Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae, Tomus 27, pp. 131—149 (1969)

BERECHNUNGEN DER ZUSTÄNDE $1sns\,^1\Sigma_g^+$ DES WASSERSTOFFMOLEKÜLS AUF GRUND DER METHODE DER KORRELATIONSMÄSSIGEN MOLEKÜLBAHNEN*

Von

F. BERENCZ

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK, JÓZSEF ATTILA UNIVERSITÄT, SZEGED

(Eingegangen: 13. I. 1969)

Es wurde die Elektronenenergie des Zustandes $1s2s\,^1\Sigma_g^+$ des Wasserstoffmoleküls auf Grund der Methode der korrelationsmässigen Molekülbahnen berechnet. Es wurde weiterhin festgestellt, dass durch die Erweiterung der Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor, nur dann eine wesentliche Energiekorrektion entsteht, wenn dort gar keine Korrelation der Elektronen vorhanden war.

Einleitung

Aus den physikalischen Experimenten ist es wohlbekannt, dass das Wasserstoffmolekül zweierlei angeregte Zustände hat. Im ersten Zustand ist das eine Elektron im Grundzustand und das andere in angeregtem Zustand; dann gibt es auch solche angeregten Zustände, in welchen sich beide Elektronen in angeregtem Zustande befinden.

Im Falle des Wasserstoffmoleküls wurden über die Energie der angeregten Zustände viele Berechnungen durchgeführt. Schon ganz früh, einige Jahre danach, dass die Schrödinger'sche Gleichung angegeben wurde, konnte man über Untersuchungen der angeregten Zustände des Wasserstoffmoleküls bei GUILLEMIN und ZENER [1], bei PRESENT [2] und bei JAMES, COOLIDGE und PRESENT [3] lesen.

Der erste Teil der genauen Berechnungen der angeregten Zustände des Wasserstoffmoleküls wurde mit Funktionen, dargestellt in elliptischen Koordinaten, durchgeführt. Auf Grund solcher Funktionen wurde die Energie des niedrigsten angeregten Zustandes $^3\Sigma_g^+$ des Wasserstoffmoleküls von COOLIDGE und JAMES [4], die Energien der niedrigsten angeregten Zustände $^1\Sigma_g^+$, $^1\Sigma_u^+$ und $^3\Sigma_u^+$ von KOŁOS und ROOTHAAN [5], die Energie des angeregten Zustandes $^1\Sigma_g^+$ von DAVIDSON [6], und die Energien der angeregten Zustände $X^1\Sigma_g^+$, $b^3\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u^+$ und $B^1\Sigma_u^+$ von KOŁOS und WOLNIEWICZ [7] berechnet.

Der zweite Teil der genauen Berechnungen der angeregten Zustände des Wasserstoffmoleküls wurden mit einfachen Bahn-Funktionen durchgeführt. PHILLIPSON und MULLIKEN [8] berechneten auf Grund solcher Funktionen

* Herrn Prof. Dr. P. GOMBÁS zum 60. Geburtstag gewidmet.

die niedrigsten angeregten Zustände ${}^1\Sigma_u^+$ und ${}^3\Sigma_u^+$, BERENCZ [9] den angeregten Zustand ${}^1\Sigma_g^+$ und BROWNE [10] die angeregten Zustände ${}^1\Pi_u$, ${}^3\Pi_g$, ${}^1\Pi_g$, ${}^3\Pi_g$, ${}^1\Delta_u$, ${}^3\Delta_u$, ${}^1\Delta_g$, ${}^3\Delta_g$.

Der dritte Teil der genauen Berechnungen der angeregten Zustände des Wasserstoffmoleküls wurde mit solchen Wellenfunktionen durchgeführt, die durch Bildung der Linearkombinationen solcher Atomfunktionen entstehen, die auf den Mittelpunkt der Kernverbindungslinie zentriert sind. Auf Grund solcher Wellenfunktionen wurden die angeregten Zustände des Wasserstoffmoleküls von HUZINAGE [11], TAMÁSSY-LENTEI [12], TAYLOR [13] und KATO, HAYES und DUNCAN [14] berechnet.

ZUNG und DUNCAN [15] veröffentlichten auch Berechnungen des angeregten Zustandes des Wasserstoffmoleküls, die denen von PHILLIPSON und MULLIKEN ähnlich sind, aber diese Verfasser verwendeten ortho-normierten Molekülbahnen.

Zum Schluss müssen noch die Verfasser ROTHENBERG und DAVIDSON [16] erwähnt werden, die die natürlichen Bahnen der angeregten Zustände ${}^1\Sigma_g^+$, ${}^1\Sigma_u^+$, ${}^1\Pi_g$, ${}^1\Pi_u$, ${}^1\Delta_g$, ${}^3\Sigma_g^+$, ${}^3\Sigma_u^+$, ${}^3\Pi_u$, ${}^3\Pi_g$, ${}^3\Delta_g$ des Wasserstoffmoleküls angegeben haben.

In einer früheren Arbeit des Verfassers [17] wurde untersucht, wie die Berücksichtigung des Korrelationsfaktors $(1 + pr_{12})$ die Berechnungen des Grundzustandes des Wasserstoffmoleküls beeinflusst. In dieser Arbeit werden die früheren Untersuchungen auf die Berechnungen der Zustände $1sns\,{}^1\Sigma_g^+$ ausgedehnt. Mit diesen Berechnungen vermehrt sich die Zahl der bekannten Molekülintegrale zwischen $1s$- und ns-Elektronen in grossem Masse.

Die Rechenmethode

Zur Bestimmung von Zustandsfunktionen für die Zustände $1sns\,{}^1\Sigma_g^+$ $(n \geq 2)$ des Wasserstoffmoleküls wird es angenommen, dass sie ihren Ursprung aus einer Bahn-Konfiguration nehmen, in welcher sich das erste Elektron im Grundzustand und das zweite Elektron in angeregtem Zustand befindet. Im Falle $n = 2$ haben die Molekülbahnen der einzelnen Elektronen die folgende Gestalt:

$$1\,\sigma_g = (1\,S_A + 1\,S_B)/\sqrt{2(1+S_1)}, \tag{1}$$

$$2\,\sigma_g = (2S_A + 2\,S_B)/\sqrt{2(1+S_2)}, \tag{2}$$

wo

$$S_i = \langle iS_A | iS_B \rangle\,, \qquad i = 1,2\,. \tag{3}$$

Die Wasserstoffeigenfunktionen der ns-Zustände werden durch den folgenden Zusammenhang geliefert:

$$ns(r) = \frac{1}{n^{3/2}\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{R}{n}\right) R_n(r)\,, \tag{4}$$

wo

$$R_n(r) = 1 - \frac{n-1}{1!\,2!}\left(\frac{2r}{n}\right) + \frac{(n-1)(n-2)}{2!\,3!}\left(\frac{2r}{n}\right)^2 - \ldots . \tag{5}$$

Die Zustandsfunktion ist das antisymmetrische Produkt der einzelnen $1\sigma_g$ und $2\sigma_g$ Molekülbahnen, durch den Korrelationsfaktor $(1 + pr_{12})$ erweitert.

$$\Psi_{1s2s} = 1\,\sigma_g(1)\,2\,\sigma_g(2)\,(1+pr_{12})\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1). \tag{6}$$

Die Elektronenenergie wird dann auf Grund des folgenden Zusammenhanges berechnet:

$$E_{1s2s} = \frac{\int \Psi_{1s2s}\,\mathbf{H}\,\Psi_{1s2s}\,d\tau}{\int \Psi^2_{1s2s}\,d\tau}, \tag{7}$$

wo

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}. \tag{8}$$

Die Resultate der Berechnungen

Mit der korrelationsmässigen Molekülbahn (6) ergab sich bei $R = 1.95$ a.u. Kernabstand für die Elektronenenergie des angeregten Zustandes $1s2s^1\Sigma_g^+$ des Wasserstoffmoleküls der Wert 0,70221 a.u. In einer früheren Arbeit des Verfassers [9] wurde dieselbe Energie auf Grund der (6) ähnlichen Molekülbahn mit einem Resultat von 0,68086 a.u. für die Elektronenenergie berechnet. Die Erweiterung der Molekülbahn durch den Korrelationsfaktor $(1 + pr_{12})$ gibt also eine Energiekorrektion mit dem Wert von 0,02135 a.u.. Dieselbe Korrektion hat bei der Berechnung der Elektronenenergie des Grundzustandes des Wasserstoffmoleküls den Wert 0,02352 a.u., wie man sich davon aus der Arbeit von Frost und Braunstein [18] überzeugen kann. Da die zwei Energiekorrektionen grössenordnungsmässig gleich sind, kann es auch bei den Berechnungen der angeregten Zustände festgestellt werden, dass mit der Erweiterung der Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor $(1 + pr_{12})$ nur dann eine wesentliche Energiekorrektion entsteht, wenn dort gar keine Korrelation der Elektronen vorhanden war.

Ich danke auch an dieser Stelle Fräulein A. Boldizsár für die Hilfe, die sie mir mit der Vornahme der numerischen Rechnungen geboten hat.

Anhang

Bei der Berechnung der Elektronenergie mussten mehrere Molekül-Integrale bestimmt werden, die in der Literatur bisher noch nicht vorgekommen sind. Diese seien folgendermassen bezeichnet:

$$I(\alpha,\beta,\gamma,\delta,i,j,k,m,n)=\frac{1}{\pi^2}\iint \exp(-\alpha r_{a1}-\beta r_{b1})\times$$
$$\times\exp(-\gamma r_{a2}-\delta r_{b2})\, r_{a1}^i r_{b1}^j r_{a2}^k r_{b2}^m r_{12}^n\, d\tau_1\, d\tau_2 .$$

Bei der Berechnung der Integrale wird die Methode von KOTANI [19] und seiner Mitarbeiter benutzt. Unsere Integrale wurden mit Hilfe der folgenden Hilfsintegrale ausgedrückt:

$$A_n(\alpha)=\int_1^\infty e^{-\alpha\mu}\mu^n\, d\mu ,$$

$$B_n(\beta)=\int_{-1}^{+1} e^{-\beta\nu}\nu^n\, d\nu ,$$

$$G_\tau^\nu(l,\beta)=\int_{-1}^{+1} P_\tau^\nu(\nu_i)\, e^{-\beta\nu_i}\,\nu_i^l(1-\nu_i^2)^{\nu/2}\, d\nu_i ,$$

$$H_\tau^\nu(i,\alpha;k,\beta)=\int_1^\infty\int_1^\infty e^{-\alpha\mu_1}e^{-\beta\mu_2}\mu_1^i\mu_2^i Q_\tau^\nu(\mu_+)\,P_\tau^\nu(\mu_-)\times$$
$$\times(\mu_1^2-1)^{\nu/2}(\mu_2^2-1)^{\nu/2}\, d\mu_1\, d\mu_2 .$$

Die neuen Integrale können in vier Gruppen davon abhängend eingeteilt werden, dass die Exponentialfunktionen die folgenden Gestalten haben:

$$\exp(-2_{a1})\exp(-r_{a2}),$$
$$\exp(-r_{a1}-r_{b1})\exp(-r_{a2}),$$
$$\exp(-2\,r_{a1})\exp\left(-\frac{1}{2}r_{a2}-\frac{1}{2}r_{b2}\right),$$
$$\exp(-r_{a1}-r_{b1})\exp\left(-\frac{1}{2}r_{a2}-\frac{1}{2}r_{b1}\right).$$

Wegen der grossen Zahl der Molekülintegrale werden aus jeder Gruppe nur einige mitgeteilt:

$$I(2,0,1,0,0,0,0,0,1)=$$

$$=\frac{R^7}{32}\left\{H_0^0\left(4,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+\right.$$

$$+ H_0^0\left(2, R; 4, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 3\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} -$$

$$- 2\, H_0^0\left(3, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(1, R)\, G_0^0\left(1, \frac{R}{2}\right) - 6\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} -$$

$$- 2H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) - 10\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} +$$

$$+ \frac{3}{2} H_1^1\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^1(0, R)\, G_1^1\left(0, \frac{R}{2}\right) + \frac{5}{18}\binom{1}{2} + \frac{7}{22}\binom{1}{3} + \frac{9}{200}\binom{1}{4} +$$

$$- H_0^0\left(4, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R,)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(4, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} +$$

$$+ 2\, H_0^0\left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_0^0(1, R)\left(3, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} +$$

$$+ 2\, H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$- \frac{3}{2} H_1^1\left(2, R{:}\ 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1(0, R)\, Q_1^1\left(2, \frac{R}{2}\right) - \frac{5}{18}\binom{1}{2} - \frac{7}{72}\binom{1}{3} - \frac{9}{200}\binom{1}{4} -$$

$$- H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(4, R)\, G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} +$$

$$+2H_0^0\left(1,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(3,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)+6\binom{0}{1}+10\binom{0}{2}+14\binom{0}{3}+18\binom{0}{4}+$$

$$+2H_0^0\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+6\binom{0}{1}+10\binom{0}{2}+14\binom{0}{3}+18\binom{0}{4}-$$

$$-\frac{3}{2}H_1^1\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_1^1(2,R)\,G_1^1\left(0,\frac{R}{2}\right)-\frac{5}{18}\binom{1}{2}-\frac{7}{72}\binom{1}{3}-\frac{9}{200}\binom{1}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0(4,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(4,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}-$$

$$-2H_0^0\left(1,R;1,\frac{R}{2}\right)G_0^0(3,R)\,G_0^0\left(3,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{9}{3}-18\binom{0}{4}-$$

$$-2H_0^0\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{0}{3}-18\binom{0}{4}+$$

$$+\frac{3}{2}H_1^1\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_1^1(2,R)\,G_1^1\left(2,\frac{R}{2}\right)+\frac{5}{18}\binom{1}{2}+\frac{7}{38}\binom{1}{3}+\frac{9}{200}\binom{1}{4}\Bigg\}.$$

$$I(2,0,1,0,0,0,1,0,1)=$$

$$=\frac{R^8}{64}\left\{H_0^0\left(4,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+\right.$$

$$+H_0^0\left(2,R;5,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_2^0(2,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}-$$

$$-2H_0^0\left(3,R;4,\frac{R}{2}\right)G_0^0(1,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{0}{3}-18\binom{0}{4}$$

$$-2H_0^0\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{0}{3}-18\binom{0}{4}$$

$$+\frac{3}{2}H_1^1\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_1^1(0,R)\,G_1^1\left(0,\frac{R}{2}\right)+\frac{5}{18}\binom{1}{2}+\frac{7}{72}\binom{1}{3}+\frac{9}{200}\binom{1}{4}+$$

$$+H_0^0\left(4,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;4,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}+$$

$$+H_0^0\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(3,\frac{R}{2}\right)+3\binom{0}{1}+5\binom{0}{2}+7\binom{0}{3}+9\binom{0}{4}-$$

$$-2H_0^0\left(3,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(1,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{0}{3}-18\binom{0}{4}-$$

$$-2H_0^0\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)-6\binom{0}{1}-10\binom{0}{2}-14\binom{0}{3}-18\binom{0}{4}+$$

$$+\frac{3}{2}H_1^1\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)G_1^1(0,R)\,G_1^1\left(1,\frac{R}{2}\right)+\frac{5}{18}\binom{1}{2}+\frac{7}{72}\binom{1}{3}+\frac{9}{200}\binom{1}{4}-$$

$$-H_0^0\left(4,R;1,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}-$$

$$-H_0^0\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}-$$

$$-H_0^0\left(2,R;1,\frac{R}{2}\right)G_0^0(2,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}-$$

$$-H_0^0\left(2,R;1,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(4,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}+$$

$$+2H_0^0\left(3,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(1,R)\,G_0^0\left(3,\frac{R}{2}\right)+6\binom{0}{1}+10\binom{0}{2}+14\binom{0}{3}+18\binom{0}{4}+$$

$$+2H_0^0\left(2,R;1,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+6\binom{0}{1}+10\binom{0}{2}+14\binom{0}{3}+18\binom{0}{4}-$$

$$-\frac{3}{2}H_1^1\left(2,R;1,\frac{R}{2}\right)G_1^1(0,R)\,G_1^1\left(2,\frac{R}{2}\right)-\frac{5}{18}\binom{1}{2}-\frac{7}{72}\binom{1}{3}-\frac{9}{200}\binom{1}{4}-$$

$$-H_0^0\left(4,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(3,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}-$$

$$-H_0^0\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0(0,R)\,G_0^0\left(3,\frac{R}{2}\right)-3\binom{0}{1}-5\binom{0}{2}-7\binom{0}{3}-9\binom{0}{4}-$$

$$- H_0^0 \left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(3, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0 \left(5, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$+ 2 H_0^0 \left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_0^0(1, R)\, G_0^0 \left(4, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$+ 2 H_0^0 \left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(0, R)\, G_0^0 \left(3, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$- \frac{3}{2} H_1^1 \left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1(0, R)\, G_1^1 \left(3, \frac{R}{2}\right) - \frac{5}{18}\binom{1}{2} - \frac{7}{72}\binom{1}{3} - \frac{9}{200}\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(4, R)\, G_0^0 \left(0, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(2, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{3} +$$

$$+ 2 H_0^0 \left(1, R; 4, \frac{R}{2}\right) G_0^0(3, R)\, G_0^0 \left(1, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{3} -$$

$$+ 2 H_0^0 \left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(0, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$- \frac{3}{2} H_1^1 \left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^1(2, R)\, G_1^1 \left(0, \frac{R}{2}\right) - \frac{5}{18}\binom{1}{2} - \frac{7}{72}\binom{1}{3} - \frac{9}{200}\binom{1}{3} -$$

$$- H_0^0 \left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(1, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(1, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(4, R)\, G_0^0 \left(1, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 1\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} -$$

$$- H_0^0 \left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R)\, G_0^0 \left(3, \frac{R}{2}\right) - 3\binom{0}{1} - 5\binom{0}{2} - 7\binom{0}{3} - 9\binom{0}{4} +$$

$$+ 2 H_0^0 \left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_0^0(3, R)\, G_0^0 \left(2, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$+2H^0_0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(1, \frac{R}{2}\right) + 6\binom{0}{1} + 10\binom{0}{2} + 14\binom{0}{3} + 18\binom{0}{4} -$$

$$-\frac{3}{2} H^1_1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^1_1\left(1, \frac{R}{2}\right) - \frac{5}{18}\binom{1}{2} - \frac{7}{72}\binom{1}{3} - \frac{9}{200}\binom{1}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(2, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(2, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^0_0(4, R)\, G^0_0\left(2, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(4, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} -$$

$$-2H^0_0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) G^0_0(3, R)\, G^0_0\left(3, \frac{R}{2}\right) - 6\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} -$$

$$-2H^0_0\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 6\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} +$$

$$+\frac{3}{2} H^1_1\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^1_1(2, R)\, G^1_1\left(2, \frac{R}{2}\right) + \frac{5}{18}\binom{1}{2} - \frac{7}{72}\binom{1}{3} - \frac{9}{200}\binom{1}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(3, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(3, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G^0_0(4, R)\, G^0_0\left(3, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{0}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} +$$

$$+ H^0_0\left(0, R, 0, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(5, \frac{R}{2}\right) + 3\binom{0}{1} + 5\binom{3}{2} + 7\binom{0}{3} + 9\binom{0}{4} =$$

$$-2H^0_0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G^0_0(3, R)\, G^0_0\left(4, \frac{R}{2}\right) - 6\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} -$$

$$-2H^0_0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G^0_0(2, R)\, G^0_0\left(3, \frac{R}{2}\right) - 6\binom{0}{1} - 10\binom{0}{2} - 14\binom{0}{3} - 18\binom{0}{4} -$$

$$+\frac{3}{2} H^1_1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G^1_1(2, R)\, G^1_1\left(3, \frac{R}{2}\right) + \frac{5}{13}\binom{1}{2} + \frac{7}{72}\binom{1}{3} + \frac{9}{200}\binom{1}{4}\Bigg\} .$$

$$I(2,0,1,0,0,0,0,0,2) =$$

$$= \frac{R^2}{64}\Bigg\{\Bigg[A_4(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R)A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_2(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right)\Bigg]B_0(R)B_0\left(\frac{R}{2}\right) +$$

$$+ A_2(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[B_2(R)B_0\left(\frac{R}{2}\right) + B_0(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] -$$

$$- 2A_3(R)A_3\left(\frac{R}{2}\right)B_1(R)B_1\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$-\left[A_4(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_2(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right]B_0(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$- A_0(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right)\left[B_2(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right) + B_0(R)B_4\left(\frac{R}{2}\right)\right] +$$

$$+ 2A_3(R)A_1\left(\frac{R}{2}\right)B_1(R)B_3\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$-\left[A_2(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R)A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right)\right]B_2(R)B_0\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$- A_0(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[B_4(R)B_0\left(\frac{R}{2}\right) + B_2(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] +$$

$$+ 2A_1(R)A_3\left(\frac{R}{2}\right)B_3(R)B_1\left(\frac{R}{2}\right) +$$

$$+\left[A_2(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R)A_2\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right]B_2(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right) +$$

$$+ A_0(R)A_0\left(\frac{R}{2}\right)\left[B_4(R)B_2\left(\frac{R}{2}\right) + B_2(R)B_4\left(\frac{R}{2}\right)\right] -$$

$$- 2A_1(R)A_1\left(\frac{R}{2}\right)B_3(R)B_4\left(\frac{R}{2}\right)\Bigg\}.$$

$$I(1,1,1,0,0,0,0,0,1) =$$

$$= \frac{R^7}{16}\Bigg\{\Bigg[H_0^0\left(4, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 4, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{5}{3}H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right)\Bigg]G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+ H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right)G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - 2H_1^0\left(3, R; 3, \frac{R}{2}\right)G_1^0\left(1, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+ \frac{2}{3}\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right)G_2^0\left(0, \frac{R}{2}\right) + H_1^1\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right)G_1^1\left(0, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \Bigg[H_0^0\left(4, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{5}{3} H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right)\Bigg] G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0\left(4, \frac{R}{2}\right) + 2 H_1^0\left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_1^0\left(3, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{2}{3} H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_2^0\left(2, \frac{R}{2}\right) - H_1^1\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1\left(2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{1}{3} \Bigg[H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{7}{5} H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\Bigg] G_0^0\left(0, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{1}{3} H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) + \frac{6}{5} H_1^0\left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^0\left(1, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{2}{3} \Bigg[H_2^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{8}{7} H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\Bigg] G_2^0\left(0, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{2}{3} H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_2^0\left(2, \frac{R}{2}\right) + H_3^0\left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_3^0\left(1, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{8}{35} H_4^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_4^0\left(0, \frac{R}{2}\right) - \frac{1}{5} H_1^1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^1\left(0, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{1}{45} H_3^1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_3^1\left(0, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+ \frac{1}{3} \Bigg[H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{7}{5} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\Bigg] G_0^0\left(2, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+ \frac{1}{3} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0\left(4, \frac{R}{2}\right) - \frac{6}{5} H_1^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_1^0\left(3, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+ \frac{2}{3} \Bigg[H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$- \frac{8}{7} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\Bigg] G_2^0\left(2, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+\frac{2}{3}H_2^0\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_2^0\left(4,\frac{R}{2}\right)-\frac{4}{5}H_3^0\left(1,R;1,\frac{R}{2}\right)G_3^0\left(3,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\frac{8}{35}H_4^0\left(0,R,0,\frac{R}{2}\right)G_4^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+\frac{1}{5}H_1^1\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_1^1\left(2,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\frac{1}{45}H_3^1\left(0,R;0,\frac{R}{2}\right)G_3^1\left(2,\frac{R}{2}\right)\Bigg\}.$$

$I(1,1,1,0,-1,0,0,0,1)=$

$$=\frac{R^2}{16}\Bigg\{\Bigg[H_0^0\left(3,R;2,\frac{R}{2}\right)+H_0^0\left(1,R;4,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\frac{5}{3}H_0^0\left(1,R;2,\frac{R}{2}\right)\Bigg]G_0^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+H_0^0\left(1,R;2,\frac{R}{2}\right)G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-2H_1^0\left(2,R;3,\frac{R}{2}\right)G_1^0\left(1,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\frac{2}{3}H_2^0\left(1,R;2,\frac{R}{2}\right)G_2^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+H_1^1\left(1,R;2,\frac{R}{2}\right)G_1^1\left(0,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\Bigg[H_0^0\left(3,R;0,\frac{R}{2}\right)+H_0^0\left(1,R;2,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\frac{5}{3}H_0^0\left(1,R;0,\frac{R}{2}\right)\Bigg]G_0^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-H_0^0\left(1,R;0,\frac{R}{2}\right)G_0^0\left(4,\frac{R}{2}\right)+2H_1^0\left(2,R;1,\frac{R}{2}\right)G_1^0\left(3,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\frac{2}{3}H_2^0\left(1,R;0,\frac{R}{2}\right)G_2^0\left(2,\frac{R}{2}\right)-H_1^1\left(1,R;0,\frac{R}{2}\right)G_1^1\left(2,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\Bigg[H_1^0\left(2,R;2,\frac{R}{2}\right)+H_1^0\left(0,R;4,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\frac{7}{5}H_1^0\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)\Bigg]G_1^0\left(0,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\frac{2}{3}H_0^0\left(1,R;3,\frac{R}{2}\right)G_0^0\left(1,\frac{R}{2}\right)-H_1^0\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_1^0\left(2,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\frac{4}{3}H_2^0\left(1,R;3,\frac{R}{2}\right)G_2^0\left(1,\frac{R}{2}\right)-\frac{2}{5}H_3^0\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_3^0\left(0,\frac{R}{2}\right)-$$

$$-\frac{3}{5}H_2^1\left(0,R;2,\frac{R}{2}\right)G_2^1\left(0,\frac{R}{2}\right)+$$

$$+\left[H_1^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_1^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{7}{5} H_1^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_1^0\left(2, \frac{R}{2}\right) -$$

$$-\frac{2}{3} H_0^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_0^0\left(3, \frac{R}{2}\right) + H_1^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^0\left(4, \frac{R}{2}\right) -$$

$$-\frac{4}{3} H_2^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_2^0\left(3, \frac{R}{2}\right) + \frac{2}{5} H_3^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^0\left(2, \frac{R}{2}\right) +$$

$$+\frac{3}{5} H_2^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_2^1\left(2, \frac{R}{2}\right)\Bigg\}.$$

$$I(1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 2) =$$

$$= \frac{R^8}{32}\Bigg\{\left[A_4(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_0\left(\frac{R}{2}\right) +$$

$$+ A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{3} B_0\left(\frac{R}{2}\right) + B_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] -$$

$$-\left[A_4(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_2\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$- A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{3} B_2\left(\frac{R}{2}\right) + B_4\left(\frac{R}{2}\right)\right] -$$

$$-\frac{1}{3}\left[A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_0\left(\frac{R}{2}\right) -$$

$$- A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{5} B_0\left(\frac{R}{2}\right) + \frac{1}{3} B_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] +$$

$$+\frac{1}{3}\left[A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_2\left(\frac{R}{2}\right) +$$

$$+ A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{5} B_2(R) + \frac{1}{3} B_4\left(\frac{R}{2}\right)\right]\Bigg\}.$$

$$I\left(2, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 0, 1\right) =$$

$$= \frac{R^7}{16}\Bigg\{\left[H_0^0\left(4, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 4, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{5}{3} H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(0, R) +$$

$$
\begin{aligned}
&+ H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R) - 2\, H_1^0\left(3, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^0(1, R) + \\
&+ \frac{2}{3} H_2^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_2^0(0, R) + H_1^1\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^1(0, R) - \\
&- \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(4, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&\left. - \frac{7}{5} H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(0, R) - \\
&- \frac{1}{3} H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R) + \frac{6}{5} H_1^0\left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_1^0(1, R) - \\
&- \frac{2}{3}\left[H_2^0\left(4, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&\left. - \frac{8}{7} H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_1^0(0, R) - \\
&- \frac{2}{3} H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_2^0(2, R) + \frac{4}{5} H_3^0\left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_3^0(1, R) - \\
&- \frac{8}{35} H_4^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_4^0(0, R) - \frac{1}{5} H_1^1\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^0(0, R) - \\
&- \frac{1}{45} H_3^1\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^1(0, R) - \\
&- \left[H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&\left. - \frac{5}{3} H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(2, R) - \\
&- H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(4, R) + 2\, H_1^0\left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^0(3, R) - \\
&- \frac{2}{3} H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_2^0(2, R) - H_1^1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^1(2, R) + \\
&+ \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&\left. - \frac{7}{5} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(2, R) + \\
&+ \frac{1}{3} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(4, R) - \frac{6}{5} H_1^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_1^0(3, R) +
\end{aligned}
$$

$$+\frac{2}{3}\left[H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{8}{7} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_2^0(2, R) +$$

$$+\frac{2}{3} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_2^0(4, R) - \frac{4}{5} H_3^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_2^0(3, R) +$$

$$+\frac{8}{35} H_4^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_4^0(2, R) + \frac{1}{4} H_1^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1(2, R) +$$

$$\left.+\frac{1}{45} H_3^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^1(2, R)\right\}.$$

$$I\left(2, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, -1, 0, 0, 1\right) =$$

$$= \frac{R^6}{8}\left\{\left[H_0^0\left(3, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(1, R; 4, \frac{R}{2}\right) -\right.\right.$$

$$\left.-\frac{5}{3} H_0^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(0, R) +$$

$$+ H_0^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R) - 2 H_1^0\left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^0(1, R) +$$

$$+\frac{2}{3} H_2^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_2^0(0, R) + H_1^1\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^0(0, R) -$$

$$-\frac{1}{3}\left[H_0^0\left(3, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{7}{5} H_0^0\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(0, R) -$$

$$-\frac{1}{3} H_0^0\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(2, R) + \frac{6}{5} H_1^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_1^0(1, R) -$$

$$-\frac{2}{3}\left[H_2^0\left(3, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{8}{7} H_2^0\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_2^0(0, R) -$$

$$-\frac{2}{3} H_2^0\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_2^0(2, R) + \frac{4}{5} H_3^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_3^0(1, R) -$$

$$-\frac{8}{35} H_4^0\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_4^0(0, R) - \frac{1}{5} H_1^1\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1(0, R) -$$

$$-\frac{1}{45} H_3^1\left(1, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^1(0, R) +$$

$$+\left[H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{5}{3} H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(1, R) +$$

$$+ H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_0^0(3, R) - 2 H_1^0\left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) G_1^0(2, R) +$$

$$+\frac{2}{3} H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_2^0(1, R) + H_1^1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) G_1^1(1, R) -$$

$$-\frac{1}{3}\left[H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{7}{5} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_0^0(1, R) -$$

$$-\frac{1}{3} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(3, R) + \frac{6}{5} H_1^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_2^0(2, R) -$$

$$-\frac{2}{3}\left[H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) -\right.$$

$$\left.-\frac{8}{7} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] G_2^0(1, R) -$$

$$-\frac{2}{3} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_0^0(3, R) + \frac{4}{5}\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) G_3^0(2, R) -$$

$$-\frac{8}{35} H_4^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_4^0(1, R) - \frac{1}{5} H_1^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_1^1(1, R) -$$

$$\left.-\frac{1}{45} H_3^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) G_3^1(1, R)\right\} .$$

$$I\left(2, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 0, 2\right) =$$

$$= \frac{R^8}{32}\left\{\left[A_4(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2 A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_0(R) +\right.$$

$$+ A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{3} B_0(R) + B_2(R)\right] -$$

$$-\frac{1}{3}\left[A_4(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) - 2 A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_0(R) -$$

$$- A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{5} B_0(R) + \frac{1}{3} B_2(R)\right] -$$
$$- \left[A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_2(R) -$$
$$- A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{3} B_2(R) + B_4(R)\right] -$$
$$+ \frac{1}{3}\left[A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) - 2A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right] B_2(R) +$$
$$+ A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\left[\frac{1}{5} B_2(R) + \frac{1}{3} B_4(R)\right]\Bigg\}.$$

$$I\left(1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 0, 1\right) =$$
$$= \frac{R^7}{8}\Bigg\{H_0^0\left(4, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 4, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{3} H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) -$$
$$- \frac{2}{3} H_1^0\left(3, R; 3, \frac{R}{2}\right) + \frac{2}{3} H_1^1\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) -$$
$$- \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(4, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{16}{15} H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] +$$
$$+ \frac{2}{5} H_1^0\left(3, R; 1, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{45} H_2^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) - \frac{2}{15} H_1^1\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) -$$
$$- \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(2, R; 2, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 4, \frac{R}{2}\right) - \frac{16}{15} H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\right] +$$
$$+ \frac{2}{5} H_1^0\left(1, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{45} H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{2}{15} H_1^1\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right)\Bigg] +$$
$$+ \frac{1}{9}\left[H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{5} H_0^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] +$$
$$+ \frac{4}{45}\left[H_0^0\left(2, R; 0, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{2}{7} H_2^0\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\right] -$$
$$- \frac{6}{25} H_1^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) - \frac{8}{175} H_3^0\left(1, R; 1, \frac{R}{2}\right) +$$
$$+ \frac{2}{75} H_1^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right) + \frac{8}{1575} H_3^1\left(0, R; 0, \frac{R}{2}\right)\Bigg\}.$$

$$I\left(1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 1, 1\right) =$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{R^8}{16}\left\{H_0^0\left(4, R; 3, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 5, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{3} H_0^0\left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&- \frac{2}{3} H_1^0\left(3, R; 4, \frac{R}{2}\right) + \frac{2}{3} H_1^1\left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \\
&- \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(4, R; 1, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \frac{16}{15} H_0^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right)\right] + \\
&+ \frac{2}{5} H_1^0\left(3, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{45} H_2^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) - \frac{2}{15} H_1^1\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) - \\
&- \frac{1}{3}\left[H_0^0\left(2, R; 3, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 5, \frac{R}{2}\right) - \frac{16}{15} H_0^0\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right)\right] - \\
&+ \frac{2}{5} H_1^0\left(1, R; 4, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{45} H_2^0\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{45} H_1^1\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) + \\
&+ \frac{2}{9}\left[H_0^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) + H_0^0\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \frac{4}{5} H_0^0\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right)\right] + \\
&+ \frac{4}{45}\left[H_3^0\left(2, R; 1, \frac{R}{2}\right) + H_2^0\left(0, R; 3, \frac{R}{2}\right) - \frac{2}{7} H_2^0\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) - \right. \\
&- \frac{6}{25} H_2^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) - \frac{8}{175} H_3^0\left(1, R; 2, \frac{R}{2}\right) + \\
&\left.\left. + \frac{2}{75} H_1^1\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right) + \frac{3}{1575} H_3^1\left(0, R; 1, \frac{R}{2}\right)\right]\right\}.
\end{aligned}
$$

$$
I\left(1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 0, 2\right) =
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{R^8}{16}\left\{A_4(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - \frac{4}{3} A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + \right. \\
&+ \frac{1}{3}\left[A_4(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) - \frac{16}{15} A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right] + \\
&+ \frac{1}{3}\left[A_2(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_4\left(\frac{R}{2}\right) - \frac{16}{25} A_0(R) A_2\left(\frac{R}{R}\right)\right] + \\
&\left. + \frac{1}{9}\left[A_2(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right) + A_0(R) A_2\left(\frac{R}{2}\right) - \frac{4}{5} A_0(R) A_0\left(\frac{R}{2}\right)\right]\right\}.
\end{aligned}
$$

$\binom{i}{k} = H_k^i G_k^i G_k^i$ mit den Argumenten in den betreffenden Reihen.

LITERATUR

1. V. Guillemin and C. Zener, Phys. Rev., **34**, 999, 1929.
2. R. Present, J. Chem. Phys., **3**, 122, 1936.
3. H. M. James, A. S. Coolidge and R. D. Present, J. Chem. Phys., **4**, 187, 1936.
4. A. S. Coolidge and H. M. James, J. Chem. Phys., **6**, 730, 1938.
5. W. Kołos and C. C. J. Roothaan, Revs. Modern Phys., **32**, 219, 1960.
6. E. R. Davidson, J. Chem. Phys., **33**, 1577, 1960.
7. W. Kołos and L. Wolniewicz, J. Chem. Phys., **43**, 2429, 1965; **45**, 509, 1966.
8. P. E. Phillipson and R. S. Mulliken, J. Chem. Phys., **28**, 1248, 1958.
9. F. Berencz, Acta Phys. Hung., **16**, 49, 1963; **18**, 307, 1965.
10. J. C. Browne, J. Chem. Phys., **40**, 43, 1964; **41**, 1583, 1964; Phys. Rev., **138**, **A9**, 1965
11. S. Huzinage, Progr. Theoret. Phys., **15**, 162, 1956; **17**, 169, 1957.
12. I. Tamássy-Lentei, Acta Phys. Hung., **12**, 119, 1960.
13. H. S. Taylor, J. Chem. Phys., **39**, 3375, 1963.
14. Y. Kato, E. Hayes, and A. B. F. Duncan, J. Chem. Phys., **41**, 986, 1964.
15. J. T. Zung and A. B. F. Duncan, J. Chem. Phys., **36**, 2140, 1962.
16. S. Rothenberg and E. Davidson, J. Chem. Phys., **45**, 2560, 1966.
17. F. Berencz, Acta Phys. Hung., **6**, 149, 1956.
18. A. A. Frost und J. Braunstein, J. Chem. Phys., **19**, 1133, 1951.
19. M. Kotani, A. Amemiya und T. T. Simose, Proc. Phys. Mat. Soc. Japan, **20**, **extra No 1**, 1938; 22. extra No 2, 1940.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯ $1sns$ $^1\Sigma_g^+$ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ МЕТОДА КОРРЕЛЯЦИОННО-УМЕРЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТ

Ф. БЕРЕНЦ

Резюме

Определяется электронная энергия состояния $1s2s$ $^1\Sigma_g^+$ молекулы водорода на основе метода корреляционно-умеренных молекулярных орбит. Далее показывается, что расширением собственной функции с корреляционным фактором достигается значительное улучшение в энергии только в случае, если там не имеет место корреляция электронов