

بار مؤثر هسته اتم:

همانطور که می‌دانیم که انرژی الکترون در اتم تابعی از Z^2/n^2 است. چون با افزایش عدد اتمی، بار هسته‌ای (Z) سریعتر از عدد کوانتومی اصلی (n) افزایش می‌یابد، انتظار می‌رود که پتانسیل لازم برای جدا کردن یک الکترون از یک اتم با افزایش عدد اتمی بطور پیوسته افزایش یابد. ولی این پدیده مشاهده نمی‌شود. مثلاً در مورد هیدروژن ($Z=1$)، پتانسیل یونیزاسیون برابر $13/6 eV$ است. در حالی که برای لیتیم ($Z=3$) پتانسیل یونیزاسیون لازم برابر $5/4 eV$ است. این مقدار پتانسیل یونیزاسیون مربوط به الکترونی است که تحت تأثیر بار هسته‌ای $Z < 3$ قرار گرفته باشد، یعنی آن بار هسته‌ای که الکترون واقعاً احساس می‌کند. کم شدن پتانسیل یونیزاسیون که نشانه کم شدن وابستگی الکترون خارجی به هسته و کم شدن تأثیر بار هسته روی این الکترون است، چه دلیلی می‌تواند داشته باشد؟ کم شدن تأثیر بار هسته به خاطر اثر پوششی ایجاد شده توسط دو الکترون داخلی $1s$ است. اثر پوششی این دو الکترون سبب می‌شود که الکترون خارجی $2s$ تمام بار هسته را احساس نکند، بلکه فقط تحت تأثیر بار مؤثر هسته (Z^*) قرار گیرد.

در یک اتم چند الکترونی، بار منفی هر الکترون، مقداری از بار مثبت هسته آن اتم را خنثی کرده و از تأثیر تمامی بار مثبت آن بر الکترونهاى دیگر، به میزان معینی می‌کاهد. عمل جلوگیری کردن الکترونها از تأثیر تمامی بار مثبت هسته بر الکترون مورد نظر در یک اتم (یا یون)، اصطلاحاً اثر پوششی آن الکترونها نامیده می‌شود. کسری از واحد بار مثبت هسته که به وسیله هر الکترون در آن اتم پوشیده می‌شود، به ثابت (یا ضریب) پوششی آن الکترون موسوم است و با علامت S (و یا گاهی با s) نشان داده می‌شود.

مقداری از بار مثبت هسته که پس از تأثیر اثر پوششی الکترونیهای پوشش دهنده، از بار حقیقی هسته اتم (Ze) برای الکترون مورد نظر باقی می‌ماند، بار مؤثر هسته اتم برای آن الکترون نامیده شده و با علامت Z^*e ، نشان داده می‌شود. بار مؤثر هسته بر حسب واحد نسبی بار الکترون ($e=1$) از رابطه زیر

$$Z^* = Z - s \quad \text{قابل محاسبه است:}$$

s ثابت پوششی کل الکترونیهای پوشش دهنده (یعنی تمام الکترونیهای اتم غیر از الکترون مورد نظر) است.

اگر اثر پوششی دو الکترون $1s$ در اتم لیتیم کامل می‌بود، الکترون خارجی می‌بایستی تحت تأثیر بار مؤثر هسته $Z^* = 3 - 2 = 1$ قرار می‌گرفت. اما وجود مقداری از دانسیته الکترونی اوربیتال $2s$ در نزدیکی هسته، مبین این واقعیت است که الکترون موجود در اوربیتال $2s$ در پوسته $1s$ نفوذ می‌کند و در نتیجه تحت تأثیر بار هسته‌ای بیشتر از آنچه در مورد پوشش کامل محاسبه کردیم، قرار می‌گیرد.

قدرت نفوذ ابرهای الکترونی در یکدیگر به نوع اوربیتالها بستگی دارد. اوربیتالهای s به علت وجود یک یا چند ماکزیمم نزدیک هسته نسبت به اوربیتالهای p ، d و f قدرت نفوذ بیشتری دارند و به همین دلیل مقدار قابل توجهی از دانسیته الکترونی مربوط به اوربیتالهای s در نزدیکی هسته متمرکز است. در نتیجه این اوربیتالها کمتر تحت تأثیر پوشش الکترونیهای داخلی قرار می‌گیرند و نسبت به اوربیتالهای p ، d و f اثر پوششی بیشتری روی الکترونیهای خارجی دارند. از طرف دیگر چون اوربیتالهای p ، d ، f قدرت نفوذ کمتری دارند، اثر پوششی آنها برای الکترونیهای خارجی نیز کمتر است. علاوه بر این در مقایسه با قدرت پوششی الکترونیهای داخلی تر، الکترونیهایی که در پوسته یکسانی قرار دارند، اثر پوششی کمتری بر یکدیگر وارد می‌کنند. به عنوان مثال در مورد عنصر بریلیم ($Z=4$) دو الکترون در

اوربیتال $2s$ وجود دارد. چون این الکترونها در اوربیتال یکسانی قرار دارند، اثر پوششی ناچیزی بر یکدیگر وارد می کنند ولی تحت تأثیر اثر پوششی الکترونهای اوربیتال $1s$ هستند. به همین جهت بار مؤثر هسته روی الکترونهای $2s$ در این مورد بیشتر از بار مؤثر هسته بر الکترون $2s$ عنصر لیتیم است (توجه داشته باشید که بار هسته‌ای لیتیم $Z = 3$ و بار هسته‌ای برلییم $(Z = 4)$ است).

بطور کلی اثر پوششی الکترونهای پوسته‌های داخلی سبب می شود که بار مؤثر هسته (Z^*) روی الکترونهای خارجی همیشه بطور قابل توجهی کمتر از بار واقعی هسته (Z) باشد. اما چون این اثر پوششی کامل نیست، با زیاد شدن بار هسته (Z) ، بار مؤثر هسته (Z^*) برای الکترونهای خارجی با سرعت کمتری افزایش می یابد.

