



X線自由電子レーザー施設
SACLA

The background features a delicate, out-of-focus illustration of cherry blossom branches in soft pink and white tones, creating a gentle, spring-like atmosphere.

利用のはじまり

新しい光 SACL

私たちがものをみるときには、光が必要です。光を用いて微細なものをみると、光の波長が短いほど、より細かいものがみえます。そして、新しい光がみつかると、新しい世界が拓けます。

より小さいものをより鮮明にみたい、という人類の思いには長い歴史があります。19世紀末にレントゲンによって発見されたX線は、波長がとても短いため、とても小さなものを見る道具となりました。その発見から100年以上を経た現在でも、X線は医学・工学・科学技術など様々なところで役立っており、私たちの社会に革新をもたらし続けています。また、より質の良い光を求める中で、目に見える光（可視光）では1960年にレーザーが実現されました。レーザーは強力でしかも波の歩調が揃っているという特徴をもっており、私たちの生活のあらゆる場面において無くてはならないものです。そして今、X線という短い波長と、レーザーという質のよい光の特徴を併せもつ、X線自由電子レーザー（XFEL）が実現しました。



みえなかつたものがみえる——X線自由電子レーザー施設SACLは、0.063nm^(※1)という世界最短波長で、10フェムト秒^(※2)という非常に短いパルス幅のX線レーザーを発振できる性能を持っています。SACLの光により、私たちは今までみることのできなかつた原子・分子の様子や、一瞬の動きを観察できるようになりました。これにより科学技術の飛躍的な発展のみならず、私たちの社会にある多くの課題解決に寄与することが期待されています。

SACLの整備計画は2006年に「国家基幹技術」の一つに選定され、2011年3月に完成しました。科学技術と産業の発展を牽引するSACLは、先行した米国XFEL施設「LCLS」を性能・効率ともにはるかに凌いでいます。欧州では2016年頃の完成を目指して「European XFEL」の建設が進められており、日米欧の三極でXFELをめぐる熾烈な争いが繰り広げられています。また、スイス・韓国も、施設建設を進めています。

人類が未だかつて経験したことのないSACLの光は、“日本と世界の未来”を切り拓いていきます。

※1：1nmは、100万分の1mm。原子の半径はほぼ0.1nm（ナノメートル）。

※2：1フェムト秒は、1,000兆分の1秒。

ご挨拶

国立研究開発法人理化学研究所と公益財団法人高輝度光科学研究センター（JASRI）が、共同で建設したX線自由電子レーザー（XFEL）施設SACLAは、平成23年度に世界最短波長の施設として供用運転を開始しました。その後三年余を経過しましたが、ナノ領域での構造と機能を直接的に観察するための全く新しい光として、内外からの多数の利用者にお使いいただき、先行する米国のLCLSと共に、新たな科学技術分野を開拓する施設として世界を先導しています。

皆様のご支援によってSACLAの利用研究は順調に立ち上がり、利用事例の集積が進むとともに、将来の発展性の方向もかなり明確になってきました。そのため、SACLAの利用者に向けた本冊子の内容を、これらを取り込んだ形で改訂することとしました。

SACLAの高い安定性と10フェムト秒以下の超高速パルス特性は、多様な分野で新しい知見を与えています。そのために益々ご要望が高まった利用機会の拡大のため、平成24年度に新しいXFELラインの建設に着手し、平成26年度に調整運転およびレーザー発振を確認した後、平成27年度から供用運転を開始しました。これによって世界で3本目となるXFELラインが完成いたしましたが、そのうちの2本がSACLAにあることになります。さらに、大強度レーザーを整備することにより、XFELと大強度レーザーとの組み合わせによる新たな科学技術分野の創成を目指す活動を開始しました。今後、大阪大学などの関西のレーザー研究拠点との連携を深め、高エネルギー密度科学などの展開を図っていきたいと考えています。

加えてSACLAを更に小型化する方向での研究開発計画が国の革新的研究開発推進プログラム（ImPACT）の中に採用されたことに伴い、それと協力して次世代型XFELの開発を進めることとしました。SACLAのプロトタイプとして建設したSCSSをSACLA建屋内に移設・増強してSCSS+とすることに伴って利用可能となった加速器収納施設を利用して、この開発を進めていきます。

SACLAで実現した超高速X線パルスは、今まで観測不可能であった超高速変化の中間状態の解析を可能にします。例えば、触媒がどのように働くかは今まで多くの場合、推測と計算機シミュレーションによって理解されてきましたが、SACLAによって働いている現場を直接観測することが可能になります。これは、新たな触媒開発に様々な可能性をもたらすと共に、計算機シミュレーションに対して確実な出発点を提供します。

SACLAに対する、皆様のこれまでのご支援に感謝いたしますとともに、それを日本の未来を創るための課題解決基盤として強化・充実を続けていくことをお約束し、私のご挨拶とさせていただきます。

理化学研究所 播磨事業所 所長
放射光科学総合研究センター センター長
石川 哲也



我々の想像を
はるかに超えた可能性
新しい光にはそれがある

SACLA から生まれた成果

SACLA では、新しい成果が次々と生まれてきています。

ここでは、SACLA の光の 3 つの特徴に照らし合わせながら、最新の研究成果を紹介します。

①ありのままがみえる 超精密構造解析のための実験

従来の X 線の実験では、X 線を当て続けることによって試料が損傷を受けるため、試料の正確な情報を得ることができませんでした。

SACLA の光を使うことで、損傷を受ける前の試料そのままの姿をみることができるようになりました。

また、SACLA の強力でコヒーレントな光によって、試料の様々な形状もよりくっきりとみえるようになってきました。

②速い動きをとらえる 超高速現象を観察する実験

SACLA でとても短いパルス光が実現できたことにより、化学反応の前後のみならず、反応の途中の様子までみえてくるようになりました。

光合成の仕組みの解明や、モノが壊れていく様子の観察、相転移の途中の結合状態の観察など、今後の材料設計の未来を担う実験が進んでいます。

起こるということは知られていても、その仕組みはわかつていなかったような現象を解明していきます。

③新現象をうみだす 超強力 X 線で未知の現象を探る実験

SACLA の非常に強い X 線によって、これまでの X 線源では実現できなかつたような新しい物質の状態がみえてきました。

SACLA の光を用いると、現在の科学で考えられる現象の解明だけにとどまらず、その枠を超えた全く新しい現象にまで探索の手を広げることができます。

モノのかたちを見る

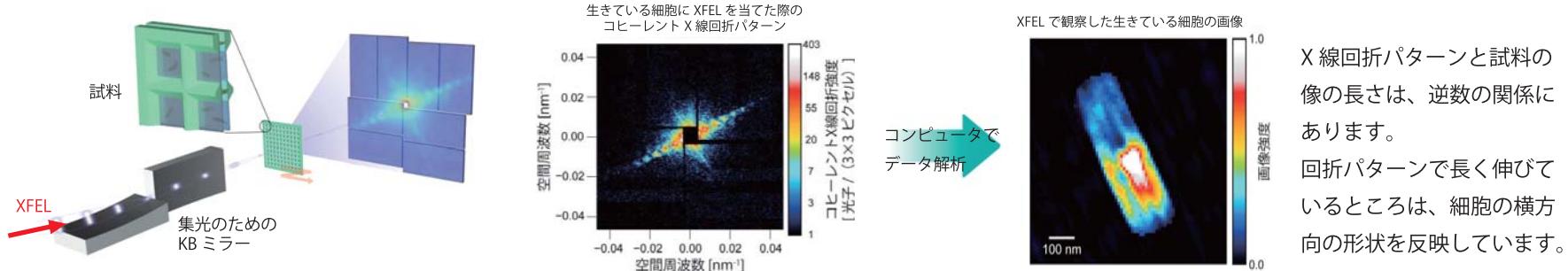
① ありのままがみえる 超精密構造解析のための実験

SACLA の光による X 線回折パターンをコンピューターで解析して試料の透過像を得るコヒーレント回折イメージング法を開発しました。

生きている細胞の内部をナノレベルで観察

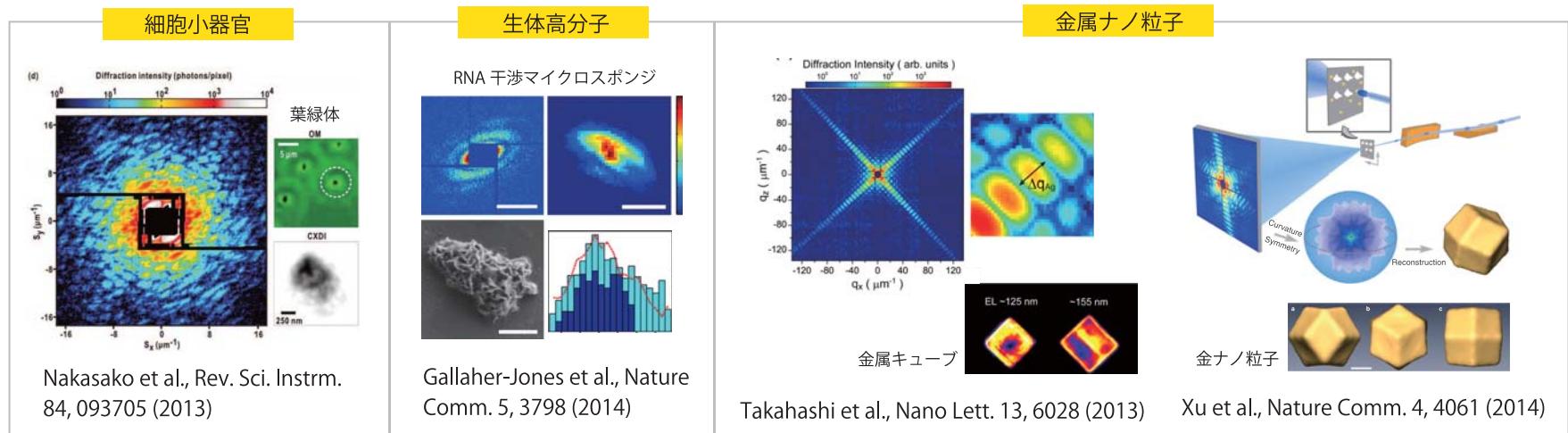
細胞を生きている状態に保ったまま、XFEL で測定する仕組みを開発しました。

Kimura, Nishino et al., Nature Comm. 5, 3052 (2014)



他にも様々なモノのかたちがみえた

試料は結晶に限らず、細胞小器官、生体高分子、金属微粒子などをナノレベルの分解能で観察することが可能です。

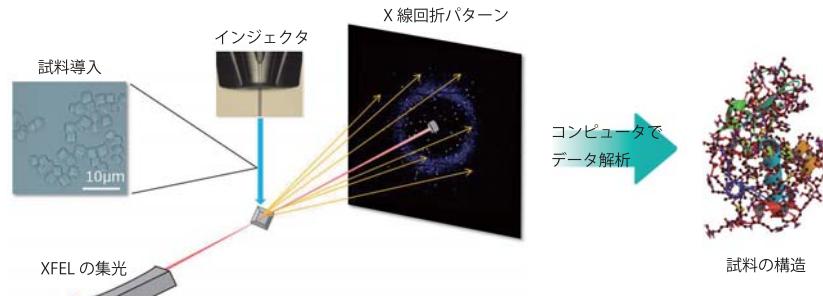


小さな結晶の中の動きと構造を見る

結晶化が難しかったり、小さな結晶しか作れないタンパク質の構造を調べる方法を開発しました。

連続フェムト秒タンパク質結晶構造解析

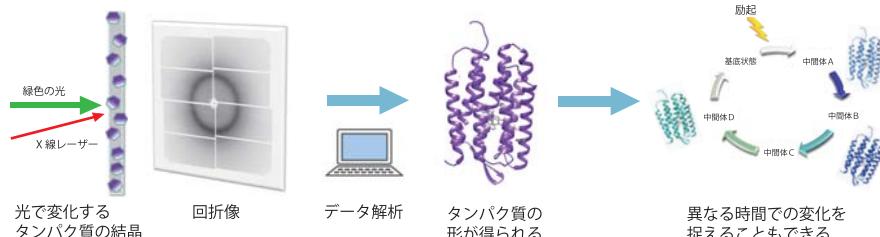
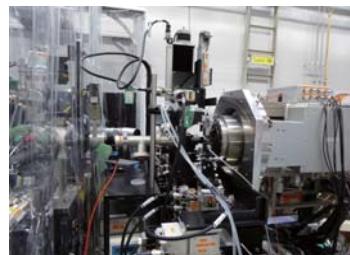
数ミクロンの小さな結晶をインジェクタより XFEL に向かって連続的に送り込み、次々と X 線回折パターンを記録します。集めた回折パターンをコンピューターで解析すると、タンパク質の構造を解明できます。



応用例 タンパク質が働く様子を捉える

形と機能の解明へ

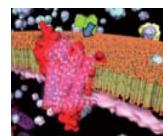
タンパク質のなかには、光などの刺激を受けて形が変化するものがあります。このような変化はタンパク質の働き（機能）と密接に関わっています。ピコ秒からミリ秒といった短い時間に起こる形の変化を調べ、タンパク質の機能との関連を明らかにします。



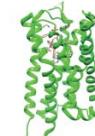
応用例 膜タンパク質の構造を明らかに

画期的な薬の開発へ

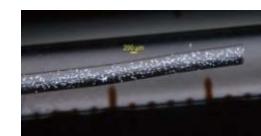
私たちの体の中にある細胞は、他の細胞や外界との間で情報や物質をやりとりしています。その際に働くのが「膜タンパク質」です。膜タンパク質は、細胞の外壁である細胞膜に埋め込まれており、外から来た情報や物質を受け取る役割を担っています。



膜タンパク質と細胞膜との結合の例

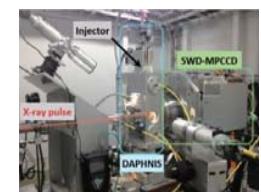


膜タンパク質の構造



膜タンパク質の微結晶

SACLA の光によって膜タンパク質結晶を、より生体内に近い状態で捉えることができます。得られた情報から膜タンパク質の機能を特定し、副作用を抑える新薬などの開発に応用することができます。



壊れる前を見る

① ありのままがみえる 超精密構造解析のための実験

タンパク質が放射線損傷を受ける前の結晶構造がわかる手法を開発しました。

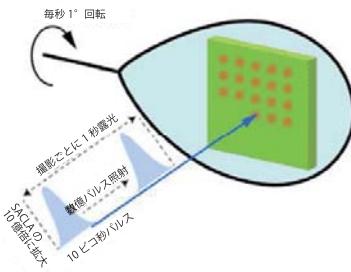
フェムト秒タンパク質結晶構造解析

SPring-8 でのこれまでの手法



SACLA でのフェムト秒
X 線レーザー結晶構造解析法

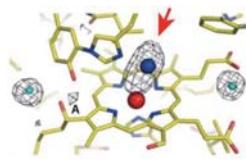
露光にかかる数秒の間に照射する
X 線によってタンパク質が損傷



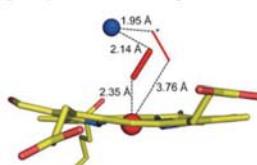
X 線を照射すると、試料の構造（原子の並び）が壊れてしまいます。

SACLA では構造が変化する前に X 線の照射が完了しますので、
壊れる前の構造を捉えることができます。

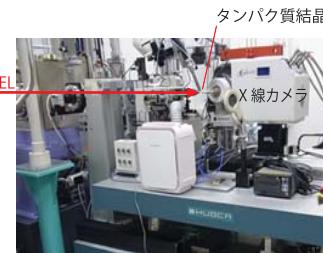
Hirata, Ago et al., Nature Methods 11, 734 (2014)



酸素還元部位の放射線損傷
のない電子密度図



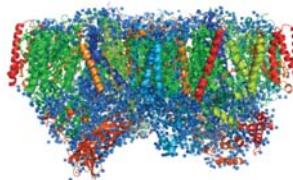
放射線損傷の影響のないチトクロム
の活性部位の構造



光合成による水分解反応を触媒する PSII の構造を解明

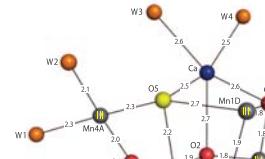
左記の手法を利用して、葉緑体の中にある光化学系 II 複合体 (PSII) の放射線損傷のない正確な構造を解明しました。

・ SPring-8 で解いた PSII の構造の一部に放射線損傷の影響があった

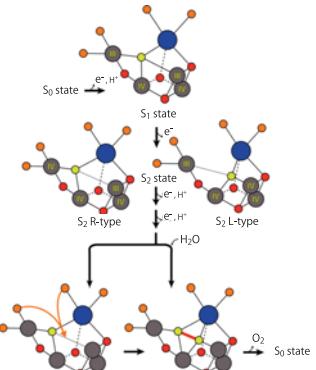


19 個のタンパク質からなる
単量体が 2 つ集まって二量体
構造を取っており、真ん中に
対象軸がある

・ SACLA では、無損傷の触媒中心の構造の詳細を明らかに



(原子間の数値の単位は Å)



Suga, Shen et al., Nature 517, 99 (2015)

速い動きを見る

②速い動きをとらえる 超高速現象を観察する実験

SACLA の光をストロボとして使えば、高速で動く原子すら捉えることができます。

速い現象を見るには？ 身のまわりの例

一般にはシャッター速度を早くすれば、動いている被写体も鮮明に捉えることができます。
しかし、最新式のハイスピードカメラでも、高速で動く原子の姿を捉えることはできません。
高速で動く被写体を捉えることができる撮影方法として、ストロボスコープがあります。

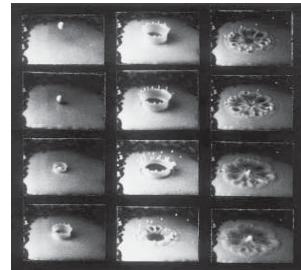


遅いシャッタースピード

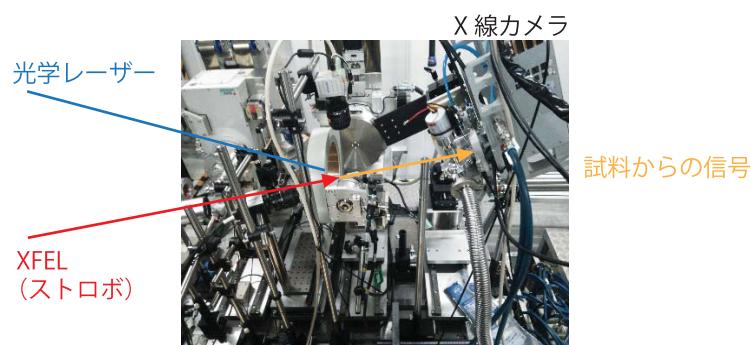


早いシャッタースピード

ストロボスコープでは、暗室で
被写体に閃光を照射して撮影します。
これによって、高速の現象も通常の
カメラで観察することができます。



c 2015 MIT. Courtesy of MIT Museum.



SACLA でのポンプ・プローブ計測

最新式のハイスピードカメラでも、高性能のストロボスコープを使っても高速で変化する原子の姿を捉えることはできません。しかし、SACLA の光を用いると、原子のストロボスコープの役目を果たし、原子の超高速の動きを捉えることができます。

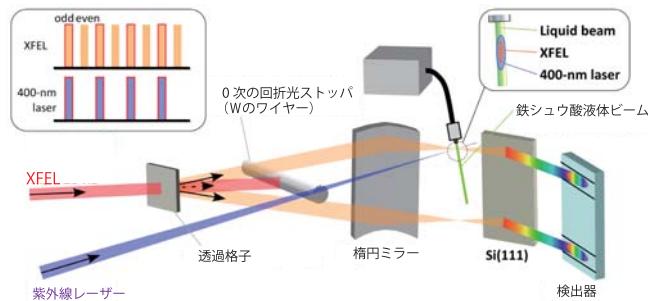
紫外光から近赤外光のレーザーを試料に照射することで、試料中の原子の動きを誘起（ポンプ）します。その後で SACLA の光を照射し、試料からの信号（プローブ）を解析することによって、原子の動きを調べます。

化学反応の過程を見る

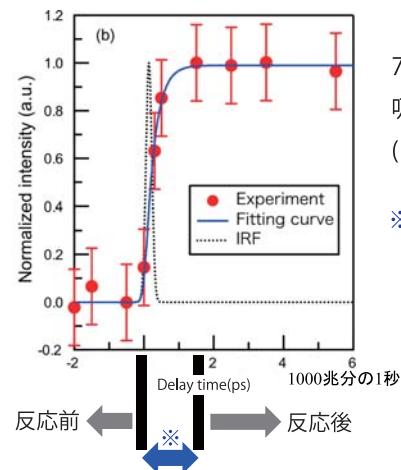
②速い動きをとらえる 超高速現象を観察する実験

SACLA の短いパルスによって、化学反応の進行過程のような超高速現象の仕組みが明らかになってきました。

超高速化学変化の追跡



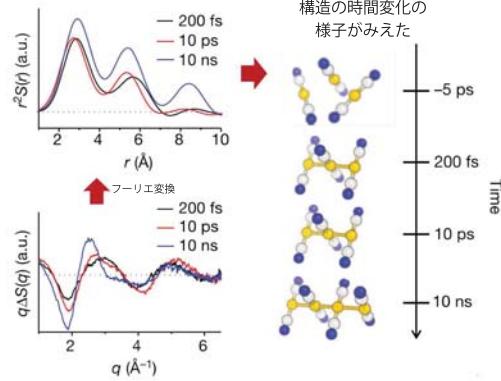
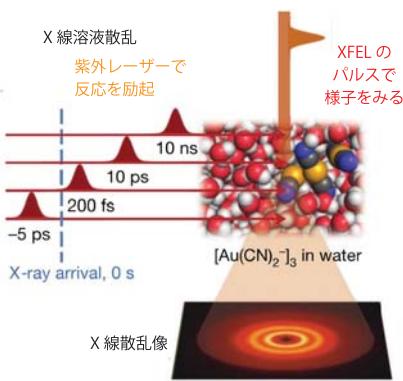
1000兆分の1秒で測る装置を開発(時間分解X線吸収分光)



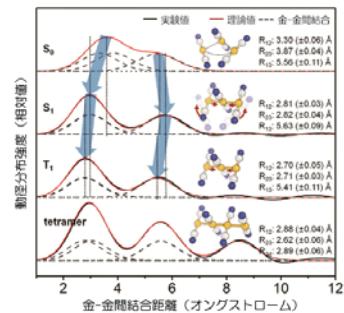
7.12 keVにおける
吸光度の時間依存性
(1000兆分の1秒単位)

※紫外線照射によって
起こる化学反応中の
途中の様子がSACLA
でみえた

化学結合の生成過程をとらえた

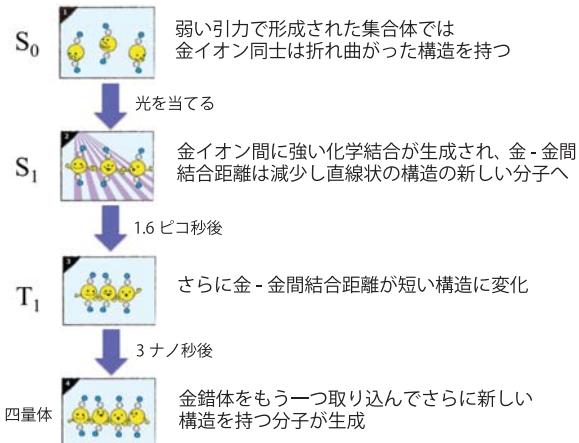


紫外光レーザーの照射によって
エネルギーを与えられた分子が、
他の分子と化学結合で結びつく
過程を捉えることができました。



Katayama et al., Appl. Phys. Lett. 103, 131105 (2013)

Obara et al., Opt. Express 22, 1105 (2014)



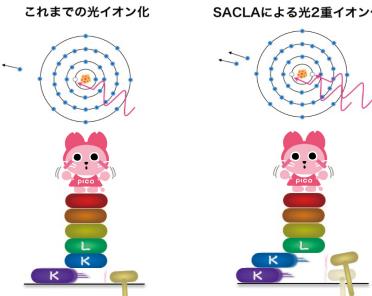
Kim, Ihee, Adachi et al., Nature 518, 385 (2015)

X線レーザーの新しい現象をさぐる

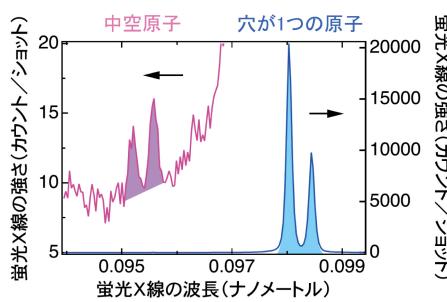
SACLAの強いX線によって、これまでのX線装置では不可能だった現象がみえてきました。また、現在の物理学では発見されていない新しい現象の探索も行っています。

中空な原子の実現（ホローアトム）

原子の一番内側にある2つの電子を順番に光で叩き出す。
1京分の2秒以内に素早く2回叩かなければならない。



SPring-8だと、もう1回叩く前に SACLAでは素早く2回叩ける落ちてしまふ

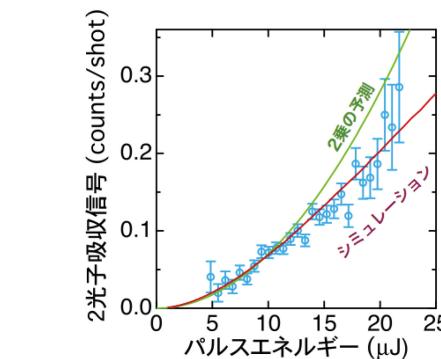
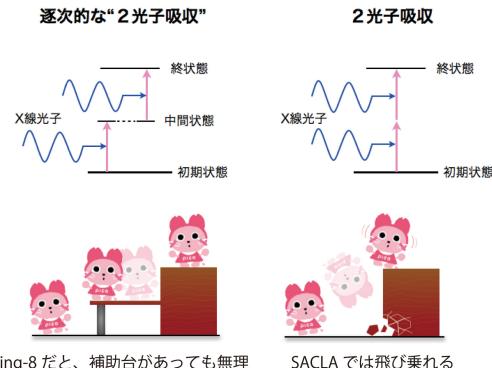


蛍光X線が、穴が1つの原子とは異なる波長に観測されたことが、中空原子の証拠

Tamasaku et al., Phys. Rev. Lett. 111, 043001 (2013)

X線2光子吸収

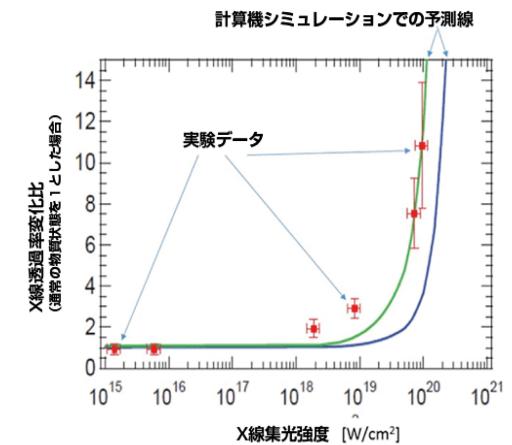
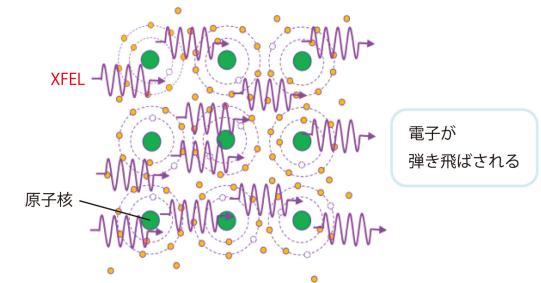
同時に2つのX線光子を吸収する。
中空原子に比べて10万倍強いX線が必要。



2光子吸収は、単純には緑線で示した予測に従う。
しかし、SACLAの強いX線によって他の過程も起こるため、予測より下側にずれる。
Tamasaku et al., Nature Photonics 8, 313 (2014)

X線可飽和吸収

X線は銅原子の中の電子によって吸収される。
ところが、強いX線によって多くの電子が弾き飛ばされてしまうと、X線を吸収する電子がなくなってしまう。結果として、物質が透明になる。



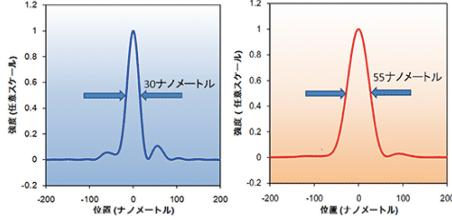
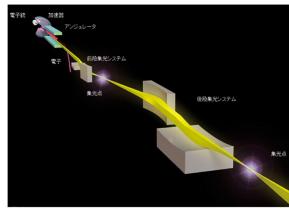
Yoneda et al., Nature Comm. 5, 5080 (2014)

未知の状態を強いX線でつくる

③新現象をうみだす 超強力X線による未知の現象を探る実験

SACLAの強いX線を集光させて、さらに強度を高めます。このX線を物質に照射することで、これまでのX線では実現できない未知の状態をつくり出します。

2段集光装置で強度を高める

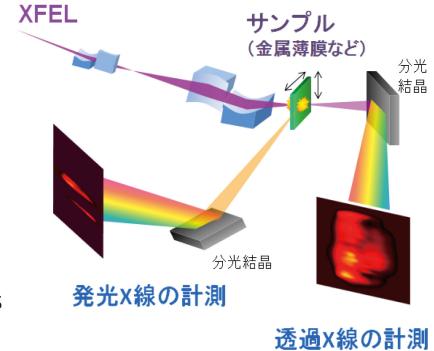


高精度の楕円ミラーで集光し、強度を通常の100万倍に高めます。

1ナノ = 100万分の1ミリ

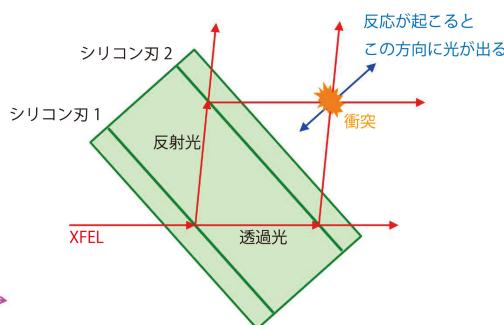
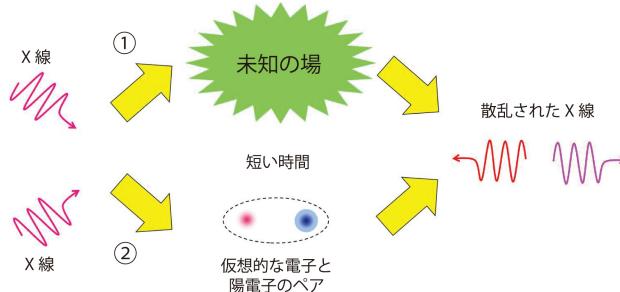
集光して強度を高めたX線を試料に当て、試料からの信号（発光するX線や透過したX線）を計測することで、未知の状態を調べます。

Yumoto et al., Nature Photonics 7, 43 (2013)

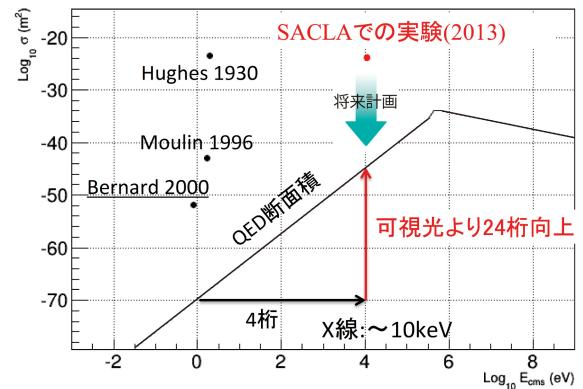


世界初のX線光子・光子散乱実験

強いX線どうしを衝突させることで、下図のような
①既存の物理学では説明できない未知の現象と
②1936年に予言された現象を探索・検証します。



SACLAの光を2つに分けて衝突させる
仕組みを開発



SACLAのさらなる高度化により、電子と陽電子の対生成・対消滅の発見へ

Inada, Asai et al., Phys. Lett. B 732, 356 (2014)



理化学研究所 放射光科学総合研究センター

〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1 TEL:0791-58-2800 FAX:0791-58-2898

URL: <http://xfel.riken.jp/> E-mail: riken@spring8.or.jp



002

Serial No. RSC-SAU002 2015.08