(Tip-９-２) 重なり積分・分子コア積分・交換積分 F の核座標による微分

原子核Ａの座標を (x_A, y_A, z_A) として、a,b,c,d,S がＡであるかどうかに注意すると、以下の如くになる。

(ｉ) expAab の微分

$\partial/\partial x_A\ \mathrm{expAab} = \partial/\partial x_A \exp(-sR_{ab}^2) = \exp(-sR_{ab}^2)\cdot 2sR_{ab}\cdot(x_a-x_b)/R_{ab}$

$= \exp(-sR_{ab}^2)\cdot \mathbf{2\alpha}\,\triangle x_a$ 　　(for a = A : a がＡに属する)

$\partial/\partial x_A\ \mathrm{expAab} = \exp(-sR_{ab}^2)\cdot \mathbf{2\beta}\,\triangle x_a$ 　　(for b = A : b がＡに属する)

(ii) ⊿の微分

$\partial/\partial x_A\ \triangle x_a = \partial/\partial x_A (x_p-x_a) = \partial/\partial x_A (\beta/p)(x_b-x_a) = \boldsymbol{\alpha/p-1}$

$\partial/\partial x_A\ \triangle x_b = \partial/\partial x_A (x_p-x_b) = \partial/\partial x_A (\beta/p)(x_b-x_a) = \boldsymbol{\alpha/p}$

$\partial/\partial x_B\ \triangle x_b = \partial/\partial x_B (x_p-x_b) = \partial/\partial x_B (\alpha/p)(x_b-x_a) = \boldsymbol{\beta/p-1}$

$\partial/\partial x_B\ \triangle x_a = \partial/\partial x_B (x_p-x_a) = \partial/\partial x_B (\alpha/p)(x_b-x_a) = \boldsymbol{\beta/p}$

(iii) ▽の微分

$$\partial/\partial x_A\ \nabla x_p = \partial/\partial x_A (x_p-x_s) = \begin{cases} \alpha/p & \text{for } s \neq A \\ \alpha/p-1 & \text{for } s = A \end{cases}$$

$$\partial/\partial x_A\ \nabla x_{pq} = \partial/\partial x_A (x_p-x_q) = \begin{cases} \alpha/p+\beta/p-\gamma/q-\delta/q & \text{for } a=b=c=d=A \\ 0 & \text{for } a\neq A\ \&\ b\neq A\ \&\ c\neq A\ \&\ d\neq A \end{cases}$$

(iv) F0 の微分

(a) 重なり積分 ＜ $F0(X) = 1$ ＞

$\partial/\partial x_A\ F0(X) = \partial F0(X)/\partial X\cdot \partial X/\partial x_A = 0$

(b) コア積分２ ＜ $F0(X) = 3-2sR_{ab}^2$ ＞

$\partial/\partial x_A\ F0(X) = \partial F0(X)/\partial X\cdot \partial X/\partial x_A$

$= \mathbf{2\alpha}\cdot \triangle x_A\ F1$

(c) コア積分１ ＜ $F0(X)=F0(p^{1/2}R_s)$ ＞

$\partial/\partial x_A\ F0(X) = \partial F0(X)/\partial X\cdot \partial X/\partial x_A$

$$= \begin{cases} (\alpha/p-1)\cdot 1/(2p)\nabla x_p\ F1 & \text{for } s = A \\ \alpha/p\cdot 1/(2p)\nabla x_p\ F1 & \text{for } s \neq A \end{cases}$$

(c) 交換積分 ＜ $F0(X) = F0((pq/(p+q))^{1/2}R_{pq})$ ＞

$$\partial/\partial x_A\ F0(X) = \begin{cases} \{\alpha/p+\beta/p-\gamma/q-\delta/q\}\cdot 1/(2p)\nabla x_{pq}\ F1 & \text{for } a=b=c=d=A \\ \alpha/p\cdot 1/(2p)\nabla x_{pq}\ F1 & \text{for } a=A, b\neq A, c\neq A, d\neq A \\ (-\gamma/q)\cdot 1/(2p)\nabla x_{pq}\ F1 & \text{for } c=A, a\neq A, b\neq A, d\neq A \end{cases}$$