

Энергетические уровни одноэлектронного приближения (1.2) заполняются, в соответствии с принципом Паули, n электронами атома. Это определяет электронную конфигурацию атома. Электроны группируются в оболочки (квантовое число n). Замкнутые обо-

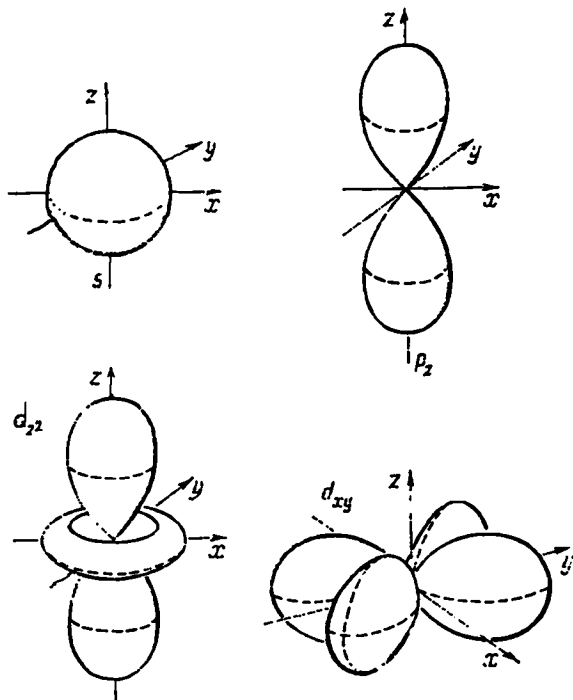


Рис. 1. Абсолютная величина угловой составляющей атомных орбиталей с $l = 0, 1, 2$: s -функция изотропна, три p -функции p_x, p_y, p_z ориентированы преимущественно вдоль осей x, y, z соответственно. Из пяти d -функций приведены только d_{z^2} и d_{xy} . Функции $d_{x^2-y^2}, d_{yz}$ и d_{zx} ориентированы иначе.

лочки не имеют результирующего спина и орбитального момента. Электроны в незаполненных оболочках, характеризующиеся симметрией соответствующих им атомных орбиталей и их спином, и определяют природу химической связи.

§ 2. Локализованная ординарная связь

Рассмотрим следующую упрощенную модель.

Две атомные орбитали $\psi_A^{\text{ат}}$ и $\psi_B^{\text{ат}}$ двух соседних атомов А и В существенно перекрываются. В свободном атоме каждая такая орбиталь занята одним электроном. Оба электрона взаимодействуют с ядрами А и В, а также и друг с другом. Все остальные взаимодействия учитываются в атомных потенциалах V_A и V_B . Мы пред-