

【新学術領域研究（研究領域提案型）】

理工系



研究領域名 3D活性サイト科学

奈良先端科学技術大学院大学・物質創成科学研究科・教授

だいもん ひろし
大門 寛

研究課題番号：26105001 研究者番号：20126121

【本領域の目的】

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。

【本領域の内容】

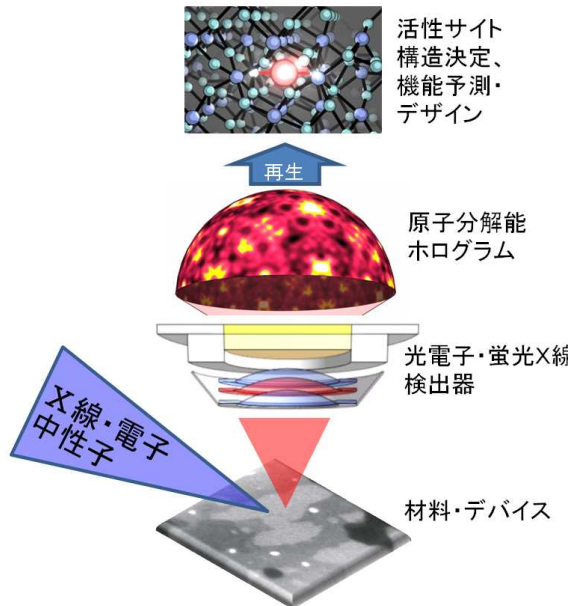


図1 「3D活性サイト科学」の研究の流れ

本領域では、以下の4つの班に区分し、13の計画研究と27年度以降の公募研究の推進により目標を達成する。

- A01: 活性サイト材料・物質の作製
- A02: 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
- A03: 理論による活性サイトの機能解明と予測・材料設計
- A04: 応用研究・デバイス開発

また、領域全体として、以下の4つの研究項目を重点的に推進する。

- ①本領域が誇る3D原子イメージング法を、タンパク質分子、有機太陽電池、触媒、スピントロニクス材料、電子・光デバイス材料等の多くの機能性材料の「活性サイト」構造決定に適用し、第一原理計算も駆使、「活性サイト」の機能性を明らかにする。
- ②困難とされたソフト・バイオ系マテリアル計測や、触媒反応等での高速時分割計測など次世代の3D原子イメージング技術を開発・実践する。
- ③得られた情報を一元化し、活性サイト原子構造データベースを構築する。
- ④「活性サイト」の役割を深いレベルで統合的に理解する新しい学理を創成し、全く新しい材料創製への知見を世界に提供する。

【期待される成果と意義】

「3D活性サイト科学」は極めて重要と認識されながら、解明のための研究領域が存在しなかった未開の分野である。本新学術領域を発展させ、研究者間の交流と活性化を図り、異分野の研究者が多数、本分野に参画することによる相乗効果が大きく期待できる。生体物質も含め、多くの機能性材料は「活性サイト」を有しており、本領域の発展が、物質の機能解明や新規材料開発に大きな貢献をもたらすことは自明である。例えば、最適なドーピング技術の探索による革新的パワーデバイス開発や、光合成タンパク質分子における金属クラスターの役割の解明等が挙げられる。

本領域の発展により、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。また、ここでの成果を海外や国内外の産業界へ発信することにより、国際的存在感を確固たるものにし、日本の科学技術の大幅な向上・強化を目指す。

【キーワード】

ドーパント、界面、ナノ構造体、原子分解能ホログラフィー、電子回折イメージング、触媒、ソフトマテリアル、無機材料、タンパク質分子

【研究期間と研究経費】

平成26年度～30年度
1,145,800千円



Title of Project : 3D active site science

Hiroshi Daimon
(Nara Institute of Science and Technology,
Graduate School of Materials Science, Professor)

Research Project Number : 26105001 Researcher Number : 20126121

【Purpose of the Research Project】

Active sites, such as dopants, interfaces, and nano-structures, play an important role in many functional materials. To date, Japan has been the world leader in the research and development of 3D atomic imaging methods. The “3D active site science” project will combine advanced materials and computational sciences to develop a new generation of microscopes that focus on active sites, pushing the boundaries of conventional life sciences and green technologies, pioneering a new field of materials science. The imaging tools will be used to study how the active sites interact with the surrounding atoms in solar cells, proteins, and catalytic, spintronic, and optoelectronic materials, among others, paving the way to the development of new functional materials and devices.

【Content of the Research Project】

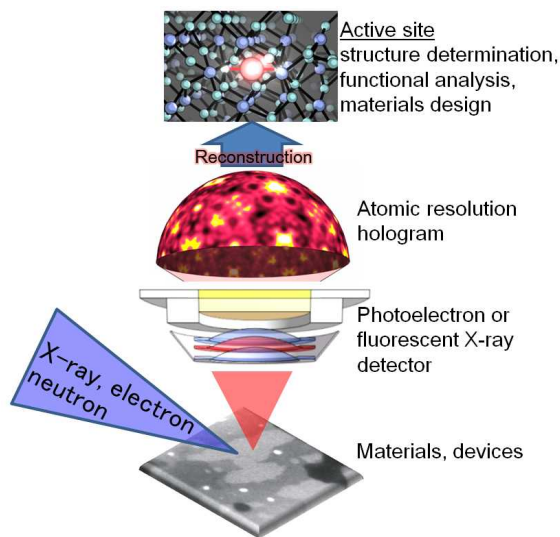


Fig.1 Research concept of the “3D active site science” project.

The “3D active site science” project has the following four branches with 13 research groups.

- A01: Fabrications of materials.
- A02: 3D active site imaging and analysis.
- A03: Active site modeling and design.
- A04: Device development and applications.

The focus will be on the following four topics:

1. Clarify the functional characteristics of active sites in proteins, organic solar cells, catalysts, optoelectronic materials, etc. by combining 3D atomic imaging methods with modeling and first-principles calculations.
2. Develop next-generation 3D imaging techniques for soft- and biomaterials, catalysts, and for time-resolved studies.
3. Construction of a 3D active site structure database.
4. Determine the relations between active site structure and materials functions. Apply the new scientific principles in novel device design.

【Expected Achievements and Significance】

“3D active site science” is a new scientific frontier that carries the potential of major advances in solid state physics and materials science. Bringing together researchers from many diverse fields is expected to provide the necessary synergy for achieving materials design breakthroughs. Since most of functional materials contain active sites, the project is expected to make a broad contribution to solid state physics and materials science, e.g., in developing a new generation of power devices and elucidating the role of metal clusters in protein molecules. Advances in this project will produce ripple effects in various related fields of device engineering and fundamental sciences, strengthening the technological and academic standing of Japan in the world.

【Keywords】

dopant, interface, nano-structured materials, atomic resolution holography, electron diffractive imaging, catalyst, soft material, inorganic material, protein molecule

【Term of Project】 FY2014-2018

【Budget Allocation】 1,145,800 Thousand Yen