

ナノテクノロジーの数理

三菱総合研究所

安田英典

1. はじめに

ナノテクノロジーを材料開発の観点から分類すると、ナノスケールのビルディングの製造とビルディングブロックを用いた構造形成の2つの分野にまとめることができる。この2つの分野に関連する事項を Fig.1,2 に概括する。

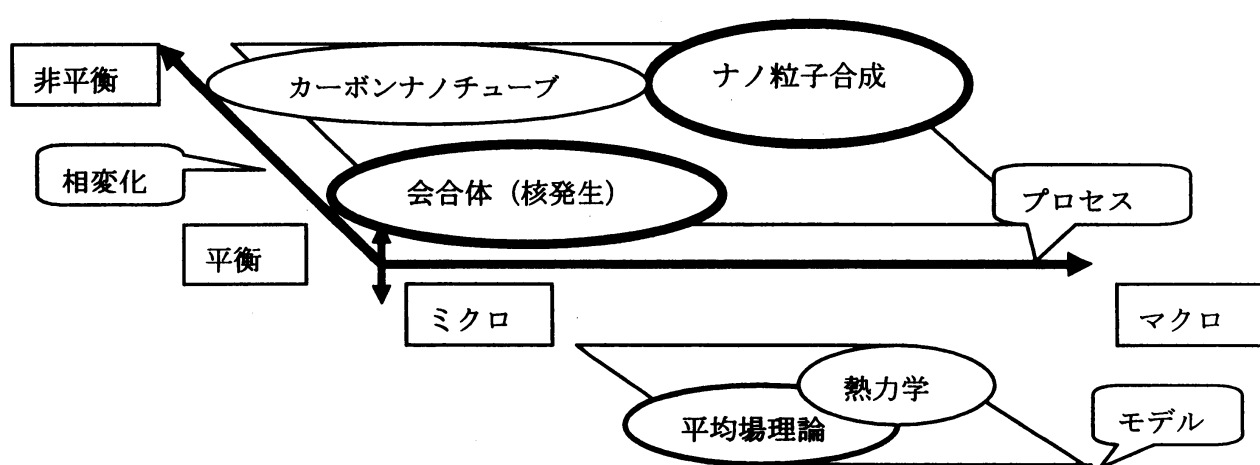


Fig.1 ナノスケールのビルディングブロックの製造

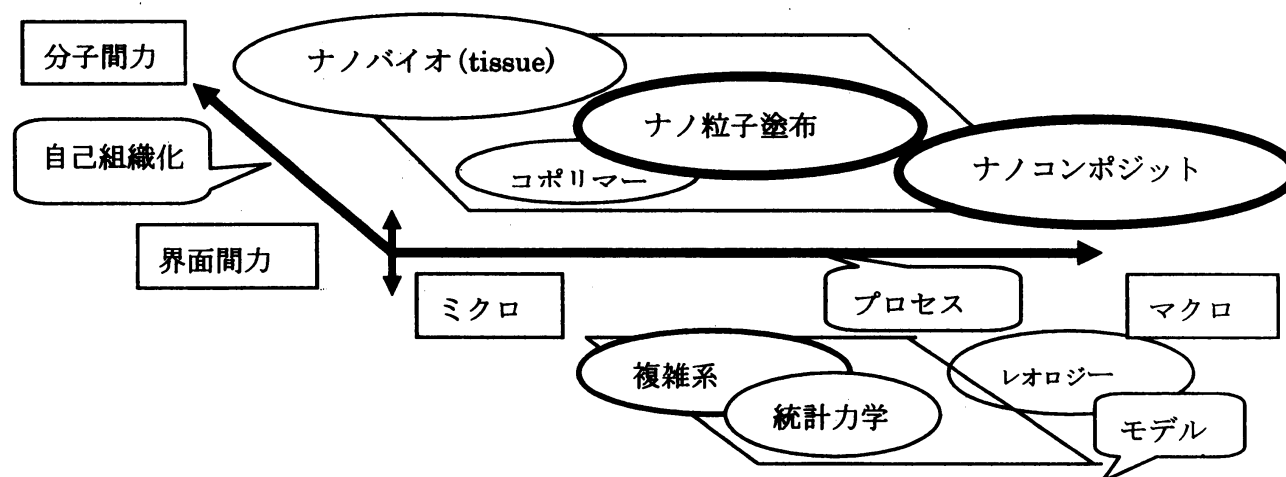


Fig.2 ナノスケールのビルディングブロックの構造形成

ナノテクノロジーはミクロ分野の原子分子のサイエンスとマクロの製造技術の境界分野であるので、既存の理論を新しいテーマに展開していく局面が多々現れる。ナノビルディン

グブロックの製造を考えると、数理科学の分野では、例えば、KH 方程式、TDGL 方程式で記述されるパターンフォメーションはナノビルディングブロック製造の中心的テーマであるナノスケールの核発生、スピノーダル分解に直接つながる分野である。ただし、従来、KH 方程式、TDGL 方程式の解析に要求されていたのは半定量的あるいは定性的なものであったが、ミクロスケール側では MD 計算と接するナノスケールでは定量的な解析が求められている。この点を現象の観点からいうと、従来のマクロスケールのパターンフォメーションは多くの複雑な過程を近似しているので定量的な解析は困難であったが、ナノスケールの系では単純な過程を対象としているので厳密な解析が可能である。つまり、方程式の非線形項が原子分子的な物理に緊密に対応することが期待できる。

2. ナノ粒子の構造形成

最も単純なビルディングブロックであるナノ粒子を平面に塗布するプロセスの問題を考える。ミクロな立場では個々のナノ粒子をモデル化する DEM 等による解析となるが、以下ではマクロな立場で 2 相流の連続体の方程式を解析する。塗布面は平坦であるので浅水波近似を行った。広く使用されている TV 項を人工粘性とする差分とナノスケールの形状を正確に追うために今回開発したガリレオ変換、相似変換に不変な差分との結果を比較する。⁽¹⁾ 問題は、塗布面の中央部で重たいナノ粒子の含有量が多いため液面が沈降して遠方へ波が走るというものである。TV 項の差分では最終的な形状である陥没面が平坦とはみなせない。このように双曲系の差分スキームのように既に多くのことがなされていると考えられるテーマにおいても、ナノテクノロジーは新しい問題を提起する。

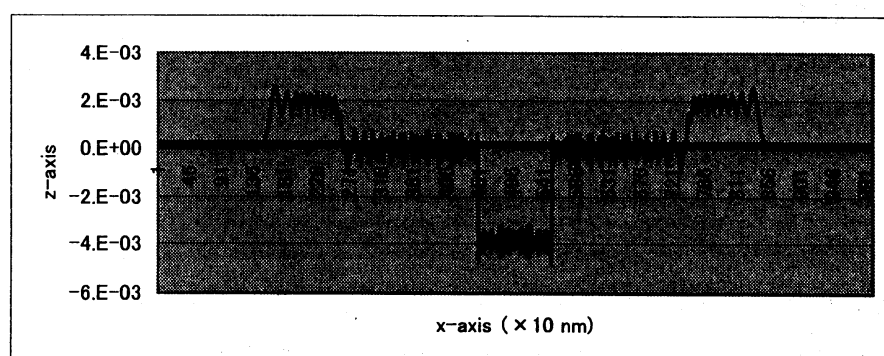


Fig.3 TV 項による差分計算

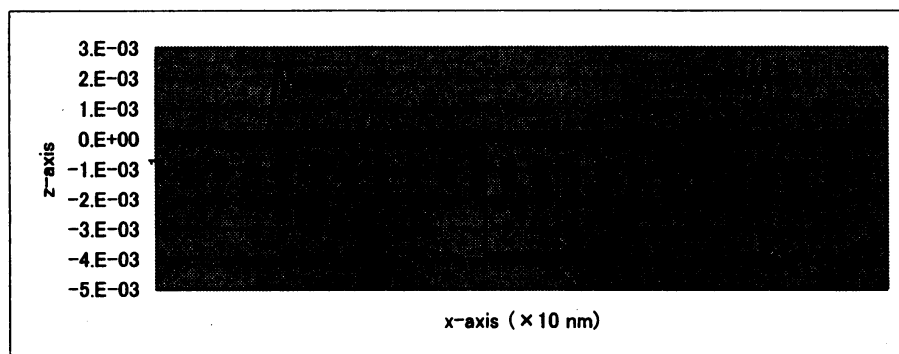


Fig..4 今回開発したスキームによる差分計算

3. ナノテクノロジーの数理

数理科学に関連するナノテクノロジーの特徴として以下のものが挙げられる。

ナノスケールのビルディングブロック

- ・いわゆる無機、有機、金属の材料種に横断的な現象である核発生、スピノーダル分解のように固有の材料に依存しない数理的な構造が対象となる。
- ・プロセステクノロジーはマクロスケールであるので、既存の連続体の偏微分方程式が現れる。ただし、非線形項はミクロスケールの原子分子のモデルによって与えられる。現象は単純であり定量的な解析が求められる。

これらのテーマは、KH方程式、TDLG方程式の新たな領域と思われる。

ナノスケールの集合構造形成

- ・ナノスケールの集合体の構造形成は、単純なファンデルワールス力から親疎水性相互結合のような複雑な力による多岐にわたるセルフアセンブリーの現象である。

ナノスケールの集合構造形成の解析は数理生物学に現れる非線形偏微分方程式に関連していくものと思われる。

ナノテクノロジーとはレガシーなマクロスケール中心のテクノロジーの量子力学をベースとしたミクロスケールのサイエンスによる再構成であるといえることができる。数理科学の観点からは、多くの非線形方程式の新たな観点からの再定式化と定量的な解析方法の開発が必要となってくる。