(Tip-１）簡略化スレータ型原子軌道の具体的表現

(a) 実距離 r_a での表現（ $\mu = Z/(na_0)$）とする。但し Z：原子番号　n：主量子数）

＜拡張 Hückel 法で使用＞　　　（ $x_a = r_a \sin(\theta)\cos(\varphi)$ etc ）

$$\chi_{1s} = \left(1/\sqrt{\pi}\right)\mu^{3/2}\exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{2s} = \left(1/\sqrt{3\pi}\right)\mu^{5/2} r_a \exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{2p} = \left(1/\sqrt{\pi}\right)\mu^{5/2}(x_a, y_a, z_a)\exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{3s} = \sqrt{2/(45\pi)}\mu^{7/2} r_a{}^2 \exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{3p} = \sqrt{2/(15\pi)}\mu^{7/2}(x_a, y_a, z_a) r_a \exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{3dz^2} = \sqrt{2/(9\pi)}\mu^{7/2} z_a{}^2 \exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{3dxy} = \sqrt{2/(3\pi)}\mu^{7/2}(x_a y_a, y_a z_a, z_a x_a)\exp\left(-\mu r_a\right)$$

$$\chi_{3dx^2-y^2} = \sqrt{3/(18\pi)}\mu^{7/2}(x_a{}^2 - y_a{}^2)\exp\left(-\mu r_a\right)$$

(b) 無次元の距離 $r = r_a / a_0$ での表現

スレータ型軌道は $\zeta_0 = Z/n$（Z：原子番号　n：主量子数)とすると、たとえば

$$\chi_{3s} = \sqrt{2/(45\pi)}\varsigma_0{}^{3/2} r^2 \exp\left(-\varsigma_0 r\right)$$

これをガウス型軌道で近似する短縮係数 d_i・短縮指数 α_i は、$\zeta_0 = 1$ に対して行い、各原子番号に対応するガウス型軌道は、

$$r \rightarrow \zeta_0 \cdot r$$

と置き換える、即ち

$$\alpha r^2 \rightarrow \alpha(\zeta_0 \cdot r)^2、$$

よって

$$\alpha \rightarrow \alpha(\zeta_0)^2$$

と置き換えればよい。即ち近似（短縮係数 d_i・短縮指数 α_i）関係は下記の式による。

$$\chi_{3s} = \sqrt{2/(45\pi)} r^2 \exp(-r) \quad \Longleftrightarrow \quad \chi_{3s} = \sum_i d_i \left(\frac{2\alpha_i}{\pi}\right)^{3/4} r^2 \exp(-\alpha_i r^2)$$

この目的のために使用するスレータ型軌道を、次ページに列記している。

＜ガウス型軌道での展開の対象となるスレータ型軌道＞（ $x = r\sin(\theta)\cos(\varphi)$ etc ）

$$\chi_{1s} = \left(1/\sqrt{\pi}\right)\exp(-r)$$

$$\chi_{2s} = \left(1/\sqrt{3\pi}\right)r\exp(-r)$$

$$\chi_{2p} = \left(1/\sqrt{\pi}\right)(x, y, z)\exp(-r)$$

$$\chi_{3s} = \sqrt{2/(45\pi)}\,r^2\exp(-r)$$

$$\chi_{3p} = \sqrt{2/(15\pi)}\,(x, y, z)r\exp(-r)$$

$$\chi_{3dz^2} = \sqrt{2/(9\pi)}\,z^2\exp(-r)$$

$$\chi_{3dxy} = \sqrt{2/(3\pi)}\,(xy, yz, zx)\exp(-r)$$

$$\chi_{3dx^2-y^2} = \sqrt{3/(18\pi)}\,(x^2 - y^2)\exp(-r)$$