

Wie wir sahen, ist neben $+z_n$ auch stets $-z_n$ ein Pol von $f(z)$. Indem wir immer zwei entsprechende Terme (66) zusammenfassen, erhalten wir

$$f(z) = 2 \sum_n \frac{1}{z_n^2 - 2} \frac{1}{z_n^2 - z^2}; \quad (67)$$

unter Berücksichtigung der Definition von X ergibt sich somit

$$\begin{aligned} p &= 2 \wp \sum_n \frac{1}{X_n^2 - 2} \frac{1}{X_n^2 - X^2} \\ &= \frac{NZ}{A} \frac{e^2}{M} \mathfrak{G}_s e^{i\omega t} \sum_n \frac{1}{X_n^2 - 2} \frac{1}{\omega_n^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}. \end{aligned} \quad (68)$$

Wirkungsquerschnitte. Da für die Oberschwingungen die Voraussetzung, daß die Lichtwellenlänge groß gegen Kerndimensionen ist, nicht mehr zutrifft, beschränken wir uns im folgenden auf die Umgebung der Grundfrequenz ω_0 . Unter Einführung der „Strahlungsbreite“ Γ_s gemäß Gl. (20),

$$\frac{\hbar \Gamma_s}{2 m c^2} = \frac{\hbar}{2 m c^2} \frac{2}{3} \frac{NZ}{A} \frac{e^2}{M} \frac{\omega^2}{c^3} \frac{1}{X_0^2 - 2} \quad (69)$$

und des in Gl. (18) angegebenen Phasenwinkels φ zwischen erregender Feldstärke $\mathfrak{G}_s$ und Dipolmoment p erhalten wir die in (19) bis (23) angegebenen und diskutierten Wirkungsquerschnitte.

Austausch- und andere Zweizentrenintegrale mit 2s- und 2p-Funktionen

VON HERMANN-JOSEF KOPINECK

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen

(Z. Naturforschg. 5a, 420—431 [1950]; eingegangen am 21. Juni 1950)

Im Rahmen ausführlicherer Untersuchungen der Quantenmechanischen Theorie der chemischen Bindung erwies es sich als notwendig, Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale mit 2s- und 2p-Funktionen numerisch zu berechnen.

Im Anschluß an Sugiura¹ — der als erster diese Integraltypen, und zwar für 1s-Elektronen berechnete — wurden von folgenden Autoren Zweizentrenintegrale mit 2s- und 2p-Funktionen angegeben:

Rosen² tabelliert eine Anzahl von Hilfsintegralen, die zur Auswertung von Austauschintegralen, s. u. Gl. (4c), benutzt werden können.

Delbrück³ hat Wechselwirkungsintegrale zwischen 2s²-Elektronen unter gewissen Vernachlässigungen ermittelt, so daß seine Berechnung des Li₂-Moleküls noch ungenau ist. Einige Integrale zwischen 2s²- und 2s,2p-Elektronen geben Bartlett und Furry⁴ an. Ihr Ergebnis ist in guter Übereinstimmung mit unseren auf anderem Wege berechneten

Werten. Die zwischen 2p²-Elektronen auftretenden Integrale hat Bartlett⁵ als erster — aber noch mit Vernachlässigungen — berechnet. Einige numerische Werte von Wechselwirkungsintegralen zwischen 2s²-, 2s,2p- und 2p²-Elektronen finden sich außerdem bei Bleich und Mayer⁶, Sklar bzw. Sklar und Lyddane⁷ und Wheatley und Linnett⁸. Sehr ausführlich und genau haben kürzlich Parr und Crawford^{9a} sowie Hirschfelder und Linnett^{9b} mehrere Integrale mit 2p-Funktionen berechnet, die in guter Übereinstimmung mit unseren Werten sind. Alle diese Autoren benutzen bei der Auswertung der Integrale den von Rosen² angegebenen Integrationsweg wie auch seine Hilfsintegraltabellen.

Kotany, Amemiya und Simose¹⁰ veröffentlichten 1938 eine sehr ausführliche Tabelle von Hilfsintegralen zur Berechnung von Austausch- und anderen Wechselwirkungsintegralen. Diese Tabellen, die sich u. a. durch die große Zahl der Werte des

¹ Y. Sugiura, Z. Physik 45, 484 [1927].

² N. Rosen, Physic. Rev. 38, 255, 2099 [1931].

³ M. Delbrück, Ann. Physik 5, 36 [1930].

⁴ J. H. Bartlett u. B. H. Furry, Physic. Rev. 38, 1615 [1931]; 39, 209 [1932].

⁵ J. H. Bartlett, Physic. Rev. 37, 507 [1931].

⁶ W. E. Bleich u. J. E. Mayer, J. chem. Physics 2, 252 [1934].

⁷ A. L. Sklar, J. chem. Physics 6, 645 [1938]. A. L. Sklar u. R. H. Lyddane, J. chem. Physics 7, 374 [1939].

⁸ P. J. Wheatley u. J. W. Linnett, Trans. Faraday Soc. 45, 897 [1949].

^{9a} R. G. Parr u. B. L. Crawford, J. chem. Physics 16, 1049 [1948].

^{9b} J. O. Hirschfelder u. J. W. Linnett, J. chem. Physics 18, 130 [1950].

¹⁰ M. Kotany, A. Amemiya u. T. Simose, Proc. physico-math. Soc. Japan 20, Extra-Nr. 1 [1938]; 22, Extra-Nr. 1 [1940].



Parameters α , einer Funktion des Kernabstandes (s. u.), auszeichnen, blieben merkwürdigerweise in der Literatur völlig unberücksichtigt. Wir haben die Werte der Hilfsintegrale sowohl mit den Werten in der Literatur, soweit sie vorhanden sind, verglichen, als auch z. Tl. selbst nachgerechnet und ihre Richtigkeit bestätigen können. Außerdem wurden sorgfältige Vergleiche der mit Hilfe dieser Tabellen berechneten Austausch- und anderer Wechselwirkungsintegrale mit den bekannten Integralwerten der Literatur angestellt, die fast immer eine gute Übereinstimmung ergaben. Die in einigen Fällen auftretenden Abweichungen halten sich im Rahmen der zu erwartenden rechnerischen Ungenauigkeiten und Druckfehler. Die japanischen Tabellen¹⁰, die unseren Berechnungen zugrunde gelegt sind, dürfen somit als sehr zuverlässig anzusehen sein, insbesondere auch deswegen, weil ein ausführliches Druckfehlerverzeichnis viele Errata beseitigt.

Die Wechselwirkungsintegrale, wie sie unten in den Gln. (4a) bis (4f) definiert werden, sind in vielen Fällen infolge der Transformation auf elliptische Koordinaten (das sind die dem Problem angepaßten Koordinaten) komplizierte Linearkombinationen jener in¹⁰ tabellierten Hilfsintegrale. Diese Linearkombinationen sind großenteils ebenfalls in¹⁰ berechnet worden. Wir haben sie alle nachgerechnet und nötigenfalls korrigiert. Darüber hinaus wurde eine Anzahl neu berechnet. Sie alle sind in Tab. 1 zusammengestellt. Diese Tabelle enthält somit sämtliche Wechselwirkungsintegrale mit 2s- und 2p-Funktionen. Nur bei den Ionenintegralen wurden lediglich diejenigen angegeben, die bei der Berechnung des N_2 -Moleküls¹¹ auftreten.

Die Zahlenwerte der Tab. 2 sind diejenigen, die wir auf Grund unserer Rechnungen und Kontrollen für die zuverlässigsten halten¹². Der Vollständigkeit halber wurden in diese Tabelle auch solche Integrale aufgenommen, die schon in der Literatur vorhanden sind.

Definition und Integrationsweg der Wechselwirkungsintegrale

Die Theorien der chemischen Bindung führen auf Integrale der Form:

$$(\psi | H | \psi) = \int \psi^* H \psi d\tau,$$

worin H der Hamilton-Operator und ψ eine Näherung der Eigenfunktion des betrachteten Systems sind. Wir setzen im folgenden voraus, daß dieses System ein zweiatomiges Molekül vom Typ A_2 sei

und daß die wechselwirkenden Elektronen der beiden Atome 2s- bzw. 2p-Elektronen sind. Die angenäherten Moleküleigenfunktionen ψ , die charakteristisch für die einzelnen Theorien sind, werden — wenn nicht mit numerischen Eigenfunktionen gerechnet wird — aus Linearkombinationen von Produkten der Elektroneneigenfunktionen aufgebaut, worin letztere Wasserstofffunktionen mit geeignet gewählten Parametern sind.

Als 2s-Eigenfunktion kommen zwei Funktionen in Frage, einmal die richtige H -Eigenfunktion:

$$\psi_{2sH} = \frac{\delta^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (1 - \delta r) e^{-\delta r} \quad \text{mit } \delta = Z/2a_0 \quad (1a)$$

und zweitens die knotenlose, von Slater¹³ eingeführte Eigenfunktion

$$\psi_{2sSl} = \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{3\pi}} r e^{-\delta r}. \quad (1b)$$

Die 2p-Eigenfunktionen können entweder als

$$\begin{aligned} \psi_{2pz} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{\pi}} r e^{-\delta r} \cos \vartheta, \\ \psi_{2px} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{\pi}} r e^{-\delta r} \sin \vartheta \cos \varphi, \\ \psi_{2py} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{\pi}} r e^{-\delta r} \sin \vartheta \sin \varphi, \end{aligned} \quad (2a)$$

oder als

$$\begin{aligned} \psi_{2p_0} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{\pi}} r e^{-\delta r} \cos \vartheta = \psi_{2pz}, \\ \psi_{2p_+} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{2\pi}} r e^{-\delta r} \sin \vartheta e^{+i\varphi} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2px} + i\psi_{2py}), \\ \psi_{2p_-} &= \frac{\delta^{5/2}}{\sqrt{2\pi}} r e^{-\delta r} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2px} - i\psi_{2py}) \end{aligned} \quad (2b)$$

gewählt werden.

¹¹ Vgl. H. J. Kopineck, Z. Naturforschg. (in Vorbereitung). Weitere Ionenintegrale sind in Arbeit.

¹² Interessenten können eine ausführlichere Lichtpause unserer Originaltabellen 1 und 2 erhalten, in der auch die Werte aller anderen Autoren, soweit sie uns bekannt sind, eingetragen sind, sei es, daß sie mit unseren Ergebnissen übereinstimmen, sei es, daß sie abweichen. Wir wären dankbar, wenn wir auf Irrtümer in unseren Tabellen sowie auf etwa übersehene Werte in der Literatur hingewiesen würden.

¹³ J. C. Slater, Physic. Rev. 36, 57 [1930].

1.

$$S_{\alpha\beta} = \int a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}(1) d\tau_1 \quad \text{s. Gl. (4a)}$$

$$S_{s's'} = e^{-\alpha} \left[1 + \alpha + \frac{1}{3} \alpha^2 + \frac{1}{15} \alpha^4 \right]$$

$$S_{ss} = \frac{1}{24} \alpha^5 \left[\frac{1}{5} A_0(\alpha) - \frac{2}{3} A_2(\alpha) + A_4(\alpha) \right]$$

$$S_{s\sigma} = \frac{1}{12\sqrt{3}} \alpha^5 \left[-\frac{1}{5} A_1(\alpha) + A_3(\alpha) \right]$$

$$S_{\sigma\sigma} = \frac{1}{8} \alpha^5 \left[-\frac{1}{3} A_0(\alpha) + \frac{6}{5} A_2(\alpha) - \frac{1}{3} A_4(\alpha) \right]$$

$$S_{\pi\pi} = \frac{1}{24} \alpha^5 \left[\frac{1}{5} A_0(\alpha) - \frac{6}{5} A_2(\alpha) + A_4(\alpha) \right]$$

2.

$$J_{\alpha\beta} = \int \frac{a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}(1)}{r_{b1}} d\tau_1 \cdot e^2 \quad \text{s. Gl. (4b)}$$

$$J_{s's'} = \frac{e^{-\alpha}}{2} \left[\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha^2}{3} + \frac{\alpha^3}{6} \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$J_{ss} = \frac{1}{72} \alpha^4 \left[-A_1(\alpha) + 3 A_3(\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$J_{\sigma s} = \frac{1}{24\sqrt{3}} \alpha^4 \left[-A_0(\alpha) + 3 A_2(\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$J_{s\sigma} = \frac{1}{24\sqrt{3}} \alpha^4 \left[A_0(\alpha) + A_2(\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$J_{\sigma\sigma} = \frac{1}{24} \alpha^4 \left[3 A_1(\alpha) - A_3(\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$J_{\pi\pi} = \frac{1}{24} \alpha^4 \left[-A_1(\alpha) + A_3(\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

3.

$$K_{\alpha\beta} = \int \frac{a_{\alpha}^*(1) a_{\beta}(1)}{r_{b1}} d\tau_1 \cdot e^2 \quad \text{s. Gl. (4c)}$$

$$K_{s's'} = \left\{ \frac{1}{2\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \left[\frac{1}{\alpha} + \frac{3}{2} + \alpha + \alpha^2 \right] \right\} \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$K_{ss} = \frac{2}{3} \alpha^4 \left[\frac{4!}{(2\alpha)^5} + A_3(2\alpha) - A_4(2\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$K_{s\sigma} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \alpha^4 \left[\frac{5!}{(2\alpha)^6} + A_2(2\alpha) - A_5(2\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$K_{\sigma\sigma} = \frac{2}{15} \alpha^4 \left[\frac{5!}{(2\alpha)^5} + \frac{2 \cdot 6!}{(2\alpha)^7} + 2 A_1(2\alpha) + 5 A_3(2\alpha) - 5 A_4(2\alpha) - 2 A_6(2\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

$$K_{\pi\pi} = \frac{2}{15} \alpha^4 \left[\frac{5!}{(2\alpha)^5} - \frac{6!}{(2\alpha)^7} - A_1(2\alpha) + 5 A_3(2\alpha) - 5 A_4(2\alpha) + A_6(2\alpha) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

4.

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \int a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}^*(2) \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\delta}(2) d\tau_1 d\tau_2 e^2 \quad \text{s. Gl. (4d)}$$

$$C_{s's's's'} = \left\{ \frac{1}{2\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \left[\frac{1}{\alpha} + \frac{435}{256} + \frac{179}{128} \alpha + \frac{143}{192} \alpha^2 + \frac{7}{24} \alpha^3 + \frac{1}{12} \alpha^4 + \frac{1}{120} \alpha^5 + \frac{1}{140} \alpha^6 \right] \right\} \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right)$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale.

$$\begin{aligned}
C_{ssss} &= \left\{ \frac{1}{2\alpha} - \frac{e^{-2\alpha}}{2} \left[\frac{1}{\alpha} + \frac{419}{256} + \frac{163}{128}\alpha + \frac{119}{192}\alpha^2 + \frac{5}{24}\alpha^3 + \frac{1}{20}\alpha^4 + \frac{1}{120}\alpha^5 + \frac{1}{1260}\alpha^6 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\sigma sss} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ \frac{5}{2\alpha^2} - e^{-2\alpha} \left[\frac{5}{2\alpha^2} + \frac{5}{\alpha} + 5 + \frac{417}{128}\alpha + \frac{97}{64}\alpha^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{25}{48}\alpha^3 + \frac{19}{144}\alpha^4 + \frac{59}{2520}\alpha^5 + \frac{1}{420}\alpha^6 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\sigma\sigma ss} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{25}{6\alpha^3} - e^{-2\alpha} \left[\frac{25}{6\alpha^3} + \frac{25}{3\alpha^2} + \frac{25}{3\alpha} + \frac{12985}{2304} + \frac{3385}{1152}\alpha \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{719}{576}\alpha^2 + \frac{31}{72}\alpha^3 + \frac{29}{252}\alpha^4 + \frac{11}{504}\alpha^5 + \frac{1}{420}\alpha^6 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\sigma\sigma\sigma s} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ \frac{45}{2\alpha^4} + \frac{5}{2\alpha^2} - e^{-2\alpha} \left[\frac{45}{2\alpha^4} + \frac{45}{\alpha^3} + \frac{95}{2\alpha^2} + \frac{35}{\alpha} + 20 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{3571}{384}\alpha + \frac{691}{192}\alpha^2 + \frac{391}{336}\alpha^3 + \frac{103}{336}\alpha^4 + \frac{17}{280}\alpha^5 + \frac{1}{140}\alpha^6 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\pi s \pi s} &= \frac{1}{2} \left\{ -\frac{3}{2\alpha^3} + \frac{1}{\alpha} + e^{-2\alpha} \left[\frac{3}{2\alpha^3} + \frac{3}{\alpha^2} + \frac{2}{\alpha} + \frac{93}{256} - \frac{35}{128}\alpha \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{71}{320}\alpha^2 - \frac{19}{240}\alpha^3 - \frac{9}{560}\alpha^4 - \frac{1}{630}\alpha^5 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\sigma s \sigma s} &= 3 C_{ssss} - 2 C_{\pi s \pi s} \\
C_{\pi \pi ss} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{25}{12\alpha^3} - e^{-2\alpha} \left[\frac{25}{12\alpha^3} + \frac{25}{6\alpha^2} + \frac{25}{6\alpha} + \frac{6215}{2304} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1415}{1152}\alpha + \frac{29}{72}\alpha^2 + \frac{3}{32}\alpha^3 + \frac{73}{5040}\alpha^4 + \frac{1}{849}\alpha^5 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\pi \pi \sigma s} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ \frac{45}{4\alpha^4} - e^{-2\alpha} \left[\frac{45}{4\alpha^4} + \frac{45}{2\alpha^3} + \frac{45}{2\alpha^2} + \frac{15}{\alpha} + \frac{15}{2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{95}{32}\alpha + \frac{15}{16}\alpha^2 + \frac{51}{224}\alpha^3 + \frac{31}{336}\alpha^4 + \frac{1}{280}\alpha^5 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\pi \sigma \pi s} &= \frac{3}{2} C_{\sigma sss} - \frac{1}{2} C_{\sigma\sigma\sigma s} \\
C_{\pi \pi \sigma\sigma} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{27}{\alpha^5} - e^{-2\alpha} \left[\frac{27}{\alpha^5} + \frac{54}{\alpha^4} + \frac{54}{\alpha^3} + \frac{36}{\alpha^2} + \frac{18}{\alpha} + \frac{9243}{1280} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1563}{640}\alpha + \frac{201}{280}\alpha^2 + \frac{201}{1120}\alpha^3 + \frac{19}{560}\alpha^4 + \frac{1}{280}\alpha^5 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
\left(-\frac{1}{2} C_{\pi \pi \pi \pi} + \frac{3}{2} C_{\pi \pi' \pi \pi'} \right) &= C_1 = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{3}{\alpha^3} + \frac{1}{\alpha} + e^{-2\alpha} \left[\frac{3}{\alpha^3} + \frac{6}{\alpha^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{5}{\alpha} + \frac{149}{64} + \frac{21}{32}\alpha + \frac{13}{120}\alpha^2 + \frac{1}{120}\alpha^3 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\pi \sigma \pi \sigma} &= C_1 + \frac{1}{2} \left\{ -\frac{27}{\alpha^5} + \frac{9}{2\alpha^3} + e^{-2\alpha} \left[\frac{27}{\alpha^5} + \frac{54}{\alpha^4} + \frac{99}{2\alpha^3} + \frac{27}{\alpha^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{9}{\alpha} + \frac{1563}{1280} - \frac{357}{640}\alpha - \frac{1031}{2240}\alpha^2 - \frac{99}{560}\alpha^3 - \frac{23}{560}\alpha^4 - \frac{1}{210}\alpha^5 \right] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0} \right) \\
C_{\sigma\sigma\sigma\sigma} &= 3 C_{\sigma s \sigma s} - 2 C_{\pi \sigma \pi \sigma} \\
C_{\pi \pi \pi \pi} &= \frac{1}{4} (9 C_{\pi s \pi s} - 3 C_{\pi \sigma \pi \sigma} - 2 C_1) \\
C_{\pi \pi' \pi \pi'} &= \frac{1}{4} (3 C_{\pi s \pi s} - C_{\pi \sigma \pi \sigma} + 2 C_1) \\
C_{\pi \pi \pi' \pi'} &= \frac{1}{4} (3 C_{\pi s \pi s} - C_{\pi \sigma \pi \sigma} - 2 C_1)
\end{aligned}$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale (Fortsetzung).

$$5. \quad A_{\alpha\beta\gamma\delta} = \int b_{\alpha}^*(1) a_{\beta}^*(2) \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\delta}(2) d\tau_1 d\tau_2 \cdot e^2 \quad \text{s. Gl. (4e)}$$

$$\begin{aligned} A_{ssss} &= \frac{8}{405} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[\frac{9}{5} W_0(0,0) - 12 W_0(0,2) + 18 W_0(0,4) + 20 W_0(2,2) - 60 W_0(2,4) + 45 W_0(4,4) \right. \\ &\quad \left. + \frac{144}{49} W_2(0,0) - \frac{96}{7} W_2(0,2) + 16 W_2(2,2) + \frac{64}{245} W_4(0,0) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{s's's's'} &= \frac{8}{45} \left\{ \left(\frac{\alpha}{2}\right)^5 [5 W_0(0,0) - 30 W_0(0,2) + 45 W_0(2,2) + 4 W_2(0,0)] - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^6 [20 W_0(0,1) - 60 W_0(0,3) \right. \\ &\quad - 60 W_0(1,2) + 180 W_0(2,3) + 16 W_2(0,1)] + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^7 [-6 W_0(0,0) + 38 W_0(0,2) - 30 W_0(0,4) \\ &\quad + 20 W_0(1,1) - 120 W_0(1,3) - 60 W_0(2,2) + 90 W_0(2,4) + 180 W_0(3,3) - \frac{48}{7} W_2(0,0) \\ &\quad + 16 W_2(0,2) + 16 W_2(1,1)] - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^8 [-12 W_0(0,1) + 36 W_0(0,3) + 40 W_0(1,2) - 60 W_0(1,4) \\ &\quad - 120 W_0(2,3) + 180 W_0(3,4) - \frac{96}{7} W_2(0,1) + 32 W_2(1,2)] \left\} \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) + 9 A_{ssss} \\ A_{\sigma sss} &= \frac{16}{135 \sqrt{3}} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[-\frac{3}{5} W_0(0,1) + 3 W_0(0,3) + 2 W_0(1,2) - 3 W_0(1,4) - 10 W_0(2,3) + 15 W_0(3,4) \right. \\ &\quad \left. - \frac{12}{49} W_2(0,1) - \frac{12}{7} W_2(0,3) + \frac{4}{7} W_2(1,2) + 4 W_2(2,3) + \frac{32}{245} W_4(0,1) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{\sigma s \sigma s} &= \frac{8}{45} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[-W_0(0,0) + \frac{104}{15} W_0(0,2) - 6 W_0(0,4) - 12 W_0(2,2) + \frac{64}{3} W_0(2,4) - 5 W_0(4,4) \right. \\ &\quad \left. - \frac{8}{7} W_2(0,0) + \frac{536}{147} W_2(0,2) - \frac{8}{7} W_2(0,4) - \frac{16}{7} W_2(2,2) + \frac{8}{3} W_2(2,4) + \frac{64}{735} W_4(0,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{\sigma \sigma ss} &= \frac{8}{135} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[\frac{4}{5} W_0(1,1) - 8 W_0(1,3) + 20 W_0(3,3) + \frac{4}{49} W_2(1,1) + \frac{8}{7} W_2(1,3) + 4 W_2(3,3) \right. \\ &\quad + \frac{64}{245} W_4(1,1) - \frac{27}{5} W_1(0,0) + \frac{144}{5} W_1(0,2) - 18 W_1(0,4) - \frac{192}{5} W_1(2,2) + 48 W_1(2,4) \\ &\quad \left. - 15 W_1(4,4) - \frac{36}{35} W_3(0,0) + \frac{72}{35} W_3(0,2) - \frac{36}{35} W_3(2,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{\sigma s s \sigma} &= \frac{8}{135} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[\frac{4}{5} W_0(1,1) - 8 W_0(1,3) + 20 W_0(3,3) + \frac{4}{49} W_2(1,1) + \frac{8}{7} W_2(1,3) + 4 W_2(3,3) \right. \\ &\quad + \frac{64}{245} W_4(1,1) + \frac{27}{5} W_1(0,0) - \frac{144}{5} W_1(0,2) + 18 W_1(0,4) + \frac{192}{5} W_1(2,2) - 48 W_1(2,4) \\ &\quad \left. + 15 W_1(4,4) + \frac{36}{35} W_3(0,0) - \frac{72}{35} W_3(0,2) + \frac{36}{35} W_3(2,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{\sigma \sigma \sigma s} &= \frac{16}{45 \sqrt{3}} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[W_0(0,1) - 5 W_0(0,3) - \frac{18}{5} W_0(1,2) + W_0(1,4) + 18 W_0(2,3) - 5 W_0(3,4) \right. \\ &\quad + \frac{2}{7} W_2(0,1) + 2 W_2(0,3) - \frac{12}{49} W_2(1,2) + \frac{2}{7} W_2(1,4) - \frac{12}{7} W_2(2,3) + 2 W_2(3,4) \\ &\quad \left. + \frac{32}{245} W_4(1,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \\ A_{\pi s \pi s} &= \frac{8}{135} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left[\frac{3}{5} W_0(0,0) - \frac{28}{5} W_0(0,2) + 6 W_0(0,4) + 12 W_0(2,2) - 28 W_0(2,4) + 15 W_0(4,4) \right. \\ &\quad + \frac{12}{49} W_2(0,0) + \frac{44}{49} W_2(0,2) - \frac{12}{7} W_2(0,4) - \frac{24}{7} W_2(2,2) + 4 W_2(2,4) - \frac{32}{245} W_4(0,0) \\ &\quad \left. + \frac{32}{245} W_4(0,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0}\right) \end{aligned}$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale (Fortsetzung).

$$\begin{aligned}
A_{\pi\pi ss} &= \frac{4}{45} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(1,1) + 2 W_1^1(1,3) - 5 W_1^1(3,3) - \frac{4}{105} W_3^1(1,1) + \frac{3}{49} W_2^1(0,0) \right. \\
&\quad \left. - \frac{2}{7} W_2^1(0,2) + \frac{1}{3} W_2^1(2,2) + \frac{4}{735} W_4^1(0,0) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi ss \pi} &= \frac{4}{45} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(1,1) + 2 W_1^1(1,3) - 5 W_1^1(3,3) - \frac{4}{105} W_3^1(1,1) - \frac{3}{49} W_2^1(0,0) + \frac{2}{7} W_2^1(0,2) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3} W_2^1(2,2) - \frac{4}{735} W_4^1(0,0) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\sigma\pi s} &= \frac{16}{45 \sqrt{3}} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_0(0,1) + W_0(0,3) + \frac{6}{5} W_0(1,2) - W_0(1,4) - 6 W_0(2,3) + 5 W_0(3,4) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{49} W_2(0,1) - \frac{1}{7} W_2(0,3) - \frac{6}{49} W_2(1,2) + \frac{1}{7} W_2(1,4) - \frac{6}{7} W_2(2,3) + W_2(3,4) - \frac{16}{245} W_4(0,1) \right. \\
&\quad \left. + \frac{16}{245} W_4(1,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\pi\sigma s} &= \frac{4}{15 \sqrt{3}} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(0,1) + W_1^1(0,3) + W_1^1(1,2) - 5 W_1^1(2,3) - \frac{4}{105} W_3^1(0,1) + \frac{3}{49} W_2^1(0,1) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{7} W_2^1(0,3) - \frac{1}{7} W_2^1(1,2) + \frac{1}{3} W_2^1(2,3) + \frac{4}{735} W_4^1(0,1) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\sigma s \pi} &= \frac{4}{15 \sqrt{3}} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(0,1) + W_1^1(0,3) + W_1^1(1,2) - 5 W_1^1(2,3) - \frac{4}{105} W_3^1(0,1) \right. \\
&\quad \left. - \frac{3}{49} W_2^1(0,1) + \frac{1}{7} W_2^1(0,3) + \frac{1}{7} W_2^1(1,2) - \frac{1}{3} W_2^1(2,3) - \frac{4}{735} W_4^1(0,1) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\sigma\sigma\sigma\sigma} &= \frac{8}{45} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[5 W_0(0,0) - 36 W_0(0,2) + 10 W_0(0,4) + \frac{324}{5} W_0(2,2) - 36 W_0(2,4) + 5 W_0(4,4) + 4 W_2(0,0) \right. \\
&\quad \left. - \frac{48}{7} W_2(0,2) + 8 W_2(0,4) + \frac{144}{49} W_2(2,2) - \frac{48}{7} W_2(2,4) + 4 W_2(4,4) + \frac{64}{245} W_4(2,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\pi\sigma\sigma} &= \frac{4}{15} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(0,0) + 2 W_1^1(0,2) - 5 W_1^1(2,2) + \frac{3}{49} W_2^1(1,1) - \frac{2}{7} W_2^1(1,3) + \frac{1}{3} W_2^1(3,3) \right. \\
&\quad \left. - \frac{4}{105} W_3^1(0,0) + \frac{4}{735} W_4^1(1,1) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\sigma\sigma\pi} &= \frac{4}{15} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-\frac{1}{5} W_1^1(0,0) + 2 W_1^1(0,2) - 5 W_1^1(2,2) - \frac{3}{49} W_2^1(1,1) + \frac{2}{7} W_2^1(1,3) - \frac{1}{3} W_2^1(3,3) \right. \\
&\quad \left. - \frac{4}{105} W_3^1(0,0) - \frac{4}{735} W_4^1(1,1) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\sigma\pi\sigma} &= \frac{8}{45} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[-W_0(0,0) + \frac{48}{5} W_0(0,2) - 6 W_0(0,4) - \frac{108}{5} W_0(2,2) + 24 W_0(2,4) - 5 W_0(4,4) \right. \\
&\quad \left. - \frac{2}{7} W_2(0,0) - \frac{72}{49} W_2(0,2) + \frac{12}{7} W_2(0,4) + \frac{72}{49} W_2(2,2) - \frac{24}{7} W_2(2,4) + 2 W_2(4,4) - \frac{32}{245} W_4(0,2) \right. \\
&\quad \left. + \frac{32}{245} W_4(2,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\pi\pi'\pi'} &= \frac{1}{2205} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[W_2^2(0,0) - 14 W_2^2(0,2) + 49 W_2^2(2,2) + \frac{4}{45} W_4^2(0,0) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) \\
A_{\pi\pi\pi\pi} &= \frac{8}{45} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^9 \left[\frac{1}{5} W_0(0,0) - \frac{12}{5} W_0(0,2) + 2 W_0(0,4) + \frac{36}{5} W_0(2,2) - 12 W_0(2,4) + 5 W_0(4,4) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{49} W_2(0,0) + \frac{12}{49} W_2(0,2) - \frac{2}{7} W_2(0,4) + \frac{36}{49} W_2(2,2) - \frac{12}{7} W_2(2,4) + W_2(4,4) + \frac{16}{245} W_4(0,0) \right. \\
&\quad \left. - \frac{32}{245} W_4(0,2) + \frac{16}{245} W_4(2,2) \right] \left(\frac{Z e^2}{a_0} \right) + A_{\pi\pi\pi'\pi'} \\
A_{\pi\pi'\pi\pi} &= A_{\pi\pi\pi\pi} - 2 A_{\pi\pi\pi'\pi'}
\end{aligned}$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale (Fortsetzung).

$$6. \quad L_{\alpha\beta\gamma\bar{\delta}} = \int a_{\alpha}^*(1) a_{\beta}^*(2) \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\bar{\delta}}(2) d\tau_1 d\tau_2 \cdot e^2 \quad \text{s. Gl. (4f)}$$

$$L_{\sigma\sigma\sigma\bar{\sigma}} = \frac{4}{105} \left(\frac{\sigma}{2}\right)^9 \left\{ [G_0(0) - G_0(4)] [-35 W_0(0,2) + 126 W_0(2,2) - 35 W_0(2,4)] \right. \\ + G_0(1) [-70 W_0(0,3) + 252 W_0(2,3) - 70 W_0(3,4)] \\ + G_0(2) [35 W_0(0,0) - 126 W_0(0,2) + 126 W_0(2,4) - 35 W_0(4,4)] \\ + G_0(3) [70 W_0(0,1) - 252 W_0(1,2) + 70 W_0(1,4)] \\ + [G_2(0) - G_2(4)] [-70 W_2(0,2) + 60 W_2(2,2) - 70 W_2(2,4)] \\ + G_2(1) [-140 W_2(0,3) + 120 W_2(2,3) - 140 W_2(3,4)] \\ + G_2(2) [70 W_2(0,0) - 60 W_2(0,2) + 60 W_2(2,4) - 70 W_2(4,4)] \\ + G_2(3) [140 W_2(0,1) - 120 W_2(1,2) + 140 W_2(1,4)] \\ + [G_4(0) - G_4(4)] \cdot 24 W_4(2,2) \\ + 48 G_4(1) \cdot W_4(2,3) \\ + 24 G_4(2) [-W_4(0,2) + W_4(2,4)] \\ \left. - 48 G_4(3) \cdot W_4(1,2) \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0}\right) \\ L_{\pi\sigma\sigma\bar{\sigma}} = \frac{2}{105} \left(\frac{\sigma}{2}\right)^9 \left\{ G_0(0) [35 W_0(0,2) - 35 W_0(0,4) - 126 W_0(2,2) + 161 W_0(2,4) - 35 W_0(4,4)] \right. \\ + G_0(2) [-35 W_0(0,0) + 126 W_0(0,2) - 126 W_0(2,4) + 35 W_0(4,4)] \\ + G_0(4) [35 W_0(0,0) - 161 W_0(0,2) + 35 W_0(0,4) + 126 W_0(2,2) - 35 W_0(2,4)] \\ + G_2(0) [70 W_2(0,2) - 70 W_2(0,4) - 60 W_2(2,2) + 130 W_2(2,4) - 70 W_2(4,4)] \\ + G_2(2) [-70 W_2(0,0) + 60 W_2(0,2) - 60 W_2(2,4) + 70 W_2(4,4)] \\ + G_2(4) [70 W_2(0,0) - 130 W_2(0,2) + 70 W_2(0,4) + 60 W_2(2,2) - 70 W_2(2,4)] \\ + 24 G_4(0) [-W_4(2,2) + W_4(2,4)] \\ + 24 G_4(2) [W_4(0,2) - W_4(2,4)] \\ \left. + 24 G_4(4) [-W_4(0,2) + W_4(2,2)] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0}\right)$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale (Fortsetzung).

Da es möglich ist, Säkularprobleme nach resultierendem Bahndrehimpuls auszureduzieren¹⁴, ist es oft zweckmäßig, als 2p-Eigenfunktionen die Funktionen (2b) zu wählen.

Unsere unten definierten Wechselwirkungsintegrale (4a) bis (4f) werden mit den Funktionen (2a) berechnet. Der Übergang von (2b) zu (2a) ist mit Hilfe des zweiten Teils von (2b) leicht zu bewerkstelligen.

Wir benennen in den Zweizentren-Wechselwirkungsintegralen (4a) bis (4f) die Elektronenfunktionen mit:

$$a_{\alpha}(1) \text{ bzw. } a_{\alpha}(2) \text{ bzw. } b_{\alpha}(1) \text{ bzw. } b_{\alpha}(2), \quad (3)$$

die die Eigenfunktionen der Elektronen 1 bzw. 2 am Atomkern a bzw. b darstellen sollen. Der Index α

gibt die Quantenzahlen des betr. Elektrons an. Wir setzen fest:

für $2s_H: \alpha = s'$	für $2p_x: \alpha = \pi$
„ $2s_{sl}: \alpha = s$	„ $2p_+: \alpha = +$
„ $2p_z: \alpha = \sigma$	„ $2p_y: \alpha = \pi'$
„ $2p_0: \alpha = 0$	„ $2p_-: \alpha = -$

Die Berechnung der Wechselwirkungsenergien als Funktion des Kernabstandes R führt auf folgende Zweizentrenintegraltypen:

¹⁴ s. z. B. L. Pauling u. E. B. Wilson, „Introduction to Quantum Mechanics“, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, London 1935, S. 235.

$$\begin{aligned}
L_{\sigma\pi\sigma\pi} &= \frac{2}{105} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left\{ [G_0(0) - G_0(4)] [+14W_0(0,2) - 84W_0(2,2) + 70W_0(2,4)] \right. \\
&\quad + G_0(1) [28W_0(0,3) - 168W_0(2,3) + 140W_0(3,4)] \\
&\quad + G_0(2) [-14W_0(0,0) + 84W_0(0,2) - 56W_0(0,4) - 84W_0(2,4) + 70W_0(4,4)] \\
&\quad + G_0(3) [-28W_0(0,1) + 168W_0(1,2) - 140W_0(1,4)] \\
&\quad + [G_2(0) - G_2(4)] [10W_2(0,2) + 60W_2(2,2) - 70W_2(2,4)] \\
&\quad + G_2(1) [20W_2(0,3) + 120W_2(2,3) - 140W_2(3,4)] \\
&\quad + G_2(2) [-10W_2(0,0) - 60W_2(0,2) + 80W_2(0,4) + 60W_2(2,4) - 70W_2(4,4)] \\
&\quad + G_2(3) [-20W_2(0,1) - 120W_2(1,2) + 140W_2(1,4)] \\
&\quad + 24[G_4(0) - G_4(4)] [-W_4(0,2) + W_4(2,2)] \\
&\quad + 48G_4(1) [-W_4(0,3) + W_4(2,3)] \\
&\quad + 24G_4(2) [W_4(0,0) - W_4(0,2) - W_4(0,4) + W_4(2,4)] \\
&\quad \left. + 48G_4(3) [W_4(0,1) - W_4(1,2)] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0}\right) \\
L_1 &= (L_{\pi\pi\pi\pi} - L_{\pi\pi\pi'\pi'}) = (L_{\pi\pi\pi\pi} + L_{\pi\pi\pi'\pi'}) \\
&= \frac{1}{105} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left\{ G_0(0) [-14W_0(0,2) + 14W_0(0,4) + 84W_0(2,2) - 154W_0(2,4) + 70W_0(4,4)] \right. \\
&\quad + G_0(2) [14W_0(0,0) - 84W_0(0,2) + 56W_0(0,4) + 84W_0(2,4) - 70W_0(4,4)] \\
&\quad + G_0(4) [-14W_0(0,0) + 98W_0(0,2) - 70W_0(0,4) - 84W_0(2,2) + 70W_0(2,4)] \\
&\quad + G_2(0) [-10W_2(0,2) + 10W_2(0,4) - 60W_2(2,2) + 130W_2(2,4) - 70W_2(4,4)] \\
&\quad + G_2(2) [10W_2(0,0) + 60W_2(0,2) - 80W_2(0,4) - 60W_2(2,4) + 70W_2(4,4)] \\
&\quad + G_2(4) [-10W_2(0,0) - 50W_2(0,2) + 70W_2(0,4) + 60W_2(2,2) - 70W_2(2,4)] \\
&\quad + 24G_4(0) [W_4(0,2) - W_4(0,4) - W_4(2,2) + W_4(2,4)] \\
&\quad + 24G_4(2) [-W_4(0,0) + W_4(0,2) + W_4(0,4) - W_4(2,4)] \\
&\quad \left. + 24G_4(4) [W_4(0,0) - 2W_4(0,2) + W_4(2,2)] \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0}\right) \\
L_{\pi\pi\pi'\pi'} &= \frac{1}{75600} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^9 \left\{ G_2^2(0) [-75W_2^2(0,2) + 525W_2^2(2,2)] \right. \\
&\quad + G_2^2(2) [75W_2^2(0,0) - 525W_2^2(0,2)] \\
&\quad \left. - 2G_4^2(0) \cdot W_4^2(0,2) + 2G_4^2(2) \cdot W_4^2(0,0) \right\} \left(\frac{Ze^2}{a_0}\right) \\
L_{\pi\pi\pi\pi} &= L_1 + L_{\pi\pi\pi'\pi'} \\
L_{\pi\pi'\pi'\pi'} &= L_1 - L_{\pi\pi\pi'\pi'}
\end{aligned}$$

Tab. 1. Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale (Fortsetzung).

Orthogonalitätsintegrale (Überlappintegrale):

$$S_{\alpha\beta} = \int a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}(1) d\tau_1 \quad (4a)$$

Übergangsintegrale:

$$\begin{aligned}
J_{\alpha\beta} &= e^2 \int \frac{a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}(1)}{r_{b1}} d\tau_1 \\
&= e^2 \int \frac{a_{\beta}^*(1) b_{\alpha}(1)}{r_{a1}} d\tau_1, \quad (4b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_{\alpha\beta} &= e^2 \int \frac{a_{\alpha}^*(1) a_{\beta}(1)}{r_{b1}} d\tau_1 \\
&= e^2 \int \frac{b_{\alpha}^*(1) b_{\beta}(1)}{r_{a1}} d\tau_1. \quad (4c)
\end{aligned}$$

Coulomb-Integrale:

$$\begin{aligned}
C_{\alpha\beta\gamma\delta} &= e^2 \int a_{\alpha}^*(1) b_{\beta}^*(2) \\
&\quad \cdot \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\delta}(2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (4d)
\end{aligned}$$

Austauschintegrale:

$$\begin{aligned}
A_{\alpha\beta\gamma\delta} &= e^2 \int b_{\alpha}^*(1) a_{\beta}^*(2) \\
&\quad \cdot \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\delta}(2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (4e)
\end{aligned}$$

Ionenintegrale:

$$\begin{aligned}
L_{\alpha\beta\gamma\delta} &= e^2 \int a_{\alpha}^*(1) a_{\beta}^*(2) \\
&\quad \cdot \frac{1}{r_{12}} a_{\gamma}(1) b_{\delta}(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (4f)
\end{aligned}$$

$\alpha =$	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0	5,5	6,0	6,5	7,0
$Ss's' =$	0,96287	0,88291	0,80048	0,73081	0,67207	0,61736	0,56129	0,50185	0,43978	0,37732	0,31708	0,26126	0,21136	0,16815
$Ss's'^2 =$	0,92712	0,77953	0,64077	0,53408	0,45168	0,38113	0,31505	0,25185	0,19341	0,14237	0,10054	0,68257 ⁻¹	0,44673 ⁻¹	0,28274 ⁻¹
$Sss =$	0,98645	0,94831	0,88973	0,81502	0,72907	0,63727	0,54485	0,45626	0,37479	0,30246	0,24016	0,18789	0,14502	0,11056
$Sss^2 =$	0,97308	0,89929	0,79162	0,66426	0,53154	0,40611	0,29686	0,20817	0,14047	0,91482 ⁻¹	0,57677 ⁻¹	0,35303 ⁻¹	0,21031 ⁻¹	0,12224 ⁻¹
$Ss\sigma =$	0,14299	0,27611	0,38647	0,46361	0,50354	0,50878	0,48613	0,44413	0,39108	0,33390	0,27771	0,22583	0,18007	0,14115
$Ss\sigma^2 =$	0,20446 ⁻¹	0,76237 ⁻¹	0,14936	0,21493	0,25355	0,25886	0,23632	0,19725	0,15294	0,11149	0,77123 ⁻¹	0,50999 ⁻¹	0,32425 ⁻¹	0,19923 ⁻¹
$S\sigma\sigma =$	-0,92749	-0,73576	-0,48252	-0,22556	-0,51294 ⁻²	0,15932	0,26485	0,31869	0,33257	0,31891	0,28863	0,25035	0,20987	0,17143
$S\sigma\sigma^2 =$	0,86024	0,54134	0,23283	0,50877 ⁻¹	0,26311 ⁻⁴	0,25383 ⁻¹	0,70146 ⁻¹	0,10156	0,11060	0,10170	0,83307 ⁻¹	0,62675 ⁻¹	0,44045 ⁻¹	0,29388 ⁻¹
$S\pi\pi =$	0,97550	0,90744	0,80885	0,69472	0,57802	0,46800	0,37017	0,28694	0,21857	0,16395	0,12134	0,88739 ⁻¹	0,64209 ⁻¹	0,46020 ⁻¹
$S\pi\pi^2 =$	0,95160	0,82345	0,65424	0,48264	0,33411	0,21902	0,13703	0,82335 ⁻¹	0,47773 ⁻¹	0,26880 ⁻¹	0,14723 ⁻¹	0,78746 ⁻²	0,41228 ⁻²	0,21178 ⁻²
$Sss Ss\sigma =$	0,14105	0,26184	0,34385	0,37785	0,36712	0,32423	0,26487	0,20264	0,14657	0,10099	0,66695 ⁻¹	0,42431 ⁻¹	0,26114 ⁻¹	0,15606 ⁻¹
$Sss S\sigma\sigma =$	-0,91492	-0,69773	-0,42931	-0,18384	-0,37397 ⁻²	0,10153	0,14430	0,14540	0,12464	0,96458 ⁻¹	0,69317 ⁻¹	0,47027 ⁻¹	0,30435 ⁻¹	0,18953 ⁻¹
$Sss S\pi\pi =$	0,96228	0,86053	0,71966	0,56621	0,42142	0,29824	0,20169	0,13092	0,81918 ⁻¹	0,49588 ⁻¹	0,29141 ⁻¹	0,16673 ⁻¹	0,93116 ⁻²	0,50880 ⁻²
$Ss\sigma S\sigma\sigma =$	-0,13262	-0,20315	-0,18648	-0,10457	-0,25829 ⁻²	0,81059 ⁻¹	0,12875	0,14154	0,13006	0,10648	0,80155 ⁻¹	0,56537 ⁻¹	0,37791 ⁻¹	0,24197 ⁻¹
$Ss\sigma S\pi\pi =$	0,13949	0,25055	0,31260	0,32208	0,29106	0,23811	0,17995	0,12744	0,85478 ⁻¹	0,54743 ⁻¹	0,33697 ⁻¹	0,20040 ⁻¹	0,11562 ⁻¹	0,64957 ⁻²
$S\sigma\sigma S\pi\pi =$	-0,90477	-0,66766	-0,39029	-0,15670	-0,29649 ⁻²	0,74562 ⁻¹	0,98040 ⁻¹	0,91442 ⁻¹	0,72690 ⁻¹	0,52285 ⁻¹	0,35022 ⁻¹	0,22216 ⁻¹	0,13476 ⁻¹	0,78892 ⁻²
$J_{ss} = Z e^2/a_0$	0,24640	0,23503	0,21616	0,19172	0,16446	0,13691	0,11104	0,88017 ⁻¹	0,68390 ⁻¹	0,52219 ⁻¹	0,39264 ⁻¹	0,29125 ⁻¹	0,21346 ⁻¹	0,15477 ⁻¹
$J_{\sigma s} = Z e^2/a_0$	0,69307 ⁻¹	0,12390	0,15700	0,16929	0,16538	0,15091	0,13094	0,10927	0,88480 ⁻¹	0,69699 ⁻¹	0,53801 ⁻¹	0,40787 ⁻¹	0,30444 ⁻¹	0,22419 ⁻¹
$J_{s\sigma} = Z e^2/a_0$	0,25534 ⁻¹	0,53099 ⁻¹	0,76489 ⁻¹	0,91158 ⁻¹	0,96265 ⁻¹	0,93420 ⁻¹	0,85175 ⁻¹	0,74022 ⁻¹	0,61933 ⁻¹	0,50248 ⁻¹	0,39743 ⁻¹	0,30769 ⁻¹	0,23391 ⁻¹	0,17505 ⁻¹
$J_{\sigma\sigma} = Z e^2/a_0$	-0,22113	-0,15328	-0,76701 ⁻¹	-0,11278 ⁻¹	0,35057 ⁻¹	0,62234 ⁻¹	0,73921 ⁻¹	0,74789 ⁻¹	0,69084 ⁻¹	0,60080 ⁻¹	0,50020 ⁻¹	0,40280 ⁻¹	0,31588 ⁻¹	0,24241 ⁻¹
$J_{\pi\pi} = Z e^2/a_0$	0,24008	0,21460	0,18129	0,14661	0,11458	0,87127 ⁻¹	0,64799 ⁻¹	0,47315 ⁻¹	0,34021 ⁻¹	0,24144 ⁻¹	0,16943 ⁻¹	0,11774 ⁻¹	0,81123 ⁻²	0,55473 ⁻²
$J_{s's'} = Z e^2/a_0$		0,15328		0,10150		0,87127 ⁻¹		0,71736 ⁻¹		0,52219 ⁻¹		0,34083 ⁻¹		0,20441 ⁻¹
$J_{s's'} Ss's' = Z e^2/a_0$		0,13533		0,74177 ⁻¹		0,53789 ⁻¹		0,36001 ⁻¹		0,19703 ⁻¹		0,89045 ⁻²		0,34372 ⁻²
$J_{ss} Sss = Z e^2/a_0$	0,24306	0,22288	0,19232	0,15626	0,11990	0,87249 ⁻¹	0,60500 ⁻¹	0,40159 ⁻¹	0,25632 ⁻¹	0,15794 ⁻¹	0,94296 ⁻²	0,54723 ⁻²	0,30956 ⁻²	0,17111 ⁻²
$J_{\sigma s} Ss\sigma = Z e^2/a_0$	0,99102 ⁻²	0,34210 ⁻¹	0,60676 ⁻¹	0,78485 ⁻¹	0,83275 ⁻¹	0,76780 ⁻¹	0,63654 ⁻¹	0,48530 ⁻¹	0,34603 ⁻¹	0,23272 ⁻¹	0,14941 ⁻¹	0,92109 ⁻²	0,54821 ⁻²	0,31644 ⁻²
$J_{s\sigma} Ss\sigma = Z e^2/a_0$	0,36511 ⁻²	0,14661 ⁻¹	0,29561 ⁻¹	0,42262 ⁻¹	0,48473 ⁻¹	0,47530 ⁻¹	0,41406 ⁻¹	0,32875 ⁻¹	0,24221 ⁻¹	0,16778 ⁻¹	0,11037 ⁻¹	0,69486 ⁻²	0,42120 ⁻²	0,24708 ⁻²
$J_{\sigma\sigma} S\sigma\sigma = Z e^2/a_0$	0,20510	0,11278	0,37010 ⁻¹	0,25439 ⁻²	-0,17982 ⁻³	0,99151 ⁻²	0,19578	0,23834 ⁻¹	0,22975 ⁻¹	0,19160 ⁻¹	0,14437 ⁻¹	0,10084 ⁻¹	0,66294 ⁻²	0,41556 ⁻²
$J_{\pi\pi} S\pi\pi = Z e^2/a_0$	0,23420	0,19474	0,14664	0,10185	0,66230 ⁻¹	0,40775 ⁻¹	0,23987	0,13577 ⁻¹	0,74360 ⁻²	0,39584 ⁻²	0,20559 ⁻²	0,10448 ⁻²	0,52088 ⁻³	0,25529 ⁻³
$K_{s's'} = Z e^2/a_0$		0,21826		0,17674		0,14952		0,12135		0,99280 ⁻¹		0,83199 ⁻¹		0,71405 ⁻¹
$K_{ss} = Z e^2/a_0$	0,24891	0,24061	0,22339	0,20116	0,17816	0,15696	0,13859	0,12314	0,11031	0,99659 ⁻¹	0,90765 ⁻¹	0,83273 ⁻¹	0,76898 ⁻¹	0,71418 ⁻¹
$K_{s\sigma} = Z e^2/a_0$	0,45964 ⁻¹	0,77067 ⁻¹	0,87999 ⁻¹	0,84590 ⁻¹	0,74332 ⁻¹	0,62339 ⁻¹	0,51178 ⁻¹	0,41774 ⁻¹	0,34214 ⁻¹	0,28263 ⁻¹	0,23603 ⁻¹	0,19941 ⁻¹	0,17037 ⁻¹	0,14710 ⁻¹
$K_{\sigma\sigma} = Z e^2/a_0$	0,26217	0,27448	0,26815	0,24633	0,21783	0,18924	0,16380	0,14245	0,12503	0,11093	0,99476 ⁻¹	0,90091 ⁻¹	0,82308 ⁻¹	0,75770 ⁻¹
$K_{\pi\pi} = Z e^2/a_0$	0,24228	0,22367	0,20100	0,17857	0,15832	0,14082	0,12598	0,11348	0,10295	0,94023 ⁻¹	0,86409 ⁻¹	0,79864 ⁻¹	0,74193 ⁻¹	0,69242 ⁻¹
$C_{s's's's'} = Z e^2/a_0$		0,14590		0,13676		0,12355		0,10869		0,94241 ⁻¹		0,81471 ⁻¹		0,70876 ⁻¹
$C_{ssss} = Z e^2/a_0$		0,17537	0,16812	0,15891	0,14842	0,13736	0,12633	0,11581	0,10608	0,97289 ⁻¹	0,89474 ⁻¹	0,82586 ⁻¹	0,76540 ⁻¹	0,71235 ⁻¹
$C_{\sigma\sigma\sigma\sigma} = Z e^2/a_0$		0,20340 ⁻¹	0,27958 ⁻¹	0,33000 ⁻¹	0,35378 ⁻¹	0,35441 ⁻¹	0,33799 ⁻¹	0,31110 ⁻¹	0,27939 ⁻¹	0,24697 ⁻¹	0,21635 ⁻¹	0,18882 ⁻¹	0,16481 ⁻¹	0,14423 ⁻¹
$C_{\sigma\sigma\sigma s} = Z e^2/a_0$		-0,29633 ⁻¹	-0,19353 ⁻¹	-0,89421 ⁻²	-0,25369 ⁻³	0,58603 ⁻²	0,94078 ⁻²	0,10890 ⁻¹	0,10959 ⁻¹	0,10204 ⁻¹	0,90642 ⁻²	0,78240 ⁻²	0,66419 ⁻²	0,55917 ⁻²

Tab. 2. Werte der Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale.

($\alpha = \frac{Z}{2} \frac{R}{a_0}$ mit: Z = Kernladungszahl, R = Kernabstand in [Å], $a_0 = 0,5285$ Å; es bedeutet: $0,12345^{-2} = 0,12345 \cdot 10^{-2} = 0,0012345$).

$\alpha =$	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0	5,5	6,0	6,5	7,0
$Cosos = Ze^2/a_0$		0,17741	0,17238	0,16561	0,15710	0,14724	0,13655	0,12569	0,11514	0,10527	0,96342 ⁻¹	0,88398 ⁻¹	0,81414 ⁻¹	0,75307 ⁻¹
$Cososs = Ze^2/a_0$		0,11325 ⁻¹	0,18619 ⁻¹	0,25840 ⁻¹	0,31555 ⁻¹	0,34875 ⁻¹	0,35696 ⁻¹	0,34485 ⁻¹	0,31938 ⁻¹	0,28721 ⁻¹	0,25336 ⁻¹	0,22102 ⁻¹	0,19187 ⁻¹	0,16650 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,36488 ⁻¹	0,32529 ⁻¹	0,27915 ⁻¹	0,23214 ⁻¹	0,18841 ⁻¹	0,15030 ⁻¹	0,11864 ⁻¹	0,93214 ⁻²	0,73260 ⁻²	0,57822 ⁻²	0,45965 ⁻²	0,36871 ⁻²	0,29877 ⁻²
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,17435	0,16599	0,15556	0,14408	0,13242	0,12122	0,11087	0,10155	0,93298 ⁻¹	0,86040 ⁻¹	0,79680 ⁻¹	0,74103 ⁻¹	0,69199 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,57478 ⁻²	0,60439 ⁻²	0,60766 ⁻²	0,60755 ⁻²	0,58872 ⁻²	0,54315 ⁻²	0,47669 ⁻²	0,40105 ⁻²	0,32675 ⁻²	0,26036 ⁻²	0,20468 ⁻²	0,15988 ⁻²	0,12478 ⁻²
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,24848 ⁻¹	0,32628 ⁻¹	0,36580 ⁻¹	0,37290 ⁻¹	0,35724 ⁻¹	0,32850 ⁻¹	0,29422 ⁻¹	0,25940 ⁻¹	0,22685 ⁻¹	0,19784 ⁻¹	0,17272 ⁻¹	0,15128 ⁻¹	0,13310 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		-0,63317 ⁻²	-0,27659 ⁻²	0,26273 ⁻³	0,22471 ⁻²	0,31947 ⁻²	0,33731 ⁻²	0,30970 ⁻²	0,26189 ⁻²	0,21012 ⁻²	0,16293 ⁻²	0,12368 ⁻²	0,92779 ⁻³	0,69263 ⁻³
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,17252	0,16859	0,16192	0,15330	0,14223	0,13101	0,11997	0,10964	0,10028	0,91965 ⁻¹	0,84665 ⁻¹	0,78284 ⁻¹	0,72709 ⁻¹
$Cosss = Ze^2/a_0$		0,18719	0,17996	0,17299	0,16470	0,15726	0,14763	0,13713	0,12614	0,11525	0,10510	0,95864 ⁻¹	0,87674 ⁻¹	0,80503 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,18430	0,17223	0,15833	0,14385	0,13080	0,11866	0,10796	0,98634 ⁻¹	0,90590 ⁻¹	0,83621 ⁻¹	0,77567 ⁻¹	0,72280 ⁻¹	0,67635 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,16623	0,15715	0,14643	0,13509	0,12423	0,11399	0,10468	0,96376 ⁻¹	0,89024 ⁻¹	0,82534 ⁻¹	0,76808 ⁻¹	0,71745 ⁻¹	0,67253 ⁻¹
$Cpls = Ze^2/a_0$		0,90352 ⁻²	0,75401 ⁻²	0,59504 ⁻²	0,43803 ⁻²	0,32849 ⁻²	0,23348 ⁻²	0,16402 ⁻²	0,11289 ⁻²	0,78301 ⁻³	0,54347 ⁻³	0,37948 ⁻³	0,26753 ⁻³	0,19121 ⁻³
$A_{ssss} = Ze^2/a_0$		0,16266	0,14264	0,11908	0,94613 ⁻¹	0,71591 ⁻¹	0,51691 ⁻¹	0,35717 ⁻¹	0,23698 ⁻¹	0,15151 ⁻¹	0,93651 ⁻¹	0,56146 ⁻²	0,32743 ⁻²	0,18621 ⁻²
$A_{s's's's'} = Ze^2/a_0$		0,11128	0,74778 ⁻¹	0,74778 ⁻¹	0,54493 ⁻¹	0,37317 ⁻¹	0,23717 ⁻¹	0,15151 ⁻¹	0,93651 ⁻¹	0,56146 ⁻²	0,32743 ⁻²	0,18621 ⁻²	0,11868 ⁻²	0,07121 ⁻²
$A_{ssss} = Ze^2/a_0$		0,52522 ⁻¹	0,68816 ⁻¹	0,75163 ⁻¹	0,72275 ⁻¹	0,62913 ⁻¹	0,50478 ⁻¹	0,37827 ⁻¹	0,26747 ⁻¹	0,17991 ⁻¹	0,11588 ⁻¹	0,71872 ⁻²	0,34811 ⁻²	0,25112 ⁻²
$A_{ssos} = Ze^2/a_0$		-0,11837	-0,63872 ⁻¹	-0,16124 ⁻¹	0,16465 ⁻¹	0,32975 ⁻¹	0,37017 ⁻¹	0,33552 ⁻¹	0,26841 ⁻¹	0,19687 ⁻¹	0,13518 ⁻¹	0,88052 ⁻²	0,54906 ⁻²	0,32995 ⁻²
$A_{ssss} = Ze^2/a_0$		-0,13873 ⁻¹	0,10692 ⁻¹	0,32556 ⁻¹	0,46106 ⁻¹	0,50042 ⁻¹	0,46408 ⁻¹	0,38528 ⁻¹	0,29395 ⁻¹	0,20962 ⁻¹	0,14140 ⁻¹	0,91027 ⁻²	0,56302 ⁻²	0,33640 ⁻²
$A_{ssss} = Ze^2/a_0$		0,49642 ⁻¹	0,59081 ⁻¹	0,66544 ⁻¹	0,68434 ⁻¹	0,63923 ⁻¹	0,54648 ⁻¹	0,43233 ⁻¹	0,31994 ⁻¹	0,22358 ⁻¹	0,14871 ⁻¹	0,94770 ⁻²	0,58184 ⁻²	0,34570 ⁻²
$A_{ssos} = Ze^2/a_0$		-0,35265 ⁻¹	-0,25882 ⁻¹	-0,40709 ⁻²	0,18607 ⁻¹	0,34013 ⁻¹	0,39863 ⁻¹	0,38030 ⁻¹	0,31854 ⁻¹	0,24298 ⁻¹	0,17247 ⁻¹	0,11554 ⁻¹	0,73787 ⁻²	0,45260 ⁻²
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,15449	0,12754	0,98686 ⁻¹	0,72008 ⁻¹	0,49835 ⁻¹	0,32896 ⁻¹	0,20816 ⁻¹	0,12687 ⁻¹	0,74781 ⁻²	0,42784 ⁻²	0,23833 ⁻²	0,12963 ⁻²	0,69010 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,34576 ⁻¹	0,28725 ⁻¹	0,22270 ⁻¹	0,16208 ⁻¹	0,11149 ⁻¹	0,72962 ⁻²	0,45700 ⁻²	0,27542 ⁻²	0,16045 ⁻²	0,90713 ⁻³	0,49939 ⁻³	0,26847 ⁻³	0,14130 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,34973 ⁻¹	0,29381 ⁻¹	0,23054 ⁻¹	0,16977 ⁻¹	0,11805 ⁻¹	0,78014 ⁻²	0,49292 ⁻²	0,29938 ⁻²	0,17561 ⁻²	0,99894 ⁻³	0,55296 ⁻³	0,29874 ⁻³	0,15793 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,50452 ⁻¹	0,61812 ⁻¹	0,62162 ⁻¹	0,54602 ⁻¹	0,43309 ⁻¹	0,31692 ⁻¹	0,21720 ⁻¹	0,14099 ⁻¹	0,87425 ⁻²	0,52131 ⁻²	0,30054 ⁻²	0,16824 ⁻²	0,91774 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,13789 ⁻¹	0,16283 ⁻¹	0,15792 ⁻¹	0,13415 ⁻¹	0,10325 ⁻¹	0,73539 ⁻²	0,49192 ⁻²	0,31239 ⁻²	0,18989 ⁻²	0,11118 ⁻²	0,63034 ⁻³	0,34744 ⁻³	0,18682 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,16375 ⁻¹	0,19339 ⁻¹	0,18760 ⁻¹	0,15941 ⁻¹	0,12273 ⁻¹	0,87453 ⁻²	0,58527 ⁻²	0,37185 ⁻²	0,22614 ⁻²	0,13248 ⁻²	0,75148 ⁻³	0,41442 ⁻³	0,22295 ⁻³
$A_{ssss} = Ze^2/a_0$		0,10165	0,46807 ⁻¹	0,21997 ⁻¹	0,21658 ⁻¹	0,30799 ⁻¹	0,38031 ⁻¹	0,39273 ⁻¹	0,35305 ⁻¹	0,28476 ⁻¹	0,21212 ⁻¹	0,14711 ⁻¹	0,97087 ⁻²	0,60981 ⁻²
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		-0,21496 ⁻²	0,38857 ⁻²	0,77893 ⁻²	0,90721 ⁻²	0,84125 ⁻²	0,67886 ⁻²	0,49680 ⁻²	0,33763 ⁻²	0,21640 ⁻²	0,13222 ⁻²	0,77612 ⁻³	0,44040 ⁻³	0,24269 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,16047 ⁻¹	0,19045 ⁻¹	0,19590 ⁻¹	0,17703 ⁻¹	0,14383 ⁻¹	0,10718 ⁻¹	0,74438 ⁻²	0,48772 ⁻²	0,30433 ⁻²	0,18221 ⁻²	0,10528 ⁻²	0,58993 ⁻³	0,32179 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		-0,10694	-0,53649 ⁻¹	-0,12011 ⁻¹	0,12393 ⁻¹	0,22114 ⁻¹	0,22588 ⁻¹	0,18738 ⁻¹	0,13782 ⁻¹	0,93350 ⁻²	0,59442 ⁻²	0,36049 ⁻²	0,21008 ⁻²	0,11840 ⁻²
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,85008 ⁻²	0,65906 ⁻²	0,47147 ⁻²	0,31516 ⁻²	0,19899 ⁻²	0,11974 ⁻²	0,69167 ⁻³	0,38577 ⁻³	0,20875 ⁻³	0,11001 ⁻³	0,56402 ⁻⁴	0,28590 ⁻⁴	0,14167 ⁻⁴
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,15786	0,12263	0,88023 ⁻¹	0,59114 ⁻¹	0,37536 ⁻¹	0,22731 ⁻¹	0,13220 ⁻¹	0,74263 ⁻²	0,40481 ⁻²	0,21495 ⁻²	0,11150 ⁻²	0,56695 ⁻³	0,28301 ⁻³
$A_{pls} = Ze^2/a_0$		0,14086	0,10945	0,78594 ⁻¹	0,52811 ⁻¹	0,33556 ⁻¹	0,20336 ⁻¹	0,11837 ⁻¹	0,66548 ⁻²	0,36306 ⁻²	0,20395 ⁻²	0,10022 ⁻²	0,50977 ⁻³	0,25468 ⁻³
$L_{ssos} = Ze^2/a_0$		-0,13648	-0,80912 ⁻¹	-0,26739 ⁻¹	0,16713 ⁻¹	0,45847 ⁻¹	0,61348 ⁻¹	0,66101 ⁻¹	0,63585 ⁻¹	0,56893 ⁻¹	0,48348 ⁻¹	0,39546 ⁻¹	0,31371 ⁻¹	0,24299 ⁻¹
$L_{ssos} = Ze^2/a_0$		-0,11892	-0,68546 ⁻¹	-0,20929 ⁻¹	0,16266 ⁻¹	0,40666 ⁻¹	0,53367 ⁻¹	0,57026 ⁻¹	0,54735 ⁻¹	0,48966 ⁻¹	0,41685 ⁻¹	0,34184 ⁻¹	0,27216 ⁻¹	0,21156 ⁻¹
$L_{ssos} = Ze^2/a_0$		0,15668	0,13762	0,11576	0,93811 ⁻¹	0,73643 ⁻¹	0,56280 ⁻¹	0,42048 ⁻¹	0,30819 ⁻¹	0,22225 ⁻¹	0,15803 ⁻¹	0,11108 ⁻¹	0,77262 ⁻²	0,53252 ⁻²
$L_1 = Ze^2/a_0$		0,16401	0,14227	0,11811	0,94533 ⁻¹	0,73415 ⁻¹	0,55604 ⁻¹	0,41243 ⁻¹	0,30057 ⁻¹	0,21579 ⁻¹	0,15294 ⁻¹	0,10721 ⁻¹	0,74425 ⁻²	0,51230 ⁻²
$L_{pls} = Ze^2/a_0$		0,91141 ⁻²	0,76786 ⁻²	0,61377 ⁻²	0,46992 ⁻²	0,34767 ⁻²	0,24972 ⁻²	0,17540 ⁻²	0,12090 ⁻²	0,82054 ⁻³	0,54938 ⁻³	0,36436 ⁻³	0,23930 ⁻³	0,15595 ⁻³
$L_{pls} = Ze^2/a_0$		0,17312	0,14995	0,12425	0,99232 ⁻¹	0,76892 ⁻¹	0,58101 ⁻¹	0,42997 ⁻¹	0,31266 ⁻¹	0,22400 ⁻¹	0,15843 ⁻¹	0,11085 ⁻¹	0,76818 ⁻²	0,52790 ⁻²
$L_{pls} = Ze^2/a_0$		0,15490	0,13459	0,11197	0,89834 ⁻¹	0,69938 ⁻¹	0,53107 ⁻¹	0,39489 ⁻¹	0,28848 ⁻¹	0,20758 ⁻¹	0,14745 ⁻¹	0,10357 ⁻¹	0,72032 ⁻²	0,49670 ⁻²

Fortsetzung der Tab. 2. Werte der Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale.

($\alpha = \frac{Z}{2} \frac{R}{a_0}$ mit: Z = Kernladungszahl, R = Kernabstand in [Å], $a_0 = 0,5285$ Å; es bedeutet: $0,12345^{-2} = 0,12345 \cdot 10^{-2} = 0,0012345$).

Mit Ausnahme von (4e) und (4f) lassen sich die Integrale geschlossen berechnen, und zwar werden die Integrationen bei (4a), (4b) und (4c) in elliptischen Koordinaten (u, v, φ) durchgeführt, die durch

$$\begin{aligned} x &= \frac{R}{2} \mathfrak{S} \sin u \sin v \cos \varphi \\ y &= \frac{R}{2} \mathfrak{S} \sin u \sin v \sin \varphi \\ z &= \frac{R}{2} \mathfrak{C} \cos u \cos v \end{aligned} \quad (5)$$

mit den karthesischen Koordinaten verknüpft sind. Den Zusammenhang (Abb. 1) zwischen den Kugelkoordinaten (mit den Atomen a oder b als Nullpunkt) und den elliptischen Koordinaten (Nullpunkt im

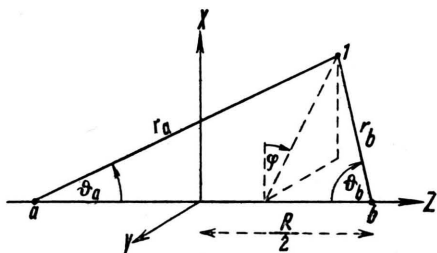


Abb. 1. Definition der Zweizentren-Koordinaten.

Mittelpunkt der Kernverbindungsachse) geben die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} r_a &= \frac{R}{2} (\mathfrak{C} \mathfrak{C} u + \cos v), \\ r_b &= \frac{R}{2} (\mathfrak{C} \mathfrak{C} u - \cos v), \\ r_a + r_b &= R \mathfrak{C} \mathfrak{C} u, \\ r_a - r_b &= R \cos v, \\ r_a \cos \vartheta_a &= \frac{R}{2} (1 + \mathfrak{C} \mathfrak{C} u \cos v), \\ r_b \cos \vartheta_b &= \frac{R}{2} (1 - \mathfrak{C} \mathfrak{C} u \cos v), \\ r_a \sin \vartheta_a \cos \varphi_a &= r_b \sin \vartheta_b \cos \varphi_b \\ &= \frac{R}{2} \mathfrak{S} \sin u \sin v \cos \varphi, \\ d\tau &= r^2 dr d(\cos \vartheta) d\varphi \\ &= \frac{R^3}{8} (\mathfrak{C} \mathfrak{C}^2 u - \cos^2 v) d(\mathfrak{C} \mathfrak{C} u) d(\cos v) d\varphi. \end{aligned} \quad (6)$$

Besonders hingewiesen sei auf die Definition von ϑ_a und ϑ_b . Diese hat den Vorteil, daß die Eigenfunktionen $b_a(i)$ die Bilder von $a_a(i)$ bei Spiegelung an der XY-Ebene sind, d. h. es ist bei Spiegelung

$$\begin{aligned} r_a &= r_b \\ \cos \vartheta_a &= \cos \vartheta_b \\ \sin \vartheta_a e^{\pm i \varphi_a} &= \sin \vartheta_b e^{\pm i \varphi_b}. \end{aligned} \quad (7)$$

Durch diese Definition von ϑ_a und ϑ_b sind eine Reihe von wichtigen Relationen zwischen den einzelnen Integraltypen bedingt [s. u. Gl. (12)]. Bei Bartlett, Bartlett u. Furry u. a. wird ϑ_b als Winkel zwischen der positiven Z-Achse und r_b definiert, wodurch diese Gleichheitsrelationen z. Tl. fortfallen.

Die Coulomb-Integrale (4d) werden zweckmäßigerweise unter Verwendung von Kugelkoordinaten und der Entwicklung von $1/r_{12}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{12}} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_l^l}{r_k^{l+1}} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} P_l^{|m|}(\cos \Theta_1) \\ &\quad \cdot P_l^{|m|}(\cos \Theta_2) e^{im(\varphi_1 - \varphi_2)} \end{aligned} \quad (8)$$

(mit: r_i = kleinerer Wert von r_1 und r_2 ,
 r_k = größerer Wert von r_1 und r_2)

und späterem Übergang zu elliptischen Koordinaten (6) integriert¹⁵.

In den Austauschintegralen und Ionenintegralen, (4e) und (4f), verwenden wir die Neumann-Entwicklung von $1/r_{12}$ in elliptischen Koordinaten¹⁶,

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{12}} &= \frac{2}{R} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \varepsilon_j (2k+1) \left[\frac{(k-j)!}{(k+j)!} \right]^2 \\ &\quad \cdot Q_{kj}(\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_+) P_{kj}(\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_-) P_{kj}(\cos v_1) \\ &\quad \cdot P_{kj}(\cos v_2) \cos j(\varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned} \quad (9)$$

mit $\varepsilon_0 = 1$; $\varepsilon_{1,2,3 \dots} = 2$,

$\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_+$ = größerer Wert von $\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_1$ und $\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_2$,
 $\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_-$ = kleinerer Wert von $\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_1$ und $\mathfrak{C} \mathfrak{C} u_2$.

Damit lassen sich bei den Austauschintegralen die Integrationen nach φ_1 , φ_2 , v_1 und v_2 durchführen.

¹⁵ Vgl. A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien, Bd. II, Vieweg-Verlag, Braunschweig 1944, S. 647.

¹⁶ C. Neumann, Theorie des Potentials, Teubner, Leipzig 1887.

Es bleiben Integrale der unten definierten Art $W_\tau^v(m, n; \alpha)$ übrig. Analog kann man bei den Ionenintegralen nach φ_1 , φ_2 und v_1 (bzw. v_2) integrieren. Außer $W_\tau^v(m, n; \alpha)$ bleiben Integrale der Form $G_\tau^v(m; \alpha)$ zurück. Diese beiden Integraltypen:

$$W_\tau^v(m, n; \alpha) = \int_1^\infty \int_1^\infty Q_\tau^v(\lambda_+) P_\tau^v(\lambda_-) e^{-\alpha(\lambda_1 + \lambda_2)} \cdot \lambda_1^m \lambda_2^n (\lambda_1^2 - 1)^{v/2} (\lambda_2^2 - 1)^{v/2} d\lambda_1 d\lambda_2, \quad (10a)$$

$$G_\tau^v(m; \alpha) = \int_{-1}^+ e^{-\alpha\mu} P_\tau^v(\mu) \mu^m (1 - \mu^2)^{v/2} d\mu \quad (10b)$$

mit $\lambda = \cosh u$; $\mu = \cos v$;

worin $\alpha = \frac{Z}{2} \frac{R}{a_0}$ ein Parameter ist, lassen sich nur numerisch auswerten. Man findet sie für $\alpha = 1$ bis $\alpha = 7$ in ¹⁰.

Da es numerisch einfacher ist, die Integrale (4a), (4b) und (4c) mit Hilfe der tabellierten Integrale:

$$A_n(\alpha) = \int_1^\infty e^{-\alpha\lambda} \lambda^n d\lambda \quad (11)$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{Z}{2} \frac{R}{a_0} \quad s.^{10}$$

zu berechnen, werden sie auf diese zurückgeführt.

Integral (4a) ist dimensionslos, (4b) bis (4f) haben

die Dimension $\frac{e^2}{a_0} Z$, worin Z die wählbare Kernladungszahl in den Eigenfunktionen ($Z = 2a_0 \delta$) ist.

Gemäß unserer Definition von ϑ_a und ϑ_b bestehen folgende Identitäten innerhalb der einzelnen Integraltypen (auf die bereits oben hingewiesen wurde):

$$S_{\alpha\beta} = S_{\beta\alpha};$$

$$K_{\alpha\beta} = K_{\beta\alpha};$$

$$\text{aber: } J_{\alpha\beta} \neq J_{\beta\alpha};$$

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = C_{\gamma\beta\alpha\delta} = C_{\alpha\delta\gamma\beta} = C_{\gamma\delta\alpha\beta} \quad (12)$$

$$= C_{\delta\gamma\beta\alpha} = C_{\delta\alpha\beta\gamma} = C_{\beta\gamma\delta\alpha} = C_{\beta\alpha\delta\gamma};$$

$$A_{\alpha\beta\gamma\delta} = A_{\beta\alpha\delta\gamma} = A_{\gamma\delta\alpha\beta} = A_{\delta\gamma\beta\alpha};$$

$$L_{\alpha\beta\gamma\delta} = L_{\gamma\beta\alpha\delta}.$$

Die vollständigen Formeln für die Integrale sind in Tab. 1 zusammengestellt. Tab. 2 enthält die numerischen Werte.

Der Verf. möchte Hrn. Prof. Dr. K. Wirtz für die Anregung zu dieser Arbeit und die zahlreichen wertvollen Diskussionen und Hinweise herzlichst danken. Besonderer Dank gebührt auch Frl. Dr. E. Trefftz, die zu sämtlichen Integrationen Kontrollrechnungen durchführte, und der Rechengruppe der astro-physikalischen Abteilung des Max-Planck-Institutes für Physik für die Hilfe bei den zeitraubenden numerischen Auswertungen.

Quantenelektrodynamische Selbstenergie und exakte Lösungen der Schrödinger-Gleichung I*

Von H. SALECKER **

(Z. Naturforschg. 5a, 431—438 [1950]; eingegangen am 7. August 1950)

Im ersten Abschnitt wird über ein Verfahren zur Behandlung der Entartung in der Quantentheorie der Wellenfelder und insbesondere über den Einfluß der Entartung auf die Selbstenergie des Elektrons berichtet. Es ergibt sich dabei, daß die Behandlung der Entartung keine Änderung der früher erhaltenen Ergebnisse bedingt. Im zweiten und dritten Abschnitt wird die Herkunft der Selbstenergie-divergenz untersucht. Nach einer störungstheoretischen Behandlung im Abschnitt 2 wird mit Hilfe einiger einfacher Beispiele gezeigt, daß es keineswegs selbstverständlich ist, aus der Divergenz der zweiten Näherung auf die Divergenz des exakten Selbstenergieausdrucks zu schließen. Anschließend wird die Frage nach dem Ursprung der Divergenzschwierigkeiten in der Quantenelektrodynamik mit Hilfe einer exakten Methode dahingehend entschieden, daß diese aus den Grundlagen der Theorie stammen; d. h. die zugehörige Schrödinger-Gleichung besitzt in Strenge gar keine Lösung zu endlichen Energieeigenwerten. Diese Ergebnisse sind auch für die neue kovariante Formulierung von Tomonaga und Schwinger gültig.

Schon oft ist auf die Schwierigkeiten hingewiesen worden, die der Behandlung quantisierter Feldtheorien beim Vorhandensein von Wechselwirkungen-

gliedern entgegenstehen. Wegen der großen Kompliziertheit der zugehörigen Schrödinger-Glei-

* Gekürzte Diss. Tübingen 1949. Teil I und II.

** Jetzt am Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart.