

(Tip-6-4)

拡張Huckel法での重なり積分の具体的表現

σ・π表現としては、xをσ、y,zをπと読み替える。但し3d軌道関連ではy,zを適宜π、π'と読み替える。

重なり積分	係数	(t2:t'2の意味)	AnBm	(AnBmの左端の数字は係数)	係数/数値項の正確な表現
(1s,1s)	1/4*p^3*(1-t2)^1.5		A 2B 0-A 0B 2		1/4
(1s,2s)	1/13.9*p^4*(1-t2)^1.5*(1-t)		A 3B 0-A 2B 1-A 1B 2+A 0B 3		1/(8*sqrt(3))
(1s,2px)	1/8*p^4*(1-t2)^1.5*(1-t)		A 3B 1-A 2B 0-A 1B 3+A 0B 2		1/8
(1s,3s)	1/75.9*p^5*(1-t2)^1.5*(1-t)^2		A 4B 0-2A 3B 1+2A 1B 3-A 0B 4		1/(24*sqrt(10))
(1s,3px)	1/43.8*p^5*(1-t2)^1.5*(1-t)^2		A 4B 1-A 3B 0-A 3B 2+A 2B 1-A 2B 3+A 1B 2+A 1B 4-A 0B 3		1/(8*sqrt(30))
(1s,3dxx)	1/33.9*p^5*(1-t2)^1.5*(1-t)^2		A 4B 2-2A 3B 1+A 2B 0-A 2B 4+2A 1B 3-A 0B 2		1/(24*sqrt(2))
(1s,3dyy)	1/67.9*p^5*(1-t2)^1.5*(1-t)^2		-A 4B 2+A 4B 0+A 2B 4-A 2B 0-A 0B 4+A 0B 2		1/(48*sqrt(2))
(1s,3dzz)	1/67.9*p^5*(1-t2)^1.5*(1-t)^2		-A 4B 2+A 4B 0+A 2B 4-A 2B 0-A 0B 4+A 0B 2		1/(48*sqrt(2))
(1s,4s)	1/567.9*p^6*(1-t2)^1.5*(1-t)^3		A 5B 0-3A 4B 1+2A 3B 2+2A 2B 3-3A 1B 4+A 0B 5		1/(96*sqrt(35))
(2s,2s)	1/48*p^5*(1-t2)^2.5		A 4B 0-2A 2B 2+A 0B 4		1/48
(2s,2px)	1/27.7*p^5*(1-t2)^2.5		A 4B 1-A 3B 0+A 3B 2-A 2B 1-A 2B 3+A 1B 2-A 1B 4+A 0B 3		1/(16*sqrt(3))
(2s,3s)	1/262.9*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 0-A 4B 1-2A 3B 2+2A 2B 3+A 1B 4-A 0B 5		1/(48*sqrt(30))
(2s,3px)	1/151.8*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-A 4B 0-2A 3B 3+2A 2B 2+A 1B 5-A 0B 4		1/(48*sqrt(10))
(2s,3dxx)	1/117.6*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 2-2A 4B 1+A 4B 3-A 3B 4-2A 3B 2+A 3B 0+A 2B 1-A 2B 5+2A 2B 3+2A 1B 4-A 1B 2-A 0B 3		1/(48*sqrt(6))
(2s,3dyy)	1/235.2*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 0-A 5B 2+A 4B 1-A 4B 3+A 3B 4-A 3B 0-A 2B 1+A 2B 5-A 1B 4+A 1B 2-A 0B 5+A 0B 3		1/(96*sqrt(2))
(2s,3dzz)	1/235.2*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 0-A 5B 2+A 4B 1-A 4B 3+A 3B 4-A 3B 0-A 2B 1+A 2B 5-A 1B 4+A 1B 2-A 0B 5+A 0B 3		1/(96*sqrt(2))
(2s,4s)	1/1967.4*p^7*(1-t2)^2.5*(1-t)^2		A 6B 0-2A 5B 1-A 4B 2+4A 3B 3-A 2B 4-2A 1B 5+A 0B 6		1/(192*sqrt(105))
(2px,2px)	1/16*p^5*(1-t2)^2.5		A 4B 2-A 2B 0-A 2B 4+A 0B 2		1/16
(2px,3s)	1/151.8*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-2A 4B 2+A 4B 0-2A 3B 1+2A 2B 4-A 1B 5+2A 1B 3-A 0B 4		1/(48*sqrt(10))
(2px,3px)	1/87.6*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 2-A 4B 3-A 3B 4-A 3B 0+A 2B 1+A 2B 5+A 1B 2-A 0B 3		1/(16*sqrt(30))
(2px,3dxx)	1/67.9*p^5*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 3-A 4B 2-A 3B 5-A 3B 1+A 2B 0+A 2B 4+A 1B 3-A 0B 2		1/(48*sqrt(2))
(2px,3dyy)	1/135.8*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-A 5B 3+A 4B 0-A 4B 2+A 3B 5-A 3B 1-A 2B 0+A 2B 4-A 1B 5+A 1B 3-A 0B 4+A 0B 2		1/(96*sqrt(2))
(2px,3dzz)	1/135.8*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-A 5B 3+A 4B 0-A 4B 2+A 3B 5-A 3B 1-A 2B 0+A 2B 4-A 1B 5+A 1B 3-A 0B 4+A 0B 2		1/(96*sqrt(2))
(2px,4s)	1/1135.9*p^7*(1-t2)^2.5*(1-t)^2		A 6B 1+A 5B 0-3A 5B 2+2A 4B 3-3A 4B 1+2A 3B 2+2A 3B 4+2A 2B 3-3A 2B 5-3A 1B 4+A 1B 6+A 0B 5		1/(192*sqrt(35))
(2py,2py)	1/32*p^5*(1-t2)^2.5		-A 4B 2+A 4B 0-A 2B 4-A 0B 4+A 0B 2		1/32
(2py,3py)	1/175.3*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 0-A 5B 2-A 4B 1+A 4B 3+A 3B 4-A 3B 0+A 2B 1-A 2B 5-A 1B 4+A 1B 2+A 0B 5-A 0B 3		1/(32*sqrt(30))
(2py,3dxy)	1/78.4*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-A 5B 3-A 4B 0+A 4B 2+A 3B 5-A 3B 1+A 2B 0-A 2B 4-A 1B 5+A 1B 3+A 0B 4-A 0B 2		1/(32*sqrt(6))
(2pz,2pz)	1/32*p^5*(1-t2)^2.5		-A 4B 2+A 4B 0-A 2B 4-A 0B 4+A 0B 2		1/32
(2pz,3pz)	1/175.3*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 0-A 5B 2-A 4B 1+A 4B 3+A 3B 4-A 3B 0+A 2B 1-A 2B 5-A 1B 4+A 1B 2+A 0B 5-A 0B 3		1/(32*sqrt(30))
(2pz,3dzz)	1/78.4*p^6*(1-t2)^2.5*(1-t)		A 5B 1-A 5B 3-A 4B 0-A 4B 2+A 3B 5-A 3B 1+A 2B 0-A 2B 4-A 1B 5+A 1B 3+A 0B 4-A 0B 2		1/(32*sqrt(6))
(3s,3s)	1/1440*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 0-3A 4B 2+3A 2B 4-A 0B 6		1/1440
(3s,3px)	1/831.4*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 1-A 5B 0+A 5B 2-2A 4B 3-A 4B 1+2A 3B 2-2A 3B 4+2A 2B 3+A 2B 5-A 1B 4+A 1B 6-A 0B 5		1/(480*sqrt(3))
(3s,3dxx)	1/644*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 2-2A 5B 1+2A 5B 3+A 4B 0-4A 4B 2+2A 3B 1-2A 3B 5+4A 2B 4-A 2B 6+2A 1B 5-2A 1B 3-A 0B 4		1/(288*sqrt(5))
(3s,3dyy)	1/1288*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 2+A 6B 0-2A 5B 3+2A 5B 1+A 4B 2-A 4B 0+2A 3B 5-2A 3B 1-A 2B 4+A 2B 6-2A 1B 5+2A 1B 3-A 0B 4+A 0B 4		1/(576*sqrt(5))
(3s,3dzz)	1/1288*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 2+A 6B 0-2A 5B 3+2A 5B 1+A 4B 2-A 4B 0+2A 3B 5-2A 3B 1-A 2B 4+A 2B 6-2A 1B 5+2A 1B 3-A 0B 4+A 0B 4		1/(576*sqrt(5))
(3s,4s)	1/10776*p^8*(1-t2)^3.5*(1-t)		A 7B 0-A 6B 1-3A 5B 2+3A 4B 3+A 3A 3B 4-3A 2B 5-A 1B 6+A 0B 7		1/(2880*sqrt(14))
(3px,3px)	1/480*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 2-2A 4B 4-A 4B 0+2A 2B 2+A 2B 6-A 0B 4		1/480
(3px,3dxx)	1/371.8*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 3-A 5B 2+A 5B 4-A 4B 5-A 4B 1-A 4B 3-A 3B 2+A 3B 0+A 3B 4-A 3B 6+A 2B 3+A 2B 1+A 1B 4-A 1B 2-A 0B 3		1/(96*sqrt(15))
(3px,3dyy)	1/743.6*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 3+A 6B 1+A 5B 0-A 5B 4-A 4B 3+A 4B 5+A 3B 4-A 3B 0-A 3B 2+A 3B 6+A 2B 3-A 2B 1-A 1B 6+A 1B 2-A 0B 5+A 0B 3		1/(192*sqrt(15))
(3px,3dzz)	1/743.6*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 3+A 6B 1+A 5B 0-A 5B 4-A 4B 3+A 4B 5+A 3B 4-A 3B 0-A 3B 2+A 3B 6+A 2B 3-A 2B 1-A 1B 6+A 1B 2-A 0B 5+A 0B 3		1/(192*sqrt(15))
(3px,4s)	1/6221.5*p^8*(1-t2)^3.5*(1-t)		A 7B 1-2A 6B 2+A 6B 0-A 5B 3-2A 5B 1+4A 4B 4-A 4B 2-A 3B 5+4A 3B 3-A 2B 4-2A 2B 6-2A 1B 5+A 1B 7+A 0B 6		1/(960*sqrt(42))
(3py,3py)	1/960*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 2+A 6B 0-A 4B 2-A 4B 0+2A 4B 4-A 2B 4-A 2B 6+2A 2B 2+A 0B 6-A 0B 4		1/960
(3py,3dxy)	1/429.3*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 3+A 6B 1+2A 5B 2-A 5B 0-A 5B 4+A 4B 3-2A 4B 1+A 4B 5-A 3B 4+A 3B 0-A 3B 2+A 3B 6-2A 2B 5+A 2B 3+A 2B 1+A 1B 4-A 1B 6-A 1B 2+A 0B 5-A 0B 3		1/(192*sqrt(5))
(3pz,3pz)	1/960*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 2+A 6B 0-A 4B 2-A 4B 0+2A 4B 4-A 2B 4-A 2B 6+2A 2B 2+A 0B 6-A 0B 4		1/960
(3pz,3dzz)	1/429.3*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 3+A 6B 1+2A 5B 2-A 5B 0-A 5B 4+A 4B 3-2A 4B 1+A 4B 5-A 3B 4+A 3B 0-A 3B 2+A 3B 6-2A 2B 5+A 2B 3+A 2B 1+A 1B 4-A 1B 6-A 1B 2+A 0B 5-A 0B 3		1/(192*sqrt(5))
(3dxx,3dxx)	1/288*p^7*(1-t2)^3.5		A 6B 4-A 4B 6-2A 4B 2+2A 4B 2-A 0B 2		1/288
(3dxx,3dyy)	1/576*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 4+A 6B 2-2A 5B 3+2A 5B 1-2A 4B 2+A 4B 0+A 4B 6+2A 3B 5-2A 3B 1-A 2B 6+2A 2B 4-A 2B 0-2A 1B 5+2A 1B 3-A 0B 4+A 0B 2		1/576
(3dxx,3dzz)	1/576*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 4+A 6B 2-2A 5B 3+2A 5B 1-2A 4B 2+A 4B 0+A 4B 6+2A 3B 5-2A 3B 1-A 2B 6+2A 2B 4-A 2B 0-2A 1B 5+2A 1B 3-A 0B 4+A 0B 2		1/576
(3dxx,4s)	1/4819.2*p^8*(1-t2)^3.5*(1-t)		A 7B 2+2A 6B 1-3A 6B 3+2A 5B 4-6A 5B 2+A 5B 0+2A 4B 5+4A 4B 3-3A 4B 1+4A 3B 4+2A 3B 2-3A 3B 6+2A 2B 3+A 2B 7-6A 2B 5+2A 1B 6-3A 1B 4+A 0B 5		1/(576*sqrt(70))
(3dyy,3dyy)	1/768*p^7*(1-t2)^3.5		-2A 6B 2+A 6B 0+A 6B 4+3A 4B 2-2A 4B 0-A 4B 6-3A 2B 4+A 2B 0+2A 2B 6+2A 0B 4-A 0B 6-A 0B 2		1/768
(3dyy,3dzz)	1/2304*p^7*(1-t2)^3.5		-2A 6B 2+A 6B 0+A 6B 4+3A 4B 2-2A 4B 0-A 4B 6-3A 2B 4+A 2B 0+2A 2B 6+2A 0B 4-A 0B 6-A 0B 2		1/2304
(3dyy,4s)	1/9638.3*p^8*(1-t2)^3.5*(1-t)		A 7B 0-A 7B 2-3A 6B 1+3A 6B 3-2A 5B 4-A 5B 0+3A 5B 2-2A 4B 5+3A 4B 1-A 4B 3+3A 3B 6-A 3B 4-2A 3B 2-2A 2B 3+3A 2B 5-A 2B 7-3A 1B 6+3A 1B 4+A 0B 7-A 0B 5		1/(1152*sqrt(70))
(3dzz,3dzz)	1/768*p^7*(1-t2)^3.5		-2A 6B 2+A 6B 0+A 6B 4+3A 4B 2-2A 4B 0-A 4B 6-3A 2B 4+A 2B 0+2A 2B 6+2A 0B 4-A 0B 6-A 0B 2		1/768
(3dzz,4s)	1/9638.3*p^8*(1-t2)^3.5*(1-t)		A 7B 0-A 7B 2-3A 6B 1+3A 6B 3-2A 5B 4-A 5B 0+3A 5B 2-2A 4B 5+3A 4B 1-A 4B 3+3A 3B 6-A 3B 4-2A 3B 2-2A 2B 3+3A 2B 5-A 2B 7-3A 1B 6+3A 1B 4+A 0B 7-A 0B 5		1/(1152*sqrt(70))
(3dxy,3dxy)	1/192*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 4+A 6B 2-A 4B 0+A 4B 6-2A 6A 2B 0+A 0B 4-A 0B 2		1/192
(3dyz,3dyz)	1/768*p^7*(1-t2)^3.5		-2A 6B 2+A 6B 0+A 6B 4+3A 4B 2-2A 4B 0-A 4B 6-3A 2B 4+A 2B 0+2A 2B 6+2A 0B 4-A 0B 6-A 0B 2		1/768
(3dxx,3dzz)	1/192*p^7*(1-t2)^3.5		-A 6B 4+A 6B 2-A 4B 0+A 4B 6-2A 6A 2B 0+A 0B 4-A 0B 2		1/192
(4s,4s)	1/80640*p^9*(1-t2)^4.5		A 8B 0-4A 6B 2+6A 4B 4-4A 2B 6+A 0B 8		1/80640