

4-2. 液体の物性への応用

(2) 圧力の計算

$g(\mathbf{r})$ から圧力を計算する方法は 2 つある。

1. ビリアル定理を使う方法: ノート 7 (4) 式 (訂正)

$$PV = Nk_B T - \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') x \frac{\partial v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x} \quad (1)$$

2. 圧縮率 (宿題 41)

$g(\mathbf{r})$ が厳密ならば、この 2 つの方法で計算してもまったく同じ答えになる。しかし、もし近似的に $g(\mathbf{r})$ を計算すると、違う値になることがある (ノート 11P6 参照)。

剛体球について、計算した圧力がノート 11P6 の図で示してある。V はビリアル定理の計算を表し、C は圧縮率による計算を表している。点線が計算機シミュレーションの結果で、PY 近似の圧縮率による計算が最も近似が良い。一般に、剛体球などの短距離の斥力系では、1 成分の場合に、PY 近似の方が良いと、経験的に知られている。

4-3. タンパク質への応用*1

目標 depletion に関係する問題で、タンパク質の crowding による引力があること、それが積分方程式の理論 (OZ-HNC 近似) で考えられることを理解する。

- 細胞内は、様々な物質が「混み合っている」ので、タンパク質の会合現象に depletion 効果が注目されている。
- それまで、「混み合っている」物質の depletion 効果しか考えられていなかったが、実は水が重要。
- この問題に積分方程式の理論が使える。
- 水を考えると、引力がポテンシャルにして 25 倍増える。また引力に対する「混み合い」物質の濃度依存性も大きく変る。
- depletion 効果は、まわりの小さい粒子がぶつかって大きな粒子を押しすることで、大きな粒子の間に引力があるように見える効果。
- 積分方程式の結果は、粒子が一様に分布しているとした簡単な計算で定性的に説明できる。

- 目次 (1) 細胞内の crowding と depletion 効果
(2) モデルと計算
(3) 結果
(4) depletion 効果と朝倉・大沢理論

宿題

- 44 (20 点) depletion(枯渇) 効果について、調べなさい。なぜ、斥力なのに引き合うように見えるのか。参考にした文献は明記すること。
- 45 (10 点) 朝倉・大沢理論で、 $|\mathbf{r}| = d_L$ (大球の直径) の、平均力ポテンシャルの値 $\epsilon(d_L)$ が、2 成分の場合、

$$\epsilon(d_L) = -\frac{k_B T d_L}{2d_M} \left(3 + 2\frac{d_M}{d_L}\right) \phi_M \quad (2)$$

3 成分の場合、

$$\epsilon(d_L) = -\frac{3k_B T d_L}{2d_M} \left\{ \left(\frac{2d_M}{3d_L} + q \right) \phi_t + (1 - q) \phi_M \right\} \quad (3)$$

となることを示せ。ただし、 d_L, d_M, d_S は、大球、中球、小球の直径、 ϕ_M は中球の充填率、 ϕ_t は、小球と中球を併せた充填率、 $q = d_S/d_L$ とする。

- 46 (10 点) 大球が 2 つ接していて、中球がその 2 つの大球に接しているときの、安定化エネルギーを朝倉・大沢理論で計算しなさい。

*1 この節は、化学科の秋山先生 (<http://mole.rc.kyushu-u.ac.jp/~akiyama/>) らの研究の紹介です。