电子的能量。能态是能够存在（即使无电子占据）的可能的能量组态。Pauli 原理应用于能态而非能级。

1.1.5 电子组态

电子占据能态的顺序取决于 n 与 l 。它可以因屏蔽作用而变得更为复杂，屏蔽作用就是接近核的电子电荷将核与最外电子部分地遮挡住，因而出现更复杂的情况。表 1-2 是按上述规则构成的，在给定 n 值之后列出了 l ， m_l 与 m_s 的可取值。读者可以按这一处理引伸出更高值 n 的壳层。例如，证明在第 4 壳层中可能的量子态数是 32。

表 1-2 开头三个壳层中量子态的数目

壳层	n	l	m_l	m_s	态数
第一	1	0	0	$+\frac{1}{2}$	2
				$-\frac{1}{2}$	
第二	2	0	0	$+\frac{1}{2}$	8
				$-\frac{1}{2}$	
		1	0	$+\frac{1}{2}$	
				$-\frac{1}{2}$	
1	-1	$+\frac{1}{2}$			
		$-\frac{1}{2}$			

续表 1-2

壳 层	n	l	m_l	m_s	态 数
第 三	3	0	0	$+\frac{1}{2}$	} 2
				$-\frac{1}{2}$	
		1	0	$+\frac{1}{2}$	} 6
				$-\frac{1}{2}$	
				$+\frac{1}{2}$	
				$-\frac{1}{2}$	
		2	0	$+\frac{1}{2}$	} 10
				$-\frac{1}{2}$	
				$+\frac{1}{2}$	
				$-\frac{1}{2}$	
1	-1	$+\frac{1}{2}$	} 6		
		$-\frac{1}{2}$			
		$+\frac{1}{2}$			
		$-\frac{1}{2}$			
0	-2	$+\frac{1}{2}$	} 4		
		$-\frac{1}{2}$			
		$+\frac{1}{2}$			
		$-\frac{1}{2}$			
					18

常用的处理原子结构的表示方法是，首先给出主量子数 n 的值。因而指明了要占的壳层。后面的标记规定 l 的值。 $l=0,1,2,3$ 与 4 的各个态分别被称为 s, p, d, f 与 g 态。所以， $n=2, l=1$ 的态为 $2p$ 态。占据这些态的电子数用一个指数表明。例如， $2p^4$ 表明有 4 个电子居于 $n=2, l=1$ 的各态。

含一个电子的氢原子在给定态中电子的能级仅由 n 值确定。然而，这对于其它原子是不对的，因为原子核对任何一个电子的静电吸引都受到其它电子的更动。因此，在特定量子态中一个电子的能级取决于 n 也决定于 l 的值。一般效应可总括如下：

① n 值愈大，该壳层中所有各态的能量愈高（在这一点上，其行为与单电子原子相似）。

② 在 n 给定后, l 值愈大, 能量愈高。

③ 自由原子中具有相同 n 值与 l 值的所有量子态均有相同能量。

按 Pauli 原理, 因为原子的能态由 4 个量子数所规定, 一给定量子态只能被一个电子所占, 即没有二个电子可以具有完全相同的能态。因此, 在一个含有 Z 个电子 (基态下) 的原子中, Z 个最低能量的量子态各被一个电子所占。当描述电子在量子态中的排布时, 方便的办法是想像一个原子序数逐渐增长的核心, 然后为了与不断增长的核电荷相平衡应该有哪些态被逐次占据。态的占据顺序由能级序所给定。然而, 这一点很快变得复杂化了, 因为一个态的能量同时决定于 n 与 l , 结果是, 当电子逐个进入原子时, 发生占据的顺序是: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, (4s, 3d), 4p, (5s, 4d), 5p, (6s, 5d, 4f), 6p, (7s, 5f, 6d)$ 。括号内的各态当他们是原子的最外态时几乎具有相同的能级, 因此它们被电子占据时发生了不规则性, 如图 1-1 和表 1-3 所示。

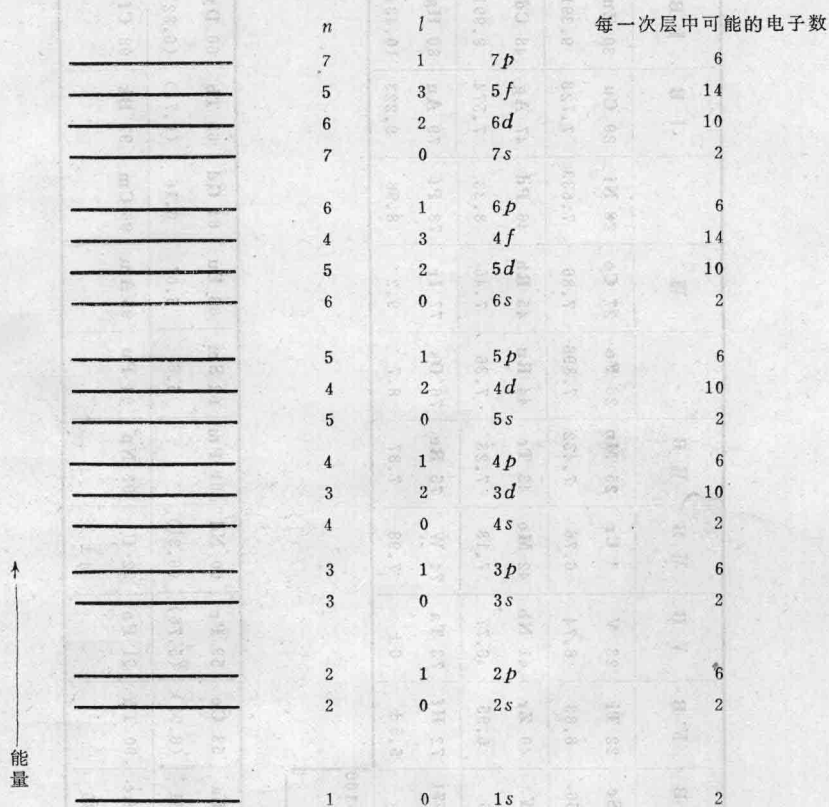


图 1-1 化学元素基态的能量图解, n 与 l 的每一种结合代表轨道电子的可能的能级, 在各能级中按量子数 m_l 与 m_s 划分未表明。

1.1.6 电子轨函数

量子力学把原子中电子看成不很确定的电荷云。从而对于有轨道的粒子模型作了修改, 修改后各电子云与各自的轨函数相关。轨函数规定着电子的最可能占据的空间位置, 轨函数也可以空着。轨函数的形状与尺寸决定于具体的量子数组。

在正常情况下, 用包含电子密度大部分 (或许是 95%) 的界表面描绘轨函数。坐标轴系

的原点取原子核处，全部 s 轨函数具有球状界面，随 n 增大、所包球体增大，正如图 1-2 所示。在这些球中各处电子密度并不恒定。图 1-3 表明了一系列轨函数的、薄球壳中电子密度随离核的距离而变。电子密度的不均匀性显示极大值，正相当于一些半径。在 $1s$ 轨函数的界面之内有一个高电子密度的“模糊的”球壳。在 $2s$ 界面之内，有二个同心的密而模糊的壳层。

各个 p 轨函数都有同样形状，它们的界表面像畸变的哑铃。与球形的 s 轨函数相比， p 轨函数有如图 1-4 所示的方向性，一个电子在哑铃状空间的各个肺叶中的几率是相等的。二个肺叶组成一个 p 轨函数。电子密度不均匀，但如图 1-3 所示，在某个半径处达到极大值。与 s 轨函数不同，各个 p 轨函数有电子密度为 0 的平面(分开两肺叶的节平面)，它在划分原子间键的类型时很重要。

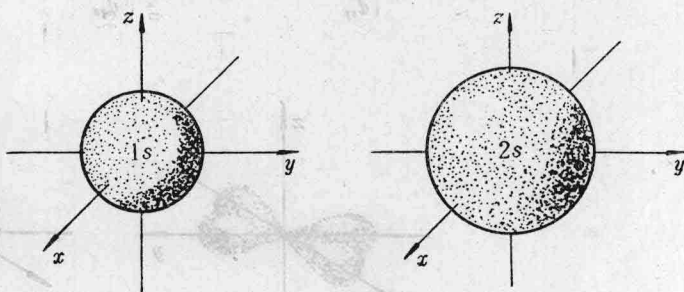


图 1-2 规定 $1s$ 与 $2s$ 轨函数的界面

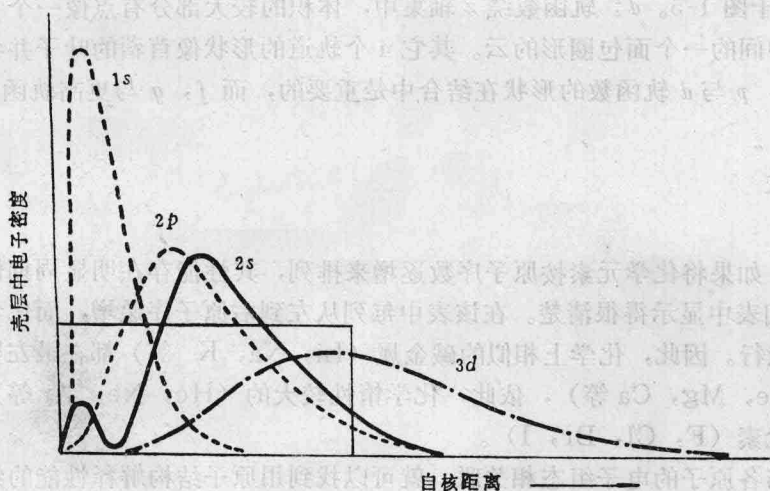


图 1-3 在 $1s, 2s, 2p, 3d$ 轨函数中电子密度分配。直线代表电子云为恒定密度时应有的分布

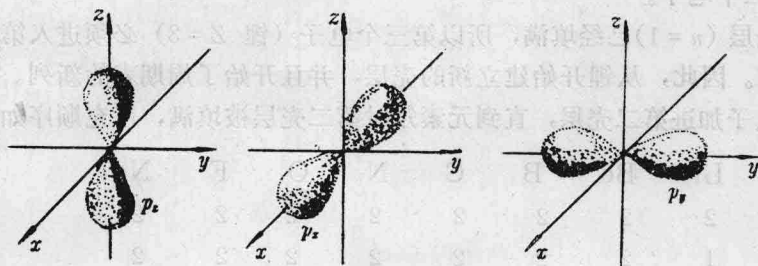


图 1-4 p 轨函数

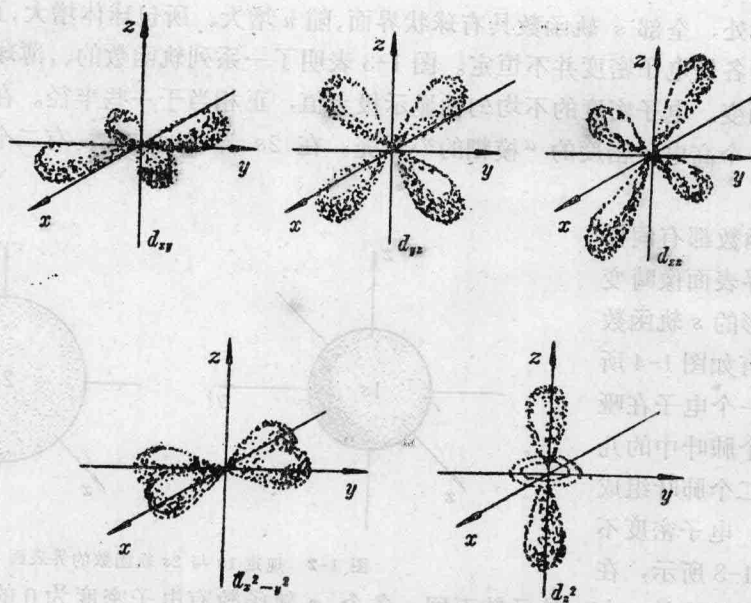


图 1-5 5 个 d 轨函数

d 轨函数示于图 1-5。 d_{z^2} 轨函数绕 z 轴集中，体积的较大部分有点像一个 p 轨道形状，而其余是围住中间的一个面包圈形的云。其它 4 个轨道的形状像苜蓿的叶子并各带 4 个肺叶与两个节面。 s 、 p 与 d 轨函数的形状在结合中是重要的，而 f 、 g 与更高轨函数则否。

1.2 周期表

众所周知，如果将化学元素按原子序数逐增来排列，其性能存在明显周期性。这一点在表 1-3 所示周期表中显示得很清楚。在该表中每列从左到右原子序递增，而化学性相似的每一群放在同一竖行。因此，化学上相似的碱金属 (Li, Na, K 等) 都在最左竖行中，随后是碱土金属 (Be, Mg, Ca 等)，依此，化学惰性较大的 (He, Ne, Ar 等) 在右行，在它之前是卤族元素 (F, Cl, Br, I)。

将周期表与各原子的电子组态相关联，就可以找到用原子结构解释性能的线索。表中第一个元素是氢，它有一个电子。按规律，正常情况下这个电子占据二个 $1s$ 态之一，因为二个 $1s$ 态的能量最低。氢原子 ($Z=1$) 有二个电子，二者都在 $1s$ 态中，只要它们反向自旋， $1s$ 态可以接纳二个电子。

现在第 1 壳层 ($n=1$) 已经填满，所以第三个电子 (锂 $Z=3$) 必须进入第二壳层的最低次层即 $2s$ 能级。因此，从锂开始建立新的壳层，并且开始了周期表的新列。在这一列中的各元素，将其电子加进第二壳层，直到元素氖时第二壳层被填满，填充顺序如下：

	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
1s 电子数	2	2	2	2	2	2	2	2
2s 电子数	1	2	2	2	2	2	2	2
2p 电子数	0	0	1	2	3	4	5	6

当一个新的主层开始形成时，元素在周期表上开始一个新的横列。这些开头的元素即碱金属最外层都含一个电子。例如在氖之后的钠，其第一与第二壳层中共填有 10 个电子，在第三壳层的最低次层中有一个电子。第三壳层的电子结构如下：

	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
3s 电子数	1	2	2	2	2	2	2	2
3p 电子数	0	0	1	2	3	4	5	6

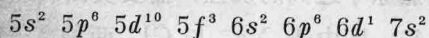
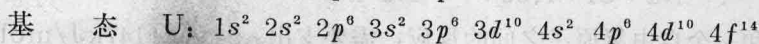
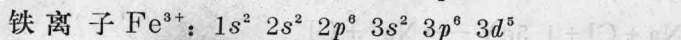
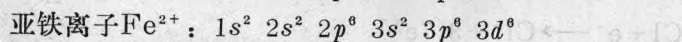
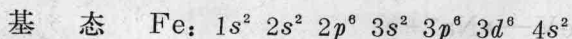
紧靠氩之后的各元素出现了重要效应。为充满第三壳层，需要多出 10 个电子占领 3d 态，然而，对于这些元素，其 4s 能级比 3d 略低，所以在第三壳层填满之前即开始形成第 4 壳层，因而其填充顺序为：

	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
3d 电子数	0	0	1	2	3	5	5	6	7	8	10	10	10	10	10	10	10	10
4s 电子数	1	2	2	2	2	1	2	2	2	2	1	2	2	2	2	2	2	2
4p 电子数	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	3	4	5	6

这一新横列或新周期是从一个碱金属钾与一个碱土金属钙开始的。在随后的各元素中，从钪到锌，各 3d 态逐渐被填。因此，在这个周期中一些元素的最外壳层只有 1~2 个电子。所有这些元素都是金属；其第三壳层由 8 增到 18 电子的那些元素，即由钪到锌，意味着其 3d 次层逐渐被填，即所谓的过渡金属。

在周期表的随后横列中也有同样的现象。5s 在 4d 层之前被占，6s 比 5d 先填；这样就得到了另外的两群过渡金属。在最后的长周期中，由于最后一群过渡金属的 5d 的填充之中，开始了 4f 态的填充，因而情况复杂化，这就引出了稀土元素族。

下边用二个例子具体说明原子的电子结构。铁的原子序数为 26，其电子结构如何？铀的原子序数为 92，其电子结构又如何？解答是：



1.3 电子结构的某些表现

从表 1-3 可知，在周期表中的每竖行的各元素的化学性相似，而其电子结构也有相似点。决定元素化学性的主要因子是其最外层电子数。因此，一般说，外层电子较少的金属元素处于表的左端，而非金属（外层电子相对较多）则在右侧。周期表中间位置的元素则显示金属与非金属性。元素 B, C, Si 可以看成金属或非金属。

当进一步考查化学上相似的和不相同的原子 (Li, Na, K, F, Cl 与 Br) 时，电子结构与化学性能间的关系就更清楚了。很明显，每个碱金属 (Li, Na, K) 等的外层有一个电子。与此相仿，卤族元素 (F, Cl, Br 等) 最外层有 7 个电子。反过来，内壳层的结构并不提供两族之间的差异基础（而且即使化学性相异的原子内层电子结构都相同）。结论是内壳层的结构与化学特性无关。而最外层的电子数极为重要，这些最外层电子叫价电子。