

CARGA NUCLEAR EFETIVA



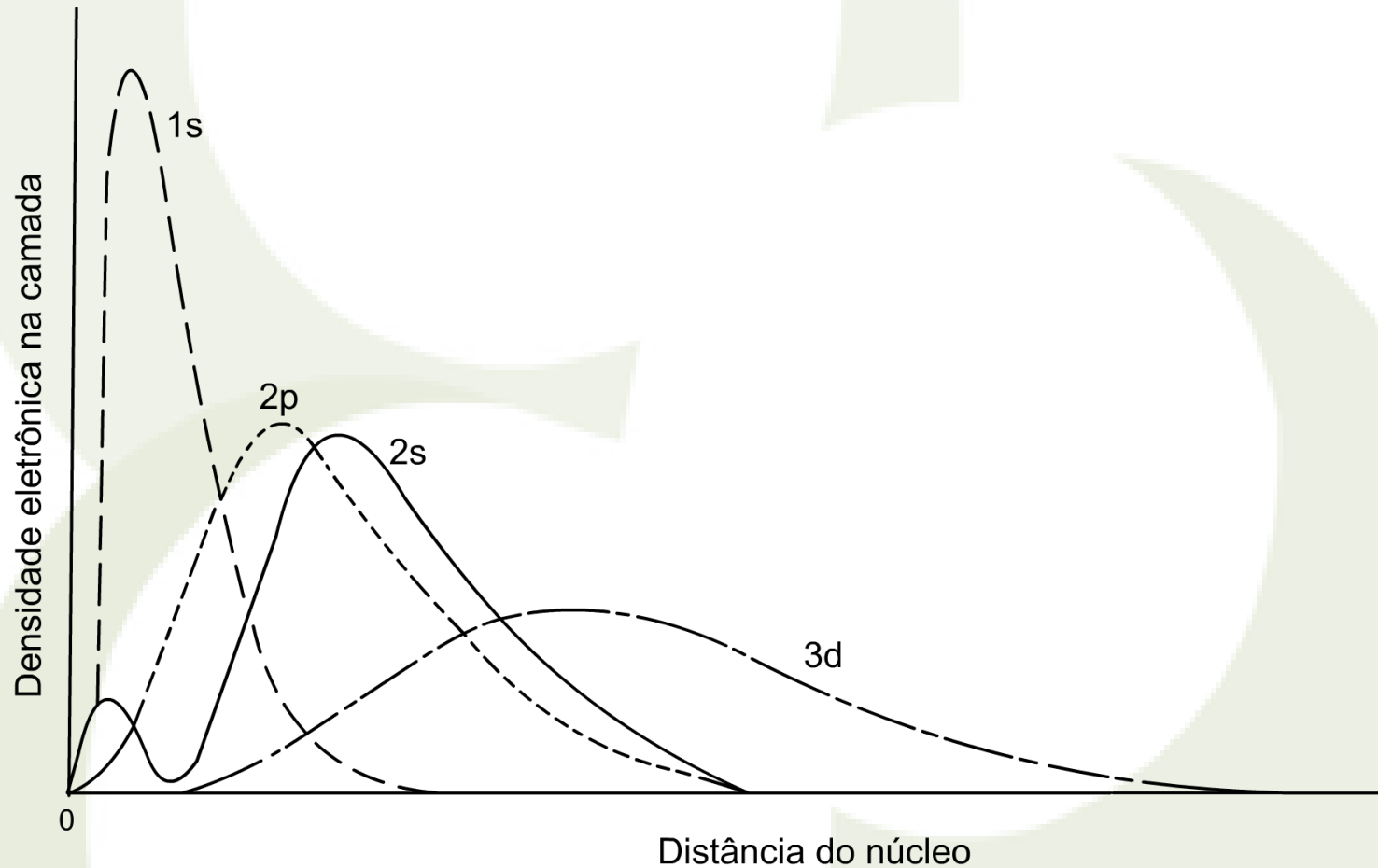
CARGA NUCLEAR EFETIVA

- A carga nuclear de um átomo é dada pelo número de prótons presentes no núcleo deste átomo e é chamada número atômico (Z).

$Z = \text{carga nuclear} = \text{número de prótons}$

- A carga nuclear efetiva é a carga sofrida por um elétron em um átomo polieletrônico.
- A carga nuclear efetiva não é igual à carga no núcleo devido ao efeito dos elétrons internos.

EFEITO DE PENETRAÇÃO



Poder de penetração: $s > p > d > f$

EFEITO DE PENETRAÇÃO E BLINDAGEM

- Cada elétron de um átomo é protegido (blindado) do efeito de atração da carga nuclear pelos elétrons do mesmo nível de energia e, principalmente, **pelos elétrons dos níveis mais internos.**
- Apenas uma parte da carga nuclear atua realmente sobre os elétrons: ***é a Carga Nuclear Efetiva (Z_{ef}).***

CARGA NUCLEAR EFETIVA

- A carga nuclear efetiva que atua sobre um elétron é dada por:

$$Z_{ef} = Z - S$$

Z_{ef} = carga nuclear efetiva

Z = carga nuclear (número atômico)

S = constante de blindagem

- Quando aumenta o número médio de elétrons protetores (S), a carga nuclear efetiva (Z_{ef}) diminui.
- Quando aumenta a distância do núcleo, S aumenta e Z_{ef} diminui.

REGRAS DE SLATER

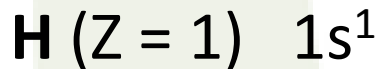
- Para determinar Z_{ef} , os elétrons são divididos em grupos (a cada um corresponde uma constante de blindagem diferente).

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

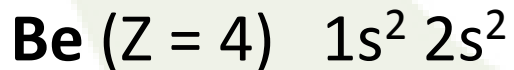
REGRAS DE SLATER

- Para qualquer elétron de um dado grupo, a constante de blindagem S é a soma das seguintes parcelas:
 - **zero** para qualquer grupo exterior ao elétron considerado.
 - **0,35** para cada um dos outros elétrons do mesmo grupo que o elétron considerado, exceto no grupo $1s$, no qual usa-se o valor $0,30$.
 - Se o elétron considerado pertencer a um grupo (ns, np) , cada elétron do nível $(n - 1)$ contribui com **0,85** e cada elétron dos níveis mais internos contribui com **1,00**.
 - se o elétron considerado pertencer a um grupo (nd) ou (nf) , cada elétron dos grupos mais internos contribui com **1,00**.

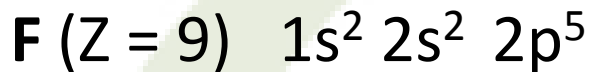
ALGUNS EXEMPLOS DE CÁLCULO DA CARGA NUCLEAR EFETIVA



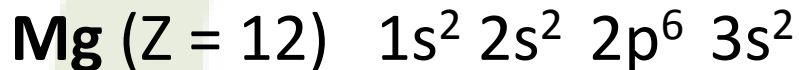
$$Z_{\text{ef}}(1s) = 1 - 0 = 1$$



$$Z_{\text{ef}}(2s) = 4 - [(1 \times 0,35) + (2 \times 0,85)] = 1,95$$



$$Z_{\text{ef}}(2p) = 9 - [(6 \times 0,35) + (2 \times 0,85)] = 5,20$$



$$Z_{\text{ef}}(2p) = 12 - [(1 \times 0,35) + (8 \times 0,85) + (2 \times 1,00)] = 2,85$$

ALGUNS EXEMPLOS DE CÁLCULO DA CARGA NUCLEAR EFETIVA

Ni ($Z = 28$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$

$$Z_{\text{ef}}(4s) = 28 - [(1 \times 0,35) + (16 \times 0,85) + (10 \times 1,00)] = 4,05$$

$$Z_{\text{ef}}(3d) = 28 - [(7 \times 0,35) + (18 \times 1,00)] = 7,55$$

$$Z_{\text{ef}}(1s) = 28 - [(1 \times 0,30)] = 27,70$$

VARIAÇÃO DA CARGA NUCLEAR EFETIVA QUE ATUA SOBRE O ELÉTRON MAIS EXTERNO

- Para elementos do mesmo grupo da tabela periódica:

Elemento	Li	Na	K	Rb	Cs
Z_{ef}	1,30	2,20	2,20	2,20	2,20

- A carga nuclear efetiva que atua sobre o elétron mais externo dos elementos do mesmo grupo da tabela periódica é aproximadamente a mesma, como pode ser vista na Tabela.
- A justificativa é que Z aumenta e S também aumenta de cima para baixo no grupo e, como os aumentos são aproximadamente iguais, o valor de Z_{ef} é aproximadamente o mesmo.

VARIAÇÃO DA CARGA NUCLEAR EFETIVA QUE ATUA SOBRE O ELÉTRON MAIS EXTERNO

- Para elementos do mesmo período da tabela periódica:

Elemento	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Z_{ef}	1,30	1,95	2,60	3,25	3,90	4,55	5,20	5,85

- A carga nuclear efetiva que atua sobre o elétron mais externo dos elementos do mesmo período da tabela periódica aumenta com o número atômico (da esquerda para a direita), como pode ser visto na Tabela.
- A justificativa é que Z aumenta mais do que S da esquerda para a direita no período, fazendo com que Z_{ef} aumente da esquerda para a direita no período.

CARGA NUCLEAR EFETIVA, Z_{ef}

Z	H								He
	1								2
1s	1,00								1,69
Z	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
	3	4	5	6	7	8	9	10	
1s	2,69	3,68	4,68	5,67	6,66	7,66	8,65	9,64	
2s	1,28	1,91	2,58	3,22	3,85	4,49	5,13	5,76	
2p			2,42	3,14	3,83	4,45	5,10	5,76	
Z	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
	11	12	13	14	15	16	17	18	
1s	10,63	11,61	12,59	13,57	14,56	15,54	16,52	17,51	
2s	6,57	7,39	8,21	9,02	9,82	10,63	11,43	12,23	
2p	6,80	7,83	8,96	9,94	10,96	11,98	12,99	14,01	
3s	2,51	3,31	4,12	4,90	5,64	6,37	7,07	7,76	
3p			4,07	4,29	4,89	5,48	6,12	6,76	

Carga nuclear efetiva Z_{ef}