

# X線自由電子レーザー施設（SACLA）の整備・共用

平成24年度予算案 : 7,501 百万円  
 (平成23年度予算額 : 5,686 百万円)  
 ※ SPring-8分の利用促進交付金を含む

- X線自由電子レーザー施設(SACLA)は、原子レベルの超微細構造や化学反応の超高速動態・変化を瞬時に計測・分析できる世界最高性能の研究基盤施設として、グリーン・イノベーションやライフ・イノベーションなど、日本の復興と経済再生を牽引する様々な分野に貢献。
- 国家基幹技術として平成18年度より整備を開始、平成24年3月に共用開始予定。
- 平成24年度は、幅広い研究者等への最大限の供用を図りつつ、革新的成果の創出や研究環境の充実を図る。



兵庫県播磨科学公園都市に立地  
 (SPring-8に隣接)

## ○SACLAの最大限の共用運転を実施

4,821百万円 (4,180百万円)

- ・施設の運転・維持管理等に必要な経費

## ○特定放射光施設(SPring-8・SACLA)の利用促進(※)

- ・利用促進(利用者選定・利用支援)に必要な経費 1,410百万円 (1,506百万円)  
 ※SPring-8及びSACLAの利用促進業務を一体化・効率化して実施

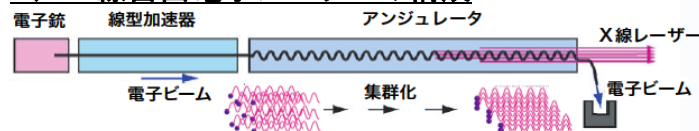
## ○SACLAの利用研究環境の整備

- ・SACLA情報通信基盤(スパコン「京」との連携)の整備 270百万円(新規)

## ○SACLA重点戦略課題の実施による先導的な成果創出

- ・SACLA重点戦略課題の推進に係る研究費 1,000百万円(新規)

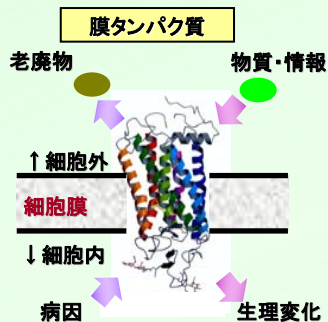
## ◆ X線自由電子レーザーの構成



## ◆ X線自由電子レーザーの特徴

- ◎ **短波長** [硬X線 → 原子レベルでの解析が可能]
- ◎ **短パルス** [フェムト秒パルス → 化学反応等の極めて早い動きの解析が可能]
- ◎ **質の良い光** [高干渉性 → 試料を調製せずとも生きたままで解析が可能]

## 【重点戦略分野】 ～ 生体分子の階層構造ダイナミクス～

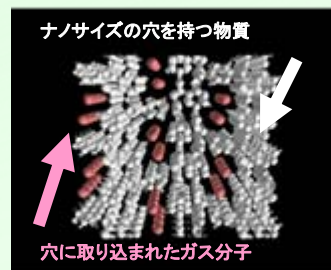


医療、創薬に極めて有用であるが、脂質(細胞膜)が結合しており、結晶化が極めて困難

結晶化せずに構造解析できれば新薬開発にかかる期間が短縮

SACLAを利用することにより結晶化を経ることなく構造解析が可能に。疾病に多く関連するとされる膜タンパク質の構造解析により、医薬品開発に要する期間・費用が大幅な短縮に期待。

## 【重点戦略分野】 ～ ピコ・フェムト秒ダイナミクスイメージング～



ナノ細孔内でガス分子が整列

細孔にガス分子が吸着される際の動的ダイナミズムをSACLAで解析が可能

分子を取り込む様子を解析すれば、特定の分子を選んで取り込む新しい素材開発が可能

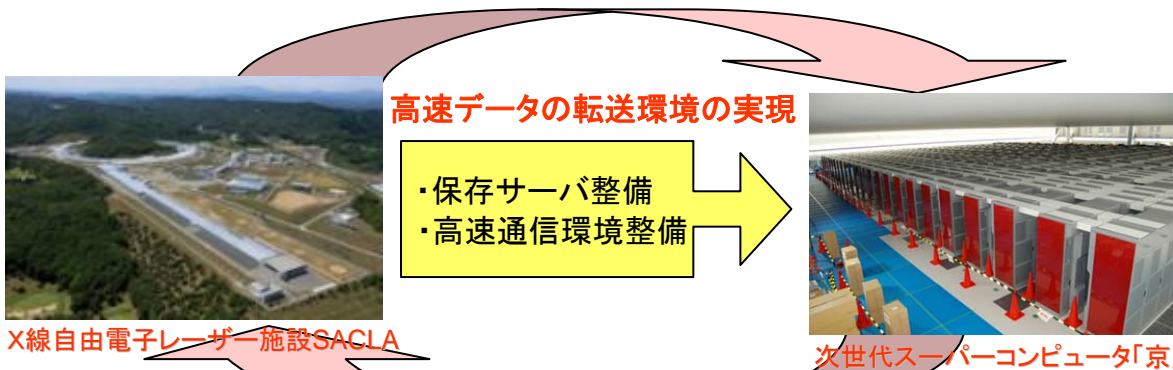
メタンなどの燃料を簡便に捕捉・貯蔵、また温暖化ガスなど有害物質除去触媒などの吸着、に役立つ機能を持つ新素材開発への貢献に期待。

### <概要>

- 2つの国家基幹技術である次世代スパコン「京」とX線自由電子レーザー施設「SACLA」との連携を可能とする情報インフラを整備し、「SACLA」による「京」を利用した高速かつ高度な解析を実現。
- 「京」を活用したSACLAの利用研究を強力に促進し、イノベーションの推進、国際競争力の強化等に貢献。

### <現状と対応策>

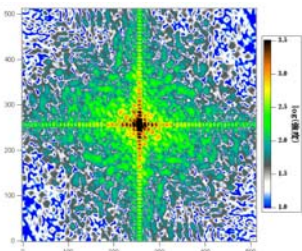
- SACLAで行われる実験(膜タンパク質の構造解析など)では、膨大な量のデータ(160テラバイト/日)計算が必要。
- 現状の情報インフラでは保存速度が遅いなどにより、「京」にデータ転送するために約2週間を要し、迅速な解析に大きな障害。
- SACLA側の情報インフラを整備することによりデータ転送の高速化が実現し、1日で「京」へのデータ転送が可能。
- SACLAでの実験中にデータの修正が可能となり、解析作業の飛躍的な効率化が実現し、膜タンパク質構造の早期解明による革新的創薬が実現。



### <スケジュール>

装置 \ 年度	H24	H25
合計(百万円)	270	230

総額:5億円

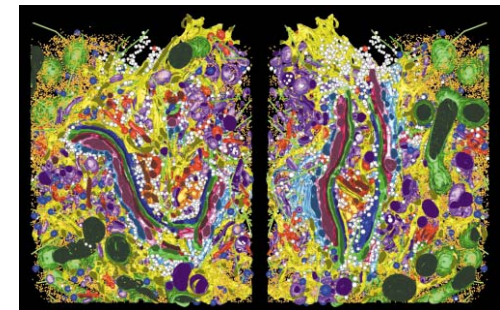
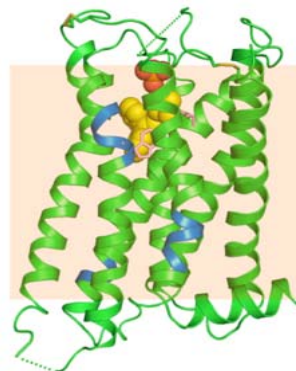


膜タンパク質の構造解析で大量に生み出される回折像。



現状では、京に転送するまで二週間も必要となる。

本整備により...



**1日で「京」へのデータ転送が可能となり、解析作業が飛躍的に効率化!**



# SACLA重点戦略課題の実施による先導的な成果創出 X線自由電子レーザー施設(SACLA)重点戦略課題の推進

## ■ 本施策の概要

- SACLAは、物質の原子レベルでの構造や超高速動態・変化を瞬時に解析できる世界最先端の研究施設。平成24年3月から共用法に基づく供用開始予定。(建設費388億円)
- 極めて革新的な光源であるため、その利用技術は未確立。先行する米国では、50~60名からなる大型利用研究プロジェクトを平成21年より強力に推進。どちらが先に利用技術を確立するか激しい競争状況。
- 国家基幹技術として整備されたSACLAの性能を最大限発揮できる、標準化された利用技術・装置を確立し、世界に先駆けて先導的な成果を創出して国内外のユーザーを惹きつけることが重要。
- そのため、ライフ・グリーンイノベーション実現に向けXFEL利用推進戦略会議が設定した「重点戦略課題」について、研究機関や大学等が一体となったチームを編成し、重点的かつ強力に利用研究を開拓・推進する。



## ■ 期待される成果例と社会への波及効果

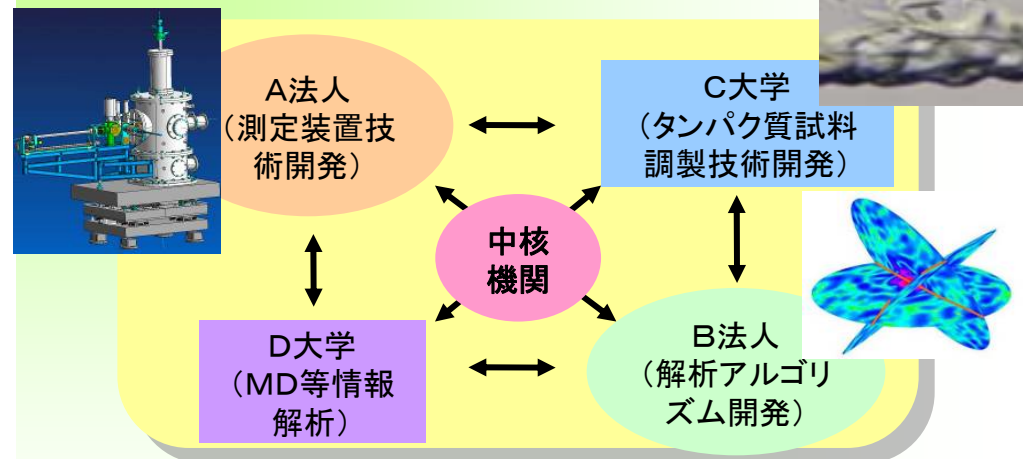
有力な創薬ターゲットであったが構造決定が極めて困難な膜タンパク質について、ナノ結晶を用いた構造解析手法や高性能スパコンによるシミュレーションを活用し、原子分解能での構造・動態解析を可能とする技術を確立し、先導的な解析事例を創出。

創薬業界をはじめとした利用が本格化し、大量の膜タンパク質解析データに基づいた革新的かつスピーディな創薬が実現されるなど、ライフイノベーションを創出。

これまで解析が不可能であった、触媒反応のダイナミクスや太陽電池の電荷発生過程等の「超高速の化学反応ダイナミクス」の原子分解能での動態の可視化技術を確立し、先導的な解析事例を創出。

自動車メーカーや半導体メーカーなどの製造業界をはじめとした利用が本格化し、環境汚染物質を安全に吸着・放出する新規気体吸着素子や、超高効率太陽電池が実現されるなど、グリーンイノベーションを創出

## ■ 課題推進研究の実施スキーム(案)



- ・1つのプロジェクトとして中核機関主導による連携、一元的管理を行い、効果的な成果創出を目指す。
- ・1課題あたり1~2億円程度のプロジェクト5~10課題を推進。