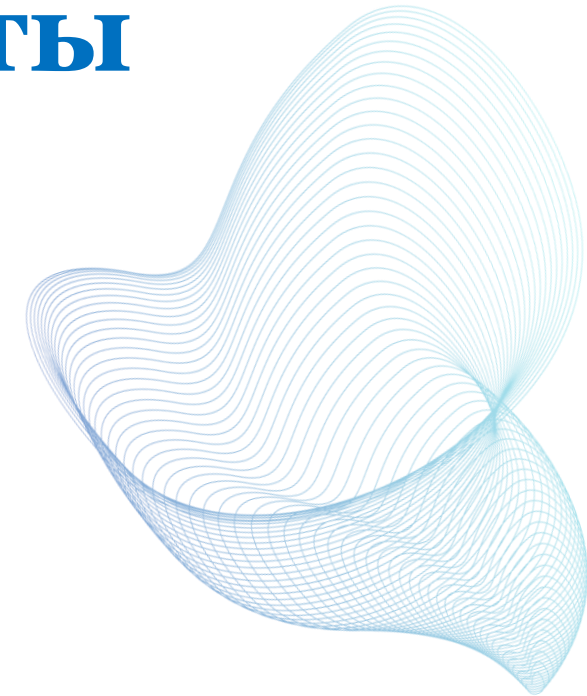


КазНУ им аль-Фараби
Кафедра общей и неорганической химии

Понятие эффективного заряда, расчет эффективного ядерного заряда, эффекты проникновения и экранирования

2 лекция



PhD Кеңес Қ.М.

Эффект экранирование

Эффект экранирования, иногда называемое защитой атомов или защитой электронов, описывает притяжение между электроном и ядром в любом атоме с более чем один электрон. Эффект экранирования можно определить как уменьшение эффективного заряда ядра на электронном облаке из-за разницы в силах притяжения электронов в атоме. Это частный случай экранирования электрического поля. Этот эффект также имеет некоторое значение во многих проектах в области материаловедения. Эффектом экранирования и взаимного отталкивания электронов одной орбитали объясняется также внутреннепериодический характер изменения по периоду атомных радиусов

Эффект экранирования ядра обусловлен электронами внутренних слоёв, которые, заслоняя ядро, ослабляют притяжение к нему внешнего электрона. Так, при переходе от бериллия ${}_4\text{Be}$ к бору ${}_5\text{B}$, несмотря на увеличение заряда ядра, энергия ионизации атомов уменьшается:

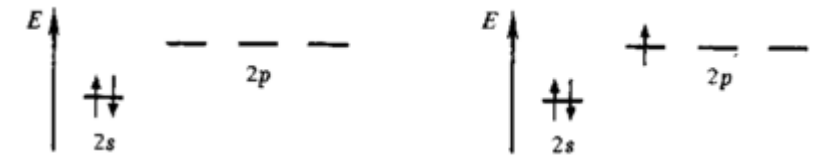
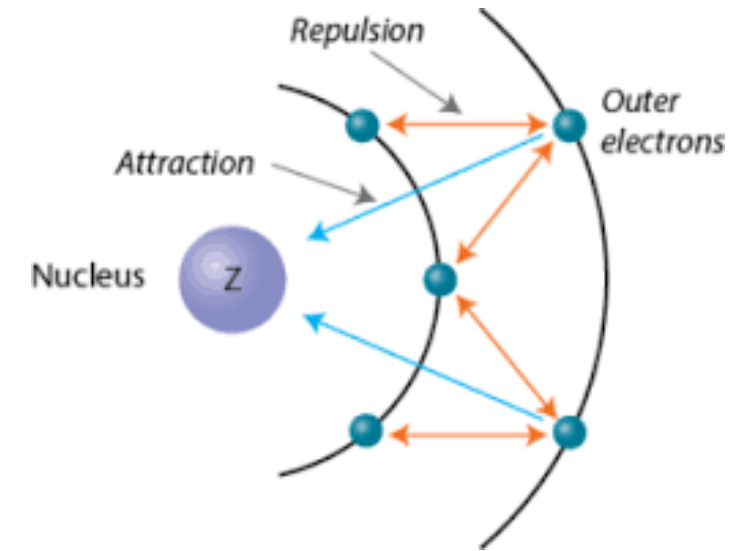


Схема строения последних уровней бериллия, 9,32 эВ (слева) и бора, 8,29 эВ (справа)

Эффект проникновения

Проникновение описывает близость, на которую электрон может приблизиться к ядру. В многоэлектронной системе проникновение электрона определяется относительной электронной плотностью электрона (плотностью вероятности) вблизи ядра атома.

Электроны на разных орбиталях имеют разные волновые функции и, следовательно, разные радиальные распределения и вероятности (определяемые квантовыми числами n и ml вокруг ядра). Другими словами, проникновение зависит от оболочки (n) и подоболочки (ml). Например, мы видим, что поскольку электрон $2s$ имеет большую электронную плотность вблизи ядра, чем электрон $2p$, он проникает в ядро атома больше, чем электрон $2p$.

Проникающая способность электрона в многоэлектронном атоме зависит от значений как оболочки, так и подоболочки. В пределах одного и того же значения оболочки (n) проникающая способность электрона следует этой тенденции в подоболочках **$(ml):s > p > d > f$** . И для разных значений оболочки (n) и подоболочки (l) проникающая способность электрона следует этой тенденции: **$1s > 2s > 2p > 3s > 3p > 4s > 3d > 4p > 5s > 4d > 5p > 6s > 4f \dots$**

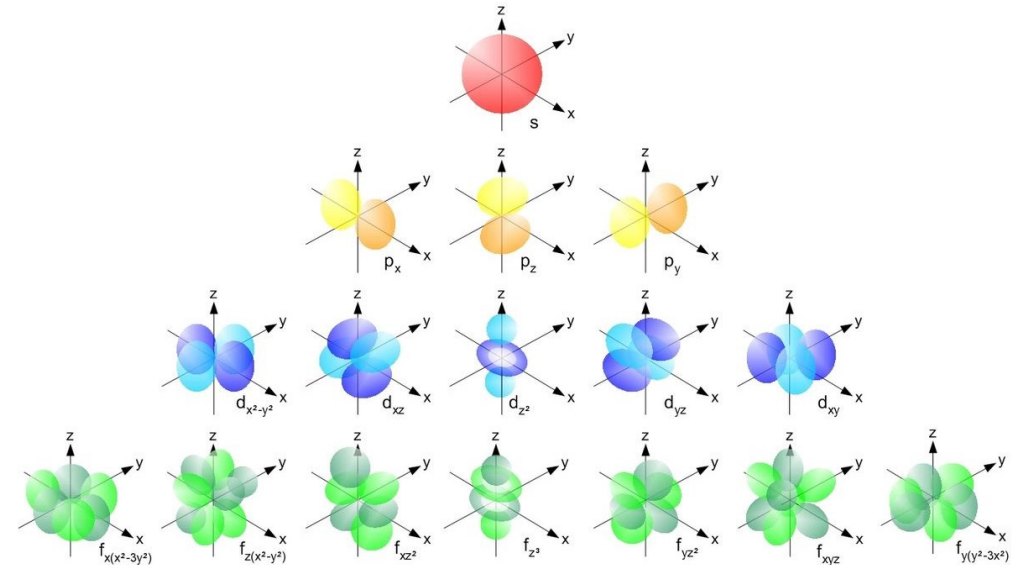
Орбитальное приближение

Концепция орбитального приближения:

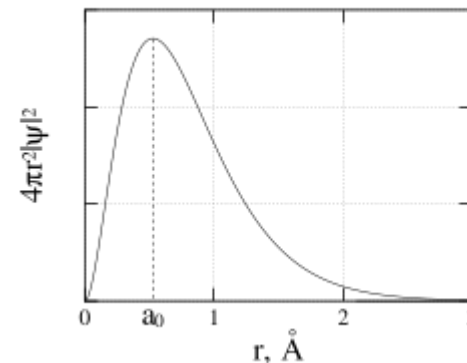
Электроны описываются волновыми функциями (орбиталями) вместо точных траекторий. Орбитали определяются квантовыми числами, которые описывают состояние электрона в атоме.

Квантовые числа:

- Главное квантовое число (n): Определяет энергию и размер орбитали.
- Орбитальное квантовое число (l): Определяет форму орбитали (s, p, d, f).
- Магнитное квантовое число (m_l): Определяет ориентацию орбитали в пространстве.
- Спиновое квантовое число (m_s): Определяет направление спина электрона ($\pm\frac{1}{2}$).



Вещественные комбинации угловых функций.

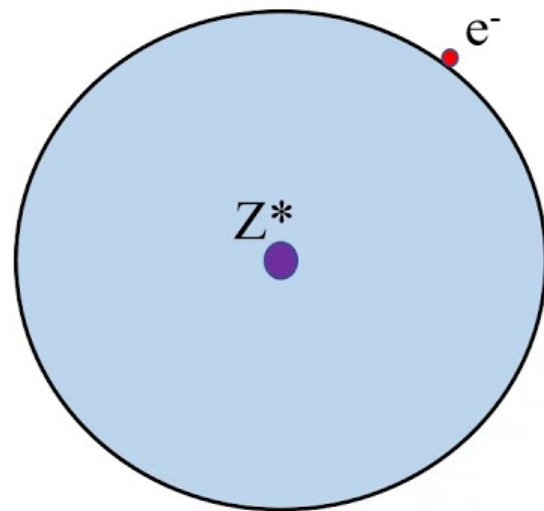


Атомная орбиталь — та же, что на рисунке выше, в виде волновой функции (точнее, построена не ψ , а $4\pi r^2 |\psi(r)|^2$). В этом простом случае зависимости от углов θ и φ нет.

Эффективный заряд ядра (Z^*): Определение и значение

Эффективный заряд ядра (Z^*) — это притяжение, которое испытывает электрон к ядру с учетом экранирования другими электронами.

Влияние экранирования: Внутренние электроны "экранируют" внешний электрон, уменьшая его притяжение к ядру. Это приводит к тому, что внешний электрон испытывает меньшее притяжение — фактически, заряд ядра "уменьшается".



одноэлектронное приближение

$$Z^* = Z - \sigma$$

число
протонов

↑

Z^* ← эффективный заряд ядра → постоянная экранирования

Атом	H	Li	Al	Ge	Br
Z	1	3	13	32	35
σ	0	2.70	11.01	29.18	31.55
Z^*	1 ◦	1.30	1.99	2.82	3.45

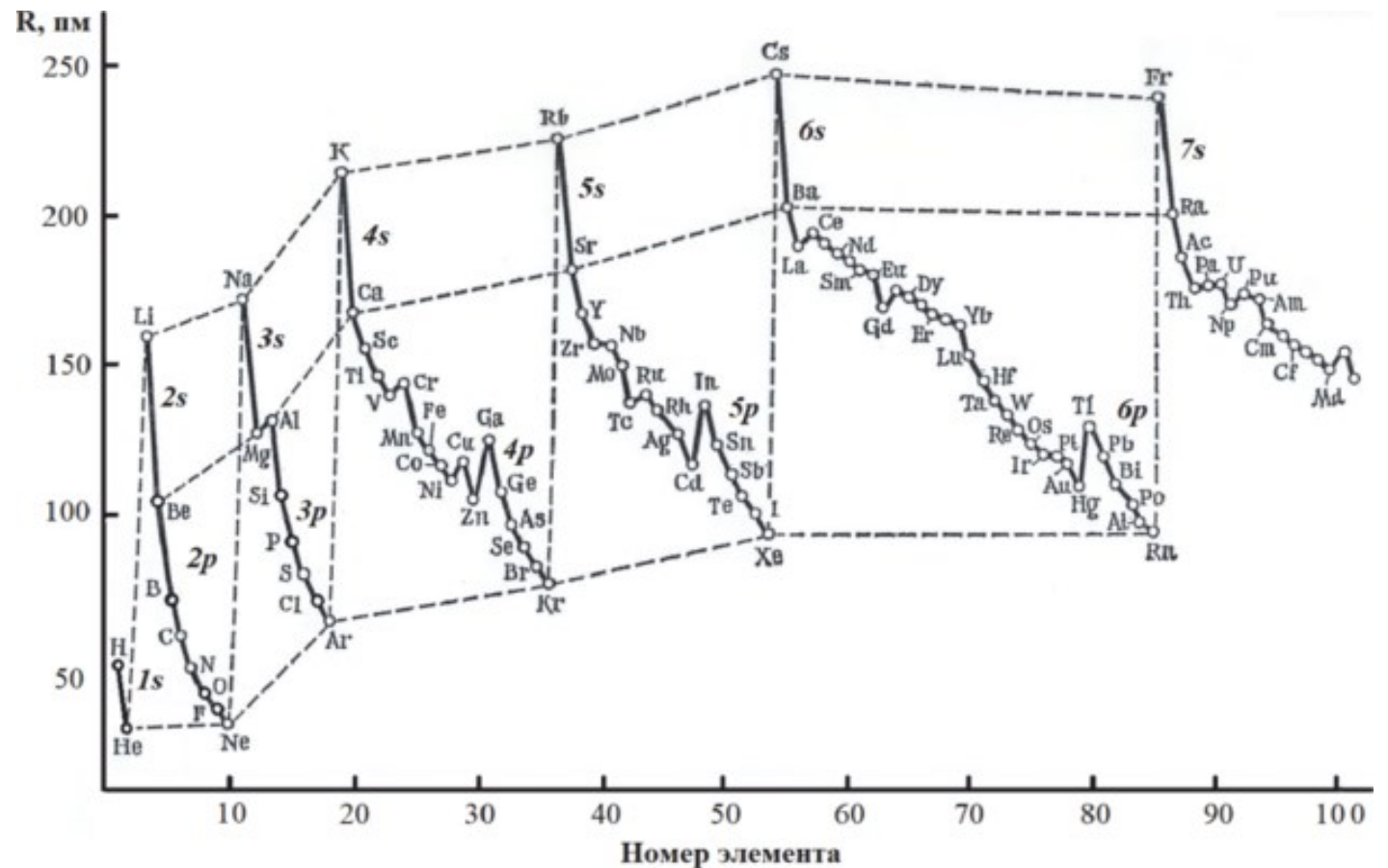
Зависимость эффективного заряда от положения электрона

Эффект на внутренние и внешние электроны:

Внутренние электроны меньше экранируются и испытывают более высокое притяжение.

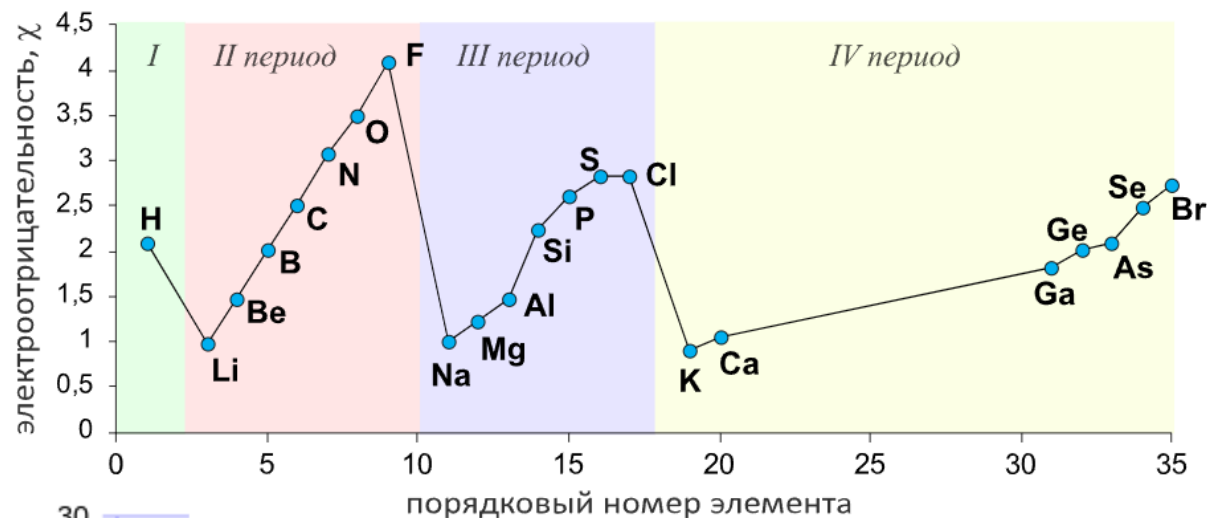
Внешние электроны экранируются сильнее, что снижает их эффективный заряд. Зависимость от группы и периода в периодической системе:

В периодах: с увеличением номера атома растет Z^* , что сужает оболочку и усиливает связь с ядром. В группах: с увеличением числа оболочек Z^* уменьшается из-за большего экранирования.

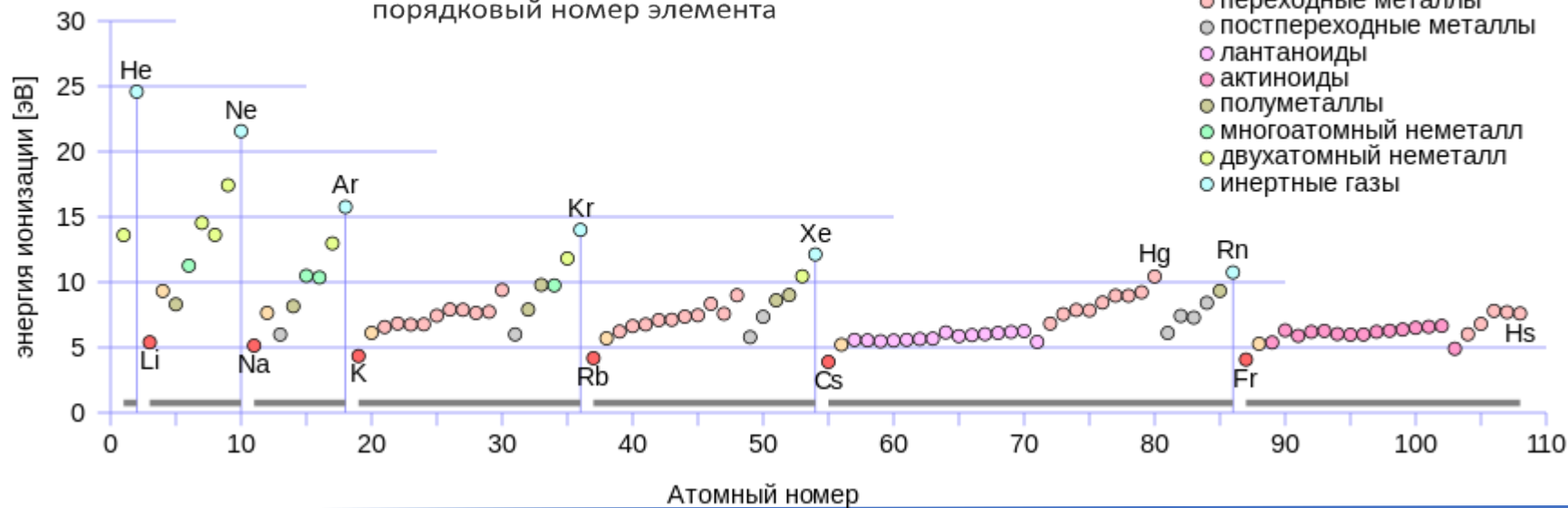


Изменение значений орбитальных радиусов по периодам и группам ПСХЭ

Влияние эффективного заряда на свойства элементов



- щелочные металлы
- щёлочноземельные металлы
- переходные металлы
- постпереходные металлы
- лантаноиды
- актиноиды
- полуметаллы
- многоатомный неметалл
- двухатомный неметалл
- инертные газы



Расчет эффективного заряда ядра

1. Запишите электронную конфигурацию элемента как показано ниже.

(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) (5d)...

2. Расположите электроны согласно правилу Клечковского.

Любые электроны, расположенные справа от интересующего вас электрона, не оказывают влияния на константу экранирования.

3. Константа экранирования для каждой группы рассчитывается как сумма следующих составляющих:

Все остальные электроны, находящиеся в одной группе с интересующим нас электроном, экранируют 0,35 единиц заряда ядра. Исключение составляет 1s-группа, где один электрон считается только за 0,30.

В случае группы, относящейся к [s, p] типу, берут 0,85 единиц на каждый электрон (n-1) оболочки и 1,00 единицу на каждый электрон (n-2) и следующих оболочек.

В случае группы, относящейся к [d] или [f] типу, берут 1,00 единицу на каждый электрон, находящийся слева от этой орбитали.

Заключение

Электронная конфигурация отражает расположение электронов по энергетическим уровням. **Орбитальное приближение** помогает описать вероятное положение электронов.

Эффективный заряд влияет на **атомный радиус, энергию ионизации и электроотрицательность**.

Роль Z^* : Как Z^* влияет на химические свойства элементов, в том числе на способность атомов образовывать связи.

Элемент	Эффективный заряд (Z^*)	Атомный радиус (пм)	Энергия ионизации (кДж/моль)	Электроотрицательность (по Полингу)
Литий (Li)	1.3	152	520	0.98
Бериллий (Be)	1.9	112	899	1.57
Бор (B)	2.6	87	801	2.04
Углерод (C)	3.3	77	1086	2.55
Азот (N)	3.8	70	1402	3.04
Кислород (O)	4.5	66	1314	3.44
Фтор (F)	5.1	64	1681	3.98
Неон (Ne)	5.7	62	2081	—