

Здесь A имеет смысл обменного интеграла, что легко видеть из сравнения с интегралом в (ч. I.3.13.)*). Тогда получаем

$$E_{\pm} = E_A + E_B + \frac{C \pm A}{1 \pm S}, \quad (1.20)$$

причем $E_A = E_B$ суть энергии при $R \rightarrow \infty$ (нет перекрытия атомных орбиталей). Знаки соответствуют знакам в (1.7). Обменный интеграл и здесь отрицателен. Следовательно, E_+ — основное состояние. Легко можно показать, что E_+ — связывающее состояние с увеличенной вероятностью пребывания электрона между ядрами; E_- — соответственно антисвязывающее состояние.

Поскольку $\psi(AB)$ для основного состояния симметрична относительно координат электронов, следует домножить ее на антисимметричную комбинацию спинных функций. Таким образом, связывающая электронная пара является спинонасыщенной, в согласии с результатом МО-метода. В антисвязывающем состоянии спиновая составляющая волновой функции должна быть симметричной. Поскольку для этого есть три возможные реализации: $\alpha(1)\alpha(2)$, $\beta(1)\beta(2)$, $\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)$, антисвязывающее состояние является триплетным состоянием. Связывающее состояние, напротив, синглетное.

Следовательно, обобщив методы мы пришли к одинаковому результату, а именно, что два одинаковых атома связаны симметрично посредством спинонасыщенной электронной пары. Такой тип связи называется *ковалентной* связью. В случае ковалентных связей коэффициент $\bar{\lambda}$ в (1.9) определяет приращивание ионных состояний. Часто $\bar{\lambda}$ называют *ионностью* (ionicity) связи**).

Асимметрия связи в случае различных атомов A и B , которая в МО-методе описывается полярностью λ , в VB-методе определяется посредством отношения $\bar{\lambda}_1/\bar{\lambda}_2$ из (1.9).

Полезно сравнить обе пробные функции (1.6) и (1.7) для ковалентной связи. Функция (1.6) (при $\lambda = 1$) является линейной комбинацией четырех возможных реализаций: $(1A)(2B)$, $(1B)(2A)$, $(1A)(2A)$ и $(1B)(2B)$ с одинаковым весом. В (1.7) оба ионных состояния $(1A)(2A)$ и $(1B)(2B)$, напротив, отсутствуют. Они добавляются только на следующем этапе при переходе от (1.7) к (1.9). Соответствующее дополнение возможно также и в рамках МО-метода. В пробной волновой функции для этого комбинируют

*) Напоминаем, что здесь и далее индексом ч. I или ч. II обозначаются ссылки на формулы, рисунки, главы и параграфы изданного ранее перевода на русский язык первых двух частей книги О. Маделунга. (Примеч. пер.)

**) В отечественной литературе употребляется также, чаще всего, термин «степень ионности связи», реже — «параметр ионности». См. также примечание на стр. 18 и предисловие переводчиков. (Примеч. пер.)