

相互作用のある粒子系の動的平衡を表現する実体モデルの開発

(山口大教育) ○村上 清文・小松 裕典・藤村 泰平

本研究では、化学教育の観点から、分子運動視覚化装置の開発、および、相互作用のある粒子系に関するモデル分子系の開発を行った。スーパーボールをモデル分子として突起付き底板の振動によって打ち出すことによりモデル分子に熱かく乱を与えると同時に摩擦の少ない可動隔壁に固定したバネの伸びから圧力を測定可能とした視覚化教材を開発した。

1. ファンデルワールスの状態方程式モデル スーパーボールに内接する正四面体の四つの頂点に、四つの円筒形磁石を、S 極 2 個と N 極 2 個が法線外向きに露出するように、埋め込み、水分子のモデルを作製した。このモデル分子系を装置に入れ、温度一定下で、体積を変化させながら圧力を測定し $P-V$ カurve を得た。その結果、1) 熱運動エネルギーが相互作用エネルギーよりまさる高温領域ではボイルの法則を表し、2) 中温領域では、ファンデルワールス曲線の一部が観測され、3) 低温領域では、圧力に体積依存性がないことを特徴とする気-液平衡挙動を観測することができた。特に、中温領域では、マクロな実在系では観測されない不安定領域 ($(\partial p/\partial V)T < 0$) を観測することができた。

2. 化学反応モデル スーパーボールに円筒形磁石を磁石の S 極が露出するように埋め込んだもの (A) と N 極が露出するように埋め込んだもの (B) を作製した。これらが互いの磁力によって自発的に結合することを利用して、複合体形成反応、 $A + B \rightleftharpoons C$ 、を表現した。また、スーパーボールへの磁石の埋め込み方を工夫することによって、二量体形成反応、 $2A \rightleftharpoons A_2$ 、も表現した。

モデル分子系に一定温度の熱攪乱を与えると 1 分程度で平衡状態に達した。平衡状態において、モデル分子同士の衝突による会合体の形成や解離などの動的平衡の様子を視覚的に示すことができた。各化学種の個数を数え容器の体積で除すことにより濃度を算出し、さらに、濃度の比から平衡定数を求めた。平衡定数の温度依存性のデータから熱力学公式を用いて反応の内部エネルギー変化を求めた。他方、モデル粒子間に働く力の直接測定から 1 モル当たりの結合エネルギーを求めた。それらの値は、上記の内部エネルギーの値とほぼ一致した。このことは、本モデル系に関して、測定方法とその結果に自己矛盾がないことを示すと同時に、熱力学公式の実験的証明にもなっていることを示している。さらに、初期状態から平衡に至る反応カーブの解析から反応のエネルギープロフィールを描くことが可能であることを示した。

3. 高分子の二次構造形成モデル スーパーボールをテグスで連結することによってポリグリシンモデルを作製した。構成する全てのモデル原子間の相対結合距離および結合角を可能な限り実際のものと一致するように設定した。また、酸素原子モデルと水素原子モデルには、それぞれ N 極と S 極が露出するように磁石を埋め込み、水素結合を表現した。

ポリグリシンモデルを分子運動視覚化装置に入れ適度な温度状態におくと、 3.0_{10} ヘリックス構造が形成された。また、モデルの中央部に、隣接する 2 原子の結合軸周りの回転を固定することによって、 β ターン構造を導入したところ、逆平行 β シート構造の形成が起こることが観察された。すなわち、一部の結合軸周りの回転の固定がポリペプチド全体の二次構造の形成確率大きく影響することが分かった。さらに温度を増加させると、二次構造が壊れ、ランダムコイル構造になった。これらの構造の間の変化は、温度変化に伴って、可逆的に起こることが観察された。

Development of physical models that represent dynamic equilibrium of interacting- particles system

K. Murakami, Y. Komatsu, T. Fujimura (Yamaguchi Univ., kmura@yamaguchi-u.ac.jp)

A quantitative molecular-motion visualization apparatus has been constructed and physical models of interacting molecules systems have been explored. van der Waals equation models, chemical reaction models, and secondary structure formation models of polymer have been constructed. By putting the models into the apparatus and altering the conditions of the model system such as temperature, the microscopic and kinetic pictures and the dynamic nature of equilibrium for gas-liquid equilibrium, chemical equilibrium, and reversible formation of helical and sheet structures of polymer have been well represented.