

総合科学技術会議
大規模新規研究開発事前評価
X線自由電子レーザーの開発・共用
第1回評価検討会
ご説明資料

平成17年9月22日

文部科学省研究振興局

目 次 (1)

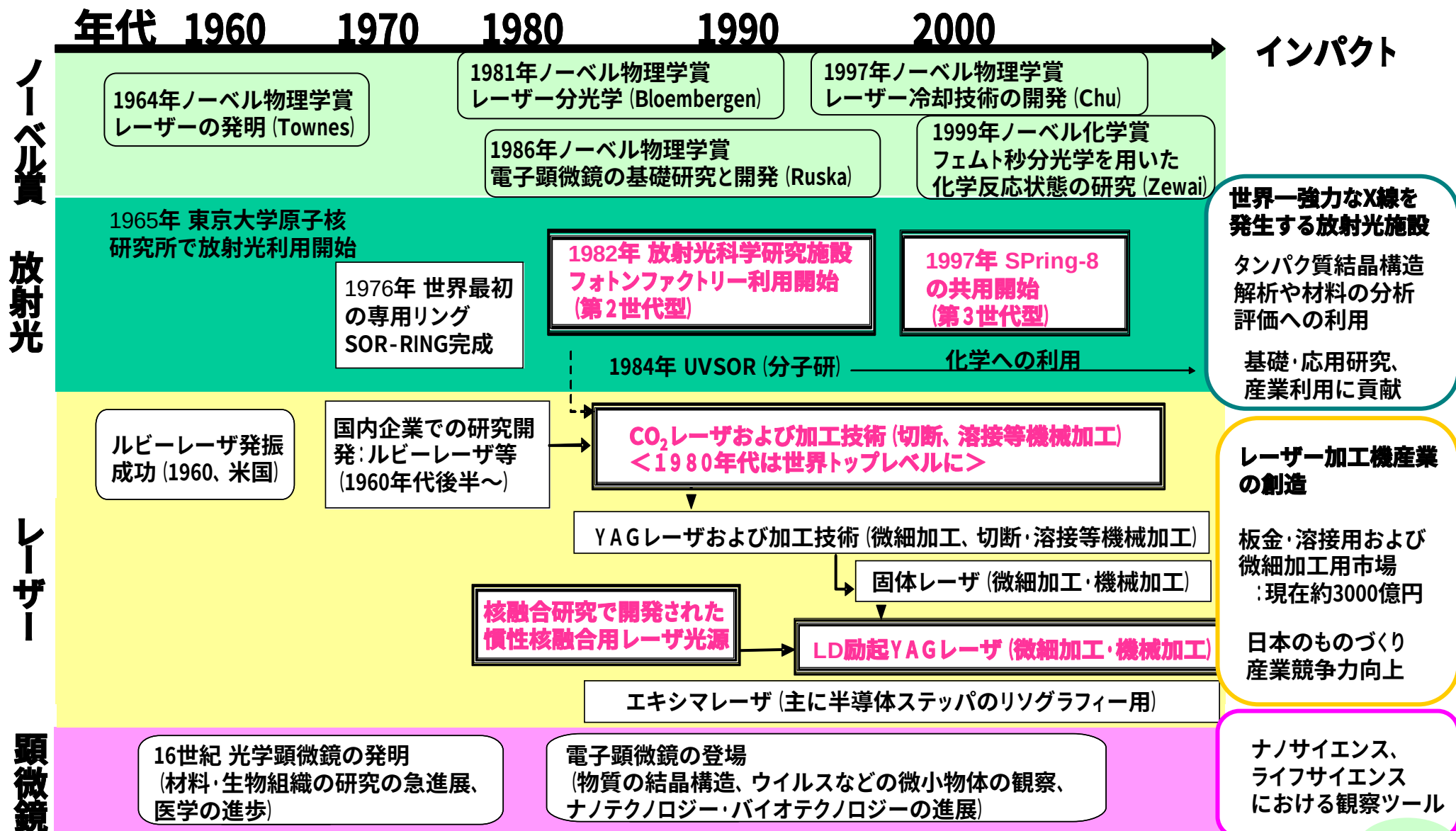
1. **新たな観測ツールの出現とサイエンスの発展**
2. **X線自由電子レーザーの開発・共用**
3. **X線自由電子レーザーの性能**
4. **欧米におけるX-FEL開発計画**
5. **我が国独自の戦略 (1)**
6. **我が国独自の戦略 (2)**
7. **X線自由電子レーザーで初めて可能となる画期的な研究テーマ**
8. **創薬に直結する「膜タンパク質」の構造解析**
9. **単一細胞レベルでの多チャンネルRNA同時測定 (セルマップ法)**
10. **X-FELによる細胞イメージング (広い時間・空間での生命現象追跡)**
11. **ナノ細孔への気体吸着を利用した新機能性材料の創成**
12. **強光子場を利用した新しいナノテクノロジーの創成**
13. **事前評価：国際レビュー委員会 & 計画評価作業部会**
14. **X線自由電子レーザーの利用に向けて**
15. **年次計画**
16. **X線自由電子レーザー計画の全体像**

目 次 (2)

(参考資料)

17. **発振波長0.06nmの決定要因**
18. **X線自由電子レーザー光の強度調整**
19. **分子ビーム発生装置によるタンパク質一分子からの散乱パターン記録**
20. **X線レーザーを得るために**
21. **日本におけるX線自由電子レーザー開発の経緯 (1)**
22. **日本におけるX線自由電子レーザー開発の経緯 (2)**
23. **プロトタイプ機の位置づけ**
24. **マイルストーン**
25. **シーディング技術による光源特性の向上**

新たな観察ツールの出現とサイエンスの発展



X線自由電子レーザーの開発・共用

- ・プロジェクト総経費 375億円 (平成18年度～22年度)
- ・平成18年度概算要求額 3,293百万円 (新規)

☆ X線自由電子レーザーの概要

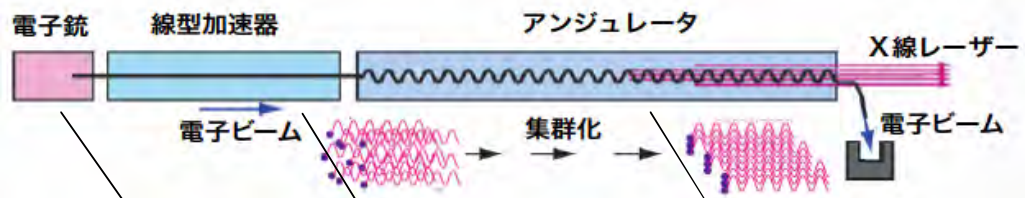
SPring-8 の10億倍を上回る高輝度の X線レーザーを発振し、原子レベルの超微細構造、化学反応の超高速動態・変化を瞬時に計測・分析することを可能とする世界最高性能の研究基盤施設「**X線自由電子レーザー (X-FEL)**」を実現する。これにより、ライフサイエンス分野やナノテクノロジー・材料分野など、様々な科学技術分野に新たな研究領域を開拓する。

☆ X線自由電子レーザーの特徴

放射光による強力な“高干渉性硬X線”の実現
⇒ レーザーと放射光の特徴を併せ持つ光

- ・**短い波長** [硬X線 (波長0.1ナノメートル以下)]
→ 原子・分子レベルでの構造解析
- ・**短いパルス** [フェムト秒パルス (10兆分の1秒)]
→ より高速な動態・変化を捕捉
- ・**質の良い光** [高干渉性 (完全コヒーレント性)]
→ よりシャープな像の取得・精密計測
- ・**強力な光** [超高輝度 (SPring-8の10億倍)]
→ 非常に強い電場を形成
→ 短時間での解析が可能

☆ X線自由電子レーザーの構成



熱駆動型電子銃：
より鋭い電子ビームを発生。

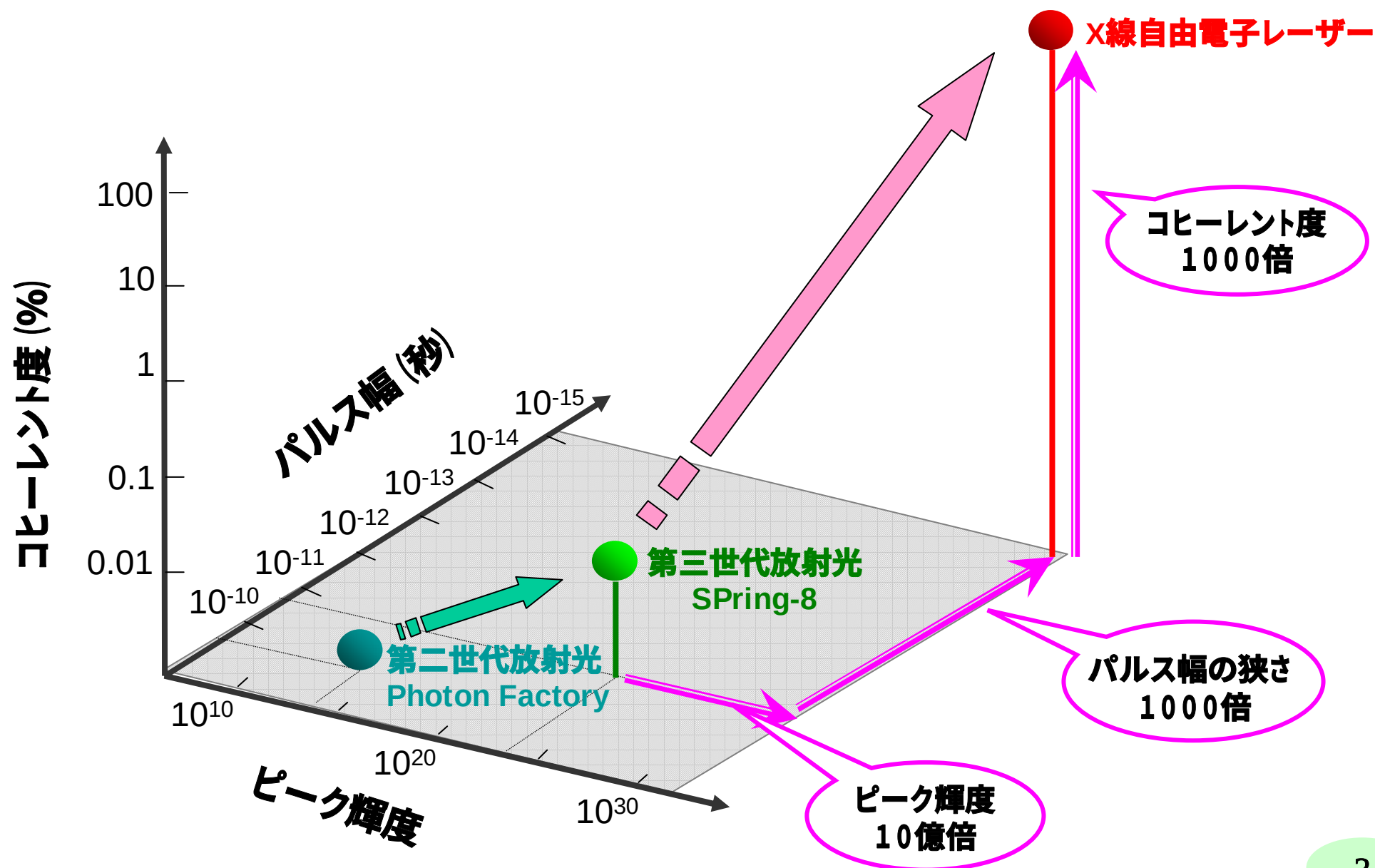


Cバンド線型加速器：
高加速勾配により、短い距離で高いエネルギーまで加速。



真空封止型アンジュレータ：
短波長・高干渉性・高輝度なX線レーザーを発振。

X線自由電子レーザーの性能



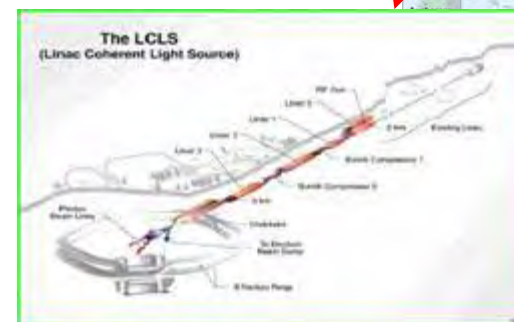
欧米におけるX-FEL開発計画

【米国】 SLAC: Stanford Linear Accelerator Center (スタンフォード線形加速器研究センター)

Liniac Coherent Light Source : LCLS
[線型加速器コヒーレント (高干渉性) 光源]

- ・ 既存2マイル ライナックの1/3 (約1km) をそのまま活用
- ・ 総プロジェクトコスト \$615M 以上 (約700億円)
(既存施設の活用により\$300M以上を節減)
- ・ 全長 2キロメートル
- ・ 発振波長 0.15 ナノメートル
- ・ FY2005予算 \$54M → 2009年運転開始に向け始動
- ・ DOEの研究施設整備計画においてプライオリティ第3位

米国カリフォルニア州



LCLS 概略図

【欧州】 DESY: Deutsches Elektronen-Synchrotron (ドイツ電子シンクロトロン研究所)

European X-Ray Free-Electron Laser
[ヨーロッパX線自由電子レーザー]

- ・ 欧州11ヶ国による共同プロジェクト
- ・ 総プロジェクトコスト 908MEuro (約1,200億円)
- ・ 全長 3.4 キロメートル
- ・ 発振波長 0.085 ナノメートル
- ・ 2012年 運転開始を計画
- ・ VUV (波長6nm) -FELを開発。XFELに向け試験研究を実施。

ドイツ・ハンブルグ



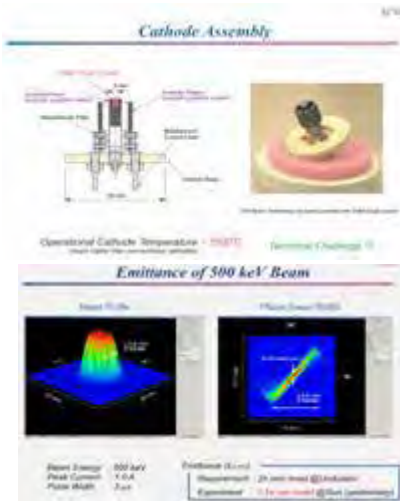
European XFEL 概略図

我が国独自の戦略 (1)

- ☆ 我が国独自の戦略
- (1) 独自技術によるコンパクト化 ⇒ 早期実現可能、優れた拡張性
 - (2) SPring-8との相乗効果 ⇒ 多様な研究手法の展開

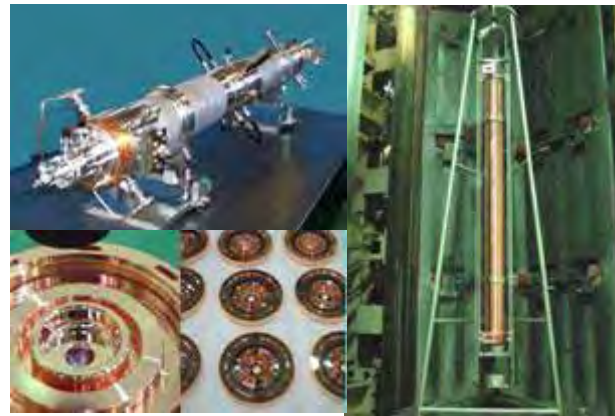
◆ 電子銃

従来の常識を破る熱電子銃を用いた高密度低エミッタンス電子ビーム発生 (← SPring-8)



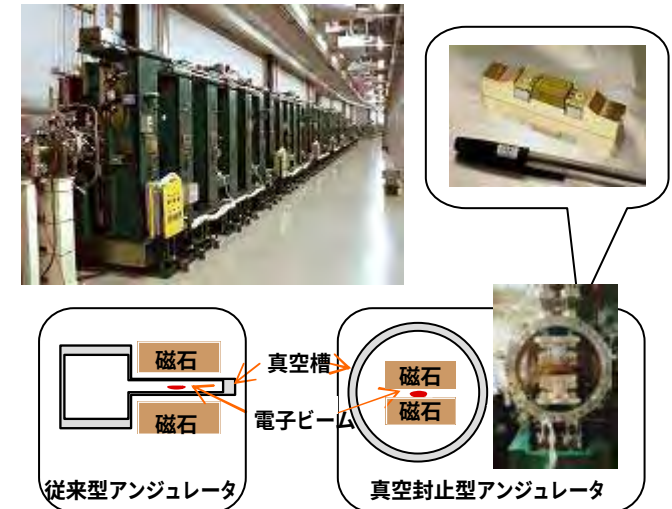
◆ 線型加速器

我が国が誇る精密加工技術を駆使して、従来の2倍の加速効率をもつ加速器を開発 (← KEK)



◆ アンジュレーター

我が国が独自に開発した真空封止型アンジュレーターを採用することで、効率良くX線レーザーを発振 (← SPring-8)



・平成17年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞

大幅なサイズダウンを実現 ➡ 全長 800メートル

さらに、電子の加速エネルギーを低く抑えてもX線の発振が可能に
➡ 建設コストとともに運転コストも軽減

我が国独自の戦略 (2)

- ☆ 我が国独自の戦略
- (1) 独自技術によるコンパクト化 ⇒ 早期実現可能、優れた拡張性
 - (2) SPring-8との相乗効果 ⇒ 多様な研究手法の展開

X線自由電子レーザー とSPring-8 を併設することにより、世界にも例を見ない、同一サイトに集積された世界最高性能の光源拠点が実現。



☆ X線レーザーと放射光の同時照射、レーザー電子光など、世界でここだけが実現可能な利用研究が展開。

☆ X-FELで加速した電子ビームをSPring-8に入射することで、SPring-8の一層の性能向上を実現。

X線自由電子レーザーで初めて可能となる画期的な研究テーマ

従来技術の限界

X線領域の強度が不足
非結晶物質の構造解析困難

時間分解能:ピコ秒
電子状態制御困難

X線領域のコヒーレント光が存在しない
イメージング:極めて低解像度

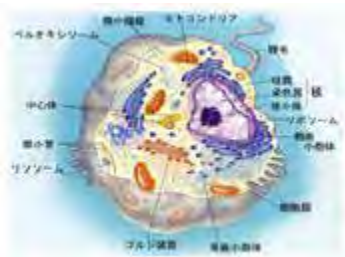
X線自由電子レーザー

10億倍強いX線

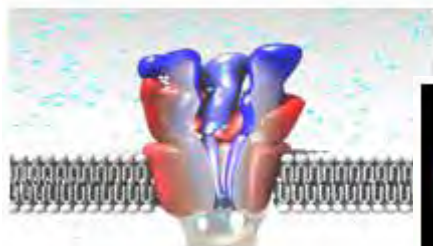
フェムト秒時間分解能

完全コヒーレントX線

高分解能細胞イメージング



膜タンパク質一分子構造解析
(結晶化不要)

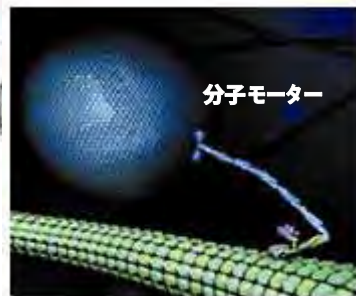


生体ナノマシンの
ダイナミクス

生物学・医学

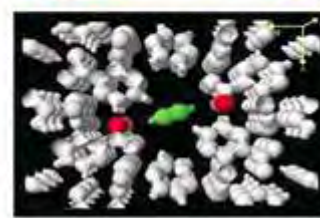
非結晶物体の原子レベル構造解析
超高精度・超高速イメージング

ナノサイエンス・ナノテクノロジー



電子状態観測
電子・分子制御

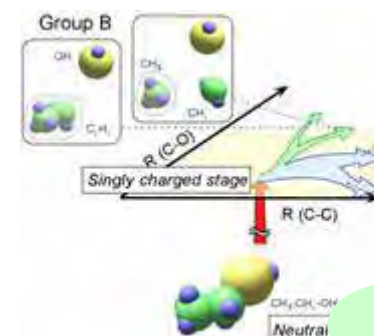
ナノダイナミクス



観測データの地上再現



強光子場ポンプ
X線回折プローブ



創薬に直結する「膜タンパク質」の構造解析

膜タンパク質：

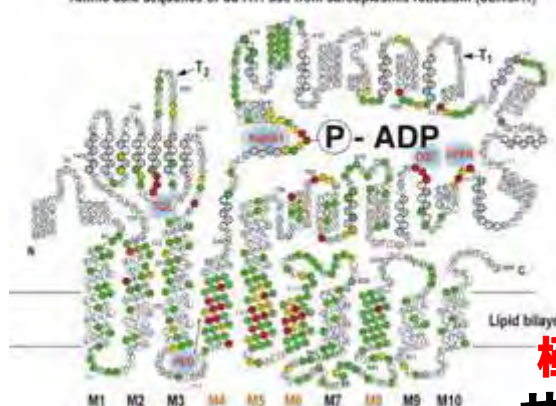
脂質(細胞膜)と結合
細胞の活動を左右
ヒトの疾病に深い関連
結晶化が極めて困難

PDB 登録
水溶性タンパク質
約 31200
膜タンパク質
約 100

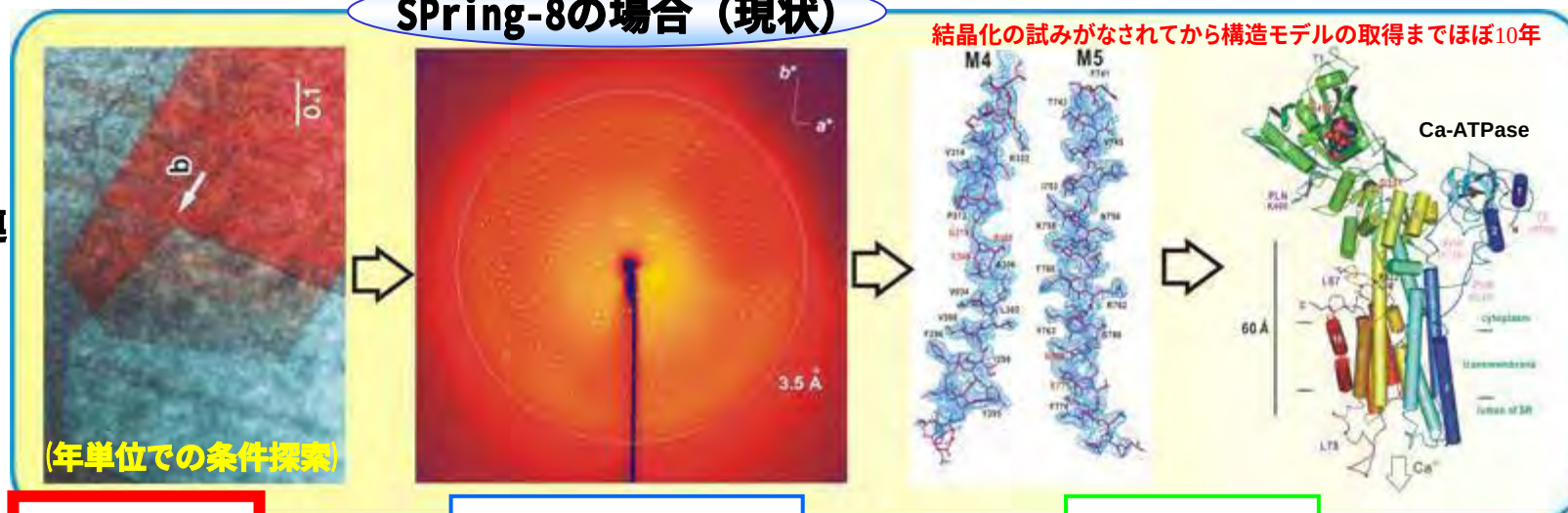
ヒトゲノム
タンパク質
約 3-40000
うち膜タンパク質
約 10000

膜タンパク質の発現・精製

Amino acid sequence of Ca-ATPase from sarcoplasmic reticulum (SERCA1)



SPring-8の場合 (現状)



結晶化

回折・散乱実験

構造解析

現状では
極めて困難

結晶化不要

X線自由電子レーザー

X FELパルス

10^{12} Photons / molecule / shot
 10^6 枚程度の散乱パターンを収集

位相回復・構造決定

単粒子構造解析アルゴリズム

計算機実験結果(Miao et al. (2002) PNAS 98, 6641)

構造解析の全過程を大幅に短縮

極めて輝度が高い (SPring-8の10億倍以上) ため、結晶化
せずとも、1分子で構造解析に必要な散乱データが得られる

単一細胞レベルでの多チャンネルRNA同時測定 (セルマップ法)

☆ 従来はタンパク質にしかできないとされていた、発生・分化等の重要な生命現象に關与するRNA (機能性RNA) の存在が明らかになり、世界中の注目を集めている。

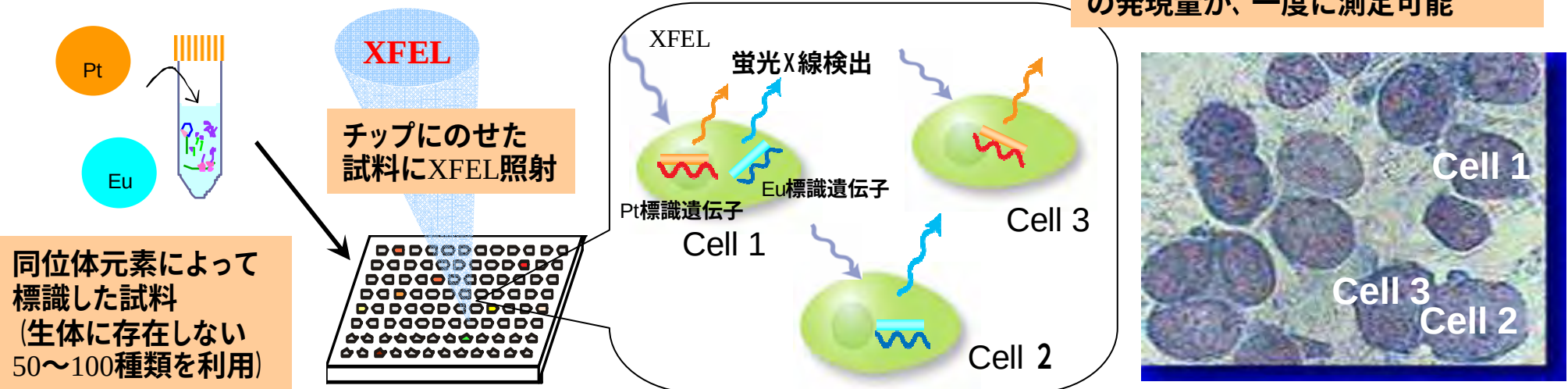
しかし！

機能性RNAは、細胞内でタンパク質との複合体を形成していると考えられているが、周囲のDNAやタンパク質の存在に紛れているため、既存技術では細胞内での位置の特定が困難であり、機能が解明されていない。

XFELによるセルマップ法を用いると

短波長レーザーのため、細胞内の位置を特定可能！
極めて輝度が高いため、微量な標識でも検出可能！

異なる元素で標識した複数のRNAの発現量が、一度に測定可能



XFELにより、単一細胞レベルの精密なRNA発現マップ (セルマップ) が実現

機能性RNAの機能解明

生物学の新たな展開
医薬品、治療効果判定への応用