

平成 26 年度 新学術領域研究（研究領域提案型）審査結果の所見

研究領域名	3D活性サイト科学
領域代表者	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）
研究期間	平成26年度～平成30年度
科学研究費補助金審査部会における所見	<p>各種機能材料における特異な機能の多くは、局所的な不純物や欠陥あるいは界面などの「活性サイト」で発現する。本研究領域は、材料中に不規則に存在する活性サイトを原子分解能で3次元的に撮像できる独創的な計測技術を核に、高度な試料合成分野と先端計算機科学分野を連携させて、活性サイトにおける機能発現の学理を追求し、従来とは異なる手法に基づいた新規デバイス開発を目指している。日本が世界をリードしてきた各種原子分解能ホログラフィー技術と原子像再生理論を結集させて共通基盤化を図る提案は革新的であり、高く評価される。また、電子材料から生体高分子まで非常に幅広い材料の3次元活性サイトを研究対象に含め、第一原理計算を駆使した計算機科学との緊密な連携により、特異な機能を解明する計画には大きな成果が期待できる。</p> <p>研究組織は、4種の研究項目の下、合計13の計画研究が計画され、若手中心の研究代表者が設定されている。計画研究の数が多く大規模な研究組織であることや Spring-8 など大型研究設備の利用が主となることから総括班の果たすべき役割は非常に大きい。本領域代表者は高い研究実績に加え、大学や学会で運営に関わる要職を務めており、領域運営に関する実績は十分と判断されるが、本研究領域の遂行には強いリーダーシップが求められる。参画する研究者を見ると、高い実績を誇る無機材料の活性サイト研究に比べて、全く異質な原理や概念が支配する可能性のある生体高分子や新規デバイス開発に携わる層が薄いという懸念が残る。公募研究による強化だけでなく、異分野間の有機的連携を強化して目標を共有化するための工夫が必要と思われる。</p>