

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

菊田 惺志

1983年9月号

本記事は、電子蓄積リングから放射されるシンクロトロン放射（放射光ともいう）を高輝度 X 線として用いるフォトンファクトリー（PF, 2.5 GeV, 第 2 世代）がつくばに実現したのを機会に、その利用研究をまとめたものである。さらに、第 3 世代リングの SPring-8 (8 GeV) が 1997 年に西播磨に実現した。また最近、電子リニアックをベースとする X 線自由電子レーザー SACLA が SPring-8 のサイトに実現した。これはピーク輝度が際立つ、極短パルス光である、空間的・時間的にコヒーレント光であるなどの特長をもつ。このように 30 年の間、光源の展開は目覚ましかったが、これは将来計画の検討を常に積み重ねてきたからで、今後もこのような努力が必要である。

解析手法の進歩で注目すべき点を私の印象も加えて挙げてみる。(1) 結晶構造解析では、結晶や 2 次元の周期性をもつ結晶表面・界面が調べられ、最近では量子細線のような 1 次元周期性のものも解析の対象になっている。さらに孤立した (0 次元の) 分子の解析も視野に入っている。(2) タンパク質の結晶構造解析は予想をはるかに超えて進展している。(3) 構造解析では原子配置の高精度化が図られる一方、結晶内の電子密度分布がリートベルト法/最大エントロピー法により正確に得られ、また ATS 散乱により軌道秩序が観測され、物性の解析に役立っているのは特筆すべきである。(4) 物質の構造評価のイメージングでは、回折、屈折、吸収や位相のコントラストによるイメージング、X 線マイクロトモグラフィ、コヒーレント X 線散乱顕微鏡など多種多様な手法が展開されている。(5) 放射光とコンピューターとの組合せが威力を発揮している。放射光を用いて取得される高精度のデータがコンピューターによるパラメーター・フィッティングなどに活かされて、例えばリートベルト法、最大エントロピー法、逆モンテカルロ法、オーバーサンプリング法などの解析で新しい解析結果が得られている。

将来展望について触れると：(1) X 線光源と光学素



子の高性能化に伴い、ビームサイズの超微細化が図られ、1 nm に迫っている。それにより回折・散乱、分光・分析の手法で観察される世界は様変わりするであろう。(2) 動的過程を超短時間で計測する。これにより例えば、タンパク結晶の反応過程、超高压、超強磁場などの極限環境下における構造変化・相転移、結晶化・融解過程、光化学反応などが解析される。(3) コヒーレンスを利用して新しい領域を開拓する。すでにそのさきがけの研究があるが、コヒーレント X 線光学や X 線量子光学・X 線非線形光学などの本格的な研究が始まる。特に SACLA はこれから本格的な利用が始まるので、今後の展開がととても楽しみである。

(きくた・せいし, 東京大学名誉教授)