

## نقش قابلیت نفوذ اوربیتالها در پیدایش اثر پوششی:

به علت اهمیتی که اثر پوششی الکترونها در توجیه معماها و پرسشهای مطرح شده دارد، به جاست با استفاده از مثالهای دیگر، موضوع را بیشتر بشکافیم. دو عنصر ئیدروژن ( $1s^1$ ) و لیتیم ( $1s^2 2s^2$ ) را مقایسه می‌کنیم. یونیزه کردن یا جدا نمودن الکترون  $1s$  در ئیدروژن مستلزم مصرف 314 کیلوکالری بر مول انرژی است. در صورتیکه جدا کردن الکترون  $2s^1$  در لیتیم در حدود 124 کیلوکالری بر مول انرژی نیاز دارد. می‌توان دو دلیل زیر را برای پائین بودن انرژی یونیزاسیون لیتیم ارائه داد:

1. فاصله متوسط الکترون  $2s$  بیش از فاصله الکترون  $1s$  است.

2. ابر الکترونی  $2s^1$  در لیتیم توسط ابر الکترونی  $1s^2$  دفع می‌گردد و این موجب می‌شود که الکترون  $2s^1$  در مقایسه با حالتی که الکترون داخلی وجود نمی‌داشت، آسانتر جدا شود.

در اینجا می‌توان گفت که قشر الکترونها داخلی نقش حائل یا پوشش را برای هسته دارند. به همین دلیل الکترون قشر ظرفیتی (الکترون  $2s^1$ )، فقط قسمتی از بار کل هسته را «حس می‌کند» و کاهش انرژی یونیزاسیون، نتیجه‌ای از همین «کاهش احساس» است.

به منظور سادگی شاید بتوان گفت که الکترون  $2s^1$  به علت پوشاندگی قشر زیرین، در قلمرو معمولی خود که بیشترین احتمال حضور را دارد، در حدود یک واحد از بار هسته را حس می‌کند ( $Z^* = 1$ ). از سوی دیگر، این الکترون بخش کوچکی از وقت خود را به علت نفوذ در اوربیتال  $1s$ ,

مستقیماً در نزدیکیهای هسته می‌گذراند که در آنجا بار مؤثر زیاد و در حدود  $Z^* = 3$  می‌باشد.

واقعیت این است که الکترون  $2s^1$  لیتیم وجود  $1/279$  واحد بار هسته را حس می‌کند.

بطور کلی باید گفت که چون قابلیت نفوذ اوربیتالهای  $s$  به علت داشتن یک یا چند ماکزیمم در

نزدیکی هسته، خیلی زیاد است، اثر پوششی یا ثابت حائل آنها نیز نسبتاً بالا است. شاید بتوان اثر

پوششی اوربیتال  $s$  را نیز بدین صورت بیان کرد که هم هسته را از اثر نفوذی الکترونهای ترازهای بالاتر

می‌پوشاند و هم الکترونهای ترازهای بالاتر را از اثر بار هسته می‌پوشاند.

با این ترتیب مفهوم اثر پوششی یا ثابت حائل ( $S$ ) در  $Z^* = Z - S$  روشن تر می‌شود.

اثر پوششی لایه‌های الکترونی وابسته به یک سطح اصلی انرژی به ترتیب زیر تغییر می‌کند.

$$s > p > d > f$$

