

آیا می‌دانید که...؟

نگاهی به دو مفهوم متفاوت و مستقل:

بار مؤثر هسته - نیروی مؤثر هسته

اشکان کریمی							
1	2	3	4	5	6	7	
^1H 1.0							^2He 1.34
^3Li 1.26	^4Be 1.58	^5B 1.56	^6C 1.82	^7N 2.07	^8O 2.00	^9F 2.26	^{10}Ne 2.52
^{11}Na 1.64	^{12}Mg 2.25	^{13}Al	^{14}Si	^{15}P	^{16}S	^{17}Cl	^{18}Ar

نیاز به معرفی این دو مفهوم و شرح چگونگی تغییر آن‌ها در جدول تناوبی احساس می‌شود.

بار مؤثر هسته

در یک اتم، بار منفی هر الکترون، مقداری از بار مثبت هسته آن اتم را خنثی می‌کند و از اثر بار مثبت، بر الکترون‌های دیگر به مقدار معینی می‌کاهد. این اثر را اثر پوششی یا اثر حایل می‌نامند. کسری از هر واحد بار مثبت هسته که توسط الکترون‌های حایل شونده پوشیده می‌شود، ثابت پوششی آن الکترون نام دارد و آن را با علامت σ یا S نمایش می‌دهند. آنچه که پس از در نظر گرفتن اثر پوششی، از بار حقیقی هسته یعنی Z باقی می‌ماند، بار مؤثر هسته (Z^*) یا Z_{eff} خوانده می‌شود: $Z^* = Z - \sigma$

در تعیین بار مؤثر هسته از دو روش تجربی که بر نتایج آزمایش‌ها استوارند استفاده می‌شود که عبارتند از: روش اسلیتر^۱ و روش کلمانتی - ریموندی^۲.

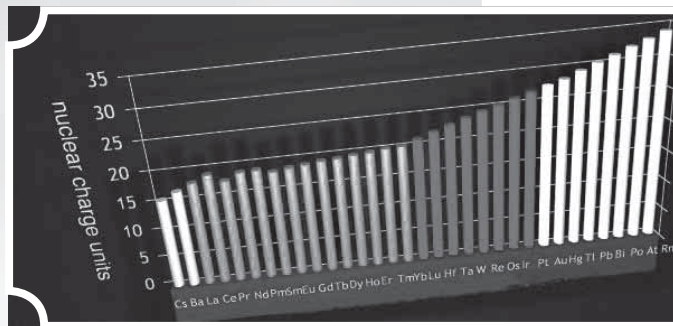
۱) روش اسلیتر

در این روش اثر حایل برای الکترون‌های یک اتم به این ترتیب در نظر گرفته می‌شود:
 - برای الکترون‌هایی که در تراز بالاتر از الکترون مورد نظر قرار گرفته‌اند، $\sigma = 0$;

- نیروی مؤثر هسته چیست؟
- آیا تفاوتی میان نیروی مؤثر و بار مؤثر هسته وجود دارد؟
- روند تغییر این دو مفهوم در جدول تناوبی چگونه است؟
- این تغییر از کجا ناشی می‌شود؟

این‌ها پرسش‌هایی چالش برانگیز در یک نشست بود که پاسخ‌هایی متناقض در پی داشت. در کمال شگفتی، حتی برخی از حاضران از وجود مفهومی با عنوان نیروی مؤثر هسته ابراز بی‌اطلاعی می‌کردند. با این بهانه و از آن‌جا که این دو مفهوم نقش اساسی در تعیین خواص بنیادی هر اتم، از جمله الکترونخواهی، الکترون‌گاتیوی، انرژی یونش و شعاع اتمی دارد

برخلاف انتظار بسیاری از افراد، بار مؤثر هسته در هر گروه از بالا به پایین، افزایش می‌یابد



شکل ۱ نمایش تغییرات نسبی بار مؤثر هسته براساس روش کلمانتی

درسی شیمی (۲) آمده و کاملاً قابل درک است. هنگامی که تعداد الکترون‌های داخلی ثابت می‌ماند و تنها الکترون‌های ظرفیتی - که ثابت پوششی اندکی دارند - افزایش می‌یابند، با افزایش تعداد پروتون‌ها بار مؤثر هسته نیز زیاد می‌شود. در واقع، ثابت پوششی الکترون‌های ظرفیتی کم است و توان مقابله با افزایش بار اتمی را ندارد.

اما در کتاب درسی به چگونگی تغییر بار مؤثر هسته در گروه‌های جدول اشاره‌ای نشده است. برخلاف انتظار بسیاری از افراد، بار مؤثر هسته در هر گروه از بالا به پایین، افزایش می‌یابد. اکنون دلیل این واقعیت را در یک نمونه بررسی می‌کنیم:

هنگامی که از تناوب ۳ به تناوب ۴ می‌رویم،

- برای الکترون‌های هم‌تراز با الکترون موردنظر، $\sigma = 0/3$ ؛

- برای الکترون‌های یک‌تراز پایین‌تر از آن الکترون، $\sigma = 0/85$ و

- برای الکترون‌هایی که در ترازهای درونی‌تر قرار دارند، $\sigma = 1$ است.

ثابت پوششی کل الکترون‌های حایل شونده از حاصل جمع ثابت‌های پوششی همه آن‌ها به دست می‌آید.

یادآوری می‌شود که اگر الکترون موردنظر، در اوربیتال‌های d یا f قرار داشته باشد برای هر یک از الکترون‌های یک‌تراز پایین‌تر از آن‌ها باید σ را برابر ۱ در نظر گرفت.

برای نمونه، در محاسبه بار مؤثر هسته اتم برم، برای یکی از الکترون‌های ظرفیتی، چنین عمل می‌کنیم:

$${}_{35}\text{Br}: 1s^2 / 2s^2 2p^6 / 3s^2 3p^6 / 3d^{10} / 4s^2 4p^5$$

$$\sigma = 1 \times 1 + 18 \times 0/85 + (7-1) \times 0/35 = 27/4$$

$$Z^* = Z - \sigma = 35 - 27/4 = 7/6$$

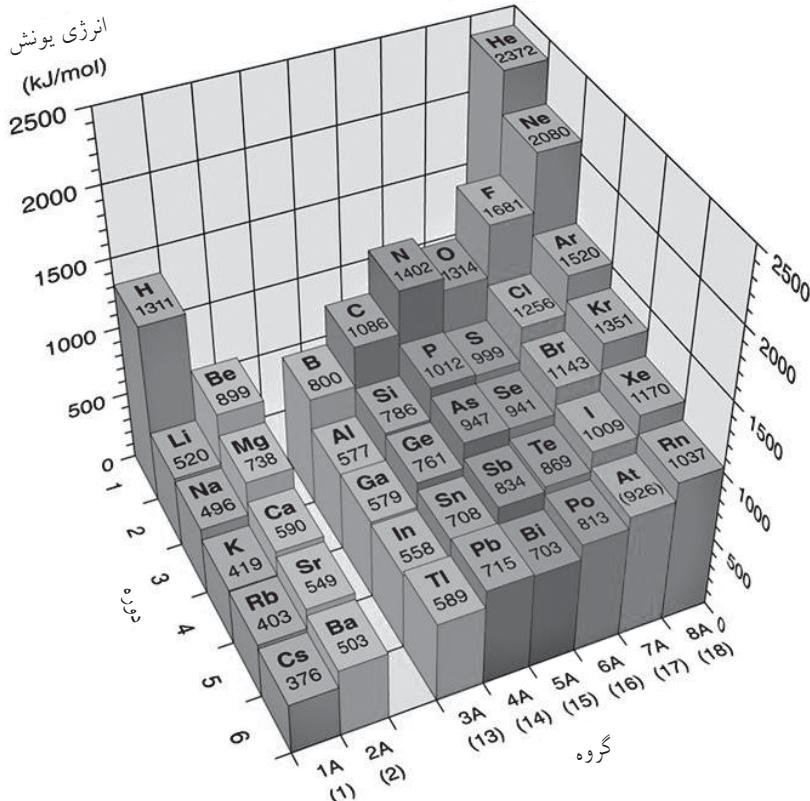
ب) روش کلماتی - ریموندی

این روش از روش اسلیتر دقیق‌تر و تا حدی شبیه به آن است با این دو تفاوت؛ نخست این‌که عدد کوانتومی فرعی نیز در محاسبات در نظر گرفته می‌شود و دیگر آن‌که، الکترون‌های ترازهای بالاتر از تراز الکترون موردنظر نیز از ثابت پوششی اندکی برخوردارند زیرا به هر حال مقداری از بار مثبت هسته صرف نگهداری آن‌ها در اتم می‌شود.

الکترون‌های پیوندی در مولکول‌ها هم بر یک‌دیگر اثر پوششی دارند یعنی برای هر اتم در یک مولکول نیز می‌توان بار مؤثر هسته در نظر گرفت و آن را بار مؤثر هسته در مولکول، Z_{mol}^* ، نامید.

روند تغییر بار مؤثر هسته در جدول تناوبی

در هر دوره از چپ به راست، بار مؤثر هسته افزایش می‌یابد. این مطلب در کتاب



شکل ۲ نمایش تغییرات انرژی یونش در دوره‌ها و گروه‌های جدول تناوبی (روند تغییرات انرژی یونش تقریباً مشابه تغییر بار مؤثر هسته است)

شکل ۳ مقدار بار مؤثر هسته
برای ۱۲ عنصر نخست جدول تناوبی

	1							8
	¹ H 1.0							² He 1.34
1s								
	2	3	4	5	6	7		
2s, 2p	³ Li 1.26	⁴ Be 1.58	⁵ B 1.56	⁶ C 1.82	⁷ N 2.07	⁸ O 2.00	⁹ F 2.26	¹⁰ Ne 2.52
3s, 3p	¹¹ Na 1.64	¹² Mg 2.25	¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar

نباید انتظار روند مشابهی را در تغییر نیروی مؤثر هسته و تغییرات بار مؤثر هسته داشته باشیم زیرا نیرو، تنها به بار بستگی ندارد

الکتریکی $F = K \cdot q_1 \cdot q_2 / r^2$ ، درمی یابیم که نباید انتظار روند مشابهی را در تغییر نیروی مؤثر هسته و تغییرات بار مؤثر هسته داشته باشیم زیرا نیرو، تنها به بار بستگی ندارد.

بار کمیته مستقل است در حالی که نیرو به فاصله نیز بستگی دارد. در توضیح روند تغییر نیروی مؤثر هسته در یک دوره، کافی است به رابطه کولن توجه کنیم. شعاع اتم در نتیجه افزایش بار مؤثر هسته در هر دوره از چپ به راست، کاهش می یابد. پس صورت این کسر بزرگتر می شود و از سوی دیگر، مقدار مخرج آن در حال کاهش است. پس نیروی مؤثر هسته از چپ به راست دوره، افزایش می یابد. بنابراین روند تغییر در بار و نیروی مؤثر هسته، در یک دوره مشابه است.

اما در گروه، مسئله اندکی پیچیده تر است. در این حال، از بالا به پایین، شعاع اتم ها بزرگتر می شود و بنا به مطالب بند قبل، بار مؤثر هسته نیز افزایش می یابد یعنی هم صورت و هم مخرج کسر در رابطه کولن زیادتر می شوند. اما چنان که اشاره شد شیب افزایش بار مؤثر هسته در یک گروه ملایم است. پس رشد مخرج کسر سریع تر بوده، نیروی مؤثر هسته در یک گروه از بالا به پایین کاهش می یابد. از این رو، از مقدار انرژی یونش در این مسیر کاسته می شود.

قدردانی

از راهنمایی ها و زحمات بی دریغ آقایان، دکتر جعفر عطار و مجید بزاززاده، در تهیه و تنظیم مطالبی که از نظر گذشت سپاس گذاری می شود.

۸ الکترون به الکترون های داخلی افزوده می شود که ثابت پوششی 0.85 دارند. در همین حال، افزایش ۸ پروتون داریم که هریک دارای بار خالص ۱ هستند. از آن جا که افزایش اثر پوششی از افزایش بار خالص هسته کم تر است پس مقدار $(Z - \sigma)$ نیز افزایش می یابد. اما این افزایش بار چندان زیاد نیست زیرا الکترون های درونی تر، از ثابت پوششی ۱ برخوردارند و تنها الکترون های یک تراز مانده به آخر هستند که باعث افزایش بار مؤثر هسته می شوند. در نتیجه، افزایش بار مؤثر در یک گروه، شیب ملایمی دارد.

اما اگر بار مؤثر هسته از بالا به پایین گروه افزایش می یابد پس چرا الکترون های ظرفیتی سست تر شده، انرژی یونش آن ها کم تر می شود؟ پاسخ به این پرسش نیازمند معرفی مفهومی دیگر است که در بسیاری از منابع به آن اشاره ای نشده است و آن، نیروی مؤثر هسته است.

نیروی مؤثر هسته

وجود نیروی جاذبه الکتریکی میان الکترون و پروتون ها در یک اتم سبب جذب الکترون ها به سمت هسته می شود. بخشی از این نیرو صرف انجام کار روی الکترون های حایل شونده می شود. اگر نیروی الکتریکی هسته را F_z^* در نظر بگیریم، هنگامی که این نیرو بر الکترون مورد نظر وارد می شود روی الکترون های حایل شونده کار F_w را انجام می دهد و این کار تبدیل به انرژی می شود که از انرژی الکتریکی کل اتم می کاهد و باقی مانده آن بر الکترون مورد نظر وارد می شود. پس داریم:

$$F_z^* = F_z - F_w$$

اکنون با توجه به قانون کولن و رابطه نیروی

1. Slater
2. Clementi & Raimondi

1. dl.clackamas.cc.or.us/ch104-06/effective_nuclear_charge.htm
2. www.eduturca.com/mcat-exam/periodic-trends-effective-nuclear-charge-z-or-zeff.html
3. www.wou.edu/las/physci/ch412/Periodic%20trends/periodic_trends.htm
4. lofi.forum.physorg.com/Effective-Nuclear-Charge_6599.html
5. hrsbstoff.ednet.ns.ca/benoitn/chem11/units/review/periodic_table/trends_p_table.htm
6. cph-theory.persianguig.com