(Tip-２）ガウス型軌道の具体的表現

(a) ガウス型軌道の一般形

$$\chi = N x^l y^m z^n \exp\left(-\alpha r^2\right) \equiv N\chi_0$$

$$N = \left\{ \frac{2^{2(l+m+n)+3/2}\,\alpha^{l+m+n+3/2}}{(2l-1)!!(2m-1)!!(2n-1)!!\pi^{3/2}} \right\}^{1/2}$$

(b) 具体的表現

対象軌道	χ^{GTO}	係数　N	χ_0
1s,2s,3s 軌道	χ_s	$\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4}$	$\exp\left(-\alpha r^2\right)$
2p,3p 軌道	χ_p	$2\alpha^{1/2}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4}$	$(x,y,z)\exp\left(-\alpha r^2\right)$
3dz^2軌道 3dx^2,3dy^2：同タイプ	χ_d	$\frac{4\alpha}{\sqrt{3}}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4}$	$z^2\exp\left(-\alpha r^2\right)$
3dxy 軌道 3dyz,3zx：同タイプ	$\chi_{d'}$	$4\alpha\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4}$	$xy\exp\left(-\alpha r^2\right)$
3dx^2-y^2 軌道 これは使用しない		省略	省略

3d 軌道は、3dx^2, 3dy^2, 3dz^2, 3dxy, 3dyz, 3dzx の６つの軌道を使用する。

(a) スケール因子ζの適用

軌道の広がりを表現するため、スケール因子ζ_0= Z/n（Z：原子番号　n：主量子数）を適用する。

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

と置き換えると、

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

であるから、実際には

$$\alpha \rightarrow \alpha\zeta_0^2 = \alpha(Z/n)^2$$

として処理をし、上表の式がそのまま適用される。