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。このときは の微分であり，は の積分を表している。

(2)

これを用いて，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。

全空間での積分は次のようになる。

の具体的な形を代入すると，積分は次のようになる。

まず，角度部分の積分を計算する。

したがって角度部分の積分は，

次に の積分を行う

ここで次のような置換を行う

積分の範囲は が0から∞まで変化すると，も0から∞まで変化する。

これを積分に代入すると,

さらに整理して

を部分積分を使って計算すると次のようになる。

これを積分に代入すると

　　　2＝

最終的な積分の結果は，角度部分の積分との積分をかけ合わせればよいので

(3)のとき，以下の式が成り立つ。

両辺を で微分すると

よって

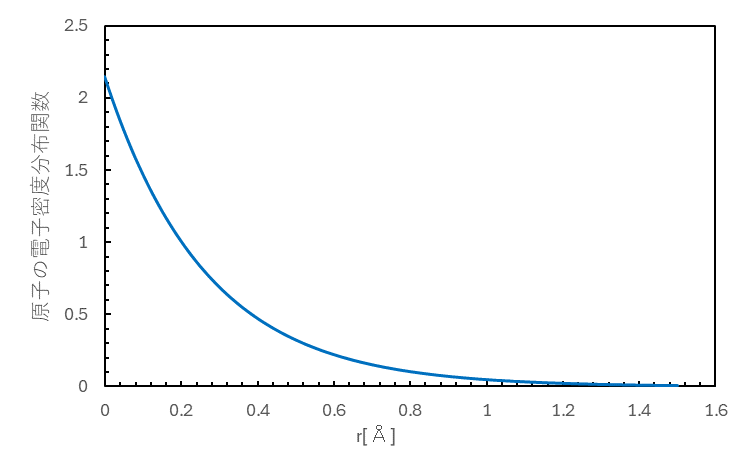
このとき，➀の式と②の式を比較すると次のようなことが分かる。

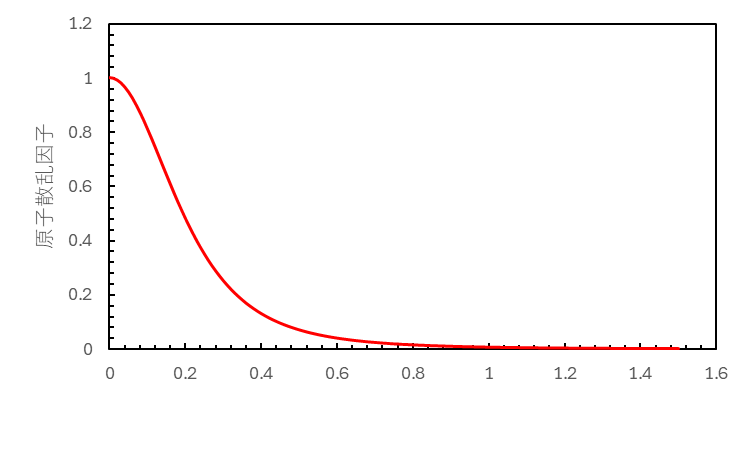
よって➀の式から次のように変形できる

ここでを代入して計算すると次のようになる。

(4)として，及びをExcelで計算し，グラフを図示すると次のようになる。

この時，はの範囲を青い線ではの範囲を赤い線でそれぞれグラフを書いた。



ｓｓｓ