



Carga Nuclear Efetiva e sua Conseqüência para a Compreensão da Estrutura Eletrônica dos Átomos

Hélio Anderson Duarte

Os conceitos de fator de blindagem e carga nuclear efetiva são geralmente evocados para explicar a estrutura eletrônica dos átomos e as propriedades periódicas em cursos introdutórios de Química nas universidades. As regras de Slater e, mais recentemente, a idéia de percentagem de blindagem, têm sido usadas de forma semi-quantitativa para estimar o fator de blindagem e relacioná-lo com as propriedades periódicas. Dados experimentais como sucessivos potenciais de ionização e os dados de espectroscopia fotoeletrônica de raios X (XPS) permitem avanços no entendimento do fator de blindagem. Neste artigo mostra-se que esses dados correlacionam-se muito bem com Z^2 , como previsto pelo modelo atômico de Bohr. No entanto, os dados demonstram que elétrons de camadas mais externas são capazes de blindarem os elétrons mais internos em relação ao núcleo, em desacordo com a 2ª regra de Slater. Ressalta-se assim o caráter probabilístico da Química Quântica e a interpenetração das funções de onda. Usando-se o modelo de Bohr, é possível estimar a carga nuclear efetiva a partir de dados experimentais. As conseqüências de uma abordagem com ênfase no conceito de átomo e de sua estrutura eletrônica para a compreensão de novas técnicas e tecnologias são brevemente discutidas.

► carga nuclear efetiva, fator de blindagem, estrutura eletrônica ◀

22

Recebido em 28/11/02; aceito em 27/3/03

No curso introdutório sobre estrutura eletrônica dos átomos e propriedades periódicas, geralmente utilizamos os conceitos fator de blindagem e carga nuclear efetiva. Estes conceitos surgem ao se utilizar a solução exata da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio para descrever os átomos polieletrônicos. De outra forma, o professor indubitavelmente teria de apresentar conceitos bem mais abstratos e exigir dos alunos conhecimentos avançados de alguns tópicos da Física e da Matemática. Obviamente, isto não faz sentido em um curso introdutório de Química para estudantes do primeiro ano universitário.

Apresentar conceitos de grande abstração e difícil analogia, como os da Química Quântica, sem discutir as

É necessário lembrar que a solução exata das equações de Schrödinger só é factível para sistemas simples, como uma partícula em uma caixa, rotor rígido e átomos hidrogenóides (espécies monoatômicas que possuem apenas um elétron)

suas bases matemáticas e físicas, parece um tanto pretensioso e corre-se o risco do ensino tornar-se mais informativo, em detrimento da aprendizagem. Geralmente, nos livros de Química Geral, a estrutura eletrônica dos átomos polieletrônicos é tratada de forma superficial, relacionando a carga nuclear efetiva, obtida de forma empírica, com as propriedades periódicas, tais como raio atômico, potencial de ionização e afinidade eletrônica. O incentivo à crítica científica (que nunca deve faltar) é substancialmente prejudicado por falta de dados experimentais que possibilitam aos alunos assimilarem os conceitos de carga nuclear efetiva e suas conseqüências para a compreensão da periodicidade.

Para uma introdução às equações de Schrödinger e à estrutura eletrônica

dos átomos e moléculas, indicamos artigo do caderno temático *Estrutura da matéria: uma visão molecular* (Almeida et al., 2001). O conceito de blindagem eletrostática é muito bem apresentado por Huheey (1983), em seu livro de Química Inorgânica. Torna-se, no entanto, necessário lembrar que a solução exata das equações de Schrödinger só é factível para sistemas simples, tais como uma partícula em uma caixa, rotor rígido e para os átomos hidrogenóides (aquelas espécies monoatômicas que possuem apenas um elétron) (McQuarrie, 1983). Em átomos polieletrônicos, a interação entre os elétrons impossibilita a separação de variáveis e, conseqüentemente, a solução exata das equações de Schrödinger. O método de Hartree-Fock utiliza funções de onda de um elétron e a aproximação do campo auto-consistente para descrever o movimento dos elétrons no campo coulombiano definido pelos núcleos dos átomos. De acordo com Slater (1951), em seu artigo intitulado "Uma simplificação do método de Hartree-Fock", esse método pode ser visto como um modelo no qual o elétron se movimenta em um

A seção 'Conceitos científicos em destaque' tem por objetivo abordar, de maneira crítica e/ou inovadora, conceitos científicos de interesse dos professores de Química.

campo médio repulsivo devido aos outros elétrons. Ou seja, na teoria de Hartree-Fock, o elétron não sente a repulsão dos outros elétrons de forma explícita, mas sim como uma nuvem de elétrons blindando parte da carga nuclear. Dessa forma, o elétron sente uma carga nuclear efetiva resultante da blindagem parcial da carga nuclear pelo campo médio repulsivo devido aos outros elétrons.

Os níveis de energia dos átomos hidrogenóides são determinados por:

$$E_n = -\frac{Z^2 2\pi^2 e^4}{n^2 h^2} \quad (1)$$

A partir desta equação, pode-se calcular a energia do orbital 1s, que é exatamente a energia de ionização do átomo de hidrogênio. Observa-se que a energia de ionização está relacionada com o fator Z^2/n^2 . Como a carga nuclear (ou seja, o número atômico Z) aumenta mais rapidamente que o número quântico principal (n), esperaríamos um aumento contínuo do potencial de ionização, ou seja, a energia necessária para retirar um elétron do átomo. Entretanto, se observarmos a energia de ionização dos átomos de hidrogênio e lítio (1312 kJ/mol e 520 kJ/mol, respectivamente), verificaremos ocorrer a diminuição da energia. As razões para essa diminuição da energia de ionização é atribuída ao fato da distância média do elétron 2s ao núcleo ser maior que a do 1s e da repulsão do elétron 2s pelos elétrons 1s da camada mais interna do lítio. Dessa forma, a energia de ionização está relacionada à razão Z_{ef}^2/n^2 , onde Z_{ef} é a carga nuclear efetiva sentida pelo elétron 2s.

Qual o valor de Z_{ef} para o caso do lítio? Alguém poderia supor que se trataria apenas de uma conta simples $Z_{ef} = 3 - 2 = 1$, isto é, os elétrons 1s estariam blindando completamente a carga nuclear. No entanto, esse valor é aproximadamente igual a 1,30, mostrando que os elétrons 1s não são eficientes na blindagem. A compreensão desse fato é a base para se explicar a periodicidade ao longo da Tabela Periódica e as anomalias observadas para alguns grupos.

A dificuldade de compreender esse fato aparece no modelo de átomo que normalmente os alunos tendem a fixar -

o modelo de cebola. Nesse modelo, os elétrons que estão em orbitais de número quântico maior estariam na região do espaço mais externo. Conseqüentemente, esperaríamos que os elétrons mais internos contribuíssem com um fator de 100% para a blindagem. Porém, no átomo quântico, isto não se verifica: os elétrons dos orbitais de maior número quântico principal apresentam maior probabilidade de serem encontrados na região mais externa. Mas há uma probabilidade, ainda que pequena, desses elétrons serem encontrados em regiões mais internas do que elétrons de número quântico menor. Esse conceito de probabilidade advém da natureza ondulatória dos elétrons. A análise da função radial da equação de Schrödinger para os átomos é normalmente a forma encontrada pelos professores para explicar o porquê dos elétrons das camadas internas não serem efetivos na blindagem dos elétrons da camada de valência. Estudantes universitários iniciantes têm dificuldade para compreender a partir da análise das funções de onda radiais como elas podem se interpenetrar, o que aparentemente significa que esses elétrons estariam ocupando o mesmo espaço. Trata-se de uma dificuldade enorme para o professor argumentar sem entrar nos conceitos mais complexos da Matemática e da Mecânica Quântica.

A proposta deste artigo é apresentar alguns argumentos baseados em dados experimentais para ajudar a compreender a natureza da estrutura eletrônica dos átomos, as funções de onda e suas conseqüências para o fator de blindagem. A relação das propriedades periódicas e os fatores de blindagem serão discutidos.

Cálculo das constantes de blindagem: Regras de Slater e percentagem de blindagem

Slater (1930) publicou um conjunto de regras para estimar as constantes

de blindagem e, conseqüentemente, a carga nuclear efetiva dos átomos. Ele as aplicou com sucesso para estimar o tamanho dos átomos e íons, os níveis de energia e a suscetibilidade magnética. Desde a publicação desse trabalho, vários autores têm sugerido o uso didático dessas regras em cursos introdutórios de Química no nível universitário (Brink, 1991). Essas regras foram resumidas por Huheey (1983) e estão descritas abaixo:

1) Escreva a configuração eletrônica dos elementos na seguinte ordem e grupos: (1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) etc.

2) Elétrons em qualquer grupo à direita do grupo (ns, np) não contribuem para a constante de blindagem.

3) Todos os outros elétrons no grupo (ns, np) blindam o elétron de valência de 0,35 cada.

4) Todos os elétrons na camada ($n - 1$) contribuem com 0,85 cada.

5) Todos os elétrons ($n - 2$) ou em camadas mais baixas blindam completamente, ou seja, contribuem com 1 para o fator de blindagem.

Quando o elétron que está sendo blindado pertence a um grupo (nd) ou (nf), as regras 2 e 3 são as mesmas, mas as regras 4 e 5 tornam-se:

6) Todos os elétrons nos grupos à esquerda do grupo (nd) ou (nf) contribuem com 1,0 para o fator de blindagem.

A carga nuclear efetiva é estimada a partir da equação:

$$Z_{ef} = Z - S \quad (2)$$

onde S é o fator de blindagem.

Geralmente, as regras de Slater são muito úteis para correlacionar a carga nuclear efetiva com propriedades tais como raio atômico e eletronegatividade ao longo das linhas da Tabela Periódica. No entanto, as regras de Slater falham nas tendências ao longo das colunas, como pode ser visto na Tabela 1.

Waldron *et al.* (2001) introduziram o

Tabela 1: Carga nuclear efetiva de Slater para a 2ª linha e a 1ª coluna da Tabela Periódica.

2ª linha	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
1ª coluna	H	Li	Na	K	Rb	Cs	-	-
Z_{ef}	1,0	1,3	2,2	2,2	2,2	2,2	-	-

conceito de percentagem de blindagem (PB), juntamente com uma modificação da 4ª regra de Slater, como segue:

4) Para o cálculo dos elétrons s e p , os elétrons d da camada $(n - 1)$ são contados como 0.50 cada. Todos os elétrons f são contados como 0.69 cada. As regras para calcular os valores dos elétrons d e f permanecem as mesmas. Ou seja, elétrons na mesma camada contam 0,35 e os outros contam com 1,0.

Nessa nova regra, os elétrons d e f são menos eficientes para blindarem. A percentagem de blindagem, dada por

$$PB = S / Z \times 100\% \quad (3)$$

correlaciona-se muito melhor com as propriedades periódicas, como pode ser observado na Tabela 2.

A utilização das percentagens de blindagem permite fazer uma análise muito mais detalhada das propriedades periódicas, incluindo a série dos lantanídeos. As similaridades entre os elementos $3p/4p$ e os elementos $4d/5d$ podem ser demonstradas.

A carga nuclear efetiva calculada pelas regras de Slater ao longo da série dos lantanídeos não sofre modificação. No entanto, o potencial de ionização dos elementos lantanídicos aumenta de 0,83 eV ao longo da série $4f$. Além disso, o tamanho dos lantanídeos diminui de 11 pm ao longo da série, indicando que deve haver alguma penetração da densidade do elétron $6s$ na camada $4f$. Enfim, o potencial de ionização (PI , 1ª energia de ionização) ao longo da série dos lantanídeos é inversamente proporcional à percentagem de blindagem que leva em conta a incapacidade de blindar dos elétrons $(n - 2)f$. Discussão detalhada das consequências de se utilizar o conceito de percentagem de blindagem no estudo das propriedades periódicas é apresentada por Waldron *et al.* (2001).

Tabela 2: Percentagens de blindagem (PB) para os elementos da 2ª linha e 1ª coluna da Tabela Periódica.

2ª linha	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
PB	56,7	51,3	48,0	45,8	44,3	43,1	43,2	41,5
1ª coluna	H	Li	Na	K	Rb	Cs	-	-
PB	0,0	56,7	80,0	88,4	94,0	96,0	-	-

Embora os valores estimados da carga nuclear efetiva e da percentagem de blindagem se correlacionem muito bem com as propriedades dos átomos, argumentos tais como penetração dos orbitais e blindagem ineficiente dos elétrons d e f devem ser evocados, de forma a explicar o comportamento periódico.

Na próxima seção, discutiremos uma forma de calcular a carga nuclear efetiva e usaremos dados experimentais para demonstrar a capacidade dos elétrons em camadas mais externas de efetivamente blindarem os elétrons mais internos. Como exemplo, elétrons em orbitais ns contribuem para o fator de blindagem dos elétrons nos orbitais $1s$, contrariando a 2ª regra de Slater.

Espectroscopia fotoeletrônica de raios X (XPS) e a energia do orbital $1s$

Nos anos 30, grande parte da Química Quântica já tinha sido desenvolvida; porém, as dificuldades em fazer cálculos complexos impediam a aplicação desse conhecimento para estudos quantitativos de forma extensiva. Por isso, aproximações eram, muitas vezes, a única forma de se utilizar a teoria para estudar sistemas químicos. As regras de Slater foram propostas para permitir a utilização de funções de onda simplificadas e sem nós em cálculos teóricos. Ele decompôs o fator de blindagem em contribuições das camadas eletrônicas dos átomos. Tratando-se de uma simplificação, o método de Slater foi posteriormente assimilado como uma ferramenta didática, para se compreender as propriedades periódicas e a estrutura eletrônica dos átomos.

Os níveis eletrônicos no átomo de hidrogênio e dos íons hidrogenóides são corretamente descritos pela equação de Rydberg:

$$E_n = - \frac{Z^2 R_h}{n^2} \quad (4)$$

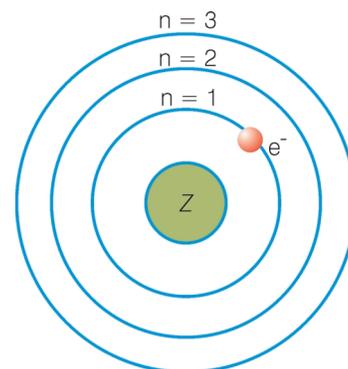


Figura 1: Modelo de Bohr para os hidrogenóides.

onde R_h é a constante de Rydberg, igual a 13,6 eV.

A Figura 1 mostra o modelo para o qual a equação de Rydberg é válida. Observe que a eq. 4 descreve corretamente a última energia de ionização de todos os átomos. A última energia de ionização (E_I^Z) corresponde à retirada do elétron $1s$, depois que todos os outros foram retirados.

No entanto, se analisarmos a última e a penúltima energia de ionização dos elementos, verificaremos serem elas diferentes. Esse fato está previsto na 3ª regra de Slater, ou seja, um elétron blinda o outro mesmo estando no mesmo orbital. Por isso, a penúltima energia de ionização é sempre menor do que a última. Podemos, então, fazer uma simplificação, modelando o íon como um hidrogenóide. Suporíamos que a penúltima energia de ionização pode ser reproduzida pela carga nuclear desse hidrogenóide (veja Figura 2). Baseando-nos nesse argumento, podemos estimar essa carga nuclear efetiva a partir da modificação da equação de Rydberg:

$$Z_{ef} = \sqrt{\frac{E_I^{Z-1}}{R_h}} \quad (5)$$

onde E_I^{Z-1} é a $(Z - 1)$ ésima energia de ionização. Observe que n é igual a 1; por isso, ele não aparece na eq. 5. O íon hidrogenóide tem carga Z_{ef} e o elétron está na pseudoprimeira camada. Em seguida, serão apresentados argumentos validando a utilização da eq. 5 para o cálculo de carga nuclear efetiva.

A Tabela 3 apresenta a última e a penúltima energia de ionização dos elementos da 2ª linha da Tabela Periódica.

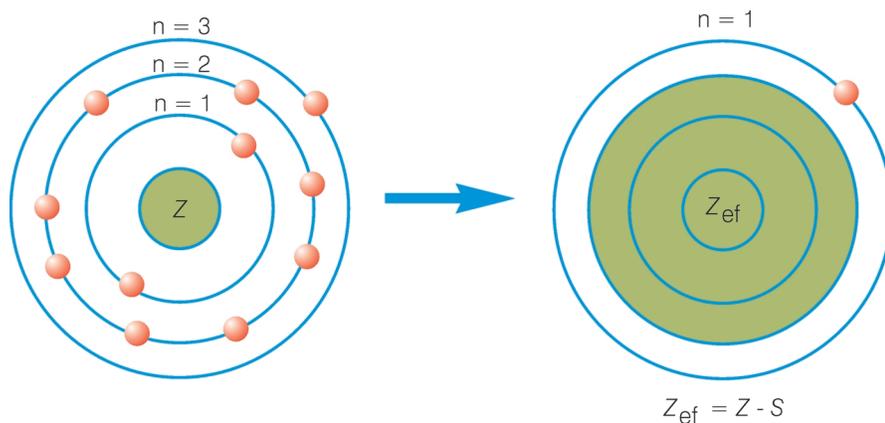


Figura 2: Íons e átomos reduzidos ao modelo de Bohr.

dica (Barros, 1995), a energia de ionização calculada pelo modelo de Bohr e a carga nuclear efetiva calculada pela eq. 5. Como era esperado, o modelo de Bohr (eq. 4) reproduz corretamente a última energia de ionização dos átomos. A carga nuclear efetiva sentida pelos elétrons do orbital 1s aumenta ao longo da série e o fator de blindagem permanece praticamente constante. Esse resultado evidencia a não alteração apreciável da forma dos orbitais 1s pelo aumento do número atômico, justificando assim o fato do fator de blindagem permanecer constante.

Um estudante poderia então perguntar: “Qual seria a energia necessária para retirar um elétron do orbital 1s de um átomo polieletrônico mantendo todos os outros elétrons? Nesse caso, qual seria a carga nuclear efetiva sentida por esse elétron?” Felizmente, a primeira questão pode ser respondida através dos dados obtidos por espectroscopia fotoeletrônica de raios X (XPS). Em XPS, a energia incidente do fóton é tão grande que os elétrons são retirados das camadas internas dos átomos. Dessa forma, obtém-se a energia característica do orbital 1s dos átomos (Cullity, 1978).

Na Tabela 4, são apresentados os dados de XPS, a respectiva carga nuclear e a blindagem eletrostática para os elementos da 2ª linha da Tabela Periódica. Diferentemente do observado com as energias de ionização na Tabela 3, o fator de blindagem aumentou monotonicamente. Qual a diferença em relação à energia de ionização? No caso dos dados de XPS, a diferença está no fato de, ao ser aumentado o

número atômico, ou seja, passar de um átomo para outro, aumenta-se também elétrons na camada de valência. Esses elétrons, embora na camada de valência, contribuem para blindar a carga nuclear em relação aos elétrons 1s. Essa explicação é perfeitamente plausível e está de acordo com os resultados da equação de Schrödinger, pois há probabilidade (ainda que pequena) desses elétrons serem encontrados mais próximos do núcleo do que os elétrons do orbital 1s. A Figura 3 mostra a função radial dos orbitais atômicos s do hidrogênio, exemplificando o racio-

ínio anterior. Esses dados experimentais demonstram de forma enfática a capacidade que os orbitais tem de se interpenetrarem. A distância média dos elétrons em diferentes orbitais aumenta com o aumento do número quântico principal e secundário; no entanto, para uma análise correta, mesmo que qualitativa, é preciso levar-se em conta a natureza probabilística da Química Quântica.

Considerações finais

Os dados de potencial de ionização sucessivos dos átomos e os dados de XPS consistem em fortes evidências da estrutura de camadas dos átomos e da interpenetração dos orbitais atômicos. Mostramos que os orbitais atômicos descritos pela equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio são semelhantes aos dos átomos polieletrônicos, uma vez que são capazes de descrever e racionalizar o comportamento dos dados de EI e XPS ao longo da Tabela Periódica. A Figura 4 mostra de forma inequívoca que o comportamento da energia do orbital 1s como função do número atômico segue uma parábola em acordo com o modelo de Bohr. A diferença entre os valores

Tabela 3: Última e penúltima energia de ionização da 2ª linha da Tabela Periódica. Os dados estão em eV¹.

Elemento	Z	Modelo de Bohr	Energia de ionização ²		Carga nuclear efetiva ³	Fator de blindagem
			$Z^2 R_n$	Z - 1		
H	1	13,6	-	13,6	-	
He	2	54,4	24,6	54,4	1,34	0,67
Li	3	122,4	75,6	122,4	2,36	0,64
Be	4	217,6	153,8	217,6	3,36	0,64
B	5	340,0	259,3	340,1	4,37	0,63
C	6	489,6	391,9	489,8	5,37	0,63
N	7	666,4	551,9	666,8	6,37	0,63
O	8	870,4	739,1	871,1	7,37	0,63
F	9	1101,6	953,5	1102,7	8,37	0,63
Ne	10	1360,0	1195,9	1362,3	9,38	0,62

¹ 1 kJ/mol = 1,036 x 10² eV. ²Dados reproduzidos de Barros (1995). ³ $R_n = 13,6$ eV.

Tabela 4: Dados de XPS para camada K (em eV), carga nuclear efetiva e fator de blindagem calculados pelo modelo de Bohr.

Elementos	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
XPS ¹	50	110	190	280	400	530	690	850
Z	3	4	5	6	7	8	9	10
Z _{ef}	1,95	2,85	3,75	4,55	5,44	6,26	7,14	7,91
S	1,05	1,15	1,25	1,45	1,66	1,74	1,86	2,09

¹ Dados obtidos de Cullity (1978).

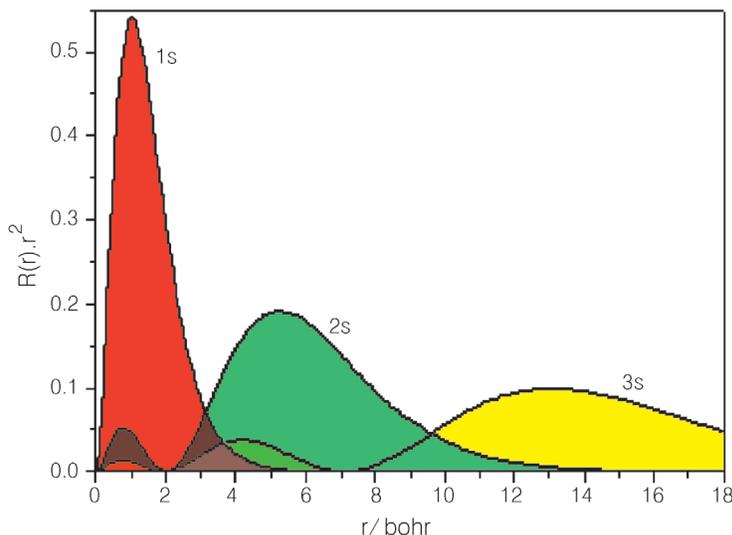


Figura 3: Densidade de probabilidade radial dos orbitais atômicos 1s, 2s e 3s.

demonstra que os elétrons mais externos contribuem para o fator de blindagem do elétron no orbital 1s em relação à carga nuclear, contrariando a 2ª regra de Slater. Ou seja, o elétron no orbital 1s sente uma carga nuclear menor do que o equivalente ao seu número atômico pelo fato dos elétrons em camadas mais externas terem uma probabilidade de serem encontrados mais próximos do núcleo. A Figura 4 mostra que a diferença em termos percentuais entre o modelo de Bohr e os dados de

XPS decresce tendendo a um patamar, demonstrando assim que elétrons em camadas mais externas blindam menos, por terem uma probabilidade menor de serem encontrados próximos ao núcleo. Enfim, as regras de Slater e suas modificações nos oferecem uma forma qualitativa e limitada para estimarmos o fator de blindagem. Entendemos que uma visão qualitativa e conceitualmente correta da estrutura eletrônica dos átomos permite aos alunos vislumbrarem de forma mais ampla as consequências do modelo atômico atual proporcionado pela

Química Quântica. Esse modelo auxilia na descrição de fenômenos observados em espectroscopia eletrônica, ressonância magnética nuclear e ressonância paramagnética eletrônica, espectroscopia de raios X e tantos outros métodos avançados de análise que vêm sendo desenvolvidos ao longo dos últimos anos (como exemplo cita-

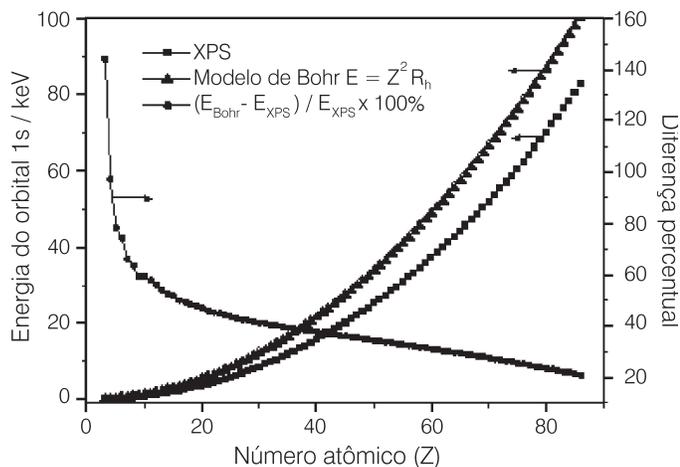


Figura 4: Energia do orbital 1s como função do número atômico estimado pelo modelo de Bohr (eq. de Rydberg) e por dados de espectroscopia de raios X. A diferença relativa entre os dois modelos (em %) é mostrada no gráfico.

Abstract: *Effective Nuclear Charge and its Consequence for the Comprehension of the Electronic Structure of Atoms* – The concepts of screening factor and effective nuclear charge are generally invoked to explain the electronic structure of atoms and periodic properties in chemistry introductory courses at the university level. Slater rules and, more recently, the concept of percent screening have been used in a semi-quantitative form to estimate the screening factor and to relate it to the periodic properties. Experimental data such as successive ionization potentials and data from X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) allow advances in the understanding of the screening factor. In this paper, it is shown that these data correlate very well the atomic number, Z , as predicted by Bohr's atomic model. Nevertheless, the data demonstrate that electrons in the outermost shells are capable of screening the more internal electrons from the nucleus, in disagreement with Slater's 2nd rule. Thus, the probabilistic character of quantum chemistry and the interpenetration of the wave functions are highlighted. From Bohr's model, it is possible to estimate the effective nuclear charge from the experimental data. The consequences of an approach with emphasis on the concept of atom and its electronic structure for the comprehension of new techniques and technologies are briefly discussed.

Keywords: effective nuclear charge, screening factor, electronic structure

ríamos as espectroscopias Zeke e EXAFS). O conceito físico e químico bem compreendido é a base para que possamos ser capazes de lidar, apreender e compreender os avanços tecnológicos e os utilizarmos de forma eficaz e eficiente.

Agradecimentos

À FAPEMIG, à CAPES e ao CNPq por apoiar nossas pesquisas com auxílios financeiros e bolsas de pós-graduação.

Hélio Anderson Duarte (duarteh@ufmg.br), mestre em Química pela Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) e doutor em Química pela Universidade de Montreal (Canadá), é docente do Departamento de Química da UFMG.

Referências bibliográficas

- ALMEIDA, W.B. de; SANTOS, H.F. dos; ROCHA, W.R. e Duarte, H.A. Modelos teóricos para a compreensão da estrutura da matéria. In: AMARAL, L.O.F. e ALMEIDA, W.B. de (Eds.). *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola (Estrutura da matéria: uma visão molecular)*, n. 4, p. 6-13, 2001.
- BARROS, H.L.C. *Química Inorgânica - Uma introdução*. Belo Horizonte: SEGRAC, 1995.
- BRINK, C.P. The use of effective nuclear charge calculations to illustrate the relative energies of ns and $(n-1)d$ orbitals. *J. Chem. Educ.*, v. 68, p. 377-378, 1991.
- CULLITY, B.D. *Elements of X-ray diffraction*. 2ª ed. Menlo Park: Addison-Wesley, 1978.
- HUHEEY, J.E. *Inorganic chemistry*. 3ª ed. Nova Iorque: Harper and Row, 1983. cap. 2.
- MCQUARRIE, D.A. *Quantum chemistry*. Mill Valley: University Science Books, 1983.
- SLATER, J.C. A simplification of the Hartree-Fock method. *Phys. Rev.*, v. 81, p. 385-390, 1951.
- SLATER, J.C. Atomic shielding constants. *Phys. Rev.*, v. 36, p. 57-64, 1930.
- WALDRON, K.A.; FEHRINGER, E.M.; STREEB, A.E.; TROSKY, J.E. e PEARSON, J.J. Screening percentages based on Slater effective nuclear charge as a versatile tool for teaching periodic trends. *J. Chem. Educ.*, v. 78, p. 635-639, 2001.