

3) LCAO : Linear Combination of Atomic Orbitals

Rimelig å anta at enpartikkeltilstander i molekyler vil ha likhetsrekke med løsningene for H-atomet.

(Molekyler er bygd opp av atomer, så hvorfor skulle ikke molekyltilstander kunne bygges opp av atomære tilstander!?)

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^M c_{\mu i} \phi_{\mu} \quad i=1,2,\dots$$

ψ_i : molekyltilstand i , evt. molekylorbital i

ϕ_{μ} : atomtilstand μ , evt. basisfunksjon μ

$c_{\mu i}$: "molekylorbitalkoeffisienter"

For hvert atomslag (H, He, ...) velges et basissett, dvs. et antall basisfunksjoner $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M$.
(ortogonale) $\{\phi_{\mu}\}$

Enhver mulig ^{elektron-}tilstand i molekylet, ψ_i , blir en lineærkombinasjon av samtlige ϕ_{μ} for alle atomene i molekylet.