特集—21世紀に向けた結晶学の新たな挑戦

特集「21世紀に向けた結晶学の新たな挑戦」にあたって

編集委員会 特集号担当：吉朝 朗, 神谷信夫, 神山 崇, 長我部信行, 佐々木 聡

Akira YOSHIASA, Nobuo KAMIYA, Takashi KAMIYAMA, Nobuyuki OSAKABE
and Satoshi SASAKI: Crystallographer's Challenge in the 21st Century

2000年度には、結晶学会創立50周年を記念して、東京では記念講演会、仙台での年会では記念シンポジウムが行われました。記念行事に合わせて本誌では「創立50周年記念号」が発行され、その第3部には「結晶学の未来を拓く」と題して、21世紀に向けた結晶学の将来への方向性や展望がいくつか提示されました。激しく変化する情報通信システム、急速に進歩する科学技術のもとで、将来を予測・展望することは容易ではないでしょう。しかし、20世紀から21世紀へ、1000年代から2000年代へ変わる節目のこの時期に、「新たな挑戦」と題して、予測可能な近未来を明るい展望に基づいて、次世代の人たちに提示することは、学会として大切なことだと思います。

本特集号では、さまざまな問題に実際に挑戦している研究者の方々に執筆をお願いしました。21世紀に向けて、これまでの研究成果を踏まえ、近未来の結晶学の展望と展開の方向性・可能性についての指針について触れて頂きました。最近5年間の結晶学会誌の特集号で取り上げられた内容の多くは、中性子や放射光施設などの巨大システムを用いた研究を主体としたものでした。これら最近の特集号においても、21世紀における結晶学会の役割に関する議論が多くなされおり、巨大システムと平行して行われる先端技術の開発応用の重要性が力説されています。最近の特集号で巨大システムに関した未来展望が示されているので、本特集号では巨大システムを用いた成果はなるべく含まぬようにしました。

20世紀後半の結晶学が成し得た貢献の多くは、1989年に学会から発行された「日本の結晶学—その歴史的展望—」に詳しく見ることができます。中性子や放射光などの一般利用、特殊条件下や極端条件下での構造解析技術の発達など、半世紀前には予想外の発展・展開があったことはいくつでも指摘できます。結晶学者は、放射光などの新しいシステムの利用を促進し、回折技術の広範な利用を多くの分野に広げました。そして、着実に解析精度や分解能も上げて見たい物を見えるようにしてきました。この流れはさらに21世紀に加速度的に発展するで

しょう。非晶質の構造、表面・界面の構造、欠陥の構造、局所構造等のバルク結晶以外の原子レベルでの理解が深まりました。さらに、時間分割実験等により相転移や化学反応に伴うダイナミックな原子の運動を原子レベルで捉える試みも、マイクロ秒からナノ秒へと技術が展開してきています。

2000年第1号の巻頭言で大橋前会長は、19世紀は元素の世紀、20世紀は原子・分子の世紀で、21世紀には、構造が内包している物理的性質や化学的反応性が重要な問題になり、分子間に働く弱い相互作用の解明が不可欠と指摘しています。魅力的な特性を持つ低・高分子結晶の中の一部の原子のわずかな移動で、性質が変わることが実験的・理論的に検証されてきています。同じ元素でできた物質であっても、わずかな配位環境や分子間に働く弱い相互作用の変化で物理的・化学的特性が変化することを示してくれています。

21世紀は「生命科学の世紀」。遺伝情報の獲得からさらに数歩踏み込んで、生命活動そのものを原子レベルで理解し、生命の再構築を夢見ることのできる時代と言うことでしょうか。生命現象そのものと言えるタンパク質間の相互作用を照らし出すことは、21世紀のタンパク質結晶学の重大な使命であり、回折結晶学をなくして考えられないのではないのでしょうか。生命を構成する膨大な物質それぞれの物性に対する原子レベルでの知識がタンパク質結晶学から得られようとしています。生命を分子機械に見立てた場合、個々のタンパク質は部品とみなされます。その部品がどのようにして組み合わされ、制御されているかを知ることにより、分子機械として生命をとらえようと試みられています。このことは、先の大橋前会長の指摘と調和的です。タンパク質結晶学には大きく分けて3つの動向があるようです。1. 結晶構造解析の対象を単独のタンパク質から複数のタンパク質の複合体に広げ、この複合体の詳細をまるごと構造解析するもので、生命現象の現場を直接解明しようという試み、2. 高度好熱菌などを対象として、生命個体中で機能を発揮してい

るタンパク質のすべてについて立体構造を解明する試み、3. こうして得られたタンパク質立体構造の構築原理に基づいて進められる未知タンパク質の構造予測の試み、の3つです。近未来には、原子のレベルで生命活動が理解され、さらに操作・設計に至るでしょう。「まだ人知の及んでいない所に科学技術を駆使して生命活動を操作している」という印象をなくしていくのは科学者の使命ではないでしょうか。

地球科学でも同じく、地球環境や地球自体をより細かな部品レベルで機械論的に理解しようとしてきました。20世紀後半の結晶学を含めた科学の進歩に支えられて、人類が手にした成果の1つに、「進化し変化するダイナミックな宇宙・地球」を理解できたことが挙げられるでしょう。最も近い恒星でも光の速度で4年以上かかること、恒星や地球などの惑星の内部の構造の進化と終焉、生命の発生・進化により古環境が変えられ現在の姿になったかけがえのない地球、人類の出現と文明の発達が必然性と多くの偶然と幸運の結果として成し遂げられたこと、などを私たちが知り得たことです。地球の歴史からみれば、現在は氷河期です。それも間氷期から氷期に向かう時期であり、人類の活動がその変化を早めていることも指摘されています。2000年代には、二酸化炭素増加による温暖化に刺激され、本来の激しい気候の変動を伴う地球環境に戻るであろうことも予測されています。発展を夢見て前進を続けた1000年代と対照的に、2000年代は効率化や縮小化を前提とした地球環境との調和型システム構築なしに人類の発展はあり得ないようなにも思われます。いまだに続く環境破壊。限りある化石燃料と鉱物資源の浪費や放射性物質の保存と廃棄の問題などのように、子孫につけや憂いを残すことのないように、結晶学の成すべきことは多くあるはずです。

20世紀後半を彩る宇宙開発事業や放射光施設の利用に伴う研究など、巨費を投じた巨大システム建設に伴う発展と同じく、コンピューターや各種デバイスの発達・低価格化による装置の大衆化も最近の発展の大きな要因でしょう。研究室レベルでの実験でも精度が桁違いに向上し、X線回折実験による電子密度分布がかなりの精度で決まるようになりました。実測の電子密度と分子軌道計

算シミュレーションとが比較対応されるようになりました。Rietveld法やMEMを導入するなど計算機の発達に伴う解析法の開発努力により、準結晶や酸化物高温超伝導体、フラーレン、カーボンナノチューブなどの新規物質の構造が決定されました。これまでに蓄積されたデータや理論に基づいて、ドラッグデザインやニューセラミックスの設計など、計算シミュレーションにより機能物質など新物質の設計開発も現実のものとなっています。新しい機能性の発現を求めて、ナノテクノロジーを駆使して自然界では起こらない複合化・ハイブリッド化もシミュレーションと合わせて行われています。ニューフロンティアに向かって飽くなき挑戦を続ける中、セレンディピティにも遭遇し、エネルギーや資源問題などを解決する新物質が出現することを祈ります。

ビッグ・サイエンスを目指した開拓的研究とは別に、多様化し精密化する科学と大衆化する科学も重要なキーワードであるでしょう。ギャンブル性を伴う開拓の開発研究のみならず、過去の遺産を引き継いだ、地味な研究や地道な研究の継続も不可欠なのは言うまでもないでしょう。また、今後の進歩には、高エネルギー化・巨大化・特殊化・画一化による「中央集中型」と、高機能化・小型化・一般化・大衆化・多様化による「地方分散型」の共存が重要テーマのようにも思えます。もしかすると、20世紀の余波がなくなるころには、21世紀は多様性を認めた分散発展型に向かうのではないのでしょうか。

原子レベル構造の詳細な情報を、あらゆる物質に迅速に高分解能で手軽に得ることが要求されている現状から察して、いずれ人類は膨大な情報を手にするでしょう。オウム真理教の若い科学技術者たちに見たような科学の大衆化に伴う危険性、遺伝子組み替え技術の大衆化、クローン人間問題など、さらにいっそう科学者の倫理が大きく問われる時代に向かうことは間違いのないでしょう。21世紀の科学者は、子供たちの未来に対して大きな責任を負っていると思います。

岩崎会長が本誌で指摘されたように、「研究手段の先にある科学とその応用」が、21世紀には科学者のモラルに守られてますます展開し、自然科学としての結晶学が21世紀でさらなる発展を遂げることを期待してやみません。