

水素結合に関する研究 I

永 原 茂
 沢 井 喜 作

A Study on Hydrogen Bond. I

Sigeru NAGAHARA

Kisaku SAWAI

Abstract :

Using linear combined atomic orbital self-consistent molecular orbitals method, we calculate the electronic structure in the hydrogen bonding X—H—Y.

The interactions of all electrons have been explicitly considered and no extrageometrical empirical data have been used.

A large number of integrals over atomic orbitals have been evaluated. all the large integrals were calculated exactly. These results are shown in many tables.

1. Introduction

水素結合に関する問題については 沢山の実験的な結果が報告されているけれども、理論的な定量的な考察は案外少ない。そしてその水素結合の形成についての条件については部分的に論ぜられているにすぎないのである。水素結合に関する問題として次の三点が特に重要である。

1. 第一に静電的に起るとみなされる水素結合はそれが ion-dipole interaction によって起るのか、dipole-dipole interaction によって起るのか。
2. 水素原子が bond のどの位置にあるのか。
3. 水素結合を形成する element はごくかぎられたもの (例えば N, O, F 等) であることはどうしてであろうか。

そこで我々は第一段階として水素結合の中で最も顕著なものとして古くから早く注意されて来た (FHF)⁽¹⁾ 分子について以前に計算考察した⁽²⁾。

ここでは更に一般的に X—H—Y⁽³⁾ について現在の分子構造論において最も精度の高いと考えられる LCAO SCF MO 法⁽³⁾ によって計算をすすめて水素結合の本質的な事柄を調べて行こうと考える。

すべての電子が考慮されて、X—H—Y の幾何学的の configuratin 以外は全く非経験的に問題を解く。

2. Outline of LCAO SCF MO theory Application to the X—H—Y

一般に LCAO SCFMO 法に於て、分子のすべての電子は LCAO MO ϕ_i によって表現される。

即ち

$$\phi_i = \sum a_{ip} \chi_p \dots\dots\dots(1)$$

ここに i は MO の種類分けを表わし、 χ_p は AO を (ここでは Slater-type⁽⁴⁾ をとる。Table 1 を参照)、 a_{ip} は未決定の係数を表わす。

For Oxygen

$$o=(1s)=(Z_1^3/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-Z_1 r)$$

$$s=(2s)=(Z_2^5/3\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-Z_2 r)$$

$$z=(2p_z)=(Z_2^5/\pi)^{\frac{1}{2}} r \cos\theta \exp(-Z_2 r)$$

$$x=(2p_x)=(Z_2^5/\pi)^{\frac{1}{2}} r \sin\theta \cos\phi \exp(-Z_2 r)$$

$$y=(2p_y)=(Z_2^5/\pi)^{\frac{1}{2}} r \sin\theta \sin\phi \exp(-Z_2 r)$$

For Hydrogen

$$h=(1/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-r)$$

where $Z_1=7.70$, $Z_2=2.257$

Orthogonal 2s function

$$s_0 = \{s\} - 0.2334\{o\} / 0.9724$$

Table 1-1 Atomic orbitals χp

The notation o, s, z, x, y is adopted for the the oxygen $1s, 2s, 2p_z, 2p_x, 2p_y$ orbitals with o', s', z', x', y' for the corresponding orbitals of the second oxygen atom. The hydrogen orbital is designated by h .

The $2p_z$ orbitals are directed along the internuclear axis and all positive in the positive z direction.

Symmetry species

Symmetry orbitals

σ_g	σ_u	π_u	π_g
$\sigma_1 = h$			
$\sigma_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(s+s')$	$\sigma_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(s-s')$	$\sigma_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x+x')$	$\sigma_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-x')$
$\sigma_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(z-z')$	$\sigma_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(z+z')$	$\sigma_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y+y')$	$\sigma_9 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y-y')$

Table 1-2 Symmetry Orbitals σ_n

MO が互に orthogonal である条件は

$$\int \phi_i \phi_j d\tau = \sum a_{ip} S_{pq} a_{jq} = S_{ij} \dots \dots \dots (2)$$

ここに S_{pq} は overlap integral である。

全体の $2N$ 電子の法線化された波動函数 Φ は LCAO MO の antisymmetrized product (AP) からつくられる。

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2N!}} \begin{vmatrix} (\phi_1\alpha)^1 (\phi_1\beta)^1 (\phi_2\alpha)^1 \dots (\phi_N\beta)^1 \\ (\phi_1\alpha)^2 (\phi_1\beta)^2 (\phi_2\alpha)^2 \dots (\phi_N\beta)^2 \\ \vdots \\ (\phi_1\alpha)^{2N} (\phi_1\beta)^{2N} (\phi_2\alpha)^{2N} \dots (\phi_N\beta)^{2N} \end{vmatrix} \dots \dots \dots (3)$$

ここに $(\phi_1\alpha)^1$ は $\phi_1(1) \alpha(1)$ の意味を表わす。

そしてそのエネルギーは

$$E = \int \bar{\Phi} H \Phi d\tau \dots \dots \dots (4)$$

で決定される。

ここに

$$H = \sum H_\mu + \frac{1}{2} e^2 \sum_{\mu > \nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}}$$

$H\mu$ は核のみの field 内での μ 番目の electron の Hamiltonian operator である。

最もよい LCAO をうるためには変分法が ground state energy を最小にするようにとられる。その結果は次のようになる。

$$(\mathbf{H}+\mathbf{G})\alpha_i = \mathbf{L}\alpha_i = \epsilon_i \alpha_i \dots\dots\dots(5)$$

ここに vector α_i は i 番目の MO の係数を表わす。

又 H matrix は bare-nuclear field orbital energy matrix でその element は今の場合次のようになる。

$$\begin{aligned} H_{pq} &= \bar{H}_{qp} = \int \chi_p H \chi_q d\tau \\ &= - \int \bar{\chi}_p \Delta \chi_q d\tau - Z_X \int \bar{\chi}_p \frac{2}{r_X} \chi_q d\tau - Z_Y \int \bar{\chi}_p \frac{2}{r_Y} \chi_q d\tau - \int \bar{\chi}_p \frac{2}{r_H} \chi_q d\tau \dots\dots\dots(6) \end{aligned}$$

G は electronic interaction operator でその element は

$$G_{pq} = \bar{G}_{qp} = \sum_{ir} \bar{\alpha}_{ir} G_{prqt} \alpha_{it} \dots\dots\dots(7)$$

$$G_{prqt} = 2 T_{prqt} - T_{prtq} \dots\dots\dots(8)$$

$$T_{prqt} = \int \bar{\chi}_p \mu \bar{\chi}_q \nu \frac{2}{r_{\mu\nu}} \chi_q \mu \chi_t \nu d\tau_{\mu\nu} \dots\dots\dots(9)$$

かくして最もよい LCAO MO を得る問題は方程式 (5) を解くことにより、 $\epsilon_i \alpha_i$ を決定することになる。L の中に α_i が G を通して含まれている故に self-consistent の手続が必要である。即ち最初 α_i を仮定してそれより G を求め L を知り、それから (5) 方程式を解いて ϵ_i, α_i を求める。これが最初仮定した α_i との比較して一般に一致しないので、ここで得られた α_i を用いて再び L をもとめ (5) 方程式を解いて、 ϵ_i, α_i を計算する。仮定したものと (5) 方程式からもとめられた α_i が一致するまで繰り返す。

3. Evaluation of Integrals

此の問題を解くに沢山の分子積分の値を計算する必要がある。それで出来るだけ精密に分子積分の値を計算した。すべての結果は atomic unit (Energy unit として $2.1792 \times 10^{-11} \text{erg} = 13.602 \text{e.v.}$) で表わされている。勿論 overlap integral は dimension のない量である。Table 2-1, Table 2-2, Table 2-3 で表示される。

α	3.50	3.50	3.50	4.00	4.00	4.00	4.50	4.50	4.50	5.00	5.00	5.00
β	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75
Ssh	0.412365	0.409548	0.400791	0.327922	0.331577	0.333259	0.253770	0.258957	0.264194	0.192384	0.197449	0.203167
Soh	0.320742	0.281048	0.237908	0.288471	0.263635	0.236434	0.244854	0.229790	0.213362	0.199275	0.190436	0.180933
Jsh	0.318339	0.368640	0.429889	0.218430	0.254496	0.297278	0.150039	0.174203	0.204196	0.102359	0.118383	0.137747
Joh	0.204299	0.207762	0.207253	0.160077	0.166376	0.171217	0.120951	0.127343	0.133523	0.089118	0.094664	0.099873
Jhs	0.271761	0.286208	0.302454	0.190132	0.198996	0.209771	0.132008	0.137255	0.144011	0.088165	0.093951	0.098074
Jho	0.308301	0.301207	0.291841	0.229826	0.225930	0.221580	0.167259	0.164839	0.162592	0.119759	0.118040	0.117372
Mss	0.41389	0.45508	0.50652	0.34989	0.38107	0.41763	0.3810	0.32303	0.35127	0.26347	0.28220	0.30325
Mso	0.09485	0.09545	0.09277	0.08080	0.08397	0.08407	0.06630	0.06970	0.07132	0.0543	0.0575	0.058809
Moo	0.4455	0.48535	0.53644	0.38614	0.41722	0.45115	0.3340	0.35705	0.3860	0.2896	0.31038	0.33199
M $\pi\pi$	0.39804	0.44187	0.49598	0.3375	0.36954	0.40768	0.2900	0.3116	0.34072	0.25527	0.27391	0.29480
Tho	0.524558	0.73897	1.06015	0.291835	0.39489	0.54144	0.16796	0.22085	0.295766	0.098898	0.127265	0.164589
Ths	0.399200	0.572027	0.828756	0.218760	0.310782	0.47519	0.12377	0.171729	0.253899	0.071204	0.096703	0.132884

Table 2-1

α	3.50	3.50	3.50	4.00	4.00	4.00	4.50	4.50	4.50	5.00	5.00	5.00
β	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75
Lhhsh	0.21565	0.2235	0.2320	0.15633	0.16375	0.17244	0.11150	0.11640	0.12255	0.07815	0.08153	0.08560
Lhhoh	0.21501	0.20181	0.1910	0.17241	0.16632	0.15882	0.13185	0.12902	0.12583	0.09777	0.09638	0.09571
Lsssh	0.25861	0.30254	0.35291	0.18120	0.21059	0.25567	0.12229	0.14567	0.17024	0.08432	0.10256	0.11751
Lsosh	0.18243	0.18592	0.18651	0.14418	0.14994	0.1563	0.1098	0.11562	0.12174	0.082216	0.08791	0.04561
Lssoh	0.03747	0.03782	0.03797	0.02932	0.03040	0.03130	0.02201	0.02337	0.0246	0.01425	0.01639	0.0180
Lsooh	0.07130	0.0794	0.0873	0.05152	0.0574	0.6432	0.0332	0.0382	0.0440	0.015995	0.0214	0.0260
Loosoh	0.2740	0.3160	0.35518	0.20263	0.23110	0.2630	0.13911	0.16227	0.18685	0.08661	0.10384	0.1204
Lsooh	0.19810	0.20130	0.20205	0.16071	0.16391	0.1670	0.12120	0.12719	0.13352	0.090064	0.09471	0.09943
L π s π h	0.25662	0.30397	0.35179	0.17048	0.20227	0.24567	0.11388	0.13738	0.161928	0.08317	0.102211	0.115970
L π s π h	0.0464	0.0560	0.0698	0.030995	0.037585	0.046925	0.01907	0.023379	0.028704	0.0095	0.0130	0.0165
L π σ h	0.17459	0.17823	0.17872	0.13592	0.14296	0.1470	0.10410	0.10984	0.11585	0.0781	0.08262	0.0871
L σ π h	0.00791	0.00820	0.00827	0.00570	0.00620	0.00645	0.00345	0.00408	0.00454	0.00120	0.00198	0.00262

Table 2-2

$H\alpha\beta$

$\alpha\beta$											
11	- 7.441	- 7.356	- 7.290	- 7.202	- 7.137	- 7.089	- 7.064	- 7.036	- 7.018	- 7.016	
12	- 3.7882	- 3.7671	- 3.7136	- 3.6714	- 3.5943	- 3.5749	- 3.5503	- 3.5158	- 3.4997	- 3.4921	
13	- 2.4842	- 2.5063	- 2.5049	-2.50013	- 2.5362	- 2.4874	- 2.4849	- 2.4703	- 2.4568	- 2.4524	
22	-17.4288	-17.4199	-17.4123	-17.4056	-17.4010	-17.3967	-17.3938	-17.3915	-17.3827	-17.3907	
23	- 0.2557	- 0.2673	- 0.2788	- 0.2879	- 0.2950	- 0.3005	- 0.3045	- 0.3072	- 0.3071	- 0.3087	
33	-16.7809	-16.7681	-16.7576	-16.7402	-16.7407	-16.51352	-16.7311	-16.7276	-16.7264	-16.7259	
44	-17.6325	-17.2043	-17.1969	-17.1902	-17.1856	-17.1813	-17.1786	-17.1763	-17.1775	-17.1755	
45	- 0.3811	- 0.3698	- 0.3586	- 0.3497	- 0.3418	- 0.3373	- 0.3375	- 0.3308	- 0.3309	- 0.3293	
55	-17.2711	-17.2585	-17.2482	-17.2390	-17.2317	-17.2264	-17.2223	-17.2188	-17.2178	-17.2173	
66	-16.4762	-16.4693	-16.4631	-16.4582	-16.4546	-16.4516	-16.4496	-16.4475	-16.4468	-16.4468	
88	-17.4428	-17.4358	-17.4297	-17.4248	-17.4212	-17.4182	-17.4162	-17.4141	-17.4134	-17.4134	

$H\alpha\beta = -\int \alpha \Delta \beta d\tau - 8(\sigma : \alpha\beta) - 8(\sigma' : \alpha\beta) - (H : \alpha\beta)$ Tabel 2-3

4. 結論, 討論

水素結合に関する bonding energy が数 kcal 程度であるのでそれには分子積分を充分精密に計算しておく必要がある。そこでここではそのところに焦点を合せて仕事をすすめた。今迄の数値表では α, β の interval が粗であるので table に示した様に密にとり範囲をひろめて新らしく精度を高めて求めたのである。

補助函数 $I_n^m(S, R), I_n^m(3S, R), F_n, m, o$ について結果を特に表示した。

Table 3, Table 4, Table 5-1, Table 5-2

$$(m, n) = I_n^m(\delta, R) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{R}\right)^{n+3} \int \int \cos m\theta r^n e^{-\delta r a - r h d\tau}$$

(0, 0)	0.02965	0.03231	0.03565	0.01445	0.01572	0.01732	0.00727	0.00790	0.00869	0.00375	0.00407	0.00447
(1, 0)	0.01108	0.01051	0.009923	0.006114	0.00593	0.00576	0.003385	0.003335	0.00330	0.00189	0.00188	0.00187
(0, -1)	0.03681	0.04223	0.04888	0.01912	0.02195	0.02542	0.01013	0.01164	0.01349	0.00545	0.00627	0.00726
(1, -1)	0.010072	0.009927	0.009713	0.005924	0.005980	0.006037	0.003459	0.003553	0.003735	0.00184	0.002072	0.002210
(2, -1)	0.01495	0.01634	0.01793	0.00775	0.00865	0.00942	0.00398	0.00468	0.00520	0.00185	0.00245	0.00291
(0, -2)	0.08874	0.10770	0.13127	0.04948	0.06015	0.07344	0.02786	0.03391	0.04146	0.01577	0.01924	0.02360
(1, -2)	0.013078	0.013479	0.013775	0.008237	0.008706	0.009158	0.005097	0.00539	0.005657	0.00318	0.00348	0.00372
(2, -2)	0.031168	0.038240	0.045486	0.018878	0.021868	0.025614	0.010299	0.012352	0.014848	0.005772	0.006996	0.008720
(3, -2)	0.00826	0.00848	0.00864	0.00529	0.00549	0.00568	0.00326	0.00347	0.00393	0.00184	0.00211	0.00234

Table 3

(0, -2)	0.029609	0.036076	0.044107	0.016279	0.019928	0.024453	0.009032	0.011098	0.013665	0.005047	0.006222	0.007682
(0, -1)	0.004162	0.00481	0.005593	0.002078	0.002422	0.002838	0.001056	0.001240	0.001463	0.000545	0.000644	0.000764
(0, 0)	0.0011702	0.0012819	0.0014174	0.00053157	0.0005895	0.0006591	0.00024808	0.00027801	0.00031377	0.00011842	0.00013385	0.00015229
(0, 1)	0.0004935	0.0005121	0.0005383	0.0002043	0.0002153	0.0002296	0.00008077	0.0000937	0.0001011	0.0000388	0.0000419	0.0000457
(0, 2)	0.0002773	0.0002725	0.0002722	0.0001048	0.0001050	0.0001107	0.0000414	0.0000422	0.0000435	0.0000170	0.0000175	0.0000183
(0, 3)	0.0001943	0.0001710	0.0001618	0.0000672	0.0000639	0.0000618	0.0000346	0.0000238	0.0000190	0.0000093	0.0000018	0.0000000
(1, -2)	0.001509	0.0015	0.001585	0.00093	0.000977	0.00102	0.00055	0.00059	0.00063	0.000331	0.000363	0.000386
(1, -1)	0.000438	0.000438	0.000404	0.000244	0.000246	0.000254	0.000114	0.000100	0.000077	0.00007	0.000076	0.000082
(1, 0)	0.000181	0.000168	0.000165	0.000091	0.000088	0.000085	0.000046	0.000046	0.0000455	0.000023	0.000024	0.000024
(1, 1)	0.00010048	0.00008846	0.00007776	0.00004619	0.00004242	0.00003906	0.00002144	0.00002635	0.00001937	0.00001013	0.00000981	0.00000957
(1, 2)	0.00006952	0.00005814	0.00004867	0.00002919	0.00002554	0.00002243	0.00001248	0.00001128	0.00001031	0.00000543	0.00000506	0.00000474
(1, 3)	0.00005749	0.00004566	0.00003100	0.00002207	0.00001835	0.0000155	0.0000070	0.0000075	0.0000057	0.00000352	0.00000313	0.00000282
(2, -2)	0.009146	0.010760	0.012712	0.004600	0.005564	0.006582	0.002854	0.003424	0.004108	0.001682	0.002058	0.002504
(2, -1)	0.001644	0.001796	0.0020	0.000791	0.000909	0.001048	0.000253	0.00034	0.000387	0.000204	0.000238	0.00031
(2, 0)	0.000382	0.000405	0.000426	0.000182	0.000193	0.000204	0.000088	0.000093	0.000100	0.0000395	0.000042	0.000044
(2, 1)	0.000179	0.0001822	0.000186	0.0000752	0.0000777	0.0000806	0.0000327	0.0000331	0.0000362	0.0000146	0.0000155	0.0000166
(2, 2)	0.0001044	0.0000996	0.0000972	0.0000402	0.0000391	0.0000388	0.0000167	0.000016	0.000016	0.0000068	0.0000068	0.0000068
(2, 3)	0.0007612	0.0006949	0.0006285	0.0002703	0.0002509	0.0002314	0.0000998	0.0000938	0.0000878	0.0000040	0.00000373	0.00000336
(3, -2)	0.000836	0.000830	0.000826	0.00060	0.00059	0.00058	0.000388	0.00038	0.000372	0.000296	0.00029	0.000286
(3, -1)	0.000170	0.000164	0.000156	0.000076	0.000076	0.000076	0.000016	0.000016	0.000016	0.000005	0.000005	0.000005
(3, 0)	0.000132	0.000127	0.000120	0.000073	0.000072	0.000070	0.000044	0.000045	0.000046	0.000024	0.000025	0.000026
(3, 1)	0.00008	0.00007	0.00006	0.00005	0.00004	0.00003	0.00002	0.00001	0.000005	0.000001	0.0000005	0.0000001
(3, 2)	0.000050	0.000034	0.000024	0.000018	0.000011	0.000005	0.000003	0.000002	0.000001	0.0000005	0.0000005	0.0000005
(3, 3)	0.00003671	0.00002885	0.00002279	0.00001418	0.00001166	0.00000975	0.00000555	0.00000480	0.00000380	0.00000233	0.00000200	0.00000178

(mm) = $L_n^m(3\theta, R)$

Table 4

α	3.50	3.50	3.50	4.00	4.00	4.00	4.50	4.50	4.50	5.00	5.00	5.00
β	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75
F0.0.0	0.047549	0.056876	0.068515	0.026674	0.031959	0.038557	0.015083	0.018098	0.021864	0.008585	0.010314	0.012475
0.1.0	0.055427	0.066094	0.079396	0.030611	0.036576	0.044019	0.017094	0.020461	0.024667	0.009614	0.011543	0.013948
0.2.0	0.066539	0.079054	0.094650	0.035980	0.042854	0.051423	0.019759	0.023585	0.028322	0.011240	0.013131	0.015814
0.3.0	0.083081	0.098274	0.117194	0.043632	0.051771	0.061909	0.0234	0.027873	0.033374	0.012983	0.01525	0.018318
0.4.0	0.1092511	0.128614	0.152656	0.055127	0.065117	0.077551	0.028712	0.034025	0.040550	0.015512	0.018187	0.021778
0.5.0	0.153924	0.180169	0.212693	0.073490	0.086356	0.102136	0.035182	0.043317	0.051363	0.019222	0.022441	0.026774
0.6.0	0.236654	0.275386	0.323757	0.104969	0.123019	0.143927	0.0461739	0.058222	0.068173	0.024970	0.029212	0.034367
0.7.0	0.404481	0.470414	0.548333	0.163320	0.190716	0.224475	0.064080	0.08380	0.100407	0.034384	0.039977	0.04660
1.0.0	0.044388	0.054565	0.067321	0.023999	0.029574	0.036573	0.013146	0.016235	0.020272	0.006953	0.009002	0.011170
1.1.0	0.055279	0.067657	0.083142	0.029179	0.035823	0.044150	0.015682	0.019301	0.023912	0.008287	0.010540	0.013045
1.2.0	0.071880	0.087450	0.106961	0.036717	0.044878	0.055086	0.019244	0.023593	0.029138	0.010343	0.012633	0.015587
1.3.0	0.0986881	0.117774	0.145080	0.048268	0.063255	0.072776	0.026689	0.029869	0.036834	0.012650	0.015591	0.019165
1.4.0	0.145307	0.174216	0.209534	0.067064	0.079443	0.099586	0.036249	0.039524	0.050378	0.016106	0.019525	0.024424
1.5.0	0.23337	0.268774	0.328281	0.099803	0.118562	0.130380	0.053415	0.055267	0.075679	0.021419	0.025865	0.032549
2.0.0	0.06251	0.077766	0.096916	0.032923	0.041045	0.051273	0.017643	0.022045	0.027649	0.009342	0.01200	0.015048
2.1.0	0.081538	0.102135	0.125359	0.041615	0.048269	0.063385	0.020366	0.027086	0.033673	0.011472	0.014456	0.018080
2.2.0	0.112223	0.138326	0.171714	0.054933	0.069100	0.083774	0.025478	0.034464	0.041049	0.014622	0.018251	0.022355
2.3.0	0.155573	0.200208	0.246551	0.076577	0.094667	0.126944	0.031797	0.045810	0.048657	0.017978	0.022446	0.028644
3.0.0	0.105130	0.136364	0.363969	0.053884	0.066957	0.085044	0.026248	0.035545	0.045836	0.014928	0.018869	0.023982
3.1.0	0.151672	0.180101	0.223621	0.070588	0.081184	0.10400	0.037549	0.04498	0.061049	0.018934	0.023806	0.029541

Table 5-1 $F_{k, m, n}(\alpha, \beta) = \int_1^\infty \int_1^1 \frac{(\lambda^\beta - 1)^k}{(\lambda + \mu)^{k+1}} \lambda^m \mu^n e^{-\alpha\lambda - \beta\mu} d\lambda d\mu$

α	3.50	3.50	3.50	4.00	4.00	4.00	4.50	4.50	4.50	5.00	5.00	5.00
β	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75	1.25	1.50	1.75
F0 0 0	0.014918	0.018153	0.022158	0.008202	0.010027	0.012290	0.004550	0.005584	0.006868	0.002543	0.003131	0.003863
0 1 0	0.015869	0.019263	0.023472	0.008671	0.010581	0.012947	0.004786	0.005865	0.007204	0.002663	0.003275	0.004035
0 2 0	0.016978	0.020555	0.024988	0.009209	0.011216	0.013695	0.005054	0.006182	0.007582	0.002799	0.003437	0.004230
0 3 0	0.018288	0.022070	0.026761	0.009834	0.011947	0.014555	0.005369	0.006543	0.008044	0.002952	0.003619	0.004446
0 4 0	0.019858	0.023866	0.028859	0.010568	0.012802	0.015552	0.005726	0.006959	0.008551	0.003126	0.003826	0.004699
0 5 0	0.021769	0.026015	0.031376	0.011443	0.013814	0.016718	0.006157	0.007442	0.009194	0.003327	0.004064	0.004970
0 6 0	0.024131	0.028563	0.034422	0.0125007	0.015024	0.018074	0.006673	0.008009	0.009990	0.003561	0.004398	0.005289
0 7 0	0.027069	0.034348	0.038050	0.0137916	0.016444	0.019589	0.007334	0.008677	0.011170	0.003850	0.004663	0.005654
1 0 0	0.01474	0.01811	0.02218	0.0080	0.0098	0.01219	0.00441	0.00545	0.00674	0.00245	0.00303	0.00385
1 1 0	0.01606	0.01966	0.02403	0.00867	0.01064	0.01312	0.00466	0.00584	0.00737	0.00261	0.00323	0.00401
1 2 0	0.01766	0.02161	0.02623	0.00942	0.01159	0.01422	0.00503	0.00628	0.00789	0.00280	0.00345	0.00438
1 3 0	0.01964	0.02380	0.02895	0.01034	0.01263	0.01559	0.00543	0.00681	0.00867	0.00301	0.00371	0.00461
1 4 0	0.02221	0.02690	0.03254	0.01156	0.01399	0.01749	0.00594	0.00746	0.00940	0.00327	0.00400	0.00508
1 5 0	0.02590	0.03120	0.0378	0.01293	0.01609	0.0198	0.00666	0.00830	0.0104	0.00358	0.00436	0.00546
2 0 0	0.0200	0.0244	0.0303	0.0103	0.0128	0.0158	0.0062	0.0073	0.0084	0.0033	0.0040	0.0049
2 1 0	0.0220	0.0266	0.0323	0.0114	0.0140	0.0169	0.0067	0.0078	0.0090	0.0035	0.0044	0.0054
2 2 0	0.0244	0.0291	0.0352	0.0127	0.0153	0.0185	0.0073	0.0085	0.0097	0.0038	0.0047	0.0057
2 3 0	0.0271	0.0322	0.0384	0.0141	0.0169	0.0200	0.0083	0.0093	0.0106	0.0042	0.0052	0.0063
3 0 0	0.0323	0.0407	0.0517	0.0166	0.0203	0.0245	0.0088	0.0116	0.0148	0.0051	0.0061	0.0080
3 1 0	0.0368	0.0465	0.0574	0.0186	0.0213	0.0300	0.0098	0.0125	0.0159	0.0053	0.0069	0.0090

Table 5-2 $F_{m, n, o}$

次に α_i を求めて物理的結果を出すのは次の paper に報告する積りである。これには電子計算機を用いて行う予定である。

References :

- (1) M. Davies : J. Chem. Phys. **15** (1957) 739
Trans. Faraday Soc. **36** (1940) 341
R. H. Gillette, A Sherman : J. Am. Chem. Soc. **58** (1936) 1135
N. D. Coggeshall : J. Chem. Phys. **18** (1950) 978
J. Lennard-Jones and J. A. Pople : Proc. Roy. Soc. **205** (1951) 155
J. A. Pople : Proc. Roy. Soc. **205** (1951) 163
W. S. Fyfe : J. Chem. Phys. **21** (1953) 2
- (2) S. Nagahara : Busseiron Kenkyu Series 2 Vol 1 No. 3 (1957) 370
- (3) C. C. J. Roothaan : Rev. Mod. Phys. **23** (1951) 69
- (4) C. Zener : Phys. Rev. **36** (1930) 51
J. Slater : Phys. Rev. **36** (1930) 57
- (5) M. Kotani et al., Proc Phys-Math. Soc. Japan **20** (1938) Extra No. 1 Extra No. 2
"Table of Molecular Integrals" (1955) Maruzen.

(昭和36年11月30日受付)