



**LS - связь** – это случай, когда орбитальные моменты всех электронов связаны между собою сильнее, чем орбитальный и спиновый моменты каждого электрона в отдельности.

Аналогично спиновые моменты всех электронов связаны прочнее, чем с орбитальным моментом каждого электрона.

В *LS*- связи сперва рассчитывается, с учётом правил квантования, полный орбитальный и спиновый моменты.

Определив полный орбитальный и спиновый моменты, рассчитывают суммарный механический момент атома.

Полный орбитальный момент определяется условием

$$M_L^2 = \hbar^2 L(L + 1);$$

Квантовое число ( $L$ ), для двух электронов принимает значения:

$$(L = \ell_1 + \ell_2; \ell_1 + \ell_2 - 1; \dots; |\ell_1 - \ell_2|)$$

Добавим ещё один третий электрон. В этом случае число ( $L$ ) меняется:

$$(L = \ell_1 + \ell_2 + \ell_3; \ell_1 + \ell_2 + \ell_3 - 1; \dots; \ell_{MIN})$$

где  $\ell_{MIN}$  — это минимальное значение попарной суммы квантового числа ( $L$ ) для двух электронов с третьим квантовым числом  $\ell_3$ .

Пример :

$$(\ell_1 = 1; \ell_2 = 1; \ell_3 = 2)$$

$$\left. \begin{array}{l} 1) L_{12} = 2; \\ 2) L_{12} = 1; \\ 3) L_{12} = 0; \end{array} \right\} \text{добавляем..} \ell_3 = 2;$$

Получаем :

$$\left. \begin{array}{l} 1) L_{123} = 4; 3; 2; 1; 0; \\ 2) L_{123} = 3; 2; 1; \\ 3) L_{12} = 2; \end{array} \right\} \text{для..трёх..электронов ..} L = 4; 3; 2; 1; 0;$$

- Для большого числа электронов процедура повторяется (т.е. определяется попарная сумма предыдущих значений квантового числа ( $l$ ), с квантовым числом добавленного электрона.
- Так как орбитальное число  $l$  всегда целое, то квантовое число полного орбитального момента тоже всегда целое.

Для проекции орбитального момента атома :

$$M_{LZ} = m_L \hbar \quad (M_Z = m \hbar)$$

$$(m_L = -L; -L + 1; \dots; 0; \dots; L;)$$



Для суммарного спинового момента атома :

$$M_S^2 = \hbar^2 S(S + 1);$$

Квантовое число (для двух электронов):

$$(S = s_1 + s_2; \dots; |s_1 - s_2|);$$

Для n – ого количества электронов, возможны два случая :

Первый случай:

В атоме чётное число электронов, тогда спиновое число атома, будет целочисленным, и будет изменяться от значения  $\left(N \cdot \frac{1}{2}; \dots \dots \dots 0\right)$ .

Пример:  $\left(N = 4; \right)$   
 $\left(S = 2; 1; 0;\right)$

Последнее значение числа S обусловлено тем, что спины электронов попарно компенсируют друг друга.

Второй случай:

При нечётном количестве электронов, спиновое число атома будет полуцелым.

Пример:  $\left(N = 5; \right)$   
 $\left(S = \frac{5}{2}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2}; \right)$



Полный механический момент атома  $J$ ,  
определяется:

$$M_J^2 = \hbar^2 J(J + 1);$$

$$(J = L + S; \dots; |L - S|;$$

Следовательно,  $J$  будет целым, если  $S$  – целое, и  
полуцелым, если  $S$ - полуцелое.

Проекция полного механического момента на  
направление  $z$  определяется формулой

$$M_{Jz} = m_J \hbar \quad (m_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J)$$

- Таким образом, состояние атома и его энергия определяются квантовыми числами  $L$ ,  $S$  и  $J$ .
- Для характеристики состояния атома пользуются символической записью, которая включает в себе информацию о квантовых числах

$${}^{2S+1}L_J$$

- Под  $L$  подразумевают одну из букв  $S, P, D, F, \dots$
- $2S + 1$  дает мультиплетность энергетического уровня.