

# SAXS基礎理論

## 参考図書

- Glatter & Kratky (1982) Small Angle X-ray Scattering, Academic Press 絶版
- KEK構造生物学研究センター編、加藤龍一編集(2010)入門構造生物学, 共立出版(2.3「X線溶液散乱」上久保裕生)

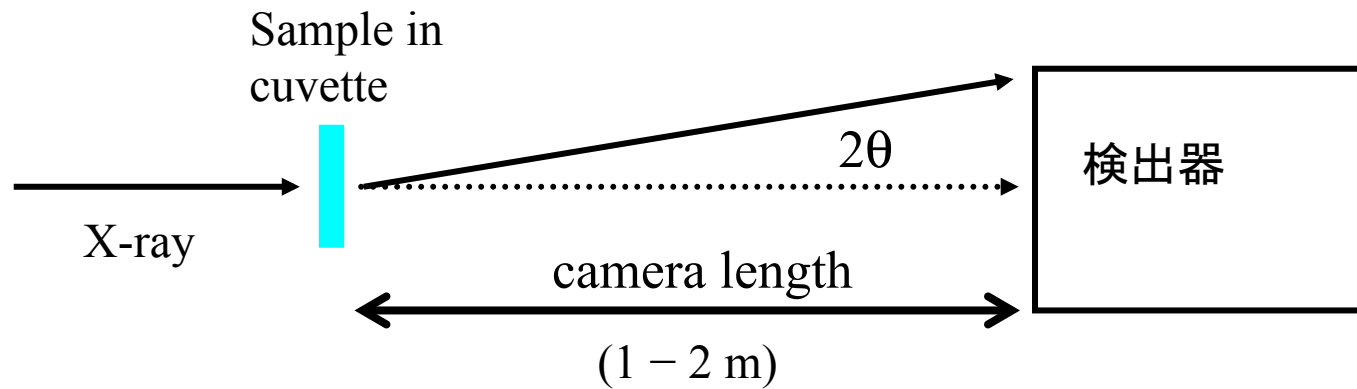
東京薬科大学生命科学部  
小島 正樹

# X線溶液散乱

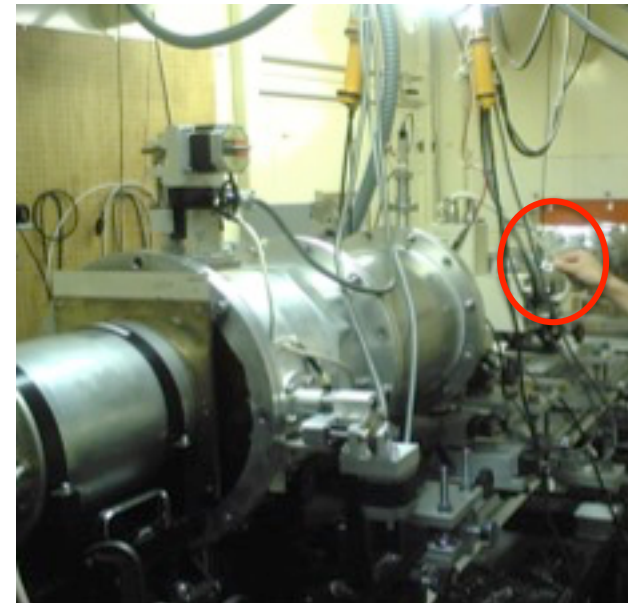
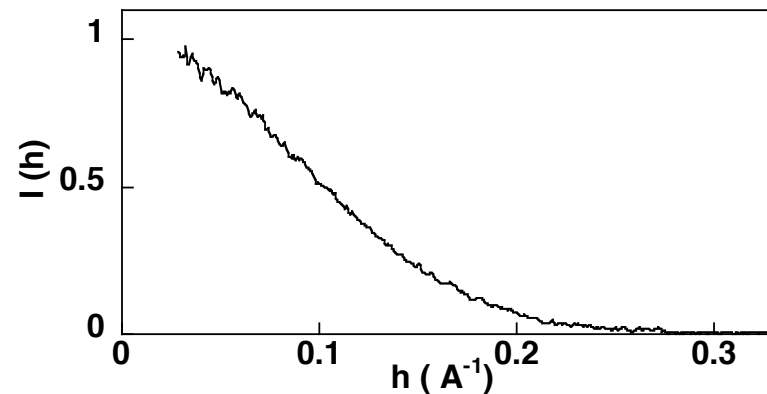
## (X線小角散乱; SAXS)

- 対象が溶液であることを除いて結晶解析と同一の測定原理に基づく
- 実測できる散乱角が小さいため、分子の全体的な構造やその変化を反映(低分解能)
- 溶液中における分子の位置や配向のランダム性により、構造情報の多くが相殺されてしまう(低情報量)
- 測定が比較的迅速かつ簡便
- 測定条件の自由な設定が可能  
変性タンパク質やアミロイド線維の構造解析

# SAXSの光学系と散乱データ

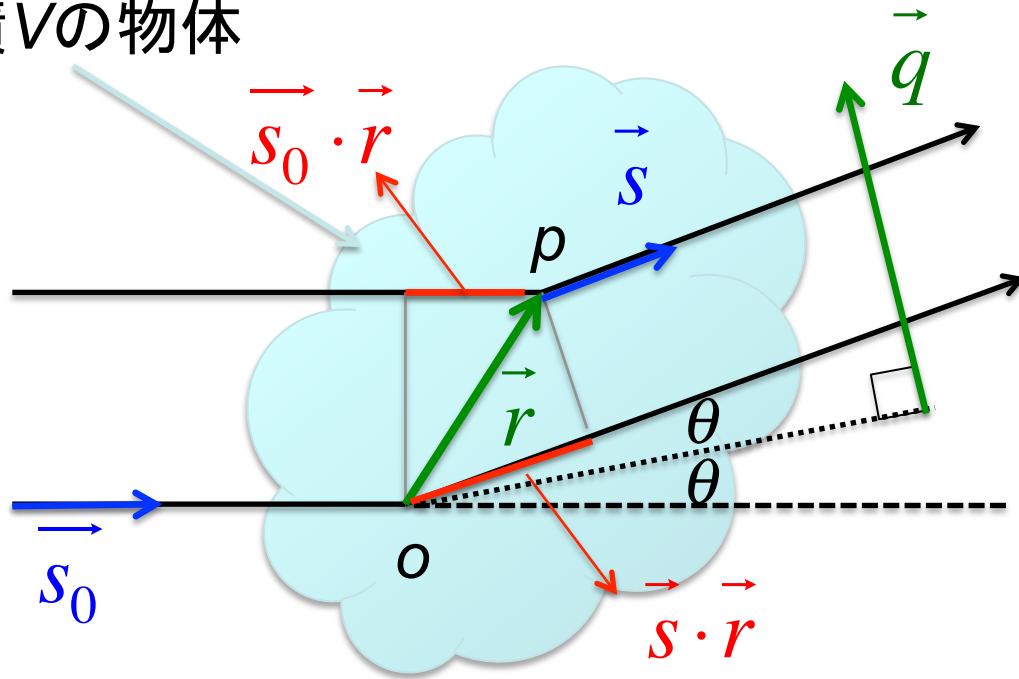


$q = 4\pi\sin\theta/\lambda$  ( $q$ を $h$ とも表す)  
( $2\theta$ : 散乱角,  $\lambda$ : 入射X線の波長)  
 $I(q)$ :  $q$ における散乱強度



# 物体によるX線の散乱

体積Vの物体



$\vec{s}_0, \vec{s}$  : 単位ベクトル

位相差  $\delta =$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (\vec{s} \cdot \vec{r} - \vec{s}_0 \cdot \vec{r})$$

$$= \frac{2\pi (\vec{s} - \vec{s}_0) \cdot \vec{r}}{\lambda}$$

$$= \vec{q} \cdot \vec{r}$$

$$\vec{q} \equiv \frac{2\pi (\vec{s} - \vec{s}_0)}{\lambda}, \quad q \equiv |\vec{q}| = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$$

電子密度  $\rho(\vec{r})$  の物体1個からの散乱**振幅**

$$F(\vec{q}) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{i\delta} dV = \int_V \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} dV$$

物体1個からの散乱振幅

$$F(\vec{q}) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV \quad (\text{複素関数})$$



実際に観測されるのは、散乱**振幅**でなく、散乱**強度**

$$i(\vec{q}) = F(\vec{q})F^*(\vec{q}) \quad (*\text{は複素共役を表す})$$



N個の物体からの散乱

溶液中では物体(分子)はランダムに配向している

$$I(\vec{q}) \approx N \cdot i(\vec{q})$$



$$F(\vec{q}) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV$$

$$I(\vec{q}) = F(\vec{q})F^*(\vec{q}) = \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_1} dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_2} dV_2$$

$$\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \downarrow \quad = \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} dV_1 dV_2$$

$$I(\vec{q}) = \int_V \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2 + \vec{r}) \rho(\vec{r}_2) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV dV_2$$

$$= \int_V \left( \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) \rho(\vec{r}_2 + \vec{r}) dV_2 \right) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV$$

$$\downarrow \quad \gamma(\vec{r}) \equiv \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) \rho(\vec{r}_2 + \vec{r}) dV_2 ; \text{相関関数}$$

$$I(\vec{q}) = \int_V \gamma(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV \quad \Leftrightarrow \quad \gamma(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V^*} I(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{q}$$

Fourier変換

## 等方的な系での平均

$$I(\vec{q}) = \int_V \gamma(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV$$

$\omega$  ; 立体角

$$\vec{r} = (r, \theta, \varphi)$$

$$dV = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr = r^2 d\omega dr$$

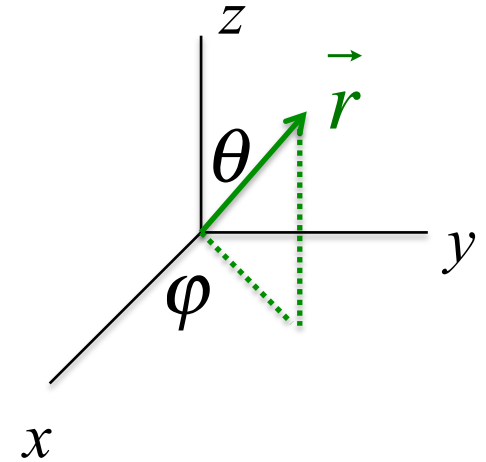
$$I(q) \equiv \langle I(\vec{q}) \rangle_{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \int I(\vec{q}) d\Omega$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int \int_0^{\infty} dr \int_0^{4\pi} d\omega \gamma(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} r^2 d\Omega$$

$$= \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{4\pi} \gamma(\vec{r}) d\omega \frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega$$

$$= \int_0^{\infty} r^2 dr 4\pi \gamma(r) \frac{\sin(qr)}{qr} = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 \gamma(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr$$

↑  
参考2



# 溶液散乱の基本式

$$I(q) = 4\pi \int_0^\infty r^2 \gamma(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr \quad \text{ただし } r \equiv |\vec{r}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

$p(r) \equiv r^2 \gamma(r)$  ; 距離分布関数

$$I(q) = 4\pi \int_0^\infty p(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr \Leftrightarrow p(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty I(q) qr \sin(qr) dq$$

Fourier変換

Debyeの式

$$\begin{aligned} I(q) &= \langle I(\vec{q}) \rangle_\Omega = \left\langle \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV_1 dV_2 \right\rangle_\Omega \\ &= \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) \frac{\sin(qr)}{qr} dV_1 dV_2 \end{aligned}$$



# Guinier近似

$$I(q) = \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) \frac{\sin(qr)}{qr} dV_1 dV_2 \quad (\text{Debyeの式})$$

$$\left| \frac{\sin(qr)}{qr} = 1 - \frac{(qr)^2}{3!} + \frac{(qr)^4}{5!} - \dots \right. \quad \text{Taylor展開}$$

$$I(q) \approx \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 - \frac{q^2}{6} \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2$$
$$= \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \left( 1 - \frac{q^2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{6 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} \right)$$

$$= I(0) \left( 1 - \frac{q^2}{3} \cdot \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} \right)$$

↓ 重心が原点の場合 (←参考1)

$$= I(0) \left( 1 - \frac{q^2}{3} \cdot \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) r_1^2 dV_1}{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1} \right) = I(0) \left( 1 - \frac{q^2}{3} Rg^2 \right)$$

$$e^{-\frac{Rg^2 q^2}{3}} = 1 - \frac{Rg^2 q^2}{3} + \frac{1}{2!} \left( \frac{Rg^2 q^2}{3} \right)^2 - \dots \quad \text{Taylor展開}$$

$$I(q) \approx I(0) e^{-\frac{Rg^2 q^2}{3}}$$

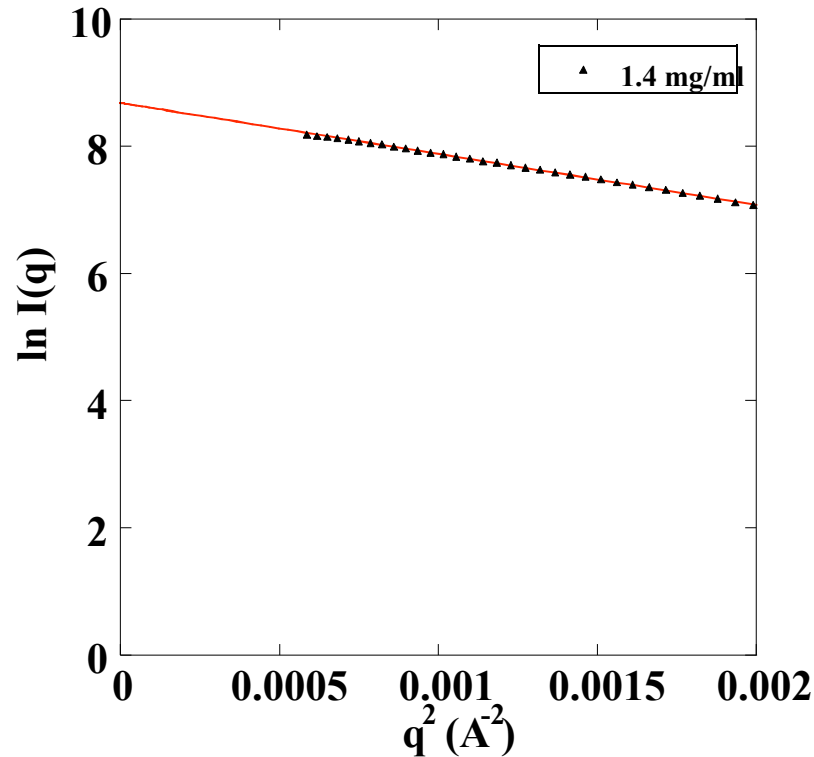


$$\ln I(q) \approx \ln I(0) - \frac{Rg^2}{3} q^2 \quad \text{Guinierプロット}$$

原点散乱強度

$$I(0) = \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2 = (\bar{\rho}V)^2$$

## Guinierプロット ( $\ln I(q)$ vs. $q^2$ )



→  $R_g$  および  $I(0)$  が求まる

Guinier近似の成り立つ領域

$$R_g q < 1.3 \quad (\text{Guinier領域})$$

$R_g$ : 分子の大きさ

$I(0)$ : 解離により減少

会合により増加

(参考) 半径  $r$  の球の慣性半径

$$R_g^2 = \frac{\int_V \rho(\vec{r}) r^2 dV}{\int_V \rho(\vec{r}) dV} = \frac{4\pi\rho \int_0^\infty r^4 dr}{\rho \frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{3}{5} r^2 \quad \text{より} \quad R_g = \sqrt{\frac{3}{5}} r \approx 0.775r$$

# 散乱強度の濃度依存性

$$I(0) = (\bar{\rho}V)^2 \propto cM$$

$c$ : 重量濃度 (mg/mL)

$M$ : 分子量

$$\frac{I(0)}{cM} = \frac{I_{st}(0)}{c_{st}M_{st}} \text{ より、既知の標準物質を用いて分子量を算出}$$

(参考) Zimmの式

$$\frac{c}{I(0,c)} = \frac{1}{K} \frac{1}{M} (1 + 2A_2Mc) \quad \begin{array}{l} K: \text{比例定数} \\ A_2: \text{第2ビリアル係数} \end{array}$$

$\frac{I(0)}{c}$  に濃度依存性があるときは、上式を用いてゼロ濃度に補外する

# $p(r)$ について

## 1. 物理的意味

物体内の任意の2点間距離の分布

→分子の**最大長** ( $D_{\max}$ )がわかる  $r > D_{\max}$  では  $p(r) = 0$

## 2. Guinier近似とは独立に慣性半径がわかる

$$R_g = \sqrt{\frac{\int_0^{D_{\max}} p(r) \cdot r^2 dr}{2 \int_0^{D_{\max}} p(r) dr}}$$

## 3. $p(r)$ 計算時に気をつけること

i) 打ち切り効果 (termination effect)  $p(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} I(q) q r \sin(qr) dq$

$p(r)$ の端に大きな振動 (ripple) が現れるときは、小角側、広角側へ正しく補外する

ii) 粒子間干渉 (interparticle interference)

ゼロ濃度へ補外して、無限希釈条件下の散乱強度を求める

iii) 離散的Fourier変換での要請:  $\Delta q \leq \pi / D_{\max}$

# 解析前に実測データから取り除くもの

## 1. 粒子間干渉: 一般に小角側に現れる

Zimmの式を用いてゼロ濃度に補外する

うまく補外できないとき

- ・各濃度でGuinier近似を行い、 $R_g$ と $I(0)$ を求める
- ・ $R_g$ と $I(0)$ の濃度依存性から、各々ゼロ濃度に補外する
- ・ゼロ濃度での $R_g$ と $I(0)$ の値から、小角領域を構築する
- ・濃度依存性のない広角側のデータと接続する

## 2. 分子内部の電子密度の不均一性のうち、SAXSでは分別不能なもの

background scatteringと呼ばれる

広角側で顕著で、かつ一定の値 $I_{bg}$ をとる

→ Porod-Luzzatiの式を用いて取り除く

$$\lim_{q \rightarrow \infty} I(q) = \frac{1}{\pi} \frac{S}{V} \frac{Q}{q^4} + I_{bg} \quad \frac{S}{V}; \text{ specific surface, } Q: \text{ invariant}$$

# 基礎理論から振り返って

1. SAXSの解析は**単分散系**が前提  
凝集や分子間会合に十分に注意する  
複数のタンパク質濃度で測定する

多分散系の場合:

試料を検討する

各成分の散乱強度を抽出する

2成分系では**等散乱点**が観測される

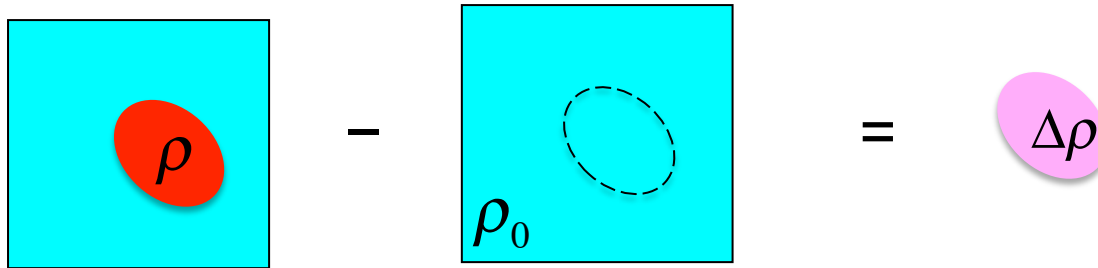
**特異値分解(SVD)**で独立な成分の数を推定する

2. 電子の空間配置から、散乱強度を理論的に計算できる  
種々のモデル計算が可能

$$I(\vec{q}) = F(\vec{q})F^*(\vec{q}) \quad F(\vec{q}) = \begin{cases} \int_V \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV & (\text{連続体の場合}) \\ \sum_i f_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} & (\text{多原子分子の場合}) \end{cases}$$

# SAXS理論における溶媒分子

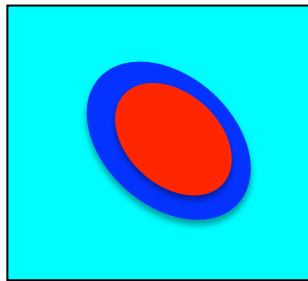
1. SAXSでは、溶媒の電子密度との差(コントラスト)を見ている



これまでの数式中の  $\rho$  は、正確には  $\Delta\rho = \rho - \rho_0$

溶媒は、連続体媒質として扱われる  $1.0\text{g}/\text{cm}^3 = 0.334e/\text{\AA}^3$

2. SAXSでは、水和層を含むタンパク質分子を見ている



水和層の厚み：均一に $3\text{\AA}$

水和層の電子密度：溶媒の約1.1倍



# SAXS試料について

**タンパク質濃度は正確に！**

分子量・会合数算出の根拠

ストック溶液から希釈により調製した方がよい

ブランクの溶媒組成は厳密に同一であること！

吸収と異なり、散乱は全ての物質で起こる

同一でない、「引き過ぎ」や「引き残り」が生じる

→**透析外液がベター**

# 問題

$I(0) \propto cM$  を用いて以下の問に答えなさい ( $c$ : 重量濃度,  $M$ : 分子量).

- (1) モル濃度  $c_M$  (mol/L) を用いて,  $I(0) \propto c_M M^2$  と表せることを示しなさい.
- (2) ホモ2量体が単量体に解離すると,  $I(0)$  の値はどうか.

# 問題解答

(1)  $c(\text{mg} / \text{mL}) = c(\text{g} / \text{L}) = c_M(\text{mol} / \text{L}) \cdot M(\text{g} / \text{mol})$  より,

$$I(0) \propto (c_M M) M = c_M M^2$$

(2)  $A_2 \rightarrow 2A$  において, 反応前後の各量は次のようになる

	モル濃度	分子量	$I(0)$
解離前 ( $A_2$ )	$c_M$	$2M$	$c_M(2M)^2 = 4c_M M^2$
解離後 ( $A$ )	$2c_M$	$M$	$(2c_M)M^2 = 2c_M M^2$

したがって, **解離により  $I(0)$  の値は半減する**

(補足) もし  $A_2 \rightleftharpoons 2A$  が平衡状態で, 2量体と単量体の存在比が

$(1-\alpha):\alpha$  の場合:

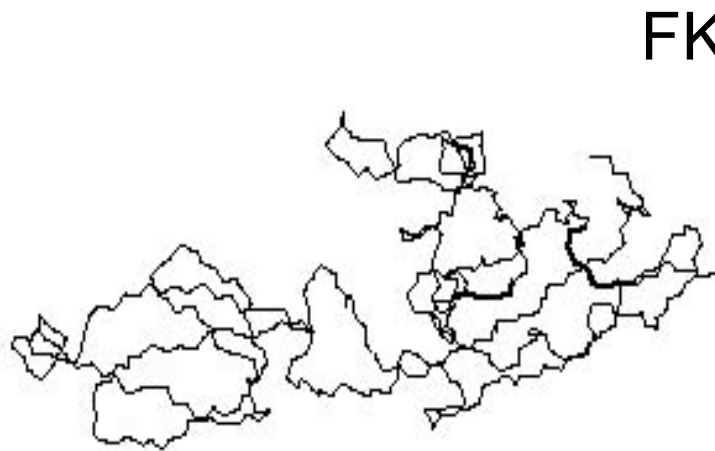
$$\left( K_{eq} = \frac{\alpha}{1-\alpha} \right)$$

$$I(0) = (1-\alpha)I_{\text{dimer}}(0) + \alpha I_{\text{monomer}}(0)$$

$$\propto (1-\alpha)4c_M M^2 + \alpha(2c_M M^2) = 2(2-\alpha)c_M M^2$$

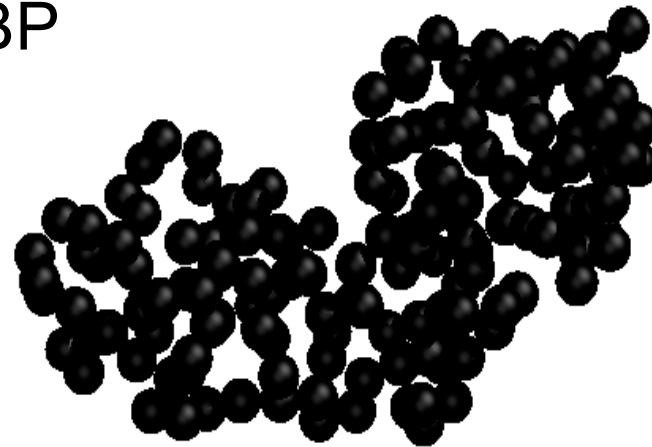
# SAXSデータからタンパク質の立体構造が どこまで決められるか？

*ab initio*モデリング法を用いてビーズ・モデルの構造を求めるのであれば、現在既に可能.



**NMR**  
(PDB code 1IX5)

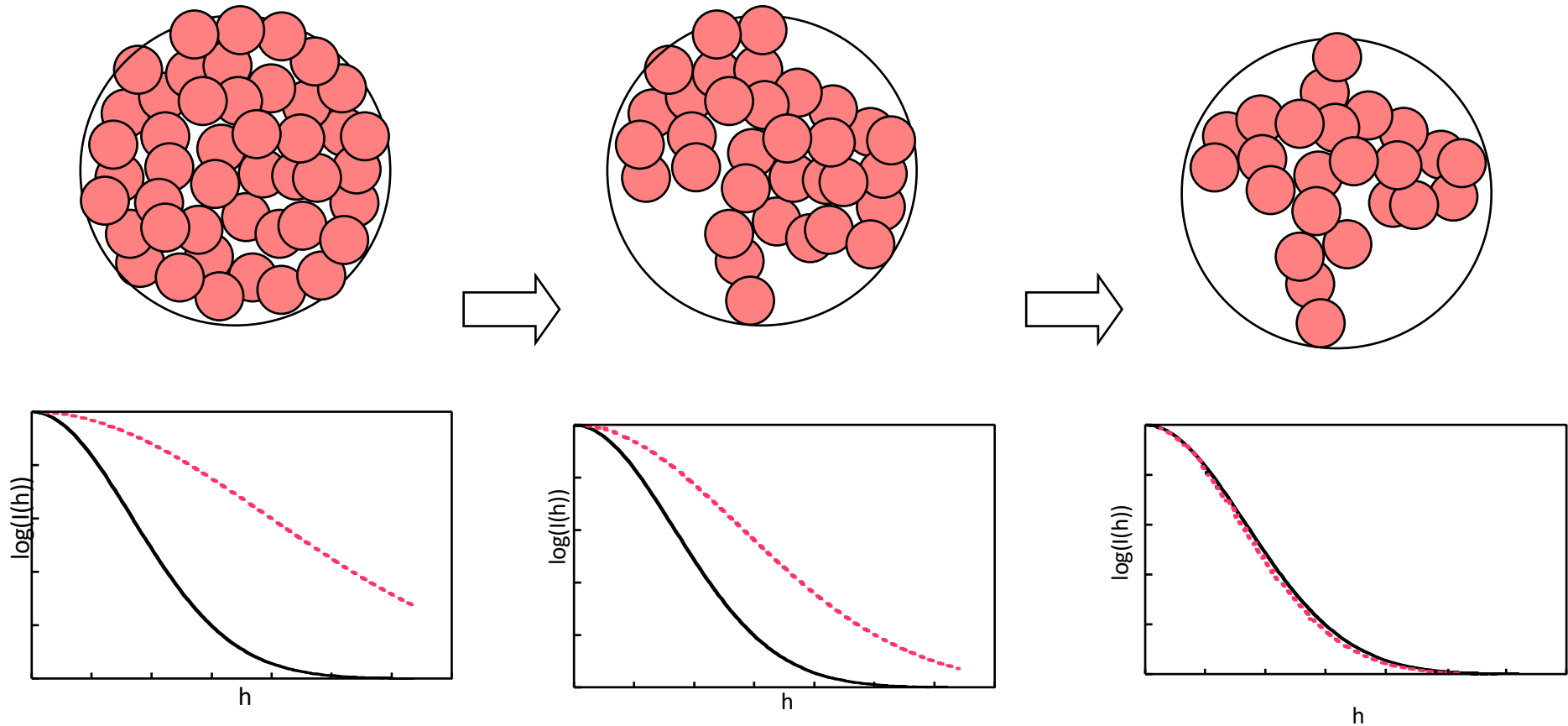
FKBP



**SAXS**→*ab initio*モデリング

# *ab initio* モデリング (DAMMIN)

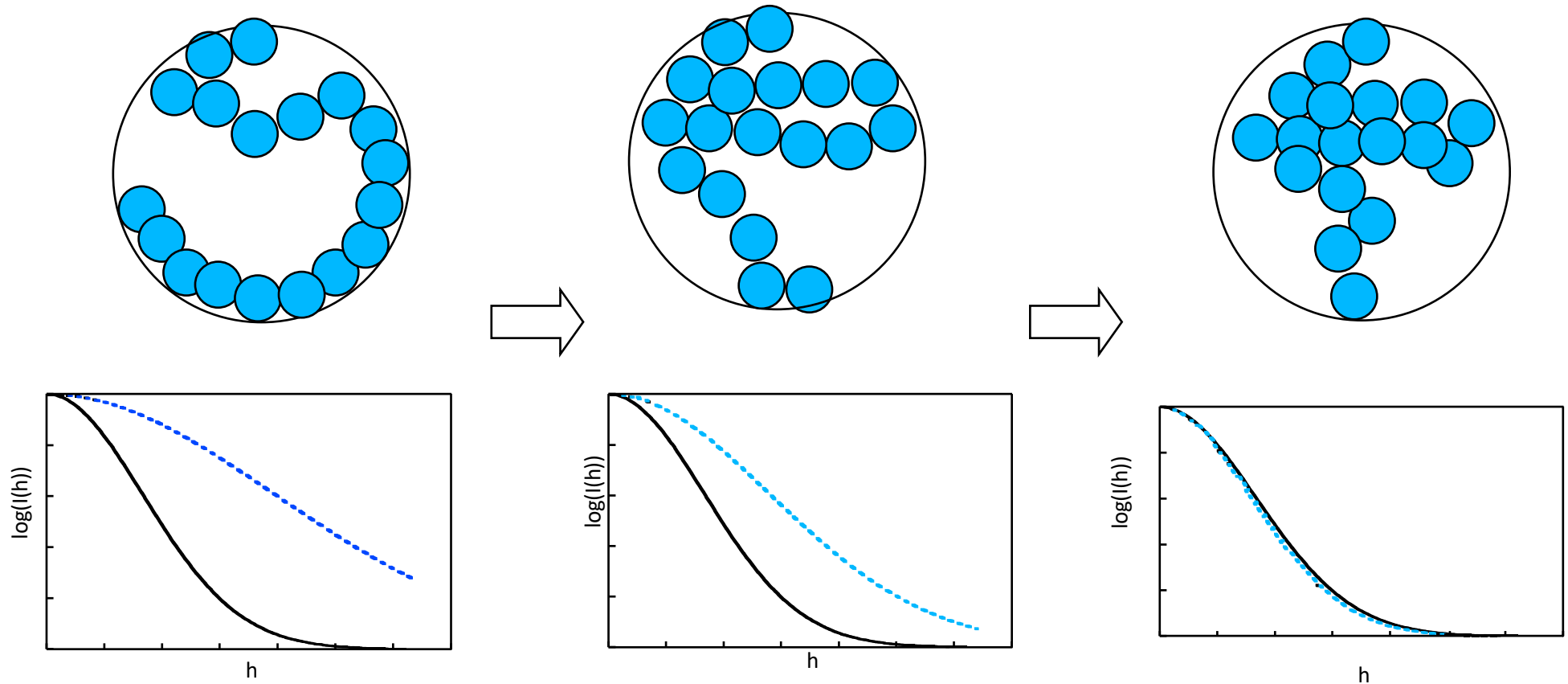
Svergun et al., *Biophys. J.* 76, 2879 (1999)



分子をビーズ(小球)の集合で近似する.  
ビーズの数や位置をランダムに変えながら, 実測散乱曲線を満たすモデルを求める

# *ab initio* モデリング (GASBOR)

Svergun et al., *Biophys. J.* 80, 2946 (2001)



分子をビーズ(小球)の集合で近似する.

各ビーズは仮想残基の役割を果たすため、ビーズの総数は不変で、かつ少なくとも1つのビーズから3.8Å以内の位置に動かす

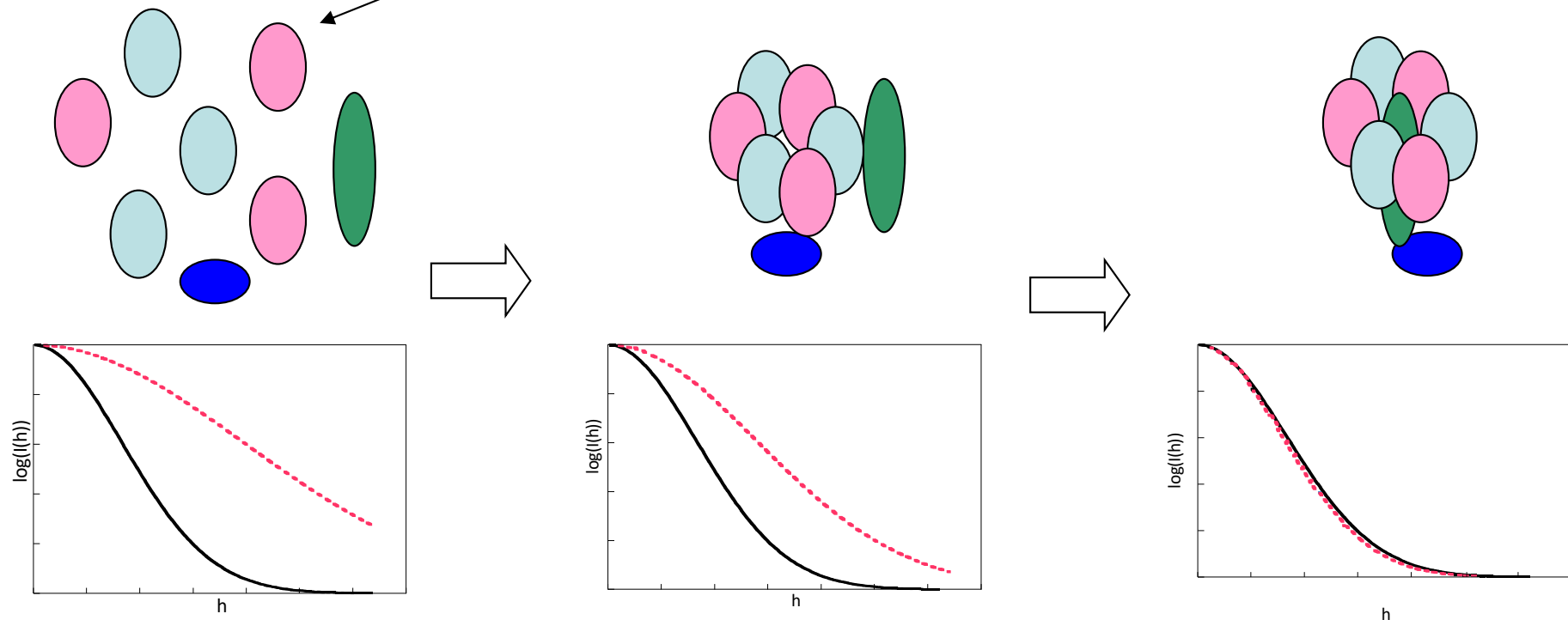
# SAXS法による複合体構造のモデリング

## Rigid-body モデリング (SASREF)

Petoukhov & Svergun, *Biophys. J.* **89**, 1237 (2005)

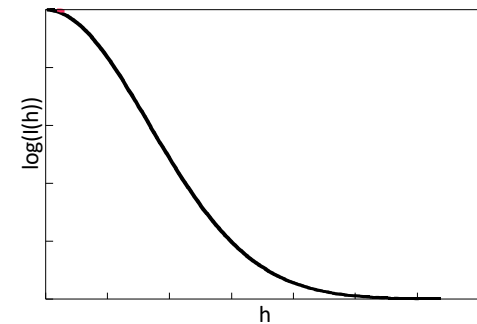
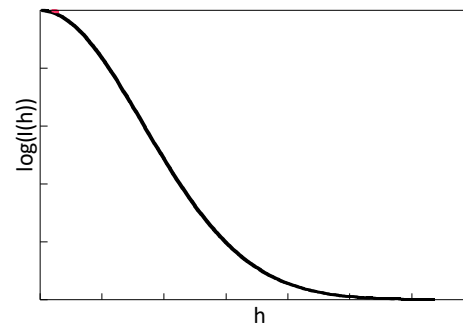
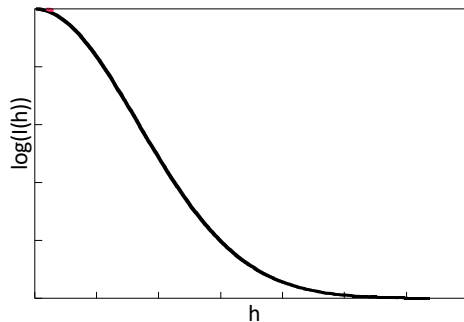
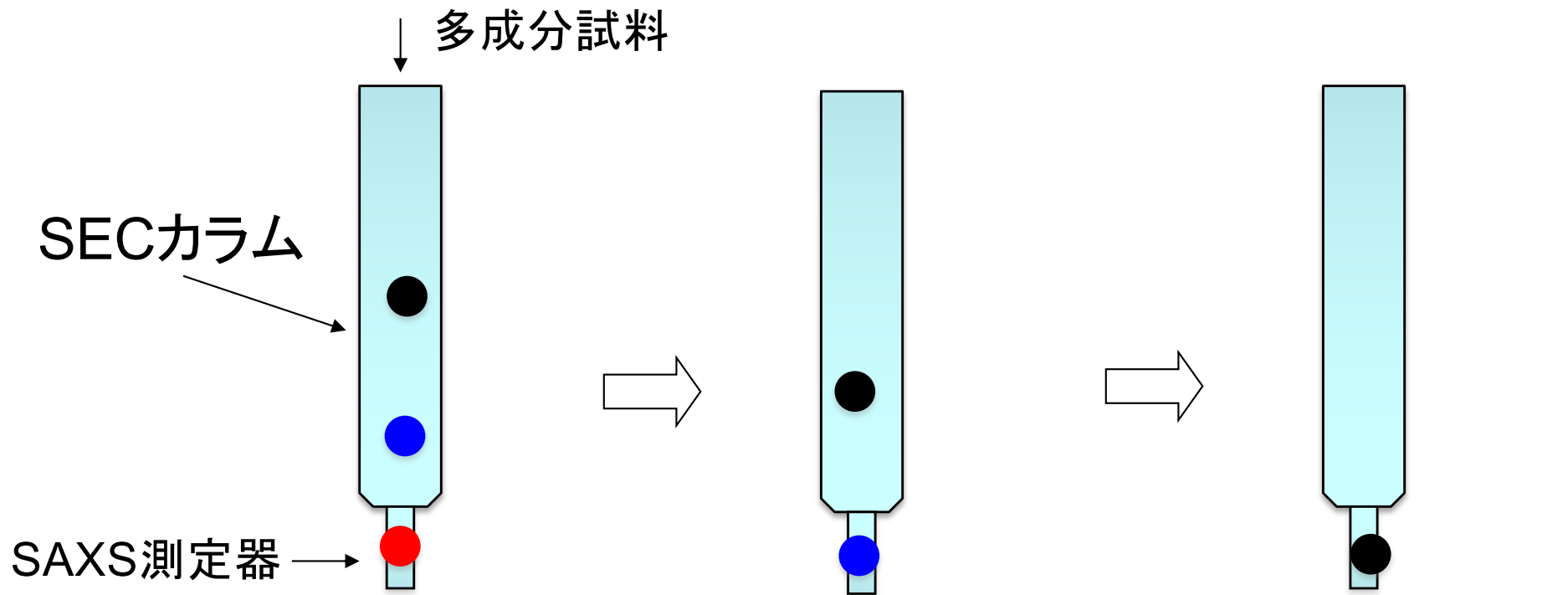
各サブユニットの内部構造は不変のまま、サブユニットの配置を動かしながら実測SAXSデータを満たす構造を探す

各サブユニットの内部構造は結晶解析により決定



# SEC-SAXS法による多成分解析

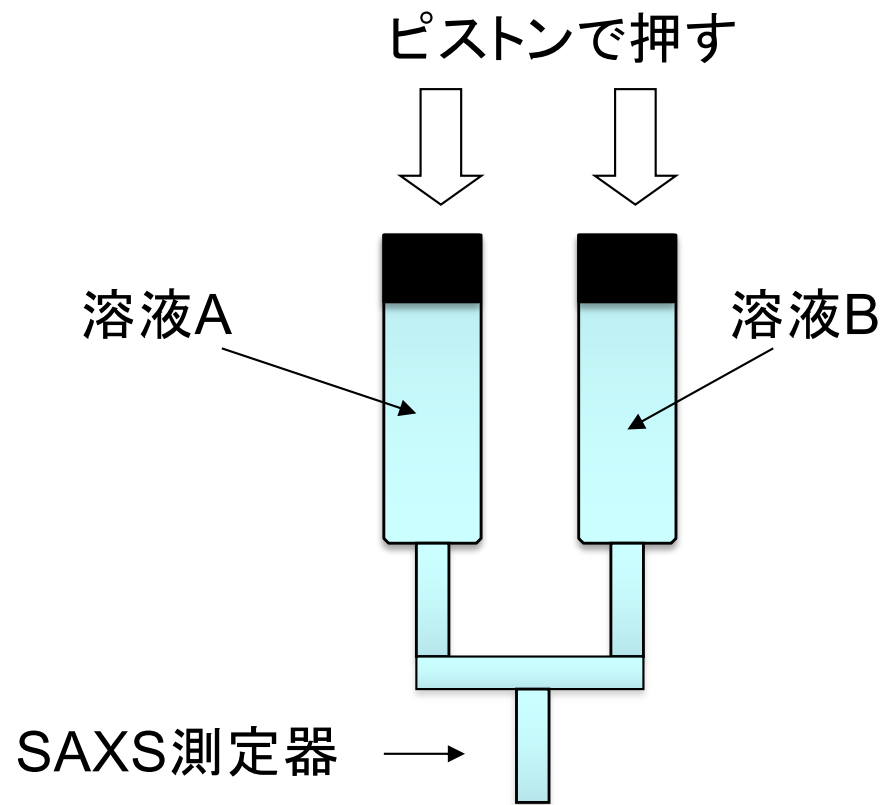
SEC(サイズ排除クロマトグラフィー)とSAXSを組合せて、各成分を分離しながらSAXSを測定する



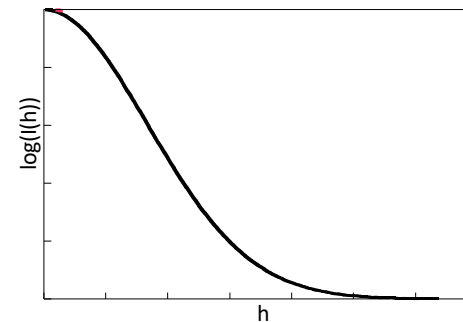
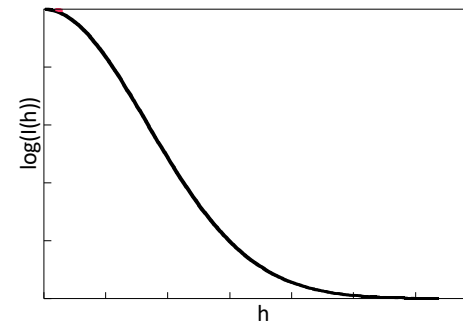
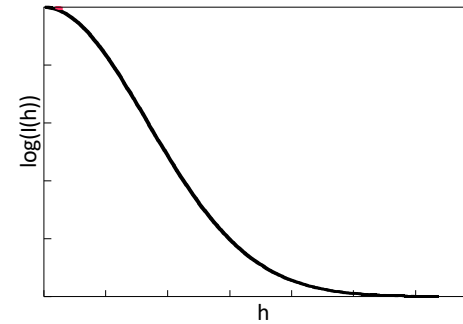


# ストップフローSAXSによる時分割測定

ストップフロー法とSAXSを組合せて、数ミリ秒程度の構造変化を時分割で測定する



混合過程をSAXSで解析



経時変化

## 参考 1 Guinier の式の導出

### 1. 厳密な導出

$$\begin{aligned}
 I(q) &= \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) \frac{\sin(qr)}{qr} dV_1 dV_2 = \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) \left( 1 - \frac{(qr)^2}{3!} + \frac{(qr)^4}{5!} - \dots \right) dV_1 dV_2 \\
 &= \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 - \frac{q^2}{6} \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2 + \dots \\
 &\approx \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \left( 1 - \frac{q^2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{6 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} \right) = I(0) \left( 1 - \frac{q^2}{3} \cdot \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} \right) \dots \textcircled{1}
 \end{aligned}$$

ここで、 $r = |\vec{r}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  だから、重心の位置ベクトルを  $\vec{r}_G$  として、

$$\begin{aligned}
 &\frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} = \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} = \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) |(\vec{r}_1 - \vec{r}_G) - (\vec{r}_2 - \vec{r}_G)|^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) dV_2} \\
 &= \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) (|\vec{r}_1 - \vec{r}_G|^2 + |\vec{r}_2 - \vec{r}_G|^2 - 2(\vec{r}_1 - \vec{r}_G) \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_G)) dV_1 dV_2}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2} \quad \left( \because \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 = \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) dV_2 \right) \\
 &= \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) |\vec{r}_1 - \vec{r}_G|^2 dV_1 dV_2 + \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) |\vec{r}_2 - \vec{r}_G|^2 dV_1 dV_2 - 2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) (\vec{r}_1 - \vec{r}_G) \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_G) dV_1 dV_2}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2} \\
 &= \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) |\vec{r}_1 - \vec{r}_G|^2 dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) dV_2 + \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) |\vec{r}_2 - \vec{r}_G|^2 dV_2 - 2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) (\vec{r}_1 - \vec{r}_G) dV_1 \right) \cdot \left( \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_G) dV_2 \right)}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2}
 \end{aligned}$$

いま  $\vec{r}_G \equiv \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) \vec{r}_1 dV_1}{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1}$  より  $\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) (\vec{r}_1 - \vec{r}_G) dV_1 = \vec{0}$  ( $\vec{r}_2$  についても同様) だから、

$$= \frac{2 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) |\vec{r}_1 - \vec{r}_G|^2 dV_1 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 - 2(\vec{0} \cdot \vec{0})}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2} = \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) |\vec{r}_1 - \vec{r}_G|^2 dV_1}{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1} = Rg^2 \quad (\because |\vec{r}_1 - \vec{r}_G| \text{ は重心と点 1 と}$$

の距離) . よって式①は、

$$I(q) \approx I(0) \left( 1 - \frac{q^2}{3} Rg^2 \right) \text{ と表せる.}$$

## 2. 感覚的な説明

式①までは1と同様.

いま,  $r = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos\theta_{12}$  (余弦定理) より,

$$\begin{aligned}
 & \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r^2 dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} = \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos\theta_{12}) dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) dV_1 dV_2} \\
 & = \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1^2 dV_1 dV_2 + \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_2^2 dV_1 dV_2 - 2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1 r_2 \cos\theta_{12} dV_1 dV_2}{2 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) dV_2} \\
 & = \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) r_1^2 dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) dV_2 + \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \int_{V_2} \rho(\vec{r}_2) r_2^2 dV_2 - 2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1 r_2 \cos\theta_{12} dV_1 dV_2}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2} \\
 & = \frac{2 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) r_1^2 dV_1 \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 - 2 \int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1 r_2 \cos\theta_{12} dV_1 dV_2}{2 \left( \int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1 \right)^2} \\
 & = \frac{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) r_1^2 dV_1}{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1} - \frac{\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1 r_2 \cos\theta_{12} dV_1 dV_2}{\int_{V_1} \rho(\vec{r}_1) dV_1} \dots \textcircled{2}
 \end{aligned}$$

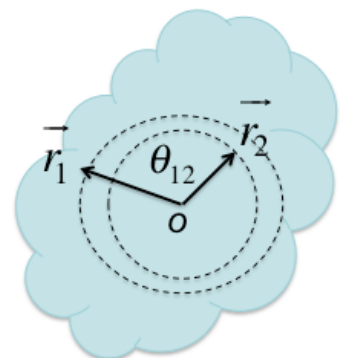
ここで,  $\int_{V_1} \int_{V_2} \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_1 r_2 \cos\theta_{12} dV_1 dV_2$  の積分を,

1)  $r_1 r_2 \cos\theta_{12} = \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2$  より,  $r_1, r_2$  が同一の  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  ごとにまとめて行うものとする.

2) 1)において,  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  (で表される点) が共に物体内部にある  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  のみ考慮する.

このとき, 物体の中心付近に原点をとれば, 任意の  $\theta_{12}$  に対応する  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  が物体内部に存在するため (右図参照), 互いに相殺し合っ, その積分値は0になると考えられる.

そこで, 物体の重心を原点Oに選ぶと, 式②は,  
 $= Rg^2 - 0 = Rg^2$  となる.



参考 2  $\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega = \frac{\sin(qr)}{qr}$  の導出

$$\vec{q}\cdot\vec{r} = qr \cos\theta_{qr} \text{ より, } \frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega = \frac{1}{4\pi} \int e^{iqr \cos\theta_{qr}} d\Omega.$$

ここで  $\int e^{iqr \cos\theta_{qr}} d\Omega$  は, ある  $\vec{r}$  に対して,  $q = |\vec{q}|$  を保ったまま  $e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$  を計算して和をとる (積分する) ことに相当する.

そこで, 図のように  $\vec{r}$  を  $z$  軸方向にとり,  $\vec{q}$  の大きさを固定したまま, 向きを任意に変えて  $e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$  の積分を実行すると,

$$\int e^{iqr \cos\theta_{qr}} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{iqr \cos\theta_{qr}} \sin\theta_{qr} d\theta_{qr} = 2\pi \int_0^\pi e^{iqr \cos\theta} \sin\theta d\theta$$

$u = \cos\theta$  とおいて置換積分すると,

$$2\pi \int_0^\pi e^{iqr \cos\theta} \sin\theta d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 e^{iqr u} du = 2\pi \left[ \frac{e^{iqr u}}{iqr} \right]_{-1}^1 = \frac{2\pi}{iqr} (e^{iqr} - e^{-iqr})$$

ここで  $e^{iqr} = \cos qr + i \sin qr$  (Euler の公式) を用いると,

$$\frac{2\pi}{iqr} (e^{iqr} - e^{-iqr}) = \frac{2\pi}{iqr} \cdot 2i \sin qr = \frac{4\pi \sin qr}{qr} \text{ が得られる.}$$

したがって

$$\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega = \frac{1}{4\pi} \frac{4\pi \sin qr}{qr} = \frac{\sin qr}{qr} \text{ が成り立つ.}$$

(注意)

$$\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega = \frac{\int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega}{\int d\Omega} = \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \rangle_\Omega$$

