LE JOURNAL DE PHYSIQUE ET LE RADIUM TOME 13, JUILLET 1957, PAGE 455.

TABLE D'INTÉGRALES A DEUX CENTRES

Par JACQUES TILLIEU, JEAN BAUDET et JEAN GUY,
Laboratoire de Physique moléculaire, Faculté de Pharmacie, Paris.

I. Au cours du calcul de certaines grandeurs moléculaires (énergie, moment dipolaire, polarisabilité électrique, susceptibilité magnétique, etc...) l'emploi des orbitales atomiques K et L du type hydrogénoïde ou d'un type voisin conduit à de nombreuses intégrales à deux centres. Un certain nombre de celles-ci ont déjà été tabulées, en particulier par Coulson [1] qui les a publiées sous une forme complètement développée mais pour laquelle le calcul numérique effectif est souvent laborieux. En plus de certaines intégrales déjà déterminées par Coulson, la présente table comporte des intégrales nouvelles et toutes sont présentées sous une forme condensée (déjà utilisée par Preuss [2]) très favorable au calcul numérique.

Nous désignons par J des intégrales à deux centres hétéronucléaires A et B, du type :

$$J_m(\alpha, \beta, \rho) = \langle f \rangle = \int f \exp\left(-\alpha r_1 - \beta r_2\right) \mathrm{d}r \; (\alpha \neq \beta) \quad (1)$$

et par K des intégrales à deux centres homonucléaires, du type :

$$K_m(\alpha, \rho) = (f) = \int f \exp\left(-\alpha r_1 - \alpha r_2\right) \mathrm{d}r \qquad (2)$$

où r_1 et r_2 sont les rayons vecteurs du point P (*fig.* 1) et f une expression algébrique de r_1, r_2 et des lignes trigonométriques de θ_1 et θ_2.

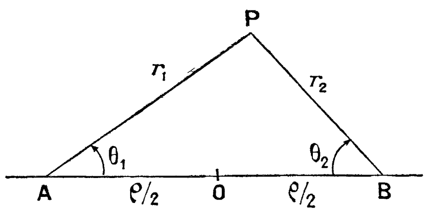

FIG. 1.

II. Ces diverses intégrales J et K sont calculables en passant aux coordonnées sphéroïdales λ, μ, φ, définies par :

$$\lambda = \frac{r_1 + r_2}{\rho} \qquad \mu = \frac{r_1 - r_2}{\rho}. \qquad (3)$$

Cette transformation conduit à des expressions comportant uniquement 4 types de fonctions des paramètres :

$$a = 1/2\, \rho(\alpha + \beta) \qquad b = 1/2\, \rho(\alpha - \beta) \qquad (4)$$

soit :

1) les fonctions

$$A_m(a) = \int_1^\infty \lambda^m\, e^{-a\lambda}\, \mathrm{d}\lambda \qquad (5)$$

connues par récurrence [1] à partir de :

$$A_0(a) = (1/a)\, e^{-a} \qquad (6)$$

et

$$A_m(a) = (1/a)\, e^{-a} + (m/a)\, A_{m-1}(a) \qquad (6')$$

2) les fonctions

$$B_n(b) = \int_{-1}^{+1} \mu^n\, e^{-b\mu}\, \mathrm{d}\mu \qquad (7)$$

pour lesquelles les formules de récurrence suivantes [1] permettent un calcul rapide :

$$B_0(b) = 2 \sinh b / b \qquad (8)$$

$$B_{2m+1}(b) = -\frac{2\cosh b}{b} + \frac{(2m+1)\, B_{2m}(b)}{b} \qquad (8')$$

$$B_{2m}(b) = \frac{2\sinh b}{b} + \frac{2m\, B_{2m-1}(b)}{b} \qquad (8'')$$

3) les fonctions

$$C_m(a) = \int_{+1}^{+\infty} \lambda^m (\lambda^2 - 1)^{1/2}\, e^{-a\lambda}\, \mathrm{d}\lambda \qquad (9)$$

qui peuvent être calculées par récurrence à partir de $C_0(a)$ ([3], voir également l'appendice).

4) Enfin les fonctions

$$D_n(b) = \int_{-1}^{+1} \mu^n (1 - \mu^2)^{1/2}\, e^{-b\mu}\, \mathrm{d}\mu \qquad (10)$$

déterminées par récurrence à partir de D_0 (voir appendice).

III. Il convient de noter les principales remarques suivantes, pour un emploi correct de la table :

1) Il est commode de débuter par la détermination des valeurs numériques des A, B, C et D nécessaires à la résolution du problème envisagé (en général, il faut aller jusqu'à l'indice 5 ou 6). Une fois ces divers nombres connus, il ne reste plus à faire que des produits et des sommes pour obtenir les intégrales désirées.

2) Certaines intégrales qui ne figurent pas explicitement dans la table, peuvent se déduire facilement des intégrales tabulées, par addition ou soustraction ; on a, par exemple :

$$\langle r_1^2 \sin^2\theta_1 \rangle = \langle r_1^2 \rangle - \langle r_1^2 \cos^2\theta_1 \rangle = J_6 - J_{11}$$

3) Permuter les indices 1 et 2, dans l'expression f de (1), revient à permuter les coefficients α et β en laissant f inchangée. L'intégrale $J_m(\beta, \alpha, \rho)$ est immédiatement connue à partir de $J_m(\alpha, \beta, \rho)$ en changeant le signe des termes contenant des fonctions $B_n(b)$ d'ordre *impair*.

I-N°	II-(1)	III-Intégrales $J(\alpha, \beta, \rho)$
1	1	$\pi\rho^3/4\ (A_2 B_0 - A_0 B_2)$
2	r_1	$\pi\rho^4/8\ (A_3 B_0 + A_2 B_1 - A_1 B_2 - A_0 B_3)$
3	$r_1 \cos \theta_1$	$\pi\rho^4/8\ (A_3 B_1 + A_2 B_0 - A_1 B_3 - A_0 B_2)$
4	$r_1 \sin \theta_1$	$\pi\rho^4/8\ (C_2 D_0 - C_0 D_2)$
5	$r_1 r_2$	$\pi\rho^5/16\ (A_4 B_0 - 2A_2 B_2 + A_0 B_4)$
6	r_1^2	$\pi\rho^5/16\ (A_4 B_0 + 2A_3 B_1 - 2A_1 B_3 - A_0 B_4)$
7	$r_1^2 \cos \theta_1$	$\pi\rho^5/16\ (A_4 B_1 + A_3 B_2 + A_3 B_0 - A_2 B_3 + A_2 B_1 - A_1 B_4 - A_1 B_2 - A_0 B_3)$
8	$r_1 r_2 \cos \theta_1$	$\pi\rho^5/16\ (A_4 B_1 - A_3 B_2 + A_3 B_0 - A_2 B_3 - A_2 B_1 + A_1 B_4 - A_1 B_2 + A_0 B_3)$
9	$r_1^2 \sin \theta_1$	$\pi\rho^5/16\ (C_3 D_0 + C_2 D_1 - C_1 D_2 - C_0 D_3)$
10	$r_1 r_2 \sin \theta_1$	$\pi\rho^5/16\ (C_3 D_0 - C_2 D_1 - C_1 D_2 + C_0 D_3)$
11	$r_1^2 \cos^2 \theta_1$	$\pi\rho^5/16\ (A_4 B_2 + 2A_3 B_1 - A_2 B_4 + A_2 B_0 - 2A_1 B_3 - A_0 B_2)$
12	$r_1 r_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^5/16\ (- A_4 B_2 + A_2 B_4 + A_2 B_0 - A_0 B_2)$
13	$r_1^2 r_2 \cos \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (A_5 B_1 + A_4 B_0 - 2A_3 B_3 - 2A_2 B_2 + A_1 B_5 + A_0 B_4)$
14	$r_1^2 r_2 \sin \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (C_4 D_0 - 2C_2 D_2 + C_0 D_4)$
15	$r_1^2 r_2 \cos \theta_2$	$\pi\rho^6/32\ (- A_5 B_1 - 2A_4 B_2 + A_4 B_0 + 2A_3 B_1 + 2A_2 B_4 + A_1 B_5 - 2A_1 B_3 - A_0 B_4)$
16	$r_1^3 \cos \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (A_5 B_1 + 2A_4 B_2 + A_4 B_0 + 2A_3 B_1 - 2A_2 B_4 - A_1 B_5 - 2A_1 B_3 - A_0 B_4)$
17	$r_1^3 \sin \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (C_4 D_0 + 2C_3 D_1 - 2C_1 D_3 - C_0 D_4)$
18	$r_1^2 r_2 \cos^2 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (A_5 B_2 - A_4 B_3 + 2A_4 B_1 - A_3 B_4 - 2A_3 B_2 + A_3 B_0 + A_2 B_5 - 2A_2 B_3 - A_2 B_1 + 2A_1 B_4 - A_1 B_2 + A_0 B_3)$
19	$r_1^2 r_2 \sin^2 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (- A_5 B_2 + A_5 B_0 + A_4 B_3 - A_4 B_1 + A_3 B_4 - A_3 B_0 - A_2 B_5 + A_2 B_1 - A_1 B_4 + A_1 B_2 + A_0 B_5 - A_0 B_3)$
20	$r_1 r_2^2 \cos \theta_1 \sin \theta_2$	$\pi\rho^6/32\ (C_4 D_1 - C_3 D_2 + C_3 D_0 - C_2 D_3 - C_2 D_1 + C_1 D_4 - C_1 D_2 + C_0 D_3)$
21	$r_1 r_2^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^6/32\ (- A_5 B_2 + A_4 B_3 + A_3 B_4 + A_3 B_0 - A_2 B_5 - A_2 B_1 - A_1 B_2 + A_0 B_3)$
22	$r_1^3 \cos^2 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (A_5 B_2 + A_4 B_3 + 2A_4 B_1 - A_3 B_4 + 2A_3 B_2 + A_3 B_0 - A_2 B_5 - 2A_2 B_3 + A_2 B_1 - 2A_1 B_4 - A_1 B_2 - A_0 B_3)$
23	$r_1^3 \sin^2 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (- A_5 B_2 + A_5 B_0 - A_4 B_3 + A_4 B_1 + A_3 B_4 - A_3 B_0 + A_2 B_5 - A_2 B_1 - A_1 B_4 + A_1 B_2 - A_0 B_5 + A_0 B_3)$
24	$r_1^3 \cos^3 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (A_5 B_3 + 3A_4 B_2 - A_3 B_5 + 3A_3 B_1 - 3A_2 B_4 + A_2 B_0 - 3A_1 B_3 - A_0 B_2)$
25	$r_1^3 \sin^3 \theta_1$	$\pi\rho^6/32\ (- C_4 D_2 + C_4 D_0 + C_2 D_4 - C_2 D_0 - C_0 D_4 + C_0 D_2)$
26	$r_1^2 r_2 \cos^2 \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^6/32\ (- A_5 B_3 - A_4 B_2 + A_3 B_5 + A_3 B_1 + A_2 B_4 + A_2 B_0 - A_1 B_3 - A_0 B_2)$
27	$r_1^3 r_2 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_1 - 3A_5 B_2 + A_5 B_0 - 2A_4 B_3 + 3A_4 B_1 + 2A_3 B_4 + 2A_3 B_2 + 3A_2 B_5 - 2A_2 B_3 + A_1 B_6 - 3A_1 B_4$
28	$r_1^3 r_2 \cos \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_1 + A_5 B_2 + A_5 B_0 - 2A_4 B_3 + A_4 B_1 - 2A_3 B_4 - 2A_3 B_2 + A_2 B_5 - 2A_2 B_3 + A_1 B_6 + A_1 B_4 + A_0 B_5)$
29	$r_1^3 r_2 \sin \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (C_5 D_0 + C_4 D_1 - 2C_3 D_2 - 2C_2 D_3 + C_1 D_4 + C_0 D_5)$
30	$r_1^3 r_2 \sin \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (C_5 D_0 + 3C_4 D_1 + 2C_3 D_2 - 2C_2 D_3 - 3C_1 D_4 - C_0 D_5)$
31	$r_1^2 r_2^2 \cos^2 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_2 - 2A_5 B_3 + 2A_5 B_1 - 4A_4 B_2 + A_4 B_0 + 2A_3 B_5 - 2A_3 B_1 - A_2 B_6 + 4A_2 B_4 - 2A_1 B_5 + 2A_1 B_3 - A_0 B_4)$
32	$r_1^2 r_2^2 \sin^2 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_2 + A_6 B_0 + 2A_5 B_3 - 2A_5 B_1 + A_4 B_2 - A_4 B_0 - 2A_3 B_5 + 2A_3 B_1 + A_2 B_6 - A_2 B_4 + 2A_1 B_5$
33	$r_1^3 r_2 \cos^2 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_2 + 2A_5 B_1 - 2A_4 B_4 + A_4 B_0 - 4A_3 B_3 + A_2 B_6 - 2A_2 B_2 + 2A_1 B_5 + A_0 B_4)$
34	$r_1^3 r_2 \sin^2 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_2 + A_6 B_0 + 2A_4 B_4 - A_4 B_2 - A_4 B_0 - A_2 B_6 - A_2 B_4 + 2A_2 B_2 + A_0 B_6 - A_0 B_4)$
35	$r_1^2 r_2^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_2 + 2A_4 B_4 + A_4 B_0 - A_2 B_6 - 2A_2 B_2 + A_0 B_4)$
36	$r_1^3 r_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_2 - 2A_5 B_3 + A_4 B_0 + 2A_3 B_5 + 2A_3 B_1 + A_2 B_6 - 2A_1 B_3 - A_0 B_4)$
37	$r_1^3 r_2 \sin \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- C_5 D_1 - 2C_4 D_2 + C_4 D_0 + 2C_3 D_1 + 2C_2 D_4 + C_1 D_5 - 2C_1 D_3 - C_0 D_4)$
38	$r_1^3 r_2 \cos^3 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_3 - A_5 B_4 + 3A_5 B_2 - A_4 B_5 - 3A_4 B_3 + 3A_4 B_1 + A_3 B_6 - 3A_3 B_4 - 3A_3 B_2 + A_3 B_0 + 3A_2 B_5 - 3A_2 B_3$
39	$r_1^3 r_2 \sin^3 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (- C_5 D_2 + C_5 D_0 + C_4 D_3 - C_4 D_1 + C_3 D_4 - C_3 D_0 - C_2 D_5 + C_2 D_1 - C_1 D_4 + C_1 D_2 + C_0 D_5 - C_0 D_3)$
40	$r_1^3 r_2 \cos^2 \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_3 - A_5 B_4 - A_5 B_2 + A_4 B_5 - A_4 B_3 + A_4 B_1 + A_3 B_6 + A_3 B_4 + A_3 B_2 + A_3 B_0 + A_2 B_5 - A_2 B$
41	$r_1^4 \sin^4 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_4 - 2A_6 B_2 + A_6 B_0 - A_4 B_6 + 3A_4 B_2 - 2A_4 B_0 + 2A_2 B_6 - 3A_2 B_4 + A_2 B_0 - A_0 B_6 + 2A_0 B_4 - A_0 B_2)$
42	$r_1^4 \cos^4 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (A_6 B_4 + 4A_5 B_3 - A_4 B_6 + 6A_4 B_2 - 4A_3 B_5 + 4A_3 B_1 - 6A_2 B_4 + A_2 B_0 - 4A_1 B_3 - A_0 B_2)$
43	$r_1^3 r_2 \cos^3 \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_4 - 2A_5 B_3 + A_4 B_6 + 2A_3 B_5 + 2A_3 B_1 + A_2 B_0 - 2A_1 B_3 - A_0 B_2)$
44	$r_1^4 \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_1$	$\pi\rho^7/64\ (- A_6 B_4 + A_6 B_2 - 2A_5 B_3 + 2A_5 B_1 + A_4 B_6 - 2A_4 B_2 + A_4 B_0 + 2A_3 B_5 - 2A_3 B_1 - A_2 B_6 + 2A_2 B_4 - A_2 B$
45	$r_1^3 r_2 \sin \theta_1 \cos^2 \theta_1 \cos \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (- C_5 D_3 - C_4 D_2 + C_3 D_5 + C_3 D_1 + C_2 D_4 + C_2 D_0 - C_1 D_3 - C_0 D_2)$
46	$r_1^3 r_2 \cos^3 \theta_1 \sin \theta_2$	$\pi\rho^7/64\ (C_5 D_3 + 3C_4 D_2 - C_3 D_5 + 3C_3 D_1 - 3C_2 D_4 + C_2 D_0 - 3C_1 D_3 - C_0 D_2)$

(1) Fonction f figurant dans l'integrant (voir formules 1 et 2).
(2) Parité de l'indice des termes a conserver lorsqu'on calcule les K sur l'espace entier.

IV-Intégrales $K(\alpha, \rho)$
(calculees sur un demi-espace)

	$K(\alpha,\rho)$	V [2]
	$\pi\rho^3/4\ (A_2 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^4/8\ (A_3 + 1/2\,A_2 - 1/3\,A_1 - 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^4/8\ (1/2\,A_3 + A_2 - 1/4\,A_1 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^4/8\ (\pi/4\,C_2 - \pi/16\,C_0)$	P
	$\pi\rho^5/16\ (A_4 - 2/3\,A_2 + 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^5/16\ (A_4 + A_3 - 1/2\,A_1 - 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^5/16\ (1/2\,A_4 + 4/3\,A_3 + 1/4\,A_2 - 8/15\,A_1 - 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^5/16\ (1/2\,A_4 + 2/3\,A_3 - 3/4\,A_2 - 2/15\,A_1 + 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^5/16\ (\pi/4\,C_3 + 1/3\,C_2 - \pi/16\,C_1 - 2/15\,C_0)$	I
	$\pi\rho^5/16\ (\pi/4\,C_3 - 1/3\,C_2 - \pi/16\,C_1 + 2/15\,C_0)$	I
	$\pi\rho^5/16\ (1/3\,A_4 + A_3 + 4/5\,A_2 - 1/2\,A_1 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^5/16\ (-1/3\,A_4 + 6/5\,A_2 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (1/2\,A_5 + A_4 - 1/2\,A_3 - 2/3\,A_2 + 1/6\,A_1 + 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (\pi/4\,C_4 - \pi/8\,C_2 + \pi/32\,C_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (-1/2\,A_5 + 1/3\,A_4 + A_3 + 2/5\,A_2 - 1/3\,A_1 - 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (1/2\,A_5 + 5/3\,A_4 + A_3 - 2/5\,A_2 - 2/3\,A_1 - 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (\pi/4\,C_4 + 2/3\,C_3 - 4/15\,C_1 - \pi/32\,C_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (1/3\,A_5 + 3/4\,A_4 + 2/15\,A_3 - 5/6\,A_2 + 1/15\,A_1 + 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (2/3\,A_5 - 1/4\,A_4 - 4/5\,A_3 + 1/3\,A_2 + 2/15\,A_1 - 1/12\,A_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (1/3\,C_4 + 3\pi/16\,C_3 - 7/15\,C_2 - \pi/32\,C_1 + 2/15\,C_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (-1/3\,A_5 + 1/4\,A_4 + 6/5\,A_3 - 2/3\,A_2 - 1/3\,A_1 + 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (1/3\,A_5 + 5/4\,A_4 + 22/15\,A_3 - 1/6\,A_2 - 11/15\,A_1 - 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (2/3\,A_5 + 1/4\,A_4 - 4/5\,A_3 - 1/3\,A_2 + 2/15\,A_1 + 1/12\,A_0)$	I
	$\pi\rho^6/32\ (1/4\,A_5 + A_4 + 4/3\,A_3 + 2/5\,A_2 - 3/4\,A_1 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (3\pi/16\,C_4 - 7\pi/32\,C_2 + \pi/32\,C_0)$	P
	$\pi\rho^6/32\ (-1/4\,A_5 - 1/3\,A_4 + 2/3\,A_3 + 6/5\,A_2 - 1/4\,A_1 - 1/3A_0)$	P
$- A_0 B_5)$	$\pi\rho^7/64\ (-1/2\,A_6 + A_4 + 16/15\,A_3 - 16/35\,A_1 - 1/6\,A_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (1/2\,A_6 + 4/3\,A_5 - 16/15\,A_3 - 1/3\,A_2 + 12/35\,A_1 + 1/6\,A_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (\pi/4\,C_5 + 1/3\,C_4 - \pi/8\,C_3 - 4/15\,C_2 + \pi/32\,C_1 + 8/105\,C_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (\pi/4\,C_5 + C_4 + \pi/8\,C_3 - 4/15\,C_2 - 3\pi/32\,C_1 - 8/105\,C_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (1/3\,A_6 + 1/2\,A_5 - 1/3\,A_4 - 2/3\,A_3 + 23/35\,A_2 + 1/6\,A_1 - 1/5\,A_0)$	P
$- 2A_1 B_3 - A_0 B_6 + A_0 B_4)$	$\pi\rho^7/64\ (2/3\,A_6 - 1/2\,A_5 - 2/3\,A_4 + 2/3\,A_3 - 2/35\,A_2 - 1/6\,A_1 + 2/35\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (1/3\,A_6 + A_5 + 3/5\,A_4 - A_3 - 11/21\,A_2 + 1/3\,A_1 + 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (2/3\,A_6 - 14/15\,A_4 + 34/105\,A_2 - 2/35\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (-1/3\,A_6 + 7/5\,A_4 - 17/21\,A_2 + 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (-1/3\,A_6 - 1/2\,A_5 + A_4 + 4/3\,A_3 + 1/7\,A_2 - 1/2\,A_1 - 1/5\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (-1/3\,C_5 + \pi/8\,C_4 + 2/3\,C_3 + \pi/16\,C_2 - 4/21\,C_1 - \pi/32\,C_0)$	P
$- A_2 B_1 + 3A_1B_4 - A_1B_2 + A_0 B_3)$	$\pi\rho^7/64\ (1/4\,A_6 + 4/5\,A_5 + 7/12\,A_4 - 16/35\,A_3 - 3/4\,A_2 + 4/15\,A_1 + 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (3\pi/16\,C_5 - 1/5\,C_4 - 7\pi/32\,C_3 + 9/35\,C_2 + \pi/32\,C_1 - 2/35\,C_0)$	I
$+ A_2 B_1 - A_1 B_4 - A_1 B_2 - A_0 B_3)]$	$\pi\rho^7/64\ (-1/4\,A_6 - 8/15\,A_5 + 5/12\,A_4 + 176/105\,A_3 + 5/12\,A_2 - 8/15\,A_1 - 1/4\,A_0)$	I
	$\pi\rho^7/64\ (8/15\,A_6 - 8/7\,A_4 + 24/35\,A_2 - 8/105\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (1/5\,A_6 + A_5 + 13/7\,A_4 + 4/3\,A_3 - 1/5\,A_2 - A_1 - 1/3\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (-1/5\,A_6 - 1/2\,A_5 + 1/7\,A_4 + 4/3\,A_3 + A_2 - 1/2\,A_1 - 1/3\,A_0)$	P
$- 2A_1 B_5 + 2A_1 B_3 - A_0 B_4 + A_0 B_2)$	$\pi\rho^7/64\ (2/15\,A_6 + 1/2\,A_5 + 10/21\,A_4 - 2/3\,A_3 - 26/35\,A_2 + 1/6\,A_1 + 2/15\,A_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (-2/15\,C_5 - \pi/16\,C_4 + 43/105\,C_3 + 9\pi/32\,C_2 - 2/15\,C_1 - \pi/16\,C_0)$	P
	$\pi\rho^7/64\ (2/15\,C_5 + 3\pi/16\,C_4 + 97/105\,C_3 + 5\pi/32\,C_2 - 2/5\,C_1 - \pi/16\,C_0)$	P

4) Les intégrales $K(\alpha, \rho)$ ont été calculées sur le demi-espace $z \geqslant 0$, c'est-à-dire pour $0 \leqslant \mu \leqslant 1$. Ce champ d'intégration se présente lorsqu'on tient compte des plans nodaux de certaines fonctions d'onde. Les intégrales calculées sur tout l'espace sont facilement obtenues à partir des expressions tabulées, en conservant uniquement les facteurs d'indice pair ou impair, suivant que la fonction est répertoriée P ou I et en multipliant l'ensemble restant par deux. On a, par exemple, pour le demi-espace :

$$K_2 = (r_1) = \frac{\pi\rho^4}{8}\left(A_3 + \frac{1}{2}A_2 - \frac{1}{3}A_1 - \frac{1}{4}A_0\right) \qquad (\mathrm{I})$$

et pour l'espace entier :

$$K_2 = (r_1) = (\pi\rho^4/4)\,[A_3 - (1/3)\,A_1].$$

V. Appendice : Calcul des intégrales de la forme :

$$D_n(b) = \int_{-1}^{+1} \mu^n(1-\mu^2)^{1/2}\,\mathrm{e}^{-b\mu}\,\mathrm{d}\mu \qquad (11)$$

1) D_n est une fonction uniformément continue du paramètre b et peut être obtenue, par des dérivations successives sous le signe d'intégration, à partir de D_0.

$$D_n(b) = (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}b^n}\int_{-1}^{+1}(1-\mu^2)^{1/2}\,\mathrm{e}^{-b\mu}\,\mathrm{d}\mu \qquad (12)$$
$$= (-1)^n\,\mathrm{d}^n D_0(b)/\mathrm{d}b^n.$$

2) Il faut donc calculer :

$$D_0(b) = \int_{-1}^{+1}(1-\mu^2)^{1/2}\,\mathrm{e}^{-b\mu}\,\mathrm{d}\mu. \qquad (13)$$

En posant $\mu = \cos\theta\ (0 \leqslant \theta \leqslant \pi)$, (13) devient :

$$D_0(b) = \int_0^{\pi}\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{-b\cos\theta}\,\mathrm{d}\theta. \qquad (14)$$

Or la théorie des fonctions de Bessel fournit la relation générale [4] pour les fonctions d'ordre ν :

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu}\frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\nu+\frac{1}{2}\right)}\int_0^{\pi}\sin^{2\nu}\theta\,\mathrm{e}^{\pm b\cos\theta}\,\mathrm{d}\theta. \qquad (15)$$

On voit facilement que (14) est un cas particulier de (15), obtenu en prenant :

$$\begin{cases}\nu = 1\\ z = -ib.\end{cases} \qquad (16)$$

On a alors pour la fonction de Bessel d'ordre 1 et d'argument imaginaire

$$J_1(-ib) = -(ib/\pi)\,D_0(b) \qquad (15')$$

d'où

$$\boxed{D_0(b) = -(i\pi/b)\;J_1(ib).} \qquad (17)$$

3) D'après (12) et (17) on aura :

$$D_n(b) = (-1)^{n+1}\,\pi i\,\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}b^n}\left[\frac{J_1(ib)}{b}\right] \qquad (19)$$

et d'après les formules de récurrence [5] :

$$(\mathrm{d}J_1(z)/\mathrm{d}z) = -(1/z)\,J_1(z) + J_0(z) \qquad (20)$$
$$(\mathrm{d}J_0(z)/\mathrm{d}z) = -J_1(z). \qquad (20')$$

Les fonctions $D_n(b)$ s'exprimeront uniquement à l'aide des fonctions de Bessel d'ordre zéro $J_0(z)$ et d'ordre un $J_1(z)$ dont il existe des tables [6].

Les 6 premières fonctions $D_n(b)$ sont les suivantes :

$$D_0(b) = -i\pi\left[\frac{J_1(ib)}{b}\right]$$

$$D_1(b) = -i\pi\left[\frac{2J_1(ib)}{b^2} - i\frac{J_0(ib)}{b}\right]$$

$$D_2(b) = -i\pi\left[\left(\frac{6}{b^3}+\frac{1}{b}\right)J_1(ib) - i\frac{3}{b^2}J_0(ib)\right]$$

$$D_3(b) = -i\pi\left[\left(\frac{24}{b^4}+\frac{5}{b^2}\right)J_1(ib) - i\left(\frac{12}{b^3}+\frac{1}{b}\right)J_0(ib)\right]$$

$$D_4(b) = -i\pi\left[\left(\frac{120}{b^5}+\frac{27}{b^3}+\frac{1}{b}\right)J_1(ib) - i\left(\frac{60}{b^4}+\frac{6}{b^2}\right)J_0(ib)\right]$$

$$D_5(b) = -i\pi\left[\left(\frac{720}{b^6}+\frac{168}{b^4}+\frac{8}{b^2}\right)J_1(ib) - i\left(\frac{360}{b^5}+\frac{39}{b^3}+\frac{1}{b}\right)J_0(ib)\right].$$

On peut remarquer que les fonctions C déjà publiées [3] se présentent d'une manière très analogue aux fonctions D. On passera de D_k à C_k en remplaçant le facteur de multiplication $i\pi$ par $\pi/2$, les fonctions J_1 et J_0 respectivement par les fonctions de Hankel $H_1^{(1)}$ et $H_0^{(1)}$, le paramètre b par a. On a par exemple la correspondance :

$$D_1(b) = -i\pi\left[\frac{2J_1(ib)}{b^2} - i\frac{J_0(ib)}{b}\right]$$
$$\longleftrightarrow C_1(a) = -\frac{\pi}{2}\left[\frac{2H_1^{(1)}(ia)}{a^2} - i\frac{H_0^{(1)}(ia)}{a}\right].$$

Manuscrit reçu le 6 juin 1957.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Coulson (C. A.), *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 1942, **38**, 210.
[2] Preuss (H.), Integraltafeln zur quantenchemie (Springer Verlag), 1956, **1**, 43.
[3] Guy (J.) et Tillieu (J.), *J. Physique Rad.*, 1955, **16**, 801.
[4] Goudet (G.), Les fonctions de Bessel et leurs applications en physique (*Masson*), 1954, p. 31, formule (III, 18).
[5] Goudet (G.), Les fonctions de Bessel et leurs applications en physique (*Masson*), 1954, p. 31, formules (III, 4 et 3').
[6] Voir par exemple Jahnke (E.) et Emde (F.), Tables of functions (Dover Public, 4e ed.), p. 226 et suivantes.