



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 ℓ_{MIN} — это минимальное значение попарной суммы квантового числа (L) для двух электронов с третьим квантовым числом ℓ_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.