

3D 活性サイト科学のコンセプト

Concept of 3D Active-site Science

奈良先端大物質, °大門 寛

Nara Institute of Science and Technology (NAIST), °Hiroshi Daimon

E-mail: daimon@ms.naist.jp

「3D 活性サイト科学」¹⁾は、平成 26 年度から 5 年計画で発足した文科省の新学術領域研究(研究領域提案型) 科研費のプロジェクトである。ここで「活性サイト」とは、ドーパント、界面、分子中の金属原子等、機能性材料の機能発現において本質的に重要な役割を担っている微量成分原子のことを指す。これらの原子は、結晶の中の置換位置や格子間位置を占めていたり、空孔や格子原子と結合して新たな構造を作っていて、その局所構造によって特殊な性質を出していると考えられている。しかしながら、これらの活性サイトは周期性を持たないため、通常の原子構造解析手法である X 線回折法では解析できない。このような非周期の構造を原子レベルで解析できる手法として最近日本で「立体原子写真法」、「光電子ホログラフィー」、「蛍光 X 線ホログラフィー」、「中性子ホログラフィー」、「表面・界面 (CTR) ホログラフィー」、「ナノ構造体 (電子回折) イメージング」など多くの原子分解能ホログラフィーが開発され、世界をリードしている。新しいホログラフィー解析ソフト³⁾も開発され、解析できる原子の数とその位置精度が大幅に向上している。「3D 活性サイト科学」では、これらの手法による局所構造解析と第一原理計算を連携して、触媒、太陽電池、スピントロニクス材料、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解明し、計測根拠のある深い探究で「局所構造の物質科学」という新たな学理と新機能材料創成の道筋を切り拓こうとしている。

領域の発足後 3 年になり、無機物質からバイオ物質まで多くの成果が出てきている。図 1 にグラファイト層間に K と Ca をインターカレートした超伝導体の解析例³⁾を示す。図 1 左上の光電子ホログラム (回折パターン) からホログラフィー変換して得られた 3 次元の原子配列を右上図に示した。超伝導転移温度は CaC_6 に似た高い温度を示しているが、構造は転移温度の低い KC_8 になっていることが明らかになり、Ca 原子添加の影響は構造的変化ではなくて電子的変化であることが明らかになった。講演ではその他の成果についても紹介する。

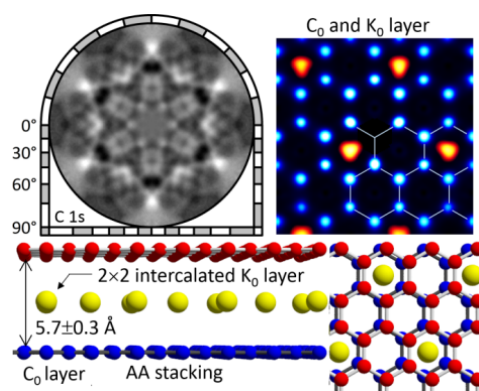


図 1 光電子ホログラフィーによるグラファイト層間化合物超伝導体の局所構造解析の例³⁾

- 1) <http://www.3d-activesite.jp/home>
- 2) T. Matsushita, *et al.*: Europhys. Lett. 71, 597 (2005).
- 3) F. Matsui *et al.*, Scientific Report 36258 (2016).