

med $2N$ elektroner
 Grunntilstanden til molekyl ψ tilsvare da det
 settet med koeffisiender $\{C_{\mu i}\}$ ($\mu=1,2,\dots,M; i=1,2,\dots,N$)
 som gir de N molekylorbitalene $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$
 slik at den tilhørende ~~energi~~ energi
 $2E_1 + 2E_2 + \dots + 2E_N$ blir minst mulig

(2 elektroner i hver molekylorbital ψ_i , ett med
 spin opp og ett med spin ned.)

Viktig med gauss-funksjoner for ϕ_μ :

$$\phi(\vec{r}) \sim x^a y^b z^c e^{-\alpha r^2}$$

s-orbitaler: $a=b=c=0$

p-orbitaler: $a=1$ or $b=1$ or $c=1$

d-orbitaler: $a+b+c=2$

Hvorfor $e^{-\alpha r^2}$ og ikke $e^{-\alpha r}$ (som i H-atomet)?

Fordel:

~~Integr~~ integraler av typen $\int \phi_\mu^* \phi_\mu d^3r$ blir enklere

Ulempe:

feil form nær $r=0$ og går for raskt mot null
 når $r \rightarrow \infty$

$\Rightarrow$ vi bruke flere gauss-funksjoner enn " $e^{-\alpha r}$ -type funksjoner"
 for å få en bedre beskrivelse av sannsynligheten.