

活性サイト周りの 3D 光電子分光イメージング

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

今年 2014 年は世界結晶年であり、ラウエやブラッグが開発した X 線回折の恩恵を受けて無機材料から有機・タンパク質構造まで立体的な原子配列が分かるようになり、物質科学は飛躍的に発展を遂げました。原子配列を知ることは物性解明の基礎であり、機能発現機構を原子レベルで理解することから、物質科学の進化や応用・産業につなげていくことがかろうになりました。しかしながら、結晶にならない物質の 3 次元的な原子配列を見る方法はほとんどありません。物質のほとんどは結晶ではないし、また結晶に不純物(ドーパント)を添加することで、初めて機能が発現する場合も多くあります。例えば、シリコン結晶にドーパントを添加して、N 型、P 型半導体をつくることは普通に行われていますが、結晶の中でドーパントの原子がどのように配列しているかは X 線回折では見ることはできません。これまでは、ドーパントの周りの原子配列がわからないまま、手探りの状態で最適なドーパ条件を探していました。結晶中のドーパント、触媒の反応中心、界面の原子構造、光合成の反応中心などの「活性サイト」は、現代のテクノロジーにとって重要であるにも関わらず、その立体的な原子構造などを直接見るのは困難です。

このような非周期構造の原子配列を直接 3 次元的に解明する手法は、1990 年代に原子分解能ホログラフィーとして開発されましたが、精度が上がらず、発展していませんでした。最近、日本で実験的および理論的な解析法の開発が進み、原子像の再現精度が飛躍的に向上しました。「光電子ホログラフィー」、「蛍光 X 線ホログラフィー」、「CTR 散乱」、「中性子ホログラフィー」、「電子線回折イメージング」などの手法により、これらの結晶でない物質の原子構造を可視化できます。これらの研究グループが集まって、「活性サイト」の周りの原子構造解明と、その結果としてもたらされる「局所的な物性科学」を開拓する「3D 活性サイト科学」が科研費の新学術領域として発足しました。無機材料、有機材料、バイオ材料など非常に幅広い分野において、物性機能を発現する「活性サイト」を観測し、第一原理計算と絡めて機能発現機構を理解し、より高機能な物質を生成して、産業応用へとつなげていこうとしています。「3D 活性サイト科学」は、これまでの「結晶」の科学では扱えなかった「非結晶局所原子構造」を対象としてその物理を究明する「活性サイトの科学」を創成します。

講演では、「光電子ホログラフィー」を中心として、これまでの日本の放射光を用いた原子分解能ホログラフィーの歴史と最近の発展、および将来の期待について紹介します。

URL: <http://www.3d-activesite.jp/home>

