

INTEGRALTAFELN ZUR QUANTENCHEMIE
ZWEITER BAND

INTEGRALTAFELN ZUR QUANTENCHEMIE

VON

DR. H. PREUSS
MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK
GÖTTINGEN

ZWEITER BAND



SPRINGER-VERLAG
BERLIN · GÖTTINGEN · HEIDELBERG

1957

ISBN-13: 978-3-642-94709-4 e-ISBN-13: 978-3-642-94708-7
DOI: 10.1007/978-3-642-94708-7

ALLE RECHTE, INSBESONDERE DAS DER ÜBERSETZUNG IN FREMDE SPRACHEN, VORBEHALTEN
OHNE AUSDRÜCKLICHE GENEHMIGUNG DES VERLAGES IST ES AUCH NICHT GESTATTET,
DIESES BUCH ODER TEILE DARAUS AUF PHOTOMECHANISCHEM WEGE
(PHOTOKOPIE, MIKROKOPIE) ZU VERVIELFÄLTIGEN
© BY SPRINGER-VERLAG OHG., BERLIN/GÖTTINGEN/HEIDELBERG 1957
SOFTCOVER REPRINT OF THE HARDCOVER 1ST EDITION 1957

Vorwort

In Fortsetzung der Integraltafeln für quantenchemische Rechnungen sind seit 1955 am hiesigen Institut auch die heteronuklearen Einelektron-Integrale fertiggestellt worden.

Wie schon im ersten Band ist darüber hinaus wieder eine Übersicht über die bisher anderenorts schon publizierten Tabellen und Formelsammlungen aufgenommen worden, die zugleich einen Vergleich in tabellierten Bereichen und Bezeichnungsweisen untereinander und mit den hier vorliegenden gestattet.

In einem beabsichtigten dritten Band sollen diese Integraltafeln erweitert werden.

Die Anregung zu einem solchen Programm stammt von Herrn Professor K. WIRTZ, dem ich an dieser Stelle besonders herzlich für die Hilfe und Ratschläge bei der Entstehung des Manuskriptes und für das Entgegenkommen in den damit in Zusammenhang stehenden Fragen danken möchte.

Ein Teil der für diese Integrale erforderlichen Hilfsfunktionen mußte mit Hilfe der Göttinger elektronischen Rechenmaschine G 1 gerechnet werden. Es sei daher Herrn Professor L. BIERMANN für deren Bereitstellung herzlich gedankt.

Frau I. FUNKE hat den größten Teil der umfangreichen numerischen Rechnungen mit großer Sorgfalt durchgeführt und bei der Programmierung der Rechnungen für die G 1 wesentlich geholfen. Ihr sei für die Mitarbeit ganz besonderer Dank gesagt sowie auch für die Hilfe bei der Herstellung der Tabellen und beim Lesen der Korrekturen.

Bei der Durchführung der numerischen Rechnungen haben uns die Damen Frau R. GURTMANN, Frau H. MÖHRING, Frä. G. GÖRING, Frä. R. KIRCHNER und Frä. U. SILLER sehr geholfen. Ihnen allen sei für die Hilfe herzlich gedankt.

Nicht zuletzt danke ich Herrn Professor HEISENBERG besonders für die gebotenen Möglichkeiten und für das Interesse, das er diesen Arbeiten zuteil werden ließ.

Max-Planck-Institut für Physik
Göttingen, im Oktober 1957

H. Preuss

Inhaltsverzeichnis

Erster Teil

Bezeichnungen, Integralformeln und Literaturverzeichnis

	Seite
1.1 Einleitung und Bezeichnung der Integrale	1
1.2 Die Berechnung der Integrale	2
1.3 Übersicht über die bisher tabellierten Funktionen und Integrale einschließlich der im Teil 2 angegebenen (Fortsetzung des I. Bandes)	4
1.4 Literaturverzeichnis	14

Zweiter Teil

Tabellen

2.1 Hilfsfunktionen	16
2.2 Wechselwirkungsintegrale der K - und L -Schale mit verschiedenen Abschirmzahlen α, β in den (normierten) SLATER-Funktionen	24

Benutzungsanweisung

Im ersten Teil werden alle in diesem Band auftretenden Formeln und Gleichungen behandelt und numeriert. Treten Gleichungen auf, die schon im I. Band vorgekommen sind, so wird die Numerierung des ersten Bandes übernommen und mit „I“ versehen. Sonst entspricht das Prinzip der Durchzählung genau dem des I. Bandes.

Der zweite Teil enthält die Tabellen. Alle dort auftretenden Formeln sind schon im ersten Teil erwähnt und führen auch die im ersten Teil erhaltene Numerierung.

Erläuterungen

In diesem Band werden Integrale um maximal zwei Zentren behandelt, die als Index an Atomfunktionen oder Koordinaten sowie in den Integralen mit a und b bezeichnet werden. Ihr Abstand ist R in atomaren Einheiten (at. E.). Die Einelektronenfunktionen werden mit Φ bezeichnet, wobei die Unterscheidung beim Auftreten mehrerer durch oben angehängte Striche (Φ' Φ'' Φ''' usw.) angegeben wird. Atomfunktionen (hier insbesondere Slaterfunktionen) werden mit φ bezeichnet. Wie schon im I. Band werden auch hier atomare Einheiten benutzt [z. B. Formel (1.1)], in denen die Längen in Wasserstoffradien $a_0 = \hbar^2/m_e^2$, die Energien in Einheiten der doppelten Wasserstoffionisationsenergie (e^2/a_0) und die Massen in Elektronenmassen (m) gerechnet werden (HARTREE 1928).

Berichtigungen zum I. Band

Tabelle 58, S. 134: $\alpha + \beta = 17,0$ $D_2^0 = .5574646^{-1}$
 $D_2^1 = .4990925^{-1}$
 $D_2^2 = .4528642^{-1}$

Tabelle 62, S. 136: $\beta = 2,0$ $\alpha = 0,5$ $D_2^0 = 0,2565830^{+1}$.

Tabelle 62, S. 136: $\beta = 2,0$ $\alpha = 1,5$ $D_1^2 = 0,11598864^0$.

Tabelle 70, S. 140: $\beta = 6,0$ $\alpha = 5,5$ $D_2^1 = 0,1069199^{-2}$.

Tabelle 72, S. 141: $\beta = 7,0$ $\alpha = 10,0$ $D_2^0 = 0,4753567^{-4}$.

Tabelle 74, S. 142: $\beta = 8,0$ $\alpha = 9,0$ $D_2^0 = 0,6190336^{-4}$.

Tabelle 76, S. 143: $\beta = 9,0$ $\alpha = 5,0$ $D_2^1 = .9986144^{-3}$

Tabelle 76, S. 143: $\beta = 9,0$ $\alpha = 8,0$ $D_2^0 = 0,9847465^{-4}$.

Tabelle 78, S. 144: $\beta = 10,0$ $\alpha = 7,0$ $D_2^0 = 0,1806460^{-3}$.

S. 8, Zeile 1 (Ende) muß heißen: „Entsprechendes gilt für ϑ_b “.

S. 16, Zeile 38 muß heißen: $G_r^v(m, \gamma) = \int_{-1}^{+1} e^{-\gamma x} P_r^{(v)}(x) (1 - x^2)^{v/2} x^m dx$.

S. 45, Zeile 17 muß heißen: $R^2[a^{-2} | \underset{-1}{3}_a \overset{\beta}{1}_b] = \dots$