

## 海外シリーズ⑬

### 『米国アルゴンヌ国立研究所と 放射線物理化学』

季 村 峯 生

私が勤務している、アルゴンヌ国立研究所は、アメリカ合衆国、エネルギー省（DOE）の管轄のもと、シカゴ大学と共同で運営されている。他のDOEに所属する類似の国立研究所は、Livermore, Los Alamos, Brookhaven, Oak Ridge, Berkeley 等にある。当アルゴンヌ研究所の起源は、シカゴ大学の著名な物理学者エンリコ・フェルミの指導のもと、人類初の核エネルギー創出が成功裏に行なわれた時、1942年、そして所、シカゴ大学、に始まり、その後シカゴ郊外のアルゴンヌの地に現在の研究所が創立された。アルゴンヌ研究所は年間予算約400億円、人員約4000名（博士研究員1500名、

研究補助員1500名、事務員1000名）で運営されており、研究分野は物理、化学、数学、生物、医学等の基礎科学の分野から、原子炉、材料、化学、コンピューター等の応用工学分野まで広くまたがり、アメリカにおける一つの研究センターになっている。Livermore, Los Alamos 等、他のDOE所属研究所とは異なり、アルゴンヌ研では直接の軍事研究は実施されておらず、その為部外者の研究所出入に対する規制も特に厳しくはなく、多数の外人研究者が常時滞在している。日本からも原研、動燃を始めとする原子力関係研究機関、企業等は数名の研究員を常駐させており、他に大学等からの1～2年の



Argonne National Laboratory  
Aerial View of Illinois Site

1972年：早大広化修士課程終了

1972年～1975年：三菱原子力工業研究所

1980年：Alberta 大学 (Canada) Ph.D. (Chemical Physics)

1981年：University of Missouri, Dept. of Physics

Assistant professor (助教授)

1983年～1984年：フランス国立研究所 客員研究員

1984年：University of Colorado, Dept. of Physics

Associate professor (準教授)

1986年～現在：Argonne National Laboratory Physicist (専任研究員)

兼任：Rice University, Dept. of Physics Professor (兼任教授)

短期研究員の数を入れると20～30名近い日本人がこの研究所に滞在しているものと思われる。

さて私が所属している基礎原子物理研究グループは、“放射線と物質との相互作用の基礎的研究”と云う一つの大きなテーマのもと、実験5名（他にポスト・ドク2名、客員研究員2名）、理論2名（他にポスト・ドク1

名、客員研究員2名)の人員で研究を行なっている。個々の研究テーマは、研究員個人の興味及び社会的要請等により変わるが、現在の所、実験グループの主なテーマは、(i)電子と分子の衝突による分子の励起状態、及び電子からの運動量移行の研究、(ii)レーザーを使った光と分子の相互作用による分子の励起状態の研究、に大別される。又理論グループの主なテーマは、(i)電子が物質中を通過した場合の減速メカニズム、及びその過程での生成物の収率の研究、(ii)電子と分子の衝突による分子の特定励起状態への遷移確率の研究、(iii)イオンと原子、分子あるいは固体表面の衝突による、イオンの電子捕獲、又標的のイオン化の研究、等を行なっている。私は理論グループの一員として上記理論(i)~(iii)のテーマについて、研究に参加している。

さて次に、私自身の研究テーマについてもう少し詳しく話をしてみたい。まず生物学的物質(たとえば細胞)を例にとり、それへの放射線効果がどのような時間的、空間的単位で起きるのかを概観し、それへの我々の研究テーマのかかわりについてながめていこう。まず、エネルギーの十分高い放射線(光、電子、中性子、核、イオン等)がこの物質中を通過した場合の主な作用は物質中のさまざまな種類の原子・分子のイオン化、つまり色々なエネルギーを持った電子が沢山たたき出される現象である。これらの電子達は入射放射線と共に物質中の他の原子・分子をイオン化あるいは励起状態(電子的、核の振動回転等)に遷移させながら、電子自身は運動エネルギーを失い、しだいに減速していく。このプロセスは物理的ステージと呼ばれ、例にとった生体物質の場合には、だいたい $10^{-15}$ 秒の時間単位での出来事である。次の $10^{-13}$ 秒間に、イオン化あるいは励起された構成原子・分子はラジカルに解離する一方、電子の集団は物質中でどんどんエネルギーを失い、周りの原子・分子と熱平衡に達し、そして云々ゆる溶媒和電子と呼ばれる状態になる。これらラジカルは始めは電子の飛程にそって、非均一的に局在化している。次の $10^{-12}$ 秒あたりより、云々ゆる化学ステージと呼ばれる、構成分子間でのエネルギーのやり取りを含む、化学反応過程が主のプロセスになっていく。ここでは前に局所的に生成されたラジカル群が物質中を拡散し始め、それらが物質中の他の原子・分子あるいは他のラジカル同志で相互作用をし連鎖反応を引き起す事になる。この連鎖反応が順々に小さな分子から大きな分子、近い所から遠い所の分子をまき込み、均一的に拡大し $10^0$ 秒あたりまで続く。その後、生化学的ステージと呼ばれる酵素の様な生化学的分子自体の変化に関係するプロセスが $10^3$ 秒程度の間起り、細胞、組織破壊、そして組織のガン化あるいは生体の死につながる

事になる(生物学的ステージで数時間より数年の単位である)。もちろん生体細胞自体すばらしい自己修復機能をそなえているので最後のプロセスがいつも起る訳ではない。最後に、放射線による細胞破壊はこれらラジカル群によるものが全体の70%近くを占め、放射線による直接破壊はあまり多くないと云へる。以上非常に概念的ではあるが放射線と生体物質との相互作用の色々なステージでのプロセスを感じ取って頂けたと思う。

さて次に、私が参加している研究テーマと上述の放射線プロセスとの関連を見てみたい。もちろんどのステージの基礎応用研究も放射線効果の統一的理解の為には重要で欠く事の出来ない問題を含んでいるが、我々の取り扱っているテーマは特に物理ステージ及び初期化学ステージに属する問題である。まず、(i)高エネルギー入射放射線がどの様に、イオン化により生成された電子と共に物質にエネルギーを与へ、つまり物質の性質を変へながら自身は減速していくかの過程を解析的手法を使い分析している。又、モンテカルロ法による計算機シミュレーションも実施し入射粒子の動きを再現している。これらのモデル計算により、どの構成原子・分子の励起種が、どのような収率で、どの空間、時間単位の間生成されるかの情報が得られる。それと同時にどのようなメカニズムで放射線とイオン化電子が物質中でエネルギーを失っていくかの知見も得られる。ところがこのモデリングの研究の為には放射線と原子・分子との衝突によって起る種々の過程の確率のデータが不可欠であるのだが、残念な事にこれらのデータの実験・理論両方の蓄積は非常に少ない。ごく一部の簡単な分子、例えば酸素、チッ素、等を除いて全くデータがないと言っても過言ではない。この要請から、(ii)我々は電子あるいは光と分子の衝突による様々の過程が起る確率を十分広いエネルギー範囲で、且つ信頼のおける精度で計算可能な理論の整備、及び応用としての確率データ製造を行っている。

次に(iii)初期化学ステージとしてのイオンと原子・分子の衝突によるイオン化、電子移行そして電子及び核運動励起のメカニズムの理解、そして各々のプロセスが起る確率の計算を行っている。基礎になる衝突メカニズムの物理的原理を理解する事により、イオン-分子反応(ラジカル反応)を統一的に理解する基礎部分をなし、又放射線化学と生物学との橋渡しの役もなしている。これらの基礎無くしてより複雑な生体系反応の正確な理解は不可能であろう。

最後に、我々のグループでは、アルゴンヌ研究所の他の部門に属する放射線化学、生物学のグループとの共同研究及び米国内そして他国の研究機関との共同研究もいくつか進行中である。

## 「テクノロジー・トレンド」

藤 本 瞭 一

### 加藤・黒田研究室

粘土鉱物の層状構造中に有機物を挿入するインターカレーションは新素材開発の有力な手法として注目されているが、加藤・黒田研究室では固相反応でインターカレーション化合物(層間化合物)を作るのに成功した。同化合物は従来、水中に分散させた状態で行う湿式法でないと作れないとみられており、学術的にも、固相反応同士のインターカレーションの報告は初めて。

インターカレーションは機能性新素材の新しい有力手法として注目されているもの。粘土鉱物であるモンモリロナイト、ゼオライトやグラファイトなどの層状鉱物の横方向の薄い空間に、その特殊な形状に応じた機能を持った原子団を挿入、従来にはない安定的な機能性新物質が得られる。例えば、グラファイトに銅原子をインターカレーションしたものは導電性が向上し、光反応性が強いビオローゲンをを用いると、水の光分解が期待されるなど、国内ばかりでなく世界的にも研究が盛ん。

同研究室では有機モンモリロナイトを用いて高温で使用するグリースや、塗料の粘度向上などに関する研究を行っており、その一環として固相反応に取り組んできた。この方法は、乾式で、しかも原料有機物と層状鉱物を乳鉢中で混ぜ合わせるだけで効率よく作れるのが特徴。すでに、モンモリロナイトとアクリルニトリル、尿素、メタアクリルアミド、アルキルアンモニウムイオンなどの層間化合物を作ることに成功した。また、これらをX線回折や熱分析で調べた結果は従来法との差はなく、特性面でも遜色ないという。固相反応であることから、従来の湿式法と比較して取り

扱いが容易などの利点を持ち、工業的な製造技術として注目されている。

これまでの方法では、有機物を水溶液中に分散させ、それを乾燥させるなどの手法によっていたが、この方法では単純に混合・かくはんするだけで良いというわけで、これまで水に溶けないために層状化合物が作れなかった有機化合物のインターカレーションで新規物質の製造が可能になるほか、工業的には小ロット生産などに威力を発揮するものとみられる。

### 宮崎研究室

分子軌道法(MO)の産業利用が、製薬業界や化学企業などを中心に広がっている。これまで、どちらかという基礎化学分野とみられてきたMOだが、新薬開発の切り札とされるドラッグデザインで、MOを活用したコンピューターグラフィックによる薬原料物質の立体分子構造の決定が大きな役割を期待される昨今である。

宮崎研究室は応用化学科の中に置かれたものとしては、国内でも珍しいMOの研究室。MOはこれまで、基礎化学との見方が強かったが、今や化学産業の革新に向けたわが国産業界の基礎研究重視の流れの中で、有力な化学研究の実用的なツールとして幅広く利用されようとしている。「ニュー・ケミカル・エイジ」の幕明けの中で、その研究成果と学生の育成の実績には、さすがは早稲田大学、先見性があるとの評価が高い。

宮崎研究室では、米国のMOソフト供給のための学会組織である「QCPE」を通じてプログラムを入手、これを活用している。分子構造中の振動解析が中心テーマ。炭素原子のパイ軌道計算では励起状態のエネルギー状態を定量的に計算したり、分子構造をエネルギー状態から決定すること、