

平成28年度 新学術領域研究（研究領域提案型）中間評価結果（所見）

領域番号	2604	領域略称名	3D活性サイト
研究領域名	3D活性サイト科学		
研究期間	平成26年度～平成30年度		
領域代表者名 (所属等)	大門 寛 (奈良先端科学技術大学院大学・物質創成科学研究科・教授)		
領域代表者 からの報告	<p><u>(1) 研究領域の目的及び意義</u></p> <p>機能材料の多くは、物質の中のドーパントやヘテロ界面、ナノ物質などの局所的な構造体、すなわち「活性サイト」が機能発現の重要な役割を担っている。我が国は、その活性サイトを狙い撃ちし、原子分解能で3Dイメージングできる技術の研究開発で世界のトップにいる。「3D活性サイト科学」は、多くの分野の機能材料、最先端計算科学、次世代計測技術を融合させ、グリーンサイエンスやライフサイエンスなる壁を打破した、原子レベルで局所的な「活性サイト」を中心とした全く新しい物質科学を創成する基盤的新学術領域である。触媒、太陽電池、スピントロニクス材料、電子・光デバイス材料、そしてタンパク質分子等、極めて幅広い試料対象において、「活性サイト」がどのように周辺原子と協調し3次元的に機能発現しているのかを、計測根拠を持って深く探究し、新たな学理と新規デバイス創出の道筋を切り拓く。本領域は「活性サイト材料・物質の作製」、「活性サイトの解析と次世代3D原子イメージング技術の開発」、「理論による活性サイトの機能解明と予測・材料設計」、「応用研究・デバイス開発」の4班から構成され、これらの有機的連携をエンジンとして、「活性サイト」の探索・原理解明から「活性サイト」の構造設計や合成プロセス開発に至る領域活動を推し進める。基礎的な物質科学からデバイス開発につながる工学分野までの広範な波及効果が期待できる。</p>		
	<p><u>(2) 研究成果の概要</u></p> <p>「3D活性サイト科学」の学理構築に向けた多彩な連携研究が進められ、多くは予想よりも早く成果が上がっている。主要な成果として、①デバイス微細化を目指した高AsドーパSiにおけるサイト選択光電子ホログラフィー、②バイオホログラフィーシステム開発によるヘモグロビン活性サイトの原子像観測の成功、③有機ナノ触媒の表面精密解析による高活性協奏機能触媒表面の設計・開発、④酸化物高温強磁性半導体における強磁性の芽となる亜酸化ナノ構造体(サブオキシド)の発見、⑤原子分解能ホログラムと高精度ファン・デル・ワールス密度汎関数法開発による超伝導グラファイト層間化合物構造の精密決定、⑥グラフェン上に担持した単一有機分子の電子線位相コントラストイメージングなどがある。これらの成果を整理・統合すると、非常に困難と予測されたサイト選択性への拡張やタンパク結晶、一分子計測、を早期達成し、3D原子イメージング技術の飛躍的進歩を達成したと考えられる。材料側面からは、全く予測しえなかったナノ構造体や異常格子歪みの発見が材料合成に新たな視点を導入させた。また、活性サイト情報が直ちに高性能触媒合成に活用され、加速度的に研究が進展していることが分かる。実験と理論の連携は、活性サイト構造の最終構造決定と機能性解明の決め手となった。応用面では、デバイス微細化に向けた有益な情報が得られている。また、これらの研究を加速支援してきた解析プラットフォーム「3D_AIR_IMAGE」の開発も特筆すべき成果の一つである。</p>		

<p>科学研究費補助金審査部会 における所見</p>	<p>A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)</p>
	<p>本研究領域の設定目的の達成へ向けて、蛍光 X 線ホログラフィーを主なツールとして非周期系の局所構造を明らかにすることに取り組んでおり、個別の活性点構造を精密に解明するという分析的な立場で優れた研究成果が得られている。ヘモグロビン結晶の育成とそれを用いたホログラム測定などの注目に値する研究成果も上がっており、今後のより一層の進展が期待される。また、大型実験施設での長時間のビームタイムの獲得など、研究領域全体を活性化する活動にも成功しており、領域代表者および総括班による積極的な研究戦略の下、当初の計画よりも前倒しで進展している計画研究もあり、高く評価できる。</p> <p>審査結果の所見において指摘された、異分野間の有機的連携の強化による目標の共有化の点についても、数多くの総括班会議、報告会やサイトビジットの実施、共通実験プラットフォームの整備や国際誌での特集号の企画などを通して、総括班全体によって連携研究の強化を目指す取組が行われている。また、領域代表者の強力なリーダーシップの下、研究組織間の共同研究が積極的に行われており、公募研究の研究者が孤立することなく、数多くの共同研究が進展している。さらに、若手研究者の育成についても、情報交換会の開催や教科書の出版などを通して積極的に推進している。</p> <p>一方で、「3D 活性サイト科学」を標榜するための統一的な学理形成へ向けて、有効な活性点の近傍の構造を精密に解明するだけでなく、その特性の改変や向上に関する研究が進展することを期待したい。また、国際的な人的交流については、さらに積極的に行える可能性を検討する余地はあると考えられ、国内若手研究者の中長期の海外派遣や海外研究者の受入れなども視野に入れることが望まれる。</p>