

平成 29年 2月13日

理研科学者会議議長

前田 瑞夫殿

高田 昌樹 主任研究員 研究業績レビュー（最終）報告

委員 辛 埴^{*1}
藤井 保彦^{*2}
永長 直人^{*3}
上坂 友洋
加藤 礼三
田原 太平

*1 東京大学物性研究所 教授

*2 東京大学 名誉教授

*3 とりまとめ役

平成 28 年 1 月 17日に行われた放射光科学総合研究センター・高田構造科学研究室・高田昌樹元主任研究員の研究業績レビューについて以下のとおり報告する。

高田元主任研究員は、2006年4月から2015年3月までの9年間、高田構造科学研究室の主任研究員を務めた。

高田氏は放射光を用いた構造物性の分野における指導的研究者であり、2003年から、JASRIのチームリーダーとしてSPring-8の維持・運転・管理に携わるとともに、2006年からは理研の主任研究員として物性科学の研究活動を行ってきた。そのフィロソフィーは単なるユーザーに留まらず、装置開発と科学研究の双方を行うことで、「X線構造解析」・「構造物性」分野を、結晶から非晶質、ソフトマター、生体物質までを対象に、「電子」を基軸とする普遍的物質構造の研究へと進化させ、同時に放射光科学の高度化にフィードバックすることであった。

理研の研究室発足以前に開発していたMEM (Maximum Entropy Method 最大エントロピー法) による電子密度分布解析法を発展させて、①静電相互作用の可視化、②電子スピンの可視化、③高分子材料のダイナミクスの可視化、④上記を可能にする回折・散乱実験の効率化・精密化、という4つの課題を探究した。一貫して放射光X線回折・散乱法で観測される運動量・エネルギー空間の情報を用いて、実空間・実時間における構造

の可視化を行う「構造可視化科学」の構築を行った。以下にその成果を簡略にまとめる。

- ① 静電相互作用可視化では、Siとダイヤモンドにおける電子分布の可視化に成功し、またマンガン酸化物の $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ では、その電荷・軌道・スピン秩序をマンガンと酸素の間の電子密度分布の変化によって捉えた。この手法は強誘電体の電気分極の可視化にも応用され、 Bi_2SiO_5 においては分極の定量的な評価、理論との比較の段階まで進展している。
- ② 電子スピンの可視化では、偏光X線回折を用いて強いスピン軌道相互作用を持つイリジウム酸化物の磁気秩序の決定、マルチフェロイックマンガン酸化物におけるスピнкаイラリティと分極の関係の発見、 CsCuCl_3 における鏡像異性体の可視化分離、などの成果を挙げた。
- ③ 高分子材料のダイナミクスの可視化では、フラーレン内包金属原子の可視化、籠状結晶に内包されたタンパク質分子の可視化、金属-有機物構造体における水素のオルソ・パラ変換機構と電場分布の関係、などの研究を行った。
- ④ 回折・散乱実験の効率化、精密化、では、時分割・ナノスケール分解能を目指したX線ピンポイント構造計測の開発が特記される。DVD/RAMによる光記録における結晶-アモルファス高速相変化の可視化に成功したことは応用へと結実した顕著な例である。この成果はSPring-8における産業利用に大きな道を拓いた特筆すべき成果である。

また運営面では、人材育成にも注力し、主任として5名の、連携研究GDとして4名の博士研究員を昇任・転出させた実績がある。さらに、フロンティアソフトマター産学連合体専用ビームラインを主導するなどSPring-8における産学連携にも尽力した。

以上に述べたように高田氏は我国の放射光科学を牽引してきた。その研究活動は国内外の広範な協働によって行われ、分野の枠をも超えて広義の物質科学の分野において学術分野融合を推進した。これは、大型施設における（従来スモールサイエンスに分類されている）物性研究を推進する主任研究員の一つのスタイルを提示したものであり、その目的は十分に達成され放射光科学総合研究センターのミッション遂行にも大きく貢献しており、高く評価される。

以上