

▶ 国際純正・応用化学連合第14回化学熱力学国際会議 (14th IUPAC Conference of Chemical Thermodynamics) に出席して ◀

北海道大学名誉教授 横川敏雄

標記国際会議が去る8月25日～30日、大阪府豊中市の千里ライフサイエンスセンターで行われた。32カ国から600名余りの参加があり、生命科学から原子力にまたがるテーマの国際会議であった。日本学術会議他が主催し、日本鉄鋼協会・日本金属学会他25の学協会の後援で行われた。本会元会長森田善一郎氏は運営委員長・募金委員長として活躍された。

原子力材料に関する分科会が設けられているのが特徴で、双方の研究者に好都合で時宜を得ており、我々にも高温度での展開を俯瞰できた。電解質および非電解質溶液、状態図、界面、コロイド、データプロセスなどの8分科会の他、ガラス、イオン伝導体、環境問題、新材料などのWorkshopsが開かれた。直接鉄鋼精錬と結びつけられる材料は少ないが、あらゆる化学・材料の基礎である熱力学であるだけに鉄鋼研究分野の人たちの参加も望まれた。以下に印象に残った話題を紹介したい。

熱力学データブックで著名なF.D. Rossiniに因んだRossini記念講演はMITのM.A. Alberty教授による「化学熱力学におけるルジャンドル変換」と題するもので、要旨は次のようであった。熱力学の第1法則 $dU=TdS-pdV$ の独立変数 S , V を実験に都合良い独立変数にするために、 $H=U+pV$, $F=U-TS$, $G=H-TS$ などにより変数を変換することが行われてきたが、これをルジャンドル変換という。化学平衡を含む系さらには電解質や蛋白質を扱うにはそれに適合した変換をすると例えば生化学では、 pH や ATP の濃度をも独立変数に選ぶことができる。熱力学的に健全で扱うのに都合の良い変数の組の選び方など基本に関わる示唆に富んだ講演であった。

室温の溶液に関しては二液相分離あるいは超臨界の付近の高温高压相の研究や電解質の濃い領域への拡張が主題のようで、実験方法の進歩や精密なデータの蓄積が印象的であった。また高温度に関連する化合物の信頼できる熱的データの上限が1500Kの段階にあることがわかった。

同じく全体講演に招待されたA. Pelton教授は原子力関連の多元系の熱力学モデルと状態図について述べた。多様な酸化状態をとる超ウラン元素を含む系の、酸素圧を計算式にどう取り込むかという討論があった。確かに一つの試練であろうと思われた。この分野ではデータベースや計算機シミュレーションについての分科会が設けられ、展示・デモンストレーションがさかんで、現在はPeltonらのFACTのほか、Gayeたちが構築し、いまはHack (Achen) が中心になっているデータベースSGTE、状態図中心のCALPHAD、わが国で構築されたMALT2などが活発な動きをしているようである。住友金属工業㈱植田昌克氏は高温の pH -電位図のデータベースについて発表した。

心配された猛暑もそれほどでなく、千里中央駅に接したライフセンターは肩張らず、また丁度良い大きさであった。東欧からの発表には特別の支援がされたとももれ聞いたが参加者が多く、夕方まで続いたポスターセッションを含め熱心な討論が印象的であった。

(1997年1月6日受付)