

材料解析センターのスーパーミニコンピュータシステム化 —有機化合物の構造解析一貫システム“TASMAC”—



研究ノート

はじめに

有機化学の研究を行うたいの大学学部や企業研究所などには、有機化合物の構造を解析したり、構造を評価したりすることを主たる任務とする分析センター、あるいはそれに類似の共同利用組織が存在する。そこではそれぞれ大型分析装置に直結のミニコンピュータが専用のデータ処理機として、高度なデータ解析に活躍している。超伝導NMR然り、また質量分析装置然りである。しかも、ほとんどの分析センターなどにおいて、それら個別の装置から得られる情報の一括統合管理と同時に、それら異種情報の複合化による高次元化情報（たとえば構造式情報）の獲得などをめざした、いわゆる分析センターのトータルシステム化構想は夢であっても、まだまだ実現には至っていないように思われる。

最近、産研材料解析センターでは、産研で合成された有機化合物の構造関連情報に焦点を絞り、(a)各種機器分析装置のスペクトル情報の統合管理機能と(b)それらスペクトル情報の複合化による構造式の創出、評価機能とを有する、スーパーミニコンピュータ支援総合構造解析一貫システム（初期版）が開発された。スーパーミニコンピュータ（富士通、FACOM、S3500）がホストコンピュータの役を担い、大、中、小型機器分析装置のミニコンやマイコンがセクションコンピュータとして組織化されている。

*花房昭静 (Terukiyo HANAFUSA), 大阪大学産業科学研究所, 有機材料合成部門, 教授, 材料解析センター長, 理学博士, 有機化学

**澤田正實 (Masami SAWADA), 大阪大学産業科学研究所, 材料解析センター, 助教授, 理学博士, 有機化学

花房昭静*, 澤田正實**

いわば、将来の分析センターが持つべき機能のコンピュータシステム化のモデルと考えられ、産官学各界から注目されている。既存の分析装置群の組織化を基盤とし、異種スペクトル情報の統合管理と複合化をめざしたわれわれのシステムは、TASMAC (Total Analysis System of Material Analysis Center) と命名され、既に産研の教職員や大学院生ら（ユーザー）に開放され、実用システムとしてその初期版が運用されている¹⁻³⁾ このTASMACの一端を紹介したい。

TASMACシステム設計

構造解析をめざしたトータルシステム化を達成するために、TASMACが備えたハード類の概略は図1の通りである。一方、ソフト類の基本的な構成は次の四種に大別される。

1. データ受信機能

RS232CやGPIBラインなどにより、材料解析センターが所有する分析装置からのデータをオンライン収集・受信できる。ホストに接続できた装置はたとえば、(a)オートサンプラー付属の超伝導核磁気共鳴吸収装置 (Bruker AM360), (b)高分解能質量分析装置1, 2 (日本電子DX300, OISG2), (c)炭水窒素自動元素分析装置1, 2 (PE240C, YANACOMT2), (d)紫外可視瞬間マルチ測光装置 (大塚電子MCPD100), (e)赤外分光光度計 (日立IR345), (f)単結晶自動X線回折装置 (リガクAF5FOS) などである。この接続が可能になったことにより、構造解析に重要な情報を提供しうるデータ類が、単一の上位ホストコンピュータ支配下に入りうるのである。

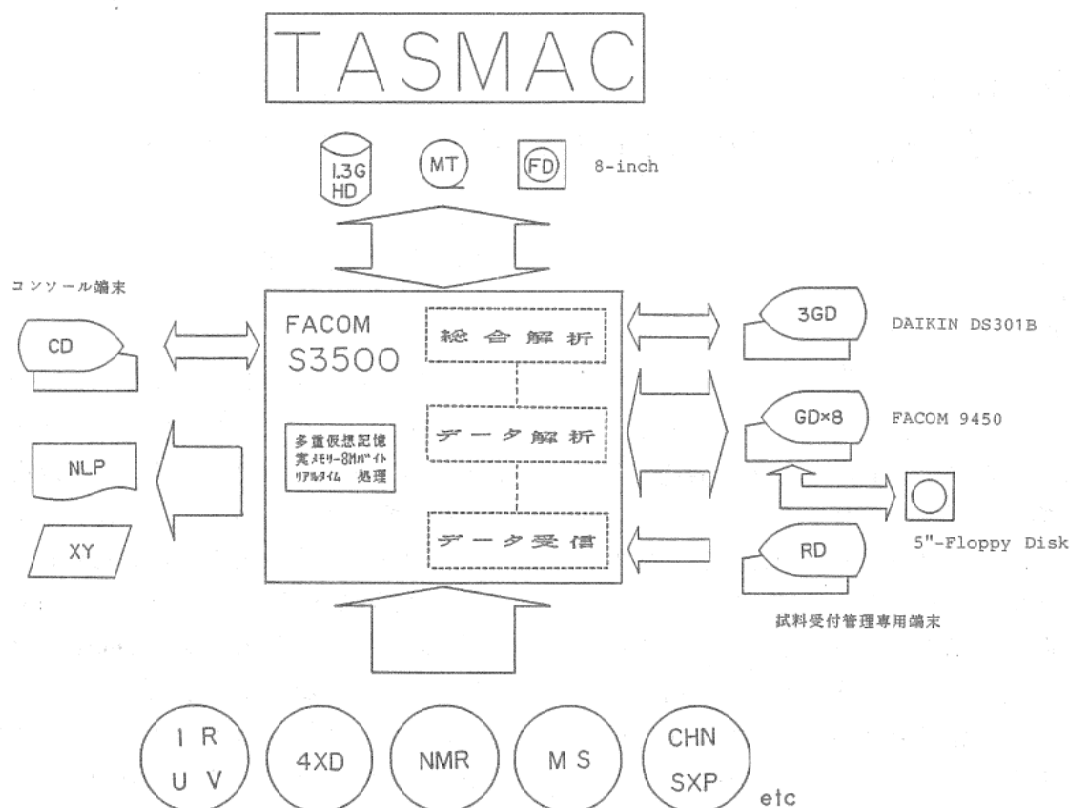


図1 TASMACH概略図

2. データ解析機能

複数のユーザーが、材料解析センターに分散配置されたインテリジェント端末（パーソナルコンピュータのワークステーション）から、(a)各装置毎の高効率データ処理・解析、(b)解析データのTASMACHからの退避・復元（5インチFDやMT）、(c)データベースとしての登録・検索などが、メニュー画面で、簡単なコマンド形式で、対話的に実行できる。たとえば、オートサンプラー利用により夜間無人で自動測定されたHNMRやCNMRのFIDデータを、ユーザーが自在に窓関数などを乗じてスペクトルに変換し、NLP出力したり、必要事項を追加してデータベースとして登録、保存できる。また、質量スペクトルでいえば、マルチ表示や差表示したり、既存のEPA/NIHデータベース検索したりでき、MCPD/UVスペクトルでいえば、経時変化データから凝一次速度定数などが解析できる。

3. 総合解析機能

複合解析、総合解析機能を担うものとしては、

“CHEMICS-6”と“ANCHOR”が登載されている。前者は豊橋技科大佐々木慎一副学長らのエキスパートシステム⁴⁾であり、CNMR、HNMR、MS、IRスペクトルデータなどから可能な候補構造式を列挙できる。TASMACH内にはCHEMICS-INTERFACEサブシステムが完備されており、必要なデータセットの入力と複合化とが容易に実行できるよう工夫されている。後者は3次元グラフィック表示やMO、MM計算が実行できる市販ソフトであり、構造評価の役を受けもっている。

4. データ管理機能

TASMACHに登録された化合物スペクトルデータの一括統合管理のために、(a)センターでの受付試料にID番号を付与する受付管理サブシステム、(b)受信したデータの一覧表示や個人名検索できる受信データ管理サブシステム、(c)解析データをデータベースとして登録、検索できるデータベース管理サブシステムなどがある。ホストコンピュータに蓄積される各種のデータが、必要に応じて取り出せたり、組み合わせたり

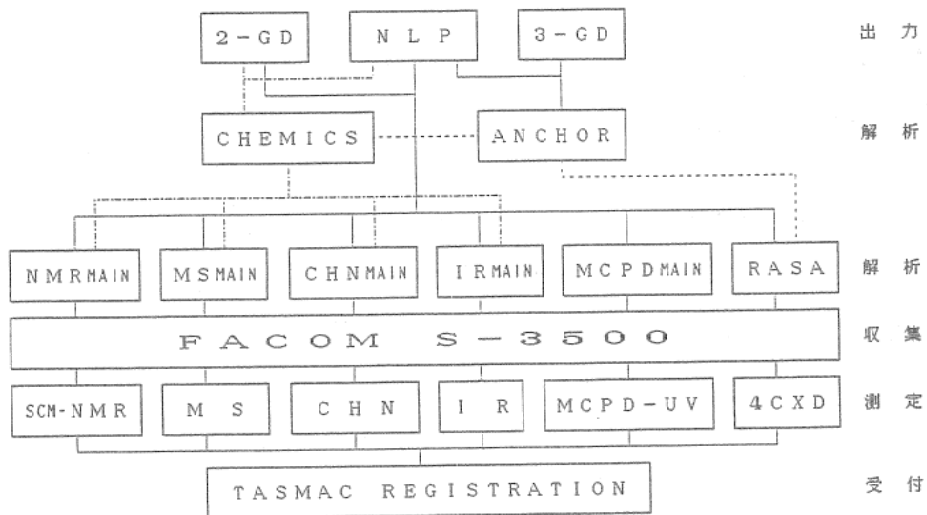
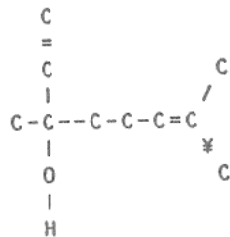
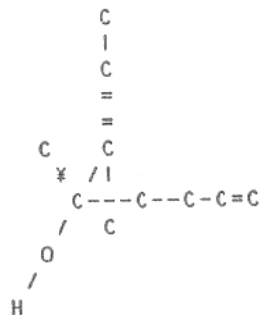


図2 TASMACH機能連携図

STRUCTURE NO. 5



STRUCTURE NO. 6



STRUCTURE NO. 7

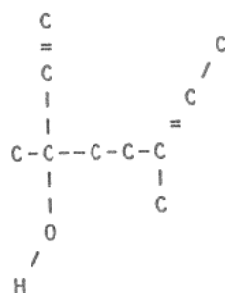


図3 候補構造式出力の例

できるようシステム全体にわたっての効率的な管理が行われている。

以上の四大機能を備えたTASMACHが、初期版であって数々の制限を内包しつつも、実際に運用されている。今後ますます改良を重ねられて、ユニークなトータルシステムとして確立されんことを願っている。図2はユーザーが利用する立場でみたTASMACH機能の有機的連携を図示したものである。略号など詳細は記載の文献に譲るが、リナロールを未知試料にみたてて、CNMR, EIMS, CHN, IRデータなどの受信—解析—総合解析ルートを経て得られた候補構造式のいくつかをあげておく。

おわりに

本稿に紹介したTASMACH構築に関する研究は、石丸寿保名誉教授が産研ご在職中に、材料解析センターの大型分析装置の導入とそれらのコンピュータシステム化（設備充実4ヵ年計画）構想が決定されたことに基ずいており、先生の国有特許料収入の見返りがあって始めて実現したものである。

石丸先生のごけい眼とご指導によるものであり、ここに改めて深甚なる感謝を表わすものがあります。

参 考 文 献

1) M. Sawada, Y. Takai, H. Yamada,
F. Fukuda, T. Tanaka, T. Ishimaru,
S. Misumi, T. Hanafusa, 投稿中.

2) 花房昭静監修, 「機器分析入門, 1987」,
阪大産研材料解析センター創立10周年記念誌,

22章 (1987).

3) 澤田正實, 化学, 42, 300 (1987).

4) 佐々木慎一教授の特別のご厚意により, TASM
ACに登載していただきました。

