

### 計算機・放射光・結晶学

坂田 誠 (高輝度光科学研究センター)



巻頭言の依頼を受けたのは、今年が世界結晶年だからということのようである。そこで、題目としては、「放射光」と言う3文字の漢字を中心に、私が研究で携わった「計算機」と「結晶学」と言うそれぞれ漢字3文字の単語を配してみた。何故今年が世界結晶年であるかと言うことは、年初来の種々の記事に詳しく記されているので、ここでは詳しくは触れない。簡単に言えば、近代結晶学の誕生100年と言うことである。現代において100年と言う期間は、学問の成立する期間としては、極めて長い時間と言ってよいであろう。結晶学が華々しく台頭してきた時期には、X線の結晶による回折現象の発見や簡単な結晶構造を解明することが、ノーベル賞級の研究に相当していた。その後、周期構造である結晶の性質を利用することにより、物質あるいは分子の構造を原子レベルで解明する確実な方法として発展を遂げたように思う。さて、この3つの単語から、この先の何かが見えて来るのか、一読願えれば幸いである。

「計算機」の発達著しいことは、誰もが認めるところである。「計算機」の命は、その速さである。全ての機能向上は、この一点に掛かっているといって過言ではない。現在では、どうやら Single CPU の性能が、ほぼ到達点まで来ているようである。「計算機」の世界は、並列計算の高度な専門的知識を必要とする HPC (High Performance Computing) から、スマートフォンまで、実に幅広い世界に広がっている。スマートフォンは、ハードとしては、私が大学院生の時に使った一部屋を占拠していた core4K のマシンに比べたら、比較にならないほどの高級マシンである。ソフトウェアも、クラウドと言う OS の下、アプリと言うソフトを使うと言う高度な技術に裏打ちされている。それにより、「計算機」のハードウェアも OS も、何も知らなくても、その成果を、あたかも自分が行ったがごとく手にすることが出来る。この方式は、学術の分野にも波及しているように思う。専門外の分野においては、その分野の専門的知識を何も知らなくても、あたかも自分が行ったがごとく、成果を手に入れることは、研究者にとっても当たり前になって来ている。

「放射光」は、「計算機」程ではないにしろ、大いに発展を遂げた。中でも、Top Up 運転が果たした役割は、利用者にとっては甚大であったと思う。利用者にとって「放射光」の性格が Top Up により、すっかり変わった。もちろん、全て良い方に、である。今でも覚えているが、放射光学会の設立総会の議論において、「中性子は DC マシンであるのに対して、放射光は RF マシンなので、強度を一定にすることはできないと！」との専門家の意見があった。私は、心の中でヴァーチャルに DC マシンに出来ないものかと思った。それが、放射光の強度が一定であるのが当たり前であり、減衰することを知らずユーザーはどんどん減少している時代になった。この様に高度な専門技術が当たり前になると、放射光の利用そのものも、放射光に対する専門知識を何も必要としないで、最終的な成果だけを求めるという考えが台頭するようである。しかも、その成果たるやその分野での世界最高レベルのものである。これが放射光利用の一つの方向性であ

---

ることは間違いない。しかし、このような方向性だけでは、放射光の未来が開けてこないことは明白である。現在、回折限界の放射光 (USR) と 3GeV SR が、話題になっているが、これは「計算機」に例えると single CPU の性能を上げるのに等しく、放射光のコミュニティとしては、是非、実現しなければならない課題と思う。

「結晶学」は、「放射光」の出現により様変わりをしたことは誰もが認めよう。正に、「放射光なかりせば」、結晶学の今日の姿はない。単純な構造の原子レベルの単結晶構造解析は、「放射光」を必要とせず「計算機」上の人工知能と言う名のアプリで可能であろう。その一方、「放射光」を利用する分野で最もノーベル賞を受賞する可能性が高い分野に、「結晶学」が入ることはこれまでの経緯をみても明らかであると思う。また、「放射光」専用光源を実現するのに「結晶学」の研究者が大いに貢献したことは、紛れもない事実である。その意味では、「放射光」と「結晶学」は、切り離せない関係にあるといえよう。

計算機・放射光・結晶学と言う題目で書いてみると、共通項が見えてきたように思う。第1は、それぞれ大いに発展を遂げた分野であること。第2は、発展したが故にその分野の専門家以外の研究者に、広く活用することが求められていること。第3は、ここでは詳述しなかったが、その分野としても更なる発展が望まれていること。第2と第3のことは、一見逆方向のベクトルのように見える。しかし、新光源のような大きな計画を実現するには、逆方向に見える両者のエネルギーを大きく束ねることが必要なのだろう。