



6.3.2 屏蔽效应和钻穿效应

天津大学

邱海霞

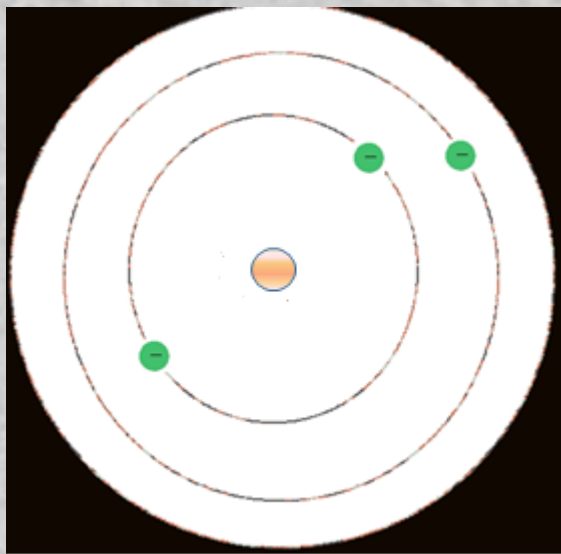


屏蔽效应 (screening effect)

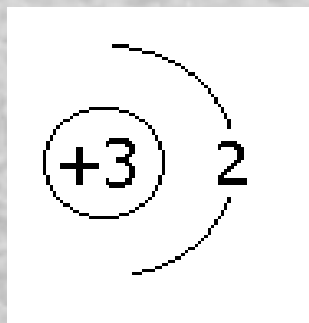
屏蔽效应

使电子的能量上升

核电荷对某个电子的吸引力因其它电子对该电子的排斥而被削弱的作用。



Li 原子



被中和掉部分
正电的原子核

z^* : 有效核电荷

$$z^* = z - \sigma \quad \sigma : \text{屏蔽常数}$$



屏蔽常数的确定

斯莱特规则

将原子中的电子分成若干轨道组：

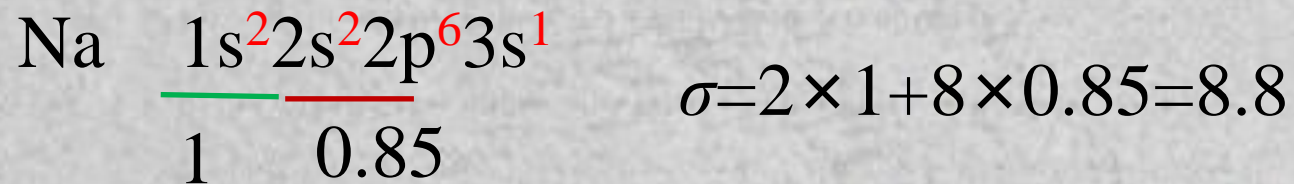
(1s) ; (2s 2p); (3s 3p); (3d); (4s 4p); (4d);(4f)....

- ◆ 外层电子对内层电子 $\sigma=0$
- ◆ 同层电子之间 $\sigma=0.35$ (第一层 $\sigma=0.30$)
- ◆ 被屏蔽电子在 ns, np 上时, $(n-1)$ 层的电子 $\sigma=0.85$, $(n-2)$ 层及以内电子 $\sigma=1$
- ◆ 被屏蔽电子在 nd, nf 上时, 位于其左边的各组电子对它的 $\sigma=1$



屏蔽常数的计算

例： 分别计算作用在Na原子第三层和第一层上某个电子的 z^*



作用在3s电子上的 z^*

$$z^* = z - \sigma = 11 - 8.8 = 2.2$$

作用在1s电子上的 z^*

$$z^* = z - \sigma = 11 - 1 \times 0.3 = 10.7$$

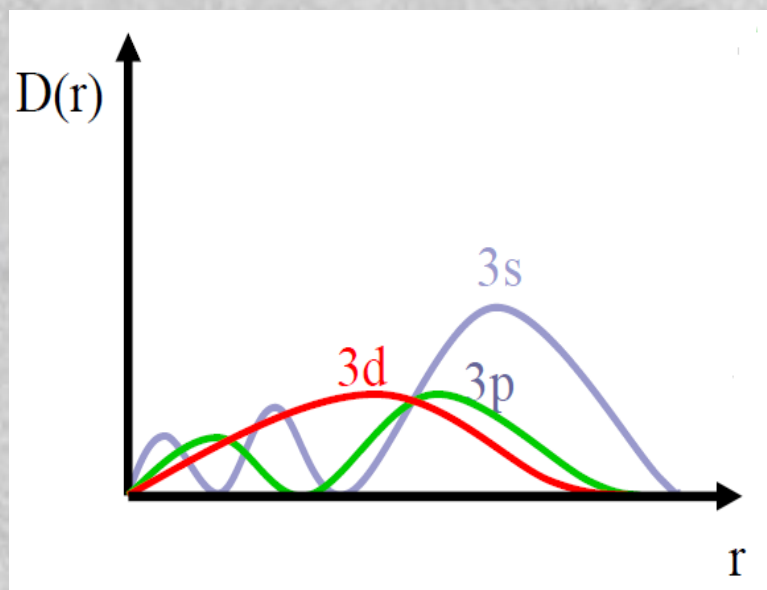


钻穿效应 (penetrating effect)

钻穿效应

使轨道能量降低

外层电子穿过内层电子云，避开其他电子屏蔽，受到核较强的吸引作用的现象。



钻穿能力:

$$3s > 3p > 3d$$

钻穿能力: $ns > np > nd > nf$

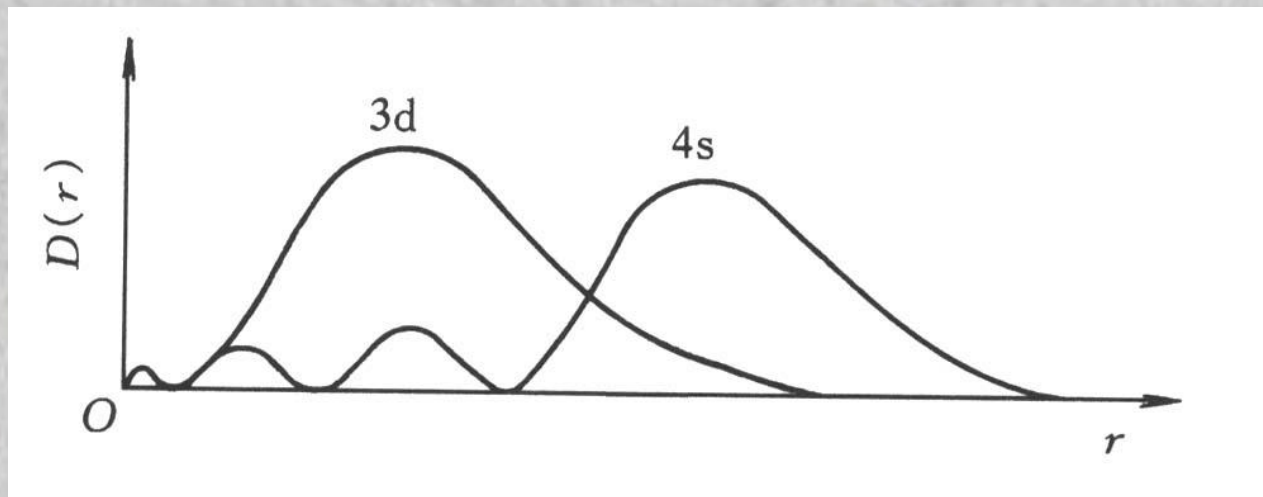
能级分裂: $E(ns) < E(np) < E(nd) < E(nf)$



钻穿效应 (penetrating effect)

n 和 l 不同时，会发生能级交错现象

$$E_{4s} < E_{3d}$$



3d 与 4s轨道的径向分布图

钻穿效应导致能级交错

f 轨道的钻穿效应更小， $E_{6s} > E_{4f}$