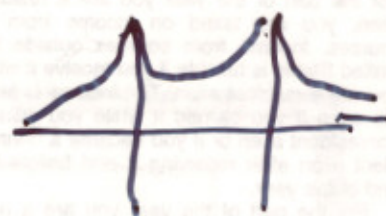
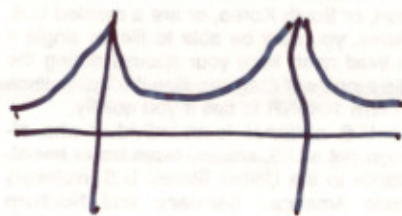
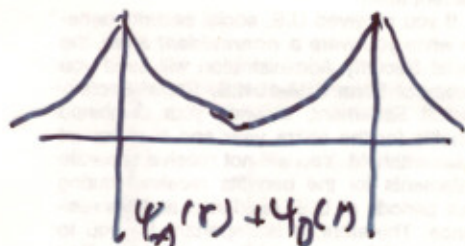


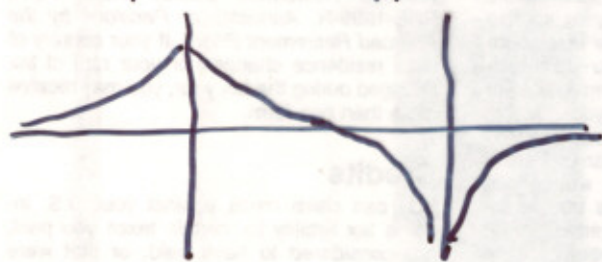
Súčet je najväčší keď $C_1/C_2 = 1 \Rightarrow$

$$\phi(r) = \phi_S(r) = C [\psi_A(r) + \psi_B(r)]$$



Inaký prípad kombinácie je $C_2/C_1 = -1 \Rightarrow$

$$\phi(r) \equiv \phi_A(r) = C [\psi_A(r) - \psi_B(r)]$$

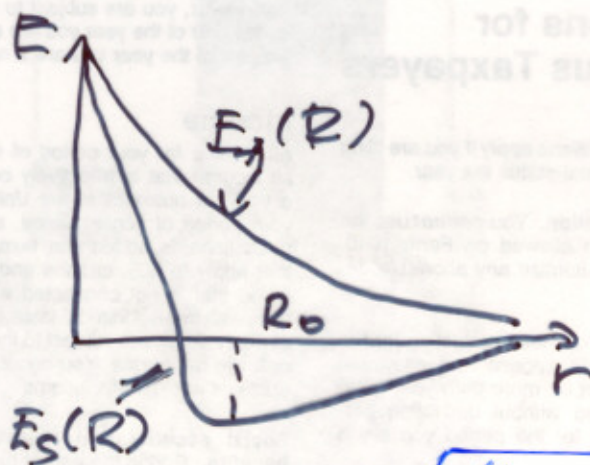


- Všet, že medzi polónami sa
- mení rýchlosť \Rightarrow väčšia kinetická energia
 - malá vzdialenosť \Rightarrow väčšia potenciálna energia

$\Rightarrow \phi_S$ má nižšiu energiu ako ϕ_A

Prí úprave štandardu H_2^+ tak, že najmenšie najnižšie energie odpovedajú vzdialenosti R dvoch protónov

$$\begin{aligned} \phi_S &\rightarrow E_S \\ \phi_A &\rightarrow E_A \end{aligned}$$



Ovsa energia P vo voľnej vzdialenosti od H .

R_0 - minimum E_S vzhľadom na vzdialenosť

$E_S(R_0) < 0 \Rightarrow$ menšie ako energia $H + P$
 \leftarrow väzbová energia H_2^+

Exp $E_S(R_0) = 2.56 \text{ eV}; R_0 = 2a_1$

Príbližný odhad chyba 25%
 a_1 - Bohrov polomer H

Molekulový orbitál - tu lin. kombinácia atómových.