

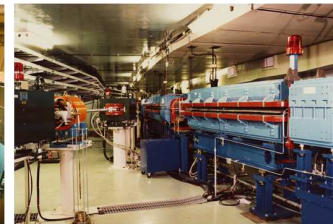
KEK・物構研・Photon Factory これまでの取組について

平成26年6月10日(火)
大学共同利用機関
高エネルギー加速器研究機構
村上洋一

施設概要



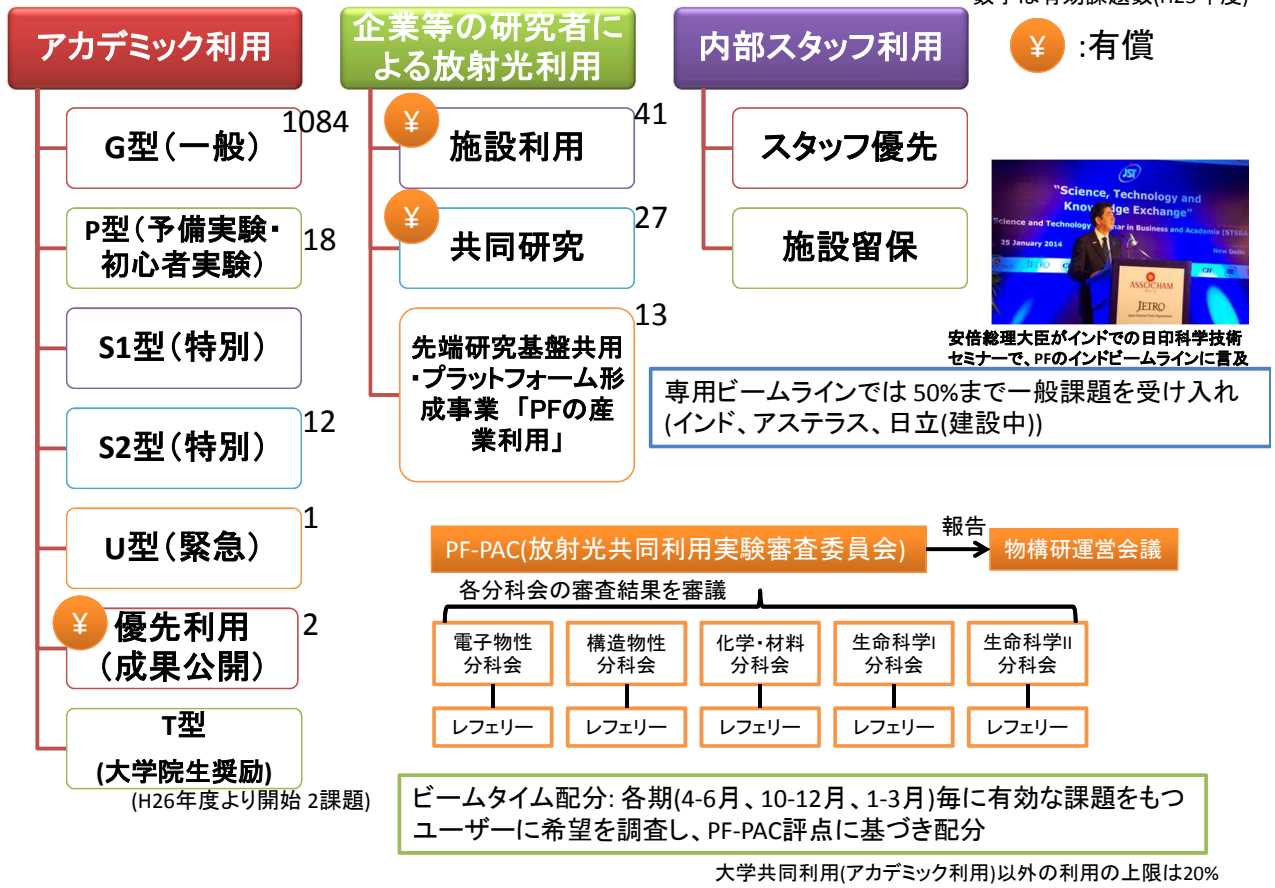
大学共同利用による次世代の人材育成
先端的研究と汎用的研究の両立
世界でも類を見ない単バンチ大強度パルス放射光源(PF-AR)



	PF	PF-AR	
運営主体	大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構		
設置場所	茨城県つくば市大穂1-1		
蓄積リング周長	187 m	377 m	
ビームライン数	22 本	8 本	
ステーション数	39 ステーション	8 ステーション	(ブランチBLを含む)
スタッフ数	98 人(測定器系及び光源系)		(任期付職員を含む)
事務・研究支援員等 ポスドク等	16 人 26 人		H26年5月1日現在
電子エネルギー	2.5 GeV	6.5 GeV	
波長領域	5 eV ~ 80,000 eV (80 keV)	6.5 keV ~ 140 keV	
建設経費(当初)	195 億円	68 億円	
運営費	28.59 億円		H25年度(利用料収入含)
運転時間	4176 時間	3912 時間	H25年度
ユーザー運転時間	3432 時間	3470 時間	H25年度
年間利用者数	6228 人(延べ数) 3096 人(総数)		H25年度
大学院生ユーザー数	1320 人(総数)		H25年度

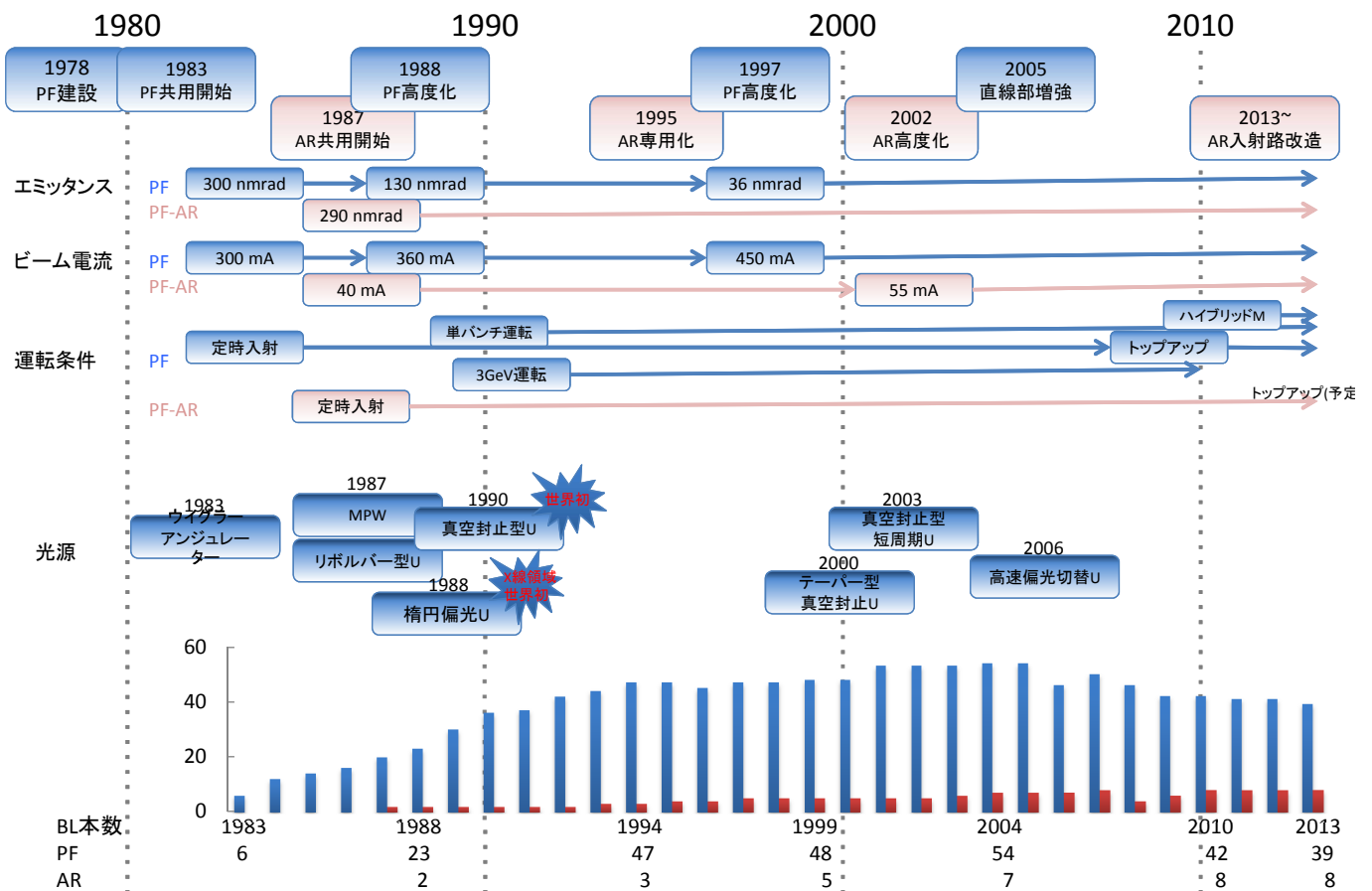
施設利用制度・スキーム

数字は有効課題数(H25年度)



安倍総理大臣がインドでの日印科学技術セミナーで、PFのインドビームラインに言及

経緯



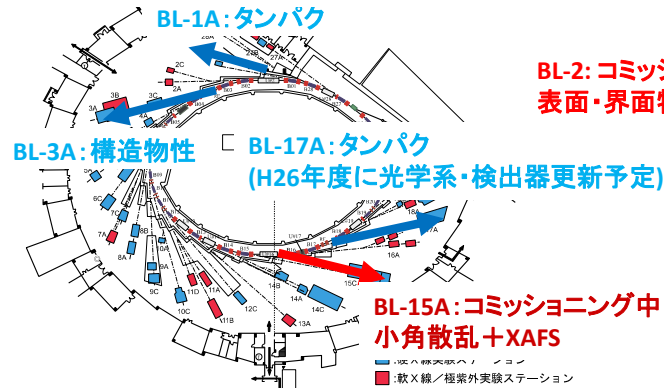
施設の高度化

PFリング直線部増強 (2005)とビームライン統廃合

既存の直線部を延長するとともに、新たに短直線部をつくり、挿入光源BLの拡充を図った

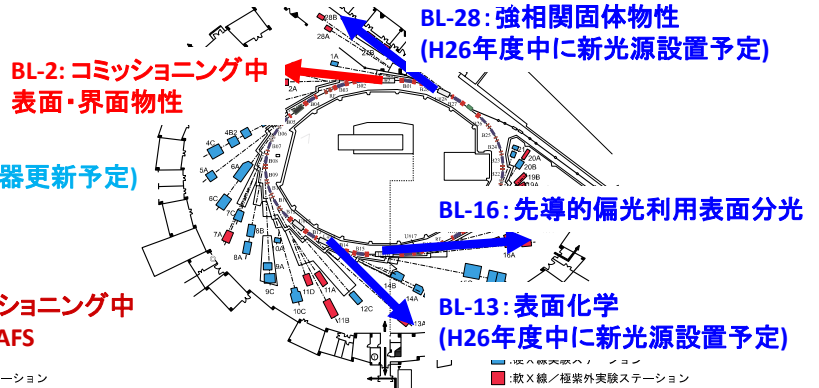
短直線部ビームライン整備

(短周期アンジュレータによるX線光源)



中長直線部ビームライン整備

(VUV/SX光源のためのアンジュレータ専用化)



自動測定・遠隔利用



試料のマウント、スクリーニング、データセット収集、試料交換等を行う全自動データ収集・処理システム。タンパクBLの他、粉末回折、XAFS BLなどでも導入中。

放射光利用技術の基礎の確立

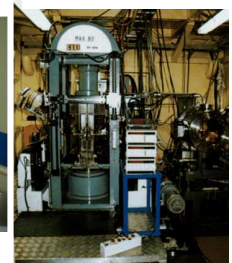
IP検出器



XAFS



高圧下構造研究



ユーザーとの連携

PF-User Association (PF-UA)

- すべてのPF登録ユーザーを組織する団体
- 2012年4月より発足、会費無料
- PFの運営に主体的に参画 (PFのビームライン運営、将来計画、運転時間削減問題等)
- PFシンポジウムをPFと共に主催

【連携の一例】

- ユーザーグループ(UG)運営ステーション
- ユーザーグループ(UG)が主体的に運営するビームライン・ステーション
- 施設側のスタッフの人的資源不足を補う役割
- 施設側はUGに対して旅費や整備費を支援し、3年ごとに評価・見直しを行っている



会長
幹事会
運営委員会

行事委員会
編集・広報委員会
教育委員会
戦略・将来計画委員会
特別委員会

各ユーザーグループ
・XAFS
・タンパク質結晶
・小角散乱
・...

PF懇談会 は、2012年4月 から、

PF-UA に、移行
(PF-User Association) します!!

Q: なぜ、PF懇談会は改組するの？

A: PF懇談会 は、以下の点を指摘されていました。
PF懇談会の会員は、PFのユーザーの20%程度。PF及びSKEKは大学共同利用機関法人であり、コミュニティの意見、要請に基づく運営が必要。しかし、組織率20%のPF懇談会が、PFのユーザーコミュニティたりえるか？

では、その解決のために、PF-UAをつくりましょう!!

懇談会を申告制から**全員参加型**に変更
PFのUser全員が主体的に参加する**PF-UA**
新規光源計画を加速するため、また放射光を利用する研究活動を効果的に推進するための、ユーザーコミュニティです。

☺ **会員資格**
PF User (登録者)
入会希望者

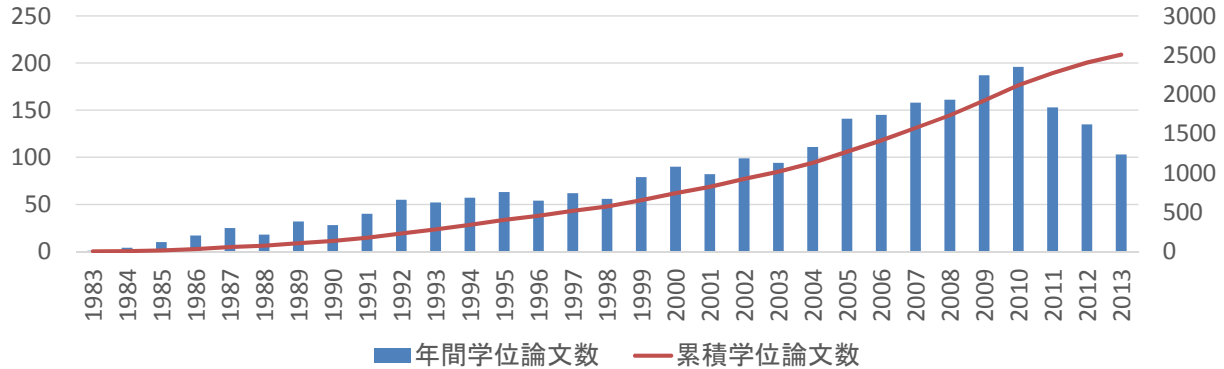
☺ **会費**
無料
法人の方は会費徴収員としてご参加をお願いいたします。

*大学共同利用機関は、大型測定機器や高度計算機などを専らで大学単独では購入することが難しい研究施設を整備し、あるいは、貴重な文献や資料を収集保存することによって、学術研究の発展・振興に資するという国家政策に基づく研究機関である。(Wikipedia)
制作 PF懇談会幹事会、2012年3月12日

人材育成への貢献

学位論文(修士・博士)

発足当時より大学共同利用機関として、放射光施設を使用した大学院教育の場を提供し、毎年多くの修士論文および博士論文作成に寄与してきた。これまでに累計、2577報の修士・博士論文を輩出。



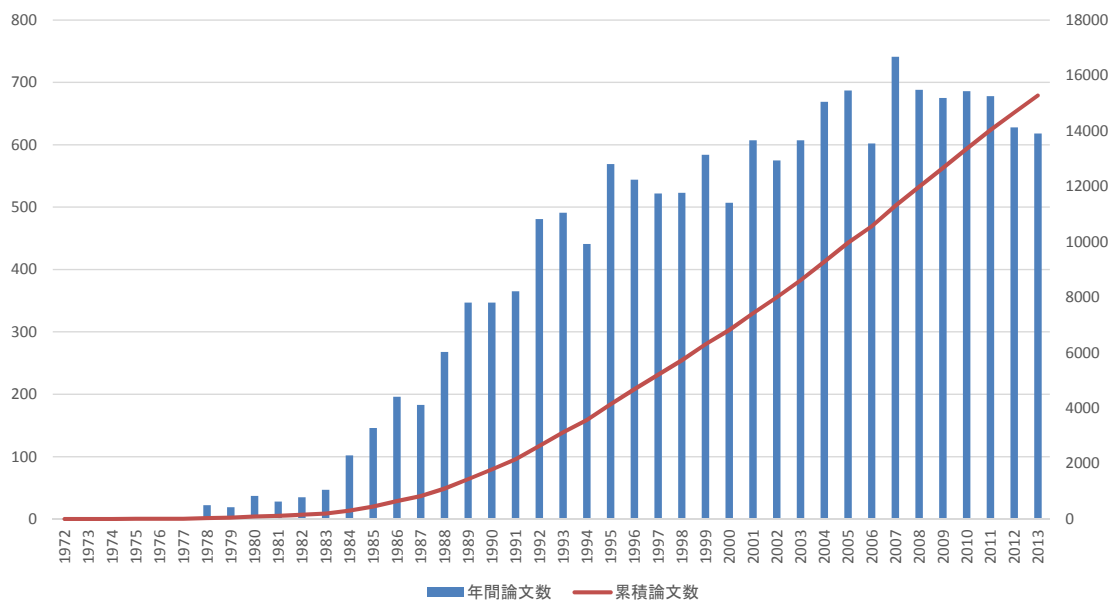
大学等運営ステーション
施設側のスタッフの人的資源不足を補って、大学が主体的に運営するステーション。大学側は、学生実習や単位取得のためにステーションを利用し、施設側は運営大学に対して旅費やステーション整備費を支援している。3年ごとに評価・見直しを行っている。

T型課題
課題募集のカテゴリーの一つとして、博士課程の大学院生が申請できる課題を2013年度より新設した。PFに長期滞在して学位取得を目指す学生を支援し、次世代の放射光分野を担う研究者の育成を目指している。

総合研究大学院大学、特別共同利用研究員制度、サマーチャレンジ、など

主な成果①

登録論文数



Nature (および姉妹紙): 151報
Science: 38報

毎年600~700報の論文を生産
これまでの累計では、15,434報
の論文が登録されている

主な成果②

論文の被引用回数TOP5 (被引用回数1000件以上)

論文タイトル	著者	掲載誌、巻、頁、年	使用ステーション	被引用回数 (2014.5月)
Magnetic Control of Ferroelectric Polarization	T.Kimura, T.Goto, H.Shintani, K.Ishizaka, T.Arima and Y.Tokura	Nature, 426, 55 (2003)	BL-4C	2405
Structure at 2.8Å Resolution of Cytochrome c Oxidase from <i>Paracoccus denitrificans</i>	S.Iwata, C.Ostermeier, B.Ludwig and H.Michel	Nature, 376, 660 (1995)	BL-6A2	2000
Ordered Nanoporous Arrays of Carbon Supporting High Dispersions of Platinum Nanoparticles	S.H.Joo, S.J.Choi, I.Oh, J.Kwak, Z.Liu, O.Terasaki and R.Ryoo	Nature, 412, 169 (2001)	BL-10B	1836
The Whole Structure of the 13-Subunit Oxidized Cytochrome c Oxidase at 2.8Å	T.Tsukihara, H.Aoyama, E.Yamashita, T.Tomizaki, H.Yamaguchi, K.Shinzawa-Itoh, R.Nakashima, R.Yaono and S.Yoshikawa	Science, 272, 1136 (1996)	BL-6A2	1796
Structures of Metal Sites of Oxidized Bovine Heart Cytochrome c Oxidase at 2.8Å	T.Tsukihara, H.Aoyama, E.Yamashita, T.Tomizaki, H.Yamaguchi, K.Shinzawa-Itoh, R.Nakashima, R.Yaono and S.Yoshikawa	Science, 269, 1069 (1995)	BL-6A2	1277

主な成果③

Ada Yonath博士とPhoton Factory

1980s			1990s			2000s			2010s		
1980 リボソーム 結晶化開始			1989 Hope <i>et al.</i> Acta Cryst. B ↑ 結晶凍結法	1996 Thygesen <i>et al.</i> Structure ↑ 重原子同型置換 (PFの実験結果)		2000, 2001 Schluenzen <i>et al.</i> Harms <i>et al.</i> Cell ↑ ノーベル賞 受賞対象論文				2009 ノーベル化学賞 受賞	
			← 1987-1997 ユーザーとしてPhoton Factoryを利用 →								

Hope *et al.* Acta Cryst. B (1989) "Cryocrystallography of ribosomal particles" (被引用数: 110)
結晶凍結法によるリボソーム結晶のX線損傷の低減

Thygesen *et al.*, Structure (1996) "The suitability of multi-metal clusters for phasing in crystallography of large macromolecular assemblies" (被引用数: 57)
重原子同型置換によるリボソーム結晶の位相決定方法の提案 (PFの実験結果)

Schluenzen *et al.*, Cell (2000) "Structure of functionally activated small ribosomal subunit at 3.3 Å resolution" (被引用数: 873)

Harms *et al.*, Cell (2001) "High resolution structure of the large ribosomal subunit from a mesophilic eubacterium" (被引用数: 812)

ノーベル賞受賞の対象となった主論文

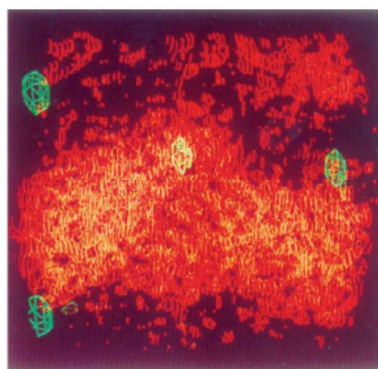
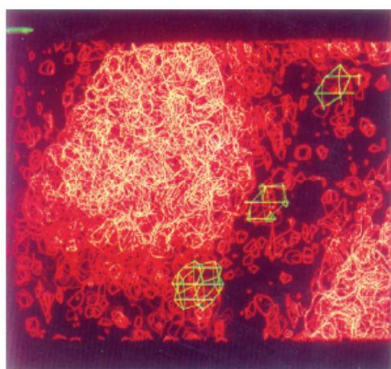
主な成果④

重原子同型置換によるリボソーム結晶の位相決定方法の提案 (PFの実験結果)

Thygesen, J., Weinstein, S., Franceschi, F. and Yonath A.
Structure (1996)

“The suitability of multi-metal clusters for phasing in crystallography of large macromolecular assemblies”

Figure 1



Two views (in orange) of portions of the SIR 9–12 Å electron density map of H50S on which the positions of the W30 cluster are shown (in green). Crystals of H50S grow as extremely thin plates and diffract best to 2.9 Å [16]. They are typically $0.3 \times 0.3 \times 0.01 \text{ mm}^3$ in size; symmetry, C222₁; cell dimensions, 212 Å, 302 Å and 567 Å. Crystals were soaked for up to 34 days in solutions containing 1–2 mM of W30, W12, W18 or W17Co. For all sets the $R_{\text{merge}}(I) = 8.4\text{--}10.3\%$ and the completeness was 74–91%. The number of major sites are 2, 2, 1 and 4, respectively, with occupancies between 0.2 and 0.6. Phasing power was between 0.7 (for the W17Co cluster) and 1.36 (for the W30 cluster). The overall figure of merit, after two cycles of solvent flattening was 0.65 [14,15].

タングステン・クラスターを用いた重原子同型置換によるリボソーム結晶の電子密度図

主な成果⑤

Ada Yonath博士のNobel Lecture

HIBERNATING BEARS, ANTIBIOTICS AND THE EVOLVING RIBOSOME

Nobel Lecture, December 8, 2009

By ADA E. YONATH

Department of Structural Biology, Weizmann Institute of Science, 76100 Rehovot, Israel.

Acknowledgments

Thanks are due to all members of the ribosome groups at the Weizmann Institute and at the Unit for Ribosome Research of the Max Planck Society at DESY/Hamburg for their experimental efforts and illuminating discussion. Support was provided by the US National Institutes of Health (GM34360), the German Ministry for Science and Technology (BMBF 05-641EA), GIF 853-2004, Human Frontier Science Program (HFSP) RGP0076/2003 and the Kimmelman Center for Macromolecular Assemblies. Ada E. Yonath holds the Martin and Helen Kimmel Professorial Chair. **X-ray diffraction data were collected** the EMBL and MPG beam lines at DESY; F1/CHESS, Cornell University, SSRL/Stanford University, ESRF/EMBL, Grenoble, BL26/PF/KEK, Japan, and APS/Argonne Nat Lab.

主な成果⑥

白川英樹博士とPhoton Factory

1970s		1980s		1990s		2000s	
1970 ポリアセチレン 重合研究開始 (東工大・資源研)	1977 Shirakawa <i>et al.</i> JCS Chem. Comm. ↑ ノーベル賞 受賞対象論文	1983 Tokumoto <i>et al.</i> Solid State Commun. ↑ 臭素ドーブポリアセチレンのEXAFS解析 (筑波大・PFの共同研究)	1987 Oyanagi <i>et al.</i> Synthetic Metals ↑ 臭素ドーブポリアセチレンの偏光EXAFS解析 (筑波大・PFの共同研究)				2000 ノーベル化学賞 受賞
 1983-1987 Photon Factoryを利用							

Shirakawa *et al.* JCS Chem. Comm. (1977) "Synthesis of Electrically Conducting Organic Polymers: Halogen Derivatives of Polyacetylene, $(\text{CH})_x$ " (被引用数: 2276)
導電性ポリアセチレンの合成 (ノーベル賞受賞の対象となった主論文)

Tokumoto *et al.*, Solid State Commun. (1983) "EXAFS Study of Bromide-doped Polyacetylene" (被引用数: 21)

Oyanagi *et al.*, Synthetic Metals (1987) "Polarized X-ray Absorption Spectra of Halogen-doped Polyacetylene" (被引用数: 6)

臭素ドーブポリアセチレンのEXAFS解析 (筑波大、PF他との共同研究)

主な成果⑦

臭素ドーブポリアセチレンのEXAFS解析 (筑波大、PF他との共同研究)

Tokumoto, M., Oyanagi, H., Ishiguro, T., Shirakawa, H., Nemoto, H., Matsushita, T., Ito, M., Kuroda, H. and Kohra, K. *Solid State Commun.* (1983)

"EXAFS Study of Bromide-doped Polyacetylene"

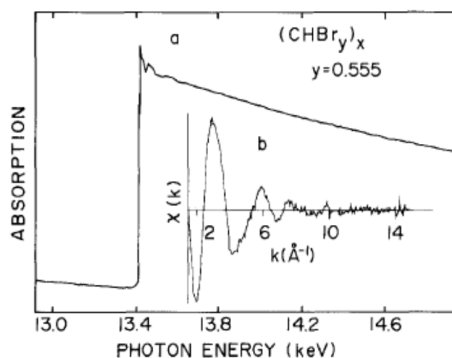


Fig. 1. (a) X-ray absorption spectra around the Br K edge, and (b) normalized oscillatory part for sample (iii).

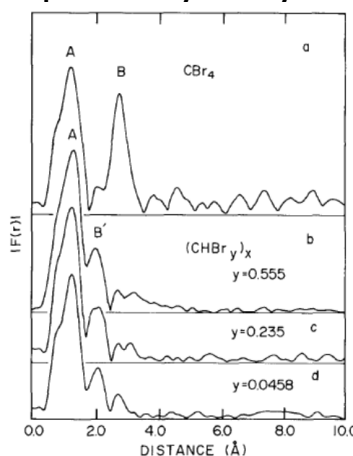


Fig. 2. Fourier transforms of k times $\chi(k)$ for (a) CBr_4 , (b) sample (iii), (c) sample (ii), and (d) sample (i). The magnitude scales are the same for all four data.

5-60%のBrドーブで
Br-C結合がほぼ同じ
結合長であることが
観測された

PFの最近の成果



鉄系超伝導物質で新しい磁気秩序層を発見 (2014年)

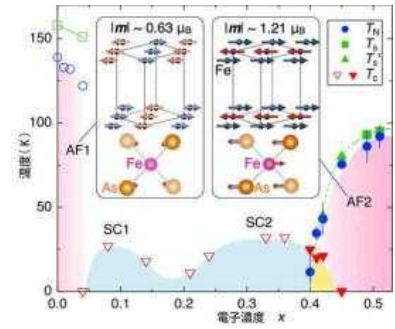
【中心研究者】 細野秀雄 (東京工業大学)
 【研究協力者】 山浦淳一、村上洋一 (KEK-PF) など

【研究概要・成果】

➢ 鉄系超伝導物質である $\text{LaFeAs}(\text{O}_{1-x}\text{H}_x)$ の磁気的性質および構造から、水素置換濃度 x が0.4を超える領域で新たな磁気秩序相が現れることを発見した。

【学術・産業への貢献】

- 新規超伝導物質の開発を通じて、エネルギー問題の解決につながることに期待。
- 物構研が持つ「マルチプローブ」の威力を遺憾なく発揮した典型例。
- 「Nature Physics (2014.3.16)」に掲載



LaFeAs(O_{1-x}H_x)の電子状態相図



ウイルスの侵入を感知し免疫系を活性化するタンパク質の構造を解明 (2013年)

【中心研究者】 丹治裕美、大戸梅治、清水敏之 (東京大学)
 【研究協力者】 三宅健介 (東京大学) など

【研究概要・成果】

➢ ウイルスの侵入を感知して免疫系を活性化するTLR8受容体の詳細な三次元構造を世界で初めて解明した。

【学術・産業への貢献】

- TLR8の活性を制御する抗ウイルス薬やワクチンなどの開発につながることを期待される。
- 「Science (2013.3.22)」に掲載

TLR8の活性化機構

