

第4回高圧結晶学ワークショップに参加して

草場 啓治 (東北大学金属材料研究所)

上記の国際ワークショップが、放射光X線回折と中性子回折法の高圧研究への応用を主題にして、この3月22日から24日までの3日間、筑波の高エネルギー物理学研究所で開催され、国の内外から約90人の参加があった。

さて、ここまでの文で三つの学術用語(業界用語)が登場していますが、まあ最初の二つはいいとして、最後の“高圧研究”とは何かなどと思っておられる読者もおられると思います。そこで、本題に入る前にこの“高圧研究”なるものの簡単な紹介とその歴史を概観したいと思います(もちろん筆者の独断と偏見を基に)。

気体に限らず液体や固体は加圧すると体積が小さくなりますが、場合によっては原子配列や化学結合が変化してその体積を小さくすることがあり、このような変化などを調べているのが“高圧研究”なのでしょう、きっと。そして圧力が1GPa(1万気圧)以上の時、私は超高圧と呼んでいます。この研究遂行の上で一番の問題は、どうやって試料に高圧条件を実現し、一定の時間その圧力を保持するかだと思います(普通のナベと圧力ナベの違いや、わずか100気圧前後のガスボンベの頑丈さを想像してください!)。次に問題なのが頑丈な高圧容器の中にある試料をどのような測定手段を用いて調べるかです(圧力ナベの中のカレーの火の通りぐあいなんてどうやって調べるんですかね?)。

そこで第二次大戦前後の高圧研究の創世記(私はこの時期を神々の時代と呼んでいます)には、高圧容器の変化から試料の圧縮率を求めたり、試料の電気伝導率などを電気信号として高圧容器の外に取り出し、構造相転移の有無を調べていま

したが、時代がくだって英雄の時代に入ると、研究室X線源を用いX線を強引に高圧容器中を透過させ、試料からの回折線を測定することにより、構造を推定することが可能になりました。しかしそこはそれ、粉末X線回折の僅か数本のピークから構造を決めたり、昇圧しているにも関わらず体積が膨張しているような結果がでたりと、常圧下の回折結晶学の常識からかけ離れたことがしばしば横行していたようです。このようなロマンと混乱の中、放射光X線を利用することで常識的な研究の可能性が示されたのが今から十数年前で、現在に到っています。ちょっと前置きが長くなりましたが、本題に入ります。

今回のワークショップでは上記の歴史的背景を踏まえ、ESRFやAPSさらにはSPring-8などの次世代放射光源による常識的回折結晶学の高圧研究への展開およびその可能性を中心に22件の発表がおこなわれた。各発表も30分と十分な時間がとられ、さらに別枠で討論の時間もとられたことから、活発な議論がなされた。

まずこの会の責任者であるKEK-PFの下村教授の始めの言葉に始まり、現在すでに実働段階に入っている唯一の次世代放射光施設ESRFにおける高圧実験のアウトラインが紹介され、参加者の注目を集めた。

また今回のワークショップの柱の一つとして高圧下の粉末X線回折の強度解析のための検出器および解析法に関して8件の発表が1日目と2日目におこなわれた。検出器関係では、CCDカメラによる粉末X線回折パターンの2次元検出の試みや、すでに実用化されているイメージングプレートによる2次元検出器、また従来のSSDなどの0次元

検出器による一次元スキャン法などが紹介され、それぞれの利点欠点が比較検討された。また討論において原研と富士フィルムが共同で中性子回折用のイメージングプレートを開発し、すでに実用化されていることが紹介された。これらの検出器を用いた高圧下の粉末X線回折データのリートベルト解析の例が、II-VI族半導体や水酸化物で報告された。

さらに高圧相の原子座標の決定にとどまらず、マキシマムエントロピー法による電子分布解析が金属ヨウ素を例に報告された。このほか、固体結晶以外に高圧下の融体のX線パターンの解析なども報告された。

中性子回折関係では、トロイダル型と呼ばれる高圧装置とその実験の研究例の報告やKEK-KENSのVEGAを線源とした日本の新しいクランプ型高圧実験装置の報告があった。こと中性子回折に関しては、欧州や米国のトロイダル型高圧発生装置が10GPa以上の圧力を発生できるのに、日本の新型装置が数GPa程度にとどまっていることが、門外漢の筆者には印象に強く残った。

また発表の幾つかではX線や中性子回折だけではなく、EXAFSやラマン分光さらにはメスbauer測定との組合せが報告された。このなかでメスbauer分光に関しては線源に放射光を用いる試みが紹介された。最後にパリ第6大学のBesson教授のまとめで3日間のワークショップも無事に閉会となった。

この会に参加して私は、明らかに“高圧研究”は今まさに、ロマンと混乱の英雄の時代から回折結晶学の常識の通用する人間の時代に移行している過渡期を終わりつつあると感じました。それに関連してちょっと気になることが一つあるので最後にその気になることを書いて、高圧の英雄の時代から今だに第一線の現役研究者である編集委員長からの半ば強制的な依頼を終わりにしたいと思います。

今回のワークショップ期間中、KEKの三つの高圧関連の実験室(PFとARそしてKENS)を見学する機会が2回取られていましたが、意外と参加者が少なくどちらの場合も10人以下で、これはどうしてだろうと私なりに考えてみました。私の独断と偏見に満ちた結論は、すでにESRFが実働した今となっては、このワークショップに参加した高圧研究者の興味は次世代放射光にうつっており、KEKの現有の施設にさほど関心を持たなくなってきたのではないかと、ということでした。となるとことは重大で、明らかに高圧結晶学の次の時代(人間の時代)は次世代放射光源と共にあるのは明白で、日本のSPring-8計画の高圧グループは今だにビームラインを獲得しておらず、明らかに欧州および米国の高圧研究グループにおくれを取ってしまったということになります。このおくれをどのぐらい短縮できるかが、人間の時代に生きる我々の世代の最大の問題になりそうです。

