

Slaterovy orbitaly

Orbitaly vodíkového typu

Azimutální část: stejná jako u H

Radiální část:

$$R(r) = N r^{n-1} \exp(-Z^* r/n)$$

n = hlavní kvantové číslo

Z^* = efektivní náboj jádra

$$E_i = -N (Z^*_i/n_i) \quad N = 1313 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Stínění a Slaterova pravidla

Vnější elektrony jsou odstíněny od kladného náboje jádra vnitřními (korovými) elektrony

Efektivní náboj jádra –

$$Z^* = Z - \sum \sigma_i$$

- (1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d) (5s,5p) ...
- elektrony napravo od uvažovaného elektronu: $\sigma_i = 0$
- elektrony ve stejné skupině: $\sigma_i = 0.35$
- uvažovaný elektron *s* nebo *p* \Rightarrow elektrony *n*-1: $\sigma_i = 0.85$
elektrony $< n-1$: $\sigma_i = 1$
- uvažovaný elektron *d* nebo *f* \Rightarrow elektrony $\leq n-1$: $\sigma_i = 1$

Stínění a Slaterova pravidla

efektivní hl. kvantové číslo:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^{*2}}{8\pi\epsilon_0 n^{*2} \hbar^2} = -\frac{e^2 Z^{*2}}{2a_0 n^{*2}}$$

$$n^* = n \Leftrightarrow n \leq 3$$

n	4	5	6
n*	3.7	4.0	4.2

Př. : Sc $Z = 21$

- $Z^*_{1s} = 21 - 0.35 = 20.65$ $E = -5799 \text{ eV}$
- $Z^*_{2sp} = 21 - (7 \times 0.35 + 2 \times 0.85) = 16.85$ $E = -965 \text{ eV}$
- $Z^*_{3sp} = 21 - (7 \times 0.35 + 8 \times 0.85 + 2.0) = 9.75$ $E = -144 \text{ eV}$
- $Z^*_{3d} = 21 - 18.00 = 3.00$ $E = -13.6 \text{ eV}$
- $Z^*_{4s} = 21 - (0.35 + 9 \times 0.85 + 10.0) = 3.0$ $E = -7.6 \text{ eV}$

Orbitální poloměr ρ_{orb}

- ρ_{orb} je definován jako vzdálenost od jádra, v níž s největší pravděpodobností nalezneme elektron obsazující příslušný Slaterovský orbital
- Lze ukázat, že platí: $\rho_{orb}(\text{a.u.}) = \frac{n^2}{Z_{orb}^*}$
- Příklad: Vypočtete Z^* a orbitální poloměry (v a.u., tj. Bohrových poloměrech i v jednotkách SI, tj. v metrech) pro jednotlivé obsazené AO síry.
- [Výsledky Z_{orb}^* pro orbitaly 1s, 2s+2p, 3s+3p: 15.70, 11.85, 10.55
 ρ_{orb} pro orbitaly 1s, 2s+2p, 3s+3p: 3.4 pm, 17.9 pm, 87.4 pm]