

Вероятность найти электрон в определенном месте следует из (1.15):

$$|\psi_{\pm}|^2 = \frac{1}{2(1 \pm S)} (|\psi_A^{\text{at}}|^2 + |\psi_B^{\text{at}}|^2 \pm 2\psi_A^{\text{at}}\psi_B^{\text{at}}). \quad (1.16)$$

Эти функции (вдоль линии А — В) приведены на рис. 2 для случая одного электрона в поле двух протонов (молекулярный ион H_2^+). Положительный знак ассоциируется с увеличением, а отрицательный — с уменьшением вероятности нахождения электрона

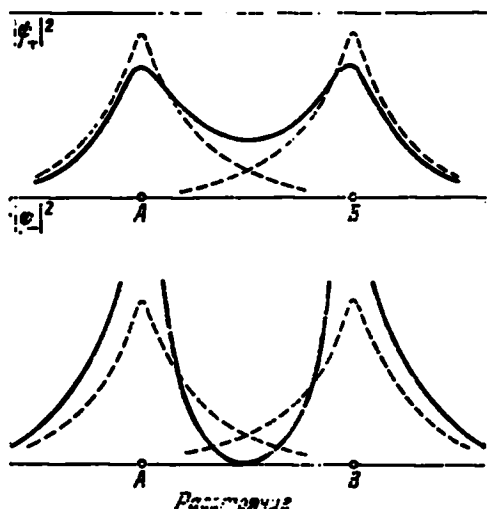


Рис. 2. Вероятность нахождения электрона вдоль линии, связывающей ядра А и В в молекуле H_2^+ согласно (1.16) при использовании в качестве $\psi_{A,B}^{\text{at}}$ водородных $1s$ -орбиталей. Верхняя сплошная кривая: связывающее состояние, нижняя сплошная кривая: антисвязывающее состояние. Квадраты модулей орбиталей свободных атомов показаны штриховыми линиями.

между ядрами. Во всех интересующих нас случаях значение интеграла A (1.12) отрицательно. Более низким собственным значением тогда является E_+ . Основное состояние E_+ является, следовательно, *связывающим состоянием* с «электронной связью» между обоими ядрами; возбужденное состояние E_- является *антисвязывающим состоянием* с уменьшенной вероятностью пребывания электрона между ядрами.

Согласно (1.15) в основном состоянии (симметричная координатная часть волновой функции) оба электрона, занимающие связывающее состояние E_+ , имеют противоположно направленные спины. В основном состоянии связь поддерживается, следовательно, *спинонасыщенной электронной парой*. В антисвязывающем состоянии спины параллельны.

В случае разных атомов А и В параметр λ становится $\neq \pm 1$. Связь тогда несимметрична; вероятность того, что электрон будет вблизи одного из ядер, тогда больше, чем вероятность его пребывания вблизи другого. Поэтому λ часто называют *полярностью* (polarity) связи *).

*) Логичнее употребить здесь термин «степень полярности». См. также примечание на стр. 20. (Примеч. пер.)