



ユースケースの創出 ESR 装置群を基軸とする研究データ流通・利活用エコシステムの構築

© Osaka Metropolitan University All Rights Reserved.

佐藤 和信、松岡 秀人[†]、土江 松美、臼杵 克之助
大阪公立大学
大学院理学研究科

[†] 現所属: 北海道教育大学

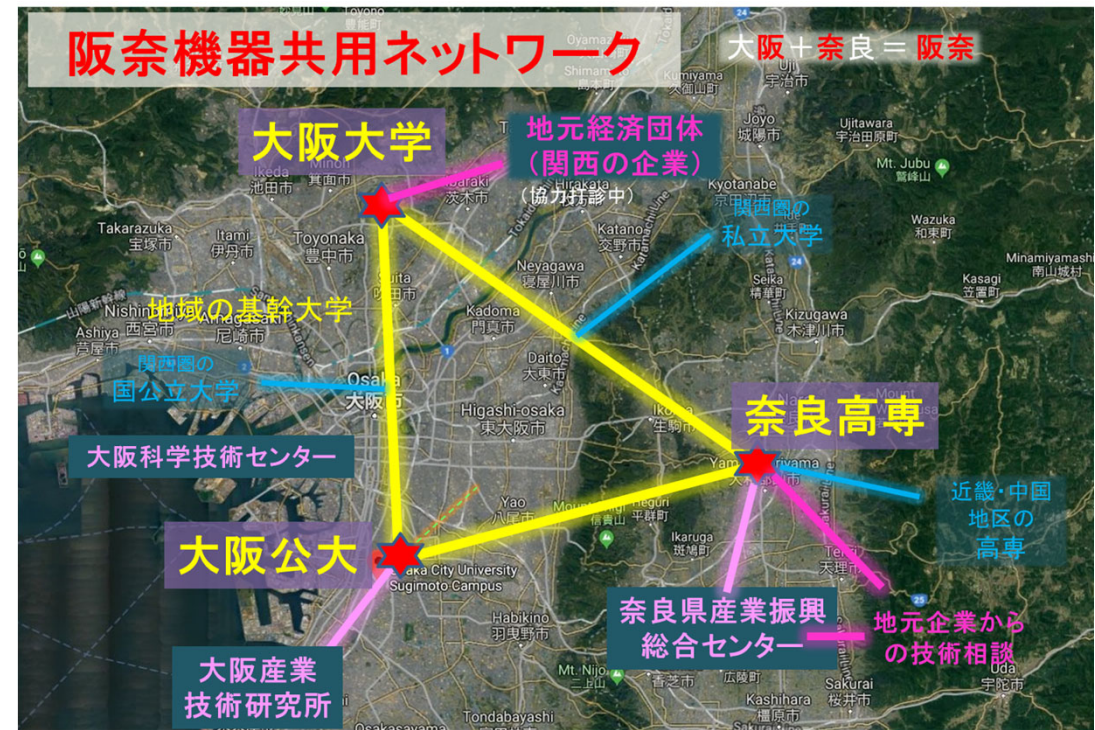
研究基盤共用センター

- 大阪公立大学が有する研究設備及び機器の共同利用を推進することにより、本学及び他の研究機関の研究力の向上と研究活動の活性化に貢献することを目的として発足
- 阪奈機器共用ネットワーク**の中核として機器利用を通じた産学官連携を推進

大阪大・大阪公大・奈良高専の強みを活かした連携を基軸に
機器共用・機器分析を介した、阪奈地区における「**知の共創**」と
「**地域産学官共創**」を目指す

- | | |
|------|---|
| 大阪大 | バラエティ豊かな固体用NMR、X線回折装置、質量分析装置など |
| 大阪公大 | 国内有数のESR(電子スピン共鳴装置)、共焦点三次元蛍光X線分析装置(試料内部の元素分析)など |
| 奈良高専 | 50nm空間分解能をもつ走査型電子顕微鏡(構造観察と元素分析)、X線光電子分光装置など |

化学分析を支える分析センターとして
大型機器の運用と活用支援



研究基盤共用センター



学術研究推進本部

研究基盤共用センター

運営委員会

- 中百舌鳥専門部会
- 杉本・阿倍野専門部会

阪奈機器共用ネットワーク

SHARE Academic Research Resources

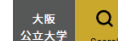
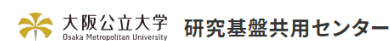
阪奈機器共用ネットワークは、大学や高専が持つ先端研究リソースを、参画する学術機関だけでなく地域の学術機関や民間企業などにも、広く簡単に活用できるフレームワークを提供します。

参画する機関が、互いに強みを活かすことで、それぞれに研究支援・研究の教化を図れるWin-Winの関係を深めていくだけでなく、将来的には「関西におけるアカデミック分析ソリューションの基幹」「機器分析を通しての日常的な産官学連携のハブ」となることを目指しています。

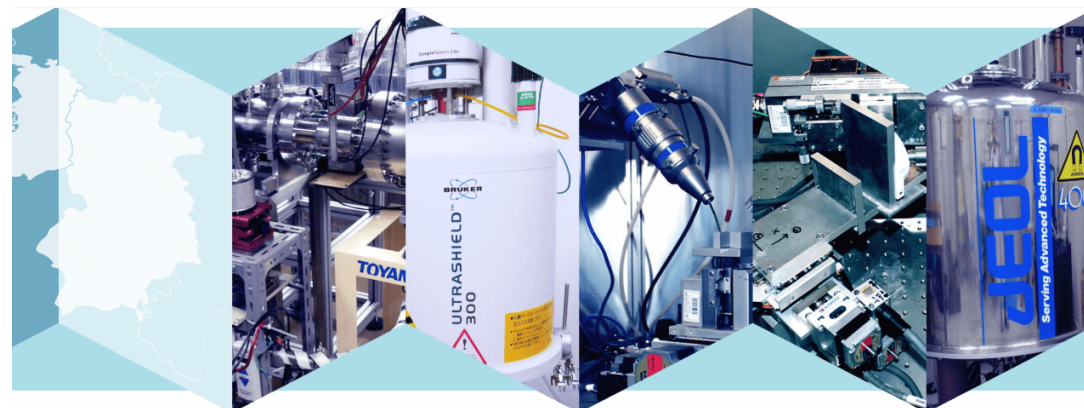


研究設備の共用

機器利用と技術相談



TOP センターの紹介 共用機器一覧 リンク先一覧 ニュース お問い合わせ



大学連携研究設備ネットワーク

大学連携研究設備ネットワーク (旧・化学系研究設備有効活用ネットワーク)

検索

関連リンク お問い合わせ 技術相談

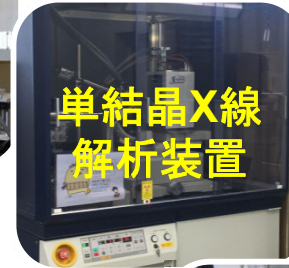
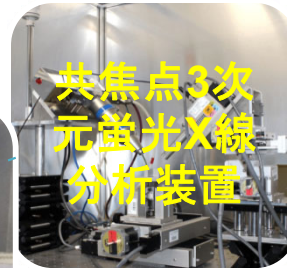
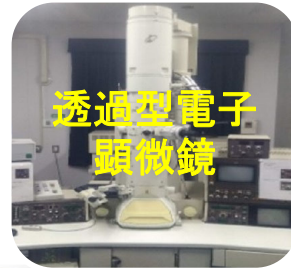
ホーム 設備リスト 利用案内 規約・資料・連絡先



大学連携研究設備ネットワークに
公立大学として初めて参画

研究データ流通・利活用エコシステムの構築 (共用機器利用により得られるデータ等の利活用)

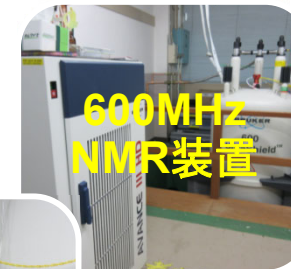
研究基盤共用センター
共用機器(抜粋)



旧2大学のネットワークから
新大学ネットワーク
(OMUNET)へ



共用機器 96台
55台(杉本・阿倍野)
41台(中百舌鳥)



OS: openSUSE Linux
or MS Windows 10

OS: MS Windows 7



Windows 7

磁気共鳴(NMR/ESR)装置群

学内外ユーザーがオンライン上で各自の測定データにアクセスできる環境
整備とデータ処理・解析環境の構築 → GakuNin RDMとmdxの活用

磁気共鳴分光

核磁気共鳴(NMR) 分子内の核スピンの測定
原子核上に局在化

電子スピン共鳴(ESR) 分子内の不対電子スピンの測定

磁場中でのゼーマン分裂(ゼーマン相互作用)が電子スピンは核スピンよりも660倍大きい (電子の質量は水素核の1/1840)

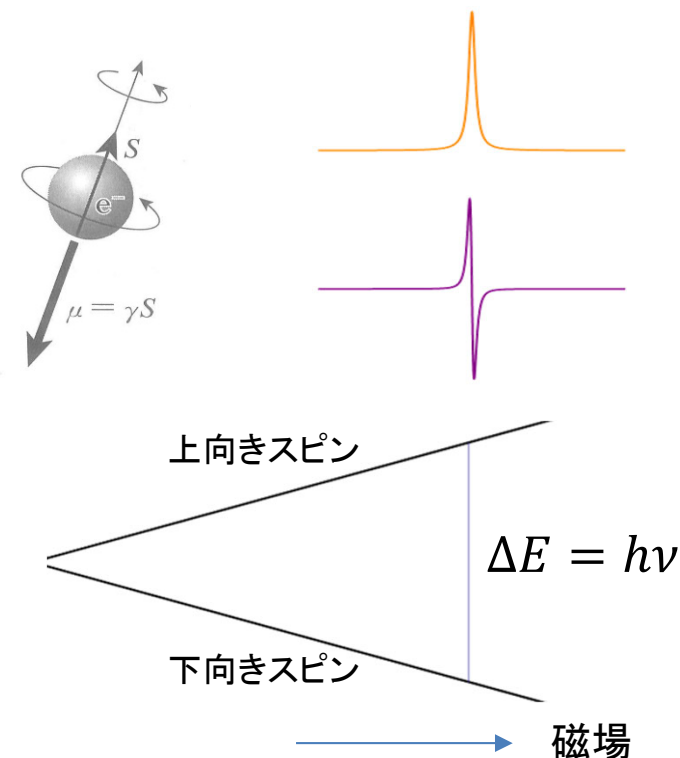
ESR 高感度 NMR 高分解能

より高感度・高分解能を実現するための方向性は、
NMR・ESRともに高磁場化

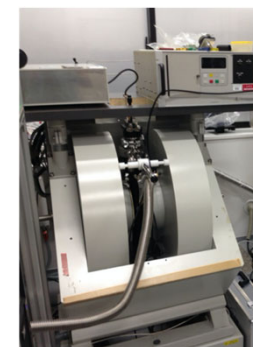
磁気共鳴画像(MRI)は磁気共鳴の原理を応用したもの

NMRは化学系における**主要な化合物分析技術の一つ**
汎用化が進んでおり、学生を含め**ユーザーが多数**
多くの大学で**共通機器として管理運営**

さまざまなレベルのユーザー
層が利用



NMR
超電導磁石



ESR
電磁石

共用機器で得られる測定データの利活用 環境構築

分析機器の運用における課題

- 装置の老朽化
 - ◎ 測定機器のライフサイクルは長いため、継続利用可能

データ活用の観点から

- × 安定な運用のため、分析機器のネットワークから独立
- × レガシーOS上での制御ソフトウェア利用 (OSのセキュリティ機能の低下)

データ活用に関するユーザー共通の課題として、

測定データ管理とデータ処理の汎用化・効率化

データ解析や評価に必要な環境の提供

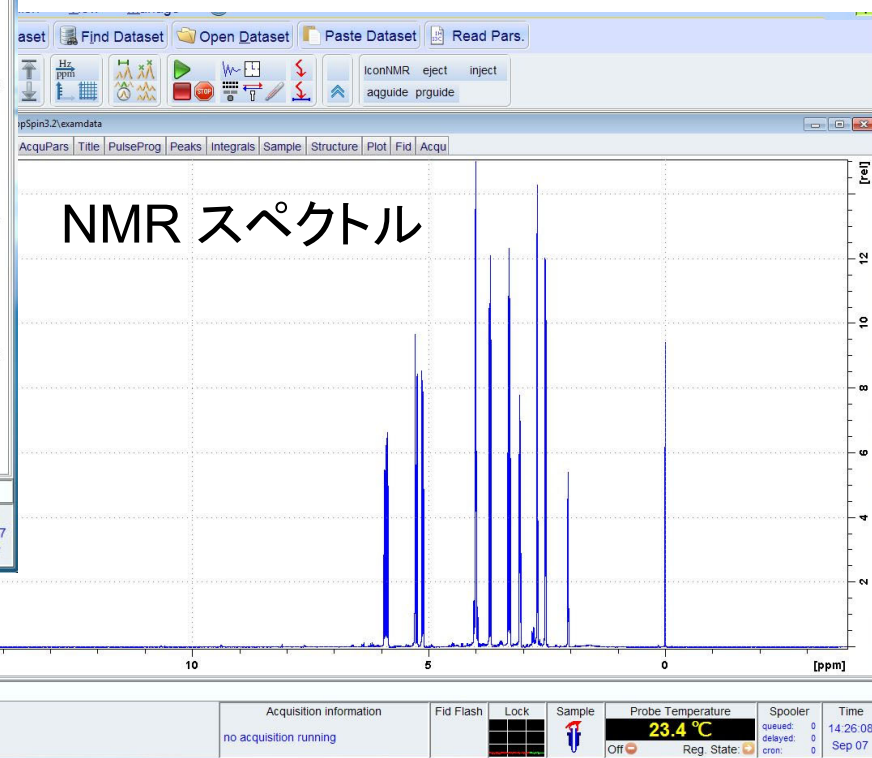
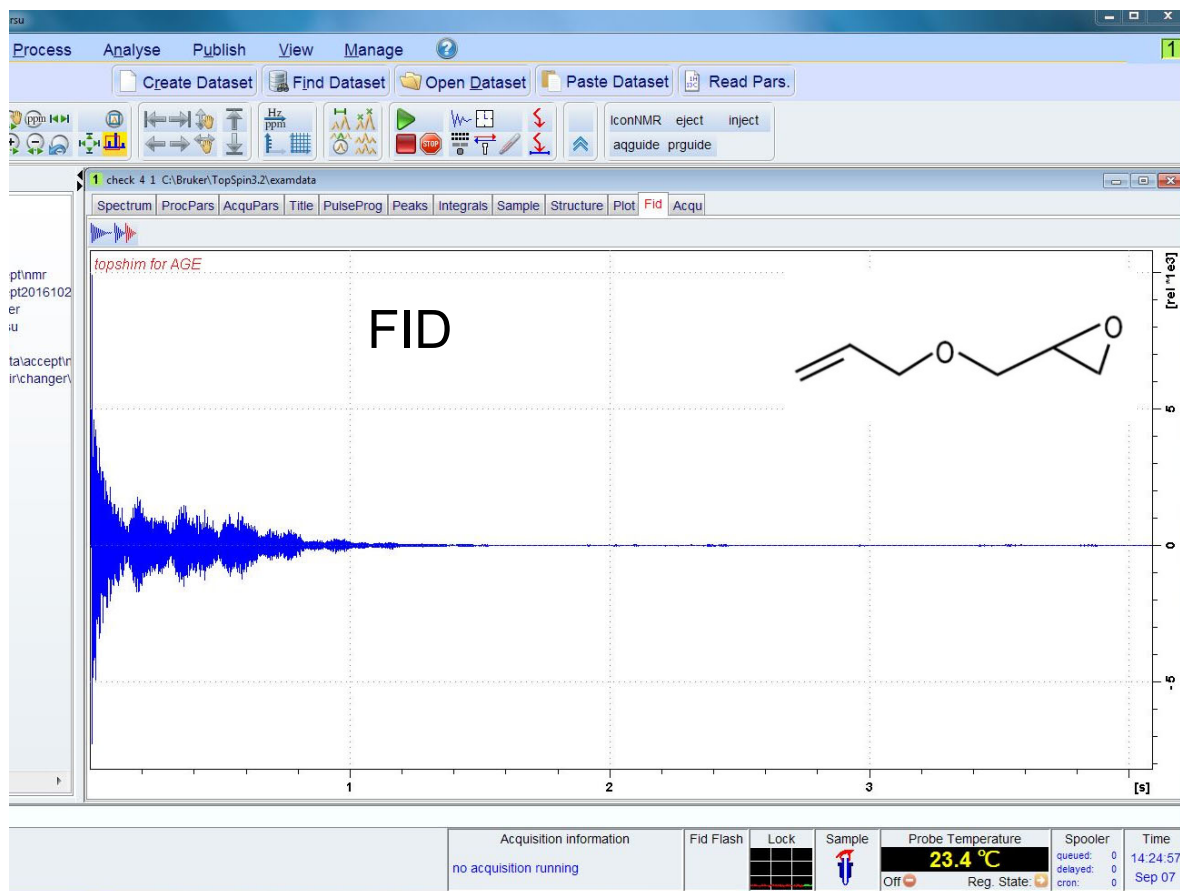
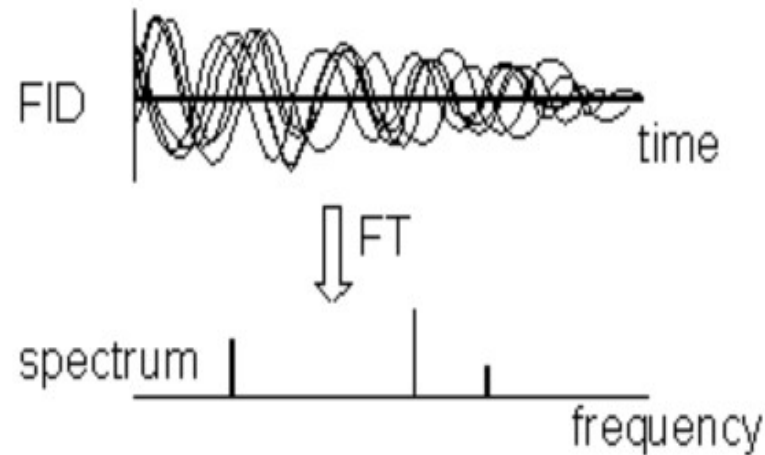


共用分析機器の利便性の向上

測定データの解析・評価支援



NMR測定事例



共用機器で得られる測定データの利活用 環境構築

分析機器の運用における課題

- 装置の老朽化
 - ◎ 測定機器のライフサイクルは長いため、継続利用可能

データ活用の観点から

- × 安定な運用のため、分析機器のネットワークから独立
- × レガシーOS上での制御ソフトウェア利用 (OSのセキュリティ機能の低下)

データ活用に関するユーザー共通の課題として、

測定データ管理とデータ処理の汎用化・効率化

データ解析や評価に必要な環境の提供



共用分析機器の利便性の向上

測定データの解析・評価支援



スペクトルデータの例

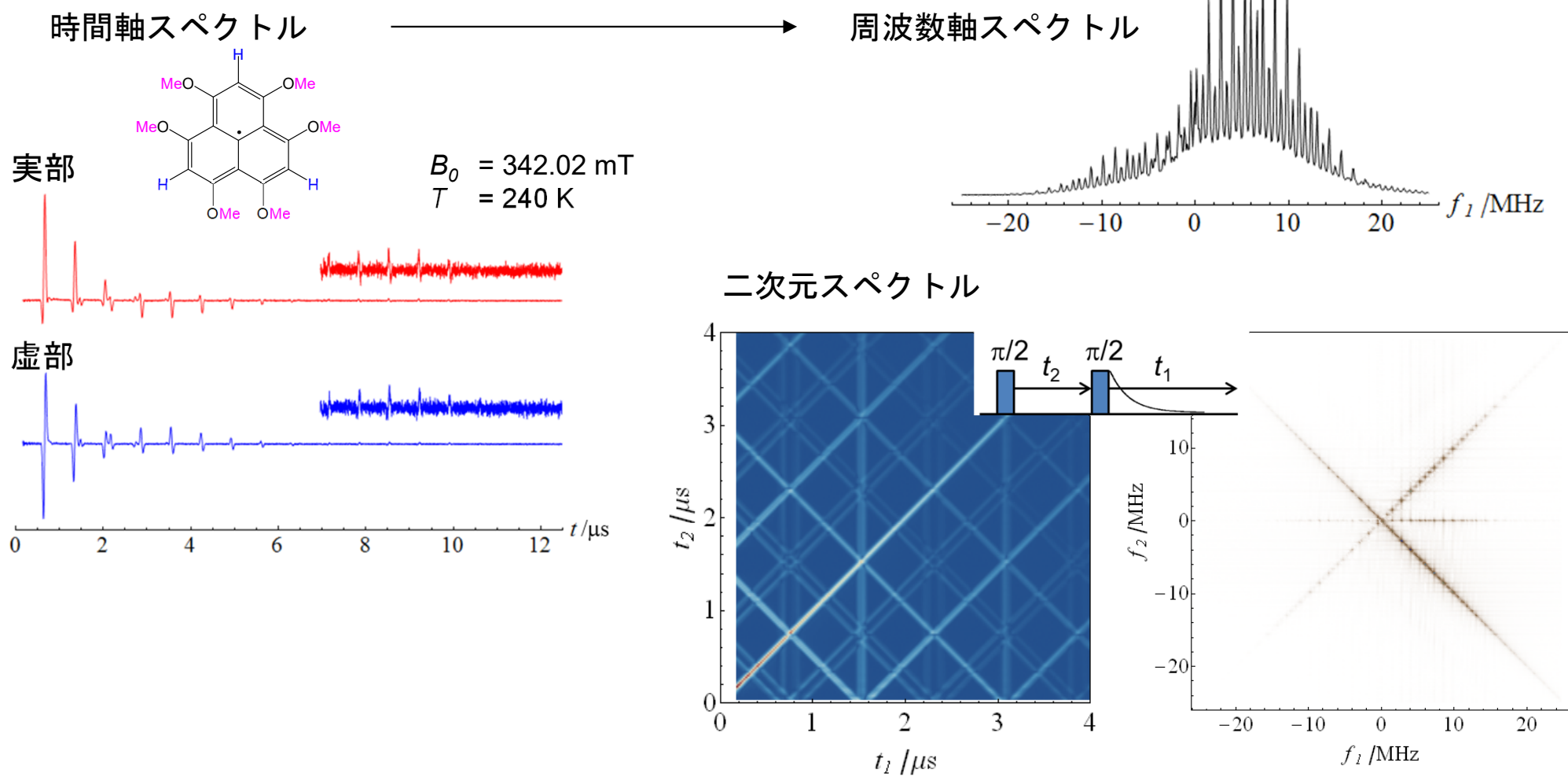
磁気共鳴 (ESR/NMR) の測定データセット

測定パラメータセット / 測定データ (バイナリーデータ、実数 or 複素数)

一次元データ: 10KB程度

多次元データ: 数百MB (データセットが巨大化)

電子スピン磁化の時間応答 (FID)



学内外の測定データ利活用

ESRやNMR等の磁気共鳴測定データを管理する分析データ集約・配信システム(3セット)を導入

- 旧OSシステム(分光装置)とNASとのセキュアなデータ通信

測定室内外から分光装置へのアクセスを遮断

装置間の通信不可

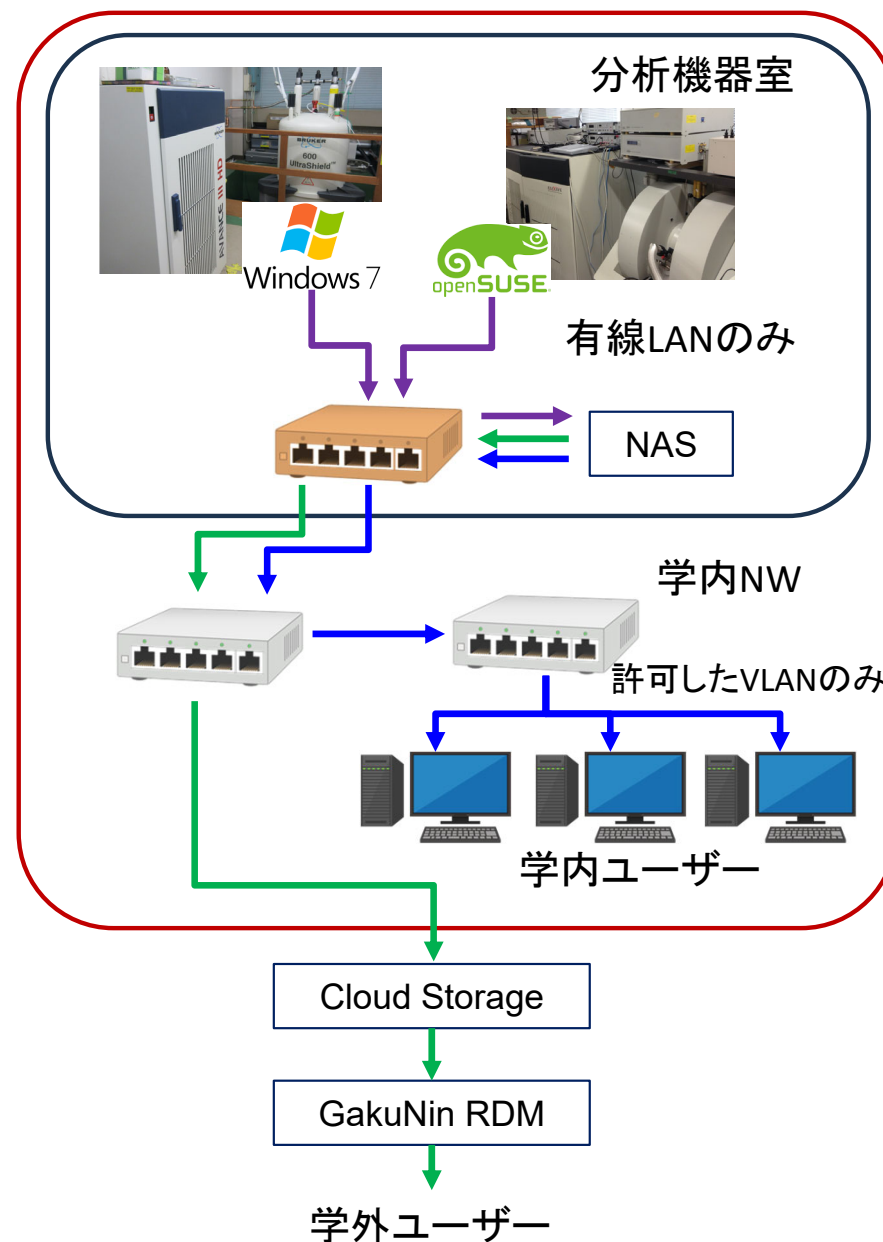
測定機能への影響を低減

NASは学内の登録されたネットワークからのみアクセス可能

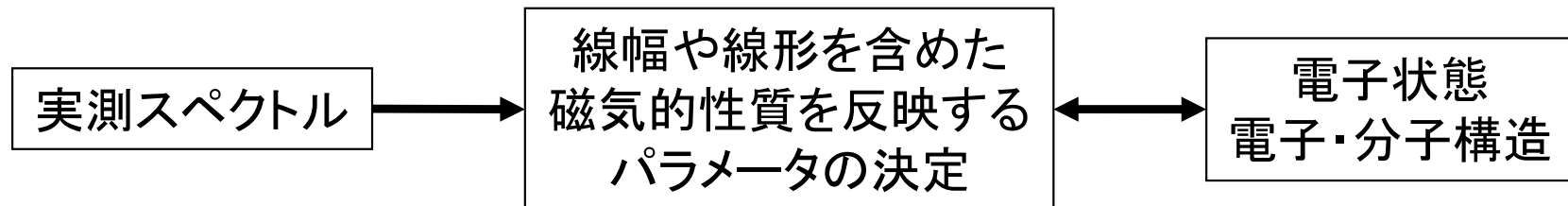
- 学内ユーザー
学内ネットワークから測定データの読出しのみ可能
- 学外ユーザー
学認RDMを活用によりデータを共有し、学外から測定データの読出し
現状) NASからGakuNin RDMにクラウドストレージを介して接続
 - セキュリティ機能はクラウドストレージに依存
 - 監理者によるサポートが必要

学内外ユーザーが研究データを活用できる環境を整備
大容量ファイルの取り扱い可能

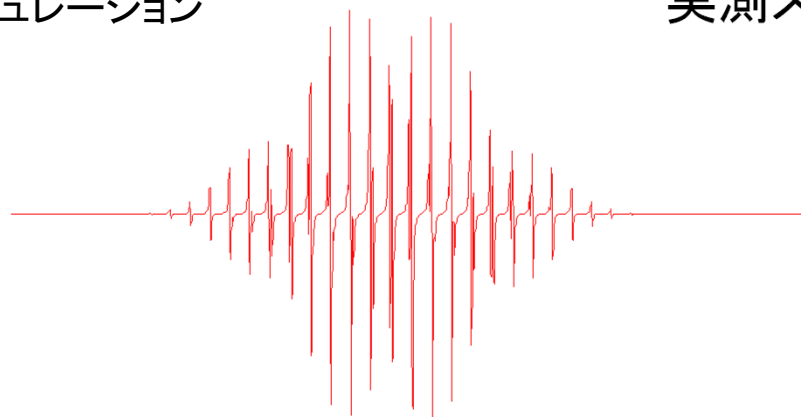
OMUNET



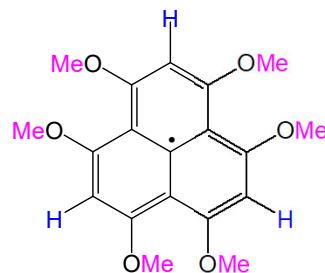
測定データの解析と評価 (ESR)



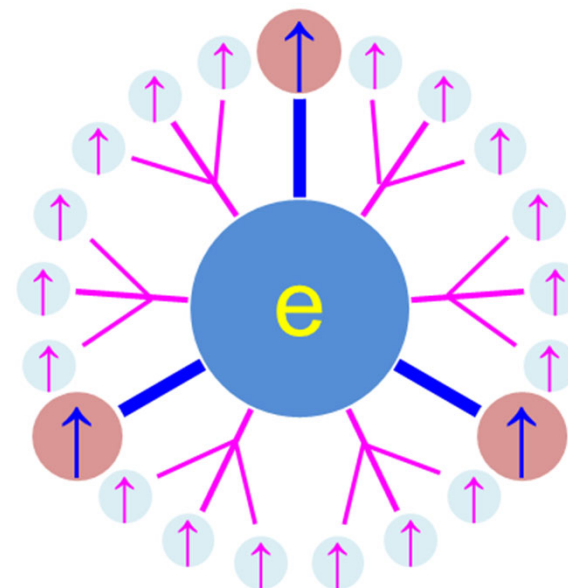
シミュレーション



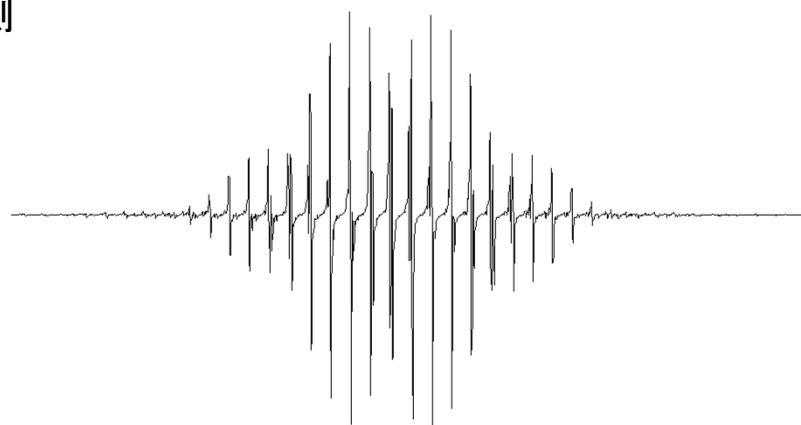
実測スペクトルの再現



スピン分布の知見



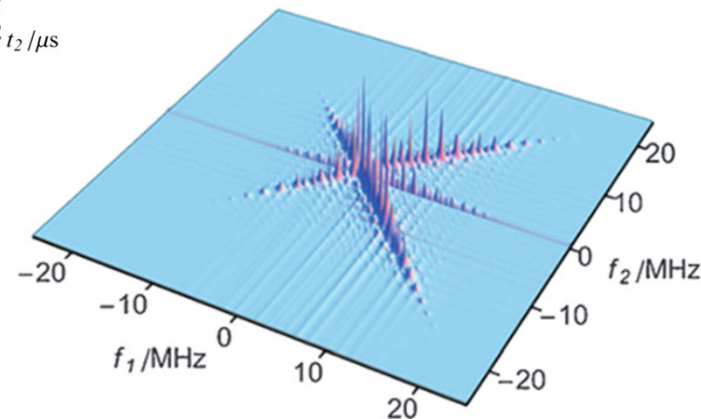
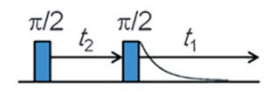
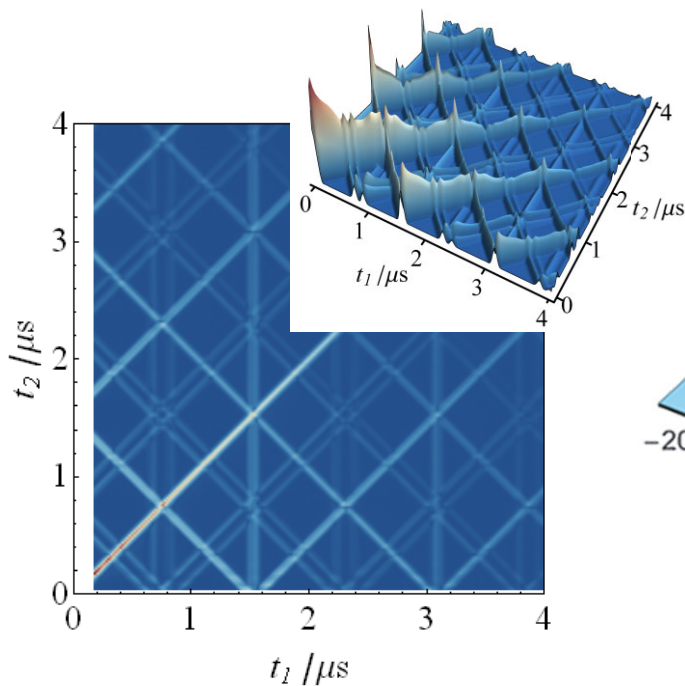
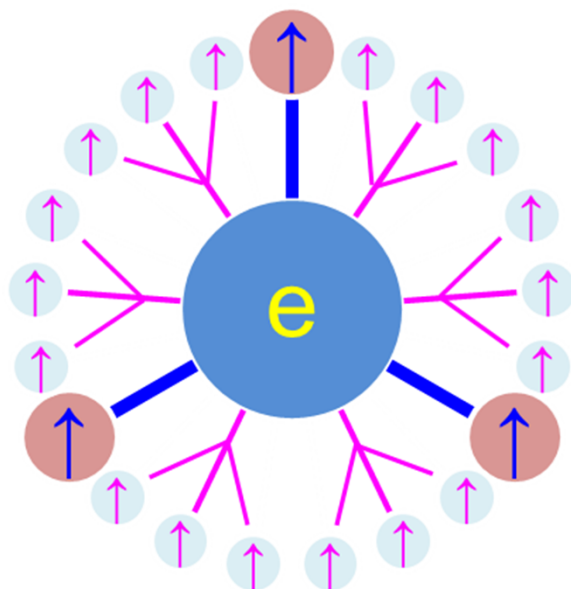
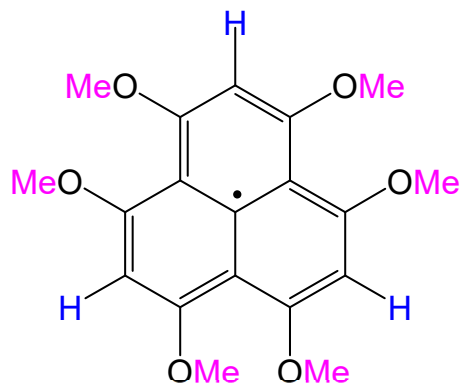
実測



334.4 334.8 335.2 335.6 336
Magnetic Field /mT

3個の水素が等価
18個の水素が等価

二次元相関スペクトルの計算

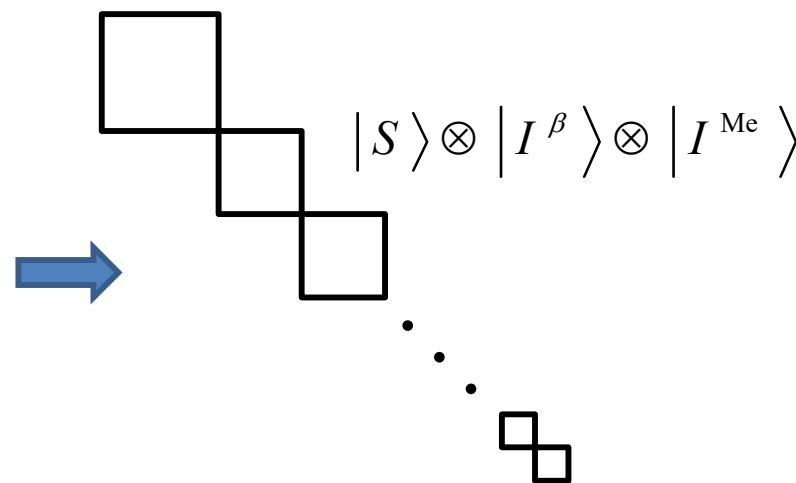


スピン空間

$$|S, I_1, I_2, \dots, I_{21}\rangle$$

$2^{22} \times 2^{22}$ の行列

- 電子スピン 1個
- 水素核スピン 3個
- 水素核スピン 18個



mdxの活用

データ利活用

データのセキュアな転送・蓄積 (VLAN, VPN)
GakuNin RDM

実測データの**データ処理・可視化**
各種データフォーマット対応

データ解析・評価

スペクトルの再現 (スペクトルのシミュレーション)
物質の磁気的パラメータの決定
→ 多変数の**最適化問題**

物質のスピン物性評価
磁気的パラメータの分子論的な理解
電子スピン分布・スピン間相互作用
(電子-核 / 電子-電子)
→ 量子論に基づく磁気パラメータの**理論計算**



分子構造・電子状態の理解

データ可視化・解析環境
の提供とプログラム共有
ブラウザ上で活用できると
理想的

データ解析・理論計算
手法の共用化と効率化

**ハイパフォーマンス計算
環境の利用**

共用機器で獲得する研究データを
解析・評価する環境プラットフォームを整備



研究力の底上げ

まとめ

- 分析データの効率的な利活用に資するデータ集約・配信システムの構築
 - レガシーOS上のデータを学内外で利活用
ルーターによる機能制限
 - GakuNin RDMとの連携による学外ユーザーの利便性向上
- 分析データの効率的な活用に向けた環境構築
 - mdxの仮想環境
 - mdxとの連携によるデータ活用・可視化、解析プラットフォームへの展開
 - データ解析、量子化学計算にmdxのハイパフォーマンス計算基盤の活用