



对于极性分子AB，设 ϕ_A 和 ϕ_B 分别是原子A和B的轨道，对应的原子轨道能量分别为 E_A 和 E_B 。请回答以下问题：

- (1) 如果在该分子轨道上运动的一个电子，有70%的时间出现在A的原子轨道 ϕ_A 上，有30%的时间出现在B的原子轨道 ϕ_B 上。请写出该分子轨道的波函数形式（此处不考虑原子轨道的重叠）。
- (2) 若 ϕ_A 和 ϕ_B 线性组合形成成键分子轨道 $\Psi = c_A \phi_A + c_B \phi_B$ ，如果 $E_A > E_B$ ，请推测 c_A 和 c_B 的大小。



解析：由LCAO-MO可知， ϕ_A 和 ϕ_B 可以线性组合形成分子轨道

$\Psi = c_A \phi_A + c_B \phi_B$ 。根据波函数归一化可知：

$$\int \Psi^2 d\tau = 1 \rightarrow \int (c_A \phi_A + c_B \phi_B)^2 d\tau = 1$$

$$c_A^2 \int \phi_A^2 d\tau + c_B^2 \int \phi_B^2 d\tau + 2 c_A c_B \int \phi_A \phi_B d\tau = 1$$

$$c_A^2 \int \phi_A^2 d\tau + c_B^2 \int \phi_B^2 d\tau = 1 \quad (\text{不考虑原子轨道重叠})$$

$$c_A^2 + c_B^2 = 1$$



(1)由态叠加原理，电子在对应状态出现的几率密度大小正比于系数的平方。由题意可知，该电子在A的原子轨道 ϕ_A 上出现的概率为70%，在B的原子轨道 ϕ_B 上出现的概率为30%。则：

$$c_A^2 = 0.7 \quad c_B^2 = 0.3$$

$$c_A = \pm\sqrt{0.7} = \pm 0.8367$$

$$c_B = \pm\sqrt{0.3} = \pm 0.5477$$

所以该分子轨道的波函数形式为：

$$\Psi = 0.8367\phi_A \pm 0.5477\phi_B$$



(2) ϕ_A 和 ϕ_B 线性组合形成成键分子轨道 $\Psi=c_A\phi_A+c_B\phi_B$ (假设 c_A 和 c_B 都为正数)，如果 $E_A>E_B$ ，则 c_A 小于 c_B 。

成键MO中含有低能原子轨道成分较多，而反键MO中含有高能原子轨道成分较多。其贡献的大小正比与系数的平方。