

## ■会議報告

### 第20回国際結晶学会報告

坂田 誠 (名古屋大学大学院工学研究科応用物理専攻)

第20回国際結晶学会は、イタリアの古都フィレンツェにおいて8月22日(月)から31日(水)までの長期にわたる会議日程を無事終了した。会場は、Fortezza da Basso (パッ要塞)と言ういかにもいかめしい場所で行われた。極めて有名な観光地で行われた為と言う訳でもないのだろうが、参加者は同伴者を含め2500人を超えたようで、大変成功した会議であったと思う。

ヨーロッパには何度も来ており、国際会議が珍しい年齢では無いが、それでも国民性の違いなのか会議の運営に関しては、驚かされることがある。先ず第一に、講演会場の形と言うかセッティングである。オープニングセレモニーが行われ、その後もメインのキーノート講演が行われたミケランジェロと名前の付いた講演会場は、極めて横長で7つのスクリーンが用意されていた。もちろん、講演者は真ん中のスクリーンのところに立ち、講演を行う。スクリーンには、全く同一の映像が表示されるが、例えば、端の列に座ると講演者のいないスクリーン上に映し出される映像を見ながら、講演を聴くことになる。一応、講演者と同じ部屋にいるのであるが、あたかも講演会場とは別の場所で講演を聞いているような気になる。この様な、会場のセッティングは日本では主催者側が、絶対にしないことだと思う。ラテン気質なのか、そこは特に問題にされることもなく、会議は進行した。この様な講演会場は、日本からの参加者の評判は、必ずしも良いとは思わなかった。

会議は、ほぼ毎日同じスケジュールで進んだ。朝一番に、3つのキーノート講演(重要な講演の場合は1つ)、その後、7つの口頭発表によるパラレルセッション、昼食の後、ポスターセッションの時間が設けてあり、午後のパラレルセッション、そして、一日の最後に3つのキーノート講演と言う具合である。朝一番のキーノート講演は8時半に始まり、最後のキーノート講演が夕方6時半に終わると言う、全部のサイエンスプログラムに参加すると、かなりハードなスケジュールである。この様な日が、7日間連続で続くのが、国際結晶学会である。

50に及ばんとするマイクロシンポジウムの中で、シンクロトロンという言葉がタイトルに含まれているのは、意外と少ない。僅かに、以下の2つである。

1. “Detectors: Developments and Requirements for X-ray, Synchrotron and Neutron Sources”
2. “Applications of Synchrotron and Neutron Facilities in Structural Chemistry”

このことは、放射光の重要性が結晶学において増加してい

ないと言うようなマイナスのイメージを全く意味していない。事態は、全く逆である。結晶学における放射光の必要性は余りにも大きく、また、放射光の利用が完全に日常化してしまっただけで、マイクロシンポジウムのタイトルにわざわざ放射光と銘打たなくなっただけである。現在の結晶学は、放射光なしでは、全く語る事が出来ない。その様な例を、以下に2~3列挙してみることにする。

1. Single Particle X-ray Diffraction Imaging
2. Micro Beam X-ray Scattering
3. Time Resolved Diffraction

これ以外のマイクロシンポジウムでも、X線関係で「放射光」が出てこないセッションはほとんど無いのでは無いか。放射光の将来計画、特に、リング型光源の将来計画を考える上で、この様なユーザーの広がりや“絶対的”必要性の観点が必要なのではないかと思った次第である。

極めて個人的な興味になるが、私の目に付いたいくつかの研究例について述べよう。第1は、“Single Particle Diffraction”関連の研究である。David Sayreが、正に、“Single Particle Diffraction”と題した、キーノート講演を行った。その具体的な話は、その日のマイクロシンポジウムでD. Shapiroが“Diffraction Imaging of the Yeast Cell: First Results”と題した講演を行った。これは、題目から分かるように、イースト菌のX線イメージングを行った研究である。位相問題は、オーバーサンプリングにより解いている。講演の中で、Radiation DamageがResolution Limitを決める要因になっていると言っていたのが、印象的であった。同じマイクロシンポジウムで、S. Eisebittが、“Imaging Magnetic Nanostructures by X-ray Holography”と題した講演を行った。半導体リソグラフィの技術を使用して試料となるナノ構造体と参照波を通すピンホールを一体化して作成し、それによりX線ホログラフィーを行った研究である。実験できる試料は、限られるかも知れないが、参照波を使っている為に、位相情報まで実験的に求める事が出来る。半導体試料では有力な方法になるかもしれない。講演の中で、オーバーサンプリングによる位相決定には、一意性が必ずしも保障されていないと指摘していたことが印象に残った。ホログラフィーでは、2次元構造を問題にしていたのに対して、オーバーサンプリング法では、モデル構造ではあるが、3次元の構造を明らかにしていた。両者とも、研究は端緒に付いたばかりで、現段階で論評するのは早すぎるが、X線自由電子レーザーの実現をにらんだ研究に取り組む若い研究者の

“静かな”熱気に接して、大いに刺激を受けた。

第2の話題は、ポスター発表で見つけた。放射光とは直接関係無いが、低分子用の全自動の構造解析ソフトである。Judith Howardの指導下でブルカーの研究者が行ったようである。データベースから1500の構造をランダムに選び、自動解析ソフトでどの程度正解が得られたかを示していた。それによると、“Correct 77%, Swap 5%, Twins 6%, Others 12%”であった。このデータを元に、全自動で8割が解けると宣伝していた。この様な話を聞くと、将棋やチェスのプログラムのことを思い出してしまう。チェスなどは、世界チャンピオンがプログラムに負け、将棋も相当に強くなっている。低分子化合物の構造解析も、その内に全自動構造解析プログラムが勝つ時が来るのだろうか？時代がどんどん進んでいることを感じる。人間かコンピューターかと言うことに関しては、述べたいことはあるのだが、それは別の機会に譲る。一言だけ言わせて貰うことにすると、人間は、コンピューターがそれだけのことを出来ると言う前提で、研究テーマを考えれば良いのではと言うことだけである。

第3は、Peter Stephensが夕方のキーノート講演で行った“Structure Solution of Pharmaceutical Compounds from Powder Diffraction Data”である。自動解析のような研究は、時代の流れを感じていたいと言う興味で取り上げたが、この研究は極めて個人的な興味によっている。我々

も同じような研究を行って、大いに頭を悩ませているからである。Peter Stephensは間違いなく、この分野での世界の第1人者である。私としては、特に、目新しいことはなかったが、解析のプロセスを説明する中で、最終段階として

Refine, Refine, Refine, Refine, Refine, ...

と書いてあったのが極めて印象的であった。正に、同感。彼も苦勞していると言うことが良く分かった。医薬品の粉末による*Ab Initio*構造解析は、低分子単結晶構造解析と違って、正に、人手を必要とする研究テーマだと思っている。しかも、放射光は絶対に必要な道具である。個人的には、この分野の世界のレベルが理解でき、ありがたかった。その内に、我々の結果を学会で発表していきたいと思っている。

国際結晶学会は最近では珍しく長期間にわたる大きな大会である。今回は、前回に比べオブリゲーションが少なく、会議期間中楽しく過ごすことが出来た。ミケランジェロと名前の付いた講演会場でSingle Particleの講演を聞くだけでなく、ミケランジェロ広場からフィレンツェの街を眺めたり、ラファエロの素晴らしい聖母を見たり、色々な時間を持つことが出来た。国際結晶学会に出席して、研究においてだけでなく、もう少し幅広く充電できたように思う。多少なりとも、息の長い研究が出来そうな気になった。