# Inhaltsverzeichnis

# Index

Variablen beziehen sich auf...

- röm. Buchstaben = Hilfsparameter
- gr. Großbuchstaben = Hamiltonmatrix
- gr. Kleinbuchstaben = Überlappung
- $\Phi$, $\phi$ = Raumorbital
- $\sigma$, $\Sigma$ = Spin
- $\Sigma = \sigma$, daher wird nur die kleingeschriebene Variante verwendet

# 1 Matrixelemente

## 1.1 Spin

$$\sigma_{11} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \right\rangle = 1$$

$$\sigma_{12} = \sigma_{21} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \right\rangle = \tfrac{1}{2}$$

$$\sigma_{22} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\sigma \right\rangle = 1$$

## 1.2 Ortsanteile

### 1.2.1 Hamiltonmatrixelemente $\Phi$

(s. 1., dann )

$$\Phi_{11} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \middle| \hat{H} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \right\rangle \tag{1}$$

$$= +D - \frac{1}{2} \cdot (ac|ca) - \frac{1}{2} \cdot (bd|db) + 1 \cdot (ab|ba) + 1 \cdot (cd|dc) - \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) - \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{2}$$

$$:= D + A' \tag{3}$$

$$\Phi_{12} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \middle| \hat{H} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \right\rangle \tag{4}$$

$$= -\frac{1}{4} \cdot D - \frac{1}{4} \cdot (ab|ba) - \frac{1}{4} \cdot (cd|dc) - \frac{1}{4} \cdot (ac|ca) - \frac{1}{4} \cdot (bd|db) + \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) + \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{5}$$

$$:= -\frac{1}{4} \cdot D + B' \tag{6}$$

$$\Phi_{22} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \middle| \hat{H} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_\Phi \right\rangle \tag{7}$$

$$= +D - \frac{1}{2} \cdot (ab|ba) - \frac{1}{2} \cdot (cd|dc) + 1 \cdot (ac|ca) + 1 \cdot (bd|db) - \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) - \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{8}$$

$$:= D + C' \tag{9}$$

### 1.2.2 Überlappungselemente $\phi$

$S_{ii}^{\Phi} = 1$ (s. gl. Funktionen treffen aufeinander), z.B.:

$$S_{11}^{\Phi} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \right\rangle = 1$$

$$\phi_{12} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \right\rangle$$

$$\propto \langle abcd - cbad - adcb + cdab + bacd - cabd - bdca + cdba + abdc - dbac - acdb + dcab + badc - dabc - bcda + dcba|$$

$$|abcd - bacd - abdc + badc + cbad - bcad - cbda + bcda + adcb - dacb - adbc + dabc + cdab - dcab - cdba + dcba\rangle$$

$$= \langle abcd|abcd\rangle - \langle cbad|cbad\rangle - \langle adcb|adcb\rangle + \langle cdab|cdab\rangle$$

$$- \langle bacd|bacd\rangle - \langle dcab|dcab\rangle - \langle abdc|abdc\rangle - \langle cdba|cdba\rangle$$

$$+ \langle badc|badc\rangle - \langle bcda|bcda\rangle - \langle dabc|dabc\rangle + \langle dcba|dcba\rangle = 4 \cdot (+1) + 8 \cdot (-1) = -4$$

mit Normierungsfaktor von je $\frac{1}{\sqrt{16}}$ folgt also: $\Phi_{12} = -\frac{1}{4}$

$$\phi_{22} = \left\langle \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \middle| \left| \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} \right|_{\Phi} \right\rangle = 1$$

# 2 Matrix

$$0 = \begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}\cdot E & H_{12} - S_{12}\cdot E \\ H_{12} - S_{12}\cdot E & H_{22} - S_{22}\cdot E \end{vmatrix}$$

1. Überlappungsintegrale $S = \phi \cdot \sigma$

$$S_{11} = \phi_{11}\cdot\sigma_{11} = \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \right\rangle \cdot \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \right\rangle = 1\cdot 1 = 1$$

$S_{12} = S_{21} = \phi_{12}\cdot\sigma_{12} = \phi_{12}\cdot\frac{1}{2} = -\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{2} = -\frac{1}{8}$

$S_{22} = 1$

2. Hamiltonmatrixelemente $H = \Phi\cdot\sigma$ :

$$H_{11} = \Phi_{11}\cdot\sigma_{11} = \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \middle| \hat{H} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \right\rangle \cdot \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \right\rangle = \Phi_{11}\cdot 1 := D + A'$$

$$\begin{aligned} H_{12} = \Phi_{12}\cdot\sigma_{12} &= \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \middle| \hat{H} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \right\rangle \cdot \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \right\rangle = \Phi_{12}\cdot\frac{1}{2} \\ &:= B\cdot\frac{1}{2} = \left(-\frac{1}{4}\cdot D + B'\right)\cdot\frac{1}{2} = -\frac{1}{8}\cdot D + \frac{1}{2}\cdot B' \end{aligned}$$

$$H_{22} = \Phi_{22}\cdot\sigma_{22} = \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \middle| \hat{H} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\Phi} \right\rangle \cdot \left\langle \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \middle| \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}\right|_{\sigma} \right\rangle = \Phi_{22}\cdot 1 = D + C'$$

## 2.1 Startgleichung

Säkulargleichung:

$$0 = \begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}\cdot E & H_{12} - S_{12}\cdot E \\ H_{12} - S_{12}\cdot E & H_{22} - S_{22}\cdot E \end{vmatrix}$$

Spinanteile eingesetzt:

$$\Leftrightarrow 0 = \begin{vmatrix} A - 1\cdot E & \frac{1}{2}\cdot B + \frac{1}{8}\cdot E \\ \frac{1}{2}\cdot B + \frac{1}{8}\cdot E & C - 1\cdot E \end{vmatrix}$$

$$\Leftrightarrow 0 = \begin{vmatrix} (D + A') - 1\cdot E & \left(-\frac{1}{8}\cdot D + \frac{1}{2}\cdot B'\right) - \left(-\frac{1}{8}\right)\cdot E \\ -\frac{1}{8}\cdot D + \frac{1}{2}\cdot B' + \frac{1}{8}\cdot E & (D + C') - 1\cdot E \end{vmatrix}$$

### 2.1.1 grober Ansatz

$$= \begin{vmatrix} A - E & \frac{1}{2}\cdot B + \frac{1}{8}\cdot E \\ \frac{1}{2}\cdot B + \frac{1}{8}\cdot E & C - E \end{vmatrix}$$

$$\Leftrightarrow 0 = (A - E)\cdot(C - E) - \left(\frac{B}{2} + \frac{E}{8}\right)^2 \tag{10}$$

### 2.1.2 Ansatz mit D

$$0 = \begin{vmatrix} D + A' - E & -\frac{1}{8} \cdot D + \frac{1}{2} \cdot B' + \frac{1}{8} \cdot E \\ -\frac{1}{8} \cdot D + \frac{1}{2} \cdot B' + \frac{1}{8} \cdot E & D + C' - E \end{vmatrix}$$

$$\Leftrightarrow 0 = (D + A' - E) \cdot (D + C' - E) - \left( -\frac{1}{8} \cdot D + \frac{1}{2} \cdot B' + \frac{1}{8} \cdot E \right)^2$$

## 2.2 Lösungsversuche

### 2.2.1 grob

Gl. (**??**) lautete:

$$0 = (A - E) \cdot (C - E) - \left( \frac{B}{2} + \frac{E}{8} \right)^2 \tag{??}$$

Auflösen der Klammern, um gl. Variablen zusammenfassen zu können:

$$0 = A \cdot C - A \cdot E - E \cdot C + E^2 - \left( \frac{B^2}{4} + 2 \cdot \frac{B}{2} \cdot \frac{E}{8} + \frac{E^2}{64} \right) \tag{11}$$

$$\Leftrightarrow 0 = A \cdot C - E \cdot (A - C) + E^2 - \frac{B^2}{4} - \frac{B \cdot E}{8} - \frac{E^2}{64} \tag{12}$$

sortieren nach Termen von E:

$$\Leftrightarrow 0 = E^2 \cdot \left( 1 - \frac{1}{64} \right) + E \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) + A \cdot C - \frac{B^2}{4}$$

$$\Leftrightarrow 0 = E^2 \cdot \frac{63}{64} + E \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) + A \cdot C - \frac{B^2}{4}$$

Teilen durch Vorfaktor von $E^2$:

$$\Leftrightarrow 0 = E^2 + E \cdot \underbrace{\frac{64}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right)}_{p} + \underbrace{\frac{64}{63} \cdot \left( A \cdot C - \frac{B^2}{4} \right)}_{q}$$

pq-Formel, um die Werte von $E$ zu erhalten:

$$\Leftrightarrow E = \frac{1}{2} \cdot \frac{64}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{32}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) \right)^2 - \frac{64}{63} \cdot \left( A \cdot C - \frac{B^2}{4} \right)}$$

$$\Leftrightarrow E = \frac{32}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) \pm \sqrt{\frac{32^2}{63^2} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right)^2 - \frac{64}{63} \cdot A \cdot C + \frac{16}{63} \cdot B^2}$$

$$\Leftrightarrow E = \frac{32}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) \pm \sqrt{\frac{16}{63} \cdot \left( \frac{64}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right)^2 - 4 \cdot A \cdot C + B^2 \right)}$$

$$\Leftrightarrow E = \frac{32}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right) \pm \frac{4}{\sqrt{63}} \cdot \sqrt{\frac{64}{63} \cdot \left( C - A - \frac{B}{8} \right)^2 - 4 \cdot A \cdot C + B^2}$$

Betrachtung des Terms unter der Wurzel, um die quadrierte Klammer aufzulösen:

$$\frac{64}{63}\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)^2-4\cdot A\cdot C+B^2$$

$$=\frac{64}{63}\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)-4\cdot A\cdot C+B^2$$

$$\frac{64}{63}\cdot\left(C^2-C\cdot A-C\cdot\frac{B}{8}-A\cdot C+A^2+A\cdot\frac{B}{8}-\frac{B}{8}\cdot C+\frac{B}{8}\cdot A+\frac{B^2}{64}\right)-4\cdot A\cdot C+B^2$$

$$=\frac{64}{63}\cdot\left(C^2+A^2+\frac{B^2}{64}-2\cdot C\cdot A-C\cdot\frac{B}{4}+A\cdot\frac{B}{4}\right)-4\cdot A\cdot C+B^2$$

zusammenfassen gl. Terme der Variablen:

$$=A^2\cdot\frac{64}{63}+B^2\cdot\left(\frac{1}{63}+1\right)+C^2\cdot\frac{64}{63}+A\cdot B\cdot\left(\frac{64}{63}\cdot\frac{1}{4}\right)+A\cdot C\cdot\left(-2\cdot\frac{64}{63}-4\right)+B\cdot C\cdot\left(\frac{64}{63}\cdot\frac{1}{4}\right)$$

$$=\left(A^2+C^2\right)\cdot\frac{64}{63}+B^2\cdot\frac{65}{63}+(A+C)\cdot B\cdot\frac{16}{63}+A\cdot C\cdot\frac{-380}{63}$$

$$=\frac{1}{63}\cdot\left(\left(A^2+C^2\right)\cdot 64+B^2\cdot 65+(A+C)\cdot B\cdot 16-A\cdot C\cdot 380\right)$$

d.h. aus $E$ wird demnach:

$$E=\frac{32}{63}\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)\pm\frac{4}{\sqrt{63}}\cdot\sqrt{\frac{1}{63}}\cdot\sqrt{(A^2+C^2)\cdot 64+B^2\cdot 65+(A+C)\cdot B\cdot 16-A\cdot C\cdot 380}$$

$$\Leftrightarrow E=\frac{32}{63}\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)\pm\frac{4}{63}\cdot\sqrt{(A^2+C^2)\cdot 64+B^2\cdot 65+(A+C)\cdot B\cdot 16-A\cdot C\cdot 380} \tag{13}$$

### 2.2.2 Einsetzen der D-Terme für A und C

aus **??** kann Genaueres geschlussfolgert werden, wenn $A$, $B$ und $C$ konkreter formuliert werden. Wie oben gilt dabei:

$$A=D+A',\qquad B=-\frac{1}{4}\cdot D+B',\qquad C=D+C' \tag{14}$$

(da $A=\Phi_{11}=H_{11}$, $B=\Phi_{12}$,$C=\Phi_{22}=H_{22}$)
Zur Übersichtlichkeit wird $E$ (gemäß (**??**)) folgenderweise in Teilterme zerlegt:

$$E=\underbrace{\frac{32}{63}\cdot\left(C-A-\frac{B}{8}\right)}_{a}\pm\frac{4}{63}\cdot\sqrt{\underbrace{\underbrace{\left(A^2+C^2\right)\cdot 64}_{c}+B^2\cdot 65\underbrace{+(A+C)\cdot B\cdot 16}_{d}\underbrace{-A\cdot C\cdot 380}_{e}}_{b}}$$

$$\Leftrightarrow E=a\pm\frac{4}{63}\cdot\sqrt{b}=a\pm\frac{4}{63}\cdot\sqrt{c+B^2\cdot 65+d+e} \tag{15}$$

Mit diesen Teiltermen sowie den Ausdrücken für $A$ und $C$ folgt:

- $a = \frac{32}{63} \cdot \left(C - A - \frac{B}{8}\right) = \frac{32}{63} \cdot \left((D + C') - (D + A') - \frac{B}{8}\right)$
$$= \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' - \frac{B}{8}\right) \tag{16}$$
- $b = c + B^2 \cdot 65 + d + e$
  * $c = (A^2 + C^2) \cdot 64$
$$= 64 \cdot \left((D + A')^2 + (D + C')^2\right)$$
$$= 64 \cdot \left(\left(D^2 + 2 \cdot D \cdot A' + A'^2\right) + \left(D^2 + 2 \cdot D \cdot C' + C'^2\right)\right)$$
$$= 64 \cdot \left(2 \cdot D^2 + 2 \cdot D \cdot (A' + C') + A'^2 + C'^2\right)$$
$$= 128 \cdot D^2 + 128 \cdot D \cdot (A' + C') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right)$$
  * $d = (A + C) \cdot B \cdot 16$
$$= 16B \cdot ((D + A') + (D + C'))$$
$$= 16B \cdot (2 \cdot D + A' + C')$$
$$= 16B \cdot 2 \cdot D + 16B \cdot (A' + C')$$
  * $e = -A \cdot C \cdot 380$
$$= -380 \cdot (D + A') \cdot (D + C')$$
$$= -380 \cdot \left(D^2 + A' \cdot D + C' \cdot D + A' \cdot C'\right)$$
$$= -380 \cdot \left(D^2 + D \cdot (A' + C') + A' \cdot C'\right)$$
$$= -380 \cdot D^2 - 380 \cdot D\,(A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'$$
- im zusammengesetzten $b$ können die Terme von $D$ zusammengefasst werden:
$$b = c + B^2 \cdot 65 + d + e$$
$$= \left(128 \cdot D^2 + 128 \cdot D \cdot (A' + C') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right)\right)$$
$$+ B^2 \cdot 65 + (16B \cdot 2 \cdot D + 16B \cdot (A' + C'))$$
$$+ \left(-380 \cdot D^2 - 380 \cdot D\,(A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'\right)$$

$$\begin{aligned} &= D^2 \cdot (128 - 380) \\ &+ D \cdot (128 \cdot (A' + C') + 32 \cdot B - 380 \cdot (A' + C')) \\ &+ \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B^2 + 16 \cdot B \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'\right) \end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned} &= -252 \cdot D^2 + D \cdot (-252 \cdot (A' + C') + 32 \cdot B) \\ &+ \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B^2 + 16 \cdot B \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'\right) \end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned} &= -252 \cdot D^2 + 4D \cdot (8 \cdot B - 63 \cdot (A' + C')) \\ &+ 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B^2 + 16 \cdot B \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C' \end{aligned} \tag{19}$$

Damit ist $E$ nicht wirklich vereinfacht:

$$E = \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' - \frac{B}{8}\right) \pm \frac{4}{63} \cdot \tag{20}$$
$$\sqrt{-252 \cdot D^2 + 4D \cdot (8 \cdot B - 63 \cdot (A' + C')) + 64 \cdot (A'^2 + C'^2) + 65 \cdot B^2 + 16 \cdot B \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'}$$

### B im Wurzelterm b

Im Term (**??**) kommt auch $B$ in mehreren Potenzen vor, analog zu $D$. D.h. es könnte nach $D$ und $B$ sortiert werden. Es galt:

$$b = -252 \cdot D^2 + D \cdot (-252 \cdot (A' + C') + 32 \cdot B) \\ + \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B^2 + 16 \cdot B \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'\right)$$

D.h. ebenso gilt:

$$b = \underbrace{-252 \cdot D^2} + \underbrace{23 \cdot B \cdot D} + \underbrace{65 \cdot B^2} \\ \underbrace{-252 \cdot D \cdot (A' + C') + 16 \cdot B \cdot (A' + C')} \underbrace{+64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) - 380 \cdot A' \cdot C'} \tag{21}$$

$$= \underbrace{-252 \cdot D^2} + \underbrace{23 \cdot B \cdot D} + \underbrace{65 \cdot B^2} \\ + \underbrace{4 \cdot (A' + C') \cdot (-63 \cdot D + 4 \cdot B)} \underbrace{+64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) - 380 \cdot A' \cdot C'} \tag{22}$$

Zum Anwenden der bionomischen Formel gibt es u.a. das Problem, dass $B$ und $D$ nicht nur als Produkt, sondern zudem auch noch als Summanden vorliegen.

### 2.2.3 B zu B'

Nach **??** kann auch noch $B$ eingesetzt werden. Mit (**??**) folgt für (**??**):

$$b = -252 \cdot D^2 + 4D \cdot \left(8 \cdot \left(-\frac{1}{4} \cdot D + B'\right) - 63 \cdot (A' + C')\right) \\ +64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot \left(-\frac{1}{4} \cdot D + B'\right)^2 + 16 \cdot \left(-\frac{1}{4} \cdot D + B'\right) \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C' \tag{23}$$

$$= -252 \cdot D^2 + 4D \cdot (8 \cdot B' - 2 \cdot D) - 63 \cdot (A' + C') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) \\ +65 \cdot \left(\frac{D^2}{16} - 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot D \cdot B' + B'^2\right) + 16 \cdot \left(B' - \frac{1}{4} \cdot D\right) \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C' \tag{24}$$

$$= -252 \cdot D^2 + D \cdot 32 \cdot B' - 8 \cdot D^2 - 63 \cdot (A' + C') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) \\ +\frac{65}{16} \cdot D^2 - \frac{65}{2} \cdot D \cdot B' + 65 \cdot B'^2 \\ +16 \cdot B' \cdot (A' + C') - 4 \cdot D \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C' \tag{25}$$

Es kann erneut nach Potenzen von $D$ sortiert werden:

$$b = D^2 \cdot \left(-252 - 8 + \frac{65}{16}\right) \\ +D \cdot \left(32 \cdot B' - \frac{65}{2} \cdot B' - 4 \cdot (A' + C')\right) \\ + \left(63 \cdot (A' + C') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B'^2 + 16 \cdot B' \cdot (A' + C') - 380 \cdot A' \cdot C'\right) \tag{26}$$

$$= -\frac{4095}{16} \cdot D^2 + D \cdot \left(-\frac{B'}{2} - 4 \cdot (A' + C')\right) \\ + (A' + C') \cdot (63 + 16 \cdot B') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B'^2 - 380 \cdot A' \cdot C' \tag{27}$$

$$ \tag{28} $$

## 2.3 A' und C'

$E$ abhängig von Termen wie $A'^2 + C'^2$, $A' + C'$ und $A' \cdot C'$. Nach (**??**), (**??**) und (**??**) gilt:

$$A' = -\frac{1}{2} \cdot (ac|ca) - \frac{1}{2} \cdot (bd|db) + 1 \cdot (ab|ba) + 1 \cdot (cd|dc) - \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) - \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{29}$$

$$C' = -\frac{1}{2} \cdot (ab|ba) - \frac{1}{2} \cdot (cd|dc) + 1 \cdot (ac|ca) + 1 \cdot (bd|db) - \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) - \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{30}$$

$$B' = -\frac{1}{4} \cdot (ab|ba) - \frac{1}{4} \cdot (cd|dc) - \frac{1}{4} \cdot (ac|ca) - \frac{1}{4} \cdot (bd|db) + \frac{1}{2} \cdot (bc|cb) + \frac{1}{2} \cdot (ad|da) \tag{31}$$

D.h. es folgt:

$$A' + C' = \frac{1}{2}(ac|ca) + \frac{1}{2}(bd|db) + \frac{1}{2}(ab|ba) + \frac{1}{2}(cd|dc) - 1(bc|cb) - 1(ad|da) \tag{32}$$

Der Vergleich mit (**??**) zeigt:

$$A' + C' = -2 \cdot B' \tag{33}$$

$$C' - A' = -\frac{3}{2} \cdot (ab|ba) - \frac{3}{2} \cdot (cd|dc) + \frac{1}{2} \cdot (ac|ca) + \frac{1}{2} \cdot (bd|db) - 1 \cdot (bc|cb) - 1 \cdot (ad|da) \tag{34}$$

### 2.3.1 Einsetzen

Einsetzen von (**??**) in die Terme von (**??**):
Aus

$$-\frac{B'}{2} - 4 \cdot (A' + C') \tag{35}$$

wird

$$-\frac{B'}{2} - 4 \cdot (-2 \cdot B') = -\frac{B'}{2} + 8 \cdot B' = \frac{15}{2} \cdot B' \tag{36}$$

Und aus

$$(A' + C') \cdot (63 + 16 \cdot B') \tag{37}$$

wird

$$(-2 \cdot B') \cdot (63 + 16 \cdot B') = -2 \cdot B' \cdot (63 + 16 \cdot B') \tag{38}$$
$$= -126 \cdot B' - 32 \cdot B'^2 \tag{39}$$

Daraus folgt für den Wurzelterm $b$ also:

$$b = -\frac{4095}{16} \cdot D^2 + D \cdot \left(-\frac{B'}{2} - 4 \cdot (A' + C')\right) \tag{??}$$
$$+ (A' + C') \cdot (63 + 16 \cdot B') + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B'^2 - 380 \cdot A' \cdot C'$$

$$= -\frac{4095}{16} \cdot D^2 + D \cdot \left(-\frac{15}{2} \cdot B'\right) \tag{40}$$
$$-126 \cdot B' - 32 \cdot B'^2 + 64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) + 65 \cdot B'^2 - 380 \cdot A' \cdot C'$$

$$= -\frac{4095}{16} \cdot D^2 - \frac{15}{2} \cdot D \cdot B' \tag{41}$$
$$+33 \cdot B'^2 - 126 \cdot B' + \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) - 380 \cdot A' \cdot C'\right)$$

bzw. nach $B'$-Potenzen sortiert:

$$b = 33 \cdot B'^2 + B' \cdot \left(-\frac{15}{2} \cdot D - 126\right) \tag{42}$$
$$-\frac{4095}{16} \cdot D^2 + \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) - 380 \cdot A' \cdot C'\right)$$
$$= 33 \cdot B'^2 - \frac{3}{2} \cdot B' \cdot (5 \cdot D + 168) \tag{43}$$
$$-\frac{4095}{16} \cdot D^2 + \left(64 \cdot \left(A'^2 + C'^2\right) - 380 \cdot A' \cdot C'\right)$$

Laut (**??**) ist zudem noch der Vorfaktor $a$ von $B$ abhängig. Einsetzen führt zu:

$$a = \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' - \frac{B}{8}\right) \tag{??}$$

$$= \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' - \frac{1}{8} \cdot \left(-\frac{1}{4} \cdot D + B'\right)\right) \tag{44}$$
$$= \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' + \frac{D}{16} - \frac{B'}{8}\right) \tag{45}$$

Damit lautet $E$ also:

$$E = a \pm \frac{4}{63} \cdot \sqrt{b} \tag{??}$$
$$= \frac{32}{63} \cdot \left(C' - A' + \frac{D}{16} - \frac{B'}{8}\right) \pm \frac{4}{63} \cdot \tag{46}$$
$$\sqrt{33 \cdot B'^2 - \frac{3}{2} \cdot B' \cdot (5 \cdot D + 168) - \frac{4095}{16} \cdot D^2 + 64 \cdot (A'^2 + C'^2) - 380 \cdot A' \cdot C'}$$

(47)