「機械分子工学」のこと*

小 竹 進^{*1}

On the “Molecular Mechanical Engineering”

Susumu KOTAKE

Key Words: Mechanical Engineering, Molecular Engineering, Molecular Mechanics

1. 「機械分子工学」ことはじめ

「機械分子工学」という学部での講義を始めて5年になる。回転温度だとかクラスタだとかいう言葉が学生たちの口から自然にでてくるのを耳にするとうれしくなるが、何となく当然のような気もする。5年前、機械系の学生には少し奇異に感じられたかもしれないが、思いきって分子原子レベルでのマクロな現象の理解を試みた。奇異に感じたのは学生のほうでなくて先生のほうかもしれない。柔らかい頭の学生たちは既成の知識がないからどのようにも対処できるが、先生のほうは既成の知識と矛盾なくなどと気を遣うから大変である。ふく射などの量子力学から熱伝導、粘性、応力などを、ミクロからマクロ、マクロからミクロに現象をとらえ理解することは、頭の固い先生よりも結構自由自在にやっている。

半導体などの材料の製造や真空技術などの進歩のために、分子原子レベルで現象を理解しなければならないことが多くなってきたことも事実であるが、熱流体工学や材料工学においてもマクロなことが一応わかってしまうとその先はどうなっているのかということになるのは人情でもあろう。例えば、沸騰や凝縮という現象では、最初に沸騰や凝縮の核ができるという前提で、それから先のことはだいたい理解が終わっているいろいろな利用や応用が行われている。そこまで行くと、それではそういう核とはどんなものか、どのようにしてできるのかということになるのは当然である。マクロマシン、ナノマシンといっているが、その空気中で

の環境はもはや連続体としては扱えない領域にあり、それが動くときに働く抵抗などの動的な特性の評価は今までの連続流体力学の延長ではできない。薄膜技術も急激な進歩をとげているが、その物性値などはどうなっているのだろうか。熱伝導はよくなるのか悪くなるのか。ナノ加工というとき何をどのくらいの精度でどう加工するのか。こうした領域では、今までの連続体としての熱流束とか圧力、応力・ひずみという概念は再検討しなければならない。

こうした機械工学の現状では、そこで扱われる現象や技術をもっと分子原子のレベルで理解する必要があるし、多くの場合はそのほうが理解しやすい。このようにして始まった話が「機械分子工学」である。もちろん、このような言葉は今まで聞いたこともないが、重要なのは「機械」であり、「分子」であり、「工学」であることである。

2. 「機械」であり、「分子」であり、「工学」であること

平成6年度の文部省科学研究費補助金申請で、重点的な格段の発展を目的とする重点研究領域研究(計画研究)の課題をみると、「分子」と名のつくものは83課題のうち32課題もある(研究項目を含む)。まさに「分子」ばやりである。分子原子レベルでの現象の理解はそれ自身として新しいことではないが、計測技術が大きく進歩したことと計算機の発達により大容量高速な計算が可能になったことにより、さらに新しい進展を期待しようということである。こうした物理・化学の「分子原子」がわかっていれば、なにも機械の「分子原子」など必要ないのではないと思われるかもしれないし、そういう人もいる。しかし、それは「機械」のこ

* 原稿受付 平成5年12月14日。

* 正員、東京大学工学部 (〒153 東京都文京区本郷7-3-1)。

とをよく知らない人のいうことである。

(1) 「機械」であること

「機械」であつかうエネルギー、すなわち、材料加工、流体運動、熱変換輸送などであつかうエネルギーは、化学反応など化学分野であつかうエネルギーに比べるとオーダーが2～3けた小さく、化学エネルギーなどではその残りがすである。しかし、機械技術者はこれらの弱いエネルギーを巧みに操作して、物を作ったり動かしたりしている。しかもこのころは少しでも有効にということで、その弱いエネルギーを精度よく制御して、0.1%という効率や性能の向上を問題にしている。化学エネルギーなどからみれば誤差の誤差範囲の話である。したがって、「機械」における分子原子の問題もこうしたエネルギー範囲のものでなければならない。光のエネルギーでいうと可視光レベル以下の問題である。問題によっては、鉄の溶解などのように物質の色が変わることがあるが、工作や流れの問題ではほとんど色が変わらない範囲の問題である。エネルギーが高い場合でもせいぜい燃焼現象であり、ここでも材料の問題で取扱う最高温度には制限がある。こうした弱いエネルギーを取扱うためには、より強いエネルギーレベルからみると誤差範囲のレベルの精度での制御が必要であり、より高度な理解と制御技術が要求される。

分子の運動は分子内の電子や原子核の電荷分布に基づくクーロン力による。この電荷分布が静的に正あるいは負に片寄っているときは、この力は強い力になる。しかし、電荷分布が静的に片寄っていないときでも、分子原子の運動により動的に片寄りが生じて結果として分子間に力が働く。これがファンデルワールス力である。したがって、この力は分子内の電子の軌道のひずみにより生じるもので、電子軌道が大きく変化する化学結合の力に比べると非常に弱いものである。しかし、これはすべての分子の間に働くことになる。「機械」の現象ではこのファンデルワールス力が主力であり、このような弱い力を相手にしなければならない。そのためには特別な創意と精度よい取扱いが必要なのである。

こうした分子原子間の力(ポテンシャル)はシュレーディンガー式を解くことによってもとめられるが、計算機の発達によって化学エネルギーのレベルではプログラムがコード化されており、容易に計算できる。簡単な分子であればシュレーディンガー式など知らなくてもその解がもとまり、そのエネルギー状態を知ることができる。しかし、「機械」レベルの分子すなわちファンデルワールス力をもとめようとすると、簡単では

なく、この計算コードは単なる誤差しか与えない。この弱い分子間力をもとめるためには2けたあるいは3けたも精度のよい式の解法を見つけないといけないのである。そして、それは「機械」の問題として解決しなければならないのである。なぜなら、そのようなエネルギーが必要なのは「機械」だからである。

(2) 「分子」であること

上述の「機械」エネルギーレベルでは、原子状態そのものが問題になるより分子状態およびその運動が問題である。この分子の状態およびその運動とともに分子集団としての状態と運動が問題にされ、そしてマクロにつながらなければならない。電子や原子状態がそれ自身問題になることもあるが、それも分子状態の特殊な場合として理解できる。この点で、「機械原子工学」、「機械量子工学」というのは意味がない。原子も量子もすべてより複雑な「分子」のなかに含まれてしまうと同時に、「機械」というマクロな状態には「分子」でしかつながらないからである。光の吸収や金属の熱伝導では、電子の量子的状態や運動が問題になるが、それでもそれ自体が問題になるというより、分子原子およびその集合体とのかかわりにおいての問題が重要である。

温度や圧力という概念は、もっとも広く用いられているが、物質の状態量の一つとしての熱力学的な意味が強い。熱力学という理論体系はこうした物質の状態量を *a priori* に「始めに…ありき」そして「これらは…を満足するあるいは満足しなければならない」ということから出発する。そこではなぜそういう状態量があり、それらがなぜそのような法則を満足しなければならないかの説明はない。一つの公理をもとにきれいに理論体系を組み上げている数学のようなものであり、それに物理的解釈をつけるのは相当の経験が必要である。そのような経験の怪しい先生がまったく経験のない学生にこれらの理論を教えるのは、論理体系がすっかりしているだけに非常に容易ではあるが単なる数学の展開にすぎない。そのような理論に、学生が自分の身近な自然現象の理解や工学的な道具としての興味をしめさないことは当然である。流体力学や材料力学は力学という動的な要素が入るので熱力学ほどではないかもしれないが事情はほとんど同じである。流体は流れる、物体はひずむということから始めている。なぜ流れるのか、なぜひずむのかということの説明はない。そこでは *a priori* に速度があり、力がある。速度や力の定義はない。日常言語として、速度とか力という概念がなんとかあるから、そこから出発してもそれ以後の論理の発展についていけるが、あやふやにしても

そのような概念がないときには大きな支障をきたす。エントロピーなどその典型であり、定義は a priori であり、理解は多くの経験を積んでからという a posteriori 的なものである。

そこで、「分子」であることの必要性がでてくる。分子原子の系の理解は簡単である。その状態や運動は非常に複雑であり、熱力学になったり、流体力学や材料力学になったりするが、基本的には分子原子の集まりである。その状態においてこうした複雑さの基本をはっきりさせておこうということである。すなわち、温度とは分子原子のもつ運動エネルギーである。分子はこの運動エネルギーのほかに分子間の力のもとになるポテンシャルエネルギーをもつから、これらの和が分子のエネルギーであり、分子集団としては内部エネルギーとなる。流体の速度とは分子の集団としての平均速度である。圧力とは分子集団に働くそれ以外の分子からの力の平均である。エントロピーとは分子系が取り得る状態の総和である。……、などである。すべてを分子の状態とその運動として理解する。基本の理解とそれからの論理展開には経験はいらない。しかし、その結果の理解・解釈には経験が必要であり、それが既存のマクロな知識とのつながりである。分子の運動エネルギーを中心に発展するものは熱力学(エネルギー方程式)に、集団としての運動を問題にするときには流体力学(運動方程式)に、集団としての分子の力の関係を問題にするときには材料力学(状態方程式)にと発展する(図1)。その発展は演えきのであり、経験のない者にもわかりやすいし、経験のある者には新しい発見がある。

(3) 「工学」であること

「科学」が自然現象の因果関係やそこに存在する法

図1 分子動力学と連続体力学 (H : ハミルトニアン, Ψ : 波動関数, ϕ : ポテンシャル, m : 質量, $\mathbf{V}$: 速度, $\mathbf{x}$: 位置)

則性を解明するというやや趣味的であるのに対して、「工学」はそうした結果やその過程を利用・応用して広い意味の生産をするという目的指向である。後者の中心は、自然現象の法則性を応用利用して何かを生産する、すなわち何かをつくる、まとめることにある。「科学」が部分的であるのに対して「工学」は全体的でなければならない。「工学」では、部分的に優れていても全体的な調和がとれていなければ意味をなさない。何かをまとめなければならないということで、「工学」はしばしば部分を犠牲にしているが、より高性能高効率性を問題にするためには部分と全体の調和が必要である。そこには“美”がなければならない。「工学」では、部分が全体としてのシステムでどう機能するかがつねに問題になる。部分から全体、ミクロからマクロだけでは「工学」は成り立たないのであり、つねに全体から部分、マクロからミクロをみななければならないのである。ここに「工学」の複雑さと面白さがある。機械分子「工学」でなければならない理由がある。機械分子工学はつねにミクロからマクロ、マクロからミクロとつながなければならない。

3. ミクロからマクロ、マクロからミクロ

分子原子の状態・運動の単純な系として出発して、連続体力学につなぐというミクロ → マクロの関係と、連続体力学から分子原子の状態や運動を演えきするマクロ → ミクロの関係は可逆でない。分子原子系を固定してその状態・運動を見る目(時間的空間的スケール)を大きくしていくと、目の大きさによって写る像は異なるかもしれないが、一つのマクロにつながる。これが前者である。後者ではまず大きな目で見た像を固定する。したがって大きな目では同じ見えても小さな目で見ると大きく異なっていることが考えられ、同じミクロ系に行き着くとは限らない。同じマクロ現象でもどのミクロな系によるのかということとはわからない。それがわかる法則が見つかるまでは、いろいろな経験が必要となる。

分子間力を含めて、分子原子の状態はシュレーディンガー式からもとめられるが、この式から分子原子系の運動をもとめるのは容易でない。もともと、シュレーディンガー式が状態のエネルギー遷移関係を記述して、分子原子の位置と運動を確定的に表す運動の式でないことによる。機械工学であつかうエネルギーレベルでは、多くの場合シュレーディンガー式のエネルギーレベルの量子性は平均化($\langle \Psi | V | \Psi \rangle$)されてなくなり、分子原子の運動はより確定的になり古典的な質点の力学(ニュートンの式)で記述される(図2)。これ

図 2 熱物質伝達におけるミクロマクロ力学
(Ψ : 波動関数, V : ポテンシャル; $\langle\Psi|V|\Psi\rangle$: V の波動関数平均)

図 3 「機械分子工学」の分野

を分子動力学という。ただし、分子間力や光・電子との干渉はシュレーディンガー式の問題であり、量子分子動力学として取扱わなければならない。計算機の発達と基礎式が簡単なことから分子動力学手法による数値計算の研究は急増して、なかにはこれでなにかマクロなことが理解できたといっているものもあるが、そんな簡単なことではない。

たしかに、分子動力学は分子原子レベルでのミクロな現象の理解には大きな役割を果たしており、これからも大きな威力を発するであろう。しかし、マクロな

現象はそれほど演えき的でないということを忘れてはならない。例えば、温度や圧力が一定な系という場合どのようにしてどのように一定なのかという多様性があると同時に、それに対応するミクロな系が一元的であるとは限らないからである。このミクロ系の多様性と多元性が機械分子工学の一つの大きな魅力であり、未知の分野として将来性が期待される要素である。

4. 機械分子工学のこれから

機械技術の発達に伴って、機械工学の基礎となって

きた a priori な前提をより根本から演えきに理解する必要が生じてきたことと、さらにそのほうが理解しやすいということのために、機械分子工学という新しい理論体系の必然性を説明した。それでは、この機械分子工学という理論体系が機械技術の発展進歩にどう結びつくのか、あるいはそれ自身の将来はどのようなかという問題を考えてみたい。

機械工学という幅広い工学分野と分子工学あるいは分子科学という基礎科学分野を組合せると非常に広い分野になる(図3)。縦軸は、現象に關与する分子のエネルギーの大きさを表し、化学反応(燃焼)のエネルギー約1eVを基準にして定性的な大小關係を表している。横軸は現象システムの寸法の大小關係である。網掛けの部分は、機械分子工学的な考え方・理解が特に今後必要とされる領域である。このような分野でミクロな現象が理解され、いままで行き詰まっていたマクロな問題が解決されたり、新たなマクロな問題のブレークスルーとなったり、あるいは逆にマクロな問題が新たなミクロな問題を提供したりということで、両者相補して大きく発展するであろうことは確実である。特に、今までミクロな立場での現象の理解は大きく遅れていたもので、当分はこの種の理解がつづくであろう

が、次にはこれらを利用したマクロの改良やその進展さらには新しいマクロの発見が続くことが期待される。例えば、薄膜・微粒子・界面での分子原子の運動状態の理解による熱および物質伝達、界面力・摩擦・接着現象などの制御、個々の分子原子運動の励起や規制制御によるマクロ物性の制御、蒸発・凝縮あるいは融解・凝固といった相変化過程の制御あるいはその制御による生成物質の組成や物性の制御、さらには、光との相互作用を利用して分子原子のエネルギーレベルを変化させることを組合せるとこうした分野はさらに大きく広がる。また、もう一つの大きな特長は、これまでは、ものがあつて結果がこうなるという消極的であつた問題が、これからは、こうした結果にするためにこうしたものが欲しい、そうした特性(ポテンシャル)をもつ分子原子を設計してほしいという積極的なことができるようになることである。熱伝導に三次元的な異方性をもつ分子原子はこうでなければならない。乱流を抑えるあるいは促進する分子原子はこのようなポテンシャル特性をもてばよいなどということがわかるであろう。

楽しい機械工学の将来である。