

Inhaltsverzeichnis

Erster Teil

Einführung in die Integrationsprobleme der Quantenchemie		Seite
1.1	Einleitung und grundsätzliche Fragen der Quantenchemie	1
1.2	Mathematische Formulierung und Lösungsmethoden	2
1.3	Die Bezeichnung der Integrale	5
1.4	Berechnung der Zweizentrenintegrale	7
1.5	Die Integrale der <i>K</i> -Schale	12
1.6	Die Integrale der <i>L</i> -Schale	14
1.7	Übersicht über die bisher tabellierten Funktionen und Integrale einschließlich der im Teil 3 angegebenen	15

Zweiter Teil

Integralformeln und Literaturverzeichnis

2.1	Einführung	21
2.2	Einzentrenintegrale der <i>K</i> - und <i>L</i> -Schale für verschiedene effektive Abschirmzahlen in den SLATER-Funktionen	22
2.3	Wechselwirkungsintegrale der <i>K</i> - und <i>L</i> -Schale für gleiche effektive Abschirmzahlen in den SLATER-Funktionen	22
2.4	Übergang von den mit ψ_s' gebildeten Integralen zu denen mit ψ_k und ψ_s	41
2.5	Überlappungs- und Übergangsintegrale der <i>K</i> - und <i>L</i> -Schale für ungleiche effektive Abschirmzahlen in den SLATER-Funktionen.	43
2.6	Literaturverzeichnis	46

Dritter Teil

Tabellen

Einteilung der tabellierten Funktionen und Integrale		49
3.1	Einzentrenintegrale mit verschiedenen Abschirmzahlen α, β in den Funktionen	51
3.2	Wechselwirkungsintegrale der <i>K</i> - und <i>L</i> -Schale mit gleichen Abschirmzahlen δ in den Funktionen	66
3.3	Hilfsfunktionen	78
3.4	Integrale der <i>K</i> -Schale für verschiedene Werte p_1, p_2, p_3, p_4 und $\alpha = \beta R$	145