8223036　栗山淳

原子の電子密度分布関数と原子散乱因子

（1）

部分積分の公式は次のようになる。このときf'はf の微分であり，Gはg の積分を表している。

$$\int \mathrm{f(x)g(x)\,dx = f(x)G(x) - \int f'(x)G(x)\,dx}$$

(2)

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 e^{-\frac{2r}{a_B}}$$

これを用いて，$\rho(r)$の善空間での積分を求めます。球対称であるので，積分は旧座標系で行う。

球座標系で，体積要素ｄＶは次のように表させる。

$$dV = r^2 \sin\theta\, dr d\theta d\phi$$

全空間での積分は次のようになる。

$$\int \rho(r)\, dV = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \rho(r) r^2 \sin\theta\, d\phi$$

$\rho(r)$の具体的な形を代入すると，積分は次のようになる。

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 e^{-\frac{2r}{a_B}} r^2 \sin\theta\, d\phi d\theta dr$$

まず，角度部分の積分を計算する。

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta = 2$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

したがって角度部分の積分は,

$$2 \times 2\pi = 4\pi$$

次にr の積分を行う

$$\int_0^\infty \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 e^{-\frac{2r}{a_B}} r^2 dr$$

ここで次のような置換を行う

$$u = \frac{2r}{a_B} \Rightarrow r = \frac{a_B u}{2} \Rightarrow dr = \frac{a_B}{2} du$$

積分の範囲はr が０から∞まで変化すると，uも ０から∞まで変化する。

これを積分に代入すると,

$$\int_0^\infty \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 e^{-u} \left(\frac{a_B u}{2}\right)^2 \frac{a_B}{2} du$$

$$\Leftrightarrow \int_0^\infty \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 e^{-u} \frac{a_B^2 u^2}{4} \frac{a_B}{2} du$$

$$= \int_0^\infty \frac{1}{\pi} \frac{u^2}{4} e^{-u} \frac{1}{2} du$$

さらに整理して

8223036　栗山淳

$$\frac{1}{8\pi}\int_0^\infty u^2 e^{-u} du$$

$\int_0^\infty u^2 e^{-u} du$を部分積分を使って計算すると次のようになる。

$$\int_0^\infty u^2 e^{-u} du = \lim_{b\to\infty}\int_0^b u^2 e^{-u} du$$

$$= \lim_{b\to\infty}\left\{[-u^2 e^{-u}]_0^b + \int_0^b 2ue^{-u} du\right\}$$

$$= \lim_{b\to\infty}\left\{[-u^2 e^{-u}]_0^b + [-2ue^{-u}]_0^b + 2\int_0^b e^{-u} du\right\}$$

$$= \lim_{b\to\infty}\{-b^2 e^{-b} - 2be^{-b} + 2(-e^{-b} + e^0)\}$$

$$= \lim_{b\to\infty}(-b^2 e^{-b} - 2be^{-b} + 2e^{-b} + 2)$$

$$= 2$$

これを積分に代入すると

$$\frac{1}{8\pi}\times 2 = \frac{1}{4\pi}$$

最終的な積分の結果は，角度部分の積分とrの積分をかけ合わせればよいので

$$4\pi \times \frac{1}{4\pi} = 1$$

(3)$p > 0$のとき，以下の式が成り立つ。

$$\int_0^\infty e^{-pr}\sin qr\, dr = \frac{q}{p^2+q^2}$$

両辺をp で微分すると

$$\frac{d}{dp}\left(\int_0^\infty e^{-pr}\sin qr\, dr\right) = \frac{d}{dp}\left(\frac{q}{p^2+q^2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \int_0^\infty -re^{-pr}\sin qr\, dr = -\frac{2pq}{(p^2+q^2)^2}$$

$$\Leftrightarrow \int_0^\infty re^{-pr}\sin qr\, dr = \frac{2pq}{(p^2+q^2)^2}\cdots ①$$

よって

$$f\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r)\frac{\sin K\cdot r}{K\cdot r} dr$$

$$= \int_0^\infty 4\pi r^2 \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^3 \cdot e^{-\frac{2r}{a_B}}\frac{\sin K\cdot r}{K\cdot r} dr$$

$$= \int_0^\infty 4r^2 \left(\frac{1}{a_B}\right)^3 \cdot e^{-\frac{2r}{a_B}}\frac{\sin K\cdot r}{K\cdot r} dr$$

$$= \frac{4}{K\cdot a_B^3}\int_0^\infty r\cdot e^{-\frac{2r}{a_B}}\cdot \sin(K\cdot r)dr\cdots ②$$

このとき，①の式と②の式を比較すると次のようなことが分かる。

$$p = \frac{2}{a_B} \qquad q = K$$

8223036　栗山淳

よって①の式から次のように変形できる

$$= \frac{4}{K \cdot a_B^3} \cdot \frac{\frac{4K}{a_B}}{\left(\left(\frac{2}{a_B}\right)^2 + K^2\right)^2}$$

$$= \frac{16}{a_B^4} \cdot \frac{1}{\left(\frac{4}{a_B^2} + K^2\right)^2}$$

$$= \frac{16}{a_B^4} \cdot \frac{1}{\frac{16}{a_B^4} + \frac{8}{a_B^2} \cdot K^2 + K^4}$$

$$= \frac{16}{16 + 8a_B^2 K^2 + a_B^4 K^4}$$

ここで$K = 4\pi \frac{\sin\theta}{\lambda}$を代入して計算すると次のようになる。

$$= \frac{16}{16 + 8a_B^2 \cdot 16\pi^2 \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2 + a_B^4 \cdot 256\pi^4 \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^4}$$

$$= \frac{1}{1 + 8a_B^2 \pi^2 \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2 + 16 a_B^4 \cdot \pi^4 \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^4}$$

(4)$a_B = 0.529$Åとして，$\rho(r)$及び$f(\frac{\sin\theta}{\lambda})$を Excel で計算し，グラフを図示すると次のようになる。

この時，$\rho(r)$は$0 < r \leq 1.5$Åの範囲を青い線で$f(\frac{\sin\theta}{\lambda})$は$0 < \frac{\sin\theta}{\lambda} \leq 1.5$Å^{-1}の範囲を赤い線でそれぞれグラフを書いた。