

۵-۲) اثر پوششی لایه‌های الکترونی و قاعده تجربی اسلیتر (۱)

همان‌طور که لایه‌های ابر مانع نفوذ کامل نور خورشید به سطح زمین است، لایه‌های الکترونی نیز از نفوذ اثر جذب هسته بر هریک از الکترونها کاگند. اثر کاهش‌دهنده سایر الکترونها اتم را برابر هسته موئثر بر یک الکترون، اثر پوششی یا اثر حاصل و یا اثر S ، می‌نامند. می‌توان بار مؤثر هسته Z^* (۲) را که بر یک الکترون معین وارد می‌شود، از کسر

shielding effect (screening effect) and Slater's Empirical Rules - ۱

J. C. Slater - فیزیکدان آمریکائی (۱۹۰۰ - ۱۹۷۶)

- Z^* یا Z_{eff} (effective charge)

معماهای ورود و خروج الکترون‌ها در اتم

کردن اثر حاصل برای سایر الکترونها از کل بار هسته (عدد اتمی Z) به دست آورده، مقدار Z^* همیشه از Z کمتر است.

مثال: محاسبه بار موثر هسته بر سطحی ترین الکترون در پتانسیم. این مقادیر برای الکترون $4S$ در پتانسیم عبارت است از: $Z = S = Z^*$

$$\begin{aligned} \text{بنابراین بار موثر هسته } (Z^*) \text{ که روی الکترون } 4S \text{ در پتانسیم اثر می‌گذارد} \\ \text{برابر } 2/2 = 16/8 = 19 \text{ است. به عبارت دیگر، الکترون } 4S \text{ در پتانسیم} \\ \text{وجود } 2/2 \text{ بروتون و نه } 19 \text{ بروتون را احساس می‌کند!} \end{aligned}$$

معمولًا "راه مشخص و کاملاً" مطمئنی برای محاسبه ثابت حاصل وجود ندارد. اسلیتر، مجموعه‌ای از قواعد تجربی و ساده را برای تخمین زدن اثر حاصل (S) پیشنهاد نمود که تا حدود زیادی قابل استفاده است. این قواعد به قرار زیر هستند:

۱- آرایش الکترونی را به ترتیب گروه بندی زیر می‌نویسیم:

$$(1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p) \dots$$

۲- الکترون‌هایی که در هر گروه در سمت راست گروه موردنظر (p یا nS) قرار گرفته‌اند، بر ثابت حاصل اثری ندارند. برای مثال هرگاه مطالعه ما روی یک الکترون در اربیتال $3p$ باشد، کلیه گروههای الکترونی سمت راست آن را (از $4s$ تا $5p$ در آرایش بالا)، نادیده می‌گیریم.

۳- هریک از سایر الکترونها درون یک گروه (s ، p ، d ، f) مانند ($3s$ ، $3p$ ، $3d$ ، $4s$ ، $4p$ ، $4d$ ، $4f$)، الکترون هم گروه موردنظر را به میزان 35% حاصل می‌شود (این مقدار در مورد اربیتال $1s$ برابر $1/5$ منظور می‌شود).

۴- هریک از الکترونها در سطح انرژی ($1-n$)، به میزان $1/85$ واحد حاصل می‌شود.

۵- کلیه الکترونها در سطح انرژی ($2-n$) یا پائین‌تر، به طور کامل

۱- صفحه‌های ۲۷ و ۲۸ کتاب عابدینی (مأخذ شماره ۳)

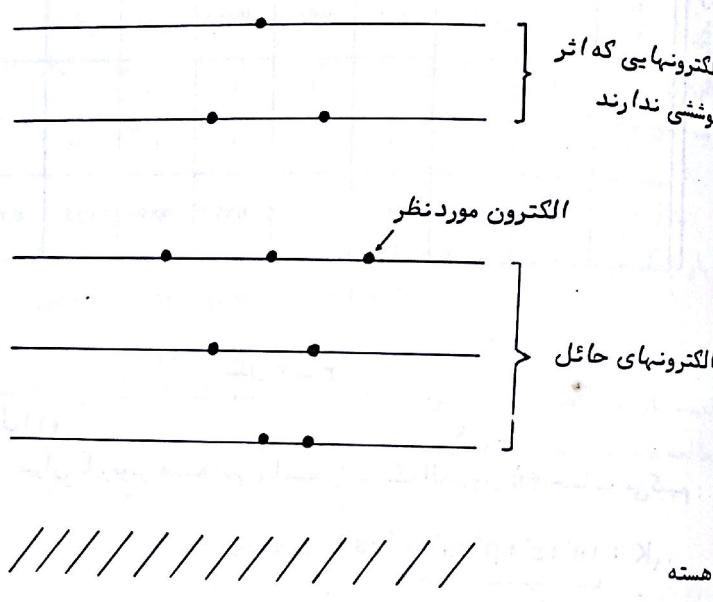
مفهوم و روش‌های لازم برای بررسی معماها

حاصل می‌شود. برای مثال، هرگاه یک الکترون $3s$ را مورد مطالعه قرار دهیم، دو الکترون $1s$ را طوری در نظر می‌گیریم که به اندازه دو واحد از بار هسته می‌کاهند.

۶- وقتی الکترونی که حفاظت می‌شود، در یک اربیتال l یا f قرار دارد، هریک از الکترونها در گروههایی که در سمت چپ آن قرار دارند، به میزان ۱ واحد روی ثابت حاصل اثر می‌کنند.

شکل (۲-۲) و جدول شکل (۲-۳) (۱) به نحوی، قواعدنا مرده فوق را مجموعه می‌کنند.

شکل ۲-۲



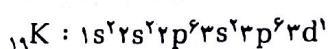
۱- از صفحه ۱۲۲ واتل (مأخذ شماره ۳۷)

$$Z^* = Z - S$$

$$Z^* = 19 - (1 \times 10 + 8 \times 0 / 85) = 19 - 16 / 8 = 2 / 2$$

مثال (۲) هرگاه، در اتم پتاسم، الکترون آخر به جای آنکه در $4s$ وارد شود، در $3d$ وارد می‌شود، مقدار بار موثر هسته بر آن چقدر می‌بود؟

آرایش مفروض پتاسم:

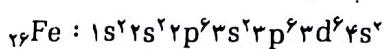


$$Z^* = Z - S$$

$$Z^* = 19 - 18 = 1$$

با مقایسه نتایج این دو مثال به نتیجه مهمی می‌رسیم. وقتی الکترون در اربیتال $4s$ پتاسم وارد شود، بار موثر هسته بیشتری دریافت می‌کند (۲/۲) تا وقتی که در اربیتال $3d$ قرار گیرد (۱). از این رو در حالت اول بیشتر ارضامی شود به طوریکه انرژی پائین‌تر، و سیستم پایدارتر می‌شود.

مثال ۳ - مقدار بار موثر هسته اتم آهن را یک بار برای یک الکترون $4s$ و باز دیگر برای الکترون $3d$ حساب کنید.



۱۰
۱۴

الف - بار موثر هسته بر الکترون $4s$: توجه کنید که یک الکترون $4s$ مورد مطالعه ماست و الکترون دیگر به اندازه $10/35$ واحد، اثر پوششی دارد.

$$Z^* = 26 - (10 \times 1 + 14 \times 0 / 35 \times 1)$$

$$26 - 22 / 25 = 3 / 25$$

ب - بار موثر هسته بر الکترون $3d$: (۱)

$$Z^* = 26 - (18 \times 1 + 5 \times 0 / 35) = 6 / 25$$

۱ - منظور، الکترون $3d$ که در همسایگی ۵ الکترون $3d$ دیگر است.

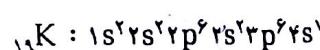
اثر حائل الکترون‌های دیگر روی الکترون مورد نظر

	۱s	۲s 2p	۳s 3p	۳d	۴s 4p	۴d	۴f	۵s 5p
1s	0,31							
2s 2p	0,85	0,35						
3s 3p	1	0,85	0,35					
3d	1	1	1	0,35				
4s 4p	1	1	0,85	0,85	0,35			
4d	1	1	1	1	1	0,35		
4f	1	1	1	1	1	1	0,35	
5s 5p	1	1	1	1	0,85	0,85	0,85	0,35

شکل ۲-۳

مثال (۱)

میزان با رموز هسته اتم پتاسم را برای الکترون $4s$ حساب می‌کنیم:



۱۰
۸

یک نتیجه‌گیری مهم :

از مقایسه دو عدد به یک نتیجه بسیار مهم می‌رسیم . بعد از تشکیل اتم آهن ، محاسبه به روش اسلیتر نشان می‌دهد که الکترون‌های $3d$ در اتم آهن ، بار موثر بیشتری دریافت می‌کنند . بنابراین بیشتر ارضا می‌شوند و ارتباط آنها با هسته محکمتر می‌شود . به همین دلیل ، هنگام یونیزه شدن ، الکtron ابتدا از $4s$ جدا می‌شود و نه $3d$!