

EINIGE ZWEIZENTRENINTEGRALE ZU RECHNUNGEN AUF GRUND DER METHODE DER KORRELATIONSMÄSSIGEN MOLEKÜLBAHN

Von

F. BERENCZ

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNIVERSITÄT, SZEGED

(Vorgelegt von A. Kónya. — Eingegangen 8. IV. 1958)

Die numerischen Werte der Integrale

$$I_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \mu_1^i \mu_2^k \nu_1^l \nu_2^m r_{12}^n d\tau,$$

$$J_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\psi_2 \pm \psi_3 - \psi_4 \mp \psi_5) \mu_1^i \mu_2^k \nu_1^l \nu_2^m r_{12}^n d\tau,$$

wo

$$\psi_1 = \exp[-\alpha(\mu_1 + \mu_2)], \quad \psi_2 = \exp[\beta(\nu_1 + \nu_2)], \quad \psi_3 = \exp[\beta(\nu_1 - \nu_2)],$$

$$\psi_4 = \exp[-\beta(\nu_1 + \nu_2)], \quad \psi_5 = \exp[-\beta(\nu_1 - \nu_2)]$$

und wo $i, k, l, m, n = 0, 1, 2$ sein kann, wurden in Tafeln zusammengestellt.

In einer früheren Arbeit [1] wurde die Dissoziationsenergie des H_2 -Moleküls mit einer solchen Näherungsfunktion berechnet, welche den folgenden Korrelationsfaktor enthält :

$$\Psi = N\psi_1(\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)(1 + p r_{12}),$$

wo

$$\psi_1 = \exp[-\alpha(\mu_1 + \mu_2)],$$

$$\psi_2 = \exp[\beta(\nu_1 + \nu_2)],$$

$$\psi_3 = \exp[\beta(\nu_1 - \nu_2)],$$

$$\psi_4 = \exp[-\beta(\nu_1 + \nu_2)],$$

$$\psi_5 = \exp[-\beta(\nu_1 - \nu_2)].$$

Unter den Integralen in dem Energieausdruck, der zum Minimum gemacht werden soll, sind diejenigen in der Literatur noch nicht vorgekommen, in welchen der Integrand die gegenseitige Entfernung r_{12} der beiden Elektronen in einer gewissen Potenz enthält. Diese Zweizentrenintegrale können in die folgenden zwei Gruppen eingeteilt werden :

$$I_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \mu_1^i \mu_2^k \nu_1^l \nu_2^m r_{12}^n d\tau,$$

$$J_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\psi_2 \pm \psi_3 - \psi_4 \mp \psi_5) \mu_1^i \mu_2^k \nu_1^l \nu_2^m r_{12}^n d\tau,$$

wo $i, k, l, m, n = 0, 1, 2$ sein kann.

Bei der Berechnung der Integrale wird die Methode von KOTANI und seinen Mitarbeitern [2] benutzt, die schon bei SUGIURA [3] zu finden ist. Der Integrand wird in elliptischen Koordinaten hergeleitet und die gegenseitige Entfernung der beiden Elektronen durch den Kosinussatz

$$r_{12}^2 = \frac{R^2}{4} [\mu_1^2 + \mu_2^2 + \nu_1^2 + \nu_2^2 - 2\mu_1\mu_2\nu_1\nu_2 - 2 - \\ - 2\sqrt{(\mu_1^2 - 1)(\mu_2^2 - 1)(1 - \nu_1^2)(1 - \nu_2^2)} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)],$$

sowie durch die Neumannsche Reihenentwicklung [4]

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{2}{R} \sum_{\tau=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\tau} D_{\tau\nu} Q_{\tau}^{\nu}(\mu_+) P_{\tau}^{\nu}(\mu_-) P_{\tau}^{\nu}(\nu_1) P_{\tau}^{\nu}(\nu_2) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$$

berücksichtigt, wo

$$D_{\tau 0} = 2\tau + 1 \quad \text{und} \quad D_{\tau\nu} = (-1)^{\nu} 2(2\tau + 1) \left[\frac{(\tau - \nu)!}{(\tau + \nu)!} \right]^2, \nu \geq 1.$$

μ_+ und μ_- bezeichnen den grösseren, bzw. den kleineren Wert von μ_1 und μ_2 . P_{τ}^{ν} und Q_{τ}^{ν} bedeuten Legendresche Polynome erster und zweiter Art. Die unendliche Neumannsche Reihenentwicklung macht bei der Berechnung der Integrale keine besondere Schwierigkeit, weil die Integranden die φ_i entweder nicht enthalten oder nur im Ausdruck $\sin \varphi_i$ und $\cos \varphi_i$. In diesem Falle kann in der zweiten Summe nur $\nu = 0$ oder $\nu = 1$ sein. Mit dem oben angegebenen Ausdruck für r_{12}^n bekommt man ein Polynom von sechs Integrationsvariablen ($\mu_1, \nu_1, \varphi_1; \mu_2, \nu_2, \varphi_2$), und die Integration wird in gewöhnlicher Weise sukzessive durchführbar.

Bei der Durchführung der Integrationen werden die folgenden grundlegenden Integrale verwendet:

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

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

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

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

Die numerischen Werte der obigen Grundintegrale wurden von KOTANI, AMEMIYA und SIMOSE in Tafeln zusammengestellt.

Die analytischen Ausdrücke der Integrale sind in der Arbeit [1] zu finden; hier folgen die numerischen Werte in Tafeln zusammengestellt.

$\frac{8}{R\pi^2} I_{0002}^1$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	2,39304057	0,30823904	0,05511129	0,01168467	0,00276572	0,00070447	0,00019303	0,00005288	0,00001959
0,75	3,18422573	0,41059112	0,07333562	0,015559278	0,00369351	0,00094141	0,00025848	0,00007074	0,00002680
1,00	4,70366564	0,60730466	0,10859710	0,02311376	0,00547995	0,00139786	0,00038483	0,00010518	0,00004100
1,25	7,63934825	0,98771031	0,17684263	0,03768065	0,00894225	0,00228300	0,00063013	0,00017203	0,00006931
1,5	13,4842656	1,74581554	0,31297209	0,06676078	0,01585908	0,00405245	0,00112229	0,00030500	0,00012758
1,75	25,5446579	3,31159367	0,59439882	0,12693079	0,03018177	0,00771899	0,00214249	0,00058338	0,00025182
2,00	51,2943948	6,65778013	1,19640815	0,25575495	0,05775968	0,01558099	0,00433588	0,00117930	0,00052543
2,25	108,307647	14,0248981	2,52309262	0,53990286	0,16038371	0,03294927	0,00919078	0,00249754	0,00114458
2,5	235,656654	30,6518001	5,52014883	1,18237508	0,28192066	0,07228192	0,02020503	0,00548699	0,00332177

$\frac{8}{R\pi^2} I_{0022}^1$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	0,84999163	0,11684993	0,01972636	0,00420741	0,00099934	0,00025552	0,00007074	0,00001926	0,00000811
0,75	1,21434464	0,15733844	0,02822344	0,00602348	0,00143148	0,00036591	0,00010154	0,00002763	0,00001204
1,00	1,95682990	0,25376982	0,04556054	0,00973103	0,00231417	0,00059190	0,00016455	0,00004474	0,00001991
1,25	3,48982078	0,45301130	0,08140844	0,01740239	0,00414169	0,00106007	0,00029529	0,00008022	0,00003652
1,5	6,75295881	0,87744174	0,15783592	0,03377018	0,00804370	0,00206032	0,00057504	0,00015612	0,00007263
1,75	13,9207990	1,81047475	0,32599373	0,06981220	0,01664243	0,00426610	0,00119289	0,00032371	0,00015362
2,00	30,10118303	3,91829523	0,70621735	0,15137521	0,03611661	0,00926657	0,00259527	0,00070406	0,00034004
2,25	67,4431405	9,84509920	1,58517176	0,34008226	0,08120880	0,02084988	0,00584943	0,00158665	0,00077809
2,5	155,141590	20,2282808	3,65280583	0,78437090	0,18745900	0,04816732	0,01353309	0,00367087	0,00182396

$$\frac{8}{R\tau^2} I_{0200}$$

β	α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	0,5	46,3971917	3,49460895	0,45311156	0,07792728	0,01588165	0,00287850	0,00087247	0,00023287	0,00006351
0,75	0,5	57,4845804	4,33577386	0,56299858	0,09696264	0,01978716	0,00352997	0,00109078	0,00029111	0,00007943
1,00	0,5	77,8402041	5,88136001	0,76508501	0,13199876	0,02698115	0,00471192	0,00149377	0,00039859	0,00010875
1,25	0,5	115,168853	8,71838445	1,13640573	0,19643866	0,04022465	0,00684659	0,00223754	0,00059690	0,00016269
1,5	0,5	185,529168	14,0712982	1,83887986	0,31828398	0,06739077	0,01137915	0,00364913	0,00097314	0,00026468
1,75	0,5	323,154226	24,5521015	3,21252855	0,55736545	0,11452295	0,01840628	0,00642940	0,00171394	0,00046471
2,00	0,5	602,798336	45,8688091	6,01155719	1,04464341	0,23290881	0,03015848	0,01211691	0,00322895	0,00087209
2,25	0,5	1191,31790	90,7709848	11,9134115	1,64738847	0,42714239	0,06498749	0,02416362	0,00643721	0,00173127
2,5	0,5	2468,20384	188,275531	24,7413056	4,31059637	0,88917770	0,13212065	0,05046056	0,01343970	0,00359934

$$\frac{8}{R\tau^2} I_{0220}$$

β	α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	0,5	16,6051699	1,31835643	0,16449170	0,02848658	0,00584342	0,00097977	0,00031976	0,00008651	0,00002382
0,75	0,5	22,0763646	1,76243736	0,21907374	0,03797187	0,00779536	0,00128817	0,00043441	0,00011555	0,00003179
1,00	0,5	32,5777190	2,61975010	0,32396581	0,05621136	0,01155097	0,00187308	0,00064527	0,00017148	0,00004711
1,25	0,5	52,8536673	4,28658296	0,52678120	0,09150449	0,01882302	0,00298641	0,00105482	0,00027986	0,00007670
1,5	0,5	93,1929382	7,62793604	0,93091108	0,16188615	0,03333596	0,00516760	0,00187528	0,00049635	0,00013565
1,75	0,5	176,362883	12,8819380	1,76546040	0,30734977	0,06335498	0,00959654	0,00356767	0,00094463	0,00025726
2,00	0,5	353,788949	25,7490399	3,54864085	0,61842551	0,12760334	0,01891124	0,00720381	0,00190520	0,00051730
2,25	0,5	743,730933	53,9475430	7,48865156	1,30375259	0,26926422	0,03912646	0,01523766	0,00402594	0,00108967
2,5	0,5	1622,26155	123,996957	16,3307705	2,85145101	0,58944434	0,08418563	0,03343257	0,00882618	0,00238202

$$\frac{8}{R^{\pi^2}} I_{1002}^1$$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	2,81994848	0,56978466	0,08916347	0,01738075	0,00387206	0,00094294	0,00024601	0,00006644	0,00001876
0,75	3,75189134	0,75856401	0,11881875	0,02318164	0,00516839	0,00125950	0,00032871	0,00008884	0,00002510
1,00	5,54004034	1,12123889	0,17581126	0,03434087	0,00766357	0,00186913	0,00048801	0,00013201	0,00003732
1,25	8,99095269	1,82224724	0,28611934	0,05594439	0,01249734	0,00305084	0,00079690	0,00021576	0,00006105
1,5	15,8528582	3,21854843	0,50599481	0,09904964	0,02214934	0,00541205	0,00141429	0,00038327	0,00010854
1,75	29,9930545	6,10089195	0,96029959	0,18819048	0,04212528	0,01030239	0,00269347	0,00073058	0,00020708
2,00	60,1456543	12,2573157	1,93156479	0,37893398	0,08490457	0,02078308	0,00543609	0,00147577	0,00041868
2,25	126,397557	25,8042430	4,07077757	0,79941757	0,17928680	0,04392393	0,01149453	0,00312315	0,00088681
2,5	275,653715	56,3620842	8,90062272	1,74960531	0,39274348	0,09630035	0,02521410	0,00685654	0,00194856

$$\frac{8}{R^{\pi^2}} I_{1200}$$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	101,159628	6,25288542	0,72103494	0,11466593	0,02209370	0,00482678	0,00115111	0,00029270	0,00007814
0,75	125,294232	7,75462839	0,89543705	0,14259598	0,02751094	0,00601701	0,00144092	0,00036570	0,00009772
1,00	169,585835	10,5128334	1,21603882	0,19398297	0,03610437	0,00821188	0,00196334	0,00050039	0,00013387
1,25	250,767453	15,5791854	1,80483429	0,28845074	0,05584031	0,01225290	0,00293392	0,00074880	0,00020058
1,5	403,698960	25,1158083	2,91638230	0,47065631	0,09056208	0,01990441	0,00477321	0,00121989	0,00032718
1,75	702,652139	43,7892468	5,09391904	0,81710065	0,15872471	0,03493909	0,00839034	0,00214705	0,00057651
2,00	1309,74868	81,7477628	9,52506354	1,53032034	0,29771407	0,06562406	0,01470598	0,00404237	0,00108656
2,25	2386,68387	161,663758	18,8636386	3,03492502	0,59120335	0,13047546	0,03140696	0,00805434	0,00216697
2,5	5355,86898	335,120878	39,1521976	6,30685187	1,23000528	0,27174950	0,06547861	0,01680749	0,00452579

$$\frac{8}{F\pi^2} I_{2200}^1$$

$\beta \backslash \alpha$	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	284,669273	13,3237669	1,30177440	0,18554631	0,03309095	0,00682751	0,00155842	0,00038281	0,00009939
0,75	352,471729	16,5156220	1,61568147	0,23059010	0,04117684	0,00850617	0,00194380	0,00047799	0,00012422
1,00	476,860332	22,3757511	2,19248420	0,31342693	0,05605883	0,01159801	0,00265408	0,00065350	0,00017004
1,25	704,755740	33,1218859	3,25125190	0,46563030	0,08342844	0,01728918	0,00396256	0,00097707	0,00025457
1,5	1 133,86801	53,3758035	5,24889973	0,75310695	0,13517533	0,02805937	0,00644088	0,00159041	0,00041490
1,75	1 972,52280	92,9894971	9,16006336	1,31655664	0,23670198	0,04921039	0,01131219	0,00279693	0,00073053
2,00	3 674,09546	173,467543	17,1145784	2,46369328	0,44360767	0,09235510	0,02125742	0,00526211	0,00137590
2,25	7 252,04052	342,821939	33,8698273	4,88238957	0,88027591	0,18349223	0,04228283	0,01047781	0,00274232
2,5	15 008,1282	710,241182	70,2540011	10,1394825	1,83024005	0,38192926	0,08809926	0,02185189	0,00572421

$$\frac{1}{4F^2\pi^2} I_{0002}^2$$

$\beta \backslash \alpha$	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	8,16370764	0,80578392	0,12227174	0,02327899	0,00509117	0,00122168	0,00031317	0,00008433	0,00002358
0,75	10,9067899	1,08001059	0,16436762	0,03137528	0,00687755	0,00165365	0,00042465	0,00011452	0,00003207
1,00	16,1988451	1,61052161	0,24600625	0,04711040	0,01035578	0,00249607	0,00064235	0,00017356	0,00004869
1,25	26,4789037	2,64437801	0,40555747	0,07793819	0,01718459	0,00415298	0,00107121	0,00029002	0,00008150
1,5	47,0644795	4,72165647	0,72709363	0,14022303	0,03101171	0,00751419	0,00194259	0,00052698	0,00014835
1,75	89,7813942	9,04649396	1,39847081	0,27059821	0,06001568	0,01457735	0,00377649	0,00102634	0,00028940
2,00	181,461280	18,3572549	2,84774811	0,55267793	0,12288990	0,02991383	0,00776411	0,00211346	0,00059677
2,25	384,050393	38,9890417	6,06697957	1,18053131	0,26307581	0,06415813	0,01667894	0,00454645	0,00128532
2,5	842,652719	85,8085038	13,3878832	2,61089557	0,58292375	0,14238866	0,03706664	0,01011570	0,00286269

$$\frac{1}{4R^{2\alpha}} I_{0,022}^2$$

α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	2,98464540	0,30006012	0,04629309	0,00894221	0,00198039	0,00048042	0,00012433	0,00003376	0,00000951
0,75	4,28004215	0,43133153	0,06668765	0,01290533	0,00286255	0,00069535	0,00018016	0,00004896	0,00001381
1,00	6,92779931	0,70015630	0,10852182	0,02104606	0,00467677	0,00113782	0,00029519	0,00008032	0,00002267
1,25	12,4124938	1,25878656	0,19552066	0,03800178	0,00846039	0,00206162	0,00053558	0,00014590	0,00004123
1,5	24,1246602	2,45235501	0,38203814	0,07440961	0,01659526	0,00404998	0,00105347	0,00028731	0,00008126
1,75	49,265470	5,08843868	0,79448757	0,15503685	0,03463252	0,00846330	0,00220399	0,00060168	0,00017032
2,00	108,316842	11,0650908	1,73110969	0,33837678	0,07569372	0,01851951	0,00482767	0,00131906	0,00037367
2,25	243,354329	24,9104333	3,90399313	0,76422200	0,17116264	0,04192027	0,01093731	0,00299063	0,00084775
2,5	561,027366	57,5306485	9,03001051	1,76990714	0,39682565	0,09727493	0,02539883	0,00694936	0,00197101

$$\frac{1}{4R^{2\beta}} I_{0200}^2$$

β	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	214,008089	11,3405838	1,17219796	0,17202324	0,03119233	0,00650106	0,00149359	0,00036851	0,00009597
0,75	265,621547	14,1195875	1,46449902	0,21567240	0,03923778	0,00820355	0,00189019	0,00046760	0,00012207
1,00	360,649733	19,2492219	2,00552371	0,29667560	0,05420613	0,01137812	0,00263121	0,00065308	0,00017101
1,25	535,547935	28,7192792	3,00761312	0,44718747	0,08210052	0,01730981	0,00401908	0,00100119	0,00026303
1,5	866,601223	46,7046815	4,91754049	0,73503724	0,13561553	0,02872178	0,00669590	0,00167411	0,00044126
1,75	1517,04578	82,1622128	8,69638860	1,30650816	0,24219142	0,05151225	0,01205487	0,00302420	0,00079951
2,00	2844,60952	154,767653	16,4606586	2,48449602	0,46252444	0,09875160	0,02318820	0,00583467	0,00154663
2,25	5650,28649	308,673036	32,9703405	4,99670400	0,93365882	0,19999913	0,04709902	0,01188147	0,00315657
2,5	11760,8376	644,767242	69,1237382	10,5123263	1,97045957	0,42326559	0,09992020	0,02526016	0,00672346

$$\frac{1}{4R^{2\alpha}} I_{0.220}^2$$

β \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	77,2170710	4,15402123	0,43652638	0,06512464	0,01199432	0,00253616	0,00059040	0,00014742	0,00003881
0,75	102,923579	5,55077679	0,58487220	0,08748508	0,01615190	0,00342285	0,00079840	0,00019971	0,00005266
1,00	152,416859	8,24585528	0,87176881	0,13082481	0,02422648	0,00514802	0,00120374	0,00030176	0,00007973
1,25	248,331767	13,4820889	1,43066995	0,21546998	0,04003318	0,00853214	0,00200031	0,00050262	0,00013307
1,5	439,917095	23,9694696	2,55321998	0,38593325	0,07194247	0,01537833	0,00361481	0,00091041	0,00024152
1,75	836,489990	45,7356963	4,88947730	0,74162601	0,13868112	0,02972677	0,00700465	0,00176794	0,00046991
2,00	1685,64719	92,4587768	9,91738358	1,50896860	0,28296911	0,06080679	0,01435948	0,00363119	0,00096676
2,25	3558,11905	195,720782	21,0553246	3,21249060	0,60391178	0,13005555	0,03077067	0,00779405	0,00207805
2,5	7788,92311	429,507656	46,3236442	7,08459870	1,33465189	0,28795789	0,06823964	0,01730893	0,00462054

$$\frac{1}{4R^{2\alpha}} I_{1002}^2$$

β \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	21,7871952	1,65155559	0,21419515	0,03676584	0,00747409	0,00169914	0,00041789	0,00010891	0,00002967
0,75	29,2672633	2,21025912	0,28748158	0,04947614	0,01008189	0,00229684	0,00056795	0,00014774	0,00004031
1,00	43,1110852	3,28971532	0,42942189	0,07414741	0,01515354	0,00346121	0,00085480	0,00022360	0,00006111
1,25	70,3483947	5,39019878	0,70640121	0,12241256	0,02509742	0,00574857	0,00142320	0,00037309	0,00010216
1,5	124,818164	9,60395676	1,26369594	0,21978118	0,04520418	0,01038290	0,00257681	0,00067694	0,00018571
1,75	237,700241	18,3633723	2,42554156	0,43229691	0,08732422	0,02010969	0,00500209	0,00131666	0,00036183
2,00	479,673679	37,1941047	4,92997823	0,86303212	0,17851966	0,04120662	0,01027038	0,00270812	0,00074536
2,25	1013,78085	78,8673770	10,4858518	1,84062260	0,38163048	0,08826741	0,02203812	0,00581981	0,00160390
2,5	2221,65437	173,328186	23,1062303	4,06541559	0,84460868	0,19568605	0,04893000	0,01293788	0,00356952

		$\frac{1}{4R^{2\alpha}} I_{200}^2$									
α		0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5	
0,5	504,856849	21,6997782	1,97494807	0,26575056	0,04523640	0,00898551	0,00198789	0,00047579	0,00012087		
0,75	625,314645	26,9954831	2,46480135	0,33276787	0,05682886	0,01132319	0,00251232	0,00060293	0,00015354		
1,00	849,847243	36,7641945	3,37072411	0,45702685	0,07837534	0,01567794	0,00349127	0,00084068	0,00021475		
1,25	1261,05723	54,7845201	5,04701289	0,68765645	0,11848236	0,02380551	0,00532274	0,00128646	0,00032972		
1,5	2038,99715	88,9792447	8,23849434	1,12820463	0,19533283	0,03942323	0,00885102	0,00214718	0,00055218		
1,75	3566,64782	156,334576	14,5461173	2,00179027	0,34819544	0,07057559	0,01590651	0,00387222	0,00099892		
2,00	6682,97815	294,142259	27,4928769	3,80051612	0,66386013	0,13507523	0,03054884	0,00745965	0,00192965		
2,25	13658,8037	586,038404	54,9966656	7,63262721	1,33814612	0,27317827	0,06196601	0,01517123	0,00393364		
2,5	27596,7712	1223,04127	115,175279	16,0385874	2,82067147	0,57745062	0,13131206	0,03222016	0,00837038		

		$\frac{1}{4R^{2\alpha}} I_{2200}^2$									
α		0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5	
0,5	1582,31158	50,6691830	3,85126219	0,45881768	0,07156050	0,01331309	0,00279987	0,00064378	0,00015832		
0,75	1961,91808	62,9755319	4,80047204	0,57368116	0,08975677	0,01674937	0,00353278	0,00081451	0,00029081		
1,00	2660,23385	89,6590207	6,55417307	0,78641385	0,12353777	0,02314317	0,00489934	0,00113346	0,00028033		
1,25	3944,14873	127,464652	9,79530395	1,18072602	0,18633079	0,03505985	0,00745258	0,00173069	0,00042953		
1,5	6371,63749	206,713793	15,9581316	1,93285499	0,30647136	0,05792490	0,01236436	0,00288234	0,00071784		
1,75	11135,6040	362,656376	28,1223876	3,42213957	0,54508769	0,10346696	0,02217278	0,00518741	0,00129611		
2,00	20848,1084	681,400251	53,0596749	6,48441344	1,03714838	0,19763141	0,04250191	0,00997527	0,00249955		
2,25	41353,4818	1355,93857	105,975759	13,0003696	2,08690591	0,39900407	0,08607034	0,02025618	0,00508810		
2,5	85971,4948	2826,79739	221,640453	27,2778249	4,39240520	0,84219757	0,18214014	0,04296410	0,01081407		

		$\frac{8}{R\pi^2} J_{0012}^I$									
α	β	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5	
0,5	0,5	0,38503109	0,04839070	0,00843595	0,00175346	0,00040664	0,00010161	0,00002748	0,00000736	0,00000335	
0,75	0,75	0,78452996	0,09917238	0,01738518	0,00363264	0,00084662	0,00021254	0,00005783	0,00001554	0,00000711	
1,00	1,00	1,62704244	0,21082702	0,03783802	0,00807918	0,00192082	0,00049117	0,00013645	0,00003711	0,00001638	
1,25	1,25	3,30978980	0,42944084	0,07713668	0,01648229	0,00392122	0,00100329	0,00027920	0,00007588	0,00003417	
1,5	1,5	6,95451070	0,90311737	0,16236640	0,03471920	0,00826568	0,00211622	0,00058995	0,00016023	0,00007359	
1,75	1,75	15,0696245	1,95861113	0,35783052	0,07542283	0,01796924	0,00460368	0,00128561	0,00034898	0,00016332	
2,00	2,00	33,2389713	4,30190763	0,77120942	0,16450745	0,03907820	0,00998529	0,00278371	0,00075348	0,00036327	
2,25	2,25	76,2741115	9,92950711	1,78981394	0,35367224	0,09154742	0,02348731	0,00657986	0,00178499	0,00086322	
2,5	2,5	176,654794	23,0227889	4,15502655	0,89174113	0,21301590	0,05470944	0,01535244	0,00416605	0,00204076	

		$\frac{8}{R\pi^2} J_{0210}^I$									
α	β	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5	
0,5	0,5	7,90370966	0,59940130	0,07827233	0,01355330	0,00271129	0,00046683	0,00015455	0,00004114	0,00001133	
0,75	0,75	14,8615085	1,12787969	0,14739567	0,02554111	0,00524211	0,00086907	0,00029195	0,00007767	0,00002137	
1,00	1,00	27,0673852	2,05605587	0,26894918	0,04664691	0,00958203	0,00156182	0,00053481	0,00014215	0,00003904	
1,25	1,25	50,1173515	3,81070946	0,49899993	0,08663556	0,01781321	0,00284589	0,00099664	0,00026461	0,00007253	
1,5	1,5	95,9717528	7,30466722	0,95756704	0,16642711	0,03419661	0,00535465	0,00192131	0,00050951	0,00013929	
1,75	1,75	190,958648	14,5486835	1,90071538	0,33217552	0,06843313	0,01046397	0,00384824	0,00101929	0,00027784	
2,00	2,00	394,327092	30,0709680	3,95029052	0,68798154	0,14186943	0,02123607	0,00799737	0,00211587	0,00057501	
2,25	2,25	841,696191	64,2429735	8,44907052	1,47263480	0,30395176	0,04461207	0,01717421	0,00453926	0,00122992	
2,5	2,5	1848,06873	141,170344	18,5799912	3,24197942	0,66973468	0,09658750	0,03792632	0,00109836	0,00270628	

$$\frac{1}{4R^2 z^3} J_{0,0,1,2}^1$$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	1,45254171	0,14802694	0,02311043	0,00450948	0,00100728	0,00024614	0,00006410	0,00001750	0,00000495
0,75	2,87868675	0,28989829	0,04479241	0,00866348	0,00192077	0,00046640	0,00012080	0,00003282	0,00000925
1,00	5,74758792	0,58024124	0,08984873	0,01741038	0,00386616	0,00094004	0,00024375	0,00006630	0,00001871
1,25	11,7459295	1,18892296	0,18452698	0,03582706	0,00796908	0,00194041	0,00050376	0,00013716	0,00003874
1,5	24,7809987	2,51488100	0,39121174	0,07610305	0,01695542	0,00413426	0,00107459	0,00029288	0,00008279
1,75	53,9021960	5,48371921	0,85486831	0,16660012	0,03717441	0,00907598	0,00236167	0,00064428	0,00018227
2,00	120,352085	12,2717338	1,91681656	0,37417356	0,08360720	0,02043626	0,00532304	0,00145341	0,00041148
2,25	274,534970	28,0504855	4,38916568	0,85806123	0,19196765	0,04697210	0,01224571	0,00334613	0,00094797
2,5	637,130233	65,2186101	10,2211618	2,00083628	0,44812756	0,10975326	0,02863546	0,00782990	0,00221953

$$\frac{1}{4R^2 z^3} J_{0,2,10}^2$$

β \ / \ α	0,5	0,75	1,00	1,25	1,5	1,75	2,00	2,25	2,5
0,5	36,7477561	1,97631948	0,20761547	0,03096408	0,00570113	0,00120517	0,00028049	0,00007002	0,00001843
0,75	69,2610842	3,73308588	0,39309352	0,05876201	0,01084260	0,00229651	0,00053542	0,00013387	0,00003529
1,00	126,553399	6,84034586	0,72246792	0,10831675	0,02004082	0,00425522	0,00099428	0,00024910	0,00006577
1,25	235,24398	12,7563036	1,35194076	0,20336516	0,03774201	0,00803578	0,00188227	0,00047259	0,00012503
1,5	452,446267	24,617766	2,61843038	0,39523591	0,07358256	0,01571102	0,00368930	0,00092834	0,00024609
1,75	904,321903	49,3697188	5,26964732	0,79809282	0,14903790	0,03190840	0,00751078	0,00189393	0,00050298
2,00	1875,56403	102,715914	10,9998181	1,67112142	0,31294808	0,06716782	0,01584490	0,00400313	0,00106492
2,25	4019,61358	220,765553	23,7118545	3,61242118	0,67818893	0,14588068	0,03447967	0,00872577	0,00232467
2,5	8857,44692	487,703382	52,5199239	8,02080997	1,50910635	0,32523644	0,07699968	0,01951460	0,00520555

Der Verfasser dankt auch an dieser Stelle Fräulein M. BLAZSÓ für ihre Hilfe bei den numerischen Rechnungen.

LITERATUR

1. F. BERENCZ, Acta Phys. Hung., **6**, 243, 1957.
2. M. KOTANI, A. AMEMIYA und T. SIMOSE, Proc. Phys. Math. Soc., Japan, **20**, extra No 1 (1938). 22. extra No. (1940).
3. Y. SUGIURA, Z. Physik, **45**, 484, 1927.
4. F. NEUMANN, Vorlesungen über die Theorie des Potentials und der Kugelfunktionen, Teubner, Leipzig, 1887.

НЕКОТОРЫЕ БИПОЛЯРНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ ДЛЯ ИСЧИСЛЕНИЙ НА ОСНОВЕ
МЕТОДА КОРРЕЛИРОВАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТ

Ф. БЕРЕНЦ

Резюме

Табулированы нумерические значения интегралов

$$I_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \mu_1^i \mu_2^k v_1^l v_2^m r_{12}^n d\tau,$$

$$J_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\psi_2 \pm \psi_3 - \psi_4 \mp \psi_5) \mu_1^i \mu_2^k v_1^l v_2^m r_{12}^n d\tau,$$

$$\psi_1 = \exp[-a(\mu_1 + \mu_3)], \quad \psi_2 = \exp[\beta(v_1 - v_2)], \quad \psi_3 = \exp[\beta(v_1 - v_3)],$$

$$\psi_4 = \exp[-\beta(v_1 - v_2)], \quad \psi_5 = \exp[-\beta(v_1 - v_2)]$$

и $i, k, l, m, n = 0, 1, 2$.