素描

高分子材料の分子設計

吉野 正昭 ● 鐘淵化学工業（株）

「分子設計」という言葉が言われ出してから、かなりの月日が経過したように思う。分子設計なる言葉には、「仮縫いなしに一発でぴたりと決まる背広の仕立て」のような感じがあって、日頃ユーザー次第で転々と変わり、刻々と厳しく矛盾した性質の両立をもとめられ、仮縫いばかりを繰り返している我々材料供給企業の技術者にとっては、何ともいえない魅力と憧れの響きがある。

エレクトロニクスと測定法の飛躍的進歩によって、分子構造の解明が進み、その構造から物理的性質の理論計算がかなり可能となってきた。

先頃の C & EN 誌には、原子番号と原子量から単体が超伝導化する圧力・温度を計算し、ケイ素の場合、計算値 (1.5×10^9 Pa, 5 K~10 K) に対し、実測値 8.2 K と判明したという記事があった。高結晶性高分子の結晶の弾性率を分子振動から熱力学的に計算する試みが、60 年 11 月の次世代基盤技術研究の発表会で報告された。57 年にはすでに米国のメルク社の研究所で酵素阻害剤が酵素分子の活性点にジャスト フィットするコンピューター アニメーションを見たことがある。また、パッテル研究所では、屈折率、ヘテロ原子の含率、 π 電子密度含率などと高分子の物性との経験的な回帰式を求め、所望の物性を与える高分子を設計する半経験的試みを発表している。まさに分子設計時代の到来を思わせるのである。

しかしながら実用的な「高分子材料の分子設計」となるとそう簡単にいかない。設計にあたって目的あるいは目標は、個人の意志、企業・事業の目的、社会のニーズ、市場のニーズなどから設計者が決めるが、その成果は設計の良否よりも目標選定の適否による割合が多い。本来、設計の意義はその総合性にあり、理論や式も、部分的では設計の名に値せず、諸要素間のバ

ランスや妥協、最適化など総合化されてはじめて意義をもつものであり、設計者やユーザーの価値観の影響を受ける人間臭いものである。またユーザーは自らの固有のニーズに基づいた勝手な試験法を考案し、独特の仕様数値や規格値を満足する材料を要求してくる。さらに製造コストはしばしば最も重要な性質であり、これ抜きで設計はできないなど一筋縄ではいかない。

高分子 12 月号 (1985) に安川教授 (東京農工大) は「いま注目する性質 $P_1, P_2, \dots$ が分子構造の特徴を示す変数 $x_1, x_2, \dots$ の関数として

$$P_i = f_i(x_1, x_2, \dots)$$

と表現できるとする。数学的には分子設計は $\{P_i\}$ の関数として与えられる評価関数 $E(P_1, P_2, \dots)$ が所定の値域にあるような $\{x_i\}$ の組を見いだすことである……」と書かれたが、ここでいかなる P_i を探るか、また評価関数をどうするかが曲者であり、また対象物を何とするかがもっと曲者であると言いたい。高分子材料の場合、対象は分子集合体であり、その状態（結晶や非晶、相の混合、配向、コンフォメーション、表面状態など）が、成形法や履歴によって大きな影響を受けるのが普通である。さらにアロイやブレンドや複合材料が加わると、複雑さは、定量的設計はあきらめなければならないと思われるほどになる。

分子設計の特集の素描に、否定的言辞ばかり述べるようで恐縮だが、我々は当然、部分的スポットの理論と定性的な設計で我慢しなければならないのではあるまいか。つまり仮縫いはやむを得ないであろう。そして最もよく材料の特徴を表現する P_i の組を見いだすと同時にできるだけ $\{f_i\}$ の形を明確にするという研究を積み重ねるべきである。ところで実の所、これは今まで営々と続けられてきた高分子科学の仕事そのものにほかならないのではなかろうか。

Masaaki Yoshino, 鐘淵化学工業（株）（530 大阪市北区中之島 3-2-4）常勤監査役

<略歴>昭和 27 年東京工業大学化学科卒。27 年鐘淵化学工業（株）入社、高砂工業所カネカロン製造部長、取締役中央研究所長、研究開発本部長補佐を経て、60 年より現職。