

# 3D 活性サイト科学の紹介と原子層科学との接点

奈良先端大

大門 寛

Introduction of “3D Active-Site Science” and its connection to “Science of Atomic Layers”

*Nara Institute of Science and Technology (NAIST)*

Hiroshi Daimon

新学術領域研究（研究領域提案型）「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。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周りの局所構造のことである。例えば、Si などの半導体における不純物は、ドープしただけでは機能せず、加熱して Si の置換位置に入ることによって初めて p 型や n 型として機能すると考えられているが直接観測した例は無い。金属錯体触媒や光合成タンパク質分子における中心金属原子の周りの原子の動きがわかれば反応効率を高めることができる。このように活性サイトは機能性物質において本質的に重要であるが、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ていなかった。

「3D 活性サイト科学」では、「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」、「表面・界面（CTR）ホログラフィー」、「電子回折イメージング」など、近年日本で開発された原子分解能ホログラフィーの手法を用いて、このような非周期局所構造を原子レベルで解析する。「活性サイト」がどのように機能発現しているのかを、計測根拠をもって深く探究し、「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く。

無機からバイオ物質までの極めて幅広い試料を対象にしているため、多くの分野との連携を期待しているが、特に「原子層科学」領域とは試料や興味の高いため、多くの融合研究が期待される。例として、図 1 に SiC 上に成長したグラフェンの光電子ホログラフィーによる解析結果を示す[2]。前駆体層、バッファー層とその上のグラフェン層とがきれいに再現されており、前駆体層とバッファー層の構造、バッファー層とその上のグラフェン層との積層関係などが初めて直接明らかになった。

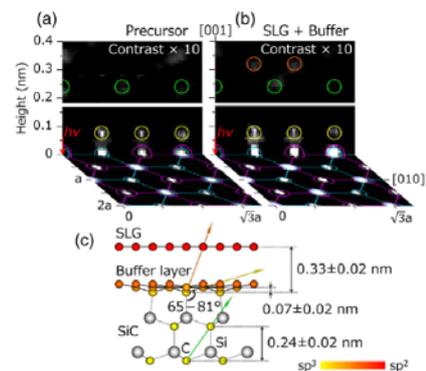


図 1 光電子ホログラフィーによる SiC 上に成長したグラフェン層の解析例 [2]。

[1]. <http://www.3d-activesite.jp/home>

[2]. Hiroshige Matsui, Fumihiko Matsui, Naoyuki Maejima, Tomohiro Matsushita, Hiroshi Daimon: *Surface Science* 635, 1-4, (2015).