A-3　二電子積分

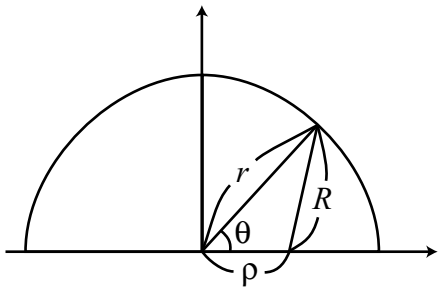
3.1　点電荷 q の作るポテンシャル

Coulomb ポテンシャル

(A3.1)　$$U(r) = \frac{q}{r}$$

3.2　球対称電荷分布 $Q(r)$ の作るポテンシャル

$Q(r)$ が任意の位置 ρ に作り出す電気ポテンシャル $\Phi(\rho)$ は，半径 r の荷電球殻の作るポテンシャル $V(\rho, r)$ を全空間について積分することによって得られる。半径 r で厚さ dr の球殻には $4\pi r^2 Q(r)dr$ の電荷がある。
$\rho < r$ の場合



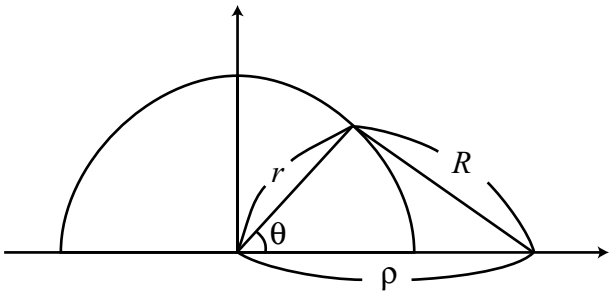
(A3.2)　$$R^2 = r^2 + \rho^2 - 2r\rho\cos\theta$$

ρ, r が一定の時

(A3.3)　$$2RdR = 2r\rho\sin\theta d\theta$$

(A3.4)　$$\begin{aligned} V_{in}(\rho, r)dr &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{Q(r)}{R} r^2 dr \\ &= \frac{2\pi r^2 Q(r)dr}{r\rho} \int_{r-\rho}^{R+\rho} dR \\ &= \frac{2\pi r^2 Q(r)dr}{r} \end{aligned}$$

$\rho > r$ の場合



同様の手順で

$$V_{out}(\rho,r)dr = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{Q(r)}{R} r^2 dr = \frac{2\pi r^2 Q(r)dr}{r\rho} \int_{\rho-r}^{\rho+r} dR = \frac{2\pi r^2 Q(r)dr}{\rho} \tag{A3.5}$$

よって

$$\Phi(\rho) = \int_0^{\rho} V_{in}(\rho,r)dr + \int_{\rho}^{\infty} V_{out}(\rho,r)dr \tag{A3.6}$$

電荷分布が指数関数的であるとする。

$$Q(r) = e^{-\alpha r} \tag{A3.7}$$

$$\Phi(\rho) = \frac{8\pi}{\alpha^3\rho}\left[1 - e^{-\alpha\rho}\left(\frac{\alpha\rho}{2}+1\right)\right] \tag{A3.8}$$

3.3 2 つの球対称電荷間の相互作用

上で考えた電荷分布のある同じ空間に別の球対称電荷分布 $Q'(\rho)$ があるとする。
2 つの電荷分布の相互作用エネルギー W は

$$W = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho Q'(\rho)\Phi(\rho) \tag{A3.9}$$

第 2 の電荷分布も指数関数的であるとする。

$$Q'(r) = e^{-\alpha r} \tag{A3.10}$$

$$W = \frac{20\pi^2}{\alpha^5} = \int\int \frac{e^{-\alpha(r_A+r_B)}}{r_{AB}} d\vec{r}_A d\vec{r}_B \tag{A3.11}$$

$$d\vec{r}_A = dx_A dy_A dz_A \tag{A3.12}$$

$$d\vec{r}_B = dx_B dy_B dz_B \tag{A3.13}$$