

# Save The Earth by Global Conservation

News Letter vol. 16  
2011年9月30日発行

## 正確無比な熱測定で、物質の本性に迫る

### 熱はすべてのエネルギーの終着点

私たちが専門としているのは、構造熱力学という分野です。熱力学は、もとはといえば蒸気機関の効率を改善しようとした技術者が中心となって、すでに19世紀に完成した学問領域です。その熱力学を道具として、ほかの手法では得られない物質の構造や分子の運動状態に関する情報を得ようとするのが、われわれの構造熱力学です。熱というのは、突き詰めれば物質を構成している原子や分子の運動エネルギーに帰着されるので、対象

とするのは固体や液体、気体どんなものでも構いません。生命現象から宇宙までどんな領域でも扱えます。

化学結合や力学的エネルギーなど、様々なかたちで存在するエネルギーは、すべて最終的には熱に変換されます。そこで逆に、熱を精密に測定さえすれば、そのもとをたどって物質の化学的、力学的な性質を突き止め、場合によっては物質の中の様々な構造や運動状態を調べることができるというのが構造熱力学の考え方です。

### 表面の分子にこそ、本質がある

現在注目しているのは、固体表面に吸着した分子一層だけでできた膜(単分子膜)です。その熱力学的性質を調べることによって、構造や分子の運動状態との関係を明らかにすることです。

表面の単分子膜に興味を持つのには、2つの理由があります。ひとつは、表面というのがとても重要な環境だということです。物質が反応するときは、その表面(界面)から始まりますから、本来、表面の性質は内部よりずっと大切であることがわかります。たとえば氷は $-10^{\circ}\text{C}$ でも、表面融解といって、表面は融けています。逆に、全体としては凝固点より温度が高くても、別の物質との界面では凍っていることがあります。

もうひとつは、膜という二次元の対象が、その熱力学を考えるうえで基本になり得るということです。この世界に存在する様々な物質について理解しようとしたとき、実際には三次元の構造の中で、分子は周囲の分子と影響を与え合いながら、複雑に振る舞っています。それを調べるモデルとして、複数の分子が存在する系を単純化していくと、二次元の世界に行き着くのです。一層



分子情報化学グループ

稲葉 章 INABA AKIRA

理学研究科附属構造熱科学研究センター教授

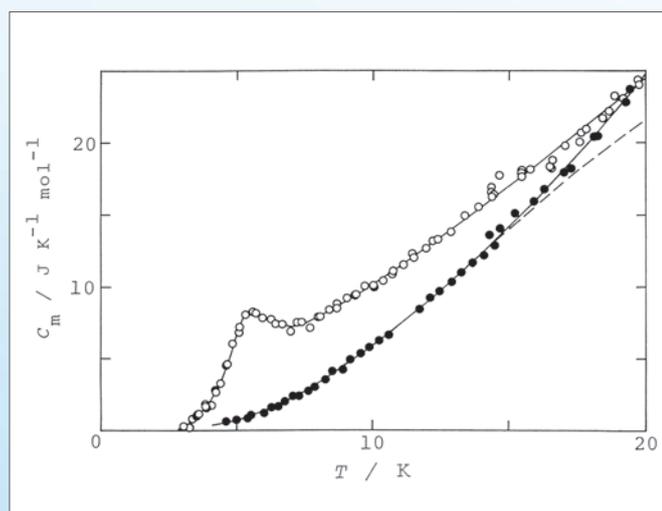
界面吸着相の構造と物性

の膜であっても、温度が低ければ分子が整列して固体状態になり、温度を上げていくと液体や気体になって、個々の分子が動き出したり、回り出したりします。そこで単分子膜で起こる現象をきちんと理解できれば、複雑な三次元の構造の中で起きていることも考えやすくなるはずで

## ポイントは精密、正確に測ること

物質が固体から液体になったり、また分子の向きが変わったりすると、加えた熱量と温度上昇の比を意味する「熱容量」に変化が現れます。そのため、熱容量の変化を正確に測定することができれば、物質の変化の本質に迫ることができます。

ただ、ある物質を考えたとき、その表面というのは全体の中でごく一部でしかないため、実験的に扱いづらく、あまり研究が進められてきませんでした。私たちの実験では、調べたい単分子膜をグラファイト表面につくって実験し、解析しています。結晶固体の表面に単分子膜をつくっているのだから、全体に占める膜の寄与はとて小さくなります。その熱容量は、グラファイトを含めた全体の0.1%程度しかありません。そのごくわずかな寄与の、しかもその変化を正確に捉えるため、測定装置は外部環境に影響されないものを自分たちでつくっています。



グラファイト表面につくった一酸化炭素(CO、白丸)と窒素(N<sub>2</sub>、黒丸)の単分子膜の熱容量。CO単分子膜の5 K付近のピークは、分子の向きが整列することによるもの。

実験時は、断熱壁で囲んだ中に、精密な温度計を取り付けたサンプルを置き、壁と測りたいサンプルの温度をまったく同

じにします。壁の内部の空間は真空にして、サンプルに取り付けたヒーターに電流を送るリード線も、とても細いものを使用します。この測定環境では、1日放置しても1/1000°C程度しか温度変化が起こらないという、非常に断熱性の高い状態になります。その装置の中でサンプルに熱を加えながら、絶対零度にごく近い極低温から室温までの範囲で熱容量の温度変化を測定し、加えた熱に対する応答が大きく変わるところがないかを調べるのです。その正確かつ精密な測定ができるというのが、私たちの研究室の武器です。

## 熱容量から物質の構造を知る

熱容量の変化から相転移を調べていると、今度は「その前後で分子の並び方や動きはどうなるのか?」ということに興味が出てきます。通常、物質の中で分子がどのように並んでいるかを調べるには、X線や中性子を当てたときに生じる回折パターンを解析するという手法が使われます。また、分子の運動状態を調べるには、中性子散乱などの分光法が使われます。私たちは今、熱測定によって導き出した新しい情報と、その他の手法で得られた情報を合わせることで、より詳細に物質の構造と分子の運動状態について調べようとしています。最近では、分子がもつ水素原子の一部を重水素に置換することで、分子の対称性を破ったとき、その熱物性が大きく変化する現象を見いだしています。

繰り返しになりますが、すべてのエネルギーは熱に行き着きます。われわれは、それを精密に、しかも正確に測定することで、構造や物性、機能まで理解しようとしています。今はまだ単分子膜をつくるのが難しい複雑な生体分子でも、サンプルの調製がうまくできれば、私たちの技術で熱測定をすることができます。そうすれば、これまでの研究手法とは異なる視点で調べることができるでしょう。

私たちが行っているのは、表面での構造と熱の関係にある原理を追究すること。それを突き詰めていけば、他の研究テーマとの融合や、既存の分野と分野の境界領域への適用を通じて、新しい方向への発展の原動力になるはずで