

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 K -Schale	12
1.6 Die Integrale der L -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 K - und L -Schale für verschiedene effektive Abschirmzahlen in den SLATER-Funktionen	22
2.3 Wechselwirkungsintegrale der K - und L -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 Überlappings- und Übergangsintegrale der K - und L -Schale für ungleiche effektive Abschirm- zahlen 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 K - und L -Schale mit gleichen Abschirmzahlen δ in den Funktionen	66
3.3 Hilfsfunktionen	78
3.4 Integrale der K -Schale für verschiedene Werte p_1, p_2, p_3, p_4 und $\alpha = \beta R$	145