

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・先端科学技術研究科・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。本研究領域は、その活性サイトを標的とし、原子分解能で3Dイメージングできる世界トップの技術を誇っている。「3D活性サイト科学」は、その計測技術による根拠をもって、グリーンサイエンスやライフサイエンスの壁を打破した、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次的に機能発現しているのかを、計測と最先端計算機科学を融合することによって深く探究し、新たな学理と新規デバイス創出の道筋を切り拓くこととした。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を狙った。</p>		
	<p><u>(2) 研究成果の概要</u></p> <p>「活性サイト」というキーワードを中心に、100名を超えるメンバーによる多彩な連携研究が行われ、その相乗効果に起因する特筆すべき幾つもの成果が得られた。代表的なものとして、①高濃度AsドーパSiにおける活性・不活性サイトの個別イメージングと活性化向上のため共ドーパ法の提案、②価数選択蛍光X線ホログラフィー技術の開発とタンパク質のサイト選択的構造解析への応用、③多環芳香族炭化水素結晶の界面構造及び電子物性の環数依存性の実験・理論的評価、④フリースタンディングなグラフェン上のPt単原子触媒のイメージングと機能、⑤遷移金属ドーパZnSnAs₂の電子状態計算と室温強磁性半導体の探索、⑥多波長中性子ホログラフィーの開発と応用、などがある。特に、①と⑤は機能改善に関する提言まで進めることができ、当初の応用面での目標を達成することができた。また、酸化物高温強磁性半導体における亜酸化ナノ構造体、Si中のAs-Bナノ活性構造体については、たんぱく質光化学系IIにおけるMn₄CaO₄クラスターとのスケール的な共通点を見いだすことができ、バイオと無機材料の垣根を越えて複合的視点から、高機能「活性サイト」の理解に関する有益な議論ができた。本研究領域の海外での発展を図るために世界拠点を設置し、複数の機関と多くの国際共同研究に結び付けることができた。継続的な研究発展に必要な大型施設での基盤整備も推し進めた。</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、期待どおりの成果があった)</p>
	<p>本研究領域は、軟 X 線および中性子線を用いた原子分解能ホログラフィーの技術により、触媒や太陽電池、生体分子などにおける周期性を持たない活性サイトの構造を 3次元で観測、理解、制御することを目的とした。大型放射光施設を活用した本技術の確立により、研究者の長年の夢であった活性サイトの局所構造解析と機能発現の原理解明がなされ、例えば半導体ドーパントの解析やミオグロビン等の金属タンパク質の構造解明において顕著な成功が見られた。さらに、ナノメートルオーダーでの時空間対称性の変調により活性サイトとしての機能が発現することを明らかにするなど、世界をリードする学術的進展も認められる。また、実験と理論の連携から不活性サイトを活性化する概念・技術を構築するなど、機能制御の面においても特筆すべき成果が得られている。これらに加え、活性サイトイメージングソフトウェアの開発供給や国際標準化のための活性サイト表記法の提案もされており、いずれも本分野の世界的な発展に貢献した点として高く評価されるべきものである。また、シンポジウムの開催や共同研究拠点の設置を海外で精力的に行っている点など、国際展開に関しても素晴らしい面が見られる。以上を鑑み、研究領域の設定目的に照らして期待どおりの成果があったと認められる。</p> <p>一方で、活性サイトを包括する学理の構築や応用への展開、将来性や波及効果に関する展望に関してはやや不明確な部分があった。空間規則性を持たない活性サイトの構造解析は今後ますます重要な役割を担う領域であるため、今後、新しい学理の確立と、さまざまな分野への技術の普及、発展を期待したい。</p>