$\therefore \Psi_a = C_A(\chi_A - \chi_B)$

規格化条件より

$$\int |\Psi_a|^2 d\boldsymbol{r} = |C_A|^2 \Big\{ \underbrace{\int |\chi_A|^2 d\boldsymbol{r}}_{=1} - \int \chi_A^* \chi_B \, d\boldsymbol{r} + \underbrace{\int |\chi_B|^2 d\boldsymbol{r}}_{=1} - \underbrace{\int \chi_B^* \chi_A \, d\boldsymbol{r}}_{S} \Big\}$$

$\therefore |C_A| = \dfrac{1}{\sqrt{2(1-S)}}$

$C_A = \dfrac{1}{\sqrt{2(1-S)}}$ としても一般性は失われない

$$\Psi_a = \frac{\chi_A - \chi_B}{\sqrt{2(1-S)}}$$ 反結合性軌道 (anti-bonding)

同様に $$\Psi_b = \frac{\chi_A + \chi_B}{\sqrt{2(1+S)}}$$ 結合性軌道 (bonding)

* $S \ll 1$ としたら?

$E_a = \alpha - \beta \qquad \Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_A - \chi_B)$

$E_b = \alpha + \beta \qquad \Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_A + \chi_B)$