

بررسی نقش اثرات متبادل الکترونها روی انرژی اتم هلیم:

اتم هلیم دو پروتون در هسته و دو الکترون در اوربیتال $1s$ دارد. یک الکترون را با شماره (1) و

الکترون دیگر را با شماره (2) مشخص می‌کنیم.¹

الکترون شماره (2) در حضور الکترون شماره (1) نمی‌تواند اثر دو واحد بار مثبت هسته را حس

کند. زیرا تحت تأثیر نقش پوششی الکترون (1) قرار گرفته است. در عین حال، الکترون شماره (2) تحت

تأثیر نیروی دافعه الکترون شماره (1) قرار می‌گیرد. به عبارتی، الکترون (2) از یکسو تحت تأثیر جذب

هسته و از سوی دیگر تحت تأثیر دفع الکترونی شماره (1) واقع می‌شود. در این شرایط، بار مؤثر هسته

که روی الکترون شماره (2) اثر می‌کند، کمتر از دو واحد و بیش از یک واحد است.

$$2 > Z^* > 1$$

از آنجا که توزیع احتمال هر دو الکترون تقارن کروی دارد و در حالت پایه، توزیع احتمال آنها

یکسان می‌باشد، اثر پوششی و بار مؤثر هسته (Z^*) هر دو الکترون یکسان خواهد بود. محاسبه و

تقریب نشان می‌دهد که نخستین انرژی یونیزاسیون هلیم برابر است با:



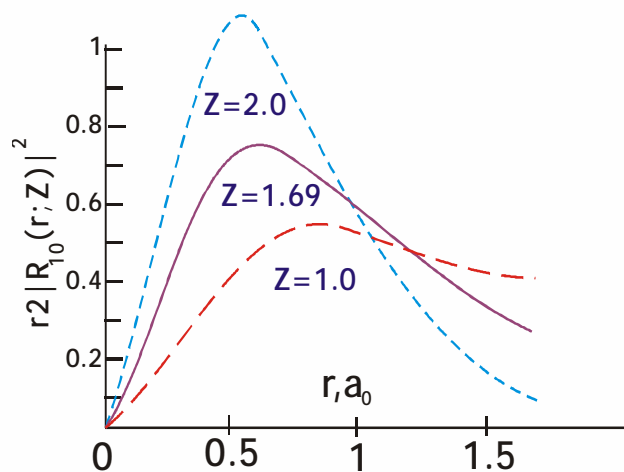
همچنین محاسبه و تقریب نشان می‌دهد که $Z^* = 1/69$. با استفاده از این عدد به انرژی اتم

هلیم و نخستین انرژی یونیزاسیون دسترسی پیدا می‌کنند. زیرا در قلمرو حداکثر (2) و حداقل (1) قرار

می‌گیرد و نشان می‌دهد که اثر پوششی جزئی نسبت به هسته وجود دارد.²

شکل زیر توزیع احتمال شعاعی الکترون $1s$ هلیوم را برای حالت نامبرده فوق که در آن $Z^* = 1/69$

است، همچنین برای دو حالت $Z^* = 1$ و $Z^* = 2$ ، نشان می‌دهد.



می‌توان انرژی کلی اتم هلیوم را حاصل جمع انرژیهای دو الکترون مستقل دانست که البته هر یک

از آنها تحت تأثیر عامل پوششی الکترون دیگری است. در این مورد، باید به مسئله اثرات متقابل این دو

الکترون بر روی یکدیگر توجه کرد زیرا اثر اختلالی در محاسبه کل انرژی اتم دارد.

محاسبات مربوطه نشان می‌دهد که انرژی اتم هلیوم باید برابر 1725 - کیلوکالری باشد. به عبارت

ساده‌تر، هنگام شکل گرفتن آرایش الکترونی اتم هلیوم، این مقدار انرژی باید از سیستم خارج شود و

پایداری زیادی فراهم گردد. حال هرگاه عامل اثرات متقابل الکترونی را به حساب نیاوریم، انرژی تشکیل

اتم هلیوم بر مبنای محاسبه به 2509 - کیلوکالری می‌رسد. اما آنچه که واقعاً از طریق مطالعه طیف اتم و

محاسبات مربوط به نتایج تجربی بدست می‌آید، می‌رساند که انرژی هلیوم عملاً برابر 1822 - کیلوکالری

می‌باشد بنابراین، مقدار خطا یا تفاوت بین دو حالت واقعی و محاسبه شده 97 کیلوکالری است.

هرگاه انرژی یونیزاسیون را تفاوت انرژی اتم و یون آن بدانیم، خواهیم داشت:

$$E_1 = E_{He^{1+}} - E_{He}$$

↙
↘
↘

نخستین انرژی یونیزاسیون انرژی کلی یون He^{1+} انرژی کلی اتم He

$$E_1 = -1254 - (-1725) = 470kcal$$

در صورتیکه مقدار تجربی که در جدولها ارائه می شود برابر 567 کیلوکالری است³

¹ واقعیت آن است که نمی توان وجه تمایزی برای دو الکترون در نظر گرفت

(*electron indistinguishability*). برای تشخیص کبوترها در هر زمان و موقعیتی، می توان حلقه‌ای یا برجسی به

پای آنها بست! انجام این کار در مورد الکترونها ناممکن است! به همین دلیل، در تنظیم تابع موجی، وزن و بهای یکسان برای

این دو الکترون قائل می شوند.

² حال که یک الکترون در He^+ وجود دارد، دیگر از مزاحمت و اثر پوششی خبری نیست و به عبارت دیگر

$$Z^* = Z = 2 \text{ می باشد.}$$

³ E_2 و E_1 هلیوم را عملاً و به طریق تجربی از برخورد فوتونهایی با فرکانس کافی، یا الکترونهایی با انرژی سینتیک

کافی با اتمها اندازه گیری می کنند. این برخوردها باعث جدا شدن نخستین و سپس دومین الکترون اتم هلیوم می شوند.

