

## 5 . 研究室紹介 ( 第 1 6 回 )

### 東京大学大学院工学系研究科 機械工学専攻 丸山研究室

東京都文京区本郷の銀杏並木に囲まれたキャンパスに機械系三専攻（機械，産業機械，機械情報）がある．機械工学科（機械工学専攻）は東大の工学部で最も古く伝統のある学科の一つである．研究室の紹介の前に，それにしても機械工学専攻でなぜフラーレンの研究をしているのかという質問に答えるために Rice 大学での Smalley 教授との関わりについても少し紹介する．

#### 1 . 機械工学専攻でなぜフラーレンの研究？

機械工学専攻といえどもっぱらエンジンやロボットを作っていると思われることが多い．確かにロボットやエンジンも重要な研究テーマであるが，これらと関連する基礎学問としての熱・流体関連の研究を進めていくと燃焼，表面反応，レーザー関連技術などにおいて，よりミクロな物理的現象の理解が欠かせなくなってくる．そこで，分子レベルでの熱流体工学という新しい研究分野が生まれてきている．このような状況の中で，博士論文を乱流熱伝達に関する研究で終えて助手になったばかりの私が Rice 大学 Smalley 教授の所に長期出張することになったわけである．

当時はまだ Krätschmer & Huffman の大量合成の前であり，Smalley 教授はクラスターや分子ビームの分野での有名人にすぎなかった．私自身は全く予備知識がなかったので，あまり深く考えずに，各種のクラスターを生成する実験を行っているらしいという Texas 州 Houston の Rice 大学に向かった．

結果的に，1989年5月から1991年2月までの1年10ヶ月間 Rice 大学の Smalley 教授のところで研究をすることとなった（写真1）．最初の1年は東大からの出張であり Rice 大学では Visiting Scholar，後半は東大を研究休職となり，かわりに Rice 大学 Rice Quantum Institute の Visiting Fellow ということで Smalley 教授から給料をもらった．

最初に Kelly Taylor らの大学院生と組んでクラスタービームの UPS（紫外光電子分光）を2~3ヶ月間行ったが，このときは専ら Kelly から色々と教えてもらうばかりであった．何しろレーザーも真空装置も見たことも触ったこともない状態で出かけてきたわけだから，勉強することばかりであった．次に，新しい

クラスターソースの設計を始めた。これを FT-ICR (フーリエ変換イオンサイクロトロン共鳴質量分析装置) に取り付けて、満足に使えるまでに半年以上かかったが、その間は本当に集中的に勉強のできた時期であった。その後は、ようやく大学院生に教わるよりも教える立場になった。シリコン・ゲルマニウムの研究を Lila Anderson と、金属クラスターについて Tapani Laaksonen と、炭素クラスターについては Maggie Lee と組んで行った。また Lihong Wang, Felipe Chibante, Robert Haufler, Mike Alford, Lai-Sheng Wang, Yan Chai らの学生との議論も非常に楽しんだ。そして、残りの 3~4 ヶ月で Ting Gao に一通りのことを引き継いだ。

この間、半導体クラスターのエキシマレーザーによるアニーリング、 $C_{60}$  程度までの巨大フラーレンの解離実験、フラーレンの Thermionic Emission などと新しい結果を次々に検討できた。

順調に実験が出来るようになった頃に Krättschmer & Huffman の大量合成の FAX が Smalley 教授のところへ届き、ワインで乾杯すると同時に一時は FT-ICR 以外の実験装置はすべて休止させて、研究室総出でアーク放電法の実験装置の製作に取りかかった。私自身は FT-ICR の方をもう少し極めたいと思っていたのであるが、実際にはその後蒸発させたサンプルは圧倒的にフラーレン関連のものが多かった。

## 2. 研究室の構成

平成 3 年に日本に帰ってきてみると、実験装置も全くなく、一体どこから研



写真 1 Rice 大学 Smalley 教授の研究室で (左が Smalley 教授, 右が丸山, 手前にアーク放電フラーレン生成装置の冷却用銅パイプが見える)

究を始めたものかという気分であった。フラレンに関してははいよいよ加速度的に研究が広がっているときであったから、物理や化学の方面の方々におまかせして、当面は分子動力学法を使って機械の方面の分子熱工学を目指そうと一旦は決めた。一年ほどの間、フラレン関連の研究はやめていたが、その後 Smalley 教授が3度ほど日本にやってきて、議論したりの間にフラレンの世界に引き戻された。

とはいっても何もない状態からの実験はかなり難しいものがある。結局、庄司正弘教授のコネで長野計器(株)にアーク放電法の実験装置を作ってもらえることになった。長野計器(株)の山野上氏と(株)ナガノの丸山氏には大変に感謝している。

その後は、予算面では大澤先生の重点領域研究の阿知波班に入れてもらったことを初めとして少しずつ実験らしいことが出来るようになってきた。また、学生の数も平成4年度に学部生3人から始めて、徐々に増えてきた。

研究室は、庄司正弘教授と一体運営で庄司・丸山研究室または伝熱工学研究室と呼ばれている。庄司教授の専門は沸騰熱伝達であり、私の研究テーマであるフラレンや分子熱工学との直接的な接点は少なく、研究面・予算面ではほとんど独立した形になっている。現在の分子グループのメンバーは、井上 満助手、D1が1人、M2、M1が2人ずつ、4年生が3人である(写真2)。このうち直接フラレン関連のテーマを受け持っているのは、D1の山口康隆君とM1の畑江尚雄君がシミュレーション、M2の林 秀明君と学部4年生の吉田哲也君が



写真2 研究室のメンバー(左から、D1:山口、M1:畑江、学部:木村、学部:吉田、M2:林、丸山助教授、(庄司教授の)秘書:渡辺、M2:倉重)。手前に波長可変レーザー、後ろに TOF 質量分析装置がわずかに見える。

新たな FT-ICR 装置の開発，M1 の木村 大君，山本愛彦君がレーザー蒸発クラスターソースと TOF 質量分析装置を担当している．フラーレン以外のテーマでは，M2 の倉重俊武君と学部 4 年生の木村達人君が相界面の分子シミュレーションを行っている．

### 3．研究テーマ

実験的な研究は，アーク放電法フラーレン生成装置による生成とレーザー蒸発超音速膨張クラスターソースとレフレクトロン質量分析装置による研究を行っており，現在は，FT-ICR 質量分析装置の製作を進めている．一方，分子動力学法を用いたシミュレーションによってフラーレンの生成過程の検討を行っている．また，ナノチューブの生成機構に関してもシミュレーションの可能性を検討している．

#### 3 - 1．フラーレン生成過程の分子動力学シミュレーション

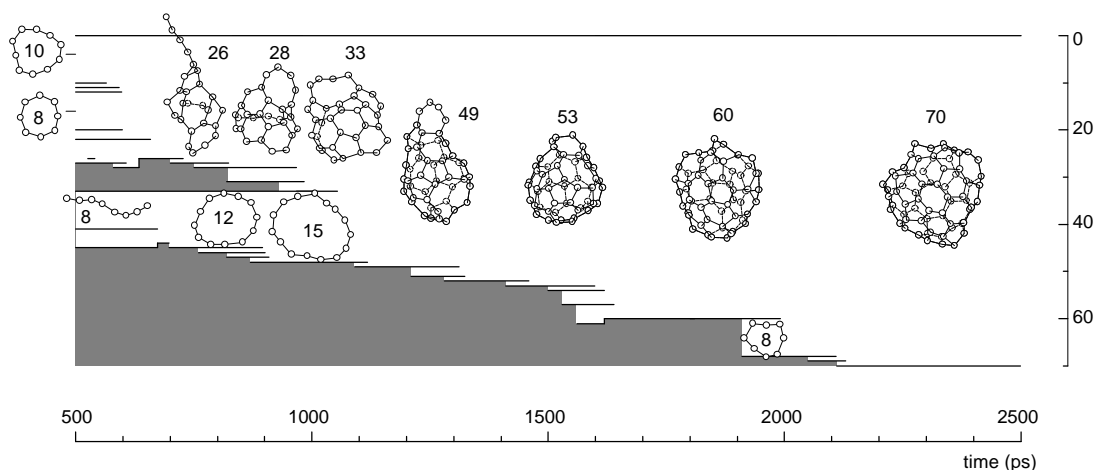


図 1 フラーレン構造への成長の様子（分子動力学法計算の結果より）

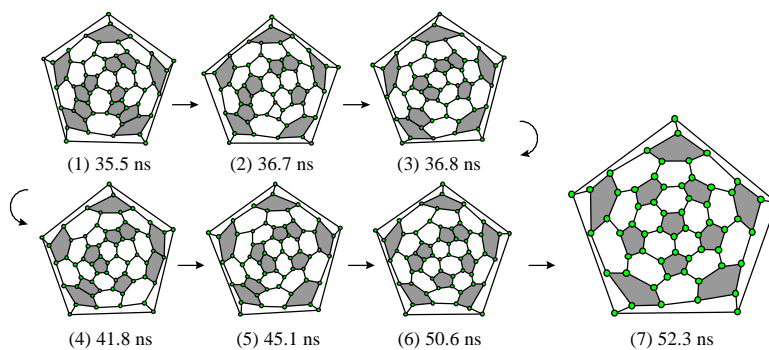


図 2 完全な  $I_h$  対称  $C_{60}$  へのアニーリング(2500K)



写真3 フラーレン生成過程の分子シミュレーションの様子（左：山口君，右：丸山助教授，中央：パソコン上で完全に  $I_h$  対称となった  $C_{60}$ ）

現在 D1 の山口君が始めて 4 年目になる。フラーレンの生成機構について何らかのシミュレーションができないかと考え，最初はゲームのような単純なものでもと考えてスタートしたが，最近は色々とおもしろい結果がでてきている。シミュレーションの過程を図 1 のように表現できる。この図では，どのような形状，サイズのクラスターが衝突して最終的に  $C_{70}$  になったかを表している。一方，このようなシミュレーションで無視されがちなアニーリングの効果について考察するため，シミュレーションの途中で現れるちょうど炭素が 60 個のクラスター  $C_{60}$  を取り出して徹底的に一定温度でのアニーリングをしてみたら Stone-Wales 変換を繰り返してとうとう完全な  $I_h$  対称の  $C_{60}$  になった（図 2）。これらの結果よりフラーレン生成機構に関するかなり具体的なモデルを示すことができると考えている。

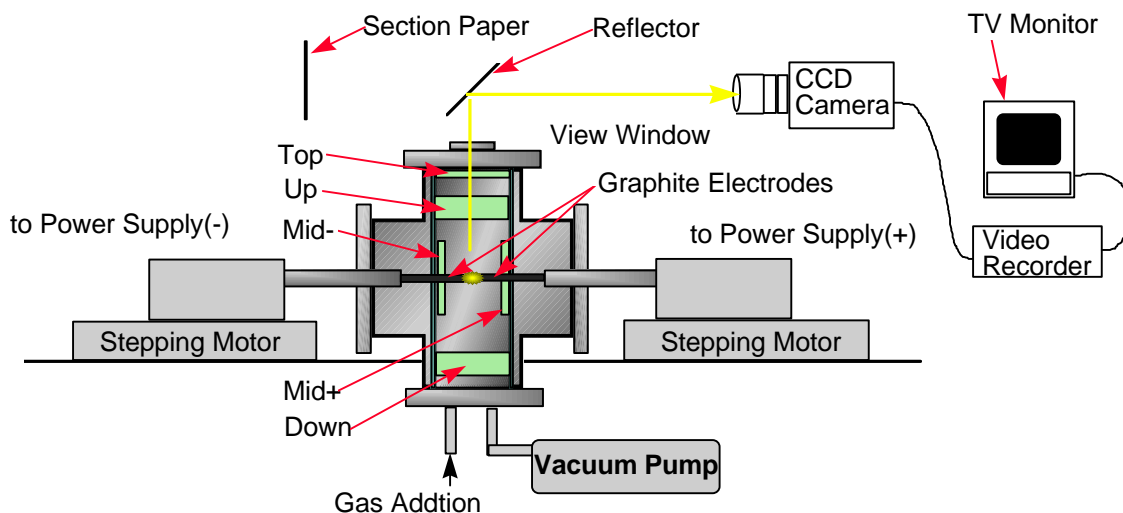


図3 アーク放電フラーレン生成装置

計算には、以前には東京大学大型計算機センターのスーパーコンピューターを用いることが多かったが、最近では、機械系三専攻共有の並列コンピューターを用いることが多くなってきた。図2の結果は、この計算機で1ヶ月ほど計算してようやく  $I_h$  対称となったわけであるが、その2日ほど前にはこんな見込みのない計算は断念しようとする研究会で明言したところであった。

これ以外にも炭素ナノチューブの生成機構に関しての計算をM1の畑江君が始めている。

### 3-2. アーク放電型フラーレン生成装置 (図3)

私にとっての實質的には最初の学生である高木 敏男君 (現:住友電工) と望月 巖雄君 (現:旭硝子) とともに設計をして、長野計器 (株) のお陰で完成したフラーレン生成装置である。基本的な設計は、Rice 大学の Smalley 教授のところのものとあまり変わらないが、ステンレス二重筒の水冷装置などの特色をもっている。この装置と液体クロマトグラフィーやソックスレーなどの装置をそろえて、緩衝ガスの種類や圧力、流れ、放電に関する電流、電圧、ギャップ長さなどがフラーレンの生成率にどの様に影響するかなどの検討を行ってきた。また、チャンバー内の温度分布を計測して内部の伝熱様相についての検討をした。現在は、少し休憩しているが、今後も金属内包フラーレンと炭素ナノチューブの生成に用いる予定である。

### 3-3. レーザー蒸発クラスターソースと TOF 質量分析

平成6年度から作り始めたのが写真4に示すレーザー蒸発超音速膨張クラス

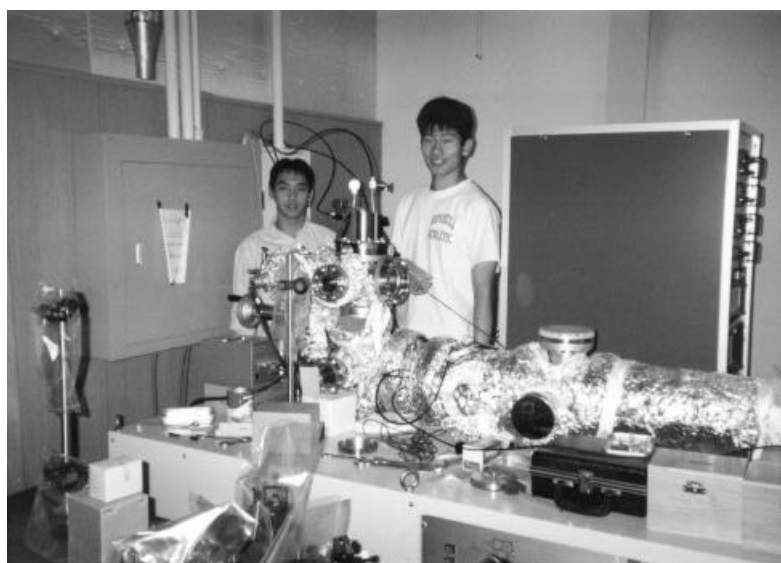


写真4 クラスターソースと TOF 質量分析装置

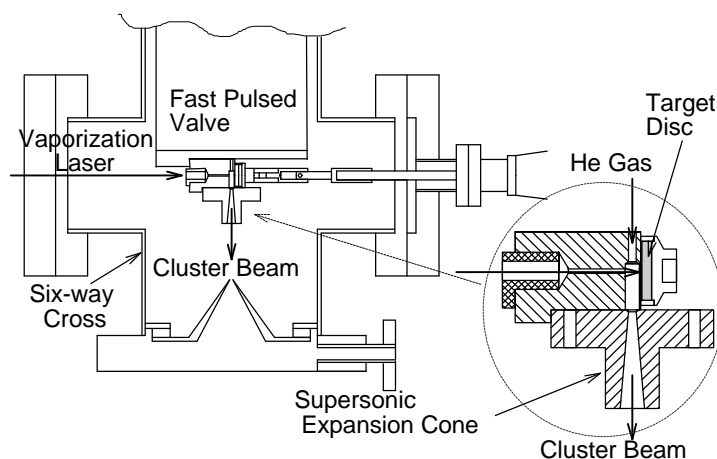


図4 レーザー蒸発クラスタービームソース

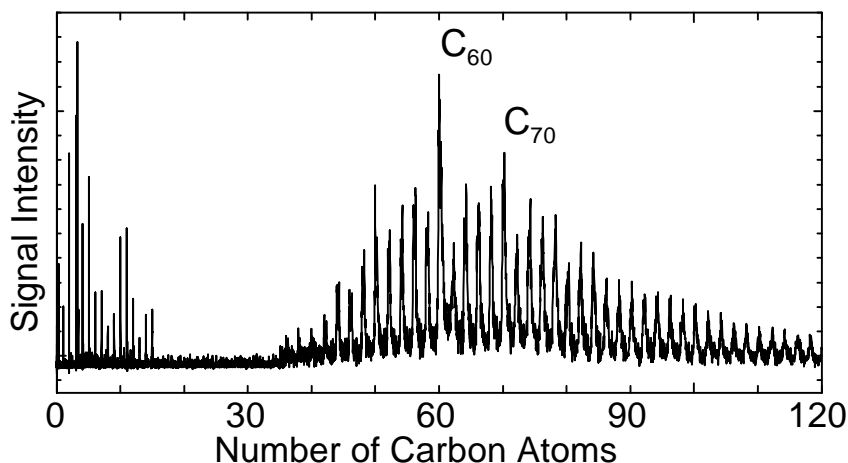


図5 炭素クラスターの陽イオン質量スペクトル

ターソースとレフレクトロン型 TOF 質量分析装置である。金原 秀明君(現在：三菱マテリアル)が中心となって、林 秀明君らとともに開発してきた。現在は M1 の木村 大君と学部部の山本愛彦君とで責任を持って使用している。図4にクラスターソース部分を示す。予算の関係で Rice 大学で設計したときよりも単純な構造となっているが、ノズルの形状はほとんど同じである。

図5に炭素クラスターの陽イオン質量分析結果を示すが、今までに発表されているものと基本的に同じである。クラスターソースに関しては、炭素材料以外にも銀やシリコンクラスターの生成にも用いており、汎用のクラスターソースとなっている。また、レフレクトロン型の質量分析装置は、飛行途中でのレーザー照射と質量選別ができるように設計されている。予算の事情で非常に短期間に設計する必要があったために保守的な装置であるが、今後変更を加えられるのが容易であるように工夫をしてある。ここで、用いるレーザーは、固体材料蒸発用の Nd:YAG (2倍波, Continuum Surlite 10)と Nd: YAG(3倍波, Continuum

Powerlite) 励起の OPO 波長可変レーザー (Sunlite) があり, 現在, エキシマレーザーを準備中である. 測定系は, PC から GP-IB 経由で制御する形式としており, このための DOS プログラムの開発にも Smalley 教授のプログラムを参考にさせてもらった.

### 3 - 4 . FT-ICR (フーリエ変換イオンサイクロトロン質量分析)

現在, M2 の林 秀明君と学部生の吉田哲也君が開発を進めているのが FT-ICR (フーリエ変換イオンサイクロトロン質量分析装置) である. 私が最初に立ち上げたかった装置であり, ようやく開発にかかれた. 6 テスラの超電導磁石は, Rice 大学で使っていたものを Smalley 教授から譲り受け, ICR セルの設計, 測定機器, 制御プログラムの大まかなものが揃ってきている.

### 4 . おわりに

研究室としてはようやく必要な実験装置と計算プログラムのノウハウが集まってきたところであり, これから新しい展開を考える段階である. フラーレンに関しては, その生成機構についての新しい知見とそれに基づく新しい生成方法などを考えたり, 新しい素材としての応用面など, いろいろと取り組むべき面がある. このような研究を始めることができたのは Rice 大学の Richard Smalley 教授のお陰である. また, 科学研究費に関してグループに入れて頂いた東京都立大の阿知波 洋次先生, 機械工学専攻の立場からは東大の小竹 進先生にお世話になった. ここに記して感謝したい.