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

大阪公立大学 大学院理学研究科
佐藤 和信、松岡 秀人†、土江 松美、臼杵 克之助
† 現所属：北海道教育大学

大阪公立大学 Osaka Metropolitan University

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

研究設備の共用
機器利用と技術相談

阪奈機器共用NW
SHARE Academic Research Resources

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)

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

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

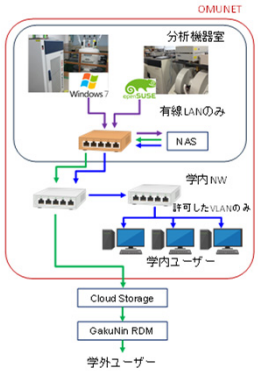
→ 共用分析機器の利便性の向上
測定データの解析･評価支援

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
  のへの影響を低減
  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



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

→ データ可視化･解析環境の提供とプログラム共有
ブラウザー上で活用できると理器的

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

→ 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

分子構造･電子状態の理解

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

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

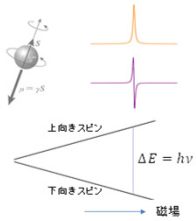
磁場中でのゼーマン分裂(ゼーマン相互作用)が電子スピンは核スピンよりも660倍大きい（電子の質量は水素核の1/1840）

ESR　高感度　　NMR　高分解能

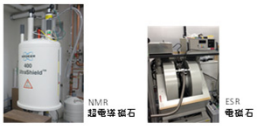
より高感度･高分解能を実現するための方向性は、
NMR･ESRともに高磁場化

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



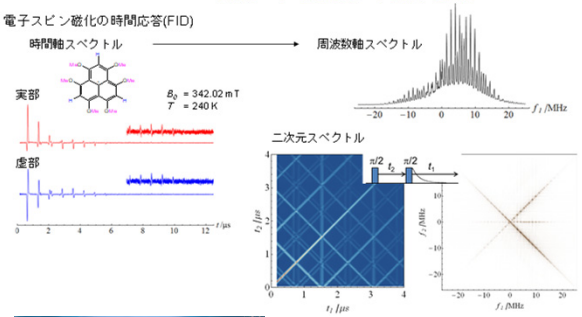
さまざまなレベルのユーザー層が利用

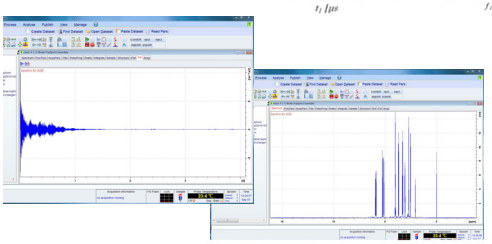


スペクトルデータの例

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)
時間軸スペクトル → 周波数軸スペクトル





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用法
    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