

# X線自由電子レーザー 現状及び今後の取組

独立行政法人理化学研究所

平成23年3月

# X線自由電子レーザー事業の概要

※総建設費約388億円（平成18～22年度）

○第三期科学技術基本計画において、国家的な大規模プロジェクトとして基本計画期間中に集中的に投資すべき「国家基幹技術」として位置付け。国家的な目標と長期戦略を明確にして取り組むものの一つとして、平成23年度中の供用開始に向けて、平成18年度から事業を実施。

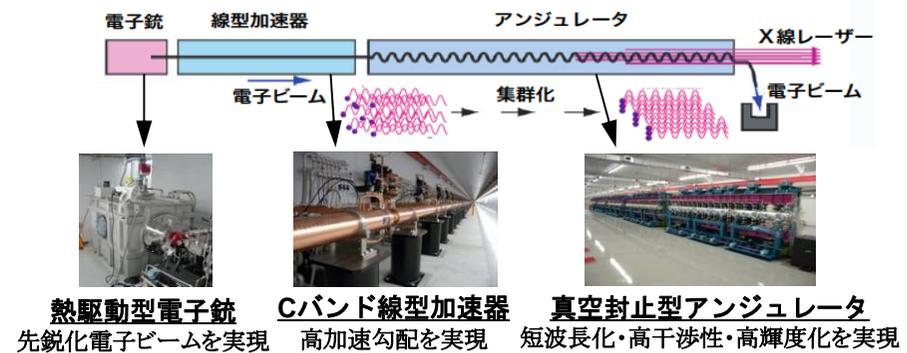
○原子レベルの超微細構造、化学反応の超高速動態・変化を瞬時に計測・分析することを可能とする世界最高性能の研究施設で、ライフサイエンス分野やナノテクノロジー・材料分野など、様々な科学技術分野に新たな研究領域を開拓し、欧米に先んじる成果の創出を目指す。



## ◆ X線自由電子レーザーの特徴

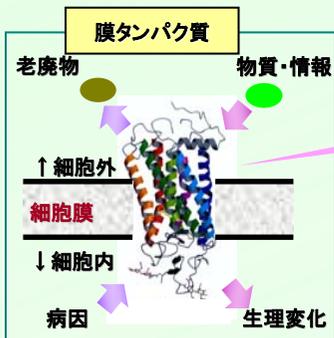
- ・ **短い波長** [硬X線（波長0.1ナノメートル以下）]  
→ 原子・分子レベルでの超微細構造解析
- ・ **短いパルス** [フェムト秒パルス（10兆分の1秒以下）]  
→ 化学反応等の超高速動態・変化を捕捉
- ・ **強力な光** [超高輝度（SPring-8の10億倍以上）]  
→ 物質深部の解析、瞬時のデータ取得
- ・ **質の良い光** [高干渉性（コヒーレント性100%）]  
→ よりシャープな像の取得・精密計測

## ◆ X線自由電子レーザーの構成



### ライフサイエンス分野

～ 膜タンパク質の構造解析 ～



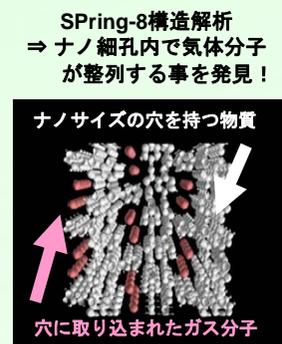
医療、創薬に極めて有用であるが、脂質（細胞膜）が結合しており、結晶化が極めて困難

既存技術では解析困難  
SP8: 結晶化が必要、NMR: 分子量に限界あり

XFELにより結晶化が不要で1つのタンパク質でも構造解析が可能。医薬品開発の鍵である膜タンパク質構造解析に要する期間を10年から半年に大幅短縮。

### ナノテクノロジー分野

～ 気体吸着素子の開発 ～



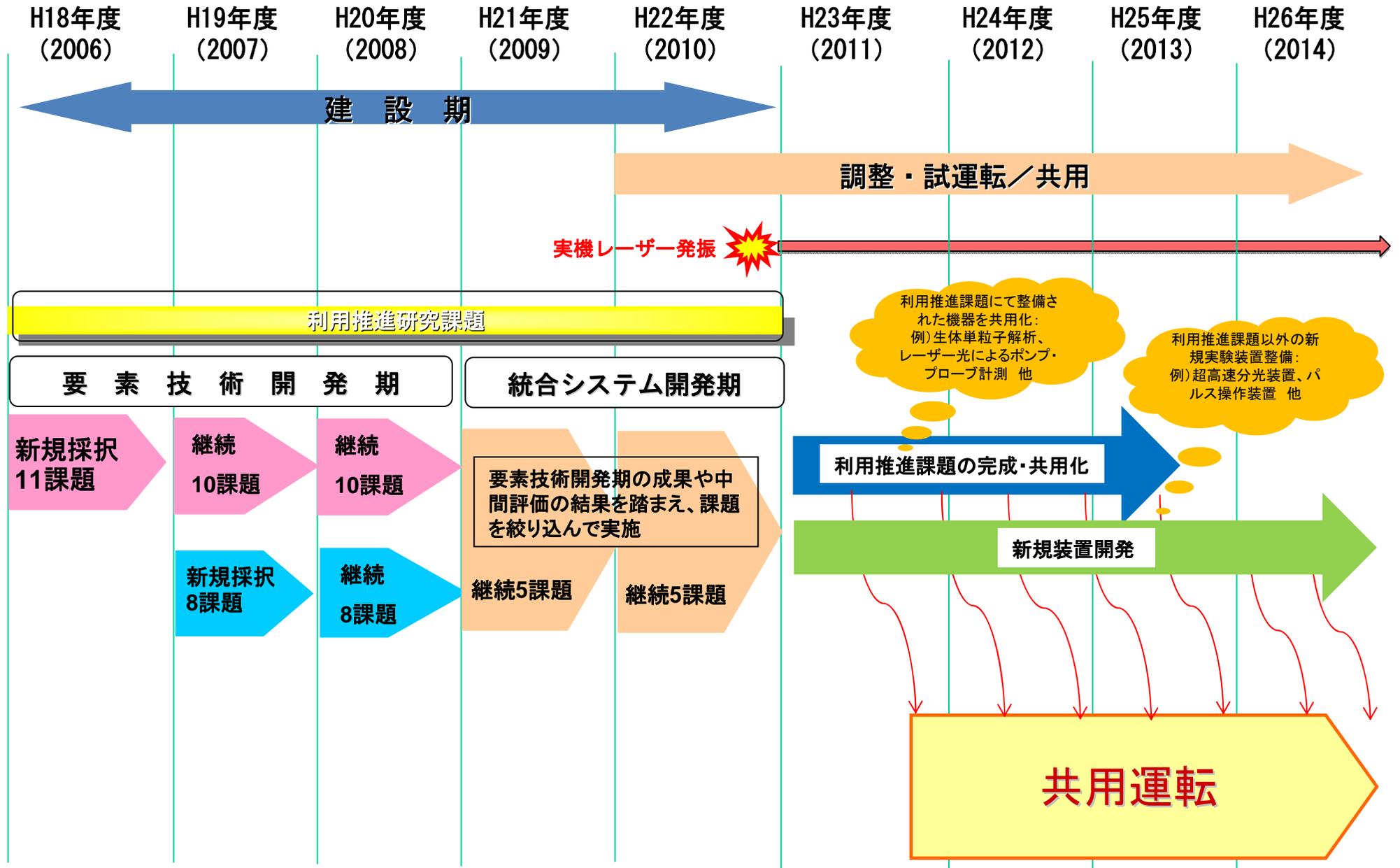
SPring-8構造解析  
⇒ ナノ細孔内で気体分子が整列する事を見!

XFELにより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ズムを解析可能。

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

シックハウス原因物質や、フロンガスなどの環境汚染物質などの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の開発に貢献。

# 経緯と今後



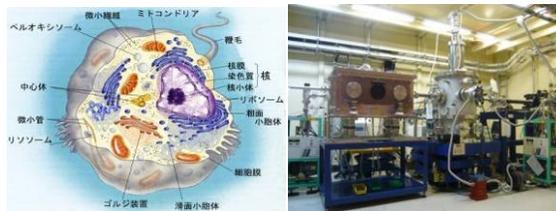
# 具体的な研究例

～ 見たいものを、見たい場所で、見たい速さで ～

## バイオテクノロジー分野

～ 非結晶生体単粒子解析 ～

### 細胞等の構造と動き



サンプル例)  
・細胞  
・細胞小器官

細胞小器官のモデル図 (左) と  
コヒーレントX線回折実験装置 (右)

非常に重要であるが結晶化が絶望的・不可能な生体粒子が存在  
・非結晶生体物質の解析には、高輝度且つ高干渉性の光源が必要

XFELによる解析で非結晶生体物質の構造と動きを解明  
＜短いパルス、強力な光、質の良い光＞

葉緑体の中での光合成機能に迫る

CO<sub>2</sub>

食料問題

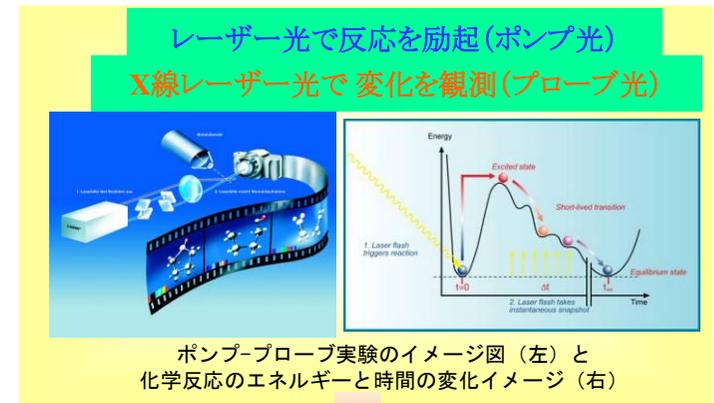
エネルギー消費を減らす社会への貢献

環境問題

## ナノテクノロジー分野/環境科学分野

～ 化学反応のリアルタイム計測 ～

### 選択的化学反应



ポンプ-プローブ実験のイメージ図 (左) と  
化学反応のエネルギーと時間の変化イメージ (右)

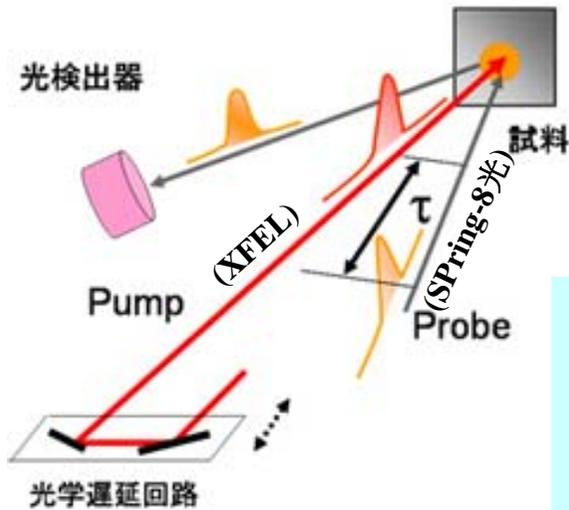
XFELで化学反応の素過程を解明  
＜短い波長、短いパルス、強力な光＞

- 新機能物質創成
- 環境破壊物質の除去
- 触媒機能の高度化

XFELの短いパルスにより超高速過程の追跡が可能

# SPring-8との連携（相互利用実験基盤）

## 新しい光反応の発見や新規材料・触媒開発に貢献



通常は起こらない物質同士でも非常に強い光を当てると、“化学反応”を起こすことがある。

■XFELの強力な光で人工的に化学反応を起こすことができる

■放射光でそのときの原子配列、電子のエネルギー状態を調べることができる

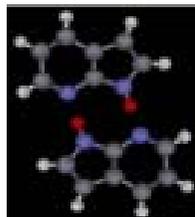
この2つの利点を活かして反応を観測すると、全く新しい光学現象や知見を得ることが可能になる。この知見に基づいて太陽光発電パネルなどに使用される**新規触媒**や**化合物などの設計や開発**に貢献。

光が当たると構造が変化したり化学反応が起こったりする高分子材料などがあるが、なぜそのような現象が起こるかは謎。さらに、デザインして作り出すことは非常に困難。

■SPring-8の放射光は、強力なさまざまな波長の光を照射することができるため、色々な元素を対象とした解析ができる

■XFELは、その短パルス性により、超高速過程を調べることができる

この2つの利点を生かして、放射光照射時とXFELの照射時の遅延時間差を調整することで、化学変化・構造変化の様子を知ることができる。**窒素、酸素、二酸化炭素などの効率的なガス分離**や**吸蔵機能を持つ多孔性物質の設計や開発**に貢献。

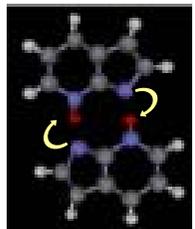


光で化学反応を開始

放射光照射

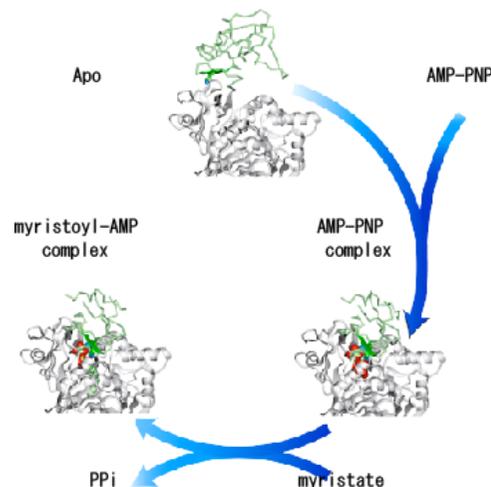


状態変化



瞬間の変化を観測

XFELで観察



人体の代謝をつかさどる脂肪酸代謝システムの反応（脂肪からエネルギー変換）過程の解明

疾病の原因解明・創薬には、生体を構成するタンパク質のダイナミックな動きを精密かつ連続イメージとして知ることが重要。

■XFELで構造解析すると、非常に短い時間で変化していくタンパク質の構造を結晶化することなくそのままの姿を精密に見ることができる。しかしXFELは光が強すぎて試料を壊してしまうので、その動きを連続して観察することができない。

■SPring-8では、試料を壊さず時間を追って見る事ができるが、結晶化しなければ解析できないので、ダイナミックな動きを見る事ができない。

この2つの利点を組み合わせて解析を進めることにより、**糖尿病などの疾病の原因解明・創薬**に貢献。

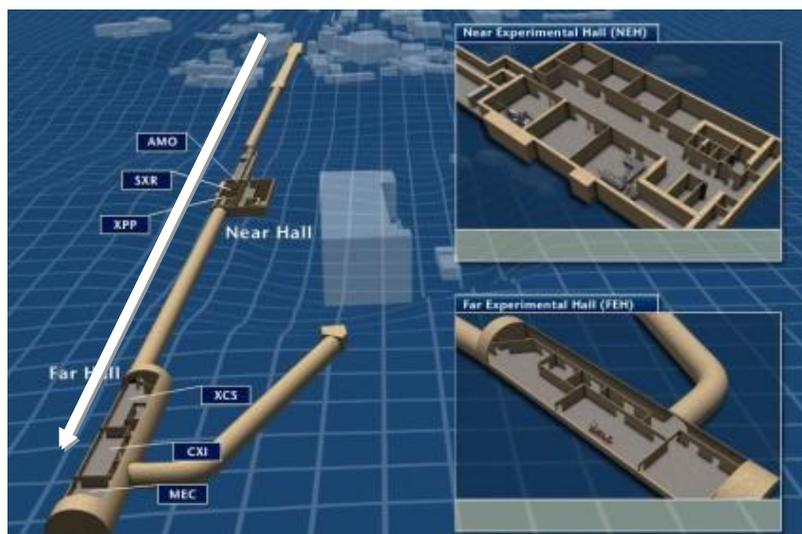
具体例) 新しい磁性・電気的特性の発見やしくみの解明による新規物質創生、光記録材料等の開発、エネルギー生産や細胞機能の調節などの生体の基本的働きを知り、疾病の解明や創薬につながる

# 米国の状況 (LCLS : Linac Coherent Light Source)



## スタンフォード大学 線形加速器研究センター

- 2009年 実験施設完成 (総額約756億円)
- 2009年4月 X線レーザー発振 (0.15nm) に成功 (世界初)
- 2009年10月 ユーザー運転開始 (0.6nm : 軟X線領域)
- 2010年10月 0.15 nm (硬X線領域) で部分的に運転開始
- 2011年10月 0.15 nmで原子レベル構造解析等実験開始予定



名称	開始時期	内容
AMO (原子分子光学)	2009年10月	光と原子分子の相互作用
SXR (軟X線物質科学)	2010年5月	軟X線領域の物質科学
XPP (X線ポンプ・プローブ)	2010年10月	高速化学反応のストロボ撮影
CXI (コヒーレントX線イメージング)	2011年10月(予定)	生体試料のイメージング
XCS (X線相関分光)	2012年10月(予定)	ナノ材料のイメージング
MEC (極端条件)	2013年10月(予定)	極端条件下の反応解析

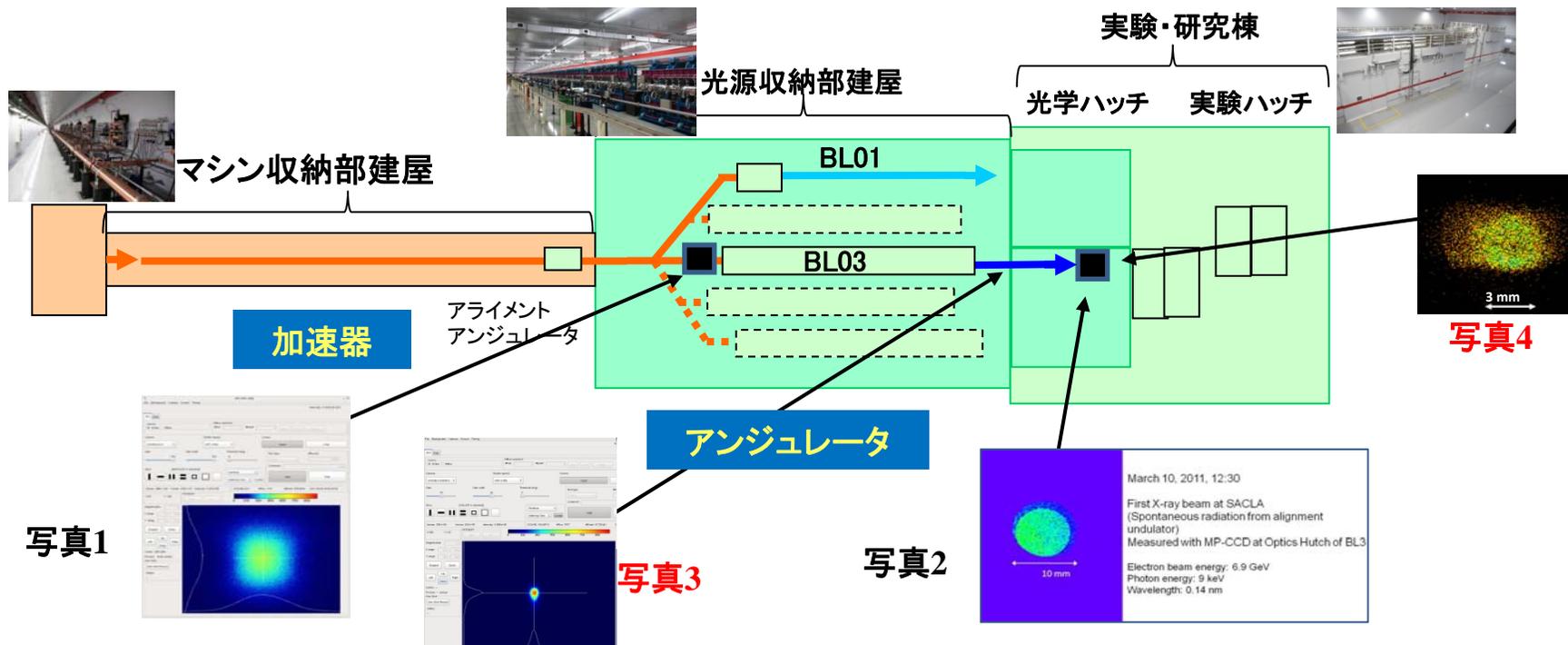
本格実験  
(整備中)

- ・ 2009年から、314の課題申請 (利用者約1,000人)、約6割が米国外からの課題、25カ国。
- ・ 2010年秋期は、107課題の申請で26課題が実施。ユーザーは2015年までに1,600名に増加見込。  
(競争率が高い; 採択率20%程度)
- ・ 一番研究が進んでいるのがAMOのグループで、Nature1本、PRL3本、Optics Express1本の論文掲載。
- ・ LCLS-II (軟X線領域) を新たに建設予定。約400万ドルで2017年までに完成。既存加速器活用、アンジュレータ併設、実験ハッチ4つ追加予定。



# XFELのビーム調整状況について

- 3/9 アライメントアンジュレータからのX線自発放射光を確認(写真1)
- 3/10 同光を光学ハッチ内で確認(写真2)  
(電子エネルギーは6.9GeV・波長は0.14nm、電子ビームはBL01にダンプ)
- 3/14-18 加速管エージング実施
- 3/22 電子ビームの7.82GeV加速に成功(BL01にダンプ)
- 3/23 BL03最終ビームダンプまで電子ビームの出射に成功(写真3)  
アンジュレータ(#15,16)からのX線自発放射光を光学ハッチ内で確認(波長は0.083nm。写真4)



- 今後の予定及び想定:
- ・引き続きアンジュレータ磁石のギャップ調整
  - ・ビーム調整
  - ・装置提案課題の実施
  - ・レーザー発振
  - ・供用開始(H24年3月目途)

# XFEL利用装置提案課題について

1/20のXFEL利用推進協議会にて利用推進方策が議論され、XFEL施設の完成後、直ちに本格的な利用研究を推進し、革新的な成果を多数創出するために、「X線自由電子レーザー利用装置提案課題」の募集を行うこととなった。

これは、理研が国内の幅広い研究者の方々と協力しながら、利用研究を実施する際に必要な装置の整備を行うものである。

スケジュールは以下の通り:

3/1 公募開始

3/28 公募×切

4/11~/12 利用装置提案課題シンポジウム

@ 播磨(XFEL実験研究棟 大会議室)

4月中旬 結果通知、客員研究員手続き準備

4月下旬 課題開始