また、Incommensurate 相の観察に収束電子回折法を適用した例を示したが、小生には示唆に富むものであった。これらの研究には、小生らが開発した大角度法をふんだんに利用しており、すっかりお株を奪われた感じであった。小生は Goodman の要請もあり、回折図形から空間群を決める方法を、我々の作成した表を用いて実例によって示した。この表は volume C に載る予定である。また、回折図形を得るための計測技術法のいろいろを解説した。Goodman は電子回折にあらわれる回折群と結晶の点群の関係、後者から前者の導き方を紹介した。午後、Wilson と Goodman を中心として、収束電子回折の成果を volume C にのせる実務的な話し合いがされた。

14日のMS4 (fluctuations and Modulations) には電子回折の講演も含まれていた。このセッションは、残念なことに、二つの講演が取り消しになった。そのうち一つは dynamics を扱った唯一のものであった。余った時間を他の講演者にふりあてたが、密度がすっかり薄くなってしまい興ざめであった。広い会場があてられたが退席者が目立った。

ポスターセッションには、沢山の電子回折関係の論文が報告されたが、多岐に亘りすぎるので、ここでも要約して述べることは不可能であるので、割愛する。

国際結晶学会のような巨大組織の学会ではややもすると、学問の現状とそぐわないシンポジウムがでたりする。この点は今後とも注意しなければならない。

JCPDS-国際回折データ・センターについて

竹内 慶夫

日本学術会議に学術情報研究連絡委員会が発足した頃、その会合の席上で委員長の小谷正雄先生が、次のような意味の発言をされたことを記憶している。“学術情報の活動はもっぱら先進国の仕事のような観があるが、日本でもこの活動を高めなければならない”。それから十数年経ち、学術情報に関する活動が驚く程活発になって来た現在でも、この小谷先生の言葉が何かにつけて思い出される。我々の分野でも、単に先進国で作られたデータ・ベースの恩恵に浴するばかりでなく、独自にデータ・ベースが開発されつつある。然し、その殆どが一団体、あるいは個人に近いスケールの活動に留まり、その成果を世界的なスケールでユーザーに提供することを積極的に検討する余裕がない様に思われる。これでは、学術情報に関して、小谷先生の言われる先進国に列するにはまだ程遠い気がする。

そもそもデータ・ベースの様なものは、個人的ではなく、その開発を専門的に行う世界的な一つのセンターに委ね、それに対する協力組織を置くのが最も能率的であろう。たとえ異なる機関で作られたデータ・ベースであっても、‘cross index’によりそれぞれの情報を拡大することが可能であるから、それらの機関の間の協力は重要な意義を持つことになる。一般に、学術情報の活動を支える重要な要素の一つは組織間の協力と言えるであろう。

X線粉末回折データについては、世界的なセンターとして JCPDS が存在することは良く知られているが、その運営、活動が主に大学、政府研究機関に属する学者、研究者達のヴォランティア・グループに依存していることを知る人は少ないかも知れない。JCPDS については、その年会への出席報告を兼ねて、その活動の一端として、JCPDS の主催した round robin について本誌に紹介したことがある¹⁾。この round robin は、同一の多相粉末混合物を複数の参加者に配分して、それぞれ異なる検索方法で同定し、その成果を検討するテストである。第2回の round robin には日本からの参加も要請されたの

Yoshio Takéuchi: JCPDS—International Center for Diffraction Data; Its History, organization and activities.

で、松崎尹雄博士に参加していただいた所、満点の成績を上げられた。これについても、やはり同博士により本誌に寄稿されている²⁾。今回、JCPDS についての執筆を依頼された機会に、粉末データ・ファイル (PDF) の沿革と、JCPDS の組織、活動等の概略を以下に述べさせていただくことにする。

Joint Committee の誕生

結晶性粉末が与える X 線回折図形の特徴が P. Debye および P. Scherrer によって発見されたのは 1916 年のことである。その 3 年後の 1919 年、A. W. Hull により “A new method of chemical analysis” と題する論文が発表され (J. Am. Chem. Soc. 41, 1168) X 線粉末回折法を用いることにより、未知物質を構成している元素を同定し得ることが示された。この論文の中で、各物質の粉末回折図形は、それぞれについて固有であり、また、混合物についても各構成物質のパターンはそれぞれ他とは独立であることが指摘されるとともに、解析に必要な物質の量はごく僅かで十分であり、しかも実験法が極めて簡単であることが強調されている。この論文は 20 年後に PDF の萌芽を育てる役割を果たすことになった。

萌芽は J. D. Hanawalt 教授とその協力者 H. W. Rinn および L. K. Frevel によって作られた。彼等は 1000 種類の物質について、粉末回折パターンをリストアップし、一つのカテゴリ方式を導入することにより、Hull の分析法がルーティン的に広く応用出来ることを示した。この論文が発表されたのは 1939 年であった。当時のパターン分類方式は Hanawalt 教授により考案されたものであるが、現在 Hanawalt 方式として知られているものと異なり、最強の回折線に基づいて 1000 種類のパターンを 20 の群に分類した上で、それぞれの群の中で 2 番目の最強線の順にパターンを並べたものである。この Hanawalt, Rinn, Frevel 等の仕事を最初にテストしたのはダウ化学会社 (Dow Chemical Co.) の研究所であった。

一方、彼等の仕事に注目し、その将来の発展性を予測した ASTM とアメリカ学術会議はワーキング・グループを作って、粉末回折法による分析システムを組織的に開発する計画を立てた。それを知った英国の Institute of Physics は直ちにそのグループに参加し、ここにそれらの合同の委員会、即ち Joint Committee が 1941 年 8 月に ASTM の傘下に誕生した。その委員会の名称は “Joint Committee on Chemical Analysis by Powder Diffraction Methods” であって、初代の委員長は Hull-Davey の図表で知られている Wheeler P. Davey 教授であった。

ASTM

ここで、ASTM (American Society for Testing and Materials) について簡単な説明を加えておこう。この組織の歴史はかなり古く、1898 年に創設され 1902 年に法人組織となった非営利団体である。事業の目的は「科学技術的に重要な物質について、その知識の向上を計るとともに、それらの試験 (test)、特性化 (specification)、定義づけ (definition) 等をするための標準的な方法を確立し、その実用化を計る」ところにある。種々の Technical Committee を設けて活動が推進されているが、手許にある 1967 年の資料によると、103 の Technical Committee があり、それらは更に 2500 以上の Subcommittee に細分化されている。Hanawalt 等の仕事に注目したのは X 線に関する Committee E-4 であった。会員組織で、会員数は 1967 年現在で 15000 名に上る。その約 67% は科学、技術者等の個人会員であり、業界団体は 15% を占めている。

ASTM には上記の Technical Committee の外に、外部組織との合同委員会がいくつかある。それ等は、原子物理学、分子物理学データ、脂肪酸等理工学的なものが多い。上に述べた粉末回折の合同委員会はこのような合同委員会の一つとして設けられたわけである。

JCPDS への移行

創設された合同委員会のオフィスは Davey 教授の所属する ペンシルベニア 州立大学の物理学教室に

上：JCPDS 本部の建物。

右：W. P. Davey 教授 (1886—1954)。

置かれた。創設された年に Hanawalt 等による 1000 組のデータが 3×5 インチのカードの形式で世に出たのであるが、このカードの大きさは今も変わらない。これが PDF の “1st set” である。

Davey 教授は編集者の役割も果たされたが、この時、委員会の活動に対してなんらの財政的裏付けが無く、作業はもっぱら Davey 教授の奉仕と、教授の下で働く人達の善意と好意に依ったのである。印刷費を捻出するため ASTM 親委員会の L. L. Wyman 委員長が GE (General Electric X-Ray Company) を説得して、上記のカードを 1 セットにつき 50 ドルで 50 セット注文させた。「これが委員会が始めて手にした現金の総てであった」と W. L. Fink 博士が回想している³⁾。ペンシルベニア州立大学は無料で編集用のオフィスを提供したばかりでなく、必要な事務用品を用立てる一方、ASTM も又、無償で印刷、出版、配送等に係わる事務作業を分担した。やがて、後になって、GE、ダウ化学を始め金属関係の会社等より委員会の活動に対して基金が寄せられるようになるが、PDF の発足を可能にしたのは、この様に専ら Davey 教授および彼の協力者達の奉仕と、彼等を支えた周辺の組織の理解と好意によるものであった。

新しいデータ作成のための資金が無いため、最初の三つのセットは専ら文献よりの収録によったが、特に 2 番目のセット出版のためには Institute of Physics と英国の工業界から手持ちのデータが大量に寄贈された。英国では間もなく A. J. C. Wilson 教授が合同委員会の委員となり、PDF の為にデータを作成する作業が始められるのであるが、それは同教授が 70 歳に達した現在もなお続けられていることを付記しておく。

Davey 教授は老齢の上、健康を害されて 1956 年に止むなく委員長を辞任された。合同委員会のオフィスは引続きペンシルベニア州立大学の中に置かれていたが、1964 年に ASTM 本部の建物が新築されると、そこに移転した。その 5 年後、合同委員会は新しい独自の本部建物をフィラデルフィア郊外のスワスマア (Swarthmore) という小さな町に建設し、ASTM の傘下を離れた独立の非営利団体としてそこへ移った。委員会の名称も “Joint Committee on Powder Diffraction Standard” と改められた。これが JCPDS である。この頃には、2 万を越す物質についての PDF が蓄積されていた。後に、単結晶データを収録した *Crystal Data* も出版するようになった為、また、その国際性を打ち出して、1979 年には International Centre for Diffraction Data (ICDD) という副称を付けることを決めた。従って、現在合同委員会の正式な略称は JCPDS-ICDD である。然し、煩雑を避けるため、以下の文中では JCPDS で通すことにする。

JCPDS-ICDD の組織と運営

JCPDS は粉末回折パターンに基づいて、結晶性物質を同定するための標準となるような粉末回折デー

タの収録、編集および出版を専門とする組織である。運営、および結晶物質のデータとそれに関する一切の技術的な問題は既に述べた如く学者、研究者達のヴォランティア活動によって遂行されるが、編集、出版等の事務を扱うパートタイムの雇用員及び秘書達を抱えるため、それ等の統轄を専従とする幾人かの職員が居る。

JCPDS には協力団体として、当初は前に述べた如く英国の Institute of Physics, ASTM とアメリカ学会会議があったが、やがて学会会議に代ってアメリカ結晶学会が加わった。その後参加した協力団体はアメリカのセラミックス、粘土、鉱物などの諸学会、およびフランス鉱物・結晶学会、カナダ鉱物学会等合計 11 団体に上る。1984 年 8 月現在で 128 名の会員が所属している。会員候補者は JCPDS の会員担当委員会でその経歴、研究歴、業績等が検討された上で評議会に推薦され、評議会は投票により入会の可否を決定する。また、JCPDS より補助金を受けて活動している 18 のグループがある。

ところで、最高決議機関である評議会 (Board of Directors) は、現在 21 名のメンバーで構成されている。その中、事務長とマネージャーの二人を省く他の過半数は大学、政府研究機関の学者、研究者達であり、残りが IBM, ダウ化学, デュボン等の会社研究所に属する研究者達である。学者達の中には、英国、西独、オランダ、カナダ、日本等の外国勢も含まれている。ノースダコタ州立大学の化学教室に所属する Gregory J. McCarthy 教授が現在の委員長を務め、評議会の議長も兼ねている。同教授も数年前まではペンシルベニア州立大学物質科学の教授であって、同大学の鉱物学の教授である Dean K. Smith 前委員長と共に JCPDS を強力に盛り立てて来た人である。この様にペンシルベニア州立大学と JCPDS との関係が深いのは、その発足の経緯もさることながら、Davey 教授のヴォランティア精神がこの大学の関係者の中に脈々と生き続けている為であろう。

第 1 図は JCPDS の組織を要約したものである。この図の中で A は Headquarters, 即ち事務局, F は Finance Committee, また M はその他の委員会をまとめたもので、この中には JCPDS & NBS Crystal Data Committee, Membership Committee, Honors Committee, Bylaws Committee が含まれる。この中、Honors Committee というのは粉末回折データの分野で功績のあった人を顕彰するために最近設けられた賞委員会のことである。

JCPDS のデータに関する活動は Technical Committee によって遂行される。具体的な個々の問題を処理するため Technical Committee は第 1 図に示すように 11 の Subcommittee と Task Group によ

第 1 図

EDITORIAL PATH for PDF DATA

第 2 図

って組織されている。現在 Task Group として置かれているのは、PDF Data Base, Frequently Encountered Phases (FEP), と Fink Numerical Index を継続開発することを検討するもの等がある。この図の中で NBS とあるのは NBS Associateship Technical Advisory Committee を意味している (NBS=National Bureau of Standards)。次に、データのソース (source) と PDF が生まれるまでの流れの概略を第 2 図に示しておこう。ソースは図の最上部に示すように四つに分類される。年間に収録されるデータ数は、一般の文献からは約 1300~1600, 個人からの寄贈 30~100, 補助金を受けているグループ 300~500, NBS 70~100 で合計約 2000 程度である。現在 44,000 種の物質について PDF が作成されているから、この割合で増加するとファイルの数は間もなく 5 万を超すことになる。事務局に集められたデータは各物質担当の編集者によって厳重に審査され、パスしたものはその質を示す印 (quality mark) が付されて編集総幹事の下に集められ所定の形式に整えられる。

JCPDS-ICDD の活動

〔年会〕 JCPDS は毎年、春と秋に恒例の会合を開く、春の会合はいわゆる年会であって、3 月初旬に一週間 (月曜~金曜) にわたって開催される。その期間中に各委員会は平行して会議を開き、それぞれが総会の席上で報告を行い、一般参加者の討議に委ねる。総会に割り当てられる時間は通常午前中の 4 時間半で、参加者数は 100 名を超えない程度である。年会の会場には通例フィラデルフィア国際空港に程近いホテルが選ばれ、参加者はすべてそこにかん詰にされる。ヴォランティアの集りのせい、各委員会、評議会とも驚く程活発かつ真剣に討議が展開される¹⁾。

〔Technical Committee〕 JCPDS からはデータ・カードばかりでなく、本の形でデータ集が、或いは種々の形式の索引書等が出版されている他、データ・ベースおよび検索用プログラム等開発されたソフトが磁気テープの形で実用に供されていることは周知の通りである。それ等の中で、例えば結晶

構造データから粉末回折パターンを計算するプログラム (POWD 10) などは、その中に盛り込まれている f , 空間群の情報等は粉末パターンばかりでなく結晶学の分野全般を通じて極めて利用価値の高いものである。

然しながら、データ・ベースを取り上げてみても、現在その中に組み込まれている d 値の代りに、純粋な一次情報としての θ (ブラッグ角) の観測値を使用すべきであるとの意見も出されて居り、また、必要な結晶学的情報の総てがパターンの総てについて網羅されている訳でも無い。この様に、データ・ベース自身の形式、ドキュメンテーション等に多くの問題が残されていると共に、ハードウェアの進歩との対応も必要である。この様な点が Computer subcommittee の抱えている問題である。

その他、個々の Subcommittee の活動については省略することにして、一般的な観点から問題を取り上げてみると、その一つは増加を続けるデータへの対処である。例えば 8 本の最強線に基づく Fink 法の検索書は正にデータの数の増加につれて厚みを増す一方である。検索の能率を下げずに、検索書の厚さの増大を抑えることの検討が必要となってくる。一方において、データ数の増大は、検索の能率を上げるため、特定の物質グループのみを集めたサブファイルを生むことになる。また、更に特に出現頻度の高い物質を集めようと言う考えも生れてくる。これがすでに記した FEP ファイルのことである。ここで起きる問題は、何をもって FEP と定義するかで、この問題に取り組んでいるのが FEP Task Group である。このグループの存在は、今述べた第一の問題が生んだ一つの典型であろう。

第二は、データの精度という最も基本的な問題である。そもそも粉末回折実験法は 30 年程以前に確立された方法であるのに、何故か文献中のデータは平均的に精度が低い。文献から収録された PDF は正に玉石混交である。JCPDS が現在の活動の方針として最も重点を置いているのは精度の向上であって、その為に特別の予算を計上し、主に NBS のグループがその作業を進めている。

粉末データの公表に際して

最後に、論文中に発表する粉末データが具えるべき条件について触れておこう。これはアメリカ結晶学会 (ACA) の中に設けられた委員会が、一部の PDF を対象として、それを解析し、データ・ベースのドキュメンテーションおよび実験データにおける問題点を明らかにした上で到達した結論である⁴⁾。その条件の中、主なものを抜粋すると次の通りである。

- (1) 強度の弱い回折線を省かず、すべて記載すること。一般に、一つの物質を特性づけるには、その粉末回折線の数 は 40 程度で十分であるが、本数が少ない時は $2\theta=100^\circ$ (CuK α) までのデータを記載することが好ましい。
- (2) 相対強度は現行の 1 から 100 の段階でなく 0~100 とすること
- (3) 装置の系統誤差を補正した 2θ の観測値を記載すること
- (4) 特別の理由の無い限り回折線の指数付けを行うこと
- (5) パターンの評価値⁵⁾ F_N を記入すること。

この委員会は、すべての学術誌が論文を受理する際に、この様な条件に留意するよう IUCr に要求すべきであると ACA に勧告している。

本稿を終えるに際し、資料調査に協力いただいた JCPDS の J. M. Messick, L. Zwell 両氏に感謝します。

文 献

- 1) 竹内慶夫：日本結晶学会誌 **19**, 222 (1977).
- 2) 松崎尹雄：日本結晶学会誌 **22**, 292 (1980).
- 3) Wm. L. Fink : *Scientific Information in the Field of Crystallography and Solid State Physics*, Ed. Toku. Watanabe and Y. Takéuchi, Cryst. Soc. of Japan, 91 (1962).
- 4) L. D. Calvert, J. L. Flippen-Anderson, C. R. Hubbard, Q. C. Johnson, P. G. Lenhert, M. C. Nichols, W. Parrish, D. K. Smith, G. S. Smith, R. L. Snyder, and R. A. Young:

N B S Spec. Publication 567, 513 (1980).

5) G. S. Smith and R. L. Snyder : Appl. Cryst. 12, 60 (1979).

21 世紀に向けて

東京工業大学・工学部 長倉 繁彦

本年は1985年、あと僅か15年で紀元2000年となり世紀が変わる。世紀が変わったからといって太陽が西から登るようになるわけではないが、折目、節目というものは人の心を新にする機会を提供する。15年の間にはいろいろなことが起こるかも知れないが、確実にいえることは、現在50歳台の人は学術研究の第一線から離れ、40歳台の人が指導的役割を演じ、30歳台乃至それ以下の人が中堅として活躍するだろうということである。

歴史を紐といて見るまでもなく、結晶学は1912年の von Laue らによるX線回折現象の発見、引続く Bragg, 寺田らによるX線回折の研究を契機として、古典結晶学から回折結晶学へとその重心が移動した。そして、1927年の電子線の回折現象の発見や、1930年代の中性子回折実験、電子顕微鏡の発明等の重要な研究成果を間にはさみつつ、回折結晶学は着実に進歩発展し、20世紀後半に至って大きく花開き、多くの果実を実らせて今日に至った。

我が国でもこれと歩を一にして、西川正治先生を先駆者とする回折結晶学は急速な進歩発展をとげ、今日では多数の優れた研究者と研究設備をもつ世界有数の国となった。即ち、研究の面では世界の注目を集める多数の論文が結晶学関連の諸分野で発表されるし、また、施設の面ではフォトン・ファクトリーを頂点とする強力X線設備、各種の高性能電子顕微鏡、高品質の中性子実験設備等が数多く設置されるに至った。それ故、現在では世界の中でも一、二を争う恵まれた研究環境が実現されているといっても過言ではない。

然しながら、このような状況が永続性を保持し、21世紀に於て更に大きな果実を実らせ得ると確信をもって言えるであろうか。第1図は1983年度版日本結晶学会会員名簿（会員数約900）に基づいて作製した会員数一推定会員年齢図で、これを1981年度版日本物理学会会員名簿（会員数約14000）から任意に抽出した約1000名に対する会員数一推定会員年齢関係と比較したものである。一見して明かな

第1図 日本結晶学会会員の年齢構成と日本物理学会会員の年齢構成の比較、日本結晶学会：1983年度版会員名簿による。日本物理学会：1981年度版会員名簿による。

ように、40歳以上の会員数分布は両学会ともほぼ同じだが、40歳以下では日本結晶学会会員数は日本物理学会会員数に較べて著しく少ない。また、日本結晶学会会員数はこの10年間ほとんど一定で、900名を前後している。結晶学的手法により研究を行っている研究者の数は、各研究機関における研究設備の増加よりみると、著しく増加していると推定されるにも拘らずである。こうした事実は21世紀における結晶学を考える際の一つの大きな警鐘である。結晶学研究者並に日本結晶学会はその原因を追求し、