

⊗ Retour

Calcul du Z effectif avec les coefficients de Slater.

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

Pourquoi ? : Un électron donné est normalement soumis au champ électrique du noyau de charge $Z+$. En fait, cela n'est vrai que si cet électron est seul (Cas hydrogénéide), sinon les autres électrons vont perturber (écranter - faire écran) le champ électrique vu par l'électron. Les coefficients de Slater permettent d'obtenir le Z effectif (charge Z_{eff} du noyau vue par l'électron considéré).

Les règles suivantes s'appliquent :

Les électrons sont regroupés de la manière suivante :

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

Contribution à l'effet d'écran

- sur un électron du type (ns np) par un électron situé :
 - ◇ à droite du groupe (ns np) 0 (nulle)
 - ◇ dans le groupe 0.35
 - ◇ dans le groupe (n-1) 0.85
 - ◇ dans le groupe (n-2) 1.0
- sur un électron situé en (nd) ou (nf)
 - ◇ à droite du groupe (nd ou nf) 0 (nulle)
 - ◇ dans le groupe 0.35
 - ◇ dans le groupe (n-1) 1.0
 - ◇ dans le groupe (n-2) 1.0

Exemple : Cas d'un électron 3p du Phosphore ($Z=15$) Cet électron est écranteré par :

2 électrons 3p et 2 électrons 3s	4×0.35	1.4
8 électrons du groupe (2s 2p)	8×0.85	6.8
2 électrons du groupe (1s)	2×1	2.0

Valeur de S 10.2

$$Z_{\text{effectif}} = 15 - 10.2 = 4.8$$

La charge du noyau de phosphore "vue" par cet électron est 4.8