



熱測定ニューミレニアム

東京工業大学 阿竹 徹

今世紀と来世紀を結ぶ記念すべき年に日本熱測定学会が主催する熱測定討論会は第36回を迎えた。2年毎に開催されるIUPAC化学熱力学国際会議は第16回目が本年8月カナダのハリファックスで開催された。またそこで同時開催となった毎年開かれるカロリメトリー会議は第55回目である。さらに4年毎に開催されるICTACはデンマークのコペンハーゲンで同じく8月に第12回目が開催された。産業革命時に飛躍的に発展した熱力学をベースとした学会が、今やっと半世紀の歴史を持つとしていて。それはあまりにも短く、熱測定は未だ成長途上にあると言わなければならない。しかしながら一方で熱力学はもはや過去の学問であるとの声も聞く。おそらくいずれも一面の真実を突いた意見に違いない。

産業革命に際して熱機関の効率の説明に成功した熱力学は、極めて美しい理論体系を持つものであるが、それは原子・分子の存在を知ることなく構築されたものであり、今日ミクロスコピックな立場から詳細な知見を手にした我々にとってまさに驚嘆に値するものである。

その後、原子・分子の存在が実証され、量子力学と統計力学が発展したことにより、マクロな物性値のみからなる熱力学が原子・分子のレベルから検証されたことは素晴らしい感動である。例えば熱力学第3法則は、まさに統計力学によりその本質が理解できる。マクロ物性が原子・分子のレベルから理解できるようになったことは、しかしながら決して熱力学がもはや過去の学問になったということの意味しない。原子や分子に関する知見が極限的とも言えるほどに得られても未知の化合物の最安定結晶構造を予言できない。多体問題は解けないのである。比喩が適当ではないかもしれないが、人間に関して調べ尽くしてもその集団としての社会を予測できないように、 6×10^{23} 個の集合体が示す構造や物性に至るには極めて大きなギャップがあると言わなければならない。材料科学においてもその機能性発現機構にかかわる相転移現象を予言することはできず、相転移機構の解明が精一杯である。その意味で我々の科学は未だ博物学の水準にあると言わなければならない。こ

れも比喩が適当ではないかもしれないが、量子力学に基づいて原子や分子の運動方程式から物性を理解することができたとしても、古典力学の有用性は変わらず、その存在意義はいささかも揺るがない。ここで熱力学を古典力学に対比させることは正しくない。古典熱力学は原子や分子の存在を知ることなく成立したが、我々は既にその存在を知っており、ことさらにその知識を避けた論理に止まるべきではない。構成粒子の詳細と統計力学、さらにはコンピュータシミュレーション等々最新の実験技術と理論を駆使して古典力学にも量子力学にも対比されない新しい熱力学を興さねばならない。今、熱力学ルネサンスのときを迎え、それを支える熱測定には大きな飛躍が要請されているのではないだろうか。



熱力学第3法則は、統計力学によってその本質的理解が得られたが、それは熱測定が不要となったことを意味しない。物質内部の乱れの定量化は唯一エントロピーによるものであり、それは熱測定によってのみ可能となる。結晶については格子力学により、およそその熱容量値を見積もることができるが、ポテンシャルを始め多くの仮定に基づいた近似値に過ぎない。しかも現実には欠陥構造が不可避免的に発生するから周期性を仮定した理論では不足である。また多くの理論的計算が絶対零度において行われていることはエントロピーの寄与を無視していることを意味している。したがって熱測定による実験的研究が極めて重要な役割を果たすことになる。ガラス状態の研究では、さらに時間依存する現象を熱的に捉えて解析しなければならない。エレクトロニクスからフォトニクスへ、そのようなハイエネルギーの20世紀に対し、21世紀の主流はサーマルエネルギーのレベルとなるに違いない。環境問題、バイオ関連、イオニクス関連しかりである。