

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 الکترونها پوشش دهنده، از بار حقیقی هسته اتم (Ze) برای الکترون مورد نظر باقی می ماند، بار مؤثر هسته اتم برای آن الکترون نامیده شده و با علامت Z^*e ، نشان داده می شود. 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 الکترونها پوشش دهنده (یعنی تمام الکترونها اتم غیر از الکترون مورد نظر) است.

اگر اثر پوششی دو الکترون $1s$ در اتم لیتیم کامل می بود، الکترون خارجی می بایستی تحت تأثیر بار مؤثر هسته $Z^* = 3 - 2 = 1$ قرار می گرفت. 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 می کند و در نتیجه تحت تأثیر بار هسته ای بیشتر از آنچه در مورد پوشش کامل محاسبه کردیم، قرار می گیرد.

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 الکترونها داخلی قرار می گیرند و نسبت به اوربیتالهای p ، d و f اثر پوششی بیشتری روی الکترونها خارجی دارند. از طرف دیگر چون اوربیتالهای p ، d ، f قدرت نفوذ کمتری دارند، اثر پوششی آنها برای الکترونها خارجی نیز کمتر است. علاوه بر این در مقایسه با قدرت پوششی الکترونها داخلی تر، الکترونها بی که در پوسته یکسانی قرار دارند، اثر پوششی کمتری بر یکدیگر وارد می کنند. 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 الکترونهاي اوربیتال $1s$ هستند. به همین جهت بار مؤثر هسته روی الکترونهاي $2s$ 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 الکترونهاي پوسته‌های داخلی سبب می شود که بار مؤثر هسته (Z^*) روی الکترونهاي 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 الکترونهاي خارجی با سرعت کمتری افزایش می یابد.

