

**「X線自由電子レーザーの開発・共用」  
文部科学省に補足説明を求める事項及び  
補足の提出を求める資料への回答**

**補足説明を求める事項**

**(1) 目標設定について**

①波長が最短で0.06nm、パルス長が100fsという設計基本パラメータを決めた理由を、装置開発上の観点だけでなく、物理・化学・生物学的な応用面から説明していただきたい。

1. 設計基本パラメータは、欧米よりコンパクトかつ高性能というコンセプトで、設計当時、技術的に実現可能かつデータ検出が可能な最大限の値として設定された。それぞれの応用面でのメリットは以下の通り。

(波長について)

波長は空間分解能を規定する要素であり、原則として波長より細かい解像度での解析はできない。0.1nm付近が原子の大きさであり、波長0.06nmを実現することにより原子レベルを鮮明に測定可能である。また、波長は同様に元素識別実験の際に識別可能な元素の種類を規定しており、0.1nmよりも0.06nmの波長の方がより多くの元素識別が可能となる。例えば、0.1nmまでだと原子番号35番の臭素までの識別が可能であるが、0.06nmまでだと原子番号45番のロジウムまでの識別が可能。この間には、ルビジウム、ストロンチウム、イットリウム、ニオブ、モリブデンなど工業的にも非常に重要な元素が多く存在しており、これらの元素を含む材料評価が可能であることは、海外の計画（波長0.1~0.15nm）と比較して、新物質創成や光通信デバイス開発等の開発における大きな優位性である。

(パルス長について)

パルス長は時間分解能を規定する要素であり、原則としてパルス長以下の時間分解実験はできない。化学反応発生の初期過程はフェムト秒単位で推移していると推測されており、フェムト秒スケールでのパルス長の実現により、化学反応の素過程をコマ送りで詳細に分析可能となるため、化学反応の素過程解析が極めて重要である機能性触媒の開発等における大きな貢献が期待される。

**②パルス光源については、通常パルス長と繰り返し周波数を基本パラメータとして併記するが、今回は繰り返し周波数の現状を示していない。その理由を説明していただきたい。**

1. 設計値における繰り返し周波数は 60Hz であり、調整運転において 60Hz での運転に成功している。現在は、電力需給の逼迫による電力各社からの節電要請を受けて、10Hz に落とした運転もしており、供用開始後の繰り返し周波数については、ユーザーのニーズや電力事情等を勘案して決定していくこととなる。
2. 12月21日の資料においては、総合科学技術会議が平成17年に行った事前評価における指摘事項に対する達成状況を中心に記載したため、繰り返し周波数については記載しなかった。なお、海外施設における繰り返し周波数の設計基本値は、欧州 European-XFEL は 10 Hz、米国 LCLS は 120 Hz である。

**③XFEL のビーム品質が立派過ぎて、光学素子や計測技術がついて来られない恐れはないか説明していただきたい。(XFEL のビーム品質を有効に活用するための光学素子、計測技術について説明していただきたい。)**

1. 光学素子については、SPring-8 を活用しつつ高強度の硬 X 線に耐えうるものの研究開発を推進してきた。特に、大阪大学・東京大学を中心として開発した K-B ミラーは、極微集光による超高強度 X 線ビームの生成に成功している。これらのミラー作成技術については、メーカーへの技術移転も完了しており、米国 LCLS から多数の発注を受けている。
2. 計測技術については、XFEL のピーク強度は非常に高く、従来の検出器では定量計測が難しい。しかし SACLA においては、理化学研究所が産総研、ドイツ DESY、米国 LCLS 等と協力して、高いピーク強度でも定量的にビームの強度計測が可能な計測装置を開発し、既に運用している。さらに、SACLA の大強度 X 線レーザーを用いた散乱・回折実験に必須であるイメージング検出器について、理化学研究所において MPCCD 検出器を開発し、2次元像の計測に成功している。今後は、さらなる性能向上とコスト低減・大面積化を行うための研究開発を継続して実施する予定である。
3. なお、米国 LCLS においてはその絶対強度計測に成功しておらず、エネルギー損失から間接的に推定している。

## (2)期待される成果について

①XFEL を用いることによって初めて明らかにできる顕著な成果の例を従来法の限界も示しつつ、二つの重点戦略分野について示していただきたい。(配布資料の18ページにも記載されているが、XFEL でなければできないという強いメッセージが伝わってこない)。

1. 文部科学省においては「X線自由電子レーザー利用推進計画」の策定を通じて、成果の早期創出が期待されるもので、当面、施設設置者・登録施設利用促進機関・利用研究者が一体となって重点的に利用研究を進めるべき課題を「重点戦略課題」としてまとめている。
2. 重点戦略課題それぞれについて、研究ニーズと既存技術におけるボトルネック、SACLAにより期待されるブレイクスルー、期待される成果の例を【別紙1】にまとめているのでご参照いただきたい。

②米国の SLAC 国立加速器研究所の研究成果、SACLA に提出されている利用装置提案課題及び利用推進課題の進展状況から推察できる、共用運転開始後に期待される成果を具体的に示していただきたい。

1. LCLS においては、【別紙4】のように超高強度 X線に対するフェムト秒での原子の電子応答、フェムト秒タンパク質ナノ結晶構造解析、硬 X線レーザーのコヒーレント特性などについて成果が創出されている。但し、利用課題の採択率は20%を割っており、高い需要に対して十分なビームタイムを供給できておらず、物性研究や材料研究など応用的研究はまだ進展していない。
2. SACLA においては、X線自由電子レーザー利用推進研究課題及び理化学研究所装置提案課題を通じて、LCLS において実験に利用されている AMO 装置のほか、生体分子単粒子解析システムやポンプ・プローブ実験装置、汎用イメージングシステムが開発されている。これらは、集光装置・サンプルハンドリング装置・イメージング検出器・高速計算機から構成される大規模なシステムであり、2011年冬期の調整実験時間を利用してテストが進められ、基本的な性能の確認は完了している。
3. そのため、共用運転直後から、非結晶の生体試料やナノ材料の構造解析が可能になる

と見込まれており、LCLS における基礎的な光学的実験のみならず、光学デバイスに用いられるナノ材料解析や細胞小器官の単粒子イメージングなどといったイノベーションにつながる研究開発成果が早期に創出されるものと期待される。

4. また、LCLS においても開発されているナノクリスタルの回折実験を行うための装置の改良も早急に進めており、早期にテストが可能になる予定。

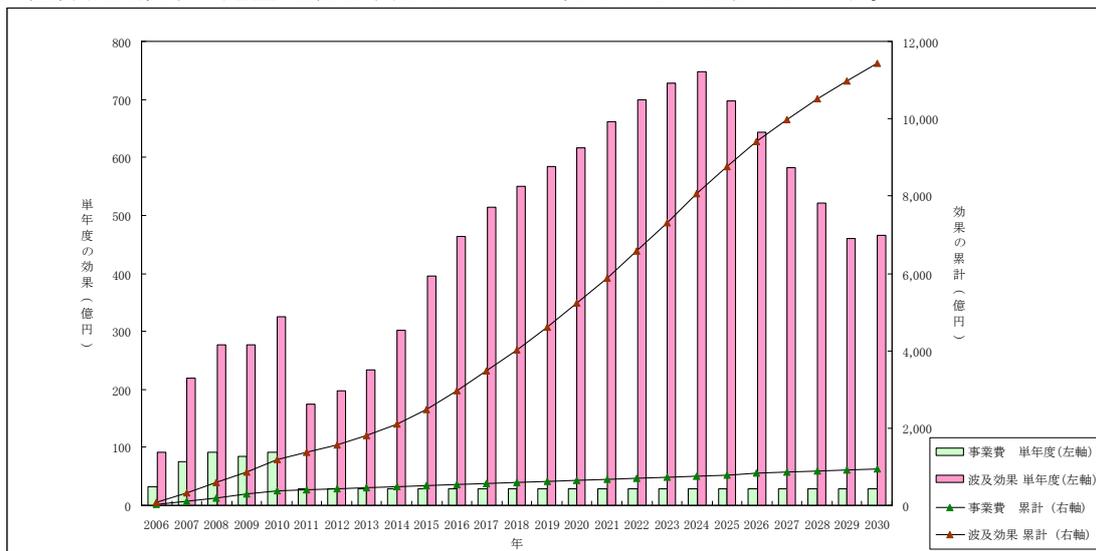
### (3) 社会経済的な波及効果について

① 経済波及効果の内訳と時間軸（効果の発生時期）、及び産業経済への貢献シナリオについて、定量的に示していただきたい。

1. XFEL の経済波及効果について、平成 17 年に株式会社日本総合研究所に委託して実施した、調査の報告書「X 線自由電子レーザー計画の波及効果」によれば、施設建設に向けて開発した要素技術による波及効果、施設建設及び運用による波及効果、施設を用いた研究による波及効果をそれぞれ以下の通り試算しており、2030 年までに累計 1 兆円を超える効果を生み出すことが可能であると結論づけている。

- ① 要素技術による波及効果について、無収縮コンクリート技術や高精度床研削装置等の 7 つの技術項目による産業界におけるコスト削減や新規市場創出により、2030 年までに累計で 900 億円程度 の経済効果が発生
- ② 施設建設及び運用による波及効果について、産業連関分析を用いて、2030 年までに累計で 2200 億円程度 の経済効果が発生
- ③ 利用研究による波及効果について、XFEL による利用研究テーマのうち比較的早期に産業への波及効果が現れると考えられる 4 つの分野について、それぞれ 1 % 程度の市場の代替が発生すると推測し、2030 年までに累計で 8300 億円程度 の経済効果が発生

2. 経済波及効果の発生時期を年度毎にグラフ化したものを以下に示す。



3. 特に利用研究を通じた経済波及効果については、試算されている規模と同等もしくはそれ以上の成果が生まれるよう、早期に先導的な成果を創出するとともに利用手法の開拓を行い、産業界を含めた利用者の一層の呼びこみと SACLA の最大限の戦略的活用を図ることが重要である。
4. そのため文部科学省においては、「X 線自由電子レーザー利用推進計画」において当面重点的に取り組むべき研究課題を重点戦略課題としてまとめ、これら課題について先導的な成果を創出するための研究開発を平成 24 年度から実施する予定である。
5. これらの取組を通じて、SACLA を通じた科学技術の飛躍的発展と、第四期科学技術基本計画が掲げるライフイノベーション、グリーンイノベーションの創出、さらには我が国の国際競争力の強化に貢献してまいりたい。

#### (4) 利用推進計画について

①ビーム課題のどれだけを公募するのか。また、公募以外のマシンタイムの利用はどのように決定されるのかを説明していただきたい。

1. 平成 24 年度については年間 7000 時間程度のマシンタイムを想定しており、調整状況を見つつ 3000 時間程度のユーザータイムの確保を予定している。残り 4000 時間でマシンの立上げ/下げ、加速器・光源・ビームラインの調整、装置開発や高度化のための技術開発等を実施する予定である。
2. SPring-8 での実績や海外施設等も参考にしつつ、ユーザーに安定して X 線レーザーを供給するための調整時間以外をユーザー利用の時間としてなるべく確保するという考えで運用している。
3. なお、SPring-8 の立ち上げ期（例：平成 9 年度）にはマシンタイム 1932 時間のうちユーザータイムは 1286 時間であり（マシンタイムの 66.6%）、また LCLS では施設側の調整時間を十分取らなかったため結果的にトラブル対応が後手になったり、新しいハッチの立上げにより時間がかかり成果の創出が想定よりも遅れたといった障害が発生したと承知している。

**②公募課題の採択審査の手順(日程、採択委員会の人選、採択方針など具体的に決まっていればその内容とその理由)はどのようなになっているかを説明していただきたい。**

1. 公募及び課題選定については、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき、登録施設利用促進機関（登録機関）が行うこととされている。登録機関においては、原則として半年に一度のサイクルで課題選定を実施することとしており、2012A 期(2012 年 3 月～7 月)は 10 月 6 日から公募を開始し 12 月 15 日に締切った。その後 1 月に、登録機関に設置した課題審査委員会及び選定委員会を経て、申請者に課題の採択不採択を通知している。
2. 課題審査委員会及び選定委員会のメンバーは外部有識者にて構成しており、課題審査における公平性を担保するため、その構成員については任期終了後に公表することとしている。
3. 採択方針は、文部科学省に設置した有識者からなる X 線自由電子レーザー利用推進戦略会議において策定した「X線自由電子レーザー利用推進計画」を踏まえ、登録機関に設置した選定委員会が以下の通り決定している。
  - (1) 科学技術的妥当性として、次の①又は②に該当すること。
    - ① 最先端の科学技術的価値（斬新性、革新性）を有すること又は SACLA の新たな可能性の開拓に貢献するとともに、以下の(イ)又は(ロ)のうち、いずれかに該当すること。
      - (イ) 学術的な貢献度が高いこと
      - (ロ) 産業利用の推進に貢献すること
    - ② 重要な社会的意義を有する又は社会経済へ寄与すること
  - (2) 研究手段としての SACLA の必要性
  - (3) 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること
  - (4) 実験内容の技術的な実施可能性
  - (5) 実施内容の安全性
  - (6) 重点戦略課題については、課題解決に向けた道筋の明確性についても重視する。
  - (7) 配分可能ビームタイムが利用研究課題の実施に必要なビームタイムを下回る場合、ビームタイム配分可否境界上の重点戦略課題及び一般課題において、選定に際し同等の評価を得た課題については、重点戦略課題の重要性に鑑み、その選定を優先する。

**③XFEL の個別利用課題（公募採択および機関実施の両方）の成果をどのように評価し、その後の運営や採択に反映させる計画かを説明していただきたい。**

（公募による利用実験成果の反映について）

1. 利用実験での結果は、利用課題実験報告書のタイトル、主著者および共著者、利用の目的および結果の概要を記した本文（添付画像含む）、発表形式、誌名、投稿／発表時期等を「利用課題実験報告書」として、課題実施後 60 日以内に提出する事を義務づけている。また、成果の公開として、課題実施後 3 年以内に、査読付論文の発表を原則として行うこととしている。
2. ユーザーによるこれらの結果は、次の課題審査においても考慮することとなっており、更なる効率的なビームタイムの配分を図ることとしている。

（理化学研究所および登録機関による利用成果の反映について）

1. 理化学研究所においては、開発した機器・装置については整備状況・技術情報を Web で公開しているほか、主要な論文等についてはプレス発表を行っている。またそれらの成果をユーザーミーティングなどを通じて議論を行い、その後の整備計画や運用方法にフィードバックしている。
2. 一方、登録機関においては、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」第 12 条に基づき施設利用の促進に資する調査研究を、文部科学大臣の承認のもと実施し、その成果を、利用者の利便性確保や利用実験の迅速化・効率化に反映させることとしている。

**⑤利用拡大のためには、ビームそのものだけでなく、それを活用するための分析装置、解析ソフトウェア、利用チュートリアルなど、さまざまなレベルの装置とソフトおよび運用体制が必要と推測される。その具体的な準備状況、および、供用後の整備計画はどうなっているか説明していただきたい。**

1. 施設建設と併行して、平成 18～22 年度には、文部科学省に設置した有識者会議である X 線自由電子レーザー利用推進協議会の主導の下、供用開始後早期に革新的な利用研究が実施できるよう利用装置のプロトタイプ開発等を行う XFEL 利用推進研究課題を実施。それにより、生体分子の回折像から立体構造の像回復を行う解析ソフトウェアの開発や、ポンプ・プローブ計測装置、生体分子単粒子解析装置などの様々な利用装

置を開発した。

2. また、調整運転を実施している平成 23 年度においては理化学研究所において公募にて装置提案課題を実施し、平成 22 年度までに開発された装置の実機への適用・調整や利用実験に新たに必要となった機器の整備を行っている。
3. さらに、平成 24 年度からは、文部科学省に設置した有識者会議においてとりまとめた重点戦略課題について、重点的に推進するため装置の開発・高度化、利用手法の開拓や先導的利用成果の創出を目指すための X 線自由電子レーザー重点戦略研究課題を実施する予定。(説明資料 14~19 参照)
4. 登録機関においても、利用者に対するワークショップや講習会を実施し、情報提供や技術の習得を促すとともに、登録機関の支援スタッフの技術研鑽を実施し、ユーザーサポートの体制を構築している。

**⑥SLAC など海外で先行して運用されている XFEL の運用経験、利用経験を持つ者を活用しているか。あるいは活用する計画があるかを示していただきたい。**

1. 米国 LCLS (SLAC) や欧州 European-XFEL とは競争関係にあるとともに協力関係にあり、経験者の引き抜きは行っていない。
2. しかしながら、欧米日の 3 極をはじめとする海外拠点とは協力協定を締結しており、持ち回りで合同ワークショップを開催するなど、情報交換や技術の比較・議論を行うことにより、相互の施設のより適切な運用・整備が図られる枠組みを構築している。

## **(5)他の施設も含めた総合的な展望について**

**①SPring-8、J-PARC 等の他の施設に関して、それぞれの目的、課題、期待される成果等を整理した上で、総合的な展望を示していただきたい。**

1. 理化学研究所が整備している SPring-8 をはじめとして、高エネルギー加速器研究機構が整備している Photon Factory や自然科学研究機構が整備している UVSOR などの放射光施設は、赤外光から硬 X 線までの広帯域の電磁波を利用可能であり、主として電子と光の相互作用により物質の構造や機能を解明するのに不可欠なツールとなっている。

2. しかしながら放射光では、電子の数が少ない水素やリチウムなどの軽元素の分析や物質の磁性の解明が困難であるので、主として原子核と中性子等との相互作用により物質の構造や機能・磁性を解明することができ、軽元素の解析を得意とする J-PARC との複合的な利用により幅広い物質の多様な性質を解析できる。
3. また、既存の放射光では明るさとコヒーレンスがボトルネックとなり、化学反応等のフェムト秒単位で推移する高速の過程を解明することが困難であったが、既存の放射光の 10 億倍の明るさを持ちコヒーレンスが 100% である X 線レーザーを発振可能な SACLA を用いることでその課題を解決できるものと期待されている。
4. このように、量子ビームはそれぞれの物質との相互作用の特長などから、得意な解析領域と不得意な解析領域が存在するため、相補的に活用することで物質の構造や機能の全体像を詳細に把握することが可能である。
5. 平成 23 年度は、J-PARC と SACLA が共に供用を開始することとなっており、今後は我が国の有する最先端の量子ビーム施設を相補的・複合的に利用した研究開発を推進して参りたい。  
(参照：別紙 2)

**②SPring-8 との相互利用実験及びスパコン「京」との連携に関する具体的な計画があれば示していただきたい。**

(SPring-8 との相互利用実験について)

1. 世界で唯一 X 線レーザーと放射光を同時に利用でき、光触媒開発等における研究成果が期待されている相互利用実験施設については、平成 22 年度に整備が完了しており、現在各種試験（漏洩、インターロック等）を実施している。
2. 今後も実験機器・装置の調整を進め、平成 24 年度中の実験開始を目指している。

(スパコン「京」との連携について)

1. 平成 24 年度予算案において、スパコン「京」等との連携を可能とする情報基盤の整備に係る予算を計上している。平成 24～25 年度に SACLA 側における情報通信インフラの整備を行うとともに、併行して既存の計算資源（Focus、e-Science 等）を使ったデータ転送実験や、理化学研究所計算科学研究機構と連携した解析ソフトウェアの開発

を進める予定であり、平成 25 年度中にユーザー実験への実験環境提供を目指している。  
(参照：別紙 3)

2. また、課題選定等にあたっては、京及び SACLA の登録機関同士の連携も必要であり、装置の開発と平行して、京と SACLA を共に利用する利用者の利便性向上に向けた制度設計も進めていく予定である。

## **補足の提出を求める資料**

### **①すでに共用開始されている米国の SLAC 国立加速器研究所から出ている研究課題(成果を含む)の概要を示す資料。(軟 X 線と硬 X 線とを分けて)**

1. 米国 SLAC において行われている主な研究課題は以下の通り。

#### A-1) 軟 X 線が必須のもの

- ・ Kanter et al, PRL 2011 強光子場中の共鳴現象 (AMO)
- ・ Berrah et al. PRL 2011 強光子場中の原子分光 (AMO)
- ・ Doumy et al. PRL 2011 非線形原子分光 (AMO)
- ・ L. Fang et al, PRL 2010 強光子場中の分子分光 (AMO)
- ・ L. Young et al Nature 2010 強光子場中の原子分光 (AMO)
- ・ M. Hoener et al, PRL 2010 強光子場中の分子分光 (AMO)

#### A-2) 硬 X 線の予備実験として軟 X 線で行ったもの

- ・ S. L. Johnson et al, PRL 2012. 銅酸化物中のフェムト秒磁気相転移 (ナノ)
- ・ A. Barty et al, Nature Photonics 2012, ナノ結晶回折におけるゲート効果 (手法・バイオ委)
- ・ I. Vartanyants et al, PRL 2011 コヒーレンス計測 (光源・手法)
- ・ H.N. Chapman et al Nature 2011 ナノ結晶回折 (バイオ・手法)
- ・ M.M. Seibert et al, Nature 2011 ウイルスのイメージング (バイオ)

#### B) 硬 X 線

- ・ C. Gutt et al, PRL 2012 コヒーレンス計測 (光源・手法)
- ・ P Emma et al, Nature Photonics 2010 LCLS のレーザー発振 (光源)

2. これらの実験で創出された主な成果については【別紙 4】を参照。

②X-FEL の経済効果について(株)日本総合研究所が平成17年実施した委託調査結果の資料。

【別紙5】参照。

③フェーズ2で利用装置提案課題にあげられた26課題のタイトルと提案者の所属機関、それらの課題で開発してきた装置の整備状況を示す資料。

【別紙6-1, 6-2】参照。

④文部科学省において行われた中間評価および最終評価の報告書(分担課題毎)とその評価結果の資料。

【別紙7-1, 7-2】参照。

⑤ビームラインを2本から5本に増設するのに要する費用(アンジュレータは既に5本分設置されているか?)、5本を想定したときの年間の維持管理費用の概算を示す資料。

新規 BL3 本分の整備費概算 : 約 118 億円 (BLの種類や性能による変動)

BL5 本の場合の年間維持管理費概算 : 約 62 億円

(H24 年度予算案 : 約 48 億円 (建設費 389 億の約 12%))

→ 新規 3 本分約 118 億を追加した場合、 $48+118 \times 0.12 \approx 62$  億円と概算)