

X線自由電子レーザー利用推進計画

～SACLA の戦略的な供用開始に向けて～
(中間報告)

<案>

削除: 素

平成23年6月27日

X線自由電子レーザー利用推進戦略会議

目 次

○ X線自由電子レーザー利用推進計画（概要）

1. X線自由電子レーザー利用推進計画について	4
2. 戦略的利用推進に係る基本的考え方について	6
(1) 重点戦略分野について	6
(2) 利用時間の配分について	8
(3) 利用者選定の方針について	9
(4) 利用支援及び運営の方針について	10
(5) 産業利用の促進について	12
(6) ユーザーコミュニティについて	12
(7) 成果の公表及び普及・啓発活動について	13
(8) 他施設等との連携について	14
(9) 今後の整備方針について	15
(10) 検証・評価と利用推進計画の見直しについて	16

○ 別紙（重点戦略分野と重点戦略課題について）

○ 参考資料

・SACLAに係る研究開発の流れについて

・SACLAの科学技術政策における位置づけについて

・SACLAの今後のスケジュール等について

・X線自由電子レーザー利用推進戦略会議について

X線自由電子レーザー利用推進計画(概要)

利用推進計画について

- SACLA が目指すべき主な目標は、課題解決型研究開発の実現、ライフ・グリーンイノベーションの推進、国際頭脳循環の拠点形成である。
- 本中間報告は、戦略的な研究推進体制を構築するため、SACLA の供用開始(24年3月)以降の推進方策等について優先順位を付け取りまとめたものである。

戦略的推進に係る基本的な考え方等について

- 「重点戦略分野」及び「重点戦略課題」を設定(別紙参照)し、早期成果の創出と実験手法の確立・開拓を進める。当面は、設置者、登録機関、課題提案者、その他利用者等が一体となり利用研究を推進する。
- 当面、成果非専有(公開)利用を原則とし、重点戦略課題を優先しつつ一般課題も進める。また、開発・利用等に関する技術・ノウハウ等を蓄積し、国際公共財として国際的な研究拠点の形成を図り、世界のサイエンスの発展を先導する。
- 公募は年2回とするが、透明性及び公平性を確保しつつ、状況に応じて臨時公募を行うなど装置の状況や課題の特徴等に応じてある程度柔軟に設定するとともに、運営状況や利用者等のニーズ等を踏まえ適時見直しを図る。
- SPring-8 でのノウハウを活かしつつ、利用者視点に立った運営を基本とする。利用経験を有する国内の研究者等は非常に限られており、登録機関は、設置者や課題提案者等と協力することにより、SACLA に特化した支援体制の確立を目指す。また、支援者等の育成は大変重要な課題であり、設置者や大学等とも連携・協力しつつ、人材育成に努めることが必要である。
- 当面、重点戦略課題の研究グループに、産業界の積極的な参加を促し、利用手法や成果を共有していくことで、今後の産業利用の拡大につなげることが重要である。
- 産業界を含む全てのユーザーが参加するコミュニティにより、利用研究の開拓・推進を図ることが望まれ、新規参入がしやすい環境の醸成を図ることが必要である。
- 専用ホームページで失敗事例も含めた成果等を分かりやすく公表し利用者等の習熟に貢献するとともに、登録機関が行う講習会等により潜在的利用者等の掘り起こしを図る。
- 早期成果創出に必要な装置等の開発・整備を最優先し、SACLA の特徴となる京速コンピュータ「京」との連携や SPring-8 との相互利用実験基盤の整備を優先的に進めるとともに、LCLS や European XFEL と連携して装置性能の向上等に努める。
- 研究の進捗状況等を踏まえ、検証・評価を行い利用推進計画の見直しを行う。

削除: において

削除: 自らも学びつつ知識・技術・ノウハウ等の獲得・向上に努めることが必要である

1. X線自由電子レーザー利用推進計画について

はじめに

- 平成24年3月に供用が予定されるX線自由電子レーザー施設(以下「SACLA」という。)は、これまで見えなかった極微細構造の解明やこれまで捕捉できなかった超高速動態の解明などを通じて、世界最先端の研究開発の推進と幅広い分野への活用が期待される先端研究施設である。
- 平成22年度には本体施設が完成し、23年2月よりビーム発振調整を開始、6月7日16時10分に世界最短波長となる0.12ナノメートルのX線レーザーの発振を実現した。引き続き、供用開始に向け更に波長0.06ナノメートルの実現を目指し、調整作業を進めている。
- 第4期科学技術基本計画を見据えた SACLA が目指すべき主な目標としては、課題解決型研究開発の実現や、革新的創薬技術の開発や新エネ技術開発などのライフ・グリーンイノベーションの推進、国際頭脳循環の拠点形成が挙げられる。
- SACLA が、イノベーションの創出や国際競争力の強化に加え、将来につながる新たな科学の開拓にも貢献するよう、戦略的な研究推進体制を構築することが重要である。

(戦略会議の位置づけ及び目的)

- 23年1月に「X線自由電子レーザー利用推進協議会」(以下「協議会」という。)が取りまとめた「X線自由電子レーザー利用推進方針」(以下「推進方針」という。)において、「X線自由電子レーザー利用推進戦略会議」(以下「戦略会議」という。)の設置の必要性が提言された。
- 戦略会議においては、24年3月に予定される「SACLA」の供用開始以降の推進方策等について、検討することが求められている(供用開始までは、推進方針に基づき進める)。
- 具体的には、推進体制、登録機関が行う課題公募や選定の基準、優先分野・課題、利用時間の配分、産業利用の推進、ユーザーコミュニティー、今後の整備方針、等のあり方について検討し、「X線自由電子レーザー利用推進計画(仮称)」(以下「推進計画」という。)を策定することが求められている。本戦略会議としては、SACLA の供用開始に向け、推進計画を策定することとする。

(他の委員会との関係)

- 登録利用促進機関(以下「登録機関」という。)が利用者選定等のために設置する選定委員会は、本戦略会議の方針等を踏まえ、利用者選定に関する具体的方針や課題選定等について検討し、登録機関に意見を述べるものとする。

- ・ 設置者(理化学研究所)が設置する利用装置検討委員会は、23年度に実施している新規提案募集課題の状況等について、戦略会議に説明するとともに、必要に応じて課題内容の見直しを行うものとする。

(中間報告の位置づけ)

- ・ 本中間報告は、23年9月には利用制度等を決定する予定であることから、優先順位を付けて検討を行い、取りまとめたものである。
- ・ 今後、必要に応じて供用開始までに更に検討を進めるものとする。

(参考:これまでの経緯)

平成18年 2月	「次世代放射光源計画評価報告書」(科学技術・学術審議会研究計画評価部会次世代放射光源計画評価作業部会)
平成18年 2月	「X線自由電子レーザー利用推進協議会」設置
平成18年 3月	「利用推進方針」とりまとめ
平成18年 4月	「X線自由電子レーザー利用推進研究課題」(委託事業)開始
平成21年 2月	「X線自由電子レーザー利用推進研究課題」中間評価
平成23年 1月	「X線自由電子レーザー利用推進研究課題」成果発表 「X線自由電子レーザー利用推進方針」とりまとめ
平成23年 3月	「X線自由電子レーザー利用推進戦略会議」設置

2. 戦略的利用推進に係る基本的考え方について

(1) 重点戦略分野について

○重点戦略分野の設定について

- ・ SACLA は、多くの潜在的利用者等にとっては、その利用方法や利用可能性が未知であることも考えられるため、まずはこれまで SACLA の利用装置の開発等に当たってきた研究者等や設置者・登録機関が先導して成果を創出し、その成果を積極的に発信していくことが重要である。
- ・ そのため、当面2～3年間は、設置者、登録機関、課題提案者、その他利用者等が一体となり利用研究の推進にあたることを最優先に進めるべきである。
- ・ これに加えて、SACLA は、供用開始当初はビームラインが2本のみであり、また利用時間も有限であることから、戦略的に重点分野(以下「重点戦略分野」という。)を設定し、利用研究を推進していくことが必要である。

削除: 可能性があ

○重点的に推進すべき分野について

- ・ SACLA を利用した研究の実施には、人類がまだ経験したことのない光である SACLA の光に対応できる利用装置が必須である。そのため、重点戦略分野として進める利用研究は、これまで協議会の方針等に基づき進められてきた利用推進研究課題及び平成23年度の調整運転期間中に設置者を中心に進められる新規提案募集課題にて開発される装置を最大限活用するものであることが必要である。
- ・ また、取り組むべき利用研究は、先行する米国施設の後追いであってはならず、学術利用から産業応用まで幅広い研究者等が SACLA を活用することにより、第4期科学技術基本計画に向け取りまとめられた「科学技術に関する基本政策について」(平成22年12月、総合科学技術会議答申)及び「科学技術に関する基本政策について見直し案」(平成23年6月14日パブリックコメント開始)に掲げられているグリーンイノベーションやライフイノベーションの創出や産業競争力の強化に寄与し、我が国の科学技術の発展や国際競争力の強化に大きく貢献することが重要である。
- ・ SACLA の大きな特徴としては、①原子・分子レベルでの超微細構造解析(例えば1つのタンパク質でも構造解析が可能)、②化学反応等の高速な動態・変化の瞬時の計測・分析(例えば細孔に分子が吸着される際の細孔と気体分子の相互作用のダイナミクスの解析)であり、これらの特徴を十分活かし、他の放射光施設では実現できない成果の創出が期待される。
- ・ そのため、以下のような重点戦略分野等を設定することにより、SACLA の戦略的な利用を図ることとする。

(重点戦略分野・重点戦略課題の設定)

- 重点戦略分野として、利用推進研究課題における技術開発の2つの大きな柱であった、①「生体分子の階層構造ダイナミクス」及び②「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」を設定する(詳細は別紙参照)。
- また、両分野において具体的な成果の早期創出が期待され得る研究課題を「重点戦略課題」として、以下のように設定する。これら課題への取組を通じて、実験手法の確立・開拓が十分に進むことを期待する。
- なお、これらの課題については、当面3～5年程度を念頭に重点的に進めることとし、研究開発の進捗状況や国内外の状況等に応じて適宜見直しを図っていくこととする。

①「生体分子の階層構造ダイナミクス」の重点戦略課題は以下のとおり。

- 創薬ターゲット膜タンパク質のナノ結晶を用いた構造解析
- 細胞全体及びその部分の生きた状態でのイメージング
- 超分子複合体の一分子構造解析
- 一分子X線回折実験と構造解析とスパコン解析を融合させたダイナミクス研究
- ポンプ-プローブ法を適用した動的構造解析

②「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」の重点戦略課題は以下のとおり。

- 気相・溶液・固相反応ダイナミクス
- 界面反応の超高速過程
- 電荷発生・電荷移動ダイナミクス
- 極端条件下の超高速過程
- 動的 X 線分光科学

(重点戦略課題に対する支援について)

- 国は、重点戦略課題として取り組む利用研究に対し、必要な支援を検討する。特に、今後SACLAの供用を促進するにあたっては、早期に先導的な成果の創出を図ることが当面の最重要課題であることから、これを円滑に実現させるために必要な支援を適切に行っていくことが求められる。その際、先行する米国 LCLS における取組状況を勘案することが重要である。
- 登録機関は、以下のような重点的な支援を実施することとする。
 - 円滑に実験・研究を行えるよう、例えば装置の構成変更等に機動的に対応するなどの重点的な利用支援を行う。

削除: ナノ結晶及び一分子構造解析をスパコンで融合させた原子分解能ダイナミクス研究

削除: 光感受性タンパク質にポンプ-プローブ法を適用した動的構造解析

削除: 原子分解能

削除: 超分子複合体の一分子構造解析

削除: 細胞全体及びその部分の生きた状態でのイメージング

削除: 界面・生体

削除: 非晶質・局所構造の超高速過程—原子・分子動画—

削除: 設置者や課題提案者等と協力しつつ知識・技術・ノウハウ等を蓄積する。また将来の支援体制の確立も念頭に置きながら、

- ▶ 各重点戦略課題に対応する成果報告会や勉強会等を開催し、研究グループの形成を図り、早期の成果創出に資する。

・ また、登録機関は、設置者や課題提案者等と協力することにより、SACLA に特化した支援体制の構築を目指す。

(重点戦略課題の選定について)

- ・ 重点戦略課題に該当する研究課題については、利用者選定にあたってその重要性に鑑み優先的に採択されることが望ましいが、その科学的妥当性等については登録機関において他の一般課題と同様の枠組みの下で審査することとする。

(重点戦略課題の進捗の評価について)

- ・ 重点戦略課題については、その進捗や成果等について、登録機関が評価し、戦略会議に報告することとする。
- ・ なお、これら設定した重点戦略課題の所期の目的が達成された際には、より利用者側のニーズを踏まえた課題設定へと変更することが望ましい。

(2) 利用時間の配分について

○重点戦略課題/一般利用課題の配分について

- ・ (1) で述べた通り、重点戦略課題に該当する研究課題については、利用者選定にあたってその重要性に鑑み優先的に採択されることが望ましい。しかしながら、重点戦略課題に取り組む利用者等であっても、限られたビームタイムの中、競争的環境下で効果的かつ効率的に研究を行うことが重要であり、また一般課題の利用者等に対しても広く門戸を開いていることも重要である。
- ・ そのため、利用時間の設定にあたっては、重点戦略課題に特別の枠を設けず、登録機関において他の一般課題と同様の枠組みの下で選定を実施することとする。

○成果専有枠の設定について

- ・ SACLA は共用施設であり、供用開始以降広く研究者等の利用に供するため、その利活用方法や成果等を積極的に発信していくことが求められる。
- ・ そのため、当面、成果非専有(成果公開)利用を原則とする。
- ・ 成果専有(非公開)利用については、今後、SACLA の利活用方法等についての知見等がある程度蓄積し、成果専有利用希望者が一定程度増えた段階で、産業利用のニーズなど内外の状況も踏まえつつ、検討を進めることが適当である。
- ・ しかしながら、例えば自ら新たなビームラインを建設し、その利用枠の多くを共用に提供するなど、他の利用者等にとっても十分な利点がありユーザーコミュニティ

の理解が得られると考えられる場合には、その時点の状況を踏まえつつ、成果専有利用を認めるか否か個別に検討する。

○海外研究者等との共同研究の推進について

- ・ SACLAは、我が国の国家基幹技術として、重点的な投資の下に整備されたものであり、今後、戦略的な利活用を進めることが求められている。
- ・ XFELは、先行する米国の LCLS、現在整備中である欧州の European XFEL、我が国の SACLA の3施設のみであり、成果の早期創出に向けて世界的な大競争状況にある。
- ・ 我が国の SACLA は、日本独自技術の結晶であり、上記3施設内で最もコンパクトかつ低コストで、品質のよいX線を発振することができるものである。今後、新しく建設を検討している国にとっては、魅力的なモデルの一つともなりうるものである。
- ・ 今後、この分野で世界をリードし、将来の海外市場への売り込みも視野に考えると、X線自由電子レーザー施設の開発・製作・調整・利用に関する国内の技術・知識(知的財産)・ノウハウ等を蓄積していくことが、非常に重要となる。
- ・ SACLA は多額の国費を投じた我が国の戦略施設であるとともに、頭脳循環の核として我が国における国際的な研究拠点となり、世界のサイエンスの発展を先導していくことが期待される重要な基盤施設である。
- ・ 米国 LCLS においては、現在、利用者の約6割が海外からの研究者等であり、世界中から優秀な頭脳が結集し、新たなサイエンスの開拓を進めている。
- ・ SACLA が世界的な研究拠点へと発展していくためには、内に閉じるのではなく、世界に開かれた国際公共財として活用されていくことも重要であり、積極的に日本に技術を発信していくことが必要である。
- ・ 当面の間、海外研究者等については成果非専有(公開)を原則として利用できるものとする。その際、国内研究者がコンタクトパーソンを務めることとする。

(3)利用者選定の方針について

○課題選定基準の基本的な方針について

- ・ 重点戦略課題及び一般課題のいずれについても、登録機関が公募し選定するものとし、重点戦略分野に係る提案課題の採択を優先するものとする。
- ・ 全ての課題に共通する採択の条件としては、以下のような点を考慮することが適当である。
 - ・ SACLA でなければ実施が不可能な課題であること
 - ・ 最先端の科学技術的価値があること(斬新性、革新性を有すること)
 - ・ SACLA の新たな可能性の開拓に貢献すること

- ・学術的貢献度が高いこと
- ・今後の産業利用の推進に貢献すること
- ・重点戦略分野については、上記に加え、例えば重点戦略課題解決に向けた道筋が明確であるか、といった点も考慮されることが適当である。

○ 供用開始後の募集及び選定の計画・方法について

- ・ 募集及び選定期間については、設置ビームライン本数や想定される各実験ハッチの有効ビームタイム等の状況を踏まえ、また課題毎の特徴や状況等に応じてある程度柔軟に設定することが重要である。
- ・ SACLA の利用期間は、隣接する SPring-8 の利用期間も考慮し、また理化学研究所により策定される運転計画に基づき、年 2 回の公募を行い、公募開始から利用者選定まで速やかに行えるよう配慮する。
- ・ また、同一利用期にビームタイムを複数回配分し、初回の利用実験結果を迅速に次の利用実験に反映させるような仕組みも考えられる。
- ・ 更に、ビームタイムを有効に活用するため、状況に応じて、臨時の公募枠を行うことも考えられる。
- ・ 採択された課題の「有効期間」については重点戦略課題及び一般利用課題のいずれについても、基本的に SPring-8 と同様の半年とする。
- ・ 以上を踏まえると、供用開始から当面の間は簡素な利用制度で運用しつつ、今後の運営状況や利用者等のニーズ等を踏まえ、選定委員会等の意見を聴きつつ、適時見直しを図ることが適切であると考えられる。なお、募集及び選定の計画及び方法については、透明性及び公平性を確保しつつ、利用者等に十分な周知を行っていくことが必要である。

(4) 利用支援及び運営の方針について

- ・ SACLA は、特定放射光施設として、利用者本位の運営を行うことが設置者及び登録機関に求められる。
- ・ また、今後も運営に巨額の資金を必要とすることや昨今の国の財政状況等も踏まえ、これでの経験等も十分に活かしつつ、可能な限り効率的な運営を継続的に図っていくことが必要である。
- ・ その際、一般の電力供給の逼迫等に鑑み、節電対策を進めることも重要である。

○ 運転スケジュールについて

- ・ 限られた予算を効果的かつ効率的に有効活用することが重要であり、SPring-8 でのノウハウを活かしつつ、利用者視点に立った運転が求められる。
- ・ その際、先行する米国 LCLS の運転・運営の状況を参考にすることも重要である。

○利用支援について

- ・ XFEL施設の利用経験を有する国内の研究者等は非常に限られており、SACLAは全くの新しい施設・装置であることから、利用者等に対する利用支援は大変重要なものである。新たな参入を促していくためにも、コーディネート機能の強化を図っていくことが求められる。
- ・ また、当面の間は、設置者、登録機関、課題提案者、その他利用者等が一体となり利用研究の推進にあたることから、登録機関は、設置者や課題提案者等と協力することにより、SACLAに特化した支援体制の構築を目指す。
- ・ SACLAの施設情報や利用制度等に関する情報支援については、SPring-8における様々な情報支援ツールやノウハウを活用しながら、必要に応じてSPring-8と一体的に行うことが重要である。

削除: 将来の研究支援体制の確立も念頭に置きながら、知識・技術・ノウハウ等の獲得・向上に努めることが必要である。

○利用支援業務を行う者等の人材育成方策について

- ・ SACLAは、国内唯一の施設であり、XFELに習熟している研究者等は非常に限られていることも踏まえると、支援者等の育成は大変重要な課題であり、今後の利用研究の成果の創出にも大きな影響を及ぼすものである。
- ・ そのため、国においては、利用支援業務が適切に行えるよう必要な支援を継続的に行うことが必要である。
- ・ 登録機関は、設置者と協力し、また大学等とも連携しつつ、人材育成を積極的に進めることが必要であり、より充実した支援ができるよう常に支援業務の質の向上等に努めることが重要である。このため、当面は、設置者とも連携・協力しつつ、技術支援要員に可能な限り現場経験を積ませることが重要である。

○登録機関と設置者の連携等について

- ・ 設置者は、重点戦略分野及び重点戦略課題の推進にあたり、必要な研究及び施設・設備の整備を行う。また、施設・設備等の整備については、利用者等のニーズや利用状況等を聴取しつつ、登録機関や登録機関が行う実験手法の開拓等と十分連携して進めることが必要である。
- ・ 登録機関は、共用法(※)12条に基づく利用枠も活用し、例えば設置者や大学等との共同研究などを通じて、研究支援能力の向上等に努める。なお利用枠の活用については、重点戦略課題や一般課題の実施に支障のない範囲で行うこととする。
- ・ 登録機関は、潜在的利用者等の開拓等について、設置者とも十分な協力をしつつ、啓発活動等を進めることが必要である。また、一般利用が拡大していく段階においては、トライアルユース制度等により潜在的利用者等の開拓につなげていくこ

削除: 23年以降の登録機関と設置者が用意すること等について

削除: とともに、潜在的利用者等の開拓等について、設置者とも十分な協力をしつつ、啓発活動等を進めることが必要である

とも考えられ、SACLA の利用状況等を踏まえつつ、検討することとする。

- ・ 国は、SACLA の運営及び利用支援等が円滑に進むよう、設置者及び登録機関が進める事業等に必要な支援をすることとする。

(※) 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律

(登録施設利用促進機関による利用)

第十二条 登録施設利用促進機関は、施設利用研究の促進のための方策に関する調査研究その他の目的で、特定先端大型研究施設のうち研究者等の共用に供する部分を利用しようとするときは、文部科学大臣の承認を受けなければならない。

(5) 産業利用の促進について

○ 産業利用の促進に向けた方法、体制等について

- ・ 当面、重点戦略課題の研究グループに産業界の積極的な参加を促し、利用の手法や成果を共有していくことで、今後の産業利用の拡大につなげることが重要である。その際、SPring-8 と同様に産学が密接に連携して進める体制が求められる。

○ 利用料金の考え方について

- ・ 成果専有(成果非公開)利用がなされる場合には、従来の国際ルールを踏まえ、原則、運営費回収方式とする。具体的な料金体系等については、内外の諸状況も踏まえつつ、引き続き検討を進めるものとする。
- ・ なお、成果非専有(成果公開)利用においても、消耗品などの諸経費については、SPring-8 同様、実費相当分を利用者等が負担するものとする。

○ 知的財産のあり方について

- ・ 特許等の知的財産の扱い等については、特許法等と各当事者の規程に基づき当事者同士で取り決めるものとする。
- ・ 特に SACLA 立上げ時には共用施設の整備に設置者以外も参画することとなるため、今後の施設整備・運転に必要な知的財産を設置者以外も持つ可能性がある。従って、これを原因として十分な調整・運転が進まない状態とならないよう十分留意する必要がある。

(6) ユーザーコミュニティについて

○ ユーザーコミュニティのあり方について

- ・ SACLA は、共用施設であり、利用者本位の整備・運営を基本とすべきである。
- ・ また、我が国唯一の施設として、学术界及び産業界を含む全てのユーザーが参加するコミュニティにより、利用研究の開拓・推進が図られることが望まれる。

削除: 利用に係る

- ・ コミュニティには、様々な分野の研究者等の意見を集約し、今後の整備・運営方針等について国・設置者・登録機関に対し意見を提出する機能等が求められる。
- ・ また、今後の利用研究について、コミュニティから新たな重点分野の提案がなされるといったことも期待される。
- ・ そのためには、例えば、失敗事例を含めた研究成果の報告会を定期的に開催し、大学と企業等の出会いの場として活用される取組や、学术界と産業界が積極的に連携できる環境の構築などの取組が進められることが必要である。
- ・ 限られた利用時間の中で新規参入者を増やしながらSACLAの共用を促進することが重要であり、コミュニティには開放的かつ競争的な環境を維持していくことが期待される。

削除: ユーザーコミュニティには

○レーザー分野など、これまで放射光分野と関わりが薄かった分野からの参入促進 方策について

- ・ SACLA は、多様な分野に新たな展開を生み出す可能性があることから、幅広く様々な分野の学会や大学、企業等に対して、いろいろな情報ツールを活用しつつ、広くその情報を展開していくことが望ましい。
- ・ また、オープンで定期的な勉強会を開くことで、いつでも企業等が参加できる仕組みを構築することが期待される。
- ・ 登録機関が行う講習会等を有効活用し、積極的に SACLA の潜在的利用者等の掘り起こしを図ることも重要である。

削除: 例えばメールマガジンなどといった

削除: <#>SACLAの専用HPにおいて、失敗事例も含めた成果やノウハウを公表し、利用者等の習熟に貢献していくことも必要である。

(7) 成果の公表及び普及・啓発活動について

○利用研究の進捗や成果の状況等についての公表方策について

- ・ SACLA の専用HPにおいて、失敗事例も含めた成果やノウハウを公表し、利用者等の習熟に貢献していくことが必要である。

○広報・普及・啓発のあり方について

- ・ 登録機関が行う講習会や見学会等を有効活用し、積極的に SACLA の潜在的利用者等の掘り起こしを図ることが重要である。
- ・ 例えば、オープンで定期的な勉強会を開くことで、いつでも誰でも参加できる仕組みを構築することが期待される。
- ・ SACLA は、多様な分野に新たな展開を生み出す可能性があることから、幅広く様々な分野の学会や大学、企業等に対して、いろいろな情報ツールを活用しつつ、広くその情報を展開していくことが望ましい。
- ・ 行政刷新会議による事業仕分けへの反省として、設置者と登録機関が協力し

削除: 企業が

削除: 例えばメールマガジンなどといった

て、広く国民に事業内容を知らせる努力を行うことが必要である。

- ・ また、SACLA が国家的な最先端大規模研究プロジェクトであり、国民からの期待も高いことに鑑み、施設運営状況、利用研究の成果及び利用研究により期待される社会・経済への波及効果等について、広く国民を意識した分かりやすい情報発信が重要であり、国民の理解と信頼と支持を得るよう努めることが必要である。
- ・ さらに、SACLA による研究の成果や可能性について、次世代を担う若者や子どもが科学への興味・関心を引き付けられるような広報に努めることも重要である。

削除: なお、当面は失敗事例も含め、積極的に研究成果を発信していくことが重要である。

(8) 他施設等との連携について

○米国 LCLS や European XFEL との連携・競争のあり方について

- ・ SACLA は、LCLS や European XFEL と連携し、装置性能の向上や成果創出の促進に努めることが重要である。
- ・ また、SACLA の特徴的な性能を生かした競争を展開することが重要である。
- ・ 特に、空間だけでなく時間的にもコヒーレンスの高い光をつくるシーディング技術については、日本が世界にリードする技術である。XFELの輝度を更に100倍程度高めることが可能であり、アト秒領域のより短いパルス幅を実現し、より高精度な解析、短い時間単位での原子や電子の挙動を解析する実験が可能となる。したがって、X線レーザーの調整を進め安定したビームを定常的に供給できるようになり、本格的な利用研究が進んでいく段階で、着実に整備を進めることが必要である。

○効果的な予備実験の推進方策等について

- ・ SACLA の利用資源が限られることも踏まえ、予備的な実験については、理化学研究所の協力も得て、積極的に SCSS 試験加速器や SPring-8 等を活用していくこととする。
- ・ 公募の選定に際しては、SACLA で行うべきか、SCSS 試験加速器や SPring-8 でまずは実施すべきか、といった観点も含め審査されることが望ましい。
- ・ その際、SPring-8 で実施すべきとされた場合、SPring-8 の課題選定と適宜連携し、研究の進展が遅れることがないよう配慮されるべきである。

削除: (SCSS 試験加速器の活用方策等)

○SPring-8 との相互利用実験基盤の活用方策について

- ・ 平成21年度より整備が開始されている相互利用実験基盤については、米国や欧州の施設にはない特徴であり、その実験開始が期待されていることから、今後、共用施設として広く活用されることを念頭にしつつ、関係者間で調整を進め、早期の利用開始を目指し、引き続き整備・調整を進めることが適当である。
- ・ 当該施設を利用した研究については、その可能性を探求することが不可欠である

削除: 平成24年から

ことから、当面、設置者と登録機関が協力し、大学等の研究者も巻き込みながら利用研究の開拓にあたるのが適切である。

- ・ 研究計画の策定に際しては、SPring-8とSACLAの利用者等から広く意見を受け、世界唯一の成果を目指し、利用研究を推進することが期待される。

○他の量子ビーム施設との連携方策について

- ・ 様々な分野において、SACLA の新しい光の可能性について探求を進める必要があることから、施設運営状況や利用研究の成果について広く情報を公開していくことが重要である。
- ・ 放射光だけでなく、例えば中性子線など他の量子ビームも活用した研究の展開など、我が国独自の研究開発の探求を進めることも期待される。

○京速コンピュータ「京」をはじめとする高性能スパコンとの連携方策について

- ・ SACLA の実験においては、膨大なデータの高速解析が必要になる課題(膜タンパク質の単分子解析等)があり、現時点での施設側の計算能力には限界があるため、データ処理等に多くの時間を要する恐れがある。「京」などの高性能スパコンを用いることにより、迅速な解析が可能となり、より質の高い実験を行うことが出来る。
- ・ そのため、まず「京」における実験結果の分析を可能にするために必要な、理化学研究所播磨研究所におけるサーバー等の機器について、平成24年度から整備及び試験を行い、平成25年度からの運用開始を目指す。

削除: 平成23年度から予備的な検討を開始し、

削除: は機器の

削除: 予備的な

(9) 今後の整備方針について

○今後必要となる測定装置等について

- ・ 当面、まず早期に成果を創出するために必要な装置等の開発・整備を最優先にしつつ、上記「京」などの高性能スパコンとの連携を可能とする施設整備を優先的に進めることとする。
- ・ その後、内外の状況等を踏まえつつ、共用施設にふさわしい新たなビームラインの整備やシーディング装置の開発等について、設置者及び登録機関において検討、戦略会議において検証し、整備方針を決定することとする。

○施設・装置の整備の進め方(専用施設のあり方含む)について

- ・ 専用ビームライン・ハッチ及び設置者ビームライン・ハッチについては、SACLA のビーム取り出し口数が現時点においては最大5本と少ないことも踏まえ、様々な状況を踏まえつつ、国・設置者・登録機関が密接に連携し、その必要性を慎重に検討するものとする。

- ・ また、現在ある SPring-8 の研究交流施設については、ピーク時の利用率が90%程度に及んでおり、今後増加することが想定される SACLA の利用者等のため、研究環境の整備が必要である。
- ・ 施設設置者においては、今後の整備方針と併せてその必要性等については検討を進めるものとする。

(10) 検証・評価と利用推進計画の見直しについて

○利用研究の進捗や成果の検証・評価等について

- ・ 利用研究の進捗状況について、設置者や登録機関からの報告も踏まえつつ、戦略会議において検証を行い、必要に応じて有識者等からも意見を受けつつ、適宜、計画の見直しを行うものとする。
- ・ その際、利用者等の SACLA に対する習熟度や、産業利用の状況、海外動向等を十分踏まえることが重要である。

「生体分子の階層構造ダイナミクス」分野の概要について

生命の大きな特徴はその階層構造にある。タンパク質などの生体素子が細胞を形成しそれがさらに生体全体を構築している。SACLAの大きな特徴である、パルス性の大強度ビームを用いる事により、細胞の各種階層レベルでのダイナミクスを観察し、それをつなげて実際の生きた細胞のダイナミクスを理解するために設定したのが本分野である。

ライフイノベーションやグリーンイノベーションの鍵となる現象を実際に生きた細胞のコンテキストで理解する事を目標とする。

(1)創薬ターゲット膜タンパク質のナノ結晶を用いた構造解析

受容体、チャネルのような膜タンパク質は重要な創薬ターゲットでありながら良好な大きな結晶を得る事が困難となっている。タンパク質のナノ結晶を作製し、非常に多くの数の結晶からのX線回折像を高速に測定してそのデータを組合せる事により構造解析を行う。

(2)細胞全体及びその部分の生きた状態でのイメージング

自由電子レーザーでのイメージングは電子顕微鏡解析のような、サンプル凍結処理や染色を必要とせず、生きた細胞をそのまま観察できるというメリットがある。その反面コントラストが低い事や1回の観察からは投影図しかえられず3次元再構成をするのが難しいなどの問題も同時にかかえている。このような技術的な問題に対処しつつ、生きた細胞や細胞内組織のイメージングを行う研究を対象とする。

(3)超分子複合体の一分子構造解析

ウイルスや脂肪酸合成酵素の様に数種類のサブユニットの繰り返しでできている超分子に関しては、現在のSACLAの強度でも一分子から原子分解能に近いX線回折が得られる可能性がある。将来のより広い範囲のタンパク質への適用を考慮にいたした超分子複合体の一分子回折測定／構造解析の研究を対象とする。

(4)一分子X線回折実験とスパコン解析を融合させたダイナミクス研究

タンパク質から結晶を作成せずに構造を解く事が自由電子レーザー研究の一つの究極目標であり、将来的には、一分子のタンパク質からSACLAによる高分解能のX線回折像を得る事を目指す。その準備段階として、一分子から得られた回折像がタンパク質の動的構造の情報を有していることから、これに高分解構造及びコンピューターシミュレーションを組み合わせる事によりタンパク質のダイナミクスを行う研究を対象とする。

(5)ポンププローブ法を適用した動的構造解析

ダイナミクス研究法として有効なポンププローブ法を用いてタンパク質結晶中の化学反応を観測する事ができる。たとえば、国内外で最先端研究が展開されている呼吸鎖、光合成といったグリーンイノベーションの鍵となるような光感受性タンパク質の動的構造を解析する研究を対象とする。

「ピコ・フェムト秒ダイナミックスのイメージング」の概要について

X線自由電子のレーザーの大きな特徴は、ピコ秒あるいはフェムト秒という超高速に変化する反応過程等のダイナミックスを原子分解能で可視化することを初めて可能にする点にある。この特徴を最大限に発揮して貰うために設定したのが、本重点分野である。

(1)気相・液相・固相反応ダイナミックス

本課題は、①環境科学の基礎となる気相反応、②今後のエネルギー科学の鍵となる液相反応、③ナノ微粒子及びバルク固体中の局所に生じる構造変化が引き起こす相転移の過程など、広く気相・液相・固相分野における超高速の分子変化・化学反応ダイナミックスを散乱パターンから導かれるイメージング画像を使って可視化する研究を対象とする。

(2)界面反応の超高速過程

本課題は、気体分子の吸着、各種不均一触媒反応、電子デバイス作製プロセスのような界面が関与する超高速変化を伴う化学反応をピコ秒あるいはフェムト秒時間分解能で解析し、新たな触媒材料や電子デバイスの創成に資するような研究を対象とする。

(3)電荷発生・電荷移動ダイナミックス

電荷発生・電荷移動の素過程はフェムト秒、ピコ秒といった超高速領域で、分子・原子レベルでの構造変化をも伴いながら起きている事が予測されており、このダイナミックスの研究を対象とするのが本研究課題である。

(4)極端条件下の超高速過程

本課題は超高压・超高温あるいは超強磁場などの極端条件下での研究を対象とする。このように本研究テーマの重要性、その魅力は広く基礎研究分野で認知されてはいるが、極端条件装置との組み合わせの困難さを考えると、極めて挑戦的な研究となる。そこでこのような挑戦的研究を奨励するために本研究課題を設定する。

(5)動的 X 線分光科学

X 線分光学的手法は、近年、時間分解測定法の導入とともに、その重要性を飛躍的に増している。本課題では、ピコ・フェムト秒時間分解X線分光学分野の発展に資するための様々な分野の挑戦的な研究を奨励する。得られた基礎的知見を基盤にして、将来的には新規な材料開拓につなげて行く事が望まれる。

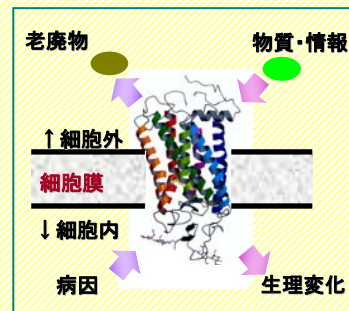
SACLAの利用研究における重点戦略分野と戦略課題について

- SACLAの利用研究を先導する成果の創出を目指し、「重点戦略分野」を設定する。
- 具体的な研究課題として「重点戦略課題」を提示し、実験手法の確立・開拓を強力に推進する。

【重点戦略分野】

「生体分子の階層構造ダイナミクス」

主な創薬ターゲット物質である膜タンパク質等の構造や、生体内の様々なダイナミクスを原子レベルで解明することで、新たな創薬技術の開発等に基づくライフイノベーションや、光合成機能の解明によるグリーンイノベーションの推進を目指す。



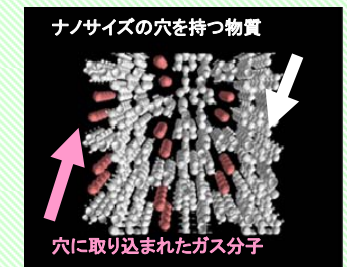
【戦略課題】

- ①「創薬ターゲット膜タンパク質のナノ結晶を用いた構造解析」
- ②「細胞全体及びその部分の生きた状態でのイメージング」
- ③「超分子複合体の一分子構造解析」
- ④「一分子X線回折実験とスパコン解析を融合させたダイナミクス研究」
- ⑤「ポンプ-プローブ法を適用した動的構造解析」

【重点戦略分野】

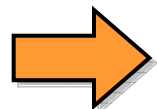
「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」

物質・材料中の反応過程などの超高速変化について、原子レベルで可視化することにより、革新的な蓄電池や太陽電池、気体吸蔵材料の開発等を促進し、グリーンイノベーションをはじめ、様々な分野での革新的な成果創出を目指す。



【戦略課題】

- ①「気相・液相・固相反応ダイナミクス」
- ②「界面反応の超高速過程」
- ③「電荷発生・電荷移動ダイナミクス」
- ④「極端条件下の超高速過程」
- ⑤「動的X線分光科学」



これらの先導的研究開発の推進により、利用分野を開拓し、イノベーションの推進及び我が国の国際競争力の強化に貢献する。

「生体分子の階層構造ダイナミクス」により実現される成果例

莫大な市場規模を持ち、国際競争が激しい創薬・医療開発分野で我が国が勝ち抜くためには、生きた細胞内におけるタンパク質、脂質をはじめとする生体高分子間の複雑な相互作用の様子(ダイナミクス)等を「直接」的に「原子分解能」で「その場観測」する高度な構造評価法に基づく、合理的・短時間の技術革新が必要となっている。X線自由電子レーザーの大きな特徴であるX線コヒーレント大強度ビームを用いる事により、これまで見るのでできなかった生きた細胞の原子分解能におけるダイナミクス理解を初めて可能にする。この特徴を最大限に発揮するために設定したのが本重点分野である。

本分野の推進により、ライフイノベーション分野を中心に、構造評価に基づく革新的な創薬や疾患発症の機構解明等において世界を先導する。

(1) 創薬ターゲット膜タンパク質のナノ結晶を用いた構造解析

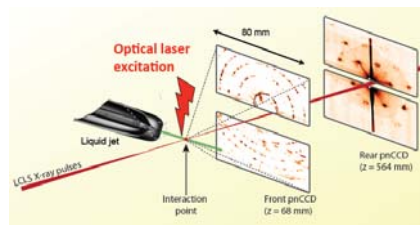
研究ニーズと技術的ボトルネック

受容体、チャネルのような膜タンパク質は、医薬品の50%以上がターゲットとする重要なタンパク質群であり、その構造解明が創薬に極めて有効であるが、既存技術ではその解析に必要な大きさの質の良い結晶を得る事は非常に困難であり、これまでに解析されたヒト由来の膜タンパク質は10程度しかない。

先行する米国施設におけりXFELによるタンパク質の構造解析には、目下のところ一分子ではなく、「ナノ結晶」を噴射し、それにX線レーザーを照射して回折像をとることによって行う。

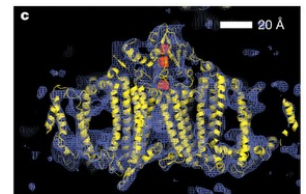
本課題が目指すブレイクスルー

SACLAを用いて、これまで最先端の放射光を使っても構造決定に必要なデータを得ることができなかった、ナノサイズの結晶から原子レベルでの構造解析を行う。



期待される成果

大量の膜タンパク質解析による、革新的かつスピーディな創薬に期待。



米国施設で解析された、膜タンパク質(光合成タンパク質)。

(2) 細胞全体及びその部分の生きた状態でのイメージング

研究ニーズと技術的ボトルネック

多くの生物学者・医学者にとって、生きた細胞を原子レベルで直接観察することは、疾病等の原因解明のため、長年の夢であった。

現行では、電子顕微鏡撮影においてサンプルの凍結処理、薄膜化や染色を必要としており、生きた細胞をそのまま原子レベルで観察することはできない。

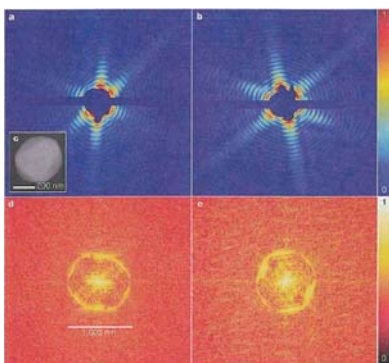
本課題が目指すブレイクスルー

SACLAを用いて、電子顕微鏡のような試料処理をすることなく、厚さ1ミクロン以上の生きたサンプルを10nm程度をそのまま観察する。

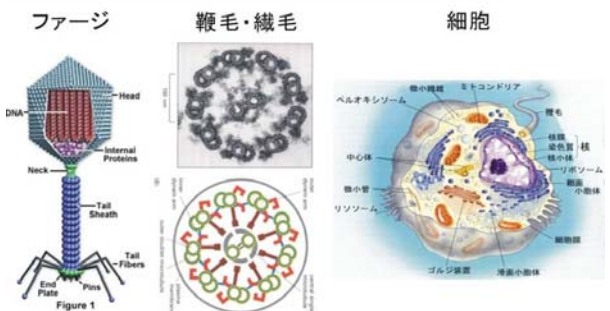
画像コントラストの低さや放射線損傷により、1回の観察像からは3次元像の再構成が難しいという技術的な問題に取り組み、生きた細胞や細胞内組織のイメージングを実現。

期待される成果

細胞の深層構造までをありのまま見ることができるので、医学・生物学分野に革新をもたらすと同時に、疾病等の原因解明や新たな創薬や医療技術開発に期待。



先行する米国施設での成果。ウイルス中最も巨大なミミウイルス(300-400nm)のイメージング



生体超分子集合体、細胞内小器官、細胞ナノメートルから数マイクロメートルの非結晶生体粒子サブμmからnm分解能で構造解析

(3) 超分子複合体の一分子構造解析

研究ニーズと技術的ボトルネック

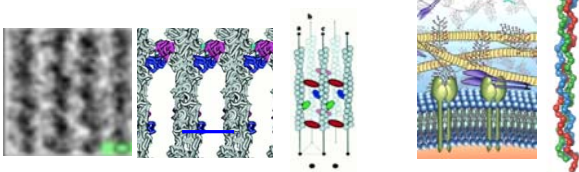
細胞の中で、生体分子は巨大な分子複合体を形成することにより、統合された生物機能を発揮している。その複合体は生物機能を理解する上で重要な解析ターゲットとなっているが、既存技術では、試料調製や得られたデータの分析などその構造解析が極めて困難となっている。

本課題が目指すブレイクスルー

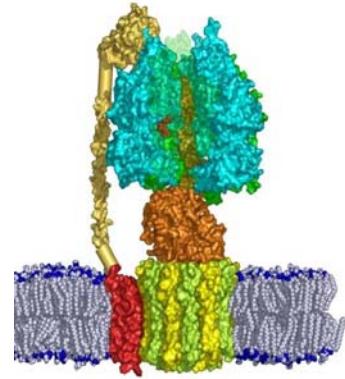
SACLAの大強度X線を用いて、ウイルスや脂肪酸合成酵素の様に数種類のサブユニットの繰り返しでできている10nm以下の超分子に関して、複合体一分子からほぼ原子レベルの構造解析を実現。

期待される成果

生体超分子をはじめとして細胞の深層構造までをありのまま見ることができるので、医学・生物学分野に革新をもたらすとともに、疾病等の原因解明や新たな創薬や医療技術開発に期待。



アクチン繊維やコラーゲン3重らせんの重合構造



8種類の蛋白質が統合した複合体を形成することでプロトンの濃度勾配を使ってATPを合成するF₁F₀ATPase

(4) 一分子X線回折実験とスパコン解析を融合させたダイナミクス研究

研究ニーズと技術的ボトルネック

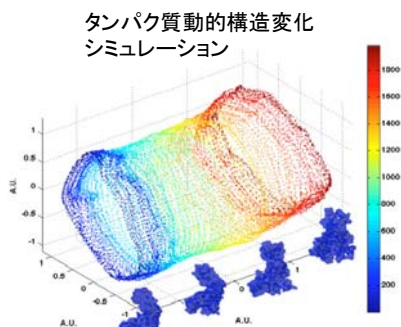
リボソーム等の生体高分子について、生体内での単分子の動態の情報を得ることが細胞分子生物学の課題となっている。現行技術では、生体高分子の構造からその動的機能を推定する研究が行われているが、現行技術では「生きたまま」でその動的機構を解析することに限界がある。

本課題が目指すブレイクスルー

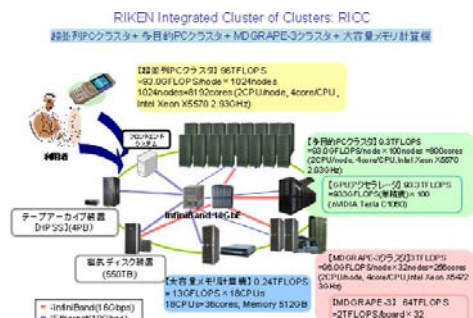
SACLAを用いてタンパク質複合体一分子ごとに得られた低分解能の動態データと既存のX線結晶構造解析で得られた高分解能の構造データを、コンピューターシミュレーションの手法を組み合わせることで、生体内でのタンパク質のダイナミクスを解明。

期待される成果

タンパク質が「生きたまま」の状態でのどのように機能するかという動的機構を明らかにすることにより、医学・生物学分野に革新をもたらすとともに、疾病等の原因解明や新たな創薬や医療技術開発に期待。



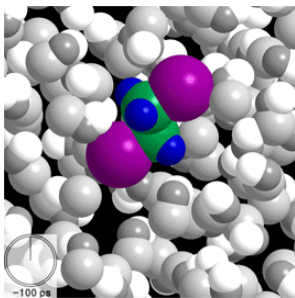
MD simulation of ADK: 850K, 5ns
New J. Phys. 12 (2010) 035007



(5) ポンプ-プローブ法を適用した動的構造解析

研究ニーズと技術的ボトルネック

呼吸鎖、光合成といったグリーンイノベーションの鍵となるような膜タンパク質複合体の動的構造の解析が注目されているが、超高速で起こっている光合成の初期過程の理解にはフェムト秒からピコ秒の時間分解能が必要であり、現行の技術で解析することは不可能。



溶液中で反応する分子の構造

本課題が目指すブレイクスルー

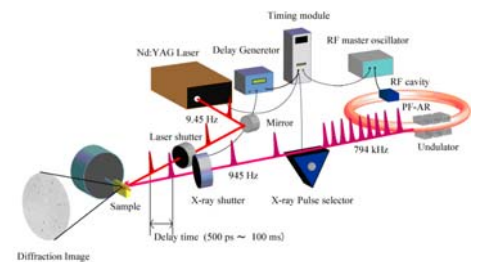
SACLAを用いて、別の光を当ててそれによる変化のさまを解析するポンプ-プローブ法を適用し、光に反応するタンパク質ナノ結晶中の化学反応について、既存技術の1000倍以上高速(10ピコ秒程度)のコマ送りで解析。



可視光レーザーによるマイクロ秒ポンプ&プローブ実験

期待される成果

自己組織化した光合成膜タンパク質複合体システムの機能解明やエネルギー変換・貯蔵素子等の人工光合成ナノデバイス開発研究等への展開が期待。



実験の模式図。短パルスX線とナノ秒大強度YAGパルスレーザーのタイミングを合わせて単結晶に照射し、X線回折像を撮影する。

「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」により実現される成果例

物質・材料分野の研究開発の激しい国際競争を勝ち抜くためには、物質がその機能発現に伴って変化する様子(ダイナミクス)を「直接」的に「原子分解能」で「その場観測」するイメージング等の高度な構造評価に基づく合理的な技術革新が必要となっている。

X線自由電子レーザーの大強度・極短パルスという大きな特長は、ピコ秒あるいはフェムト秒という**超高速の反応過程等のダイナミクスを原子分解能で可視化することを初めて可能**にする。この特長を最大限に発揮するために設定したのが、本重点分野である。

この特長を生かし、グリーンイノベーション分野を中心に、日本が得意とする「新物質・材料開発」を世界的に先導する。

①「気相・液相・固相反応ダイナミクス」

研究ニーズと技術的ボトルネック

超高密度ハードディスクなどに利用が期待されている次世代磁気デバイスの開発のためには、物質の原子レベルでの超高速の反応過程等の知見が重要だが、電子顕微鏡など現行技術では、静的な状態観察はできるが動態に関する十分なデータが得られない。

本課題が目指すブレイクスルー

SACLAを利用し、①環境科学の基礎となる気相反応、②今後のエネルギー科学の鍵となる液相反応、③バルク固体中の局所に生じる構造変化・相転移など、「超高速の化学反応ダイナミクス」を可視化する。

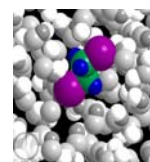
期待される成果

超高密度ハードディスクなどに利用が期待されている次世代磁気デバイス等の開発に期待。

化学反応の動態プロセス解析



時間分解回折像



像回復された構造ダイナミクス

②「界面反応の超高速過程」

研究ニーズと技術的ボトルネック

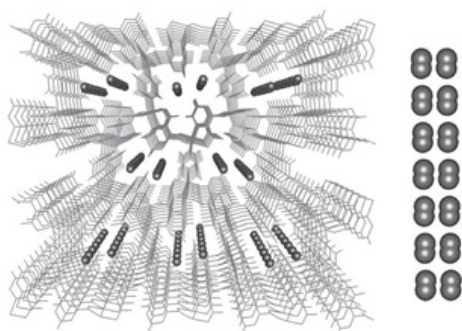
これまで開発されてきた気体分子の吸着・放出機能をもつ細孔物質は、細孔の制御が困難で、吸着・放出の動的機構の解明による高機能・制御可能な細孔材料の開発が望まれるが、現行技術では極めて困難。

本課題が目指すブレイクスルー

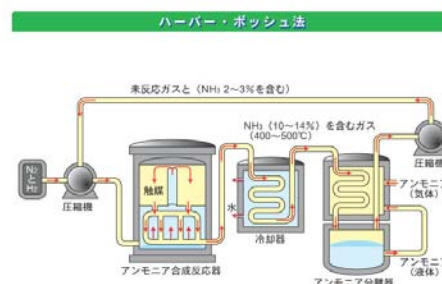
SACLAを利用し、細孔物質における気体分子の吸着過程のように「界面が関与する超高速変化を伴う化学反応」をピコ秒あるいはフェムト秒の時間分解能で解析する。

期待される成果

燃料電池普及の鍵となる水素や環境汚染物質を安全に吸着・放出する新規気体吸着素子の開発や、従来の半導体に代わる電子デバイス・高速磁気メモリー・高速読み出しヘッドの新規開発へ展開。



気体吸着素子の動的機構解析に期待(整列酸素分子を細孔に持つ[Cu(pydc)2(pyz)2]の結晶構造)



全産業が使うエネルギーの数十%は化学会社における蒸留分野で消費。新規吸着素子の実用化により直接分離できれば加圧や冷却は不要となり、大幅に省エネルギーとなる。

③「電荷発生・電荷移動ダイナミクス」

研究ニーズと技術的ボトルネック

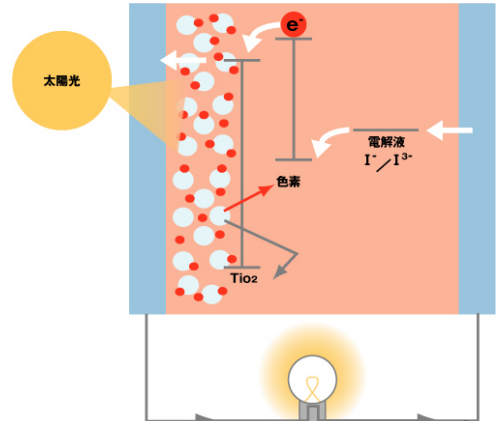
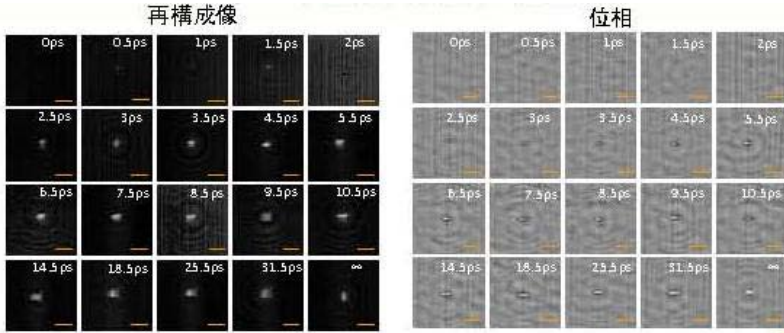
低コストだが変換効率の低さが課題である色素増感太陽電池の性能向上のためには、電池内での発電・放電過程をフェムト秒、ピコ秒といった超高速領域で、分子・原子レベルで捉えることが重要だが、それを捉える手段はこれまで存在しなかった。

本課題が目指すブレイクスルー

SACLAを利用し、太陽電池における電荷分離による発電や、電池の放電過程をフェムト秒、ピコ秒といった超高速領域で、分子・原子レベルで解析する。

期待される成果

色素増感太陽電池の変換効率の高効率化や次世代シリコン太陽電池に用いる低コストかつ高効率な素材開発に期待。



位相から求めたレーザー照射後の照射中心でのシリコン単結晶の起伏の時間変化

色素増感太陽電池における充放電過程はフェムト秒、ピコ秒といった超高速領域で、分子・原子レベルでの構造変化を引き起こしている。

④「極端条件下の超高速過程」

研究ニーズと技術的ボトルネック

超高压・超高温などの極端条件下では、物質は通常とは全く異なった構造を示す。例えば極端条件下での物質の破壊プロセス等の原子レベルでの解明は、耐久性の高い素材開発等に重要だが、極短時間しか再現できない極端条件下での物質の破壊プロセスを原子・分子レベルで解析することは既存技術では不可能だった。

本課題が目指すブレイクスルー

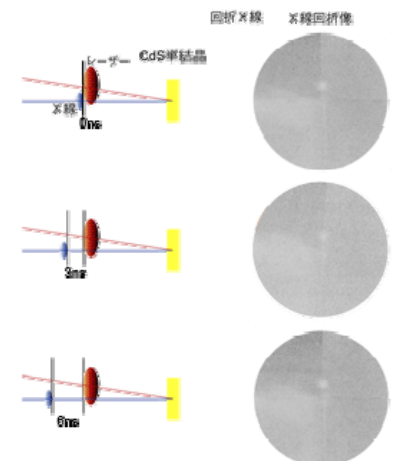
十分なX線強度を持ったレーザーを発振できるSACLAを用いて、数ピコ秒の時間分解能で極端条件下での物質構造変化のプロセスを解析する。

期待される成果

材料の内部構造の破壊の初期メカニズムの解明による、高強度のレーザーによる材料加工や、放射線損傷に強い材料の開発に重要な役割を果たすと期待。



マンタル物質を二つのダイヤの間に挟み、超高压下でレーザー加熱を行って、実験室でマグマを作る。



硫化カドミウム単結晶の衝撃圧縮過程のX線回折測定イメージ図。複数のX線回折像を、時間をずらしながら連続的につなげた動画。フェムト秒X線レーザーで更に詳細な解析が可能となる。

⑤「動的X線分光科学」

研究ニーズと技術的ボトルネック

光触媒反応等をはじめとした触媒を用いた化学反応プロセスについて、X線分光学的手法を用いれば構造変化や電子状態の変化を局所的に極めて詳細に観測できる。

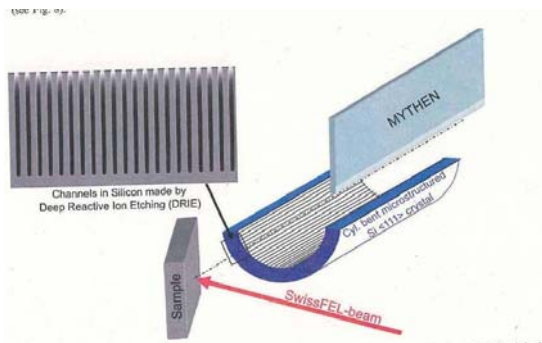
しかし現行技術では、反応前後の状態しか観測できず、ピコ・フェムト秒といった超高速の反応プロセスまでは解明できない。

本課題が目指すブレイクスルー

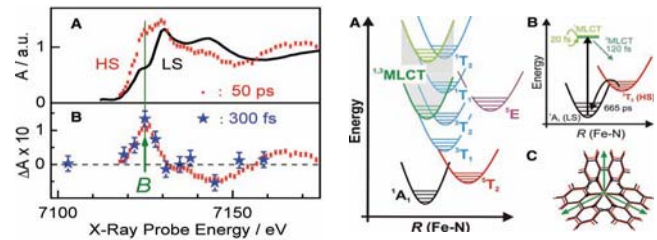
SACLAの超短パルスレーザーでX線分光学的手法を用いることにより、フェムト秒という超高速における時間分解能で、光触媒をはじめとした「化学反応」における様々な状態変化の詳細な解析が可能となる。

期待される成果

触媒反応について、電子状態変化等も含んだ局所的・詳細な超高速構造変化を分析することで、通常起こりにくい様々な化学反応を制御・コントロールする有用な触媒開発に向けた重要な知見を得る。



2016年に運転開始を予定しているスイスXFEL (PSI) で検討中のXFEL-XAFSの概念図



光誘起電荷移動反応をきっかけとしておきる光反応の解析例

Femtosecond XANES Study of the Light-Induced Spin Crossover

Dynamics in an Iron(II) Complex. Bressler et al. SCIENCE VOL 323 23 JANUARY 2009 489

SACLAに係る研究開発の流れ(利用推進研究から重点戦略課題へ)

H18
§
H22

フェーズ1:利用装置プロトタイプ開発

■X線自由電子レーザー利用推進研究課題■
供用開始後早期に革新的な利用研究を開始できるよう、大学を初めとした各研究機関が、X線自由電子レーザー利用推進協議会にて選定した研究課題を実施。平成20年度までに19課題を実施するとともに、平成21年度からは、独自性・優位性がありSACLAを用いた計測装置に直結する5課題に絞りこみ、重点的に研究を推進。

H23
26

フェーズ2:利用装置実用化開発・施設へのアプライ

■既存装置共用化・調整提案■
フェーズ1の利用推進研究課題にて開発・整備された装置の調整運転を行うとともに、当該装置等により実施の可能性がある実験手法などについての事前実験・研究課題について、理化学研究所が公募し、実施。

H24.3
§
H26?

フェーズ3:利用装置を活用・高度化しつつ戦略的に成果創出

■重点戦略課題を中心とした共用■
フェーズ2までに開発・整備された装置について更なる調整・高度化を図りつつ、利用推進戦略会議の示した重点戦略分野の研究課題等について、産業界を含めた利用研究者等の総力を結集して戦略的に先導的な成果を創出。

H27?
§

フェーズ4:いつでも誰でも、見たい物を見たい速さで

フェーズα: 新しい科学の開拓

■新規実験装置提案■
フェーズ1の利用推進研究課題で整備した装置以外にも、我が国のXFELの独自性・革新性を十分に活かし、新たなサイエンスを開拓する利用装置の開発課題について、理化学研究所が公募し、実施。

SACLAの科学技術政策における位置づけ、目標と推進方策について

●SACLAの位置づけ

- 世界最先端の研究開発の推進と幅広い分野への活用が期待される先端研究施設
- 優れた研究開発成果の創出や人材養成において極めて重要な施設

●SACLAが切り開く科学技術

- これまで見えなかった極微細構造の解明
- これまで捕捉できなかった超高速動態の解明

●SACLAの研究推進方策

- 早期成果創出、先導的成果創出に向け、**重点戦略分野**を設定
- 成果が期待できる具体的な**戦略課題**を定め、集中的に研究開発を推進
- これまでの整備・開発の成果を最大限に活用
- 新たな可能性の芽を育てるため、一般利用枠も一定程度確保

第4期基本計画を見据えた、SACLAが目指すべき主な目標

- 課題解決型研究開発の実現
- ライフ・グリーンイノベーションの推進
 - ・革新的創薬技術の開発
 - ・新エネ技術開発 等
- 国際頭脳循環の拠点形成
 - ・SPring-8と相まって世界的研究拠点の形成を目指す

**イノベーションの推進、我が国の国際競争力の強化、
第5期科学技術基本計画につながる新たな科学の開拓に貢献**

X線自由電子レーザー施設(SACLA)の供用開始に向けた取組について

平成23年

平成24年

4月 5月 6月 7月 8月 9月 10月 11月 12月 1月 2月 3月 4月 5月 6月 7月 8月 9月



世界最短波長を実現

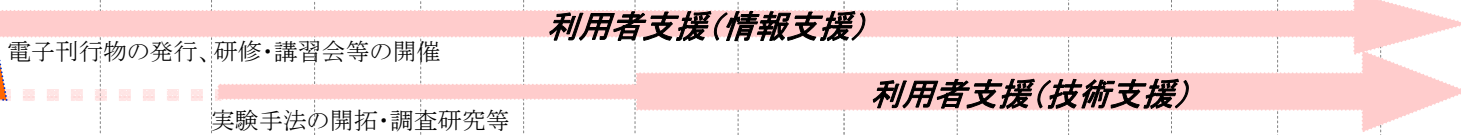
登録機関

選定委員会
(公募要項決定等)

公募(公正・公平) 審査・選定

24年度
実施計画

公募



ユーザーコミュニティ(SPring-8とも連携)

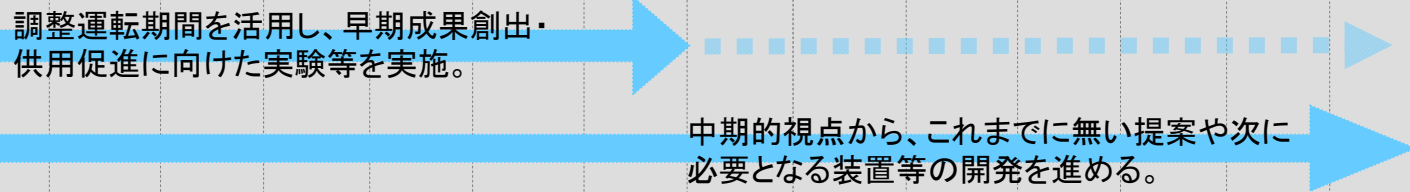
28

施設設置者

理研・利用装置検討委員会
(利用装置提案募集)

共用化課題

新規提案課題



文科省

X線自由電子レーザー
利用推進戦略会議



中間まとめ

参考資料 3

X 線自由電子レーザー利用推進戦略会議の設置について

平成 23 年 3 月 22 日

文部科学省研究振興局

1 設置の趣旨

X 線自由電子レーザー(以下「XFEL」という。)は、第三期科学技術基本計画において「国家基幹技術」に位置づけられており、ライフサイエンス分野やナノテクノロジー・材料分野をはじめとする幅広い科学技術分野において革新的な成果を創出することが強く期待される研究基盤である。XFEL は独立行政法人理化学研究所を中心として、平成 23 年度中の供用開始を目指して整備・調整が進められている。

XFEL の完成後直ちに本格的な利用研究を開始するため、これまで、文部科学省に設置された「X 線自由電子レーザー利用推進協議会」において、利用実験装置の整備に向けた予備的研究を実施するとともに、供用開始までの利用推進方策を定めた「X 線自由電子レーザー利用推進方針」が取りまとめられたところである。

利用推進方針に定められた事項をさらに強力に推進するとともに、供用開始後の具体的な利用推進方策を定めた「XFEL 利用推進計画(仮称)」を策定するなど、XFEL の利用推進に必要な事項を検討するため、X 線自由電子レーザー利用推進戦略会議を設置する。

2 検討事項

- ・平成 23 年度内に登録利用促進機関が実施する公募・選定に関する方針
- ・供用開始以後の本格的な利用研究に向けて、XFEL の利用推進方策・体制等についての具体的な計画である「XFEL 利用推進計画(仮称)」の策定
- ・その他 XFEL の利用推進に必要な事項

3 構成及び運営

- ・会議は、研究振興局長の私的諮問機関として設置する
- ・会議の構成員及び主査は、別紙の通りとする
- ・会議には、必要に応じて臨時委員を置くことができる
- ・会議の運営に係る詳細については、会議において定める
- ・会議は、原則公開とする。ただし、非公開情報等を使用して議事を運営する場合など、主査が非公開が適当と認める場合には、非公開とすることができる

4 設置期間

平成 23 年 3 月 22 日～平成 24 年 3 月 31 日

5 庶務

本会議の庶務は、研究振興局基礎基盤研究課量子放射線研究推進室が処理する。

X線自由電子レーザー利用推進戦略会議 委員一覧

(五十音順)

平成 23 年 3 月 22 日現在

【委員】 (14名)

- 石川 哲也 (独) 理化学研究所播磨研究所 所長
岩田 想 (国) 京都大学 教授
上田 潔 (国) 東北大学 教授
太田 俊明 立命館大学総合理工学研究機構 SR センター センター長
大野 英雄 (財) 高輝度光科学研究センター 理事
上村 みどり 帝人ファーマ (株) 生物医学総合研究所 課長
腰原 伸也 (国) 東京工業大学理工学研究科物質科学専攻 教授
坂田 誠 (国) 名古屋大学 名誉教授
下村 理 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 理事
物質構造科学研究所 所長
妹尾 与志木 (株) 豊田中央研究所分析研究部 副部長
西島 和三 持田製薬 (株) 医薬開発本部 専任主事
濡木 理 (国) 東京大学 教授
山田 昇 パナソニック (株) ストレージメディア総括担当
若槻 壮市 大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 教授

【利用推進課題代表者】 (オブザーバー)

- 河野 秀俊 (独) 日本原子力研究開発機構 研究主幹
中迫 雅由 慶應義塾大学理工学部 教授
松原 英一郎 (国) 京都大学 教授
山内 和人 (国) 大阪大学大学院工学研究科 教授
山内 薫 (国) 東京大学大学院理学系研究科 教授

X線自由電子レーザー利用推進戦略会議 開催経緯

平成23年

- 3月28日 第一回 (1) 主査及び副主査について
(2) 会議の議事運営等について
(3) XFELの現状及び今後の取組について
(4) X線自由電子レーザー利用推進方針について
(5) 今後の検討事項等について
(6) その他
- 4月19日 第二回 (1) 調整運転提案・新規実験装置提案の選定(案)について
(2) 利用研究の重点分野について
(3) 利用時間の配分について
(4) 利用者選定、利用支援の方針等について
(5) その他
- 5月24日 第三回 (1) X線自由電子レーザー利用装置提案課題の選定について(案)
(2) 登録機関における検討状況について
(3) 利用研究の重点分野について
(4) SACLA利用研究の位置付けの整理について
(5) ユーザーコミュニティについて
(6) 成果の公開及び普及・啓発活動について
(7) 他施設等との連携について
(8) 今後の整備方針について
(9) 検証・評価と利用推進計画の見直しについて
(10) その他
- 6月27日 第四回 (1) SACLAの現状及び今後の行程について
(2) 登録機関における検討状況について
(3) X線自由電子レーザー利用推進計画中間報告(案)について
(4) 今後のスケジュール等について
(5) その他
※ SACLA 施設見学もあわせて行った

