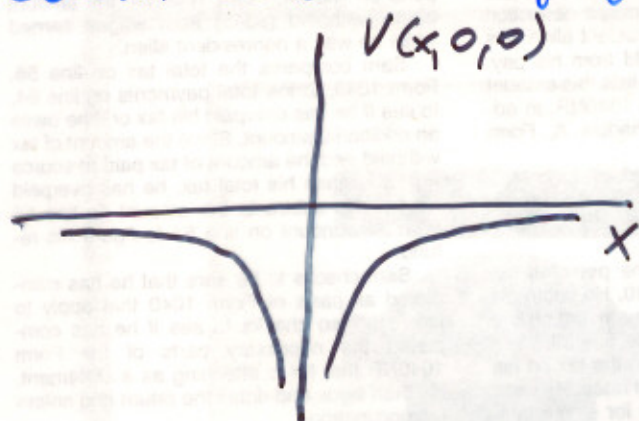


## Najjednoduchšia molekula - ion $H_2^+$

Kovalentná chemická väzba je vytvorená dvojicou ťahov, pričom táto dvojica je spôsobená dvomi atómovými spojivými väzbami.



Potenciálna energia elektrónu v poli protónu uvažovaného v pevnostke súradníc

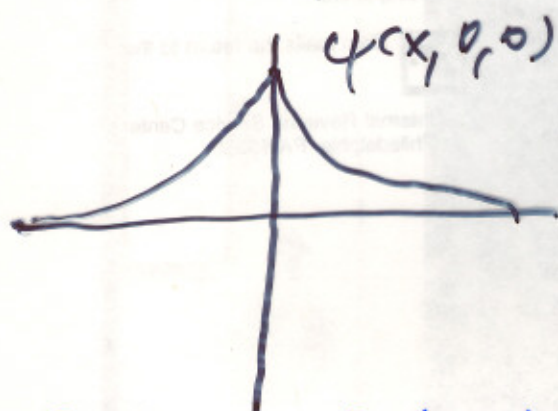
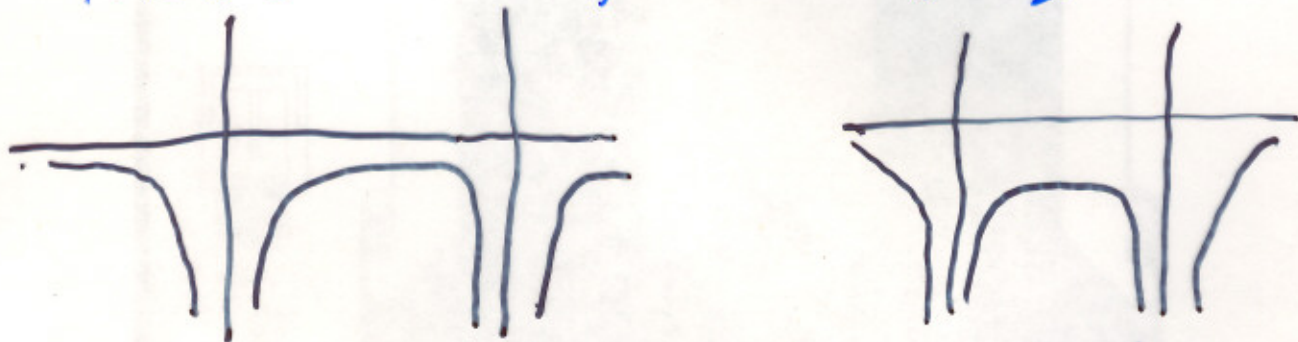


Schéma vlnovej funkcie základného stavu atómu vodíka

Približovanie dvoch protónov s jedným  $e^-$  ( $H_2^+$ )



Potenciálna energia sa znižuje postupným približovaním.

Ako bude vyzerať vlnová funkcia  $e^-$  v základnom stave pre tento prípad?

1. Dva protóny dočasne udržiavať a  $e^-$  sa pridať k jednému z nich:

Atóm  $H$  v bode A a protón v B

$H$  v bode B a protón v A