



که آن الکترون، در اوربیتال اتمی آن هسته داراست. در این صورت به احتمال زیاد، اوربیتالهای مولکولی باید شبیه اوربیتالهای اتمی آن دو اتم باشد. بنابراین اگر توابع موجی اوربیتالهای اتمی  $\psi_A$  و  $\psi_B$  باشد، توابع تقریبی اوربیتالهای مولکولی که از انطباق این اوربیتالهای اتمی بر روی یکدیگر بوجود می آید به شکل  $\psi_A \pm \psi_B$  است. این گونه جمع جبری را ترکیب خطی می نامند.

- 
1. *Molecular Orbital Theory*
  2. *Linear Combination of Atomic Orbital*

