

Slater-Koster パラメータで表した s, p, d 軌道間の移動積分

$E_{s,s}$	$(ss\sigma)$
$E_{s,x}$	$l(sp\sigma)$
$E_{x,x}$	$l^2(pp\sigma) + (1 - l^2)(pp\pi)$
$E_{x,y}$	$lm(pp\sigma) - lm(pp\pi)$
$E_{x,z}$	$ln(pp\sigma) - ln(pp\pi)$
$E_{s,xy}$	$\sqrt{3}lm(sd\sigma)$
E_{s,x^2-y^2}	$\frac{1}{2}\sqrt{3}(l^2 - m^2)(sd\sigma)$
$E_{s,3z^2-r^2}$	$[n^2 - \frac{1}{2}(l^2 + m^2)](sd\sigma)$
$E_{x,xy}$	$\sqrt{3}l^2m(pd\sigma) + m(1 - 2l^2)(pd\pi)$
$E_{x,ys}$	$\sqrt{3}lmn(pd\sigma) - 2lmn(pd\pi)$
$E_{x,zx}$	$\sqrt{3}l^2n(pd\sigma) + n(1 - 2l^2)(pd\pi)$
E_{x,x^2-y^2}	$\frac{1}{2}\sqrt{3}l(l^2 - m^2)(pd\sigma) + l(1 - l^2 + m^2)(pd\pi)$
E_{y,x^2-y^2}	$\frac{1}{2}\sqrt{3}m(l^2 - m^2)(pd\sigma) - m(l + l^2 - m^2)(pd\pi)$
E_{z,x^2-y^2}	$\frac{1}{2}\sqrt{3}n(l^2 - m^2)(pd\sigma) - n(l^2 - m^2)(pd\pi)$
$E_{x,3z^2-r^2}$	$l[n^2 - \frac{1}{2}(l^2 + m^2)](pd\sigma) - \sqrt{3}ln^2(pd\pi)$
$E_{y,3z^2-r^2}$	$m[n^2 - \frac{1}{2}(l^2 + m^2)](pd\sigma) - \sqrt{3}mn^2(pd\pi)$
$E_{z,3z^2-r^2}$	$n[n^2 - \frac{1}{2}(l^2 + m^2)](pd\sigma) + \sqrt{3}n(l^2 + m^2)(pd\pi)$
