

Apantallamiento y carga nuclear efectiva

Carga del núcleo: $+Z \cdot e^-$

Repulsión global de los $Z - 1$ electrones restantes.

Un electrón percibe una carga nuclear inferior a la real, le atrae una carga nuclear efectiva Z_{ef} .

$Z_{ef} = Z - \sigma$, siendo σ = constante de apantallamiento.

Cálculo de la Z_{ef} . Reglas de Slater (1930)

1. Se escribe la configuración electrónica completa y se agrupan los orbitales ns y np. (1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d) (4f) (5s,5p) (5d) (5f) (6s,6p) (6d) ...
2. Todos los electrones de orbitales con **n** mayor al considerado, -los situados a la derecha- no contribuyen al apantallamiento.
3. Para los electrones **s** o **p** :
 - a) Los electrones en **el mismo grupo (ns, np) apantallan 0,35** unidades de carga nuclear y **0,30 para el orbital 1s**.
 - b) Los electrones en los niveles **n-1** apantallan **0,85** unidades
 - c) Los electrones en los niveles **n-2** o inferiores apantallan completamente (**1,0** unidades).
4. Para los electrones **d** o **f**:
 - a) Todos los electrones situados a la derecha del grupo (**nd, nf**), no contribuyen al apantallamiento.
 - b) Los electrones en el mismo (**nd, nf**) apantallan **0,35** unidades de carga.
 - c) Los electrones situados en los grupos **a la izquierda** pantallan completamente (**1,0** unidades).
5. Para obtener la carga nuclear efectiva experimentada por un electrón dado:
Restamos a la carga nuclear verdadera Z, la suma de las constantes de apantallamiento obtenidas al aplicar las reglas de Slater.

Ejemplos:

En el Nitrógeno: $Z=7$, cada electrón de valencia tendría:

$$\begin{array}{l} \uparrow N \Rightarrow (1s^2) (2s^2 2p^3); \quad \sigma = 2 \cdot 0,85 + 4 \cdot 0,35 = 3,1 \\ \quad \quad \quad \downarrow \quad \quad \quad \downarrow \\ \quad \quad \quad 2 \cdot 0,85 \quad 4 \cdot 0,35 \end{array}$$

$$\mathbf{Z_{ef} = Z - \sigma} \Rightarrow Z_{ef} = 7 - 3,1 = 3,9$$

En el Zinc: Z = 30,

$${}_{30}\text{Zn} \Rightarrow (1s)^2 (2s, 2p)^8 (3s, 3p)^8 (3d)^{10} (4s, 4p)^2$$
$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ (n-2) & & (n-1) & & (n) \end{array}$$
$$\sigma = 10 \cdot 1 + 18 \cdot 0,85 + 1 \cdot 0,35 = 25,65$$

Zef. = Z - σ = 30 - 25,65 = 4,35

Para un electrón 3d: $[(1s)^2 (2s, 2p)^8 (3s, 3p)^8]^{18} [(3d)^{10}]^9$

$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow \\ \sigma = 18 \cdot 1 + 9 \cdot 0,35 = 21,15 \end{array}$$

Zef. = Z - σ = 30 - 21,15 = 8,85

En el Plomo: Z = 82,

$${}_{82}\text{Pb} \Rightarrow [\dots (4d)^{10} (4f)^{14}]^{60} [(5s, 5p)^8 (5d)^{10}]^{18} [(6s, 6p)^4]^4$$
$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \sigma = 60 \cdot 0,35 + 18 \cdot 0,85 + 3 \cdot 0,35 = 76,35 \end{array}$$

Zef. = Z - σ \Rightarrow Zef. = 82 - 76,35 = 5,65

En el Potasio: Z=19,

$${}_{19}\text{K} \Rightarrow [(1s)^2]^2 [(2s, 2p)^8]^8 [(3s, 3p)^8]^8 (3d)^0 (4s)^1$$
$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ \sigma = 2 \cdot 1 + 8 \cdot 1 + 8 \cdot 1 = 18 \end{array}$$

El apantallamiento desde 3d sería:

Zef. = Z - σ \Rightarrow Zef. = 19 - 18 = 1

El apantallamiento desde 4s sería:

$$\sigma = 2 \cdot 1 + 8 \cdot 1 + 8 \cdot 0,85 = 16,8$$

Zef. = Z - σ \Rightarrow Zef. = 19 - 16,8 = 2,2 \Rightarrow

El electrón está más fuertemente atraído en un orbital 4s que en el 3d.