

<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・変化を解析できる世界最先端の研究施設。平成24年3月から「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づく共用を開始予定。
- 極めて革新的な光源であるため、その利用技術を発展させることが必要。先行する米国では、大規模なチームを構築し、平成21年より強力に推進。
- 第三期科学技術基本計画において国家基幹技術として整備されたSACLAについて、その性能を最大限発揮できる利用技術・装置を確立し、世界に先駆けて先導的な成果を創出することが重要。
- そのため、ライフ・グリーンイノベーション等の実現に向け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

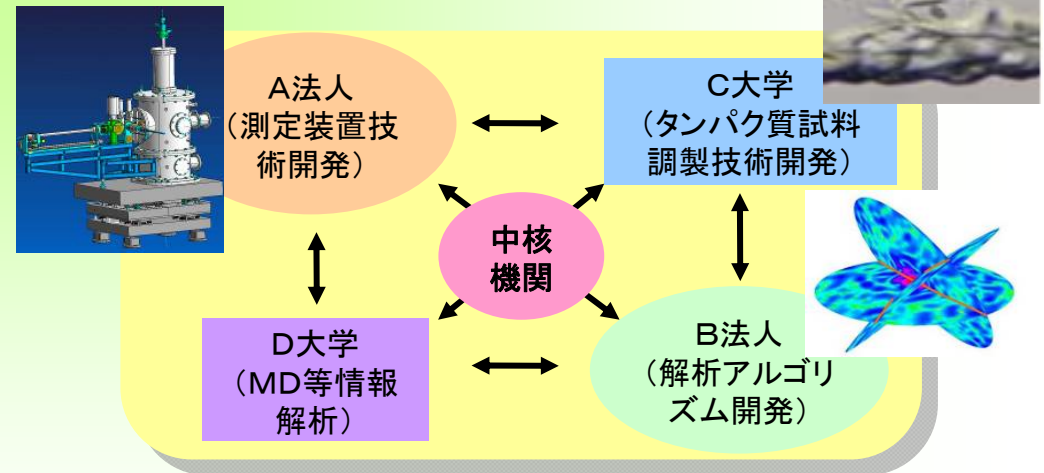
有力な創薬ターゲットであったが構造決定が極めて困難な膜タンパク質について、ナノ結晶を用いた構造解析手法や高性能スパコンによるシミュレーションを活用し、原子分解能での構造・動態解析を可能とする技術確立し、先導的な解析事例を創出。

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ズム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3千万円～5億円程度のプロジェクトを5～10課題程度、実施。

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
S
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

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
S
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?
S

フェーズ4:いつでも誰でも、見たい物を見たい速さで

「XFEL利用推進計画中間報告」

共用開始後3～5年程度を念頭に重点的に取り組む「重点戦略分野」及び「重点戦略課題」を設定し、早期の成果創出と実験手法の確立・開拓を進める。国は重点戦略課題の推進に対し必要な支援を行っていくことが求められる。また、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。

<SACLA重点戦略課題の推進>

戦略課題を中心に、世界に先駆けた先導的・革新的な成果創出を実現するため、解析装置を開発、解析手法を確立し、広く利用研究を推進する。

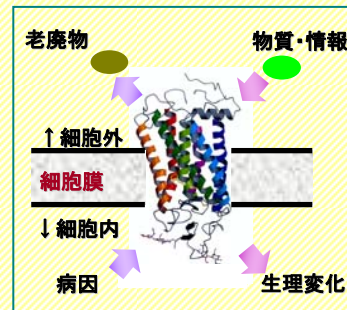
SACLAの利用研究における重点戦略分野と戦略課題について

- 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。
- 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。

【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。



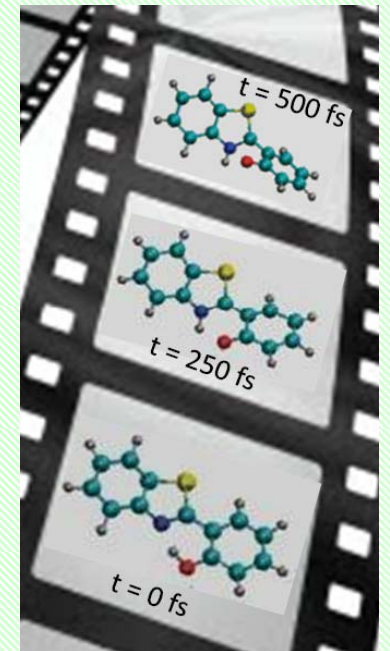
【戦略課題】

- 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】

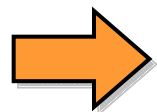
「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」

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」



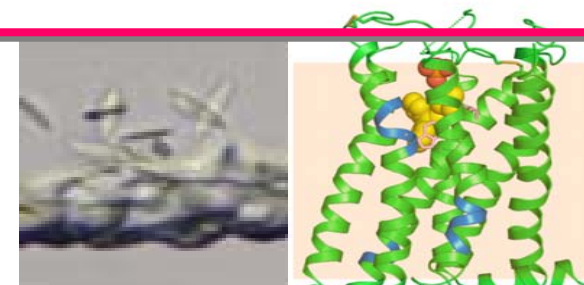
これらの先導的研究開発の推進により、利用分野を開拓し、イノベーションの推進及び我が国の国際競争力の強化に貢献する。

【参考】具体的な研究内容の例

- ① これまでは構造決定が不可能であった、創薬ターゲットである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ーパーコンピュータによるシミュレーションを活用して原子分解能での構造・動態解析を目指す研究。

これまでの放射光では構造決定に必要なデータが得られなかった、作製が容易なナノサイズの結晶から原子レベルでの構造解析を行う。

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。

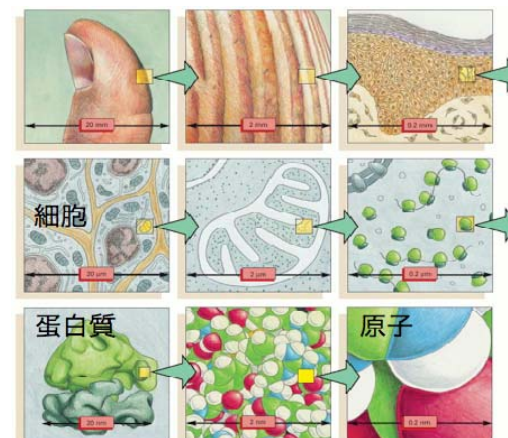


ヒスタミンH1受容体の構造(Shimamura T. et al., Nature 2011)は、10ミクロン程度の結晶(左図)からマイクロビームを用いて解かれた。SACLAではこの1/100程度の大きさの結晶を用いて構造解析を行うことが可能。

- ② これまでは試料処理の問題で不可能であった、厚さ1ミクロン以上の生きた細胞の全体又はその部分の原子分解能でのイメージングを目指す研究。

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課題に取り組み、生きた細胞や細胞内組織のイメージングを実現。

細胞の深層構造までをありのまま見ることによって医学・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。



生体は階層構造を持っており、それぞれのレベルでの構造情報を組み合わせることにより、最終的には生体/細胞の構造を原子分解能で明らかにすることが可能になる。

- ③ これまでは時間分解能が粗く解析が不可能であった、触媒反応や太陽電池の電荷発生過程等のピコ・フェムト秒領域で起こる「超高速の化学反応ダイナミクス」の原子分解能での可視化を目指す研究。

環境科学の基礎となる気相反応、今後のエネルギー科学の鍵となる液相反応、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(ピコ秒・フェムト秒の時間分解能で解析)。

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、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。

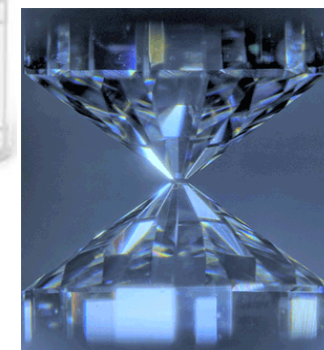


化学反応の動画撮影

- ④ これまでは再現出来る時間が限られているため解析不可能であった、超高温・高圧下における物性や物質の破壊プロセスの原子分解能での解析を目指す研究。

大強度X線レーザーを用いれば、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が可能。

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加速に期待。



マントル物質を二つのダイヤモンドの間に挟み、超高温下でレーザー加熱を行って、実験室でマグマを作る。

SACLA重点戦略課題の推進事業（実施スキーム）

- 関連分野や欧米の動向など利用研究の調査等に基づいて、利用研究の方針・計画を定め、優れた研究課題を公募・選定し、利用研究を推進するXFEL利用推進戦略会議を平成23年3月に文部科学省の下に設置。
- X線自由電子レーザー利用推進戦略会議の下に、採択方針の策定、課題の採択、研究評価等を行う「重点戦略課題推進部会」を設置する。

X線自由電子レーザー利用推進戦略会議

主査：下村理 (KEK理事)

委員14名、オブザーバー5名

- ・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」の策定
- ・その他XFELの利用推進に必要な事項

重点戦略課題推進部会

委員7名、装置者側オブザーバー1名

- ・公募要領の策定、重点戦略研究課題の選定
- ・実施課題の進捗状況の調査・把握
- ・中間評価及び資源配分の変更
- ・シンポジウムの開催 等

X線自由電子レーザー 重点戦略研究課題

公募・選考



SACLAの利用
重点戦略課題の遂行

【事務局】

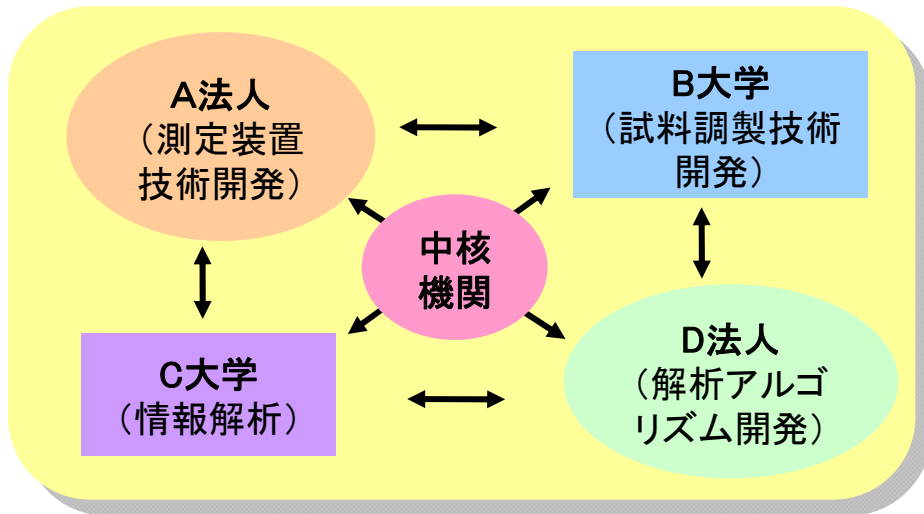
文部科学省研究振興局

基盤研究課 量子放射線研究推進室

SACLA重点戦略課題推進事業（設定課題、応募条件等）

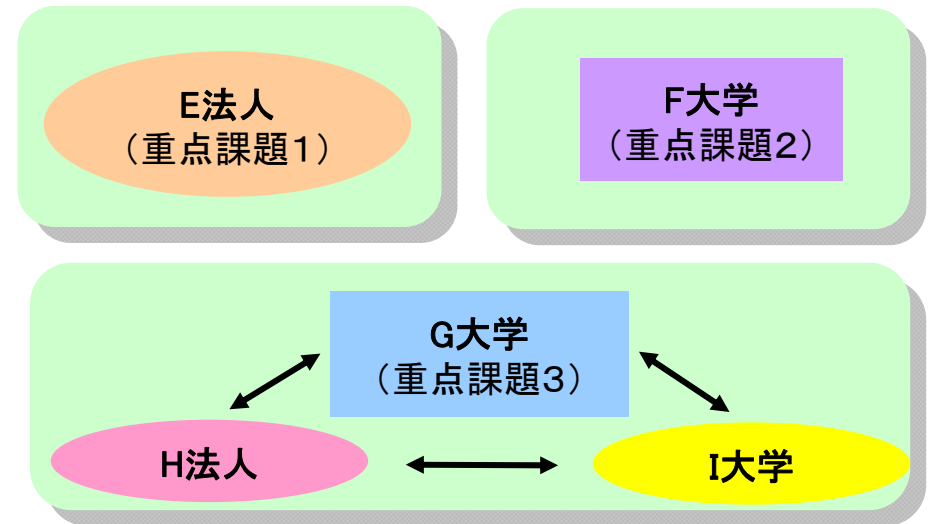
- 「X線自由電子レーザー利用推進計画」において重点的に推進すべき分野とされた「生体高分子の階層構造ダイナミクス」及び「ピコ・フェムト秒ダイナミックイメージング」の早期実現を目指した課題を選定する。
- 以下、2つのプログラムにより課題を公募する。

●大型利用研究推進プログラム（イメージ）



- 複数の研究機関からなる実地体制を組織する。中核機関主導による連携、一元的管理を行う。
- 新規装置開発や解析方法の確立を含めた、効果的な成果創出を目指す。
- 原則、1課題あたり3～5億円程度、3年のプロジェクトとして実施。

●個別利用研究推進プログラム（イメージ）



- 個人研究者やチームを核とした実施体制による利用研究により、効果的な成果創出を目指す。
- 既存装置を応用した利用研究による革新的成果の早期創出を目指す。
- 原則、1課題あたり3千万円～1億円程度、2年のプロジェクトとして実施。

※ 毎年度、進捗評価を実施し、事業の継続・見直し等を検討する。

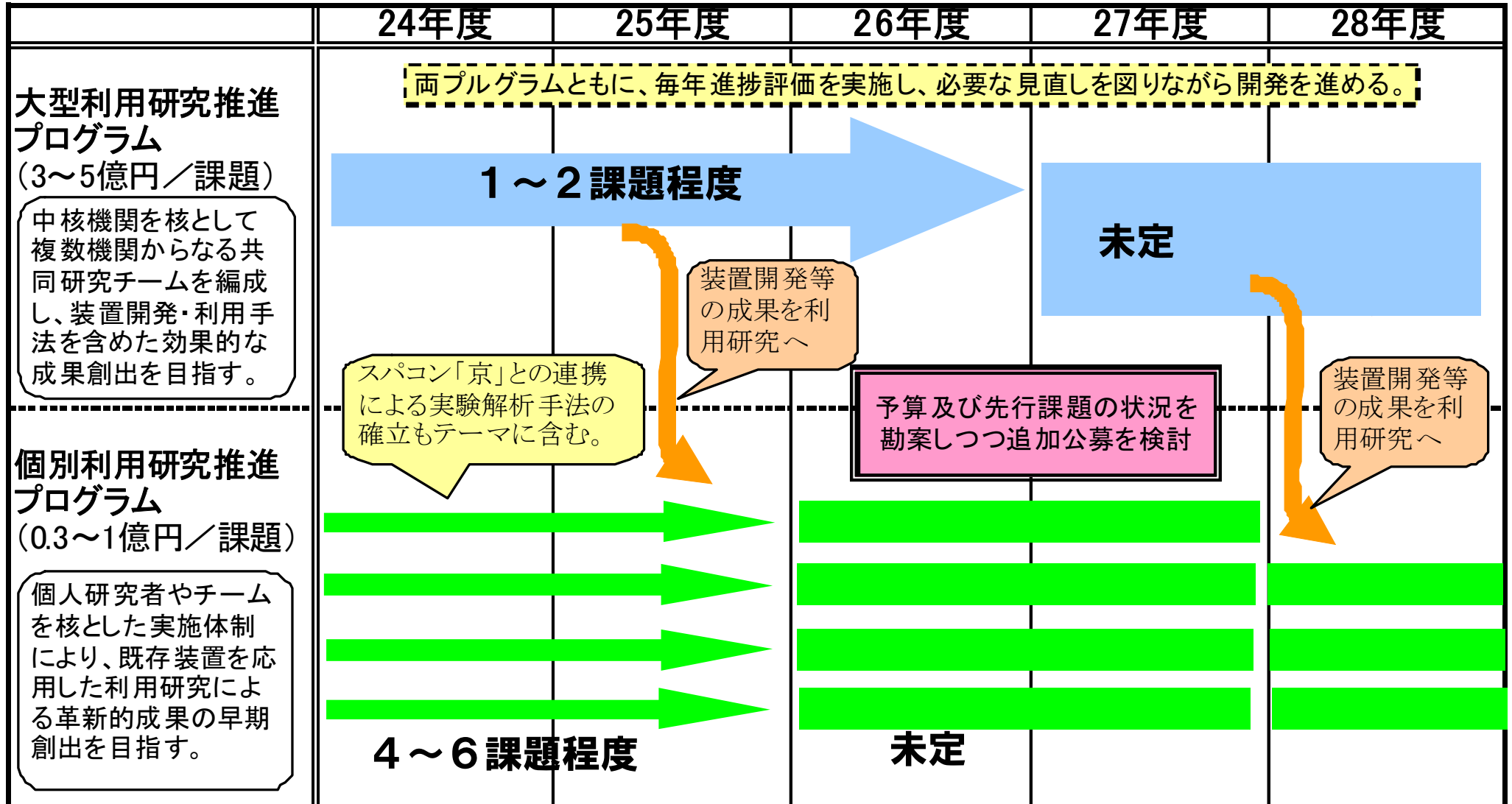
※ 平成26年度は、事業全体の予算状況及び先行課題の状況を勘案しつつ追加公募を検討する。

※ 事業終了後に事後評価を実施する。

SACLA重点戦略課題推進事業 全体計画

- SACLAの共用を強力に推進し、世界を凌駕する成果の創出を目指す。
- 先導的成果を早期に創出することで、利用者・利用分野の拡大、今後の産業利用の拡大を図る。

SACLA重点戦略課題推進事業の年度推移について



【参考】海外施設での研究開発状況等について

- X線自由電子レーザーは極めて革新的な光源であるため、その利用技術を発展させることが重要。
- このため、先行する米国施設でもその利用研究にあたり、重点分野の設定及びそれに基づく重点的予算配分等を行い、大規模な利用研究チームの構築により成果の創出を図っているところ。

アメリカ

- 米国では、XFEL施設立ち上げ時に重点的に行う研究分野として6分野（①原子物理②プラズマと極限状態③生体単粒子解析④フェムト秒化学⑤ナノスケールダイナミクスと物性物理⑥X線レーザー物理）を指定。
- このため、エネルギー省（DOE）が主導して、これらの分野における利用研究や機器整備にこれまで約100億円規模の予算を投資。計測機器の高度化・開発により、創薬・材料開発をはじめとした幅広い研究分野での成果創出を目指している。
- 例えば③について、膜タンパク質（光合成に関するもの）の構造解析に関して50～60名からなる大型プロジェクトを強力に推進。
- また、同施設に隣接するスタンフォード大学にXFEL利用研究を主として行う3研究センター（①材料・エネルギー科学、②超高速エネルギー科学、③触媒科学）を設置（年間予算約15億円）。



ドイツ

- ドイツ電子シンクロトロン研究所（DESY）が、2015年の供用開始を目指し施設を建設中。
- 並行して、DESY、マックスプランク研究所（MPG）、ハンブルグ大学などによる共同出資で200名弱からなる「自由電子レーザー科学研究所（CFEL）」を設立（年間予算約10億円）し、米国施設と連携した研究課題を進めている。

