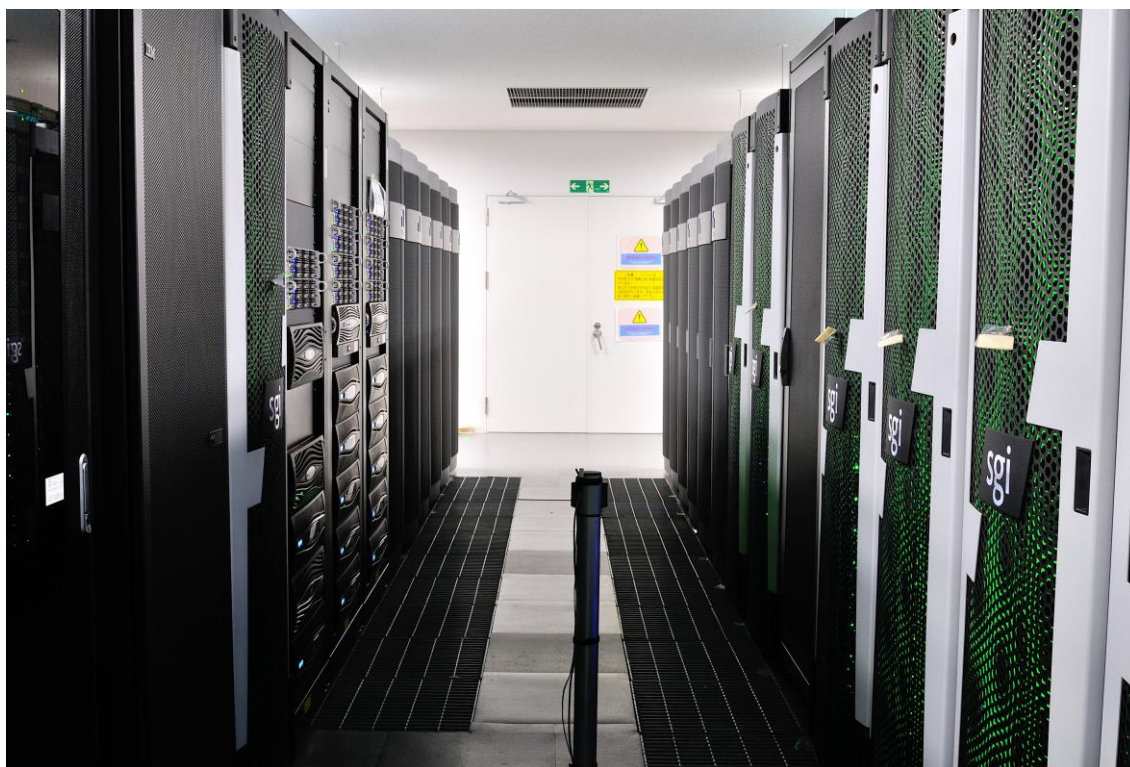


# スーパーコンピュータシステム

平成 30 年度

## 研究成果報告書



京都大学化学研究所

## はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992年1月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2016年1月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとしてSGI UV2000(総CPUコア数1,024)およびSGI C2112(総CPUコア数3,000)を採用し、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとしてDELL PowerEdge R930(総CPUコア数640)を採用しました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成30年度の361名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、82件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所WWWサービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、平成30年度は8件の採択課題(バイオ情報学分野)推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス : [spradm@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:spradm@scl.kyoto-u.ac.jp)

2019年3月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター  
<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>  
スーパーコンピュータシステム  
<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

## 化学研究所

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博	.....	1
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	.....	2
フラットで完璧な $\pi$ 共役二次元シート「シリセン」の理論設計とその物性探索	高橋 まさえ	.....	3
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	.....	4
punicafolin及びmacranganinの配座解析	上田 善弘	.....	5
リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの合成と高次構造の創製	榊原 圭太	.....	6
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	.....	7
含歪み $\pi$ 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	.....	8
電子不足部位を有する環状 $\pi$ 共役分子の合成	橋本 土雄磨	.....	9
新規ラジカル重合の開発	藤田 健弘	.....	10
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	.....	11
界面の振動分光学	長谷川 健	.....	12
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	.....	13
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖	.....	14
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成	中村 正治	.....	15
バイオインフォマティクス実習	チョウ ルイシヤン	.....	16
赤潮期間に沿岸生態システムの巨大ウイルスと藻類と細菌との相互関係分析	夏 駿	.....	17
海洋巨大ウイルス宿主同定に関する研究	孟 令傑	.....	18
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	.....	19
数値モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発	田村 武幸	.....	20
次世代シーケンシングデータの解析	森 智弥	.....	21
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	郭 晶東	.....	22
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	.....	23
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romain	.....	25
海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究	遠藤 寿	.....	26
巨大ウイルスゲノムの解析	吉川 元貴	.....	28
炎症性腸疾患における腸内微生物叢のメタゲノム解析	西山 拓輝	.....	29
配列類似性に基づいたウイルスゲノム分類法の開発	黒西 愛	.....	30
メガウイルス科のDNAポリメラーゼ遺伝子を標的とするアンプリコン解析	李 岩沢	.....	31
KEGG Orthologyに関する研究	荒巻 拓哉	.....	32
海洋巨大ウイルスとその宿主の多様性解析について	Prodinger Florian	.....	33

共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析	加藤 恭崇	.....	34
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究	金子 博人	.....	35
巨大ウイルスの分離	吉田 亘騎	.....	36
 <u>エネルギー工学研究所</u>			
ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	.....	37
 <u>防災研究所</u>			
SSEに伴う海面地殻変動の推定	井上 智裕	.....	38
 <u>理学研究科</u>			
がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発	朝光 世煌	.....	39
量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析	野田 泰斗	.....	40
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明	.....	41
 <u>薬学研究科</u>			
生物活性化合物の創製を指向した有機化学研究	大野 浩章	.....	42
 <u>工学研究科</u>			
エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価	内藤 悠太	.....	43
プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析	吉川 侑汰	.....	44
カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用	三木 康嗣	.....	45
遷移金属触媒を用いた新規変換反応	岡本 和紘	.....	46
有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成	岡本 和紘	.....	47
光触媒・光電極による高効率水分解システムの開発	東 正信	.....	48
触媒有機化学に関する研究	辻 康之	.....	49
13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明	伊藤 峻一郎	.....	50
HOPG基板上における分子配列のモデリング	松田 建児	.....	51
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	.....	52
ATR-FTIR法を用いた高分子成形プロセスの品質管理法の開発	引間 悠太	.....	53
溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明	長田 裕也	.....	54
計算化学的手法による有機物および無機物の熱物性・輸送特性予測	松本 充弘	.....	55

## エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	.....	56
軽金属・合金の力学特性	馬淵 守	.....	57
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高	.....	58
変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子	.....	59

## 農学研究科

磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発	久住 亮介	.....	60
一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究	吉田 天士	.....	61

## 人間・環境学研究科

有機分子性結晶の気体吸着特性の解析	津江 広人	.....	62
三次元 $\pi$ 共役分子の合成の機能性の創出	廣戸 聡	.....	63

## 高等研究院

有機構造体を用いたイオン伝導体合成	堀毛 悟史	.....	64
自己集合を利用したタンパク質のカプセル化	藤田 大士	.....	65
混合マトリクス膜中のガス輸送特性に関する計算機シミュレーション	ウチイ	.....	66

## 福井謙一記念研究センター

振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	.....	67
-----------------	------	-------	----

## 産官学連携本部

固液界面におけるエネルギー変換	湊 丈俊	.....	68
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗	.....	70
フッ化物シャトル電池における、塩可溶性のLiBOBの効果とBiF <sub>3</sub> 電極の電気化学的特性	CelikKucuk Asuman	.....	71

## 京都大学以外

生体分子情報データベースの開発とその応用	五斗 進	.....	73
遺伝子情報を用いた海洋生態系研究	西村 陽介	.....	74
グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用	松井 求	.....	75
典型元素を活用した機能性材料の開発	吾郷 友宏	.....	76
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	.....	77
カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築	藪崎 純子	.....	78
密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志	.....	79

菌類の系統解析	齋藤 勝晴	.....	80
琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析	岡崎 友輔	.....	81
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	.....	82
スギゲノムの解読と解析	笠原 雅弘	.....	83
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	.....	84
タンパク質の電子状態計算	平野 敏行	.....	85
アミノアシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源	浜口 悠貴	.....	86

## スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也	.....	87
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	.....	92
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	.....	93
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴	福本 淳司	.....	127
平成30年度研究課題一覧		.....	133

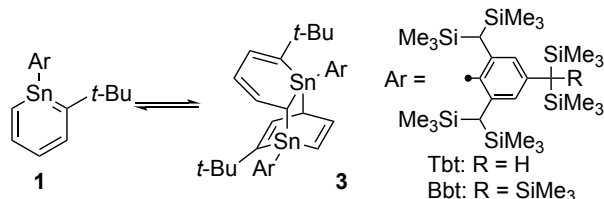
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

Theoretical studies on the reactions of novel main group elements compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 時任 宣博

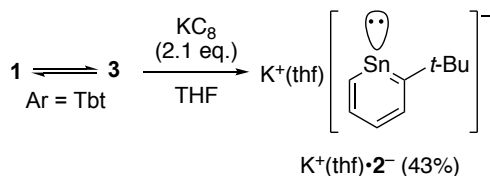
研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スズ核置換ベンゼン **1** およびフェニルアニオン  $K^+(thf) \cdot 2^-$  の性質に関する検証を行った。



**1** は溶液中で単量体と二量体 **3** の平衡状態にあり、その X 線結晶構造解析による構造の確定には至っていない。そこで、**1** に対する構造最適化を Gaussian 09 {B3LYP/lanl2DZ[Sn],6-31G(d,p)[CH]} にて行った。その構造を用いた GIAO および TD 計算 {B3LYP/TZVP[Sn],6-311G(2df,2p)[CHSi]} による NMR ケミカルシフトおよび UV/vis 吸収スペクトル吸収極大の計算結果は実測値と良い一致を示したことから、最適化構造は実際の構造をよく再現していると考えている。

また上記平衡混合物に対し、 $KC_8$  を作用させることにより、Tbt 基の還元的脱離反応が進行し、 $K^+(thf) \cdot 2^-$  が得られることを見出した。 $K^+(thf) \cdot 2^-$  の NICS(1) {GIAO-B3LYP/TZVP[Sn],6-311G(2df,2p)[CHSi]}/B3LYP/lanl2DZ[Sn],6-311G(d,p)[CHSi]} は  $-7.26$  と算出された。既報のゲルマニウムの系 [NICS(1) =  $-8.10$ ] に比してその絶対値はやや小さくなっていたが、依然として負に大きく、芳香族性を示すものと考えられる。



発表論文(謝辞あり)

- (1) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Heavy Phenyllithium and -Sodium: Synthesis and Characterization of Germanium Analogues of Phenyl Anion ('Germabenzanyl Anions'). *Chem. Lett.* **2018**, *47*, 708–710.
- (2) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Ru-Complexes of an Anionic Germabenzanyl Ligand. *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 8044–8047.
- (3) Mizuhata, Y.; Fujimori, S.; Noda, N.; Kanesato, S.; Tokitoh, N. Generation of Stannabenzenes and Their Monomer–Dimer Equilibration. *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 14436–14444.
- (4) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Stannabenzenyipotassium: The First Isolable Tin-Containing Benzene Derivative. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 17039–17045.
- (5) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. A Mixed-Anion System Consisting of a Germyl Anion and Anions Delocalized on Conjugated Carbon Ring Skeletons. *Chem. Eur. J.* in press.

高周期典型元素を含む新規結合様式の創出

Synthesis of Compounds Having Novel Bonds of Heavier Main Group Elements

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 水畑 吉行

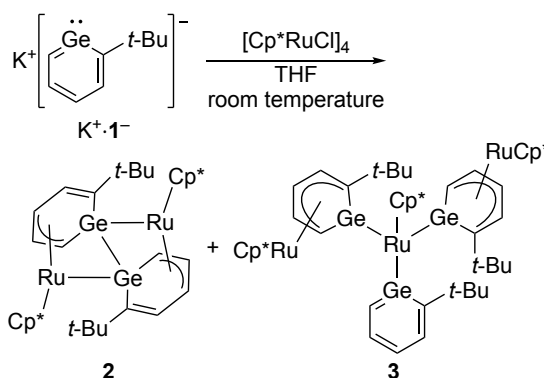
研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、筆者らがごく最近合成・単離することに成功したゲルマニウム核置換フェニルアニオン  $K^+ \cdot 1^-$  の反応生成物の性質に関する検証を行った。

$K^+ \cdot 1^-$  と 0.25 当量の  $[RuClCp^*]_4$  ( $Cp^* = [C_5Me_5]$ ) との反応生成物を分離・精製したところ、錯体 **2** と **3** を単離することに成功した。X 線

結晶構造解析の結果から、これらの錯体は母体フェニルアニオンとは大きく異なる配位様式を示していることが明らかになった。

これらの結合・配位様式を明確化するために、以下の検証を行った。まず、得られた錯体の構造最適化を Gaussian 09 {B3PW91/LanL2DZ(Ge,Ru),6-31G(d)(C,H)} にて行い、最適化構造が X 線単結晶構造解析による実測値と極めて良い一致を示すことを確認した。その上で、NBO6.0 および AIMAll プログラムによる評価{B3PW91/TZVP(Ge,Ru),6-311++G(2df,2p)}を行った。その結果、図に示す配位形式での記述が妥当であることを明らかにした。



発表論文(謝辞あり)

- (1) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Heavy Phenyllithium and -Sodium: Synthesis and Characterization of Germanium Analogues of Phenyl Anion ('Germabenzanyl Anions'). *Chem. Lett.* **2018**, *47*, 708–710.
- (2) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Ru-Complexes of an Anionic Germabenzanyl Ligand. *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 8044–8047.
- (3) Mizuhata, Y.; Fujimori, S.; Noda, N.; Kanetsato, S.; Tokitoh, N. Generation of Stannabenzenes and Their Monomer–Dimer Equilibration. *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 14436–14444.
- (4) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Stannabenzanylpotassium: The First Isolable Tin-Containing Benzene Derivative. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 17039–17045.
- (5) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. A Mixed-Anion System Consisting of a Germanyl Anion and Anions Delocalized on Conjugated Carbon Ring Skeletons. *Chem. Eur. J.* in press.



フラットで完璧な  $\pi$  共役二次元シート「シリセン」の理論設計とその物性探索  
Theoretical design of flat and perfect two-dimensional  $\pi$ -conjugated “silicene” and the search of  
their solid-state properties

京都大学 化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域  
高橋まさえ

研究成果概要

フラットなグラフェンと異なり、グラフェンのケイ素版シリセンはジグザグ構造をとり不安定であることが知られています。これは、グラフェンの構成単位ベンゼンがフラットであるのに対し、シリセンの構成単位ヘキサシラベンゼンが椅子型であることに起因しています。フラット構造のヘキサシラベンゼンの実現は長い間ケイ素化学分野の課題でした。安定でフラットなシリセン実現には、まずフラットな構成単位の構築が鍵となります。研究代表者は、昨年度 9 月、ジグザグ構造をとるケイ素二次元シート『シリセン』を、グラフェンと同じようにフラットにできる構成単位の構築に成功し、論文発表しました[M. Takahashi *Sci. Rep.* **2017**, 7, 10855.]。

本研究では、京都大学化学研究所のスーパーコンピュータを利用し、研究代表者が設計したフラットな構成単位をベースに二次元に拡張したフラットなシリセンを構築し、その物性を探索することを目的としています。分子の場合には、Gaussian シリーズの汎用ソフトが広く使われていますが、周期的に配列したシート状シリセンの計算には適していません。また、第一原理計算による物質設計では、最適構造を求めたのちに、その構造がポテンシャル曲面上で極小点にある安定な構造であることを確認する必要があります。そのためには振動解析を行う必要があります。周期系の構造の決定において格子定数も含めた最適化と振動解析の可能なアプリケーションは限られています。京都大学化学研究所のスーパーコンピュータにはこの目的にかなったアプリケーション (Materials Studio) が公開されています。

今年度は、まず、このアプリケーションを利用し、昨年度設計した分子がこの計算方法においても安定構造として得られるか、また、通常いわれているシリセンが確かに平面構造では安定ではなく虚の振動数を有するかなどを通常の方法でレベルを上げて確認しました。Materials Studio は使い慣れておりましたが、システムが異なることや、バージョンが上ったため、以前可能であった計算がうまく走らないというトラブルに見舞われ難航しました。まだ期待する計算が完全に走るシステムにたどりついていません。今後、いくつかの方法で、基本分子の確認に加え、あらたな二次元シートの設計に挑戦する予定です。6 月に、グラフェンでノーベル賞を受賞したアンドレ・ガイムが基調講演を行う 10th ICMAT 2019 での招待講演を依頼されており、それまでには、フラットで完璧な  $\pi$  共役二次元シート「シリセン」の構築にたどりつきたいと考えています。

## 特異な構造をもつ有機分子の電子的性質

## Electronic Properties of Organic Molecules with Novel Structure

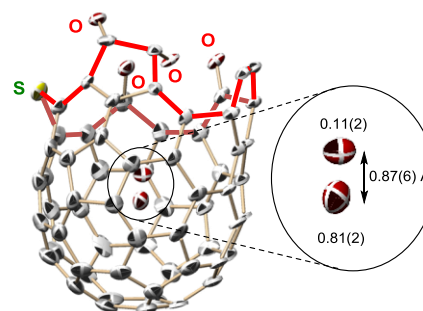
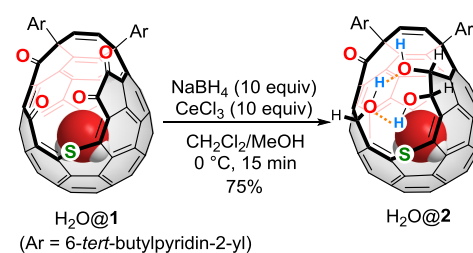
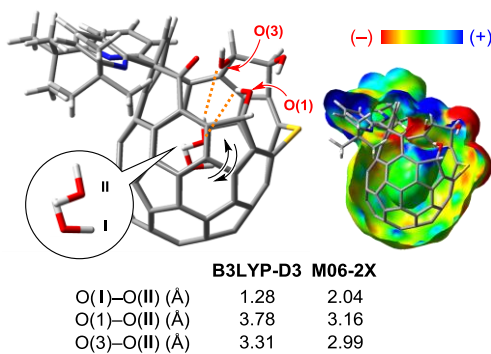
京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 構造有機化学領域 村田 靖次郎

## 研究成果概要

水素結合に誘起された水分子の動的挙動は興味深く、水一分子が関与した水素結合について理論研究が盛んに行われてきた。しかし、外的環境と複雑な水素結合ネットワークを構築するため、実験研究は困難を極める。本研究では、3つのOH基を開口部にもつ水酸化開口フルーレン C<sub>60</sub> 誘導体 **2** を設計・合成し、その内部空間に水単分子を隔離することで、開口部上のOH基との水素結合の形成・解離に基づく単一水分子の性質に着目した。

H<sub>2</sub>O@**1** に対して、CeCl<sub>3</sub> 存在下、10 equiv の NaBH<sub>4</sub> を反応させることで、3つのカルボニル基が選択的に還元された H<sub>2</sub>O@**2** を 75% の収率で得た (Scheme 1)。単結晶 X 線構造解析の結果、H<sub>2</sub>O@**2** は開口部上に強固な分子内水素結合を形成し、分子間水素結合を介してダイマー化することがわかった。さらに、骨格内部では中心部と開口部付近において内包水分子のディスオーダーが見られ、占有率はそれぞれ 0.11(2)、0.81(2)であった。(Figure 1)。分散力を加味した理論計算からも (Figure 2)、2つの異なる水分子の配置が再現され、**2** に内包された水分子は広い内部空間に由来し、開口部上のOH基との間の水素結合の形成・開裂に応答した並進運動を引き起こすことがわかった。

発表論文(謝辞なし)

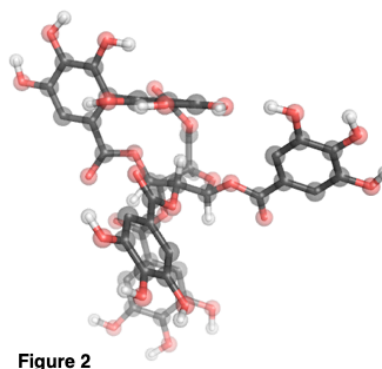
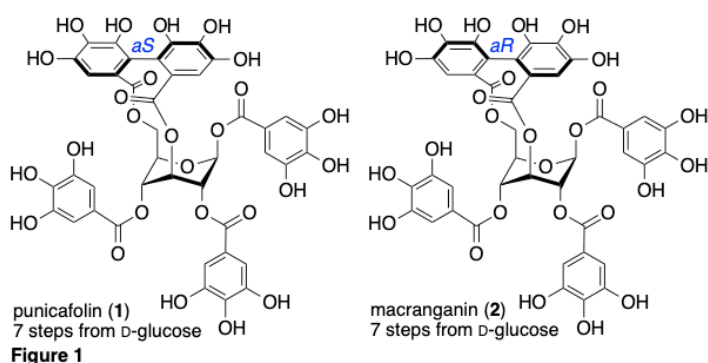
Hashikawa, Y.; Hasegawa, S.; Murata, Y. *Chem. Commun.* **2018**, , 13686–13689.Scheme 1. Synthesis of H<sub>2</sub>O@**2**Figure 1. X-ray structure of H<sub>2</sub>O@**2**. Aryl groups, solvent molecules, and hydrogen atoms are omitted for clarity. Thermal ellipsoids are set in 50% probability.Figure 2. Optimized structures of H<sub>2</sub>O@**2** (B3LYP-D3 and M06-2X) and electrostatic potential map of **2** (MP2).

punicafolin 及び macranganin の配座解析  
Conformational Analyses of Punicafolin and Macranganin

京都大学化学研究所 精密有機合成化学研究領域 上田 善弘

研究成果概要

エラジタンニン(エラジタンニンは植物二次代謝産物の一種で加水分解性ポリフェノールに属する配糖体天然物である。その多くはグルコースを基本構造とし、没食子酸により修飾される水酸基の位置や没食子酸ユニットの置換様式によって、千を超える化合物が天然に存在しており、顕著な生物活性を有するものも数多く報告されている。我々は無保護グルコースの直接位置選択的官能基化を基盤とする全合成研究に取り組んでおり、最近 punicafolin (1) 及び macranganin (2) の初の全合成をグルコースから 7 工程で達成した。1 と 2 は没食子酸ユニットが酸化的に C-C 結合形成によってできる HHDP 基の軸不斉が異なるジアステレオマーである (Figure 1)。1 と 2 の合成品の  $^1\text{H}$  NMR から糖由来のシグナルのカップリングコンスタントが大きく異なることに興味を持ち、1 及び 2 の MacroModel を用いた配座探索を行った。その結果、1 は Figure 1 の構造式に示す通り、グルコースのピラノース環がフリップし、置換基が全てアキシアルに向いた  $^1\text{C}_4$  配座をとるのに対し、2 はアノマー位の置換基がエクアトリアルに向いた boat 型の配座が安定であることが示唆された。配座探索で得られた 227 配座 (<5 kcal/mol) を初期構造とした DFT 計算により構造最適化した結果、得られた最安定構造を Figure 2 に示した。本構造を用いた NMR 計算によって算出したピラノース環上水素のカップリングコンスタントの計算値は、実測値と似た傾向を示したことから、溶液中でも同様の配座を取っていることが示唆された。1 は  $^1\text{C}_4$  配座を無理なくとれるのに対して、2 は全ての置換基がアキシアルに向いた場合、HHDP 基とアノマー位の没食子酸ユニットとの間に立体障害が生じるため、アノマー位の没食子酸ユニットをエクアトリアルに向けた boat 型配座が安定配座となったと考えられる。



発表論文(謝辞あり)

H. Shibayama, Y. Ueda, T. Kawabata, 投稿準備中.

リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの合成と高次構造の創製  
Fabrication of Higher-order Structures of Molecular Janus-type Bottlebrushes Synthesized  
through Living Radical Polymerization

京都大学 化学研究所 材料機能化学研究系 高分子材料設計化学研究領域 榊原圭太

研究成果概要

高密度に異種側鎖を有するボトルブラシは、ヤヌス型ボトルブラシと呼ばれ、異種側鎖のミクロ相分離を駆動力とした高次構造のビルディングブロックとして着目されている。我々はこれまで、セルロースを主鎖として、6 位水酸基に polystyrene (PSt,  $M_n = 3,100$ ) 鎖を、2,3 位水酸基に poly(ethylene glycol) (PEG,  $M_n = 730$ ) 鎖を有するヤヌス型ボトルブラシ(セルロース系ヤヌス型ボトルブラシ)の主鎖のコンホメーションが、希薄溶液中において、捻率と曲率を有するワイヤーモデルであるらせんみみず鎖(HW)モデルにより再現できることを見出している<sup>1)</sup>。本研究では、側鎖長と主鎖のコンホメーションの相間を明らかにすべく、種々のセルロース系ヤヌス型ボトルブラシを合成し、サイズ排除クロマトグラフィー-多角度光散乱(SEC-MALS)測定および小角 X 線散乱(SAXS)測定による希薄溶液中におけるコンホメーション解析を行った。PSt 鎖の  $M_n$  が大きくなるに連れて、ボトルブラシの断面方向の平均二乗回転半径  $S_e^2$  の値が大きくなり、側鎖はより広がっていることがわかった。 $S_e^2$  の値と  $S^2$  の  $DP_w$  依存性を総合的に考察すると、いずれのボトルブラシも主鎖のコンホメーションは HW 鎖モデルで再現できることがわかった。これは PEG 鎖のみを有するボトルブラシ主鎖がみみず鎖(KP)モデルにより再現できたことと対照的であり、PEG 鎖の有無が主鎖のコンホメーションに大きな影響を与えていることがわかった。

発表論文(謝辞あり)

該当無し

発表論文(謝辞なし)

1) K. Sakakibara, Y. Kinose, Y. Tsujii, "Synthesis of Cellulosic Bottlebrushes with Regioselectively Substituted Side Chains and their Self-assembly", In *Cellulose Science and Technology: Chemistry, Analysis, and Applications*, ed. T. Rosenau, A. Potthast, J. Hell, John Wiley & Sons Inc., NJ, USA, 2019, pp. 51-66.

2) H. Miyamoto, K. Sakakibara, I. Wataoka, Y. Tsujii, C. Yamane, K. Kajiwara, "Interaction of Water Molecules with Carboxyalkyl Cellulose", In *Cellulose Science and Technology: Chemistry, Analysis, and Applications*, ed. T. Rosenau, A. Potthast, J. Hell, John Wiley & Sons Inc., NJ, USA, 2019, pp. 127-142.

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

High-Resolution Observation of Polymer Crystals with a Transmission Electron Microscope

京都大学化学研究所 高分子制御合成研究領域 登阪雅聡

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ポリジメチルシロキサン(PDMS)の結晶構造解析に取り組んだ。PDMS はエラストマーやオイル、消泡剤としての食品添加など、幅広く使われている。この PDMS は低温で結晶化するが、その原子座標を決める構造解析は未だ行われていない。

我々は昨年度までに、透過型電子顕微鏡(TEM)中で PDMS を冷却することにより単結晶を得て、その制限視野電子線回折(SAED)パターンから、5種類の結晶構造が存在することを明らかにしていた。この SAED パターンからは、結晶の  $ab$  面内における分子充填の情報が得られるが、 $c$  軸方向の情報は欠損している。そこで  $c$  軸方向の情報はバルク試料からの X 線回折(WAXD)パターンより推定することで、エネルギー的に安定であり、かつ、回折パターンの特徴を再現できる構造モデルを Materials Studio を用いて探索した。その結果、最初に見つけた4種類について確からしい構造を提案した(図1)。また、架橋した PDMS(いわゆるシリコーンゴム)を延伸して冷却結晶化させると、WAXD パターンが延伸倍率に応じて変化するという特異な現象についても、これら4種類の結晶が混在すると考えることで説明することができた。

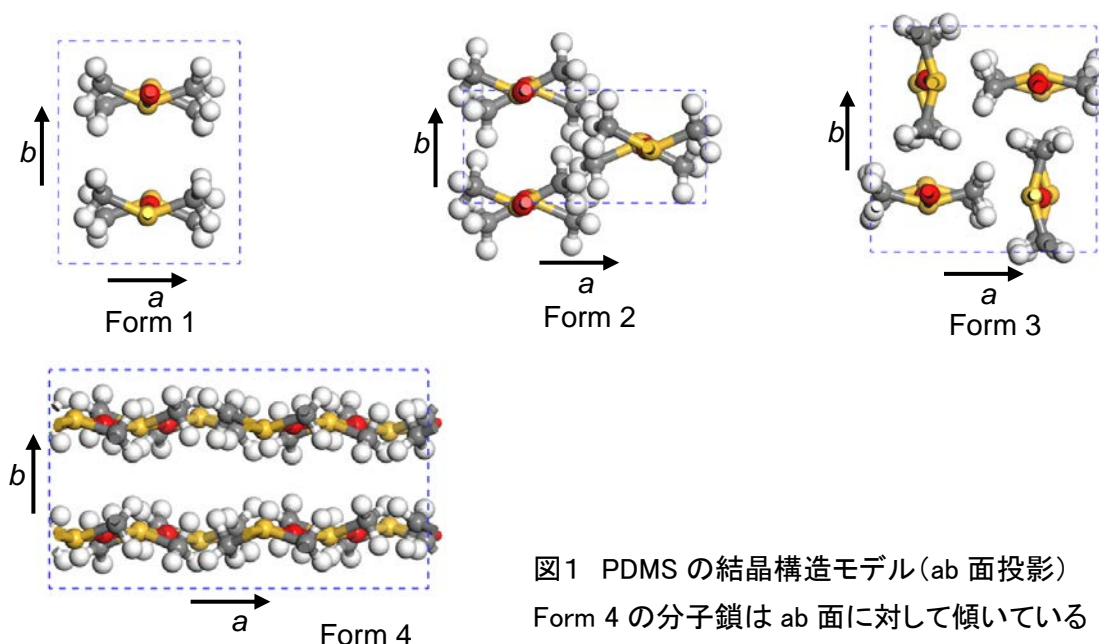


図1 PDMS の結晶構造モデル( $ab$  面投影)  
Form 4 の分子鎖は  $ab$  面に対して傾いている

発表論文 (謝辞あり)

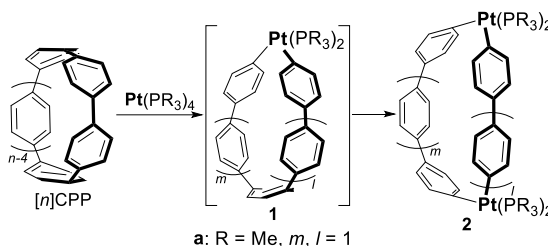
M. Tosaka, K. Tashiro, *Polymer*, **2018**, *153*, 507-520.

含歪み  $\pi$  共役化合物の合成とその物性評価

Synthesis of Strained  $\pi$ -Conjugated Molecules and Evaluation of their Physical Properties

京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成研究領域 茅原 栄一

シクロパラフェニレン (CPP) をはじめとした環状  $\pi$  共役分子は、基礎および応用研究の両面から近年大いに注目されている。我々は、最近、CPP の歪んだ炭素-炭素 (C-C) 結合に着目し、遷移金属錯体に対する反応性について検討を行ったところ、0 価白金錯体により CPP の二つの C-C 結合が一度に活性化され、環状白金二核錯体が見出された (Scheme 1)。そこで、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、DFT 計算による本反応の反応機構の推定を行った。



Scheme 1. The C-C bond activation of [n]CPPs.

まず、[5]CPP の C-C

結合に対して、Pt(PMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub> が段階的に挿入する機構の探索を行った (Figure 1)。その結果、CPP の C-C  $\sigma$  結合に白金が配位した後に、3 中心遷移状態を経由し、単核錯体 **1a** が生成する経路が見つかった。さらに、**1a** から、同様に白金錯体の配位と挿入により、二核錯体 **2a** が生成した。

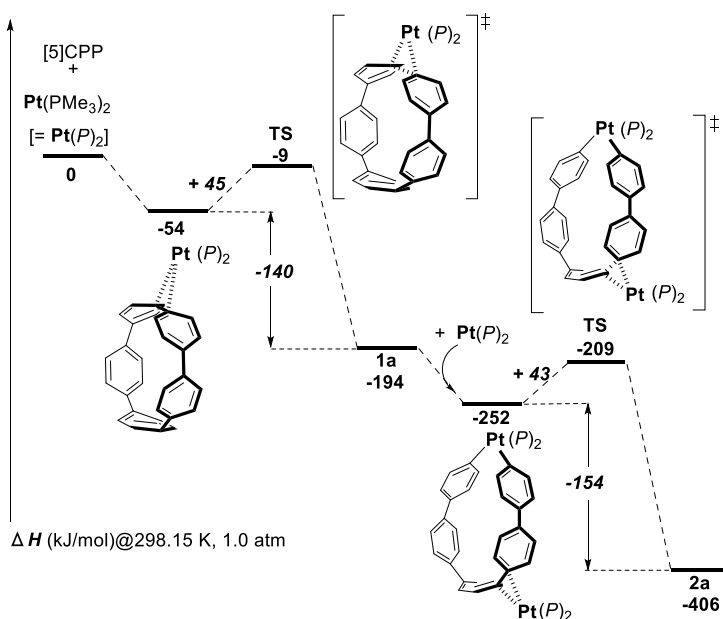


Figure 1. Potential energy surface of the C-C activation reaction of [5]CPP with Pt(PMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub> obtained by  $\omega$ B97X-D/6-311G(d)(C,H,P), SDD (Pt)// $\omega$ B97X-D/6-31G(d)(C,H,P), LANL2DZ (Pt).

1 つめ、2 つめの挿入反応の活性化エンタルピーは+52、47 kJ/mol といずれも低く、これは、実験において、80°C 程度の穏和な条件で反応が進行した結果とよい一致を示していた。また、この結果は最初の C-C 活性化が律速段階であることを示唆している。また、いずれの段階も大きく発熱的な反応であり、**1a** の生成は 129kJ/mol、**2a** の生成は 146kJ/mol であった。

発表論文(謝辞あり) Kayahara, E.; Hayashi, T.; Takeuchi, K.; Ozawa, F.; Ashida, K.; Ogoshi, S.; Yamago, S. *ng*

*n* 2018, , 11418-11421.

電子不足部位を有する環状  $\pi$  共役分子の合成

Synthesis of cyclic  $\pi$ -conjugated molecules with electron deficient moieties

京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成研究領域 橋本 士雄磨

研究成果概要

環状  $\pi$  共役分子であるシクロパラフェニレン (CPP) 及びその誘導体は、化学と材料科学の両面から注目を集める分子群である。中でも、 $\pi$  共役骨格に電子求引性基を導入したものは、n 型半導体材料などへの応用も期待できる。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新たに電子不足なテトラフルオロアリーレン部位を有する CPP 誘導体の理論計算に取り組んだ。

目的の CPP 誘導体である 8F-[6]CPP と 12F-[9]CPP について TD-DFT 計算 [B3LYP/6-311+G(d,p)]を行なったところ、HOMO から LUMO への遷移はいずれも禁制と予測され、実際の吸収スペクトル波形の傾向と一致していることがわかった。また、フッ素原子導入により HOMO、LUMO 準位を制御できる知見は、今後の材料研究への応用にも期待できる。

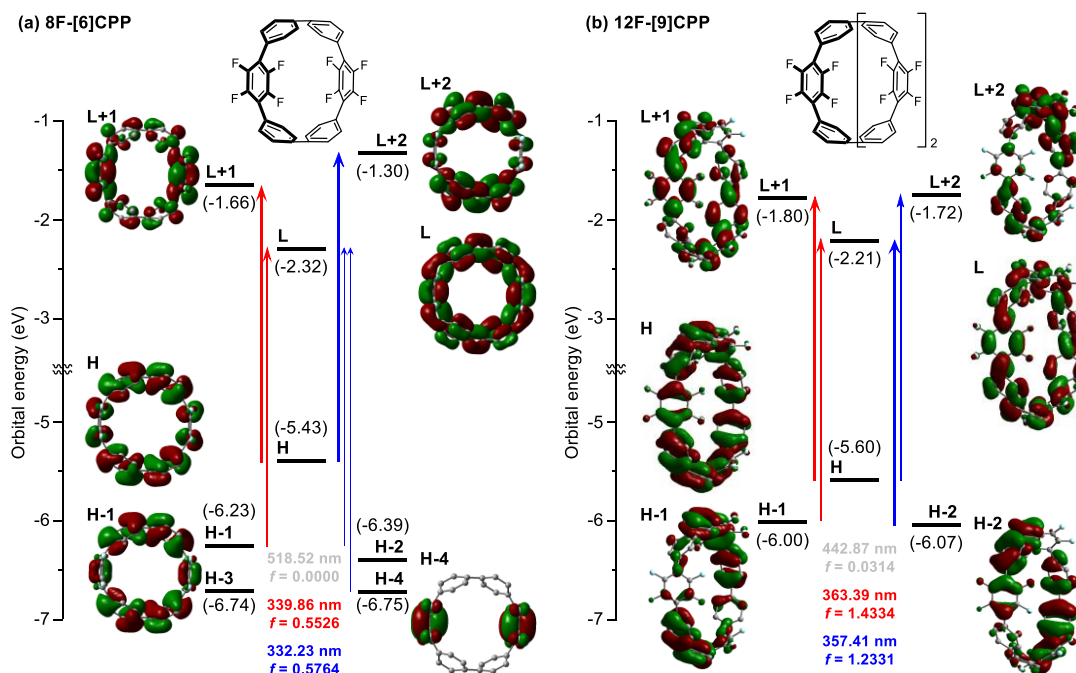


Figure 1. Summary of TD-DFT calculation [B3LYP/6-311+G(d,p) level of theory].

発表論文(謝辞あり)

“Synthesis and Physical Properties of Polyfluorinated Cycloparaphenylenes”

Hashimoto, S.; Kayahara, E.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N.; Takeuchi, K.; Ozawa, F.; Yamago, S. *Org. Lett.* **2018**, *20*, 5973-5976.

新規ラジカル重合の開発  
Development of new radical polymerization

京都大学化学研究所 高分子制御合成領域

藤田健弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新規モノマーを用いたラジカル重合の開発に関わる分子設計を行った。

これまで、新規モノマーの置換基を変えることで大きく反応性が変わる事が実験的に明らかになっている。これらの反応性の差を調べるために、Gaussian ソフトウェアを用いてモノマーの最安定構造を求めた。得られた構造を用いることで反応性の差を説明することが出来た。さらに、この結果に基づいて置換基の構造をデザインした。今後は、重合機構を明らかにするために計算サーバーを利用する予定である。



有機デバイスの基礎科学と高機能化  
Basic Science and Functionalization of Organic Devices

京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域 梶 弘典

研究成果概要

曲面状共役系を有するユニークな環状分子である $[n]$ シクロパラフェニレン( $[n]$ CPP, Fig. 1)は、これまでサイズ選択的な合成が進められるとともに、有機電子材料としての応用例として、疎水基修飾した CPP 非晶系の電子移動度が報告されている。しかしながら、CPP 非晶系の電荷輸送特性に関する系統的な理解は十分でない。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに実装されている分子動力学(MD)ならびに量子化学計算ソフトウェアを使用して CPP 非晶系の電荷輸送シミュレーションを行い、CPP の環サイズや特異な分子構造が電荷輸送特性に与える影響について検討した。MD 計算にはLinux版LAMMPSを、量子化学計算にはLinux版Gaussian 16プログラムを、分子軌道の可視化にはWindows版GaussView 6を用いた。

孤立した CPP 分子の構造最適化には密度汎関数法(DFT, B3LYP/6-31G\*)を用いた。得られた構造を初期構造として MD 計算を行い、4000 分子からなる CPP の非晶凝集体を作製した。5-10 Å 程度の近接した分子間においては herring-bone 様の配置をとる一方、10 Å 以上離れた場合は分子間においては、環が横並びになる傾向が見られた。さらに 25 Å 以上の長距離においては非晶状態にあることが示唆された。DFT を用いて非晶凝集体における分子間電荷移動積分および電荷移動に伴う再配列エネルギーを計算した。周辺分子から受ける静電相互作用も考慮しながら、Marcus 理論に従って電荷移動速度定数を算出し、動的 Monte Carlo 法による電荷輸送シミュレーションを行った。得られた正孔移動度を Fig. 2 に示す。CPP 環サイズの増大するにつれても増加し、[10]CPP は[4]CPP よりも 1-2 桁程度高い移動度を示した。

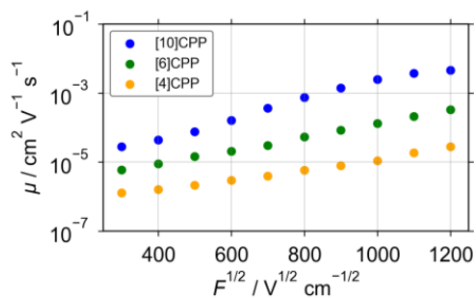


Figure 2. Calculated hole mobility  $\mu$  of [4], [6], and [10]CPP.  $F$  is applied electric field.

発表論文(謝辞あり)

[1] Gram-Scale Syntheses and Conductivities of [10]Cycloparaphenylene and Its Tetraalkoxy Derivatives. Eiichi Kayahara, Liansheng Sun, Hiroaki Onishi, Katsuaki Suzuki, Tatsuya Fukushima, Ayaka Sawada, Hironori Kaji, and Shigeru Yamago. *J. Phys. Chem. C*, 2017, **139** (51), pp 18480–18483

界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Surface Chemistry

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学領域 長谷川 健

研究成果概要

パーフルオロアルキル( $R_f$ )鎖は、鎖内で隣接する  $CF_2$  基間の立体反発に起因するねじれ構造をとるため[1, 2], 不斉炭素を持たないものの右・左巻き 2 つのねじれ構造をとりうるアトロプ異性を示す。 $R_f$ 鎖が凝集していない孤立鎖では、この 2 つの構造間のポテンシャル障壁は低いため[3], 溶液試料はラセミ混合で光学活性を示さないことがわかっている。Stratified Dipole-Arrays (SDA)理論[1, 2]によると、 $R_f$ 化合物はねじれ構造と大きな双極子支配の相互作用による自発的な二次元集合能を有し、集合体中では同じねじれ構造の  $R_f$ 鎖の集合が予想される。すなわち、溶液状態の  $R_f$ 化合物を自己集合させると、右巻きまたは左巻きのねじれ構造の  $R_f$ 鎖が集合したドメインの形成が予想され、これらは光学活性を示すはずである。本研究では、数 $\mu m$  程度の微小領域を制御できるラマン分光イメージング装置を用いたラマン光学活性 (ROA; Raman Optical Activity)解析を検討し、これまで測定例がほとんどなかった固体試料の ROA 測定に成功し、集合能が高い長鎖の  $R_f$ 化合物の集合体は、予想通り同じねじれ構造の  $R_f$ 鎖どうしが集合していることを明らかにした。

$R_f$ 化合物の ROA 解析を行う前に、不斉炭素を有するアラニンの 2 つの光学異性体(L 体および D 体)について、それぞれ水溶液から再結晶させて得た粒子を用いて ROA 解析を検討した。円偏光の崩れに注意しながら、試料表面からの照射深さを変えた ROA 測定を行ったところ、アラニンの L 体および D 体でシグナルが反転した ROA スペクトルが得られる条件を見出し、固体試料の ROA 解析に成功した。この最適化した測定条件で、自己集合能が高いことがわかっている  $R_f$ 鎖( $CF_3(CF_2)_9-$ )をもつ化合物[4]の ROA 解析を行った。 $R_f$ 化合物を有機溶媒に溶かし、ROA 解析が容易にできる数 mm のサイズになるまで、溶液をゆっくりと濃縮して得た複数の粒子について解析したところ、いずれも明瞭な ROA シグナルが観測された。これらの ROA シグナルは、量子化学計算により得た ROA スペクトルでほぼ再現できた。これは、それぞれの粒子がラセミ混合物の集合体ではなく、右・左巻きの存在量が偏っていることを意味し、SDA 理論が示唆する同じねじれ構造の  $R_f$ 鎖どうしが二次元集合する性質を裏付けることができた[5]。

参考文献

[1] T. Hasegawa, et al., *ChemPlusChem* **79**, 1421 (2014). [2] T. Hasegawa, *Chem. Rec.* **17**, 903 (2017). [3] G. D. Smith et al., *Macromolecules* **27**, 3166 (1994). [4] T. Shimoaka, et al., *J. Colloid Interf. Sci.* **483**, 353 (2016).

発表論文(謝辞なし)

[5] T. Shimoaka, M. Sonoyama, H. Amii, T. Takagi, T. Kanamori, and T. Hasegawa, *J. Phys. Chem. A* in press (2019).

EELS スペクトルの計算機シミュレーション  
Computer simulation of EEL Spectrum

京都大学 化学研究所 複合ナノ解析化学

根本 隆

研究成果概要

電子顕微鏡法と電子エネルギー損失分光法を組み合わせることにより、nm オーダーの微小領域の構造観察と同時に局所領域の元素分析や電子構造の解析が可能となる。また、電子源を単色化するモノクロメータを併用することで、低損失エネルギー領域に現れる価電子励起や振動励起の情報を得ることも可能となる。しかしながら、電子線を局所領域に照射するため、試料の損傷が生じ、本来の状態とは異なる状態のスペクトルが得られることも多い。特に有機物の結晶では試料損傷が起こりやすく、損傷の影響を受けやすい振動スペクトルや価電子スペクトルの解析は困難である。このような試料のスペクトルの取得にはいくつかの手法が提案されており、今回は非弾性散乱の非局在性を用いて、試料に直接電子線を照射せず、試料近傍を通過した電子の損失エネルギーを解析する aloof 測定法によって得られた振動励起のスペクトルの解析を試みた。

本年度は、主として TCNQ および Ag-TCNQ を対象として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに導入されている Materials Studio の DMol パッケージを使用して振動励起のシミュレーションを行い、実験で得られたピークの帰属を行った。

1. DMol ソフトウェアを用い、X 線構造解析の結果を元に、分子構造・結晶構造の構造最適化を行った。Ag-TCNQ については、TCNQ アニオンラジカルについて計算した。
2. 構造最適化後、DMol ソフトウェアを用いて単分子、及び結晶としての振動解析を行った。

単分子では TCNQ のシアノ基は等価であるが結晶中では周辺環境の違いにより非等価である。しかし、計算により得られた振動モードはわずかに異なるエネルギー値を示すものの、結果として単分子の計算結果とほぼ同じ値となっていた。実験によって得られた振動励起のピークは 165 meV, 270 meV にあらわれており、それぞれ、C-C, C=C と C≡N の振動モードと推定される。これらの値は計算値や赤外吸収スペクトル法による文献値と良い一致を示しており、aloof EELS 法により、振動スペクトルの測定ができていると判断できた。

### X線管からのスペクトル解析

X-ray spectrum analysis from X-ray tube

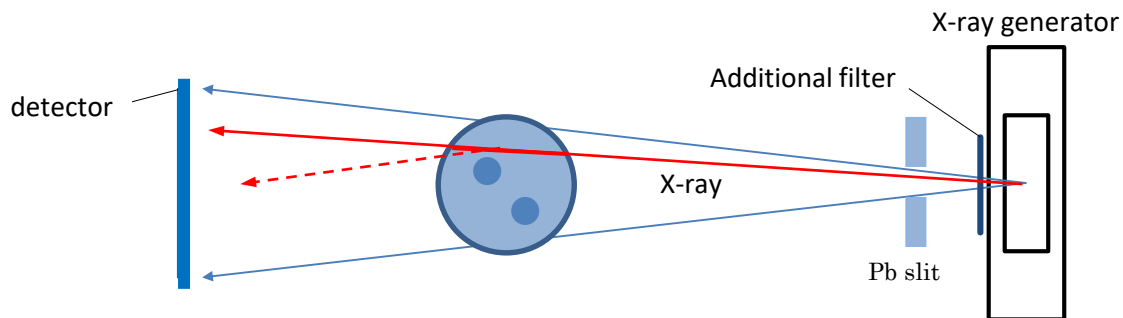
京都大学化学研究所 先端ビームナノ化学センター 原子分子構造研究領域 正岡聖

#### 背景と目的

被写体にX線管からのコーンビーム状のX線束を照射してCT撮影を行う場合、X線減衰定数の高い物質が被写体に含まれている場合、CT画像に影響を及ぼすことが分かっている。これをビームハードニング現象といい、これがアーチファクトの原因となる。ここでは、各撮影角度において、計算により散乱放射線を分離した投影画像を用いて再構成することにより、アーチファクトが抑えられたCT画像を得ることを目的とした計算を行った。

#### 検討内容

下図のようなジオメトリで、アルミロッドを内部に含む被写体を1回転させながら投影画像で得られるX線の数を計算した。被写体内部で散乱を起こす場合はX線の進行方向が変化するので、ディテクタで得られたX線が直接放射線であるか散乱放射線であるかが分かる。ディテクタで得られる輝度値からX線の進行方向が変化したことによる寄与分を差し引くことで散乱放射線の影響を除くことができる。比較のため散乱放射線を除かない場合と除いた場合について再構成を行い、この両者のCT画像を比較した。



#### 結果

上記結果を比較することにより、散乱線を取り除くことによって、アルミロッド間のアーチファクトが解消されており、その重要性を確認することができた。

効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成

Design and Synthesis of Metal Catalysts toward Efficient Organic Molecular Transformation

京都大学 化学研究所 元素科学国際研究センター 中村 正治

研究成果概要

芳香族塩化物とアルキル Grignard 反応剤との鉄触媒クロスカップリング反応は、生理活性物質や機能性材料等の簡便かつ持続可能な合成戦略として注目を集めている。本利用者は近年、フッ化鉄/SIPr (1,3-ビス(2,6-ジイソプロピルフェニル)イミダゾリジン-2-イリデン) 触媒系を用いることで、広範なアルキル Grignard 反応剤と芳香族塩化物から良好な収率で目的のカップリング体が得られることを見出した。特に、従来法では適用不可能であったメチル基や  $\text{Me}_3\text{SiCH}_2$  基などβ水素を持たないアルキル基を電子豊富で不活性な芳香族塩化物に導入することに初めて成功した。

本フッ化鉄/SIPr 触媒系は特有の反応性と選択性を示したことから、その反応機構にも興味を持たれる。そこで本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、フッ化鉄/SIPr 触媒系による芳香族塩化物とアルキル Grignard 反応剤とのクロスカップリング反応の反応機構解析を行った。まず対象原子の酸化数や隣接原子の種類、結合距離の情報が得られる溶液 XAS (X 線吸収分光法) および DFT 計算を用いることにより、反応溶液中で+II 価のアト錯体  $[\text{MgX}][\text{Fe}^{\text{II}}\text{F}_2(\text{SIPr})(\text{Me}/\text{alkyl})]$  ( $= 2$ ) が形成されていることが明らかにした。加えて DFT 計算の結果から、本反応はアト錯体を反応活性種とする  $\text{Fe}^{\text{II}}/\text{Fe}^{\text{IV}}$  触媒サイクルで進行し、フッ素配位子とマグネシウムカチオンが重要な役割を果たしていることが示唆された。すなわち、フッ化鉄に架橋配位しているルイス酸性のマグネシウムカチオンが芳香族塩化物の脱離能向上に寄与し、酸化的付加を促進していることが明らかとなった。ここで、フッ素配位子は鉄の過剰な還元反応を抑制するとともにアト錯体の生成と安定化に対して重要な役割を果たしていることが示唆された。本機構研究はフッ化鉄/SIPr 触媒系が従来の鉄触媒系と全く異なる機構を経由していることを明らかにしただけでなく、さらなる触媒開発・反応設計へと繋がる知見を与えた。尚、本研究の DFT 計算は京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを活用することで迅速かつ正確に行うことができた。

発表論文(謝辞なし)

R. Agata, H. Takaya, H. Matsuda, N. Nakatani, K. Takeuchi, T. Iwamoto, T. Hatakeyama, M. Nakamura, "Iron-Catalyzed Cross-Coupling of Aryl Chlorides with Alkyl Grignard Reagents: Synthetic scope and  $\text{Fe}^{\text{II}}/\text{Fe}^{\text{IV}}$  mechanism supported by X-ray absorption spectroscopy and density functional theory calculations", *Journal of Organometallic Chemistry* **2019**, 381–390.

平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

バイオインフォマティクス実習

Bioinformatics Training

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学

チョウ ルイシヤン

#### 研究成果概要

During the last five months, I have finished all 8 bioinformatics exercises in Professor Ogata's lab (uploaded before February 2019) by using the Supercomputer system in Kyoto university. In the future, I will continue to deal with exercises on python, 16S rRNA sequence analysis and so on to acquire more knowledge on bioinformatics.

平成 30 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

赤潮期間に沿岸生態システムの巨大ウイルスと藻類と細菌との相互関係分析  
Analysis of interaction among giant viruses, algae and bacteria in the costal ecosystem during  
bloom period

京都大学 化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学領域 夏駿

研究成果概要

This research used the super computer system in Institute for Chemical Research of Kyoto University and was cooperated with Graduate School of Agriculture of Kyoto University.

Uranouchi Bay is an enclosed, eutrophic bay in the south-west Japan, only with a narrow inlet to Tosa Bay. Temporal change from 1985 to 2014 showed that from early spring to late summer the water temperature was usually increasing and was decreasing from late summer to winter. There were harmful algae blooms happened from spring to the early autumn almost every year. Blooms usually happened from inner bay to inlet. The major harmful algae were belonging to *Chattonella* and *Karenia*, which cost large fishery damage in this area.

This research is to figure out that (1) what is the relationship among algae, bacteria and giant viruses in gulf ecosystem; (2) is there any succession between hosts and viruses in different stages of algae bloom; (3) what is the role playing by giant viruses during algae bloom period; (4) can giant virus species be applied to algae bloom monitoring, even forecasting. The sample collection will be performed by membranes with different pore sizes. And then in the laboratory, DNA extraction, amplification with different primers and MiSeq sequencing will be done. After getting the sequence data, (1) survey of seasonal variation among giant viruses, algae and bacteria; (2) community dynamics analysis; (3) network analysis based on quantitative relationship will be finished. The most important part is the network analysis, it will indicate which group is the center position, which connection among algae, bacteria, giant virus, and if there are any community successions in different periods of the bloom. With all the analysis done by the super computer, it shows a big diagram of interaction of coastal ecosystem in microbial scale.

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

平成 30 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

海洋巨大ウイルス宿主同定に関する研究  
Study on the host identification of giant viruses

京都大学 化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学領域 Lingjie Meng

研究成果概要

Megaviridae, also termed as the Giant virus, is a family of viruses proposed to infect mainly protists. Large genomes (280kb-1.51Mb) and particles (140nm-1 $\mu$ m) make them unique in nature. The evolutionary origin and the ecological function of Megaviridae are attractive but mysterious. With the development of sequencing and omics, it has been demonstrated Megaviridae is abundant and diverse in the oceans, the diversity of which is three orders magnitude greater than the number of their hosts to date. “What do they infect?” is a challenge faced with us.

In regard to hosts identification of giant viruses, I make use of the SuperComputer System of Institute for Chemical Research, Kyoto University. Mainly, I focus on the Megaviridae, as well as other NCLDV and their eukaryotic host candidates from TARA oceans data *in silico*. In this project, I need to use various software and packages to do deal with short reads sequences, to alignment the different sequences and reconstruct phylogenetic trees, and to conduct the co-occurrence analyses.

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)



生物情報ネットワークの解析と制御  
Analysis and Control of Biological Information Networks

京都大学化学研究所数理生物情報研究領域 阿久津 達也

研究成果概要

生物情報ネットワークの解析について、ブーリアンネットワーク(BN)とスケールフリーネットワークという数理モデルを主対象にこれまでの研究を継続・発展させた。

BNは遺伝子ネットワークの離散数理モデルである。今年度はBNを与えられた初期状態から目標状態まで制御するのに必要な頂点(ドライバー頂点)の個数について研究を行った[1]。特に、目標所帯を定常状態(アトラクター)に限定し、かつ、最初に1回の制御を与える場合におけるドライバー頂点数の理論解析を行った。各アトラクターに至る状態が一樣に分布するという仮定のもとで、ドライバー頂点数と離散数学でよく知られた概念である「クーポン収集家問題」との関連性を見出した。その結果、頂点数を $N$ 、アトラクター数を $M$ として、平均で $O(\log M + \log N)$ 個のドライバー頂点があれば十分であることを見出した。この結果は、制御対象をアトラクターに限定することにより効率よく制御できることを示唆するものとなった。また、以前から行っていた確率BNに対する例からのネットワーク構造とブール関数の正確な同定可能性についても研究を進め、ニューラルネットワークの離散モデルの一つである閾値BNにおいて、同定可能なクラスと不可能なクラスを特徴づけた[2]。

スケールフリーネットワークは次数分布がべき乗則にほぼ従うネットワークのことで、多くの生物情報ネットワークがこの性質を持つとされている。このスケールフリーネットワークに関して、我々が近年行ってきた最小支配集合(MDS)を用いたネットワーク制御手法・理論を、複数のネットワークの同時制御に対応するように拡張した[3]。このモデルのもとでドライバー頂点数の理論解析を行うとともに、公開ネットワークデータを用いたデータ解析を行い、選択されたドライバー頂点が生物学的に重要なものが多いことなどを示した。

発表論文(謝辞なし)

- [1] W. Hou, P. Ruan, W-K. Ching and T. Akutsu, On the number of driver nodes for controlling a Boolean network when the targets are restricted to attractors, *Journal of Theoretical Biology*, 463, 1-11, 2019.
- [2] A. A. Melkman, X. Cheng, W-K. Ching and T. Akutsu, Identifying a probabilistic Boolean threshold network from samples, *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 29(4), 869-881, 2018.
- [3] J. C. Nacher, M. Ishitsuka, S. Miyazaki and T. Akutsu, Finding and analysing the minimum set of driver nodes required to control multilayer networks, *Scientific Reports*, 9(1), 576, 2019.

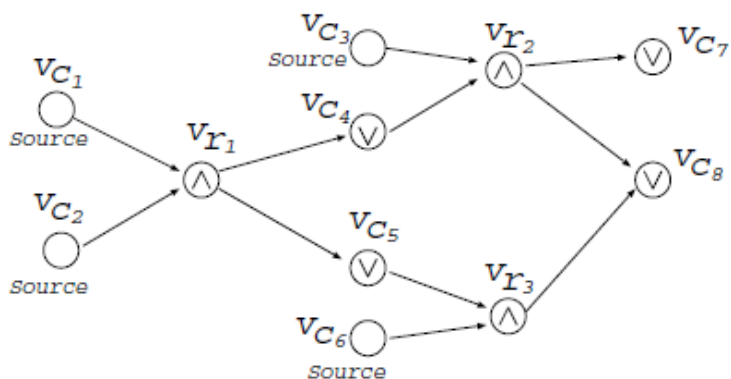
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発

Developing control methods for biological networks on mathematical models

京都大学化学研究所数理生物情報 田村 武幸

研究成果概要

細胞内には様々な化合物が存在し、互いに化学反応を繰り返すことにより生命活動が維持される。これらの化合物と反応の関係は代謝ネットワークにより表現される。この時、反応の触媒として機能するのが、遺伝子から作られた酵素と呼ばれるタンパク質である。代謝ネットワークも下図のようなブーリアンモデルで記述することが可能である。 $v_r$ は反応、 $v_c$ は化合物を表すノードである。例えば反応  $r_1$  は化合物  $c_1$  と  $c_2$  から化合物  $c_4$  と  $c_5$  を生成する。よって反応  $r_1$  が起こるための条件は  $c_1 \wedge c_2$  と表せる。一方、化合物  $c_8$  は反応  $r_2$  と  $r_3$  から生成されるので、化合物  $c_8$  の生成条件は  $r_2 \vee r_3$  と表せる。このように代謝ネットワークは反応を  $\wedge$ 、化合物を  $\vee$  のノードで表現した否定を含まない二部グラフで表現できる。



ブーリアンモデルの代謝ネットワークにおいては各ノードに0か1が割り当てられる。化合物に1が割り当てられれば、その化合物は生成可能あるいは存在するというを意味し、0が割り当てられれば、その化合物は生成不可能あるいは存在しないということの意味する。一方で反応に1が割り当てられれば、その反応はおこることができることを意味し、0が割り当てられれば、その反応はおこることができないことを意味する。

本研究では、ブーリアンモデルのみならず流束均衡モデルでも、ネットワークを制御する手法の計算を行った。

平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

次世代シーケンシングデータの解析  
Analysis of next-generation sequencing data

京都大学 化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 数理生物情報研究領域 森 智弥

研究成果概要

本年度は具体的な計算機実験を行っていない。今後、大量の次世代シーケンスデータ解析の必要が生じた場合に、改めて利用する予定である。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

該当なし

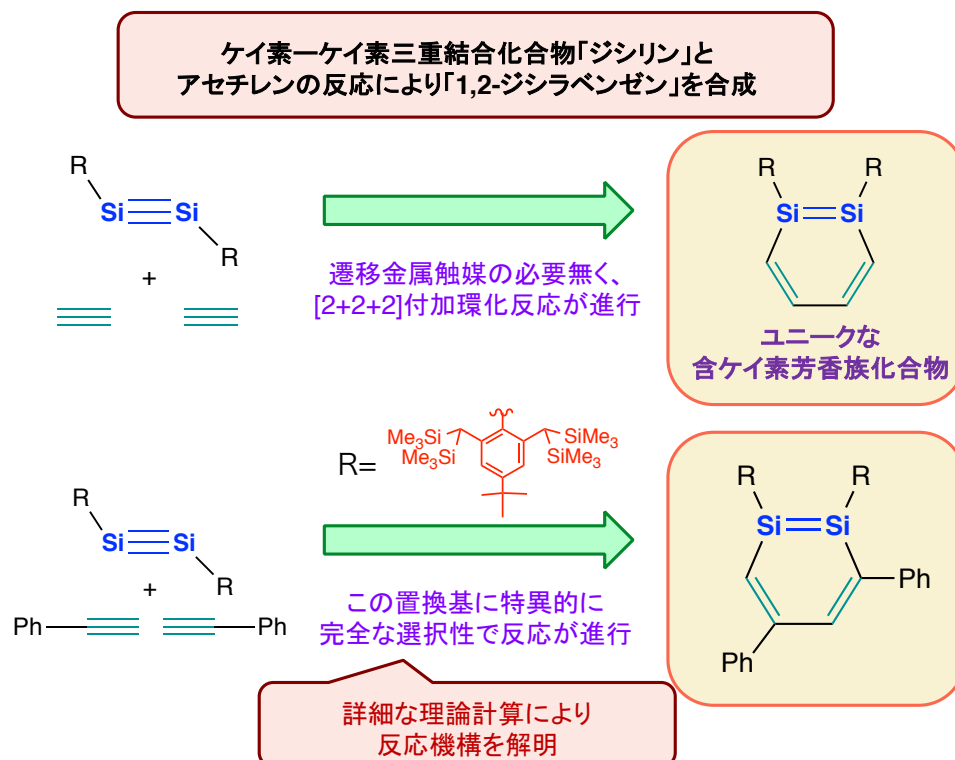
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Element Compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 郭 晶東

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期14族元素であるケイ素を二つ含む 1,2-ジシラベンゼンについて、その生成機構を明らかとした。かさ高い置換基である Tbb 基 (2,6-[CH(SiMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]-4-*t*-Bu-phenyl)) を有するケイ素-ケイ素三重結合化合物とフェニルアセチレンとの反応により、3,5-ジフェニル-1,2-ジシラベンゼンが選択的に得られることが実験的に分かっている。そこでまず、Gaussian 09 プログラムを用い、反応経路計算を行った。B3PW91-D3(BJ)/3-21G\* の計算レベルにて、構造最適化を行い、B3PW91-D3(BJ)/lanl2dz+d for Si, 6-31G(d) for C,Hレベルにて振動数計算およびIRC計算を行い反応経路を確かめた。その結果、1,2-ジシラシクロブタジエンを鍵中間体とする反応経路を明らかとし、高い選択性を合理的に説明できる結果をえることができた。



発表論文(謝辞あり): Sugahara, T.; Guo, J.-D.; Hashizume, D.; Sasamori, T.; Nagase, S.; Tokitoh, N. *Dalton Trans.* **2018**, 47, 13318-13322.

発表論文(謝辞なし): 特になし

化学生命科学研究領域の研究報告

Research Achievement of the Laboratory of Chemical Life Science

京都大学化学研究所化学生命科学研究領域 緒方博之

研究成果概要

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、巨大ウイルスおよびウイルスゲノムの解析・関連ツール開発を行うと同時に、微生物生態学関連のバイオインフォマティクス研究を行った。

具体的には、(1)東京理科大との共同による巨大ウイルス・メドゥーサウイルスのゲノム解析(吉川元貴他)、トランスクリプトーム解析(吉田亘騎)、(2)生物炭素ポンプを駆動する真核ウイルスの同定(Roman Blanc-Mathieu、金子博人他)、(3)メガウイルス科ウイルスの多様性及び生物地理・環境動態の解析(三原知子他、李岩沢他、Florian Prodinger 他)、(4)北極圏における巨大ウイルスの生物地理(遠藤寿、夏駿)、(5)NCLDV の生物地理(遠藤寿、孟令傑)、(6)ウイルス新種発見ツールの開発(黒西愛)、(7)農学研究科との共同研究による、海洋ウイルスの局所的生産・日周変動の解析(吉田天士他)、(8)ウイルスーホストデータベースの開発(山本留美子他)、(9)アメーバを利用した巨大ウイルスの単離。ウイルス関連以外の研究では、(10)近畿大学との共同により、ガンキリンが腸内細菌叢に及ぼす影響の評価(西山拓輝他)、(11)腸内細菌叢のネットワーク解析(加藤恭崇他)、(12)KO の予測ツールの開発(荒巻拓哉他)、(13)珪藻、パルマ叢のゲノム解析(Roman Blanc-Mathieu 他)を行った。

発表論文(謝辞あり)

1. Yoshikawa G, Blanc-Mathieu R., Song C., Kayama Y., Mochizuki T., Murata K., Ogata H., Takemura M. Medusavirus, a novel large DNA virus discovered from hot spring water. *J. Virol.* doi: 10.1128/JVI.02130-18. (2019).
2. Inoue M., Nakamoto I., Omae K., Oguro T., Ogata H., Yoshida T., Sako Y. Structural and phylogenetic diversity of anaerobic carbon-monoxide dehydrogenases. *Front. Microbiol.* 9, 3353 (2019).
3. Li Y., Hingamp P., Watai H., Endo H., Yoshida T., Ogata H. Degenerate PCR primers to reveal the diversity of giant viruses in coastal waters. *Viruses*, 10, 496 (2018).
4. Arai W., Taniguchi T., Goto S., Moriya Y., Uehara H., Takemoto K., Ogata H., Takami H. MAPLE 2.3.0: an improved system for evaluating the functionomes of genomes and metagenomes. *Biosci. Biotechnol. Biochem.*, 82, 1515-1517 (2018).
5. Mihara, T., Koyano, H., Hingamp, P., Grimsley, N., Goto, S., and Ogata H.; Taxon richness of “Megaviridae” exceeds those of Bacteria and Archaea in the ocean. *Microbes Environ.*,

33, 162-171 (2018).

6. Yoshida, T., Nishimura, Y., Watai, H., Haruki, N., Morimoto, D., Kaneko, H., Honda, T., Yamamoto, K., Hingamp, P., Sako, Y., Goto, S., and Ogata H.; Locality and diel cycling of viral production revealed by a 24 h time course cross-omics analysis in a coastal region of Japan. *ISME J.*, 12, 1287-1295, doi:10.1038/s41396-018-0052-x (2018).

発表論文(謝辞なし)

7. Caputi L., Carradec Q., Eveillard D., et al.; Community-level responses to iron availability in open ocean planktonic ecosystems. *Global Biogeochem. Cycles* (2019)
8. Roux S., Adriaenssens E.M., Dutilh B.E., et al.; Minimum Information about Uncultivated Virus Genomes (MIUViG): a community consensus on standards and best practices for describing genome sequences from uncultivated viruses. *Nat. Biotechnol.* 37, 29–37 (2019).
9. Piredda R., Claverie J.-M., Decelle J., et al.; Diatom diversity through HTS-metabarcoding in coastal European seas. *Sci. Rep.*, 8, 18059 (2018).
10. Endo H., Ogata H., Suzuki K.; Contrasting biogeography and diversity patterns between diatoms and haptophytes in the central Pacific Ocean. *Sci. Rep.*, 8, 10916 (2018).
11. Ogata H. Habitat Alterations by Viruses: Strategies by Tupanviruses and Others. *Microbes Environ*, 33, 117-119 (2018).

海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究

Research in evolution and ecology of marine planktonic communities

Chemical Life Science Laboratory, Institute for Chemical Research, Kyoto University  
Blanc-Mathieu Romain

研究成果概要

My current projects are as follow:

1. Assessing the diversity and deciphering the roles of marine eukaryotic viruses in epipelagic oceans using environmental genomics and contextual data.
2. Understanding the evolutionary history of large nucleocytoplasmic DNA viruses via genomic analysis of in-lab isolated viruses.
3. Study of standing genomic variation in the phytoplankton *ri ar a la vi* : what mechanisms shape this variation and how this variation channels future evolutionary changes?
4. Understand the processes that led to functional diversification of their phosphatidylinositol phosphate 5-kinases in core eudicotyledons.

To conduct these research projects I make use of the SuperComputer System of Institute for Chemical Research, Kyoto University. I am using various software to reconstruct phylogenies (phylobayes, RaXML, ete3 package), to assemble genomes (Spades and ABySS), to trim and map short read sequences (trimmomatic, bowtie, bwa), to perform sequence alignment and manipulation (Diamonds, Blast, Seqtk, Emboss) and to run my own scripts for parsing and downstream analysis.

発表論文(謝辞あり)

Yoshikawa G., Blanc-Mathieu R., Song C., Kayama Y., Mochizuki T., Murata K., Ogata H., Takemura M. Medusavirus, a novel large DNA virus discovered from hot spring water. *J. Virol.* doi: 10.1128/JVI.02130-18. (2019).

Yoshikawa G, Askora A, Blanc-Mathieu R, Kawasaki T, Li Y, Nakano M, Ogata H, and Yamada T., Xanthomonas citri jumbo phage XacN1 exhibits a wide host range and high complement of tRNA genes. *Sci. Rep.* **8**, 4486 (2018)

海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究  
Biogeography of eukaryotic plankton and giant viruses across the global ocean

京都大学 化学研究所附属バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学研究領域  
遠藤 寿

研究成果概要

本研究では、日本沿岸域および全球海洋調査で得られたゲノムデータから、巨大核細胞質 DNA ウイルス(NCLDV)の全球的な分布と多様性を解明するため、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し解析を行った。

近年の研究により、NCLDV が海洋に普遍的かつ豊富に存在することが明らかになったが、その多様性については正確な定量がなされてこなかった。本研究では、新たに設計した 82 のプライマーセットを用いることで、NCLDV の中でも海洋で特に優占するメガウイルス科の定量を試みた。その結果、沿岸海水数リットル中に 5,000 を超えるメガウイルス科の OTU が存在することが示された[1]。

大規模な海洋調査 *Tara Oceans Expedition* で得られたメタゲノムデータを解析することで、NCLDV の海洋生物地理区分の推定を行った。結果、NCLDV の群集構造は熱帯から亜寒帯にかけてほぼ一様なのに対し、極域(特に北極域)において他海域と著しく異なることが示された。また、その群集変化は種単位で生じており、北極域群集の 17%以上が同海域の固有種で構成されることが示唆された。今後、NCLDV 群集の変遷を環境勾配と宿主群集変化の両面から精査し、亜極域に生物地理学的フロントが形成された要因を特定する。

さらに、渦鞭毛藻類 *Heterocapsa circularisquama* に感染する二本鎖 DNA ウイルス(HcDNAV)の全ゲノム配列を決定するため、スーパーコンピュータシステムを用いてゲノムシーケンスデータのアセンブリと遺伝子予測、およびホモロジー検索を行った。

発表論文(謝辞あり)

- [1]. Li, Y., Hingamp, P., Watai, H., Endo, H., Yoshida, T., & Ogata, H. (2018). Degenerate PCR Primers to Reveal the Diversity of Giant Viruses in Coastal Waters. *Viruses*, 10(9), 496.

発表論文(謝辞なし)

- [2]. Yoshida, K., Endo, H., Lawrenz, E., Isada, T., Hooker, S. B., Prášil, O., & Suzuki, K. (2018). Community composition and photophysiology of phytoplankton assemblages in coastal Oyashio waters of the western North Pacific during early spring. *Estuar, Coast. Shelf Sci.* 212, 80–94.



- [3]. Endo, H., Ogata, H., & Suzuki, K. (2018). Contrasting biogeography and diversity patterns between diatoms and haptophytes in the central Pacific Ocean. *Sci. Rep.*, 8(1), 10916.
- [4]. Xia, X., Cheung, S., Endo, H., Suzuki, K., & Liu, H. (2019). Latitudinal and Vertical Variation of *Synechococcus* Assemblage Composition Along 170° W Transect From the South Pacific to the Arctic Ocean. *Microb. Ecol*, 1–10.

巨大ウイルスゲノムの解析  
Genome analysis of giant viruses

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター化学生命科学研究領域 吉川 元貴

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、アcantアメーバに感染する新規巨大ウイルス、メドゥーサウイルスのゲノム解析を行った。

メドゥーサウイルスは約 38 万塩基対の直鎖状二本鎖 DNA ゲノムを有していることが明らかになった。ゲノム中に 443 個のタンパク質遺伝子をコードすることが予測され、その 61% がデータベースに類似した遺伝子がない新規遺伝子であることが判明した。また、数個の遺伝子にはイントロン様配列が含まれていることが明らかになった。メドゥーサウイルスは核細胞質性大型 DNA ウイルス (Nucleocytoplasmic Large DNA Virus: NCLDV) に共通して保存されている遺伝子群 (コア遺伝子) のうち 15 個を保持することから、NCLDV と共通祖先を持つと推定された。一方で、分子系統解析の結果、既知のウイルスグループと進化的に極めて遠い関係であることが明らかとなり、新規の科を形成することが示唆された。メドゥーサウイルスが保有する遺伝子に関する興味深い特徴として、真核生物ヒストン遺伝子と相同性の高い遺伝子を全セット (H1, H2A, H2B, H3, H4) 持つことが判明した。真核生物と同様に 5 種類全てのヒストン遺伝子を持つことが明らかとなったウイルスはメドゥーサウイルスが初めてである。分子系統解析の結果、これらのヒストン遺伝子はその進化の枝が、真核生物の系統樹の根 (root) の部分から派生しており、その起源が真核生物の共通祖先よりも古いことが明らかになった。さらに、メドゥーサウイルスの DNA ポリメラーゼ遺伝子は真核生物の DNA ポリメラーゼ と極めて近縁であり、同様の進化的関係が推測された。これらの結果は、真核生物の先祖がヒストン遺伝子や DNA ポリメラーゼ遺伝子などを古代のウイルスから獲得した可能性を示唆している。また、アcantアメーバとメドゥーサウイルスのゲノム比較により、進化の過程で数多くの遺伝子交換が行われていることが明らかになり、自然宿主がアcantアメーバであることが示唆された。

発表論文 (謝辞あり)

- [1] Yoshikawa G., Blanc-Mathieu R., Song C., Kayama Y., Mochizuki T., Murata K., Ogata H., and Takemura M., Medusavirus, a novel large DNA virus discovered from hot spring water, *Journal of virology*, JVI.02130-18 (2019).

発表論文 (謝辞なし)

なし。

炎症性腸疾患における腸内微生物叢のメタゲノム解析

Metagenomic analyses of intestinal microbiota affected by inflammatory bowel disease

京都大学 化学研究所 化学生命科学研究領域

西山 拓輝

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、腸内微生物叢のメタゲノムの解析を実施した。具体的には、(1) 近畿大学の櫻井俊治博士等との共同研究において癌タンパク質であるガンキリンの遺伝子ノックアウトが炎症性腸疾患モデルマウスの腸内細菌叢の群集構造に及ぼす影響について細菌性 16S rRNA 遺伝子解析により調査を行い、(2) Nantes 大学の Samuel Chaffron 博士等との共同で実施した予備研究において IBDMDB ([www.ibdmdb.org](http://www.ibdmdb.org)) から取得した炎症性腸疾患患者と健常者の腸内微生物群集の全メタゲノム配列から metagenome-assembled genomes (MAG) を構築した。

本研究において、次世代シーケンサーから得られた塩基配列からの低品質領域やプライマー配列の除去に Trimmomatic や Cutadapt 等のツールを使用した。これらの配列に対し、細菌性 16S rRNA 遺伝子の解析では QIIME 等のツールを用いて操作的分類群解析を実施し、全メタゲノム解析では IDBA-UD や BinSanity 等のツールを用いて MAG を構築した。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

該当なし

配列類似性に基づいたウイルスゲノム分類法の開発

Development of viral genome classification method based on sequence similarity

京都大学化学研究所 化学生命科学研究領域 黒西 愛

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、配列類似性に基づいたウイルスゲノム分類法の開発を行った。

配列解析技術の進展によって、生体あるいは環境からウイルスの完全長ゲノム配列が高速かつ容易に検出・決定できるようになった。その結果、配列情報のみが得られているウイルスが増加しており、ウイルスゲノム配列からウイルスを正確に分類する必要性が高まっている。同じ種のメンバーである 2 つのウイルスゲノム間の配列類似度は種によって変動するが、種によって異なるゲノム類似度閾値(適応的閾値)を用いたゲノム自動分類法はこれまで開発されていなかった。そこで、Virus-Host DB<sup>1</sup> に登録されているウイルスゲノム配列を用いて、新規ウイルスゲノム配列を適応的閾値に基づいて正確に分類する手法を開発した。

Virus-Host DB(2018 年 12 月版)に含まれるウイルスのうち、ゲノム配列が 2 つ以上登録されている分類群のゲノム配列を配列解析ツールである Mash<sup>2</sup> を用いて比較し、各分類群の配列類似度閾値を学習した。学習した適応的閾値を基に既知ウイルスゲノム配列の分類予測を行い、実際のウイルス分類と比較した。

適応的閾値を採用した分類方法は単純な方法よりも高い適合率でゲノム配列を分類することができた。データベースに含まれていない種のゲノム配列を分類した場合、適応的閾値によって高い精度でそれが新種であることを判定出来た。今後さらに多くのウイルスゲノム配列が公開データベースに蓄積されていくと考えられる。これにより閾値計算の元となる配列データと閾値の決定できる分類群が増加し、新規ウイルスゲノム配列の分類精度をより向上できることが期待できる。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

なし

参考文献

1. Mihara T, Nishimura Y, Shimizu Y, et al. Linking virus genomes with host taxonomy. *Viruses*. 2016;8(3):66.
2. Ondov BD, Treangen TJ, Melsted P, et al. Mash: Fast genome and metagenome distance estimation using MinHash. *Genome Biol*. 2016;17(1):132-016-0997-x.

平成 30 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

メガウイルス科の DNA ポリメラーゼ遺伝子を標的とするアンプリコン解析

Amplicon analysis of Megaviridae DNA polymerase gene

京都大学 化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学領域 李岩沢

#### 研究成果概要

To gauge the diversity of the Megaviridae family at the population level, members of the Ogata laboratory and their collaborators designed a set of 82 pairs of degenerated primers (referred to as MEGAPRIMER), targeting DNA polymerase genes (polBs) of Megaviridae. As the target regions of 82 pairs of primers on polB were not exactly the same at their extremities, their meta-barcode data were incompatible with previous meta-barcode processing pipelines. To appropriately process the meta-barcode data from MEGAPRIMER,

I designed a bioinformatics pipeline named Megaviridae Amplicon Processing System (MAPS), which was a set of scripts to automatically process meta-barcode raw reads in parallel processing. MAPS was designed to be able to trim meta-barcodes so that the user can retain only the common regions among reads that were amplified with different primers.

To conduct this research project I make use of the SuperComputer System of Institute for Chemical Research, Kyoto University. I am using the free software such as FLASH, Trimmomatic and MAFFT for developing the MAPS. PBS system on SuperComputer System was also used in the process management of MAPS.

By analyzing sequence data from environmental DNA meta-barcoding of 5 water samples from various aquatic environments with MAPS, 220-5662 non-singleton operational taxonomic units (OTUs) of Megaviridae at 97% nucleotide sequence identity were identified from individual samples. Most of reads (88.6%) were belonging to OTUs which contained reads from more than one sample. This observation suggests a relatively wide habitat and niche for individual viruses of Megaviridae and their transport between distant geographic locations.

発表論文(謝辞あり)

Li Y, Hingamp P, Watai H, Endo H, Yoshida T, Ogata H. 2018. Degenerate PCR Primers to Reveal the Diversity of Giant Viruses in Coastal Waters. *Viruses* 10:496

発表論文(謝辞なし)

該当なし

KEGG Orthology に関する研究  
Research about KEGG Orthology

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学領域 荒巻 拓哉

研究成果概要

KEGG Orthology (KO) は、遺伝子を機能と配列類似性を元に分類した遺伝子機能データベースで、各 KO の ID (K 番号) と遺伝子を対応させることで機能アノテーションを行える。機能未知のアミノ酸配列に KO を割り当てるツールとしては、現在 KAAS、BlastKOALA、GhostKOALA の 3 つが存在する。

本研究では既存のツールに代わる新たな手法として、KO データベースの配列をプロファイル HMM 化した KOfam データベースを構築し、隠れマルコフモデル (HMM) による配列検索を用いた遺伝子機能予測法を開発した。またこの予測法に必要な、ある配列がある KO に含まれるかの判定基準となる類似度スコアの閾値を KO ごとに設定する方法を開発した。具体的には、KO 配列の 3 分の 2 で作成したプロファイル HMM を用いて、残りの 3 分の 1 の配列および他 KO の配列を検索することで、同じ KO の配列のみをよく判別できる類似度スコアの閾値を探索するという方法である。

KOfam データベースによる遺伝子機能予測法の予測精度および計算時間を KAAS、BlastKOALA、GhostKOALA と比較したところ、計算時間の面で各ツールよりそれぞれ 1.9～3.4 倍、68～87 倍、1.05～1.7 倍の高速だった。また予測精度でも KAAS を上回り、BlastKOALA、GhostKOALA と同等の予測精度を示した。

開発した KOfam データベースおよびそれを用いた遺伝子機能予測ツールは、GenomeNet (<https://www.genome.jp/>) で公開する予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年は共になし。

海洋巨大ウイルスとその宿主の多様性解析について

Diversity analysis of giant marine viruses and their hosts.

京都大学化学研究所附属バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学研究領域

Florian Proding

研究成果概要

My research focuses around diversity analysis of megaviridae in sea water samples of Osaka and Uranouchi bay. Usually, the diversity analysis of megaviridae involves metagenomics[1]–[3], however recently a primer base method was published with promising results[4]. I have been improving the referenced method and generated datasets using the so called MEGAPRIMERS, a set of 82 primers which target the megaviridae polymerase B gene. The generated data is stored on the supercomputer. Additionally, I use the supercomputer to analyze MEGAPRIMER sequencing datasets using MAPS[4] and 18S rRNA sequencing data with qiime2[5] and I utilize python 3 and R scripts for data manipulation and plotting.

References

- [1] W. H. Wilson *et al*, “Genomic exploration of individual giant ocean viruses,” *ISME J*, vol. 11, no. 8, pp. 1736–1745, 2017.
- [2] T. Mihara, H. Koyano, P. Hingamp, N. Grimsley, S. Goto, and H. Ogata, “Taxon Richness of ‘Megaviridae’ Exceeds those of Bacteria and Archaea in the Ocean,” *ISME J*, vol. 33, no. 2, pp. 162–171, 2018.
- [3] P. Hingamp *et al*, “Exploring nucleo-cytoplasmic large DNA viruses in Tara Oceans microbial metagenomes,” *ISME J*, vol. 7, no. 9, pp. 1678–1695, Sep. 2013.
- [4] Y. Li *et al*, “Degenerate PCR Primers to Reveal the Diversity of Giant Viruses in Coastal Waters,” *ISME J*, vol. 10, no. 9, p. 496, Sep. 2018.
- [5] J. G. Caporaso *et al*, “QIIME allows analysis of high-throughput community sequencing data,” *Nature Methods*, vol. 7, no. 5, p. 335, May 2010.

共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析  
Analysis of human gut microbiome using co-occurrence network

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター化学生命科学領域 加藤恭崇

研究成果概要

本研究では、健常者と患者の腸内細菌叢を分かち特徴を明らかにすることを目的とし、健常者と患者の腸内細菌叢を比較した複数のデータセットを用いることで、細菌種の同定を行い、同定した細菌種の共存関係を数学的モデルにより解析した。数学モデルには共起ネットワークを用いた。共起ネットワークの特徴量を調べる際にはグラフ理論に基づく複数のネットワーク指標を用いた。私は、本研究を進めるに当たり、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、必要な計算処理を行った。

本研究の結果、疾患のネットワーク変動は疾患毎に多様である事を確認した。このことは疾患毎に腸内細菌叢のディスバイオシスは異なり、腸内細菌叢をターゲットとする治療は疾患毎に多様になり得ることを示唆している。しかし、ネットワーク指標の1つである、平均クラスター係数は疾患間で共通の変動を示した。このことより、私は健常者と患者を分かちネットワークの特徴として、「健常者には存在し、患者では失われる3つの細菌の共存関係」を見出した。そして、これを健康トライアングルと定義した。健康トライアングルに關与する細菌の多くは短鎖脂肪酸を産生する特徴を有していた。このことより、実験系での解析は必要であるが、確認した健康トライアングルは健康維持に重要な役割を担っている可能性が考えられる。

今後は他のネットワーク指標を用いることで、さらに多様にネットワークを特徴づけていきたいと考えている。

発表論文（謝辞あり）

発表論文（謝辞なし）

本年度は共になし。



海洋微生物生態系における種間相互作用の研究  
Analysis of interspecific interactions in marine microbial ecology

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学領域 金子博人

研究成果概要

本年度私は、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、生物炭素ポンプを駆動する海洋ウイルスの探索を行った。

生物炭素ポンプは、地球規模の炭素循環を形成する経路のひとつである。この経路では、大気中の二酸化炭素が光合成によって有機炭素に変換された後に、その有機炭素が深海に沈降する粒子に変換されることにより、炭素が大気中から深海へと輸送される。どの生物がどのように生物炭素ポンプを駆動しているかを知ることは、地球規模の気候変動を評価する観点から非常に重要である。とりわけ、海洋ウイルスと生物炭素ポンプの関係は、いくつかの実験や理論から予想されているが、未だその全体像は不明である。私は、海洋ウイルスの中でも核細胞質性大型 DNA ウイルス (NCLDV) に着目し、生物炭素ポンプとの関係を地球規模のメタゲノムデータを利用して調査した。

具体的には、タラ号海洋探査プロジェクトで得られた地球の海洋全体を網羅した海洋メタゲノムを使用して、スーパーコンピュータを用いた解析を行った。その結果、NCLDV の存在量プロファイルのみから、炭素移出フラックスの分散の 50%弱を説明できることを明らかにした。このことは、NCLDV のいくつかの系統が生物炭素ポンプの駆動に関係していることを強く示唆している。さらに、NCLDV が生物炭素ポンプに貢献するメカニズムとして、宿主の凝集を促すことが考えられるが、この宿主の凝集の情報を海洋メタバーコードから抽出する新手法も考案し、その有効性をスーパーコンピュータによる解析により確認した。本手法は、生物炭素ポンプとウイルス感染の関係のメカニズムを理解するために今後利用できるものと考えられる。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

本年度は共になし。

巨大ウイルスの分離  
Isolation of large DNA viruses

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター化学生命科学 吉田亘騎

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、巨大ウイルスの RNA-seq データを用いたトランスクリプトーム解析を行った。具体的には RNA-seq により得られた配列をゲノムにツールを用いてマッピングを行い、ウイルスのカプシドを構成する Major capsid protein 遺伝子をコードする転写産物のイントロン領域を検出することで翻訳領域を推定した。こうして推定された遺伝子配列は以前に推定された配列よりも他の種との相同性が高く、またタンパク質質量が実験により推定された結果と近いことから、より真の配列に近いことが示唆された。またその他の注釈付けされた遺伝子群の発現量の時間変化について解析を行っている。

発表論文(謝辞あり)

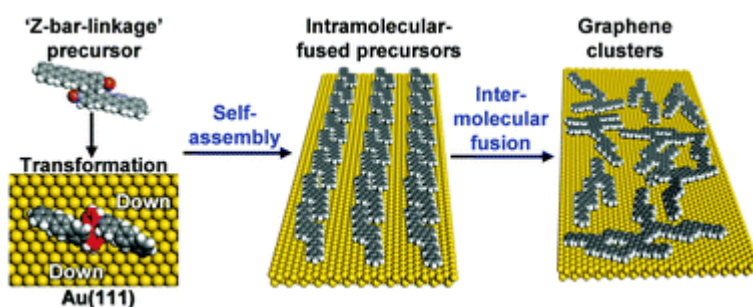
発表論文(謝辞なし)

ナノ炭素材料の理論的研究  
Theoretical study of nanocarbon materials

京都大学 エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門  
分子ナノ工学研究分野 小島崇寛

ナノ炭素細線物質であるグラフェンナノリボン(GNR)は、分子幅・炭素骨格に依存した物性を有し、優れた電子・磁気特性を示す次世代型の高機能材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御して GNR を作り分ける合成法として、我々は 2 ゴン気相成長法(2Z-CVD 法)を開発した。2Z-CVD 法により GNR を高効率合成することでボトムアップ型 GNR 薄膜の単離が可能となり、実験的な物性計測に成功している。

また、我々は新規に開発した Z 型前駆体分子を用いることでアセン型 GNR の表面合成に成功している。[1] 高選択的に進行した Z 型分子の表面重合反応のメカニズムについて、表面分子種の構造を計算機シミュレーションにより考察を行うと、面不斉が発現する表面キラリティーに加え、反応活性なラジカル中心の存在する Z 型の蝶つがいの 2 つのベンゼン環に高さ方向の非対称を有する構造が最安定構造として得られた。高さ非対称性の発現により、“鍵と鍵穴”構造を自発的に形成し同種のみ選択的する自己組織化表面重合の機構を明らかにした。さらに Z 型分子の枝長を伸ばした分子を設計し CVD を行うと、GNR は得られず、Z 型分子のアレイが観測された。この理由を明らかにするため、計算を行った結果、Z 型分子の Au(111)上の吸着構造が異なることが明らかとなり、この吸着構造の違いが反応経路の違いとなったことを明らかにした。[2]



Ref.

[1] Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons,  
H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *ACS Nano*, **2017**, *11*, 57-63.

発表論文(謝辞あり)

[2] Z. Xu, T. Kojima, W. Wang, K. Kaushik, A. Saliniemi, T. Nakae, H. Sakaguchi, *ACS Nano*, **2018**, *2*, 775.

SSE に伴う海面地殻変動の推定

An estimation of seafloor crustal deformation with SSE

京都大学理学研究科地球惑星科学専攻 地球物理学分野 伊藤喜宏研究室 井上智裕

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、海面気圧、風速を駆動力した地球物理学モデルを全球で計算した。その計算による出力を用いて、海底での圧力値に変換し、それを地殻変動でない成分である非潮汐成分として、海底圧力計に記録される水圧記録から、取り除くことができた。しかし、依然として水圧記録に含まれる地殻変動成分でないノイズが大きいため、地殻変動を精度よく求めることは難しい。そこで、これからは出力された非潮汐成分を係数補正を行うことで、さらなる精度向上に試みる。

発表論文(謝辞なし)

1. Tomohiro Inoue, Tomoya Muramoto, Daisuke Inazu, Yoshihiro Ito, Ryota Hino, Kazuaki Ohta, Syuichi Suzuki, ヒクランギ沈み込み帯における海底圧力計の解析, 日本地震学会 地震学夏の学校 2018, Shizuoka, Japan, 2018/9/5-2018/9/6
2. Tomohiro Inoue, Tomoya Muramoto, Daisuke Inazu, Yoshihiro Ito, Ryota Hino, Kazuaki Ohta, Syuichi Suzuki, Analysis of Ocean Bottom Pressure in Hikurangi subduction zone, The work shop on slow earthquake 2018, Fukuoka, Japan, 2018/9/21-2018/9/23. 英語:ポスター
3. Tomohiro Inoue, Tomoya Muramoto, Daisuke Inazu, Yoshihiro Ito, Ryota Hino, Kazuaki Ohta, Syuichi Suzuki, Detection of seafloor crustal deformation from ocean bottom pressure data using amplitude correction of non-tidal components, American Geophysics Union 2018 Fall Meeting, WashingtonD.C., Washington, USA, 2018/12/10-2018/12/14. 英語:ポスター
4. Tomohiro Inoue, Tomoya Muramoto, Daisuke Inazu, Yoshihiro Ito, Ryota Hino, Kazuaki Ohta, Syuichi Suzuki, ヒクランギ沈み込み帯における海底圧力計の解析, 防災研講演会 2019, 2019/02/19-2019/02/20. 日本語:ポスター

平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発  
Development of cyclic polyamides as the specific G-quadruplex DNA probes in oncogenes

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 朝光 世煌

#### 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、がんや遺伝子疾患との関連が示されている DNA 高次構造、グアニン四重鎖構造(G4)とそのリガンドとの相互作用の特性を計算科学的アプローチにより検討した。その結果、Discovery studio のドッキングプログラム(cDOCKER)によって、実験データを支持する重要なデータを得ることに成功した。今回の分子モデリング解析の計算は研究室保有の local server を使用して実施したが、今後はスーパーコンピュータシステムの計算サーバーを使用することによって、関連する新規 DNA 結合性タンパク質と G4 DNA との相互作用、並びに前述したリガンドとの関係性を検討する。

発表論文(謝辞あり)

なし.

発表論文(謝辞なし)

Asamitsu S., Obata S., Phan A. T., Hashiya K., Bando T., Sugiyama H.

Simultaneous Binding of Hybrid Molecules Constructed with Dual DNA-Binding Components to a G-Quadruplex and Its Proximal Duplex.

*Chem. Eur. J.*, 24, 4428-4435 (2018)

量子化学計算と固体 NMR を用いた新規無機物質の構造解析

Structure analysis of novel inorganic materials by using quantum chemical computing and solid-state NMR

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子構造化学研究室  
野田 泰斗

研究成果概要

構成原子数の精密に揃った貨幣金属クラスターはエネルギー材料や触媒としての応用に有望な新規物質として注目を集めている。これらのクラスターは有機配位子により保護され、大きさは金属状態であるナノ粒子よりも小さい。合金化や配位子交換により新機能付加を目的とした研究が行われており、交換による原子配置の変化を知ることが強く求められている。固体高分解能 NMR は結晶・アモルファスを問わず原子レベルで物質の局所構造の情報を引き出すことができる一方で、新規無機物質に対しては信号の帰属が困難である。そこで本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し DFT 計算を行うことで信号の帰属を目指した。対象物質は最も基本的な銀クラスターである  $\text{Ag}_{25}(\text{SPhMe}_2)_{18}$  (Ph = phenyl 基、Me = methyl 基) で、正二十面体を構成する  $\text{Ag}_{13}$  コアを 6 個の SR-Ag-SR-Ag-SR 配位子の両端が各頂点に結合することで有機分子が保護している。クラスターを構成する原子数は 385 個と非常に多く分子軌道を用いた計算は困難であると予想されることから、並進対称性を活用し低計算コストで固体の NMR 化学シフトを精度よく DFT 計算できるようにした Gauge Including Projected Augmented Wave (GIPAW) 法を用いた。

まず最適な cut-off エネルギーの検討を行ったところ、700 eV 程度で十分なことが判明した。次に構造最適化を試みた。 $\text{Ag}_{25}(\text{SPhMe}_2)_{18}$  は硬い  $\text{Ag}_{13}$  コアと柔らかい有機配位子から成る複合材料であるため構造最適化が難しく、コアと配位子を交互に固定化してそれぞれを異なる条件で最適化することで計算コストの低減を試みた。以上の検討を行い、NMR の化学シフト計算を行った。また、実験でも相関 NMR を用いて信号の帰属を試みた。両者を比較した結果、計算値は実験から予想される帰属と定性的には一致した。一方で、化学シフト異方性の大きさや軸性パラメータは定量的に一致しなかった。これは数値計算に相対論効果を取り入れていないなどの効果によるものと考えられるが、今回行った検討に要したコストを鑑みると、相対論効果を取り入れた計算はコストが膨れ上がり非現実的であると予想される。

本研究は第 64 回 固体 NMR・材料フォーラムにてポスター発表(謝辞あり)を行ったが論文投稿まで至っていない。今後は実験データを充実させて論文を投稿する予定である。

## 分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析

## Design and theoretical analysis of molecular conducting and magnetic materials

京都大学大学院理学研究科化学専攻 分子性材料分科 中野 義明

## 研究成果概要

これまで、 $6h$  対称性のコロネンを用いた絶縁性中性錯体から導電性陽イオンラジカル塩までの電荷移動(CT)錯体を作製し、その動的・電子的機能を明らかにしてきた。本研究では、コロネンよりも対称性の低い、 $2v$  対称性のベンゾ[*g*]ペリレン(bper)を用いたTCNQとのCT錯体や $\text{Mo}_6\text{O}_{19}^{2-}$ との陽イオンラジカル塩を作製し、その構造と物性を調べた。

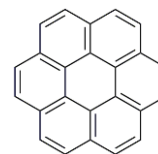
単結晶については、(bper)(TCNQ) (**1**)は溶媒蒸発法、(bper) $_2$ (TCNQ) (**2**)は共昇華法、(bper) $_3$ (TCNQ) (**3**)は溶媒蒸発法、(bper) $_3\text{Mo}_6\text{O}_{19}$  (**4**)は電解法により作製した。**1** では、bper と TCNQ が交互に積層することにより積層カラムを形成していた。**2** では、結晶学的に独立な bper 分子が2分子存在し(bper-2A, bper-2B)、bper-2A と TCNQ が交互積層カラムを形成し、bper-2B がその交互積層カラムを分離するように積層カラムの間に存在していた。**3** では、bper 分子1個(bper-3A)、bper 半分(bper-3B)、TCNQ 半分が結晶学的に独立で、bper-3B が2つの配向で乱れていた。bper-3A と TCNQ は、[bper-3A, bper-3A, TCNQ]を繰り返し単位とする積層カラムを形成し、bper-3B がその積層カラムを分離するように積層カラムの間に存在していた。**4** は、初めての bper の陽イオンラジカル塩であり、bper 分子1個(bper-4A)、bper 半分(bper-4B)、 $\text{Mo}_6\text{O}_{19}^{2-}$  半分が結晶学的に独立で、bper-4B が2つの配向で乱れていた。この塩は[bper-4A, bper-4A, bper-4B]から成る分離積層カラムを形成しており、室温伝導度は $5 \times 10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$ であった。また活性化エネルギーは0.18 eVであり、同形の(coronene) $_3\text{Mo}_6\text{O}_{19}$  (0.04 eV)の4倍以上であった。bper-4A、bper-4B の結合長と DFT 法で計算した bper $^0$ 、bper $^{+}$ の結合長を比較することにより、bper-4Aの方がよりイオン化していることが示唆された。また、DFT 法によるバンド計算からも bper-4A、bper-4B の価数は+0.82、+0.37と見積もられ、不均一な電荷分布をしていることが分かった。

発表論文(謝辞あり)

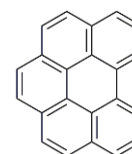
1. D. V. Konarev, A. V. Kuzmin, Y. Nakano, S. S. Khasanov, A. Otsuka, H. Yamochi, H. Kitagawa, R. N. Lyubovskaya, *Dalton Trans.*, 47, 4661-4671 (2018)
2. Y. Yoshida, S. Tango, K. Isomura, Y. Nakamura, H. Kishida, T. Koretsune, M. Sakata, Y. Nakano, H. Yamochi, G. Saito, *Mater. Chem. Front.*, 2, 1165-1174 (2018)

発表論文(謝辞なし)

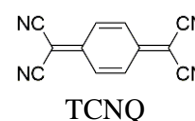
3. D. V. Konarev, S. S. Khasanov, Y. Nakano, A. F. Shestakov, M. Ishikawa, A. Otsuka, H. Yamochi, H. Kitagawa, R. N. Lyubovskaya, *Eur. J. Org. Chem.*, 2018, 3410-3415 (2018)



コロネン



bper



TCNQ

生物活性化合物の創製を指向した有機化学研究

Study on Organic Chemistry Directed toward Identification of Novel Bioactive Compounds

京都大学大学院薬学研究科ケモゲノミクス・薬品有機製造学分野 大野 浩章

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スフィンゴシンキナーゼ(SphK)阻害剤開発研究のためのドッキングシミュレーションを検討している。

SphK は細胞増殖に関与し、腫瘍細胞中での過剰発現が認められているため、抗癌剤の分子標的として注目されている。申請者らは、SphK に対する阻害活性を有することが知られている海洋天然物 jaspine B に着目し、構造展開を行っている。これまでに、申請者らは jaspine B のテトラヒドロフラン環上の置換基の立体異性体および位置異性体に関する検討を行ってきた。Jaspine B の全ての立体および位置異性体を分岐的に合成可能な方法論を確立し、分子中の 3 つの不斉中心および官能基の SphK 阻害活性に対する影響を精査した結果、4-*i* 体が最も高い阻害活性を示すことを明らかにした。また、jaspine B の側鎖アルキル鎖部分の構造展開も検討しており、様々な官能基を側鎖アルキル鎖部位に導入した誘導体を設計して、阻害活性を評価した結果、SphK の 2 つのアイソフォーム SphK1 および SphK2 のうち、SphK2 に対する選択的阻害活性を示す誘導体を複数見出している。現在、これらの結果を元に、jaspine B 誘導体と SphK とのドッキングシミュレーションを行い、詳細な相互作用の解析を検討している。今後、シミュレーション結果を利用して新たな阻害剤設計に取り組む予定である。

発表論文(謝辞なし)

Inuki, S.; Miyagawa, T.; Oishi, S.; Ohno, H. Introduction of a Polar Functional Group to the Lipid Tail of 4-*i*-Jaspine B Affects Sphingosine Kinase Isoform Selectivity. *arXiv preprint arXiv:1808.08668*, 2018, , 866–872.



平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価

Evaluation of Structure-Property Relationship of Epoxy Resin via Crosslinking Reaction

京都大学 工学研究科 機械理工学専攻 適応材料力学研究室 内藤 悠太

#### 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、エポキシ樹脂の架橋反応における構造変化と物性変化の関係を評価することを目的に、**Material studio** を活用した分子動力学法による架橋反応シミュレーション、および形成した構造に対する粘弾性特性などの力学特性を評価する手法の構築を検討している。

先進材料である炭素繊維強化プラスチックの成形性と力学特性については、炭素繊維だけでなく、マトリクス樹脂の影響を適切に把握することが求められている。一方で、マトリクス樹脂として一般に広く用いられるエポキシ樹脂は、用いられる主剤と硬化剤の種類や配合比、温度・圧力といったプロセス条件などによって、架橋反応やそれに伴う分子構造形成が変化するため、これらが成形中の挙動や最終的に発現する力学特性に影響を及ぼす。このような観点で、分子シミュレーションを利用して、エポキシ樹脂の特性変化を把握することを検討している。

本年度は、エポキシ樹脂の架橋反応シミュレーションの手法の確認と検討のみの実施であり、具体的な成果は現時点で得られていない。次年度以降については、継続して検討を進める予定である。

発表論文 該当なし

プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析  
 Analysis of local structures in plasma-damaged materials

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻 推進工学分野 吉川侑汰

研究成果概要

プラズマプロセス中に材料表面に生じる欠陥(プラズマ誘起欠陥)は、材料の電気特性変化や機械特性変化を誘発し、半導体デバイスの性能劣化や信頼性劣化に繋がる[1]。これら劣化の起源は、プラズマ誘起欠陥による材料中の電子状態変化であるが、その詳細はわかっていない。本研究では、密度汎関数理論[2]に基づく第一原理計算コード Quantum-Espresso[3]を用いて、プラズマからの原子侵入に起因する潜在欠陥形成による電子状態変化を解析した。実プロセスで用いられるガス種(Ar, Cl, Br など)を種々の材料(Si, Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, SiO<sub>2</sub>, BN など)中に挿入したときの電子状態変化を計算した。また、計算から予測される電気特性変化を実験的手法から検証した。Fig. 1 に、プラズマプロセス中に形成される潜在欠陥の一例として、絶縁体であるβ-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>にAr原子を一つ挿入した計算モデルを示す。カットオフエネルギーを200 Ryとし、PAW擬波動関数、PBE汎関数近似を用いて構造最適化を施した。Fig. 2に、計算から求めたβ-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>の電子状態密度(DOS)分布を示す。侵入原子によってバンドギャップ幅が狭まり、さらにバンドギャップ中に原子種に依存したエネルギー準位が出現した。伝導帯近くに形成されたエネルギー準位は、電子伝導のホッピング準位として振る舞い、電気特性変化を誘発すると考えられる。そこで、Arプラズマ曝露によるSi<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜のリーク電流変化を実験的手法から解析した。Fig. 3に電流-電圧特性の測定結果を示す。低電圧領域において、伝導帯近傍でのエネルギー準位形成に対応するリーク電流の増加が見られた。以上より、プラズマ誘起欠陥による材料物性劣化の詳細な理解・予測には、第一原理計算を用いた電子状態解析が有効と考えられる。今後、プラズマ誘起欠陥のさらなる理解に向け解析を進める予定である。

参考文献:[1] K. Eriguchi, *J. Phys. D* **50**, 333001 (2017). [2] W. Kohm and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, 1133 (1965). [3] P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).

発表論文(謝辞あり): Y. Yoshikawa et al., *Proc. Int. Symp. Dry Process*, Nagoya, 307 (2018).  
 発表論文(謝辞なし): Y. Yoshikawa and K. Eriguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 06JD04 (2018).

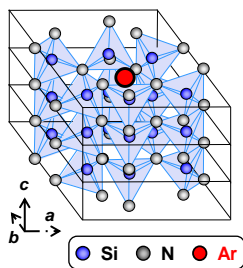


Fig. 1 Starting structure of β-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> with an Ar interstitial.

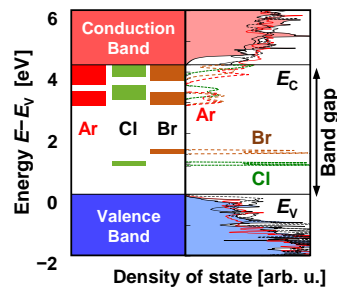


Fig. 2 DOS of β-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> in local damaged structures with Ar, Cl and Br interstitials.

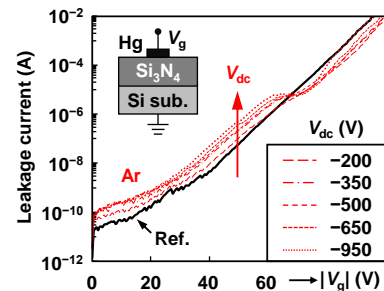


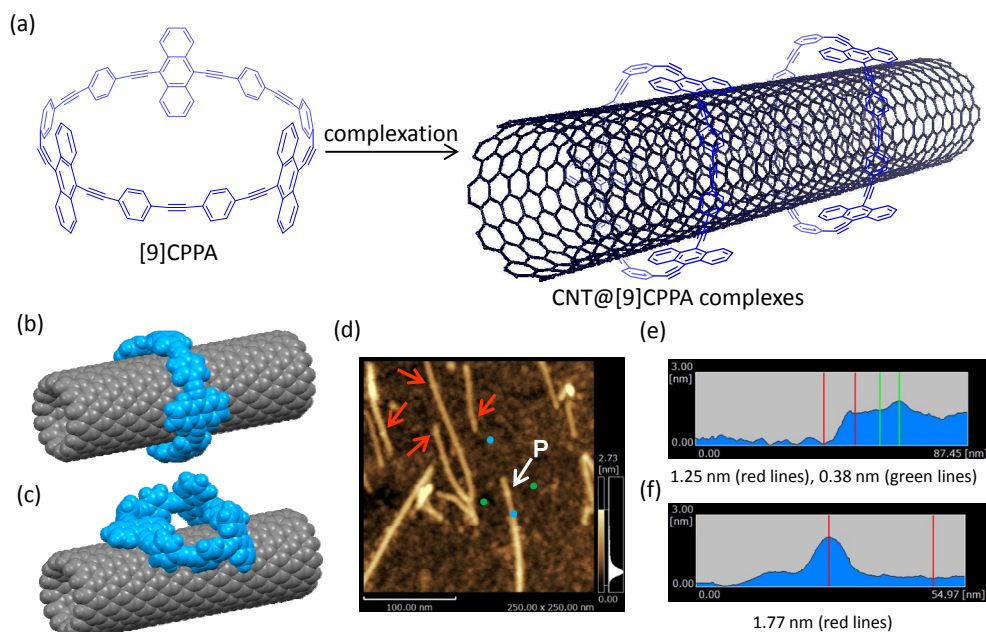
Fig. 3 *I*-*V* characteristics of Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> films exposed to Ar plasma.

カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用  
Interaction of Carbon Nanorings with Carbon Nanotubes

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 三木康嗣

研究成果概要

カーボンナノチューブ (CNT) は炭素クラスターとして光電変換素子、セラノスティック材料など様々な分野での応用が期待されている。化学修飾によりその機能を増大させることを目的に、パイ共役系を損傷しない超分子的な CNT の化学修飾が注目されている。本研究では、開発したカーボンナノリング[9]CPPA が  $\pi$ - $\pi$  相互作用により CNT と"tube-in-ring"型複合体を形成することを見出した (Figure 1a)。理論計算により、リング径とチューブ径が  $\pi$ - $\pi$  相互作用に適する組み合わせである場合、"tube-in-ring"型複合化が有利であると予想された (Figures 1b、1c)。[9]CPPA と直径 1.1~1.4 nm の CNT との複合体のラマン分光法や熱重量測定から "tube-in-ring"型複合体の形成が示唆された。また、透過型電子顕微鏡や原子間力顕微鏡から "tube-in-ring"型複合体の形成が確認された (Figures 1d-f)。



**Figure 1.** (a) CNT@CPPA complexes through “ring toss” method. (b) “Tube-in-ring” and (c) ring-on-tube” structures of CNT@CPPA complex of (14,0)CNT and [9]CPPA optimized with Forcite program and visualized by Mercury 3.6. Both terminals of CNT are capped with hydrogen atoms. (d) Representative SPM image of CNT@[9]CPPA. CNT@[9]CPPA were observed as bright spots pointed out by white and red arrows. Height profiles (at spot P) between two (e) blue and (f) green dots.

発表論文(謝辞あり)

K. Miki, K. Saiki, T. Umeyama, J. Baek, T. Noda, H. Imahori, Y. Sato, K. Suenaga, K. Ohe, *Small* **2018**, *14*, 1800720.

## 遷移金属触媒を用いた新規変換反応

## Development of Novel Transition-Metal Catalyzed Transformation

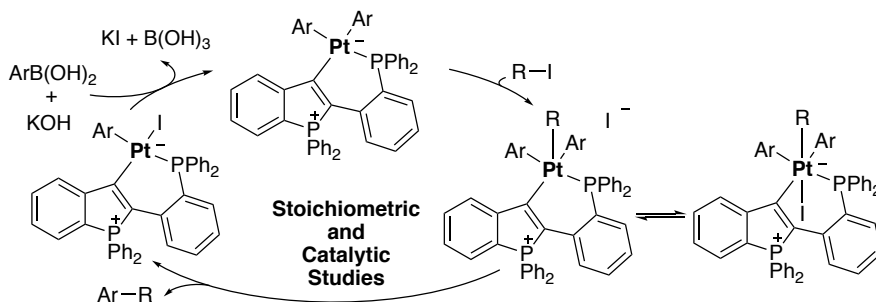
京都大学大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻 岡本 和紘

## 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、我々が最近見出した特異な双性イオン型構造を有する白金錯体の性質について DFT 計算を行った。

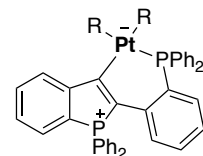
遷移金属錯体触媒の研究において、様々な炭素骨格を有する多座配位子が触媒の配位圏を規定するために開発されてきたが、配位子が自身の骨格変化を伴って新たな配位圏を構築する例はあまりない。我々はアルキン部位を有するビスホスフィン配位子を基盤とする遷移金属との錯形成について研究を行っており、白金を用いると、白金上に形式負電荷を有する双性イオン型白金(II)錯体が得られ、この錯体がクロスカップリング反応の触媒としてふるまうことを見出した (Scheme 1)。白金錯体ではパラジウムで通常見られる Pd(0⇌II) サイクルとは異なり、Pt(II⇌IV) サイクルでの酸化的付加・還元的脱離が進行することが知られているが、この原理を触媒反応へと応用した例は稀である。DFT 計算の結果、双性イオン型錯体では酸化的付加に深く関わる軌道である白金の  $5d_z^2$  軌道の寄与が最も大きい準位のエネルギーが上昇しており、これによる酸化的付加の加速効果が本触媒の利点の一つであると考えられる (Table 1)。

**Scheme 1.** Proposed catalytic cycle for a cross-coupling reaction with zwitterionic platinum catalysts.



**Table 1.** Parameters of calculated structures of zwitterionic complexes 1-3 and  $\text{Me}_2\text{Pt}(\text{dppe})$ .

complex	R	MO	$5d_z^2$ coefficient	energy (eV)
$\text{Me}_2\text{Pt}(\text{dppe})$		HOMO	0.183	-5.28
		HOMO-3	0.468	-6.02
<b>1</b>	Me	HOMO	0.597	-4.64
<b>2</b>	Ph	HOMO-2	0.547	-4.97
<b>3</b>	<i>t</i> BuCC	HOMO-4	0.720	-5.36



- 1** (R = Me)  
**2** (R = Ph)  
**3** (R = *t*-BuC≡C)

## 今後の研究計画

以上の結果をもとに学術誌への投稿準備を進め、次年度初頭には投稿する見通しである。

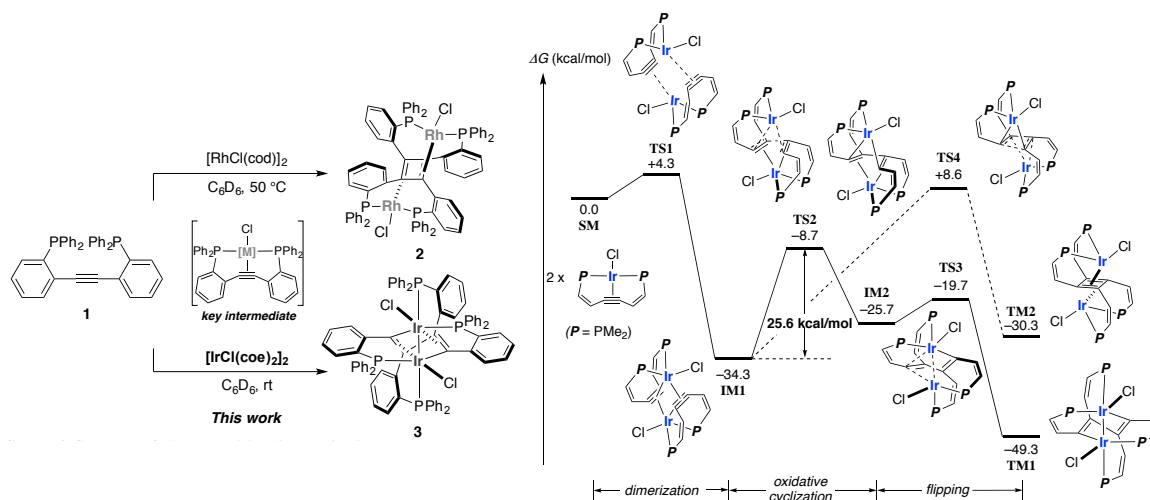
有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成  
Development of Novel Transition-Metal Catalyzed Transformation

京都大学大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻 岡本 和紘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、我々が最近見出した特異な二核構造を有するロジウムあるいはイリジウム錯体の形成機構について DFT 計算を行った。

多核錯体にはその構造中にある複数の金属中心の協働的作用によって、単核錯体にはない反応性が期待できる。一方、その合成手法の多くは既存の骨格を基に二核錯体を合成するテンプレート合成に限られており、新たな合成手法の開発が期待されている。我々は骨格内にアルキンを含むビスホスフィン配位子 **1** の後周期遷移金属との錯形成反応とその構造変化について研究しており、ロジウムあるいはイリジウムとの錯形成反応において、特異な骨格を有する二核錯体 **2, 3** が生成することを見出している。このように配位子内に反応点としてアルキンを導入することで、単核錯体を前駆体として、新たな炭素-炭素結合と新たな配位構造および金属-金属結合を同時に構築する手法を確立し、既存の方法では困難な複核構造の構築を達成している。本研究では、これらの錯形成挙動について、用いる金属種によって得られる錯体が異なる理由を調査した。DFT 計算の結果から、ロジウム、イリジウムいずれの場合もアルキンが配位した単核錯体の二量化を経て生成しており、二つの金属種の違いは、二量体からの反応性の違いに起因することを見出している。



今後の研究計画

以上の結果をまとめ、学術誌への投稿準備を進めているため次年度初頭には投稿できる見通しである。

## 光触媒・光電極による高効率水分解システムの開発

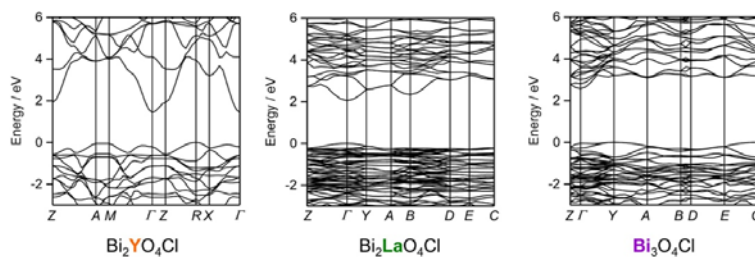
Fabrication of photocatalysts and photoanodes for water splitting under visible light irradiation

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻阿部研究室 東 正信

## 研究成果概要

我々はこれまでに、Sillén 系層状酸ハロゲン化物  $\text{ABiO}_2\text{X}$  (A: Pb, Sr, Ba, X: Cl, Br, I) において、Pb の導入がバンドギャップを大幅に狭小化し、優れた可視光応答性を発現できることを報告してきた。Pb 導入による可視光応答化は、 $\text{Pb}^{2+}$  の 6s 軌道と  $\text{O}^{2-}$  の 2p 軌道との相互作用によって、価電子帯上端を構成する O-2p 軌道が不安定化されることが主たる要因である。しかし、このバンドギャップ狭小化に不可欠な Pb は生体毒性があるため、Pb に頼らない層状酸ハロゲン化物の可視光応答化は重要な課題である。今回我々は、 $[\text{Bi}_2\text{MO}_4]$  層を有する Sillén 系化合物  $\text{Bi}_2\text{MO}_4\text{Cl}$  において、M サイトカチオンの種類によって結晶構造の歪みが増加する性質に着目し、Pb に依存しないバンド制御の可能性を検証するとともに、それらの可視光照射下における水分解活性を検討した。 $\text{Bi}_2\text{MO}_4\text{Cl}$  (M: Y, La, Bi) の XRD 測定の結果、 $\text{Bi}_2\text{YO}_4\text{Cl}$  は正方晶である一方で、 $\text{Bi}_2\text{LaO}_4\text{Cl}$  と  $\text{Bi}_3\text{O}_4\text{Cl}$  は単斜晶であり、前者と比べ後者では  $[\text{Bi}_2\text{MO}_4]$  層が歪んだ構造をとっていることが明らかとなった。光吸収端は、対称性の高い Y 置換体は、La, Bi 置換体と比べて約 80 nm 長波長側に位置した。解析した結晶構造を基に DFT 計算により推定した  $\text{Bi}_2\text{MO}_4\text{Cl}$  (M: Y, La, Bi) のバンド構造を見ると、Y 置換体は他の 2 つと比べバンドのエネルギー分散がかなり大きいことがわかる(図 1)。時間分解マイクロ波電導度測定において、 $\text{Bi}_2\text{YO}_4\text{Cl}$  は  $\text{Bi}_2\text{LaO}_4\text{Cl}$  および  $\text{Bi}_3\text{O}_4\text{Cl}$  と比べて 20 倍以上高い励起キャリアの電導度を示したことから、計算で示された広いバンド分散を実験的にも証明されたと考えている。すなわち、対称性の高い層構造では軌道の重なりが大きくなることで広いバンド分散が発現し、バンドギャップが狭小化したと結論付けられる。各置換体を用いて可視光照射下、 $\text{Fe}^{3+}$  を電子受容体とした水の酸化反応を行うと、 $\text{Bi}_2\text{YO}_4\text{Cl}$  のみ定常的に酸素を生成することが明らかとなった。

$\text{Bi}_2\text{YO}_4\text{Cl}$  は他の  $\text{Bi}_2\text{MO}_4\text{Cl}$  (M: La, Bi) と比較して、可視光吸収および励起キャリア特性の二つの側面で有利であり、結果として優れた光触媒特性が発現したと考えられる。

図 1.  $\text{Bi}_2\text{MO}_4\text{Cl}$  (M: Y, La, Bi) のバンド構造

発表論文(謝辞なし)

Suzuki, H.; Kunioku, H.; Higashi, M.; Tomita, O.; Kato, D.; Kageyama, H.; Abe, R., *Chem. Mater.* **2018**, *30*, 5862-5869.

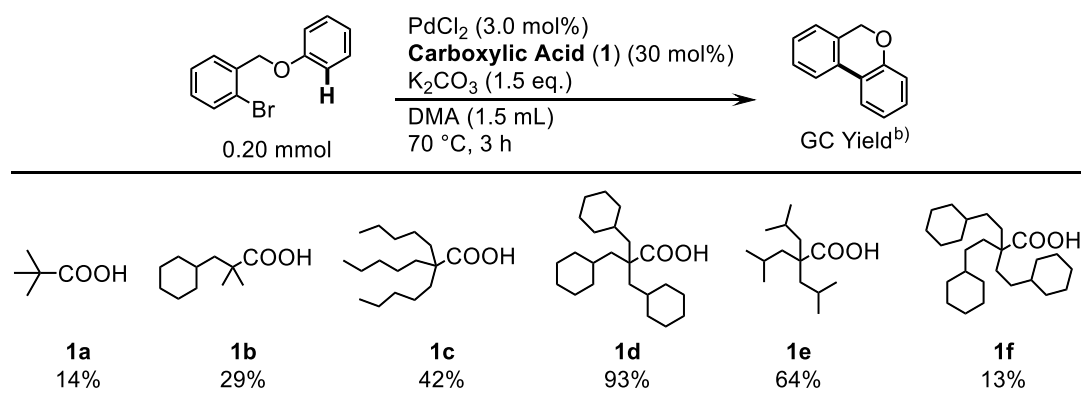
触媒有機化学に関する研究  
Studies on Catalytic Organic Chemistry

京都大学工学研究科物質エネルギー化学専攻 辻 康之

研究成果概要

パラジウム触媒による分子内 C(sp<sup>2</sup>)-H 結合アリール化反応をモデル反応として選択し、種々の α 位に 3 級アルキル基を有するカルボン酸を配位子として適用した(表 1)。, -ジメチルアセトアミド (DMA) 溶媒中、70 °C の条件で、ピバル酸 (**1a**) の添加では反応がほとんど進行しなかった。また、2 つのメチル基とかさ高い置換基を 1 つ有するカルボン酸 (**1b**) や長鎖のアルキル基を 3 つ有するカルボン酸 (**1c**) を用いた際も、低収率に留まった。これに対し、ピバル酸のメチル基をすべてシクロヘキシルメチル基に変更したトリ (シクロヘキシルメチル) 酢酸 (**1d**) は効果的であり、目的物を高収率で与えた。一方、**1d** に類似した構造を有するカルボン酸 **1e** や **1f** を用いた場合、収率は低下した。これらの結果より、カルボン酸 **1d** が C-H 結合活性化反応の触媒活性を向上させる最適な配位子であることが明らかになった。基質適用範囲を検討したところ、様々な 1,2-ジエンで目的の反応が進行することが分かった。アセタールを有するアレンや、塩素官能基を有するアレンに対しては良好な収率で目的物が得られた。

**Table 1.** Investigation of steric effect of carboxylic acid ligands on C-H arylation.<sup>a)</sup>



<sup>a)</sup> Reaction conditions: 2-bromobenzyl phenyl ether (0.20 mmol), PdCl<sub>2</sub> (0.0060 mmol, 3.0 mol%), carboxylic acid (0.060 mmol, 30 mol%), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (0.30 mmol, 1.5 equiv) in DMA (1.5 mL) at 70 °C for 3 h.

<sup>b)</sup> Determined by GC analysis using an internal standard method.

発表論文(謝辞なし)

1) Y. Tanji, N. Mitsutake, T. Fujihara, Y. Tsuji, *ng* *n* ., **57**, 10314-10317 (2018).

## 13 族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明

## Investigation of optical properties of organometallic complexes containing group 13 elements

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 伊藤 峻一郎

## 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、13 族元素を含有する金属錯体の光学特性について、量子化学計算を用いた解析を行ってきた。当研究室ではこれまでに、13 族元素であるホウ素やガリウムなどを中心元素とする種々の錯体を合成し、それらの吸収・発光特性に関する評価を行ってきた<sup>[1]</sup>。今回、それらの特性を評価するため、Gaussian 16 を用い、密度汎関数理論 (DFT) 計算並びに時間依存 (TD-)DFT 計算を行った。

対象とする分子は Fig. 1 に示したアルミニウム錯体 LAICl であり、真空中一分子を仮定した計算を行った。基底状態における構造最適化条件として、遠距離相互作用を考慮した CAM-B3LYP 汎関数を用い、基底関数として 6-31+G(d,p)を採用した。得られた基底状態における最適化構造を用い、種々の汎関数を用いた TD-DFT 計算を行った結果を Table 1 に示す。

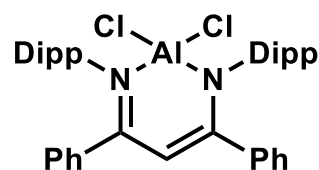


Fig. 1 Chemical structure of LAICl. (Dipp = 2,6-diisopropylphenyl).

この結果、経験的パラメータを含む M06 汎関数が実験値を最も精度よく再現することが明らかとなり、この系を評価するモデルとして最適な条件を見出すことができた。

Table 1. Results of the series of TD-DFT calculations

functional	basis set	$E_{S_0-S_1}$ / eV	$\lambda$ / nm	$f^b$
CAM-B3LYP	6-311++G(d,p)	3.76	329	0.5287
M06	6-311++G(d,p)	3.58	347	0.4033
M06-HF	6-311++G(d,p)	3.67	337	0.5191
MN15	6-311++G(d,p)	3.61	344	0.6967
$\omega$ B97X-D	6-311++G(d,p)	3.78	328	0.5313
Exp <sup>a</sup>		3.21	386	

<sup>a</sup> Determined from UV-vis absorption spectrum in toluene/2-methylpentane (99/1 v/v) solution ( $1 \times 10^{-5}$  M). <sup>b</sup> Oscillator strength.

発表論文 (謝辞あり)

特になし

発表論文 (謝辞なし)

[1] Chujo, Y. et. al. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 18131; *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 5564.



HOPG 基板上における分子配列のモデリング  
 Model study of molecular ordering on the HOPG surface

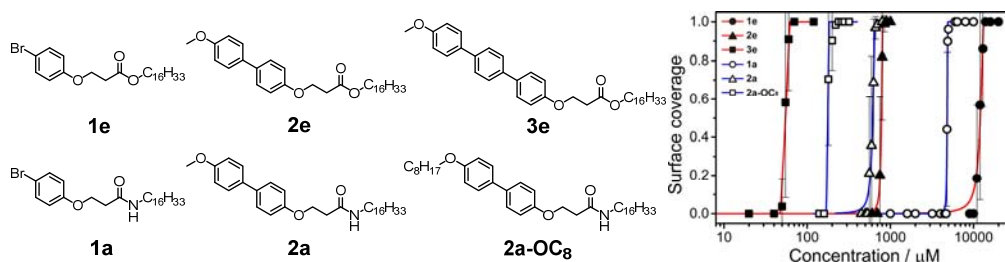
京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

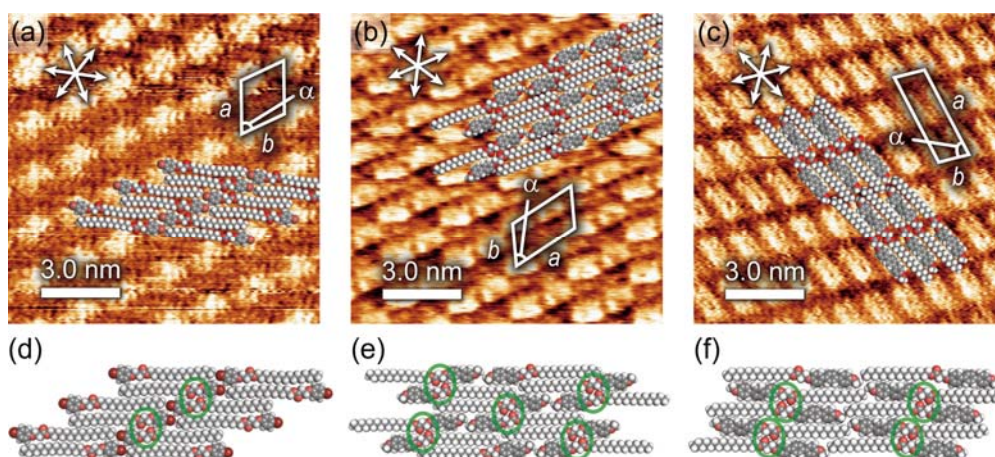
協同的な自己組織化プロセスを制御することで、外部刺激に対して高感度な応答を示す超分子システムの構築が可能となる。

本研究では、芳香環コア部や、コア部と長鎖アルキル基を繋ぐリンカー部位の分子構造が、二次元界面における核生成-伸長プロセスに与える影響について詳細な検討を行った (Figure 1)。その結果、水素結合をもたないエステル誘導体でも高い協同性を示すことが分かった。伸長プロセスのギブスエネルギー変化はコアが大きくなると大きくなることも分かった。

Materials Studio を用いた分子力学計算により、エステル誘導体の分子配列では、エステル同士の相互作用が見られた (Figure 2)。



**Figure 1.** (a) Chemical structures of compounds **1e–3e** bearing an ester group and **1a–2a-OC8** bearing an amide group. (b) Concentration dependence of surface coverage at the octanoic acid/HOPG interface.



**Figure 2.** High-resolution STM images and molecular models of the ordering of (a) **1e**, (b) **2e**, and (c) **3e** at the octanoic acid/HOPG interface. Molecular models of the orderings of (d) **1e**, (e) **2e**, and (f) **3e** simulated by MM/MD calculations.

発表論文 (謝辞なし)

1. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Lett.* **2019**, *48*, 253–256.

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、吸着工学や乾燥工学などの種々のプロセスに関連する物理化学的な諸問題を取り上げ、分子軌道法や分子動力学法などの計算機化学的手法を用いて検討を行うことを目的としている。今年度はアガロオリゴ糖の水和状態を分子動力学(MD)シミュレーションにより検討した。以下その概要を報告する。

糖鎖高分子であるアガロースは、寒天の主要成分であり、食品や電気泳動用支持体に用いられている。そのアガロースを低分子化して得られるアガロオリゴ糖は、抗炎症作用、発がん予防作用などの固有の性質が報告されており、機能性食品への応用が期待されるユニークなオリゴ糖である。本研究では、食品工学、生化学などで有用な基礎的知見を得ることを目的として、分子動力学(MD)計算を用いたアガロオリゴ糖の水和状態に関する研究を行った。特に、糖鎖の水和状態に及ぼす共存成分の影響の検討例として、KCl や NaCl のイオンが共存する場合の水和状態を調べた。

MD 計算には Amber 14 を用いた。糖残基数 6 のアガロオリゴ糖を取り上げ、糖鎖 1, 2 本、糖鎖の質量濃度 0.6, 1.8 wt%, KCl, NaCl の質量モル濃度 0, 0.19 mol/kg、の各場合について、NPT アンサンブル (1 atm, 25°C, 75°C) の MD 計算を実施した。なお糖鎖 2 本の系では、糖濃度 0.6, 1.8 wt% の各場合に糖鎖がそれぞれ 40 Å, 30 Å 離れて独立に水和した状態を初期配置とした。2 本の糖鎖の会合状態について、糖鎖間距離  $D$  [Å]、糖鎖同士がなす角度  $\theta$  [deg]、片方の糖鎖の一方の末端水素原子と他方の糖鎖の両末端水素原子までの距離  $d_1, d_2$  [Å]などを調べ、アガロオリゴ糖の動的挙動について検討した。

各条件における MD シミュレーションの結果から、2 本の糖鎖は共存イオンの有無に関わらず会合することがわかった。計算結果の一例として、糖鎖 2 本、糖濃度 1.8 wt%、25 °C、KCl 濃度 0.19 mol/kg の場合の  $\theta$  および  $d_1, d_2$  の経時変化の概要を述べる。この系の場合、糖鎖は初期配置から 20 ns 後に会合した。会合後の  $\theta$  の経時変化に着目すると、55 ns 付近と 160 ns 付近にて  $\theta$  の値が大きく変化した。これは、会合中の 2 本の糖鎖が 55 ns にて最初の向きから完全に反転し、160 ns で再び反転して元の向きに戻ったためである。この反転に伴い、 $d_1, d_2$  の値の大小は、 $\theta$  の変化と対応した時刻で入れ替わった。さらに、 $d_1, d_2$  のうち、大きい方の値に着目すると、55 ns から 160 ns では約 30 Å であるのに対し、160 ns 以降は約 20 Å であった。この変化を動画で調べたところ、前者は 2 本の糖鎖が比較的伸びた状態で会合しているのに対し、後者は比較的縮んだ状態で会合していた。以上、糖鎖は会合後でも互いの向きが反転するなど、数 ns から数十 ns の時間スケールで絶えず形状が変化していることがわかった。

ATR-FTIR 法を用いた高分子成形プロセスの品質管理法の開発

Development of monitoring technique for polymer processing processes using ATR-FTIR

京都大学 工学研究科 化学工学専攻 材料プロセス工学研究室 引間悠太

研究成果概要

フッ素ゴム(FKM)は耐熱性, 耐薬品性, 耐油性などに優れたゴム材料で, 化学プラントのシール材用途などに利用されている. FKM を所望の形状に成形するには, FKM に架橋剤, 架橋開始剤, 物性向上のためのフィラーを配合した原料を, 熱プレス成形等により加熱・賦形をしながら, 架橋反応を進行させ, 構造を固定化する. フィラーにはカーボンブラック(CB)や, 近年ではカーボンナノチューブ(CNT)が用いられ, 機械的, 熱的な物性改善に利用されているが, 架橋反応の進行に影響を及ぼすため, 架橋不良等の原因となる場合がある. しかし, 従来の加硫試験ではフィラーによる補強効果により架橋不良の有無を正確に評価することが難しかった. そこで我々は材料の化学構造変化を迅速簡便に評価できる ATR-FTIR 法を用いてその問題の解決に取り組んできた.

本研究を通して, 架橋剤である TAIC(図 1)のカルボニル基に由来する赤外吸収バンド幅の変化が架橋反応の進行と密接に関わっていることが明らかになった. この妥当性を検証するため, 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し, TAIC 分子のアリル基開裂前後でのカルボニル基吸収バンドの波数シフトを, 半経験的分子軌道法により計算した. その結果, アリル基の開裂に伴うカルボニル基吸収バンドのシフトが確認され, 実験結果との整合性が見られた.

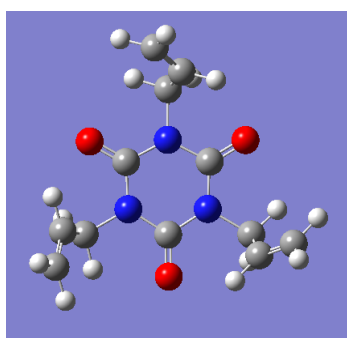


図 1 架橋剤分子の化学構造

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明

Elucidation of the Structures of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s

Exhibiting Solvent-dependent Helix Inversion

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 長田裕也

研究成果概要

主鎖にらせん構造を有する合成高分子は、不斉触媒や不斉光学材料への応用が期待され近年大きな注目を集めている。特に、主鎖らせん不斉を外部刺激によって反転させることのできる合成高分子は、キラリティスイッチング型材料の基本骨格として大きな注目が集まっているものの、不斉らせん構造反転のメカニズムについての知見は極めて限られていた。

我々のこれまでの研究において、光学活性側鎖に有するらせん高分子ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル) (以下 PQQ と略する) について、分子動力学計算による分子モデル構築を行った。計算には BIOVIA Materials Studio を用い、分子力場として COMPASS II を用いた。得られた分子モデルに基づいた小角中性子散乱パターンのシミュレーションと比較することで、右巻き／左巻き構造を持つ PQQ の構造の推定したところ、溶液中で PQQ が周囲との相互作用を持たないときには側鎖がコンパクトに縮まり左巻き構造をとり、適切な溶媒を用いることで側鎖が外側に引き出された場合には右巻き構造をとることが明らかとなった。<sup>1</sup>

本年度の研究では、溶媒依存性らせん反転を示す PQQ の構造とそのダイナミクスを明らかにすることを目的とし、BIOVIA Materials Studio を用いた分子動力学シミュレーションを行った。現在、得られたトラジェクトリについて溶液中での中性子準弾性散乱測定の結果と比較を行うことで、溶液中での PQQ 側鎖のダイナミクスについて検討を進めている。また、高分子主鎖の不斉らせん構造の量子化学計算に関する知見を活かし、面不斉光学活性化化合物の不斉光学特性についても検討し論文報告を行った。<sup>2</sup>

発表論文(謝辞あり)

- (1) Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Suginome, M.; Sato, S.; Sugiyama, M.; Porcar, L.; Martel, A.; Inoue, R.; Sato, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 2722-2726.
- (2) Kikuchi, K.; Nakamura, J.; Nagata, Y.; Tsuchida, H.; Kakuta, T.; Ogoshi, T.; Morisaki, Y. *Chem. Asian J.* **2019** (*in press*).

発表論文(謝辞なし)

- (3) Shimizu, Y.; Shoji, Y.; Hashizume, D.; Nagata, Y.; Fukushima, T. *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 12314-12317.
- (4) Nagata, Y.; Shimada, Y.; Nishikawa, T.; Takeda, R.; Uno, M.; Ogoshi, T.; Suginome, M. *Synlett* **2018**, *29*, 2167-2170.
- (5) Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Terao, K.; Hasegawa, H.; Suginome, M. *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* **2019**, *57*, 260-263.

計算化学的手法による有機物および無機物の熱物性・輸送特性予測

Investigation of thermal and transport properties of organic and inorganic compounds

京都大学工学研究科 機械理工学専攻 松本 充弘

研究成果概要

本研究は、量子論的效果を考慮した分子モデルに基づき、さまざまな物質の凝縮相の性質（相転移挙動、輸送現象など）を分子シミュレーションにより評価することを目的とする。昨年度来、いくつかの手法を予備的に検討した上で、密度汎関数 density functional 法と強結合 tight binding 近似に基づく DFTB+ パッケージを利用することとし、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムでの計算を進めている。年度当初は、同システム上の Materials Studio をフロントエンドとして各種ポリマー凝縮相の計算を行った。その後、半導体表面の chemical vapor deposition (CVD) 過程などを主なターゲットとするため、オープンソースである DFTB+ を単独で同システムにインストールし、計算条件に合わせてカスタマイズし、またツール類を作成しながら利用している。さまざまな条件下での計算を進めている途中であり、まだ成果をまとめるまでには至っていないが、例えば、シリコン結晶表面へのシランガス由来のラジカルの CVD の例（スナップショット）を図に示す。表面に衝突した  $\text{SiH}_3$  が

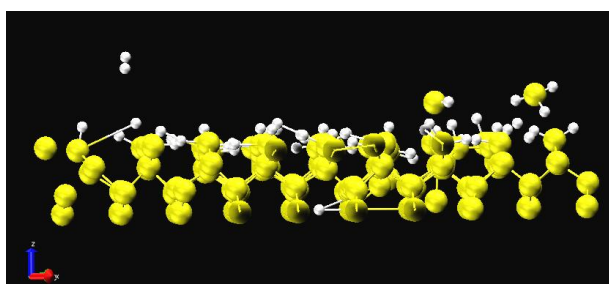


図 シリコン結晶表面への  $\text{SiH}_3$  ラジカルの衝突と反応の dftb+による計算結果の例。

結晶の Si と新たな結合を形成すると引き換えに、表面終端していた H 原子が  $\text{H}_2$  となって離脱する様子がわかる。

Tersoff モデルなどの経験的相互作用モデルを用いる従来の古典分子動力学シミュレーションでは、このような化学反応を伴う過程の解析は相互作用モデルに強く依存するため、各種条件の定量的な比較は困難であったが、DFTB などの手法を用いることでそれが可能となることが見込まれる。ただし、full ab initio 量子化学計算と比較すると、電子相関に経験的な汎関数を必要とするなど、完全に非経験的な手法ではないため、計算精度などの点についてさらに検討を行いながら、引き続き物性予測へのアプローチを進めていく予定である。

発表論文(謝辞あり)

現在執筆中

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

昨年度に引き続き、熔融 CsCl-AlCl<sub>3</sub> 二元系に着目して第一原理分子動力学法 ADMP (Atom-centered Density Matrix Propagation) によるイオン拡散のダイナミクスを検討した。

(8×CsAlCl<sub>4</sub>)を配置したユニットセルでの計算を行った。

GAUSSIAN09 を使い、汎関数 HSE06 (HSEh1PBE), 基底関数として Modified def2-SVP を使い、0.2 fs の time step での時間発展を計算し、温度設定を 700 K とした。

昨年度計算を行った、構成イオンの 1 ps 後の座標を初期座標とし、さらに 1 ps にわたるダイナミクスの計算を進めた。

FIG. 1 にイオン配置の一例を示す。

AlCl-AlCl<sub>3</sub> (A: alkaline metals) 熔融塩における、1:1 の組成付近での Al(III)イオンのとる錯体構造 (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)) において、A = Cs の場合の 1:1 組成を境とする AlCl<sub>4</sub><sup>-</sup> アニオン構造のみの構造と、二つの四面体 AlCl<sub>4</sub><sup>-</sup> アニオン構造が頂点共有で連なった Al<sub>2</sub>Cl<sub>7</sub><sup>-</sup> 構造を含む構造、両者が共存に加えて、AlCl<sub>4</sub><sup>-</sup> アニオンが多数配位した形での Cs<sup>+</sup> カチオンみられ、やや不均質な構造をとっている。AlCl<sub>4</sub><sup>-</sup> アニオン中の Al, Cs<sup>+</sup>とも相対的に動きは小さく、Cl<sup>-</sup>の動きは大きいため、頻繁に Cl<sup>-</sup>の交換が起きていることは変わらない。

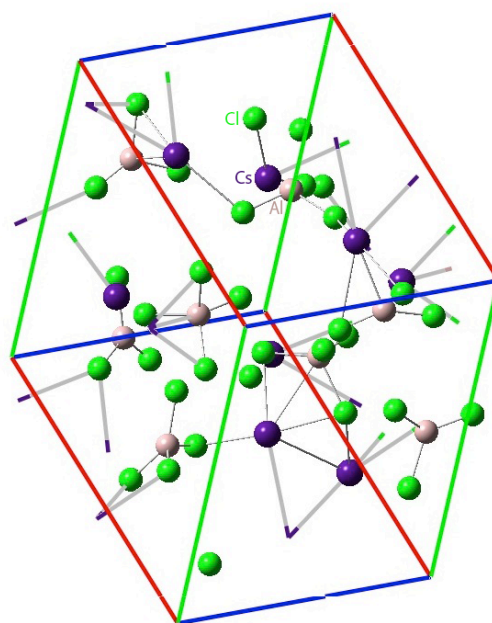


FIG. 1 Ionic configurations after 1.0 ps following another 1.0 ps of equilibration calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl<sub>3</sub> at 700 K

発表論文(謝辞あり、謝辞なし)

該当なし

軽金属・合金の力学特性  
Mechanical properties of light metals and alloys

京都大学大学院エネルギー科学研究科 馬淵守

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、マグネシウム(Mg)のねじれ粒界と刃状転位の相互作用の分子動力学シミュレーションを行った。

Mg は次世代の軽量金属構造材料として注目を集めているが、延性が低く加工性に乏しいという欠点がある。マグネシウムの延性向上に向けてこれまでに様々な研究がなされているが、添加元素の微量添加が特に有効であることが知られている。添加元素は転位と粒界の相互作用に大きく影響することが知られているが、Mg は六方細密充填構造を有しせん転位が運動しやすいことから、これまでせん転位を中心とした解析が行われてきた。しかし Mg では刃状転位が運動することも知られており、刃状転位と粒界との相互作用を解析することも重要である。そこで本研究では、分子動力学計算を用いて種々の添加元素を偏析させた Mg のねじれ粒界と刃状転位との相互作用を解析した。

本研究では母相に対しねじれ角度  $93.5^\circ$  の結晶粒からなる計算モデルを用いて解析を行った。セルサイズは  $8.9 \times 83.9 \times 19.8 \text{nm}$ 、原子数は 63 万原子とした。温度は 5K で計算を行った。母相の中心に刃状転位を導入し、バーガスベクトル方向にせん断応力を载荷することで刃状転位を粒界に伝播させた。応力は一定時間ごとに 0MPa から 50MPa ずつ増加させていくことで载荷した。また、添加元素の影響を調べるため粒界に銅(Cu)、鉄(Fe)及び、アルミニウム(Al)をそれぞれ偏析させ、刃状転位との相互作用を調べた。各添加元素は Mg よりも原子半径が小さいため、粒界の圧縮サイトの Mg 原子を添加元素に置換することで偏析粒界モデルを作製した。

計算の結果、純 Mg 粒界では刃状転位が二つの部分転位となって運動し、先頭転位は粒界に到達したのち外部応力 50MPa で粒界に吸収された。後続転位も粒界に到達した後外部応力 100MPa で粒界に吸収された。その後、外部応力を 900MPa まで载荷しても吸収された転位は粒界から放出されなかった。次に、先頭転位および後続転位が粒界に吸収された後もう一つの刃状転位を母相に生成させ、外部応力を付加した。その結果、二つ目の刃状転位は二つの部分転位となって運動した後に粒界に吸収され、外部応力 500MPa で粒界から転位ループとなって放出された。各添加元素を偏析させた粒界でも同様の現象が見られた。偏析粒界では添加元素の影響によって粒界の幅が増加する現象が確認されたが、各粒界の粒界の幅が大きいほど、粒界が転位ループを放出する際の外部応力が大きいということが明らかになった。これは、粒界の幅が大きいほど刃状転位が粒界を通り抜けて放出されるまでの変位が大きくなることに起因すると考えられる。以上から、添加元素は粒界の幅を変化させ転位の放出を抑制することが明らかになった。

発表論文: なし

多孔質金属の表面特性  
Surface properties of porous metals

京都大学大学院エネルギー科学研究科 袴田昌高

研究成果概要

ナノポーラス金属は、ナノメートルオーダーにまで微細化された孔径・リガメント径の多孔質構造を有する金属であり、比表面積の大きさ・触媒特性・力学特性など、バルクの金属にはない性質が現れる。最近、ナノポーラス金が平滑金に比べ高い抗菌活性を示すという実験結果が得られた。ナノポーラス金はその特異な表面効果によって抗菌性を発現していると考えられる。最近の実験により、種々のナノポーラス金属(ナノポーラス金及び金-白金合金)の抗菌性が金属表面の仕事関数と正の相関を示すことが分かった。そこで本研究では、第一原理計算を用いてナノポーラス金属の仕事関数を計算し、実験結果と比較することを試みた。また、ナノポーラス金属の仕事関数値を金属表面の電子密度を用いて考察した。

本研究では第一原理計算(ソフトウェア: Materials Studio) を使用し、平滑金、ナノポーラス金及び金-白金合金をモデル化し安定化計算を行った。先行研究からナノポーラス金属表面には格子定数の乱れが存在することが知られている。そこで本研究では金(111)面を 4 層積層させた平滑金モデルに対し-5%の圧縮ひずみを加えたモデルをナノポーラス金モデルとして作製した。また、ナノポーラス金モデルの表面の 3 つの金原子を白金原子と置換し、ナノポーラス金-白金合金モデルを作製した。

第一原理計算の結果、仕事関数値は平滑金<ナノポーラス金-白金合金<ナノポーラス金の順であった。これは先述の実験結果と合致した値である。先行研究から、仕事関数値の大小は金属表面における電子の染み出しによって形成される表面電気二重層の大小によって決まることが分かっている。特に圧縮ひずみを加えると、表面の電気二重層の密度が増加するため仕事関数が増加することが報告されている。従ってナノポーラス金の仕事関数の増加は圧縮ひずみに起因すると考えられる。一方ナノポーラス金-白金合金モデルでは、電気陰性度に従って表面の原子が内部の原子に電子を奪われていることが分かった。実際金属表面に垂直な面の電子密度分布をプロットしたところ、ナノポーラス金-白金合金モデルではナノポーラス金モデルに比べ表面の電子密度が低下しており、電子の染み出しが抑制されていることが分かった。ナノポーラス金属の高い仕事関数は細菌の表層構造の分極状態を変化させると考えられ、このことにより高い抗菌性を発現させると考えられる。

発表論文(謝辞なし): Electronic origin of antimicrobial activity owing to surface effect, N. Miyazawa, S. Sakakibara, M. Hakamada and M. Mabuchi, Sci. Rep. (2019) 9, 1091.



平成 30 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

変調磁場 による微結晶の三次元配向

Three dimensional alignments of microcrystals under modulated magnetic fields

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 木村史子

#### 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの **Mathematica** を用いて、異方性磁気エネルギーを計算し、種々の磁場印加方法で 3 次元配向させる条件の最適を行い、実験条件の最適化を行った。

3次元配向体と単結晶の構造を比較するため、ケンブリッジデータベースを用いた。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

Determination of the Anisotropic Rotational Diffusion Constant of Microcrystals Dispersed in Liquid Medium

Fumiko Kimura, Shigeru Horii, Itsuki Arimoto, Toshiya Doi, Masato Yoshimura, Masahisa Wada, and Tsunehisa Kimura

J. Phys. Chem. A 2018, 122, 9123–9127.

磁場配向を利用した固体 NMR 解析手法の開発

Applications of magnetic orientation techniques to solid-state NMR spectroscopy

京都大学大学院 農学研究科 森林科学専攻 久住 亮介

研究成果概要

時間的に変調された動的磁場を用いると、微結晶粉末を三次元的に配向させることができる。微結晶をあらかじめ UV 硬化樹脂へ分散させておけば、配向の達成後に UV を照射することで配向を固定することができる。こうして得られる微結晶の三次元配向体を擬単結晶と呼ぶ[1]。擬単結晶を固体 NMR へと応用すれば、微結晶粉末から化学シフトテンソル(CS テンソル)の主値と主軸方向を決定することが可能となる[2]。特に CS テンソルの主軸方向は数 mm サイズの巨大な単結晶が得られる場合にのみ精度よく決定できることから、擬単結晶化法は微結晶粉末から CS テンソルを得るための強力なツールとなる。一方、CS テンソルは単結晶 X 線回折などにより得られた結晶構造からの量子化学計算によっても得ることができる。そこで本研究では、量子化学計算により得られた CS テンソルを、擬単結晶の固体 NMR 測定により決定された実測の結果と比較した。

擬単結晶の固体 NMR により得られた CS テンソルとして、L-アラニン擬単結晶について得られた結果[2]を使用した。量子化学計算には BIOVIA Materials Studio に内包された NMR CASTEP を使用した。Perdew-Burke-Ernzerhof generalised gradient approximation (PBE-GGA)[3]を用いた密度汎関数理論(DFT)により、L-アラニンの単結晶データ[4]から CS テンソルの第一原理計算を行った。計算により得られた CS テンソルは MagresView[5]を用いて可視化させた。

Fig. 1 に、DFT 計算により得られた結果を示す。楕円体は原子核周りの電子による遮蔽の程度と方向(遮蔽テンソル)を表している。カルボキシ基炭素 C1 に着目すると、COO<sup>-</sup>面に直行する方向の遮蔽が大きくなっていることが分かる。また、COO<sup>-</sup>面内では、C1-C2 結合の方向の遮蔽軸が O2 原子側へと僅かにずれていることも分かった。これらの結果は擬単結晶の固体 NMR により得られた CS テンソルとよく一致している。今後、両手法による CS テンソルの決定精度について検討する予定である。

参考文献： [1], T. Kimura et al., *Langmuir* **22**, 3464 (2006); [2], R. Kusumi et al., *J. Magn. Reson.* **223**, 68 (2012); [3], J. P. Perdew et al., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996); [4], H. J. Simpson, *Acta Crystallogr.* **20**, 550 (1966); [5], S. Sturniolo et al., *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **78**, 64 (2016).

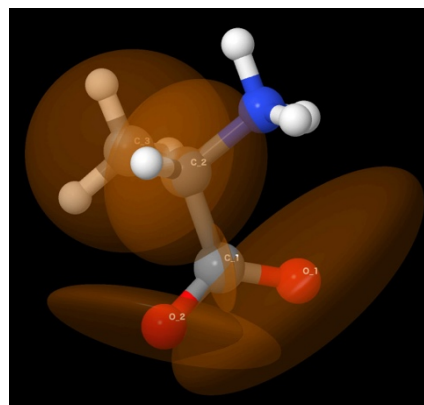


Fig. 1 Shielding tensors calculated for the L-alanine single crystal.

一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究  
Molecular biology of carboxydrotrophs and aquatic viruses

京都大学 農学研究科 応用生物科学専攻 吉田 天士

研究成果概要

水素 (H<sub>2</sub>) 生成型一酸化炭素 (CO) 資化菌は、CO を次世代エネルギーである H<sub>2</sub> に変換する。そのため、H<sub>2</sub> 生成型 CO 資化菌は合成ガス中の CO を利用して、高効率に H<sub>2</sub> を生成する微生物触媒への応用が期待される。H<sub>2</sub> 生成型 CO 資化菌の資源化を目的とし、CO 代謝の鍵酵素 CO デヒドロゲナーゼ (CODH) の網羅的探索とカタログ化を行った。

130,000 を超えるデータベース上の全微生物ゲノムに対して、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して CODH の網羅的探索を行った。その結果、CODH は幅広い生物群 (バクテリア 27 門、アーキア 9 門) に含まれており、これらは新規な系統群を含む 7 つの系統群に分類され、さらに構造モチーフに従って 24 のグループに細分化された。続いて CODH の活性に重要なアミノ酸残基の多様性を明らかにし、新規な金属配位モチーフを持つ CODH を見出した。また、その構造的な特徴に応じて同一遺伝子領域にコードされるタンパク質と共役する多数の機能未知 CODH を見出した。

有毒アオコ原因ラン藻は環境中で多様なウイルスとの相互作用が示唆される。上記の成果に加え、当研究室では網羅的転写解析により、唯一の本種ウイルス分離例 Ma-LMM01 の感染様式を明らかにし、多様な宿主ウイルス耐性機構をステルス感染により回避することを示した。また、環境中で本種は多様なウイルス感染を受けるものの、完全な選択的淘汰が起こらず、ウイルス感染履歴に基づく個体群が多様化していくことをアンプリコン解析により明らかにした。現在、海洋性ラン藻を標的として、環境中での個体群の多様性をウイルスとの相互作用から説明するべく、被感染ラン藻細胞からの新規ウイルスゲノム構築手法の確立を目指しており、その成果は平成 30 年度日本水産学会近畿支部優秀発表賞に選出されるに至った。

発表論文(謝辞あり)

Structural and phylogenetic diversity of anaerobic carbon-monoxide dehydrogenases. *Front. Microbiol.* (2019) 10.3389/fmicb.2018.03353

他 2 報

発表論文(謝辞なし)

Transcriptome Analysis of a Bloom-Forming Cyanobacterium *Microcystis aeruginosa* during Ma-LMM01 Phage Infection. *Front Microbiol.* (2018) 10.3389/fmicb.2018.00002

他 1 報

有機分子性結晶の気体吸着特性の解析  
Analysis of the gas sorption behavior of organic molecular crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座 津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に幅広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端を保護した BocGly-L-Phe（以下、**1** と略記。図1）の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。

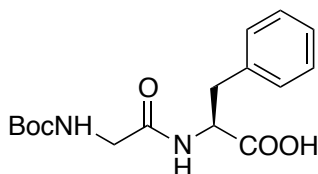


図1 **1** の分子構造

そこで本研究では、**1** の結晶が示す二酸化炭素に対する親和性を解明することを目的として、**1** の単結晶が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行った(図2)。次いで、計算化学統合パッケージ Materials Studio の DMol<sup>3</sup> を用いて、二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の最適化を行った。今後、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにインストールされている量子化学計算プログラム Gaussian を用いて、結晶中での **1** と二酸化炭素との分子間相互作用を解析する予定である。

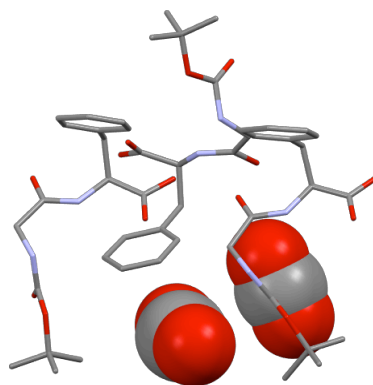


図2 **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態

三次元  $\pi$  共役分子の合成の機能性の創出  
Synthesis of three-dimensional pi-conjugated molecules

京都大学大学院人間・環境学研究科 廣戸 聡

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、三次元パイ共役分子の分子構造および物性の解析を行った。特に、曲面をもつ分子の構造を Gaussian 16 を用いて密度汎関数法 (DFT 法) により最適化し、予測される分子の安定性を評価した。さらに、TD-DFT 法を用いることで、実際に測定した吸収スペクトルを計算により算出することによって、計算によって最適化した構造が実測に則しているかどうかを判断した。

本研究では特に、ポルフィリンを用いた鞍型分子の酸化状態および還元状態における吸収スペクトル変化、および HOMO や LUMO などの分子軌道を求めた。その結果、構成している元素の分子全体に及ぼす電子的な効果が、反応の前後で変化していることを明らかにした。また、酸化・還元によるスペクトル変化がそれぞれ、ラジカルカチオンやジカチオンなど、通常安定に単離できない化学種の発生によるものであることを明らかにした。特に、最長波長吸収帯がラジカル特有の SOMO 軌道を起点とする遷移によるものと同定し、電気刺激によって色を変化させる現象の原因がラジカルカチオンの発生であることを明らかにした。本研究の成果は Chemistry Letters 誌に掲載され、Editor's Choice に選ばれた。

今後はさらに複雑な三次元構造をもつパイ共役分子の構造最適化を行っていき、構造やそれに伴う物性を精度の高い計算によって予測することによって、新たな機能をもつ分子の合成を進めていく予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

“Synthesis of dihydropyrazine-fused porphyrin dimers”

A. Takiguchi, M. Wakita, \*S. Hiroto, \*H. Shinokubo

Chem. Lett., in press. (2019). doi:10.1246/cl.190002

有機構造体を用いたイオン伝導体合成  
Synthesis of ion conductive covalent organic frameworks

京都大学高等研究院物質－細胞統合システム拠点 堀毛悟史

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、共有結合から組み上がる有機の結晶性高次元構造体 (Covalent organic framework, COF と呼ぶ) の構造推定、シミュレーションを行った。対象とした COF はポリエチレンオキシド (PEO) が内部に修飾されたヒドラジン系の構造体であり、下図にその合成スキームを示している。それぞれ粉末 X 線回折測定より回折ピークのアサインを行った。そのデータをもとに、下記の要領で構造推定を検討した。

合成した COF は二次元構造を有するヘキサゴナル構造であることが推定されたため、過去のレポートを参考にし、空間群  $P3$ , セルパラメータ  $a = b = 29.00 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.00 \text{ \AA}$  と設定し、Material Studio Reflex Plus module を用いて開始した。ミスリードを防ぐため、始めは空間群を  $P1$  に落とし、その後好適化において Material Studio Forcite molecular dynamics module (Universal force fields) を用いて検討を行い、最後は Pawley フィッティングで最適化したところ、 $a = b = 29.5499 \text{ \AA}$  and  $c = 3.7737 \text{ \AA}$ ,  $Rwp$  of 1.80% and  $Re$  of 2.00% とよい収束を示し、実験の粉末 X 線回折結果とも良い一致を示した。以上の検討により、全体の結晶構造を高精度で推定することができた。この構造は他にガス吸着測定や固体 NMR などから多角的にその信頼性を検討し、間違いがないことを確かめている。この構造体にリチウム塩 (LiTFSI) を導入し、その固体材料のイオン伝導特性を測定すると、PEO 由来のリチウムイオンホッピングが観察され、 $200^\circ\text{C}$  において  $1.0 \times 10^{-4} \text{ S/cm}$  のイオン伝導度を示すことがわかった。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

Zhang, G., Hong, Y. L., Nishiyama, Y., Bai, S., Kitagawa, S. & Horike, S. Accumulation of Glassy Poly(ethylene oxide) Anchored in Covalent Organic Framework as Solid-state  $\text{Li}^+$  Electrolyte. J. Am. Chem. Soc. 141, 1227-1234 (2019).

自己集合を利用したタンパク質のカプセル化  
Protein encapsulation within synthetic cages

京都大学 高等研究院 藤田大士

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを、合成対象分子の設計に活用している。三次元分子構造の内部に適切な大きさの空洞があり、その中に他の分子を包接する異分子複合体を「ホスト-ゲスト化合物」と呼ぶ。前者の骨組みを作る分子がホスト、後者の骨組みには入り込んでいる分子がゲストである。このホスト分子を設計するにあたり、空洞のサイズ、および空洞を規定する分子骨格上にどのような官能基が配置されているかは、系の特性を決定する極めて重要なパラメータとなる。今回は、内部にタンパク質分子を包接する巨大分子を合成し、合成分子-タンパク質複合体を実現するために、BIOVIA 社製 Materials Studio, 同じく BIOVIA 社製 Discovery Studio、富士通社製 SCIGRESS を用途に応じて組み合わせながら分子設計を試みた。分子モデリング、および Materials Studio の Forcite など古典力学計算を用いた構造最適化を通して、目的のタンパク質を包接するに十分な内部体積を有する分子の骨格に大凡の目処をつけることができた。現在は、分子の自己集合現象を活用し、モデリングした目的の分子骨格を形成する条件を鋭意検討中である(WET 実験)。分子自己集合実験の結果は随時分子設計にフィードバックする予定であり、その度に分子設計の部分修正とモデリングによる確認を行う。

混合マトリクス膜中のガス輸送特性に関する計算機シミュレーション  
 Computational Studies of Gas Transport Properties of Mix Matrix Membrane

京都大学高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 Sivaniah group Wu Chih Yi

研究成果概要: Membranes used for gas separation has become an important role in industrial application. Mix matrix membranes (MMMs) combines the advantages of polymer and inorganic membranes, that is, adding inorganic fillers into polymer. Fillers with functional groups increases gas selectivity while the polymer acts like a solution of fillers and maintains the membrane structure. Based on our previous work, which we added different functionalized polyhedral oligomeric silsesquioxane (POSS) into polymer of intrinsic microporosity (PIM-1). MMMs with amine and nitro functionalized POSS particles (OAPS and ONPS) results in great dispersibility in PIM-1, enhancement of selectivity in gas separation, and a better aging behavior comparing to PIM-1. Since characterization of these results in atomic scale may be challenging, Molecular simulation techniques becomes important at microscopic level. Our goal is to simulated OAPS and ONPS MMMs at different weight percentages and studied their mechanical and gas properties.

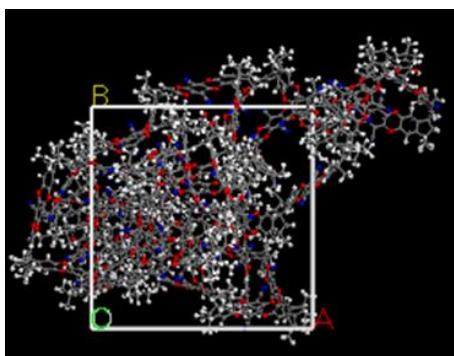


Fig.1 Simulated PIM-1

	Solubility ( $\times 10^{-3} \text{ cm}^3(\text{STP}) / \text{cm}^3$ polymer cmHg)	
	This work	Exp
CO <sub>2</sub>	1356	700
CH <sub>4</sub>	86.1	163
O <sub>2</sub>	38.8	39
N <sub>2</sub>	34.1	37

Fig.2 PIM-1 simulated solubility with experimental data

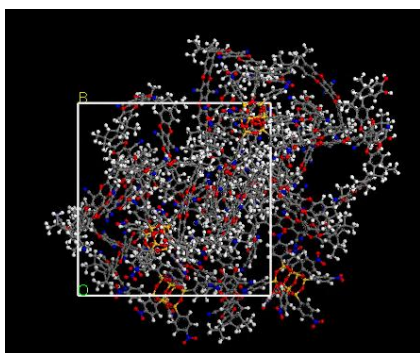


Fig.3 20wt% ONPS MMM

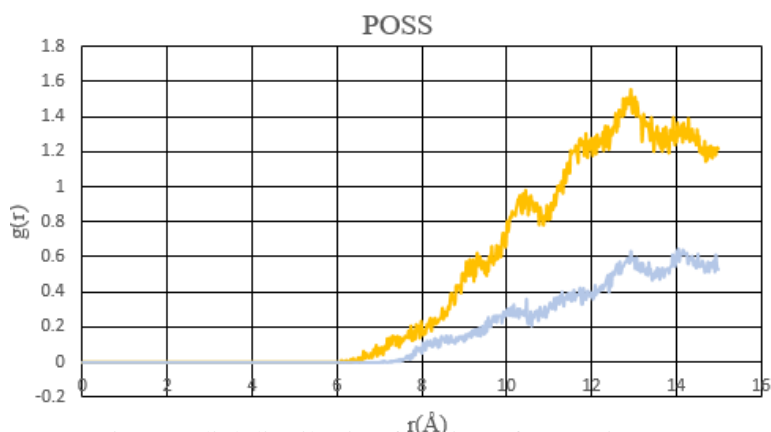


Fig.4 Radial distribution function of POSS in MMMs.  
 (Yellow: OAPS 20wt%, Gray: ONPS 20wt%)



振電相互作用に関する理論的研究  
Theoretical Study on Vibronic Couplings

京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門 佐藤 徹

【研究成果概要】触媒反応の反応機構を解明するため、また新規の触媒材料を設計するため、触媒表面上における反応分子の吸着領域を予測することが必要である。フロンティア軌道理論は化学反応の反応性指標として用いられているが、固体表面のような大きな系に対して非局在化する傾向が強く、表面上における反応分子の吸着領域を予測することは困難である。振電相互作用密度 (VCD)[1] は、電子状態に加え、原子核の振動状態を考慮することで、フロンティア軌道よりも局在化する傾向が強く、より正確に反応の領域選択性を説明することが可能である [2]。本研究では、VCD を用いることで三元触媒 Cu/ $\gamma$ -alumina 表面 [3] における NO の吸着領域を予測し、NO の還元機構を明らかにした。

VCD の計算は、当研究室で開発したプログラムを用いた。DFT 計算は、Gaussian09 Rev.E01 を使い、計算レベルは B3LYP/3-21G とした。

$\gamma$ -alumina は、計算によって予測されている結晶構造 [4] からクラスターを切り出し、末端の O 原子を H 原子で終端することでモデル化した。その際、実験によって測定されているバンドギャップと一致するまで、H 原子を付与した。このようにモデルを作成する方法は、一般の金属酸化物に対して適用することが可能である。 $\gamma$ -alumina 表面の VCD は、Lewis 塩基点として振る舞う O 原子上に局在した。触媒として機能する Cu 原子は、その O 原子上に配置した。さらに、Cu/ $\gamma$ -alumina の VCD は、Cu 原子と Cu 原子と結合する O 原子上に局在した。これより、NO は  $\gamma$ -alumina 表面と相互作用している Cu 原子上に吸着することが予測された。予測された NO の吸着領域は、構造最適化計算によって得られた安定構造と一致した。以上より、VCD は固体表面の反応性指標として有効であることが示された。また、NO の還元機構を明らかにするため、Cu/ $\gamma$ -alumina の軌道準位を計算した。その結果、 $\gamma$ -alumina と相互作用することで、Cu 原子の HOMO が 0.5eV 程度上昇し、NO の LUMO に接近することがわかった。したがって、 $\gamma$ -alumina 表面に担持された Cu から NO への電子移動が容易となり、NO の還元が促進することが示された。

[1] T. Sato *et. al.*, *J. Phys. Chem. A* **112**,758 (2008). [2] T. Sato *et. al.*, *Chem. Phys. Lett.* **531**, 257 (2012). [3] S. Hosokawa *et. al.*, *Molecular Catalysis* **442**,74 (2017). [4] M. Digne *et. al.*, *J. Catal.* **226**, 54 (2004).

【発表論文】

(謝辞あり) (1) Y.-J. Pu, R. Satake, Y. Koyama, T. Otomo, R. Hayashi, N. Haruta, H. Katagiri, D. Otsuki, D.G. Kim, T. Sato, *J. Mater. Chem. C* **7**, 2459 (2019). (2) Y. Kojima, W. Ota, K. Teramura, S. Hosokawa, T. Tanaka, T. Sato, *Chem. Phys. Lett.* **715**, 239-243 (2019). (3) W. Ota, K. Teramura, S. Hosokawa, T. Tanaka, T. Sato, *J. Comput. Chem. Jpn.* **17**, 138-141 (2018). (謝辞なし) (1) W. Ota, T. Sato, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1148** 012004 1-13(2018). (2) Z. Lian, M. Sakamoto, H. Matsunaga, J.J.M. Vequizo, A. Yamakata, Mi. Haruta, H. Kurata, W. Ota, T. Sato, T. Teranishi, *Nature Commun.* **9**, 2314 (2018). (3) D. Liu, Y. Niwa, N. Iwahara, T. Sato, L. F. Chibotaru, *Phys. Rev. B* **98**, 035402 (2018). (4) S. Kimura, A. Tanushi, T. Kusamoto, S. Kochi, T. Sato, H. Nishihara, *Chem. Sci.* **9**, 1996-2007(2018).

固液界面におけるエネルギー変換  
Energy conversion at the interface between solid and liquid

京都大学 産官学連携本部 湊 丈俊

## 研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、電気化学、触媒、電子デバイス、生化学などで反応場となる、固体と液体の界面(固液界面)におけるエネルギー変換現象の機構を原子・分子レベルで解明するために、構造、物性などを第一原理計算及び分子動力学計算によって研究した。

我々は、既存の二次電池のエネルギー密度を超える新しい二次電池として、「フッ化物シャトル二次電池」[1-4]の開発を進めている。二次電池において、電極と電解液の界面(電極電解液界面)の物性や反応は電池性能に大きな影響を与える[5]が、埋もれた界面であることから解析手法が限られ、その議論は想像に頼っている場合が多い。我々は、電極電解液界面における反応を制御することで、フッ化物シャトル電池の電極反応の反応性を向上させることに成功した[2-3]が、その反応機構は不明な点が多く残っていた。そこで、反応機構を解明するために、電解液中の分子構造を第一原理計算で解析し、キャリアイオンであるフッ化物イオンが添加物と配位結合を作り、支持塩の溶解度やイオン伝導性を高めていることを明らかにした[3, 4]。

また、水溶液中で固液界面に生成する水和構造は、様々な物理、化学、生物学的なエネルギー変換現象に著しい効果を与えるが、その原子・分子レベルでの描像も想像に頼っている部分が多い。我々は、液中で動作する周波数変調原子間力顕微鏡[5]による観測と分子動力学計算を用いて、水和構造における固体表面の次元性の効果[6]と、粘度分布における局所構造の効果[7]の解明を原子レベルで達成することに成功した。

## 文献

- [1] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Electrochemical Performance of a Bismuth Fluoride Electrode in a Reserve-type Fluoride Shuttle Battery, *Journal of The Electrochemical Society*, **164**, A3702-A3708 (2017). (謝辞あり)
- [2] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Improvement of cycling performance in bismuth fluoride electrodes by controlling electrolyte composition in fluoride shuttle batteries, *Journal of Applied Electrochemistry*, **48**, 1205-1211 (2018).
- [3] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, Zempachi Ogumi, Electrochemical performance of a lead fluoride electrode mixed with carbon in an electrolyte containing triphenylboroxine as an anion acceptor for fluoride shuttle batteries, *Materials Chemistry and Physics*, **226**, 1-5 (2018). (謝辞あり)

- [4] Asuman Celik Kucuk, Taketoshi Minato, Toshiro Yamanaka, Takeshi Abe, *Journal of Materials Chemistry A*, *in press*. (謝辞あり)
- [5] Taketoshi Minato and Takeshi Abe, Surface and Interface Sciences of Li-ion Batteries, *Progress in Surface Science*, **92**, 240–280 (2017).
- [6] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-Scale 3D Local Hydration Structures Influenced by Water-Restricting Dimensions, *Langmuir*, **34**, 9114–9121 (2018). (謝辞あり)
- [7] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-level viscosity distribution in the hydration layer, *Physical Review Letters*, **122**, 116001 (2019). (謝辞あり)

電池材料のラマンスペクトルの計算  
Simulation of Raman spectrum of battery materials

京都大学 産官学連携本部 山中俊朗

研究成果概要

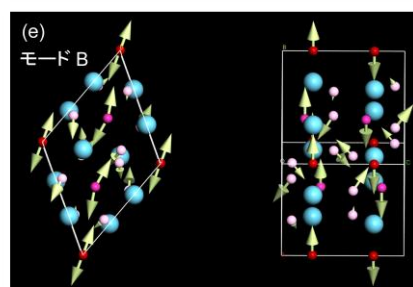
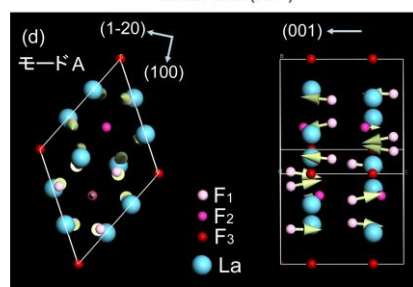
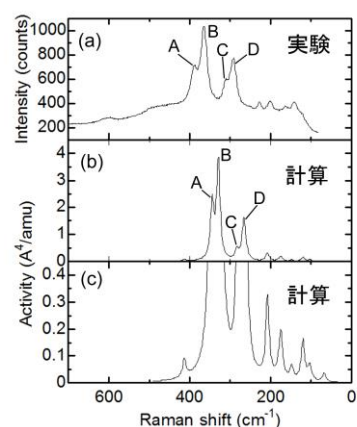
本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、 $\text{LaF}_3$  のラマンスペクトル中のピークについて、対応する振動モードの原子の動きを調べた。

計算結果(図 b,c)が実験結果(図 a)を非常によく再現している。ピーク A に対応する原子の動きを図 d に示す。このモードでは主に層間のフッ素(F1)が層に垂直方向((001)方向)に振動することがわかった。ピーク B に対応する原子の動きを図 e に示す。このモードでは主に層内のフッ素(F2、F3)が層に並行方向に振動することがわかった。 $\text{LaF}_3$  の(001)面からフッ素を電気化学的に脱離させるとピーク A の強度が減少した。計算結果から、(001)方向に振動する F1 が(001)面から脱離したことがわかった。

$100\text{cm}^{-1}$  以下の遅い振動は La の振動であることもわかった。

発表論文(謝辞あり) Toshiro Yamanaka, Hirofumi Nakamoto, Takeshi Abe, Koji Nishio, Zempachi Ogumi, “Formation and Propagation of Fluorine-Deficient Phases in Large  $\text{LaF}_3$  Single Crystals during Electrochemical Defluorination”, ACS Applied Energy Materials (2019) in press

発表論文(謝辞なし) なし



フッ化物シャトル電池における、塩可溶性の LiBOB の効果と BiF<sub>3</sub> 電極の電気化学的特性

Effects of LiBOB on Salt Solubility and BiF<sub>3</sub> Electrode Electrochemical Properties  
in Fluoride Shuttle Batteries

京都大学 産官学連携本部 Asuman Celik Kucuk

### 研究成果概要

Density Functional Theory (DFT) framework, is used as the computational calculation to determining of the ionic interactions between the electrolyte and salt and between the salt and electrode surfaces. Thus, to investigate the molecular structures in the electrolytes of rechargeable batteries, it is favorable to use DFT calculation.

In one of our study, to confirm some interaction in the electrolyte system we applied the DFT calculation. To validate the assumption based on some interaction which improve the fluoride based salt solubility by ion exchange, the change in the total energy by the reaction between the components was calculated by DFT. The most stable structures were determined based on the DFT calculation.

**Please find the abstract of the related study and revealed part of DFT calculation as in the following.**

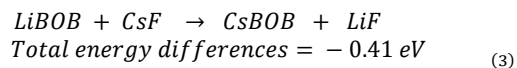
## Effects of LiBOB on Salt Solubility and BiF<sub>3</sub> Electrode Electrochemical Properties in Fluoride Shuttle Batteries

Asuman Celik Kucuk<sup>a\*</sup>, Taketoshi Minato<sup>a</sup>, Toshiro Yamanaka<sup>a</sup>, Takeshi Abe<sup>b\*</sup>

In this study, lithium bis(oxalato)borate (LiBOB) was used for the first time in a fluoride shuttle battery (FSB) to overcome the solubility problem of fluorine-based salts typically present in organic solvents. For this purpose, tetraglyme (G4) electrolytes containing CsF salt and LiBOB with three different concentrations (LiBOB<sub>0.06</sub>/CsF/G4, LiBOB<sub>0.25</sub>/CsF/G4, and LiBOB<sub>0.5</sub>/CsF/G4) were prepared. The effects of LiBOB on the electrochemical compatibility of the bismuth fluoride positive electrode were examined by cyclic voltammetry, charge–discharge tests, and alternating current impedance measurements. The related discharge and charge reactions were confirmed by X-ray diffractometry, whereas Raman spectroscopy was used to detect potential interactios in the various LiBOB/CsF/G4 systems. At the lowest and highest LiBOB concentrations (i.e., in LiBOB<sub>0.06</sub>/CsF/G4 and LiBOB<sub>0.5</sub>/CsF/G4, respectively), the electrolyte decomposition was dominant, whereas the intermediate concentration in LiBOB<sub>0.25</sub>/CsF/G4 was found to be the optimum condition and played a critical role in CsF solubility, allowing a successful fluoride shuttle-based redox reaction.

### Relevant study:

According to the Raman results, we can assume that the effect of LiBOB in the electrolyte is to enhance the CsF solubility by ion exchange. To validate this assumption, the change in the total energy by the reaction between LiBOB and CsF was calculated by DFT. Their ion-exchange reaction (Equation 3) form CsBOB and LiF as follows.



The resulting change of the total energy in the system was estimated as follows:

$$\text{Total energy differences} = (E_{\text{CsBOB}} + E_{\text{LiF}}) - (E_{\text{LiBOB}} + E_{\text{CsF}}) \quad (4)$$

where  $E_{\text{LiBOB}}$ ,  $E_{\text{CsF}}$ ,  $E_{\text{CsBOB}}$ , and  $E_{\text{LiF}}$  are the total energies of free LiBOB, CsF, CsBOB, and LiF, respectively. According to a previous work,<sup>29</sup> three sites of Li and Cs in LiBOB and CsBOB, respectively, were considered in the calculations. The most stable structures of LiBOB, CsF, CsBOB, and LiF are shown in Chart 1, and the total energy difference calculated from these structures was  $-0.41 \text{ eV}$ . This means that, after the ion-exchange reaction, energetically favorable CsBOB and LiF were formed. On the contrary, G4 is known to strongly form complexes with  $\text{Li}^+$ . Therefore, Equation 4 is likely realized and  $\text{F}^-$  becomes free (Chart 1).

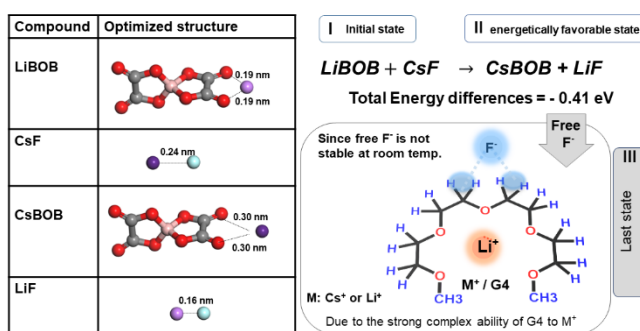


Chart 1 Proposed possible interactions in the  $\text{LiBOB}_{0.25}/\text{CsF}/\text{G4}$  system (LiBOB: lithium bis(oxalato)borate; G4: tetraglyme).

The results obtained from DFT calculations, Raman analysis and  $^{19}\text{F}$  NMR spectroscopic data suggest that the LiBOB addition enhances the solubility of CsF in G4 through the interaction between  $\text{Cs}^+$  and  $\text{BOB}^-$ . From that result it can be assumed that free fluoride is stabilized by  $\text{M}^+$  coordinated G4 (M;  $\text{Cs}^+$  or  $\text{Li}^+$ ). This assumption is also in agreement with the previous report based on the stabilization of complex fluoroanions by glyme-coordinated alkali metal cations.<sup>31</sup> The authors believe that the interactions occur in the manner of solvent-shared ions pairs rather than contact ion pairs ( $[\text{M}(\text{G4})\text{X}]$ , M; Li or Cs, X;  $\text{F}^-$  or  $\text{BOB}^-$ ).

生体分子情報データベースの開発とその応用  
Development of Databases for Biomolecular Information and its Application

情報・システム研究機構 データサイエンス共同利用基盤施設  
ライフサイエンス統合データベースセンター 五斗 進

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、生体分子情報データベースおよびバイオインフォマティクス技術の開発に取り組み、その成果をゲノムネット (<http://www.genome.jp/>) から広く公開している。2018 年度は、2017 年度までにゲノムネットサービスとして公開してきたデータベースと解析ツールに対し、引き続き改良を加えるとともに、ネットワークや表現型の観点から遺伝子機能推定などの応用に結びつけることを目指した。具体的には、微生物の表現型として生育環境を反映する培養培地情報と代謝・生理機能を反映するパスウェイモジュール情報とに着目し、両者を結びつけるための基盤開発を行った。まず、嫌気性細菌 50 種、好気性細菌 50 種を幅広い系統分類群から選定し、KEGG MODULE を用いて代謝・生理機能を定量化する Module Completion Ratio をゲノム情報から計算し、微生物間の代謝機能類似性を計算した。MCR をもとに主成分分析を行ったところ、第 2 主軸により嫌気性と好気性を大まかに分類できることを確認した。次に、選定した嫌気性細菌と好気性細菌を配布しているバイオリソースセンターが提供するウェブサイトや文献から培養培地情報を抽出してデータベース化した。この情報を培地成分によるベクトルで表現し、クラスタリングすることによって、微生物間の培養培地類似性を計算した。現在、その結果を代謝・生理機能による主成分分析結果と対応付け、代謝機能類似性と培地類似性の相関について解釈を行っているところである。今後、その結果を用いてゲノムデータから培地情報を予測するシステムを構築するために、更に多くの微生物に対して培地情報や表現型の情報をデータベース化する予定である。

発表論文(謝辞あり)

1. Arai, W., Taniguchi, T., Goto, S., Moriya, Y., Uehara, H., Takemoto, K., Ogata, H. and Takami, H.; MAPLE 2.3.0: An improved system for evaluating the functionomes of genomes and metagenomes. *Biosci. Biotechnol. Biochem.*, **82**:1515-1517 (2018).
2. Yoshida, T., Nishimura, Y., Watai, H., Haruki, N., Morimoto, D., Kaneko, H., Honda, T., Yamamoto, K., Hingamp, P., Sako, Y., Goto, S. and Ogata, H.; Locality and diel cycling of viral production revealed by a 24 h time course cross-omics analysis in a coastal region of Japan. *ISME J.*, **12**:1287-1295 (2018).

遺伝子情報を用いた海洋生態系研究  
Research on marine ecology using genetic information

東京大学 大気海洋研究所 地球表層圏変動研究センター 生物遺伝子変動分野  
西村 陽介

研究成果概要

昨年度に引き続き、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、海洋等の微生物生態系の研究や、微生物ゲノム解析ツールの開発を行った。

多くの海洋微生物は「ロドプシン」等の光受容体を用いて光エネルギーを利用していることが知られている。一方で、微生物の持つ遺伝子の多くは依然として機能が分かっていない。そのため、微生物の機能未知遺伝子の中には、光受容体として機能する遺伝子があることが期待される。本研究では、海洋において利用可能な光量は深度に応じて異なることを利用して、*Tara Oceans* や *Station ALOHA* の大規模海洋メタゲノムデータを用いて深度別の遺伝子分布を調べることにより、未知の光受容体遺伝子の候補を探索し、23 個の遺伝子ホモログを選抜した。今後はこれらの候補について、大腸菌等を用いた異種発現系を利用して光受容体としての性質を調べる予定である。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし



グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用

Development and application of the graph-based phylogenetic method

東京大学大学院理学系研究科生物科学専攻岩崎研究室 松井求

研究成果概要

タンパク質スーパーファミリーの進化過程は、現存するあらゆるタンパク質の進化の歴史を含んでおり、もしそれがまるごと解明できれば、タンパク質の諸機能と進化を結ぶ統合的知見が得られると考えられる。しかしながら、一連の従来手法(近隣結合法、最大節約法、最尤法、およびベイズ法)には根本的な弱点があり、タンパク質スーパーファミリースケールの信頼性の高い系統樹これまで得られていなかった。そこで、我々は既存手法の代わりとなる Graph Splitting (GS) 法, Edge Perturbation (EP) 法, Mixed Inference (MI) 法という三つの新規手法を開発した。GS 法は配列類似性グラフに基づいて系統樹再構築を行う方法, EP 法は同じく配列類似性グラフに基づいて内部枝支持率を計算するための方法, MI 法はペアワイズアライメントとマルチプルアライメントの両方の情報を用いて距離行列を計算するための方法であり、それぞれ既存手法の弱点を克服するために、グラフを利用した新たなアルゴリズムに基づいて開発された。

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、タンパク質スーパーファミリーのデータベースである SCOP から得られた全てのデータに対し、GS 法・EP 法・MI 法を網羅的に適用した結果、190 のタンパク質スーパーファミリーについて内部枝が支持された信頼性の高い系統樹を初めて得ることができた。特に T-fold, DNA/RNA polymerase, Toxins' membrane translocation domains の各スーパーファミリーは系統樹全体にわたって内部枝が強く支持されており、代謝、転写・複製、膜輸送の初期進化を照らす新たな知見が示唆された。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

## 典型元素を活用した機能性材料の開発

## Development of functional materials by taking advantage of main group elements

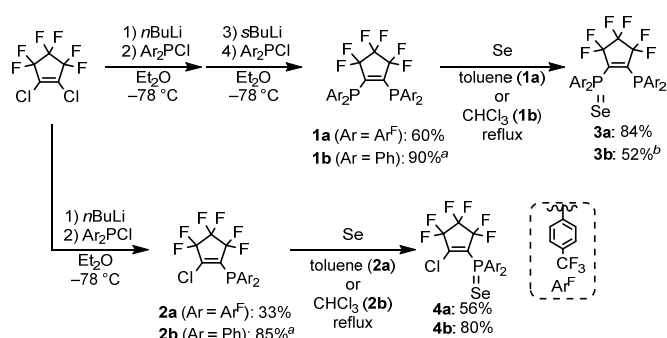
茨城大学工学部物質科学工学科 吾郷 友宏

## 研究成果概要

電子受容性配位子は遷移金属のルイス酸性を向上させると共に、トランスメタル化や還元的脱離を加速するため、触媒反応開発において重視されるようになってきた。我々のグループでは、強力な電子求引性骨格である 3,3,4,4,5,5-ヘキサフルオロシクロペンテン-1,2-ジイル(以下、HFCP と略す)を活用した電子不足化合物や電子受容性配位子の開発を行ってきた。今回、HFCP を架橋基とした  $\pi$  受容性ホスフィンの開発と配位特性の解明、および触媒反応への利用を検討した(発表論文 1)。

HFCP 骨格を有するホスフィン

**1,2** は、1,2-ジクロロヘキサフルオロシクロペンテンとクロロホスフィンから合成し、さらにセレンで処理することで *P*-セレニド **3,4** を得た。これらのセレニドは、9-ホスファトリプチセン-*P*-セレニドと同程度の  $^1J_{PSe}$  値を示し、ホスフィン **1,2** の  $\sigma$  供与能



が特異的に低いことがわかった。量子化学計算からも、ホスフィン **1,2** の  $\sigma$  供与性が極めて低い一方で、ホスファイト等に近い強い  $\pi$  需要能を持つことが示された。ホスフィン **1,2** の触媒反応への応用を検討したところ、**1a** が Au(I)触媒によるアルキンの水とおよびヒドロアリアル化といった反応に活性を示すことが分かった。

その他、HFCP を導入した縮環芳香族化合物の電子状態・光物性に関し、量子化学計算を用いた理論的な検討を行った(発表論文 2, 3)。

発表論文(謝辞あり) 1) Syntheses and Structures of  $d^{10}$  Coinage Metal Complexes of Electron-Accepting Phosphine Ligands Featuring a 3,3,4,4,5,5-Hexafluorocyclopentene Framework, Agou, T.; Wada, N.; Fujisawa, K.; Hosoya, T.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N.; Fukumoto, H.; Kubota, T. *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 9105-9114; 2) A Straightforward Synthesis of Polyfluorinated Furan Derivatives and Their Property, Agou, T.; Nemoto, S.; Yamada, S.; Konno, T.; Mizuhata, Y.; Toitoh, N.; Ebina, R.; Ishii, A.; Hosoya, T.; Fukumoto, H.; Kubota, T. *Asian J. Org. Chem.* **2018**, *7*, 2484-2489; 3) Fluorine-Containing Dibenzoanthracene and Benzoperylene-Type Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Synthesis, Structure, and Basic Chemical Properties, Gotsu, O.; Shiota, T.; Fukumoto, H.; Kawasaki-Takasuka, T.; Yamazaki, T.; Yajima, T.; Agou, T.; Kubota, T. *Molecules* **2018**, *23*, 3337.

規則性合金の触媒作用に関する理論的研究  
Theoretical study on catalysis of ordered alloys

北海道大学 触媒科学研究所

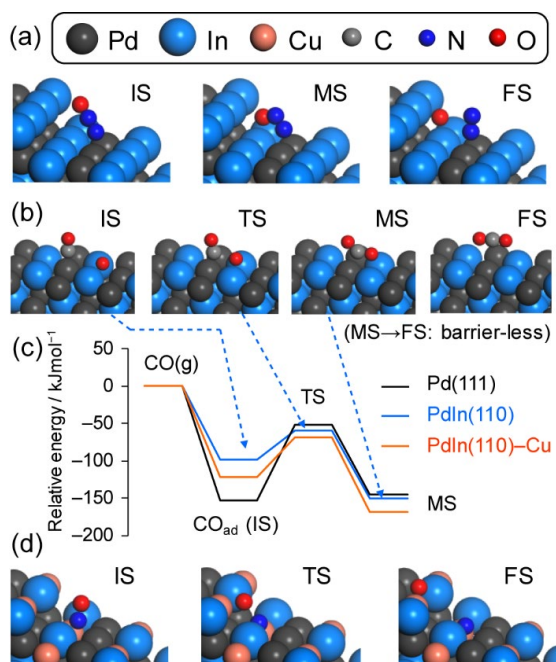
古川 森也

研究成果概要

我々は最近、PdIn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 触媒が CO による NO の還元反応において、低温領域においても副生成物である N<sub>2</sub>O を生成することなく高い N<sub>2</sub> 選択性を示すことを見出している。また In の一部を Cu に置換した Pd(In<sub>0.33</sub>Cu<sub>0.67</sub>)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 触媒は幅広い温度領域において N<sub>2</sub> 選択性を低下させることなく NO 転化率を大幅に向上させることが出来、200°C という低温においても NO を 100% 無害な N<sub>2</sub> に変換できることを見出された。この触媒性能向上のメカニズムについて、速度論的検討に基づく反応機構解析が行われたが、原子レベルにおける詳細については明らかにされていなかった。

今回京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、PdIn 表面での関連分子 (NO、CO、N<sub>2</sub>O) の反応挙動に関して詳細な DFT 計算を行うことで、そのメカニズムを詳細に解明することを目指した。

PdIn(120)面 ((110)面のステップ) における N<sub>2</sub>O 分解を計算した結果、活性化障壁は <0.1kJmol<sup>-1</sup> でありほぼバリアレスであることが判明した (図 a)。このことから PdIn 上では副生成物である N<sub>2</sub>O が速やかに N<sub>2</sub> へと分解されるために N<sub>2</sub> 選択性が高くなることが分かった。次に低温領域での律速段階である CO 酸化過程について PdIn(110)面上で計算を行ったところ (図 b) In の存在により活性化障壁が低下することが分かった (図 c)。一方高温領域での律速段階である NO 解離について In を一部 Cu で置換した PdIn(120)面で計算を行った結果 (図 d)、Cu で一部置換することで NO 解離の活性化障壁が低下することが分かった。以上の様に、In は N<sub>2</sub> 選択性と低温活性の向上、また Cu は高温活性の向上に寄与していることが DFT 計算の結果から明らかにされた。



発表論文 (謝辞あり)

“Design of Pd-Based Pseudo-Binary Alloy Catalysts for Highly Active and Selective NO Reduction”, J. Jeon, S. Furukawa, K. Kon, T. Toyao, K. Shimizu, *Chem. Sci.*, in revision.

カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの  
生合成パスウェイの再構築

Pathway reconstruction of carotenoid biosynthesis using  
Carotenoid DB Chemical Fingerprints

藪崎純子

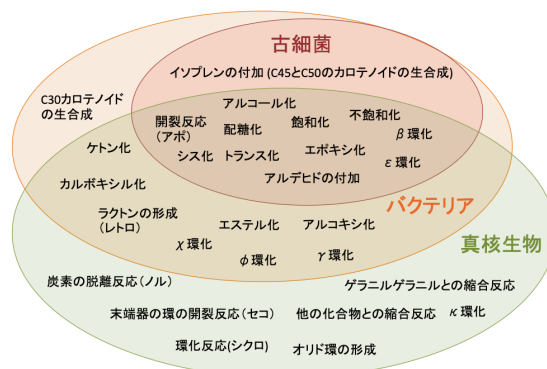
研究成果概要

我々は、独自に開発したカロテノイド DB フィンガープリントを用いて 569 の生物種における 508 のカロテノイドの生合成経路の再構築を行なった。再構築したカロテノイドは、我々が構築した Carotenoids Database に収録している 1182 の天然のカロテノイド、及び 447 件の酵素的・非酵素的カロテノイドの生化学反応データ (<http://carotenoiddb.jp/Reaction/list1.html>)、137 件の既知のカロテノイド生合成パスウェイ (<http://carotenoiddb.jp/Pathway/list1.html>) を基にしている。

再構築した全カロテノイドの生合成経路を統合した結果、化学修飾の複雑化と進化との相関が見られた。古細菌で末端器の  $\beta$  環化、 $\epsilon$  環化、末端器とポリエン鎖のアルコール化、飽和化、不飽和化、開裂反応(アポ)、エポキシ化、シス化、トランス化、配糖化、アルデヒドの生成反応、イソプレンとの縮合反応(C40 と C45 のカロテノイドの生合成反応)が生まれた。加えて、バクテリアで末端器の芳香環化 ( $\gamma$  環化、 $\phi$  環化、 $\chi$  環化)、末端器とポリエン鎖のケトン化、アルコキシ化、カルボキシル化、ラク톤の形成(レトロ)、エステル化、C30 カロテノイドの生合成経路が出現しているように思われた。さらに真核生物では末端器  $\beta$  環から  $\kappa$  環への生合成反応、末端器とポリエン鎖の炭素の脱離反応(ノル)、ゲラニルゲラニルを含む他の化合物との縮合反応、オリド環の形成、末端器の環の開裂反応(セコ)、末端器の環化反応(シクロ)が出現してきた。一方、退化した化学修飾もあり、真核生物ではイソプレンとの縮合反応、及び C30 カロテノイドの生合成経路が消失しているように思われた。(下図、及び [http://carotenoiddb.jp/stats/org\\_statistics\\_phylum.html](http://carotenoiddb.jp/stats/org_statistics_phylum.html) を参照) これらから、谷本係数に基づき系統関係を調べた結果、16S rRNA の系統解析とは異なり、カロテノイドの化学修飾においては、真核生物は古細菌よりもバクテリアに近いことが示唆された。同様の事が、真核生物とバクテリアと古細菌の共通のカロテノイドの数からも示唆された。

([http://carotenoiddb.jp/ORGANISMS/common\\_carotenoids.html](http://carotenoiddb.jp/ORGANISMS/common_carotenoids.html) を参照)

また、再構築したパスウェイの全体像から、生物はおおよそ門のレベルでまとまって棲み分けを行なっているのではないかと思われた。



密度汎関数法を用いた NO 還元用代替触媒探索  
DFT-based screening of NO reduction catalyst

福岡工業大学工学部生命環境科学科 蒲池高志

研究成果概要

現在ガソリン車の排ガスに含まれる NO<sub>x</sub> を還元する触媒として Pd、Pt、Rh などのレアメタルが使われている。これらレアメタルに大きく依存しない社会の構築は長期的課題であり、「元素戦略」として様々な取り組みがなされている。本研究では、密度汎関数法を用いた網羅的な計算により、NO<sub>x</sub> を還元する触媒として最適な2成分合金を探索している。これまでの計算から、N-O 結合開裂の活性化エネルギーは金属の表面エネルギーと相関していることが明らかとなっている。これまでに、密度汎関数計算に基づいた AFLOW データベースに登録されている 337 種類の2成分合金について、最も安定な面の表面エネルギーを京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP プログラムを用いて決定した。平成30年度は、8種類の金属について、N-O 結合開裂および N<sub>2</sub>、O<sub>2</sub> 生成活性化エネルギーや反応熱を計算し、活性化エネルギーが表面エネルギーと高い相関関係にあることが判明した。この結果に基づき、将来的には新触媒の開発につなげたい。

発表論文(謝辞なし)

1. “Combined theoretical and experimental study on alcoholysis of amides on CeO<sub>2</sub> surface: A catalytic interplay between Lewis acid and base sites”  
T. Kamachi, S. M. A. H. Siddiki, Y. Morita, Md. N. Rashes, K. Kon, T. Toyao, K. Shimizu, K. Yoshizawa, *Catalysis Today*, **303**, 256-262, (2018).
2. “Dynamic Kinetic Resolution of N-Protected Amino Acid Esters via Phase-Transfer Catalytic Base Hydrolysis”  
E. Yamamoto, K. Wakafuji, Y. Furutachi, K. Kobayashi, T. Kamachi, M. Tokunaga, *ACS Catalysis* **8**, 5708-5713, (2018).
3. “Density Functional Theory Calculations of Oxygen Vacancy Formation and Subsequent Molecular Adsorption on Oxide Surfaces”  
Y. Hinuma, T. Toyao, T. Kamachi, Z. Maeno, S. Takakusagi, S. Furukawa, I. Takigawa, K. Shimizu, *The Journal of Physical Chemistry C*, **122**, 29435-29444, (2018).

菌類の系統解析  
Phylogenetic analysis of fungi

信州大学農学部 齋藤勝晴

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、アツギケカビ目菌を含む菌類の全体のゲノムレベルでの系統解析を行った。アツギケカビ目はグロムス亜門とともに菌根共生の進化を考えるうえで重要な菌群であり、Bidartondo ら (2011) は、アツギケカビ目はグロムス亜門よりも祖先的な系統群であると提唱している。しかし、詳細な系統関係は不明である。そこで、ゲノム配列を用いて菌類を広くカバーする約 50 種を対象に系統解析を行った。オーソログ遺伝子を数百個抽出し、アミノ酸配列をもとに RAxML または Phylobayes を用いて最尤系統樹を作成した。アツギケカビ目とグロムス亜門はケカビ門に含まれ、さらにケカビ門はクサレケカビ亜門、グロムス亜門、アツギケカビ目、ウンベロプシス目、ケカビ目の順で分岐することが高い確率で支持された。今後はさらにアツギケカビ目菌類のゲノム構造について詳細に解析する予定である。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析

Metagenomics of prokaryotes and viruses in pelagic Lake Biwa

産業技術総合研究所 生物プロセス研究部門 生物資源情報基盤研究グループ 岡崎 友輔

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、琵琶湖を中心とする様々な大水深淡水湖の水中に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析を行った。琵琶湖においては9か月×2水深、その他の湖（池田湖・本栖湖・十和田湖・支笏湖・Maggiore湖・Zurich湖等）においては1回の調査で3～5水深より採水し、得られた湖水からフィルターにて細菌画分(0.2–5.0 μm)を分離、DNAを抽出し、Hiseq, Miseq または Nextseq シーケンサーによるショットガンメタゲノムシーケンスを行った。さらに琵琶湖についてはウイルス画分(<0.2 μm)の濃縮・精製サンプルよりDNAを抽出し、ウイルスのショットガンメタゲノムシーケンスを行った。得られたシーケンスリードはSPAdesを用いてアセンブリした。得られた細菌ゲノムの品質はcheckMにて、ウイルスゲノムの品質はterminal redundancyの有無によって評価した。ゲノム上の遺伝子はProdigalによってアミノ酸配列に翻訳した後、UniRef90 データベースに対するDIAMONDによる相同性検索等によってアノテーションした。

その結果、これまでに琵琶湖のサンプルにおいて、57の細菌ドラフトゲノム、183の完全長ウイルス配列が得られた(その他の湖のサンプルは解析中である)。細菌ゲノムからはacI, LD12, Limnohabitans,等の、淡水湖において量的に優占し、物質循環や微生物食物網において重要な機能を担うと考えられる系統のゲノムが多数得られたほか、深水層のメタゲノム解析からは、琵琶湖深水層で優占するCL500-11, Nitrospira, MGI等の系統のゲノムも得られた。そのうち、CL500-11は深水層の全細菌の現存量の約25%を占めることもある特に優占的な系統であるが、ゲノム上にコードされた遺伝子の解析から、ペプチドのトランスポーター遺伝子を多数保有していることや、光の届かない深水層に生息しているにも関わらずロドプシン遺伝子を保有していることなど、興味深い生理・生態的な特性が明らかとなった。さらに欧州や北米の湖で同様にして得られたCL500-11ゲノムとの比較からは、琵琶湖に生息するCL500-11と大陸由来のものとの間に「種」レベルの遺伝的な差異が見られ、異なる湖に生息する細菌の間に明確な遺伝的な隔離があることが示された。一方、ウイルスメタゲノムからは優占的な細菌系統に感染すると見られるウイルスや、ホストは不明だが現存量が非常に多いウイルス等、生態学的に重要とみられるウイルスの候補を新たに多数特定することができた。

発表論文(謝辞あり)

Mehrshad M, Salcher MM, Okazaki Y, Nakano S, Šimek K, Andrei AS, Ghai R. (2018) Hidden in plain sight—highly abundant and diverse planktonic freshwater Chloroflexi. *Microbiome* 6: 176.

高次高調波によるアト秒 X 線パルスの増幅  
Amplification of X-ray attosecond pulses

Department of Physics, UPC-Polytechnic University of Catalonia, Carles Serrat

We have investigated the amplification of attosecond pulses in different atomic gases. The research is based on the single-electron numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation (TDSE) for atomic processes in intense laser fields. We have characterized XUV amplification by synchronization of a strong IR fs light pulse with a weak XUV attosecond pulse in Ar. Our results have been compared with experimental results and have nicely confirmed the amplification in the 25 - 50 eV photon energy region.

The results allow us to give a physical explanation of the amplification processes in Ar, which are based on the recombination of highly excited Rydberg states to the 3s sub-valence shell, where atoms are strongly ionized. An study of the different scattering processes has revealed different mechanisms for the amplification, which include continuum-continuum parametric processes (C-C) induced by the XUV pulse. These type of amplifications have not been described yet. The studies for the characterization of such C-C processes include the monotorization of the electron states in time, which is accomplished by projecting the time-dependent electron wave function on the field-free eigenstates and adopting statistical studies for the different absorption and emission. This is a truly computationally time-and-memory consuming study which results however essential to understand the physical mechanisms behind the amplification processes. These C-C processes would in principle allow the amplification of frequencies which are not necessarily linked to the bound states structure of the atomic system, and therefore those are candidates to observe amplification in atoms with a higher ionization potential, such as He and Ne.

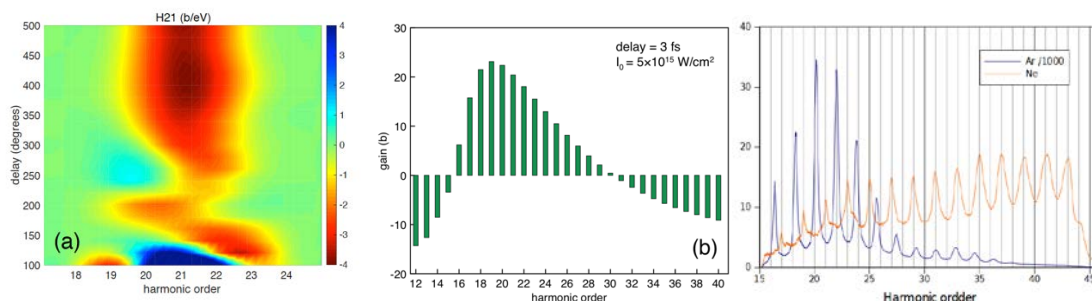


Figure: (a) Amplification map of H21 in Ar. (b) Photon energy region of the amplification in Ar. Right panel: Experimental results for Ar and Ne.



スギゲノムの解読と解析

Genome sequencing and analysis of Japanese cedar

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻 笠原 雅弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スギゲノムの解読と解析を行う。また、利用開始から間もないため、主に今後の京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの利用計画について述べる。

スギ花粉症は日本で大きな社会問題となっており、その解決は喫緊の課題である。特に、高度成長期に植えられ、花粉を大量に放出している(伐採にはちょうど適した時期の)スギ人工林を伐採し新たに植林を行う(条件が悪い土地ではあるいは植えない)ことが重要である。しかし、輸入材と比べた場合に日本林業の商業的な採算性は厳しく、特に私有地のスギ人工林の植え替えを促進するには多額の補助金を注ぎ込む必要があり、財政事情が厳しい政府あるいは地方自治体ではこの足を踏んでいた。

また、スギ花粉を出さないいわゆる無花粉スギ(雄性不稔スギ)はスギ花粉症への抜本的対策として期待されているが、自然変異体を利用しているため原因遺伝子は不明であり、各地の気候に適し商業的に優れた特性を持つ様々な雄性不稔スギを大量生産することはできない。

これらの課題を解決するための基礎研究として我々はスギゲノム配列を解読している。スギゲノム(約 11Gb)はヒトゲノム(約 3Gb)の 3.8 倍の大きさを持ち、予備解析の結果、ヒトゲノムより遙かに解読が難しいゲノム構造(極めて頻度の高い反復配列)を持っていることが分かっており、ゲノム解読には予測不能な極めて大きな計算量を必要とすることが予想されている。

このため、今後改良していく自作のソフトウェアや MaSuRCA, Flye, HERA, wtdbg2, Pilon, BUSCO などの、各種ゲノムアセンブラーや各種ゲノム解析ソフトを用いてスギゲノム概要配列の構築・解析を行っていくことを予定している。

本年度は弊ラボの研究員である藤野健と共に本解析を行い、本アカウントでは主に環境構築やスーパーコンピュータシステム毎に必要なカスタマイズを行った。

発表論文(謝辞あり)

該当無し

発表論文(謝辞なし)

該当無し

スギゲノムの解読と解析

Genome sequencing and analysis of Japanese cedar

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻 笠原研究室 藤野 健

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スギゲノムの解読と解析を行う。また、利用開始から間もないため、今後の京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの利用計画について述べる。

スギ花粉症は日本で大きな社会問題となっており、その解決は喫緊の課題である。特に、高度成長期に植えられ、花粉を大量に放出している(伐採にはちょうど適した時期の)スギ人工林を伐採し新たに植林を行う(条件が悪い土地ではあるいは植えない)ことが重要である。しかし、輸入材と比べた場合に日本林業の商業的な採算性は厳しく、特に私有地のスギ人工林の植え替えを促進するには多額の補助金を注ぎ込む必要があり、財政事情が厳しい政府あるいは地方自治体では二の足を踏んでいた。

また、スギ花粉を出さないいわゆる無花粉スギ(雄性不稔スギ)はスギ花粉症への抜本的対策として期待されているが、自然変異体を利用しているため原因遺伝子は不明であり、各地の気候に適し商業的に優れた特性を持つ様々な雄性不稔スギを大量生産することはできない。

これらの課題を解決するための基礎研究として我々はスギゲノム配列を解読している。スギゲノム(約 11Gb)はヒトゲノム(約 3Gb)の 3.8 倍の大きさを持ち、予備解析の結果、ヒトゲノムより遙かに解読が難しいゲノム構造(極めて頻度の高い反復配列)を持っていることが分かっており、ゲノム解読には予測不能な極めて大きな計算量を必要とすることが予想されている。

このため、今後改良していく自作のソフトウェアや MaSuRCA, Flye, HERA, wtdbg2, Pilon, BUSCO などの、各種ゲノムアセンブラーや各種ゲノム解析ソフトを用いてスギゲノム概要配列の構築・解析を行っていくことを予定している。

本年度は PacBio リードを入力とし、wtdbg2 を用いて概要配列の構築を目指した。また、アセンブリ結果の遺伝子アノテーションのためには高精度な配列が必要となるため、PacBio リードや Illumina リードを合わせたエラー訂正の手法を検討し、Pilon や自作プログラムなどを組み合わせ合わせたパイプラインの構築に向けて取り組んだ。

発表論文(謝辞あり)

該当無し

発表論文(謝辞なし)

該当無し

タンパク質の電子状態計算  
Electronic state calculation of proteins

東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門 平野 敏行

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、タンパク質の電子状態計算を行い、理論化学的手法によりタンパク質の物性・反応性を理解することを目的としている。

使用するプログラムは自らが開発している量子化学計算プログラム ProteinDF である。ProteinDFは、QM/MM 法やFMO 法・分割統治法などと異なり、計算領域を分割することなく、金属を含むタンパク質のカノニカル分子軌道計算を達成できる点が特長である。ProteinDF のコードは C++で記述され、MPI/OpenMP によるハイブリッド並列計算を行うことができる。

タンパク質の電子状態計算を達成するためには、高精度な初期値を作成することも重要である。そこで擬カノニカル局在化軌道(QCLO)法を利用した自動計算 Python プログラム QCLObot を開発している。QCLObot では、YAML フォーマットで用意した計算シナリオに基づき、適宜サブユニットの作成・末端処理を行い、QCLO を作成して巨大分子の電子状態計算を達成することができる。最近では、PDB から得られたタンパク質構造から、水素付加や構造緩和を行い、量子化学計算に耐えうる分子構造のモデリングを行う機能も追加している。

本年度は計算環境の構築、テスト計算を行った。ProteinDF や QCLObot ならびに Python モジュールなどを利用した関連ツールは github をはじめとするインターネット上で管理されており、それら最新パッケージの取得およびビルドに手間取ってしまった。今後、いくつかの小規模タンパク質のテスト計算からはじめ、電子状態計算の事例を増やしていきたい。

アミノアシル tRNA 合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源

Phylogenetic analysis of aminoacyl tRNA synthetases to demonstrate the mosaic origin of mitochondria

東京大学大学院新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻 浜口 悠貴

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、真核生物 81 生物種・古細菌 80 生物種・細菌 149 生物種の合計 310 生物種の ARS20 種類を取得し、RAxML の最尤法を用いて系統解析を用いて、真核生物のミトコンドリア ARS の由来を明らかにすることを試みた。解析の結果、以下の3点が示唆された。

- ①ミトコンドリア ARS は数多くの  $\alpha$ - proteobacteria 以外の細菌が由来である。
- ②真核生物のスーパーグループ毎にミトコンドリア ARS の由来となる細菌が異なる。
- ③ミトソームやハイドロジェノソームのようなミトコンドリア退化オルガネラを持つ真核生物で、ミトコンドリア ARS が数種類保持されている。

今後は引き続き PSI-BLAST を用いた相同性検索を行い、21 番目のアミノ酸セレノシステイン(Sep)に対応する ARS である、SepRS が真核生物・古細菌・細菌にどのように分布しているかを明らかにし、RAxML などの最尤法を用いてミトコンドリア ARS と細菌 ARS の系統関係を明らかにしていく。さらに、HMMER や MEME を用いてドメインとモチーフ構造を探索し、MMSeq2 を用いた配列クラスタリングの解析を行うなど bioinformatics 解析を適宜行っていき、ミトコンドリア ARS が  $\alpha$ - proteobacteria だけではなく様々な細菌由来になった所以について探っていく。

発表論文(謝辞なし) 修士論文(科学)

Phylogenetic analysis of aminoacyl tRNA synthetases to demonstrate the mosaic origin of mitochondria



システム稼働状況

スーパーコンピュータシステム

- システム稼働時間
- 部門別利用状況
- バッチジョブ処理状況
- 応用ソフトウェア利用状況

日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

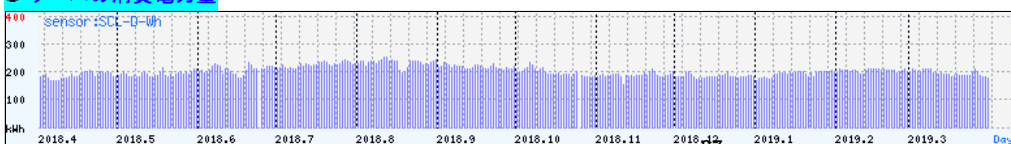
● システム稼働時間

システム名	稼働状況													年間運転時間(h)			システム運転状況
	Day	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dec	Jan	Feb	Mar	稼働	保守	停止	
大規模共有メモリスサーバ (uv1/uv2)	1	[稼働]													8742.5 (h)	17.5 (h)	システム稼働率: 99.8%
	5																
	10																
	15																
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	1	[稼働]													8736.0 (h)	24.0 (h)	システム稼働率: 99.7%
	5																
	10																
	15																
GPUクラスタ (pk01-pk14)	1	[稼働]													8760 (h)		システム稼働率: 100%(システム停止なし)
	10																
	20																
	30																

● 計算サーバの月別システム稼働時間

システム名	年月	稼働時間(b)	保守時間(c)	故障時間(d)	運転時間(e=b+c+d)	稼働率(b/e)
大規模共有メモリスサーバ (uv1/uv2)	4月	720:00			720:00	100%
	5月	744:00			744:00	100%
	6月	720:00			720:00	100%
	7月	744:00			744:00	100%
	8月	742:00	2:00		744:00	99%
	9月	720:00			720:00	100%
	10月	728:30		15:30	744:00	97%
	11月	720:00			720:00	100%
	12月	744:00			744:00	100%
	1月	744:00			744:00	100%
	2月	672:00			672:00	100%
	3月	744:00			744:00	100%
	計	8742:30	2:00	15:30	8760:00	99.8%
	月平均	728:32	0:10	1:17	729:59	99.8%
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	4月	720:00			720:00	100%
	5月	744:00			744:00	100%
	6月	720:00			720:00	100%
	7月	744:00			744:00	100%
	8月	744:00			744:00	100%
	9月	720:00			720:00	100%
	10月	720:00	24:00		744:00	96%
	11月	720:00			720:00	100%
	12月	744:00			744:00	100%
	1月	744:00			744:00	100%
	2月	672:00			672:00	100%
	3月	744:00			744:00	100%
	計	8736:00	24:00		8760:00	99.7%
	月平均	728:00	2:00		730:00	99.7%
GPUクラスタ (pk01-pk14)	4月	720:00			720:00	100%
	5月	744:00			744:00	100%
	6月	720:00			720:00	100%
	7月	744:00			744:00	100%
	8月	744:00			744:00	100%
	9月	720:00			720:00	100%
	10月	744:00			744:00	100%
	11月	720:00			720:00	100%
	12月	744:00			744:00	100%
	1月	744:00			744:00	100%
	2月	672:00			672:00	100%
	3月	744:00			744:00	100%
	計	8760:00			8760:00	100.0%
	月平均	730:00			730:00	100.0%

● サーバの消費電力量





システム稼働状況

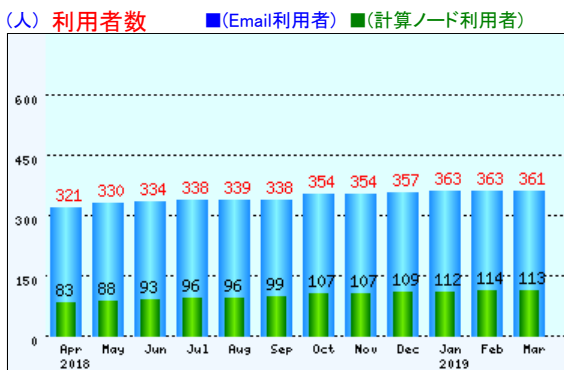
スーパーコンピュータシステム

- システム稼働時間
- 部門別利用状況
- バッチジョブ処理状況
- 応用ソフトウェア利用状況

日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 利用者数の月別推移

項番	部局名	利用者 (人)	計算ノード 利用者数	アプリ 登録者数
1	化学研究所	154	(42)	(154)
2	エネルギー理工学研究所	3	(1)	(3)
3	生存圏研究所			
4	防災研究所	2	(1)	(2)
5	宇治地区事務部	95		(95)
6	理学研究科・理学部	9	(4)	(9)
7	医学研究科・医学部	2	(1)	(2)
8	附属病院			
9	再生医科学研究所			
10	薬学研究科・薬学部	5	(2)	(5)
11	工学研究科・工学部	48	(23)	(48)
12	エネルギー科学研究科	6	(6)	(6)
13	農学研究科・農学部	5	(3)	(5)
14	総合人間学部			
15	人間・環境学研究科	4	(3)	(4)
16	経済研究所			
17	数理解析研究所			
18	情報学研究科			
19	生命科学研究所			
20	学術情報メディアセンター			
21	生態学研究センター			
22	高等研究院	4	(4)	(4)
23	次世代開拓研究ユニット			
24	先端医工学研究ユニット			
25	触媒・電池元素戦略ユニット			
26	iPS細胞研究所			
27	ウイルス研究所			
28	福井謙一記念研究センター	1	(1)	(1)
29	産官学連携本部	3	(3)	(3)
30	学際融合教育研究推進センター	1	(1)	(1)
31	その他	19	(18)	(19)



● 部局別のCPU使用時間

項番	部局名	共有メモリサーバ	CPUクラスター	GPUクラスター	ログインノード
1	化学研究所	6277日09時間13分	57825日12時間10分	3870日10時間09分	11日19時間09分
2	エネルギー理工学研究所				
3	生存圏研究所				
4	防災研究所	36日09時間40分			00時間43分
5	宇治地区事務部				
6	理学研究科・理学部		06時間16分		
7	医学研究科・医学部				
8	附属病院				
9	再生医科学研究所				
10	薬学研究科・薬学部			02時間57分	00時間04分
11	工学研究科・工学部	7018日04時間11分	51217日05時間12分	2436日03時間09分	3日10時間18分
12	エネルギー科学研究科	10日06時間19分	6889日07時間15分	940日07時間50分	09時間03分
13	農学研究科・農学部	1日04時間32分	629日18時間48分	90日07時間30分	13日08時間30分
14	総合人間学部				
15	人間・環境学研究科		1031日16時間21分	18日19時間24分	02時間35分
16	経済研究所				
17	数理解析研究所				
18	情報学研究科				
19	生命科学研究所				
20	学術情報メディアセンター				
21	生態学研究センター				
22	高等研究院	05時間47分	01時間57分	00時間53分	00時間01分
23	次世代開拓研究ユニット				
24	先端医工学研究ユニット				
25	触媒・電池元素戦略ユニット				
26	iPS細胞研究所				
27	ウイルス研究所				
28	福井謙一記念研究センター		577日13時間50分	15時間10分	00時間02分
29	産官学連携本部		02時間23分	00時間53分	05時間43分
30	学際融合教育研究推進センター				
31	その他	635日16時間51分	44595日04時間17分	1448日14時間40分	16日02時間34分



## システム稼働状況

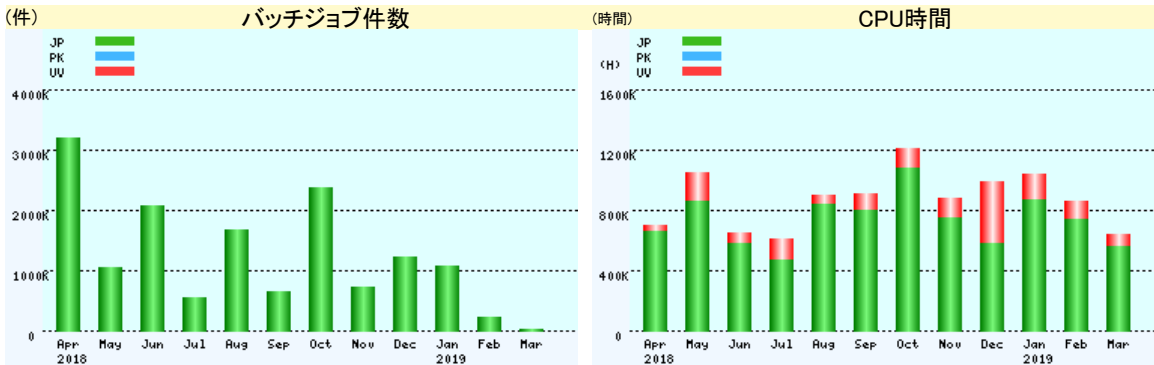
スーパーコンピュータシステム

- システム稼働時間
- 部門別利用状況
- バッチジョブ処理状況
- 応用ソフトウェア利用状況

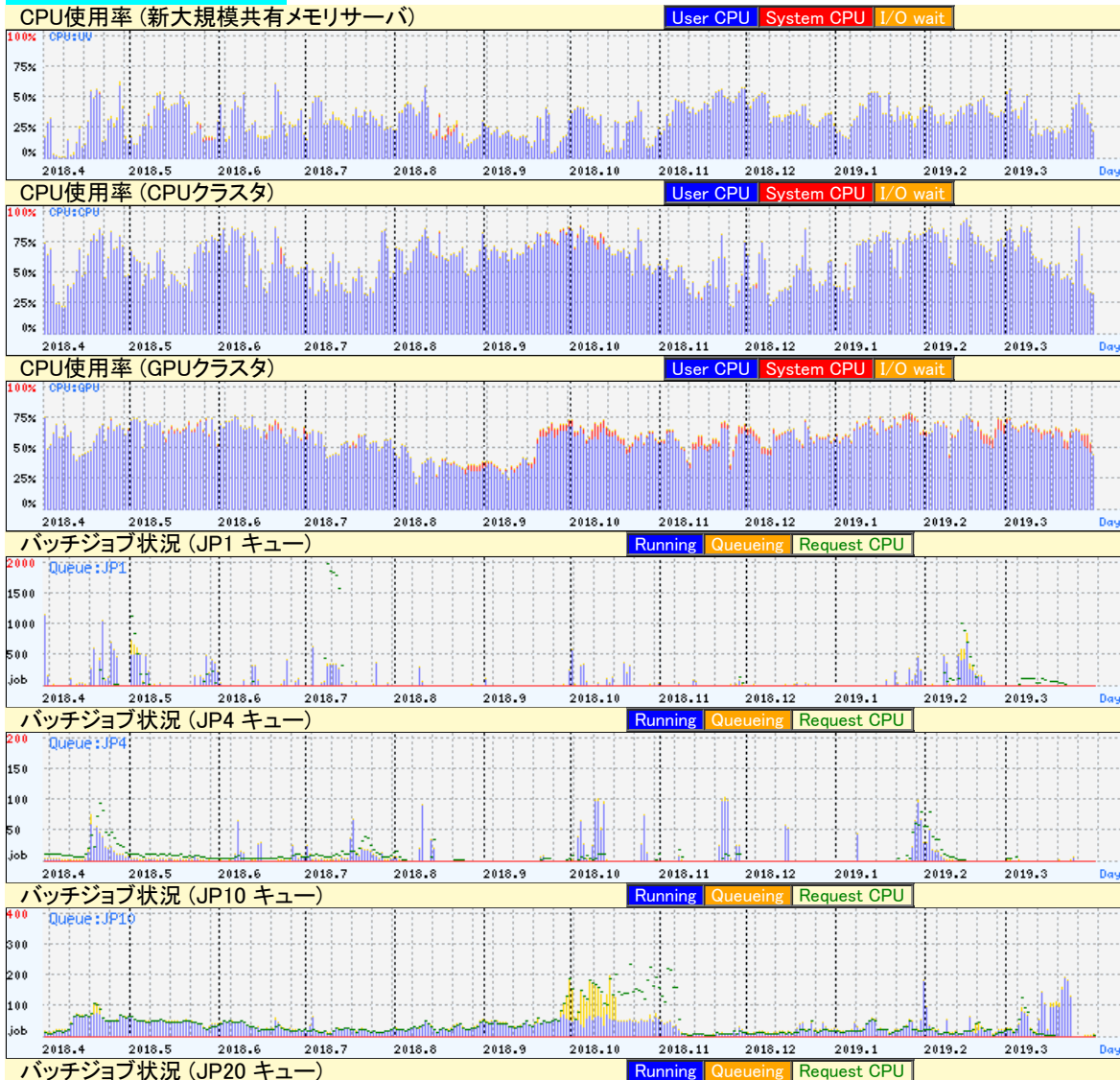
日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

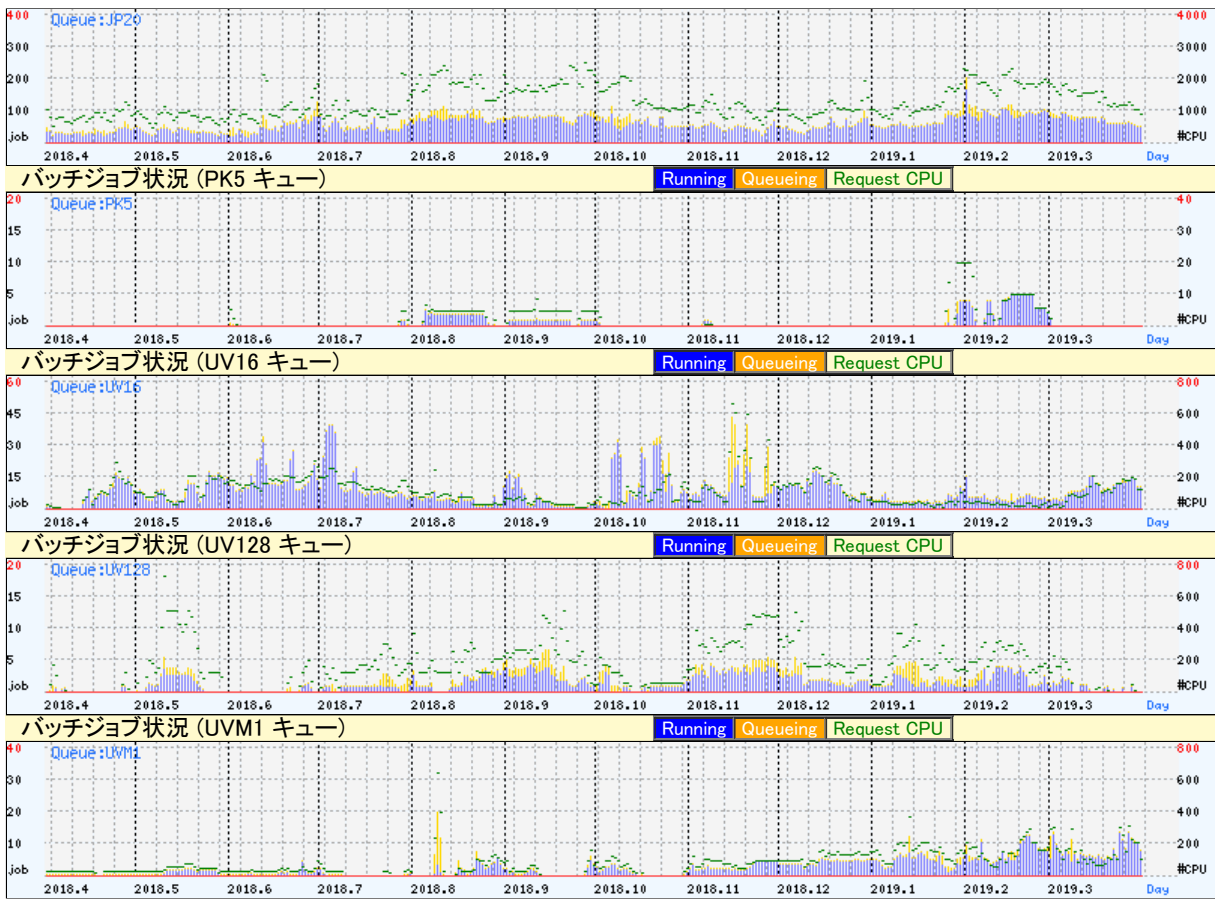
### ● バッチジョブ実行時間 (大規模共有メモリサーバ)

項番	項目	JP1,JP4,JP10,JP20 キュー	PK5 キュー	UVM1,UV16,UV128 キュー
1	総ジョブ件数	14976758	415	17901
2	総CPU時間	368749日9時間30分	178日0時間21分	69083日17時間25分
3	平均CPU時間	0時間35分	10時間16分	3日20時間36分
4	最大CPU時間	19日9時間51分	8時間44分	83日8時間15分
5	平均ジョブ実行時間	0時間05分	10時間45分	4時間56分
6	最大ジョブ実行時間	23時間37分	8時間45分	22時間16分
7	平均ジョブ待ち時間	0時間00分	0時間21分	0時間37分
8	最大ジョブ待ち時間	8時間15分	0時間22分	8時間39分



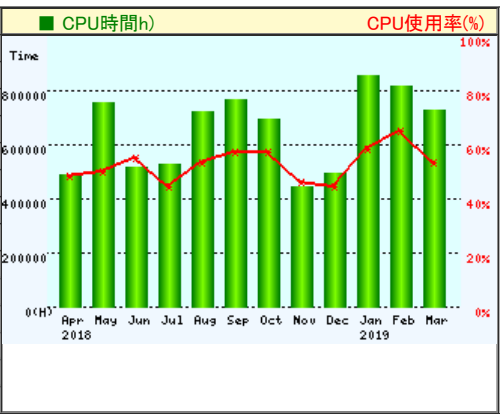
### ● 計算サーバのCPU使用率





● 月別のCPU使用時間とバッチジョブ件数(2018年度)

月	CPU使用率	CPU時間	バッチジョブ件数
4月	49.4 %	20590日06時間52分	3207088
5月	51.9 %	31615日20時間16分	1057682
6月	56.9 %	21675日17時間48分	2090537
7月	45.0 %	22212日18時間56分	564111
8月	54.9 %	30178日00時間12分	1694438
9月	58.7 %	32026日08時間29分	656876
10月	58.9 %	29092日17時間28分	2386545
11月	47.1 %	18727日05時間08分	730006
12月	45.8 %	20748日23時間02分	1245887
1月	59.9 %	35768日04時間22分	1098603
2月	66.7 %	34210日08時間18分	227368
3月	54.3 %	30471日16時間39分	35933
年度計	-	327318日03時間35分	14995074
月平均	54.1 %	27276日12時間17分	1249589







## システム稼働状況

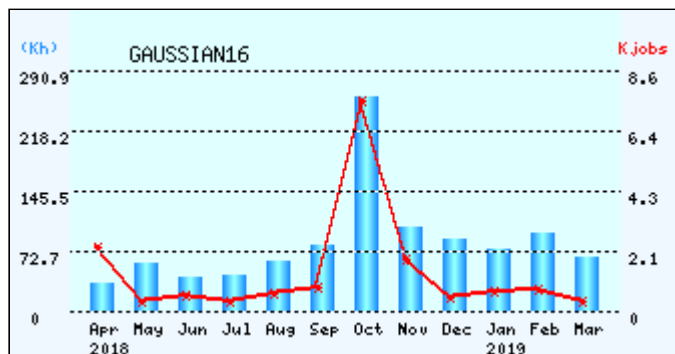
スーパーコンピュータシステム

- システム稼働時間
- 部門別利用状況
- バッチジョブ処理状況
- 応用ソフトウェア利用状況

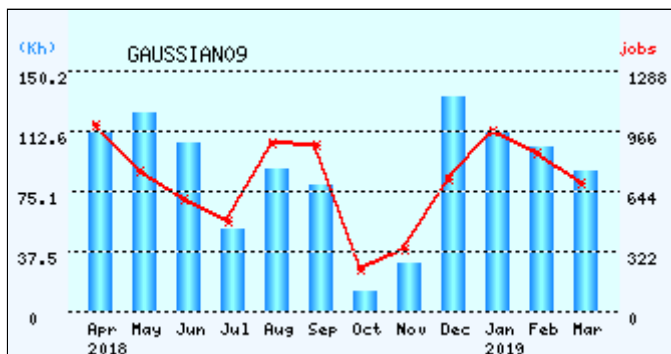
日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

### ● 応用ソフトウェア利用時間 (ジョブ件数とCPU時間)

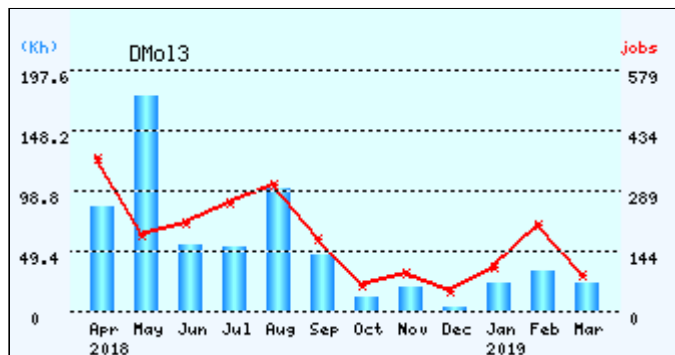
ジョブ件数とCPU時間



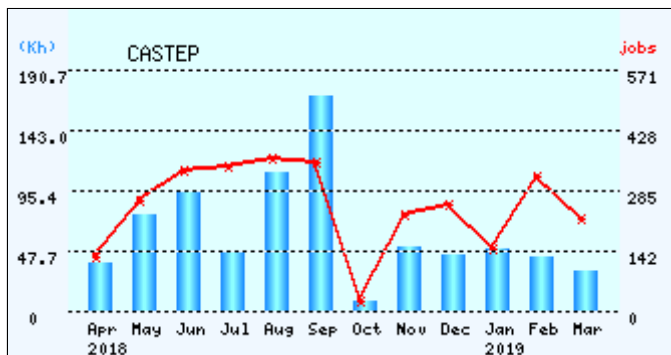
ジョブ件数とCPU時間



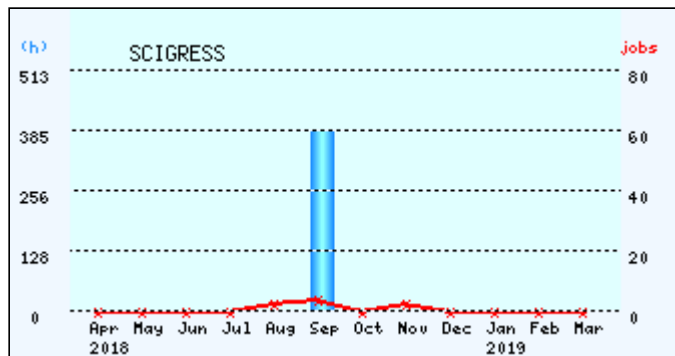
ジョブ件数とCPU時間



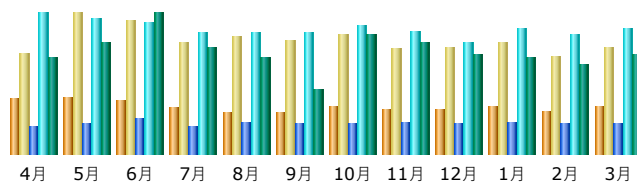
ジョブ件数とCPU時間



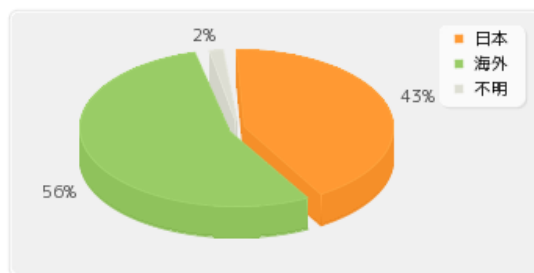
ジョブ件数とCPU時間



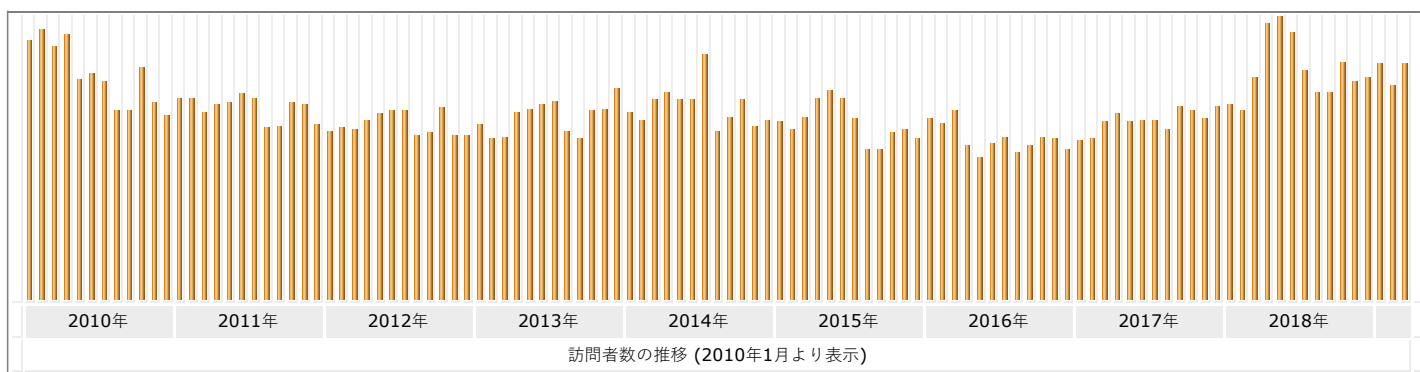
更新日時：2019年4月1日 00時30分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	9,446	17,249	106,993	565,100	44.52 GB
5月	9,648	23,952	123,233	542,882	52.13 GB
6月	9,129	22,810	139,109	530,658	65.48 GB
7月	7,868	19,012	113,018	489,174	50.00 GB
8月	7,128	20,131	130,212	486,902	44.83 GB
9月	7,119	19,423	121,149	485,175	30.42 GB
10月	8,132	20,326	124,412	516,752	55.65 GB
11月	7,468	17,832	127,627	494,428	52.13 GB
12月	7,610	18,204	122,377	450,402	46.56 GB
1月	8,056	19,023	127,744	502,490	44.48 GB
2月	7,337	16,711	124,493	478,465	41.65 GB
3月	8,066	18,210	124,858	507,975	45.99 GB
合計	97,007	232,883	1,485,225	6,050,403	573.84 GB



国内外の利用比率（2018年度）



訪問者数の推移（2010年1月より表示）



# 2018年度 ゲノムネットサービス利用統計

西川 和嗣(日本ヒューレット・パッカード株式会社)

## KEGG 生命システム情報統合データベース

KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) はシステム情報、ゲノム情報、ケミカル情報、疾患・医薬品情報に大別された 16 のデータベースから構成される「生命システム情報統合データベース」です。ゲノム情報とケミカル情報は生命の基本部品である DNA・RNA・タンパク質と低分子化合物・糖鎖・脂質等の分子構造情報、システム情報は基本部品から構成される生命システム、すなわち細胞・個体などの高次機能情報です。また、疾患・医薬品情報はシステムに対するゆらぎに関する高次機能情報です。

カテゴリ	データベース	内容
システム情報	KEGG PATHWAY	KEGG パスウェイマップ
	KEGG BRITE	BRITE 機能階層
	KEGG MODULE	機能単位 KEGG モジュール
ゲノム情報	KEGG ORTHOLOGY	KO オーソロググループ
	KEGG GENOME	全ゲノム配列既知の KEGG 生物種
	KEGG GENES	各生物種の遺伝子カタログ
	KEGG SSDB	GENES の配列類似度とベストヒット情報
ケミカル情報	KEGG COMPOUND	代謝物質など低分子化合物
	KEGG GLYCAN	糖鎖
	KEGG REACTION	生体内化学反応
	KEGG RCLASS	反応クラス
	KEGG ENZYME	酵素
疾患・医薬品情報	KEGG NETWORK	疾患関連のネットワーク要素
	KEGG VARIANT	ヒト遺伝子バリエーション
	KEGG DISEASE	ヒト疾患
	KEGG DRUG	医薬品
	KEGG DGROUP	医薬品グループ
	KEGG ENVIRON	生薬、天然物など
	KEGG MEDICUS	疾患・医薬品の統合リソース

## ゲノムネットデータベースリソース

サービス	内容
KEGG OC	KEGG OC (KEGG Ortholog Cluster) へのインタフェース
Virus-Host DB	ウイルスとその宿主のデータベース
Taxonomy	生物種分類の早見表および検索

## ゲノムネットの計算ツール

ゲノムネットでは以下の3つのカテゴリで計算サービスを提供しています。配列解析の標準的なプログラム以外はすべて京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンターで開発されたものです。

### 配列解析

サービス	内容
BLAST FASTA	配列類似性検索
MOTIF	配列モチーフ検索
CLUSTALW MAFFT PRRN TREE	配列のマルチプルアライメントおよび進化系統樹解析

### ゲノム情報解析

サービス	内容
ViPTree	ウイルスゲノムの proteomic tree を生成

KAAS	ゲノムまたはESTコンティグの自動アノテーションとパスウェイマッピング
MAPLE	ゲノム・メタゲノムに潜む代謝・生理機能ポテンシャル評価システム
EGassembler	大量のESTデータからコンセンサスコンティグ自動生成
GENIES	カーネル法での多様なオミクスデータ統合による遺伝子ネットワーク予測
DINIES	医薬品一標的ネットワーク予測

#### ケミカル情報解析

サービス	内容
SIMCOMP	化合物類似構造検索
SUBCOMP	化合物部分構造検索
KCaM	糖鎖類似構造検索
PathComp	化合物間の反応経路計算
PathSearch	類似反応経路検索
PathPred	分解・合成反応経路予測
E-zyme	化合物間の酵素反応と酵素遺伝子予測

#### DBGET/LinkDB: ゲノムネット統合データベース検索システム

DBGET は世界中に存在する分子生物学データベースを対象とした統合データベースシステムです。ゲノムネットや KEGG のバックボーンシステムとして利用されています。DBGET でサポートする分子生物学データは、各データベースのエントリ（ページ）をノード、エントリ間の参照情報をエッジ（リンク）とした膨大なグラフとして表現されます。各データベースエントリはデータベース名とエントリ名（またはアクセス番号）のペアで指定され、これは一般には対応するページのURLに変換することができます。このような名前空間を考え、名前同士のつながりを蓄積したのが LinkDB データベースです。

DBGET/LinkDB システムでは多数のデータベースを統合するために、データベース利用条件の違い（ミラーリング可、キーワードインデクシング可、リンクのみ）を考慮して、各データベースを以下の5つのカテゴリーに分類しています。

カテゴリー	検索コマンド			備考
	bget	bfind	blink	
1. KEGGデータベース	yes	yes	yes	ゲノムネットでミラーリング
2. その他のDBGETデータベース	yes	yes	yes	
3. Web上の検索可能データベース	no	yes	yes	各サイトのサービスを利用
4. Web上のリンクのみのデータベース	no	no	yes	
5. PubMedデータベース	yes	no	yes	

#### KEGGデータベース（カテゴリー1）

ゲノムネットが提供するKEGGデータベースは以下の通りで、多くのものは毎日更新されています。

データベース	内容	備考
brite	機能階層・オントロジー	KEGG BRITE
pathway	パスウェイマップ	KEGG PATHWAY
module	KEGGモジュール	
orthology	オーソログ (KO) グループ	KEGG ORTHOLOGY
genome	KEGG生物種	KEGG GENOME
mgenome	メタゲノム	
genes	高精度ゲノム中の遺伝子カタログ	KEGG GENES
mgenes	メタゲノム中の遺伝子カタログ	
compound	化合物	KEGG COMPOUND
glycan	糖鎖	KEGG GLYCAN
reaction	化学反応	KEGG REACTION
rclass	反応クラス	
enzyme	酵素分類	
network	疾患関連のネットワーク要素	KEGG NETWORK
variant	ヒト遺伝子バリエーション	KEGG VARIANT

disease	ヒト疾患	KEGG DISEASE
drug	医薬品	KEGG DRUG
dgroup	医薬品グループ	
environ	生薬・天然物、環境物質、ほか	KEGG ENVIRON
expression	マイクロアレイ遺伝子発現プロフィール	著者による登録

### その他のDBGETデータベース (カテゴリ-2)

ゲノムネットがミラーリングしているデータベースは以下の通りです。

データベース		内容	元サイト
refseq	refnuc	核酸塩基配列	NCBI
	refpep	タンパク質アミノ酸配列	
uniprot	swissprot	タンパク質アミノ酸配列	ExPASy / EBI
	trembl		
refgene	rg001	海洋微生物メタゲノムのリファレンス遺伝子セット (OM-RGC)	EMBL
	rg002	ヒト腸内細菌メタゲノムのリファレンス遺伝子セット (IGC)	BGI/EMBL
	rg003	海洋微生物メタゲノムのリファレンス遺伝子セット (MATOU)	Tara Oceans
egenes		ESTコンティグとしての遺伝子カタログ	京都大学
egenome		ESTコンティグのデータセット	京都大学
pdb		タンパク質立体構造	RCSB
pdbstr		PDBアミノ酸配列	京都大学
epd		真核生物プロモーター	ISREC
motifdic	prosite	タンパク質配列モチーフ	ExPASy
	pfam		Sanger
	ncbi-cdd		NCBI
pmd		変異タンパク質	国立遺伝学研究所
aaindex		アミノ酸指標	京都大学
carbbank		糖鎖構造 (更新なし)	帝京大学/ジョージア大学
prosdoc		PROSITE文献	ExPASy

### Web上の検索可能データベース (カテゴリ-3)

ゲノムネットでキーワード検索のみできるデータベースは以下の通りです。

データベース		内容	元サイト
insdc	genbank	核酸塩基配列	NCBI
	ddbj		国立遺伝学研究所
	embl		EBI
ncbi-gene		Entrez 遺伝子データベース	NCBI
unigene		UniGene 遺伝子データベース	NCBI
ensembl		真核ゲノムアノテーション	Ensembl
hgnc		ヒト遺伝子名	HGNC
brc-dna		ヒト完全長cDNAクローン	理研BRC
brc-epd		植物の完全長cDNAクローン	理研BRC
go		遺伝子オントロジー	GO
interpro		タンパク質ファミリー・ドメイン	EBI
omim		遺伝病	NCBI
pubchem		PubChem 化合物データベース	NCBI
chebi		ChEBI 化合物データベース	EBI
pdb-ccd		PDB リガンド辞書	PDB
lipidmaps		脂質代謝	LIPIDMAPS
lipidbank		脂質	LipidBank
knapsack		植物二次代謝産物	KNAPSAcK

hmdb	ヒトメタボローム	HMDB
3dmet	天然化合物の立体構造	3DMET
drugbank	医薬品とターゲット	DrugBank
ligandbox	医薬品の立体構造	LigandBox
sider	医薬品の副作用	SIDER

#### LinkDB検索のみ可能なデータベース (カテゴリ-4)

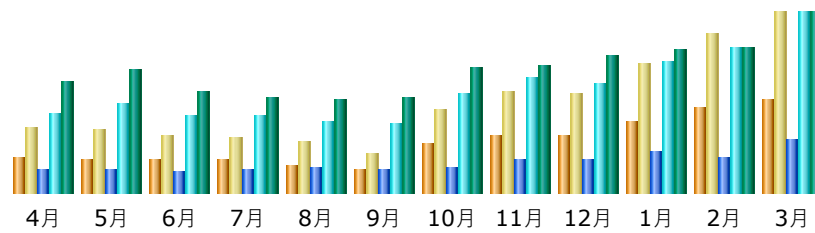
LinkDBで検索可能なデータベースは以下のとおりです。  
[https://www.genome.jp/linkdb/link\\_only.html](https://www.genome.jp/linkdb/link_only.html)

#### PubMedデータベース (カテゴリ-5)

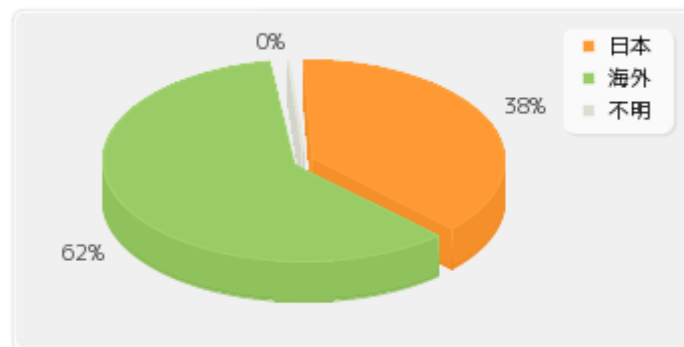
データベース	内容	元サイト
pubmed	医学・生化学文献データベース	NCBI

# 月別のWWWサービス利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 16時21分



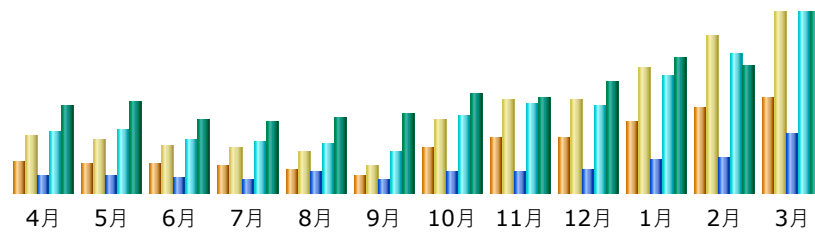
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,160,346	2,141,085	8,460,523	29,397,002	1084.90 GB
5月	1,121,860	2,120,135	8,736,995	33,400,977	1184.83 GB
6月	1,095,900	1,889,572	7,888,365	28,856,719	975.58 GB
7月	1,080,996	1,854,790	8,357,963	28,969,276	928.45 GB
8月	922,891	1,708,523	9,347,320	26,826,953	891.88 GB
9月	780,433	1,296,522	8,926,857	26,217,938	911.22 GB
10月	1,604,220	2,771,565	9,624,184	37,420,074	1213.68 GB
11月	1,905,585	3,385,597	12,125,695	43,119,136	1236.21 GB
12月	1,889,925	3,309,968	12,793,781	40,951,562	1332.76 GB
1月	2,366,228	4,287,173	15,087,377	49,094,798	1392.17 GB
2月	2,792,591	5,251,280	13,523,466	54,382,215	1396.88 GB
3月	3,110,871	5,980,614	20,222,575	67,738,018	1744.21 GB
合計	19,831,846	35,996,824	135,095,101	466,374,668	14292.77 GB



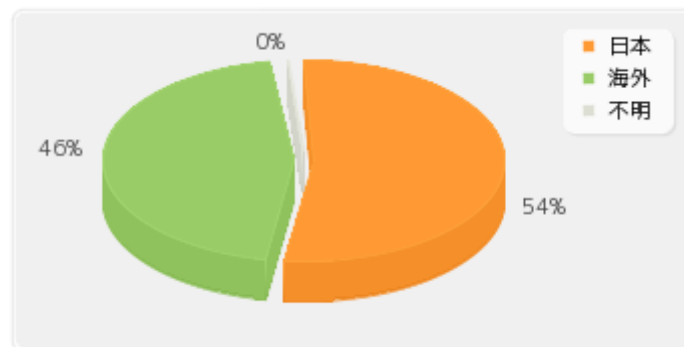
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のKEGG利用状況（2018年度）

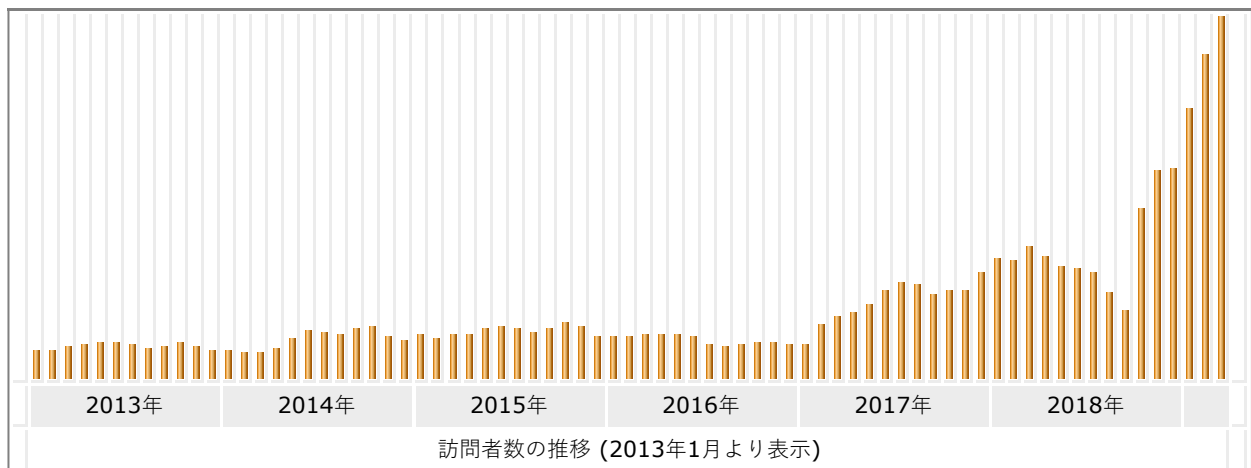
更新日時：2019年4月2日 15時07分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	979,761	1,744,464	4,937,490	17,568,195	449.44 GB
5月	894,921	1,616,824	4,808,888	17,636,823	469.88 GB
6月	872,944	1,428,075	4,067,199	14,933,139	384.97 GB
7月	848,348	1,368,043	3,806,015	14,411,884	374.22 GB
8月	690,616	1,248,379	5,786,726	13,778,776	395.90 GB
9月	535,567	832,981	3,825,939	11,565,636	410.94 GB
10月	1,358,368	2,256,838	5,703,440	21,677,134	516.02 GB
11月	1,661,203	2,855,435	6,167,534	24,967,504	498.99 GB
12月	1,680,381	2,848,394	6,724,150	24,837,665	582.33 GB
1月	2,161,922	3,847,260	9,628,303	33,403,499	702.43 GB
2月	2,601,440	4,845,611	10,122,985	39,359,244	663.80 GB
3月	2,899,784	5,536,209	16,883,269	51,069,417	937.74 GB
合計	17,185,255	30,428,513	82,461,938	285,208,916	6386.65 GB



国内外の利用比率（2018年度）

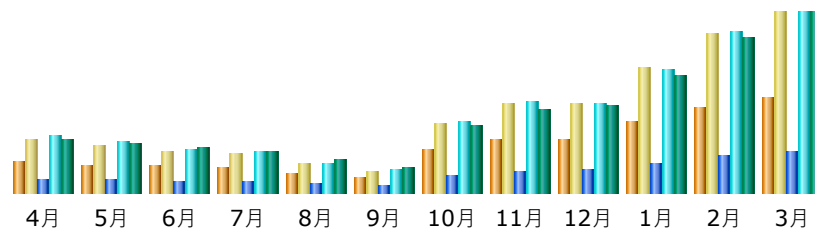


訪問者数の推移（2013年1月より表示）

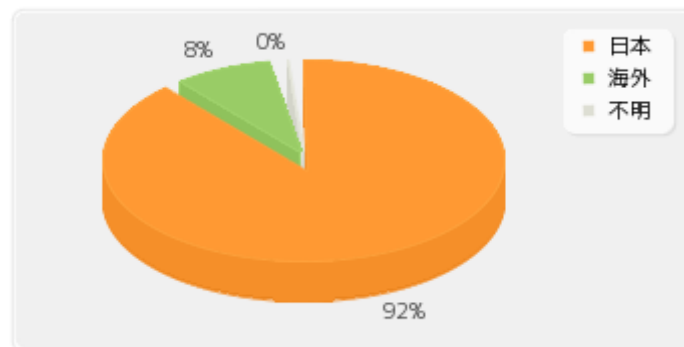


# 月別のMEDICUS利用状況（2018年度）

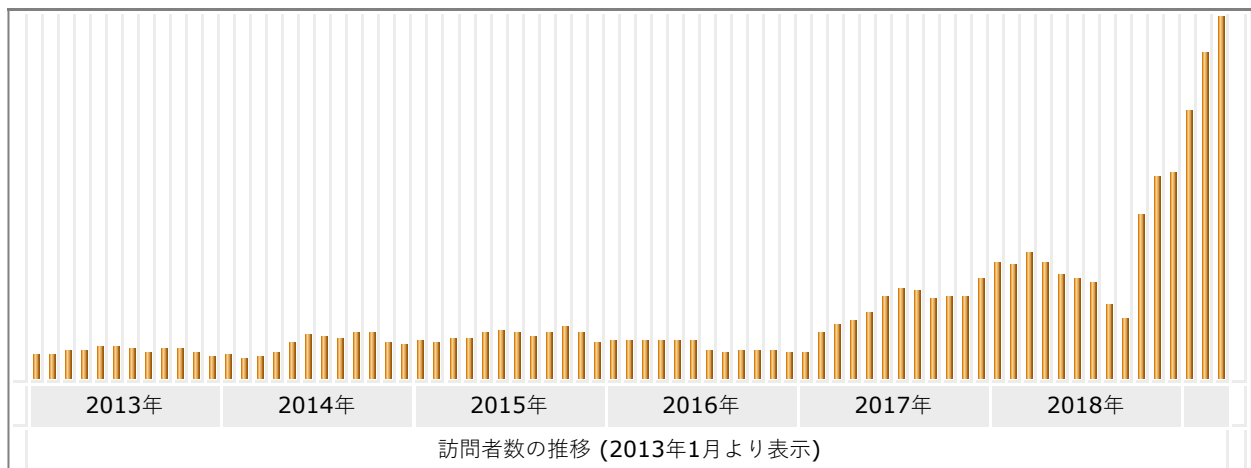
更新日時：2019年4月2日 18時37分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	899,550	1,551,300	2,686,152	11,122,034	117.88 GB
5月	801,287	1,385,558	2,345,779	9,898,480	106.56 GB
6月	775,902	1,228,814	2,137,713	8,553,234	96.45 GB
7月	743,659	1,157,489	2,008,663	8,101,055	90.43 GB
8月	566,269	840,795	1,755,824	5,801,381	70.11 GB
9月	455,875	647,896	1,352,356	4,576,403	54.13 GB
10月	1,272,499	2,061,331	3,314,697	13,704,847	144.48 GB
11月	1,571,178	2,656,477	4,177,922	17,581,880	183.40 GB
12月	1,591,281	2,655,542	4,326,501	17,467,753	189.10 GB
1月	2,082,503	3,672,094	5,628,018	23,914,304	256.62 GB
2月	2,527,012	4,685,328	7,055,583	31,295,313	339.36 GB
3月	2,806,746	5,316,154	8,015,629	35,105,978	393.71 GB
合計	16,093,761	27,858,778	44,804,837	187,122,662	2042.24 GB



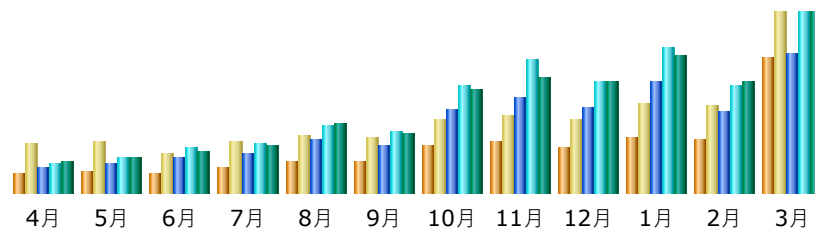
国内外の利用比率（2018年度）



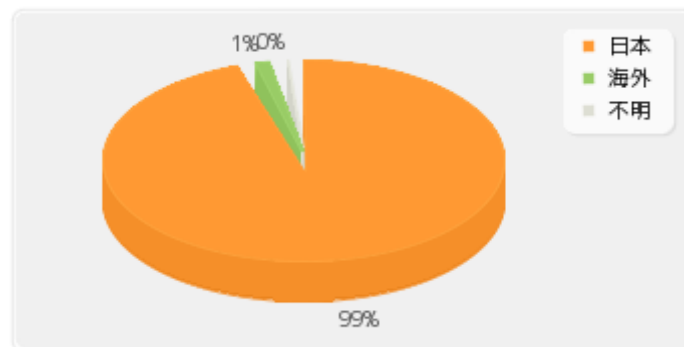
訪問者数の推移（2013年1月より表示）

# 月別のお薬手帳利用状況（2018年度）

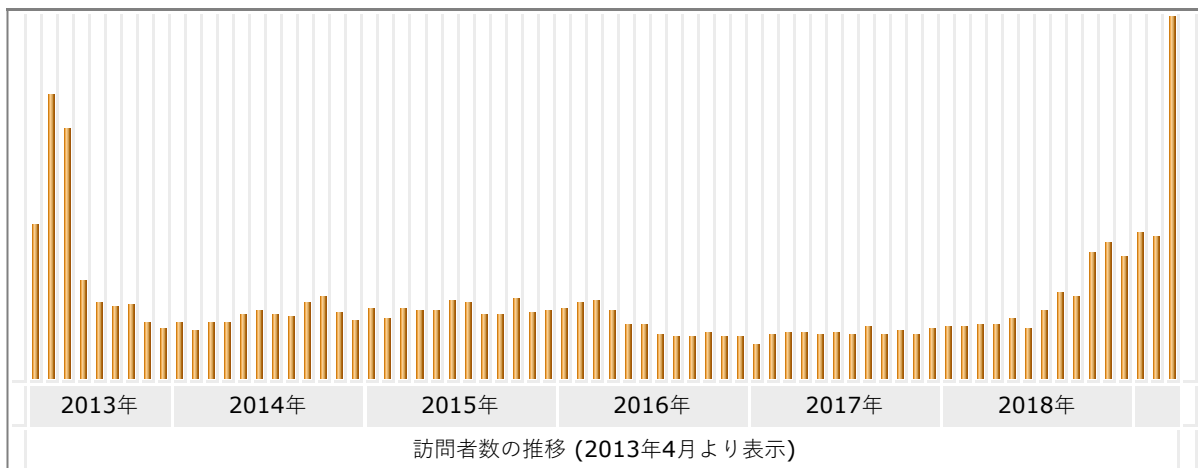
更新日時：2019年4月3日 10時04分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	573	1,385	10,554	12,577	67.13 MB
5月	631	1,485	12,743	15,387	77.39 MB
6月	534	1,112	15,024	19,076	88.62 MB
7月	715	1,492	16,876	20,969	102.62 MB
8月	915	1,634	22,672	29,220	147.14 MB
9月	881	1,554	20,104	25,888	126.90 MB
10月	1,362	2,089	35,560	45,929	222.55 MB
11月	1,454	2,239	40,557	57,477	249.35 MB
12月	1,313	2,084	36,708	47,440	236.73 MB
1月	1,577	2,547	47,914	62,172	294.76 MB
2月	1,515	2,502	35,228	46,055	237.06 MB
3月	3,893	5,177	59,837	77,470	387.00 MB
合計	15,363	25,300	353,777	459,660	2.18 GB



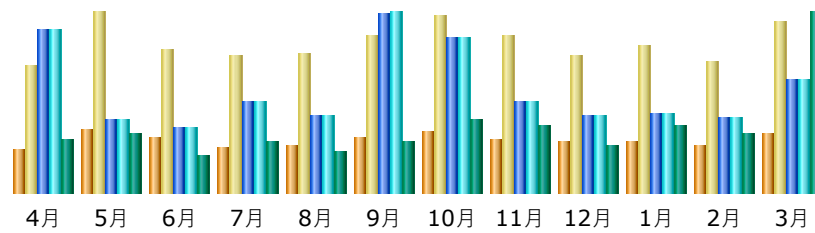
国内外の利用比率（2018年度）



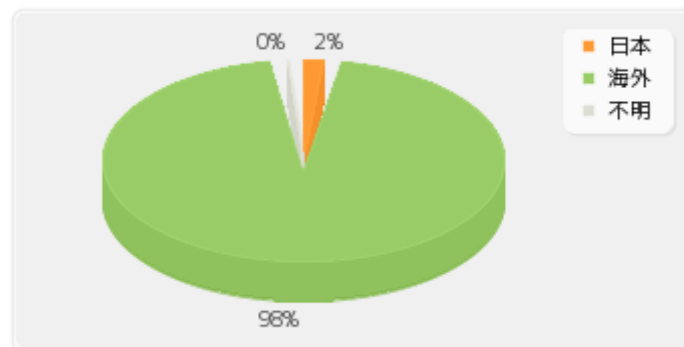
訪問者数の推移（2013年4月より表示）

# 月別のKEGG API利用状況（2018年度）

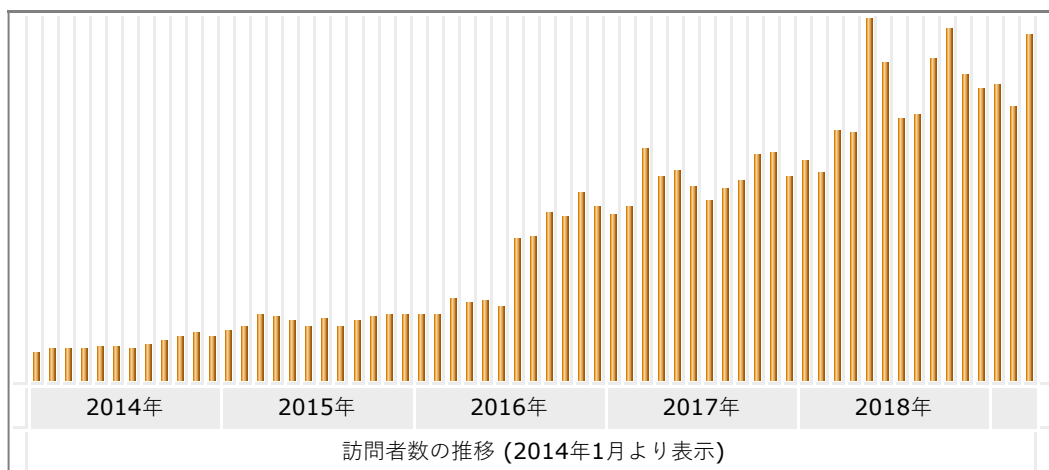
更新日時：2019年4月5日 05時04分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	10,561	31,309	54,912,198	54,912,994	336.12 GB
5月	15,395	44,214	24,762,796	24,763,594	369.65 GB
6月	13,559	34,979	21,779,035	21,779,760	229.74 GB
7月	11,193	33,553	30,711,371	30,712,125	323.53 GB
8月	11,334	34,297	26,105,589	26,106,502	265.67 GB
9月	13,733	38,683	60,942,653	60,943,468	327.43 GB
10月	15,013	43,476	52,535,630	52,536,385	461.25 GB
11月	13,075	38,321	31,129,961	31,130,775	429.18 GB
12月	12,474	33,546	26,268,141	26,268,913	295.53 GB
1月	12,580	36,178	27,064,331	27,065,196	420.94 GB
2月	11,716	32,216	25,167,145	25,167,968	369.74 GB
3月	14,726	41,990	38,232,573	38,233,412	1142.60 GB
合計	155,359	442,762	419,611,423	419,621,092	4971.39 GB



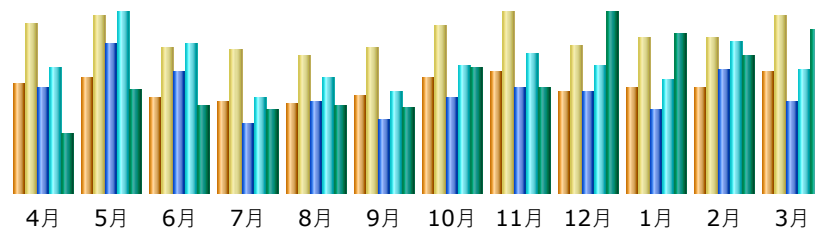
国内外の利用比率（2018年度）



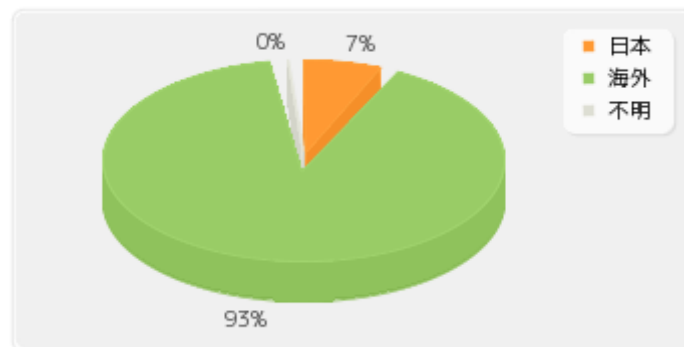
訪問者数の推移（2014年1月より表示）

## 月別のLinkDB利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 15時53分



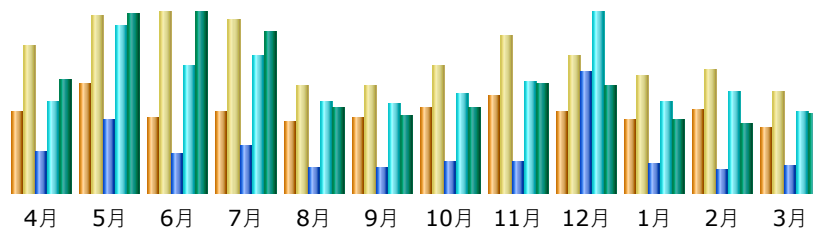
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	13,639	21,101	106,011	127,748	17.79 GB
5月	14,254	22,116	151,715	183,374	30.98 GB
6月	11,762	18,198	123,453	151,147	26.01 GB
7月	11,416	17,864	69,907	96,190	24.78 GB
8月	10,992	17,194	92,909	117,717	26.55 GB
9月	12,161	17,991	74,666	102,124	25.98 GB
10月	14,435	20,959	96,046	128,678	37.71 GB
11月	15,181	22,472	106,818	141,298	31.84 GB
12月	12,513	18,301	101,959	130,133	54.40 GB
1月	13,046	19,247	85,406	114,684	47.99 GB
2月	13,109	19,256	125,941	154,518	41.36 GB
3月	15,179	22,197	92,167	125,970	49.42 GB
合計	157,687	236,896	1,226,998	1,573,581	414.82 GB



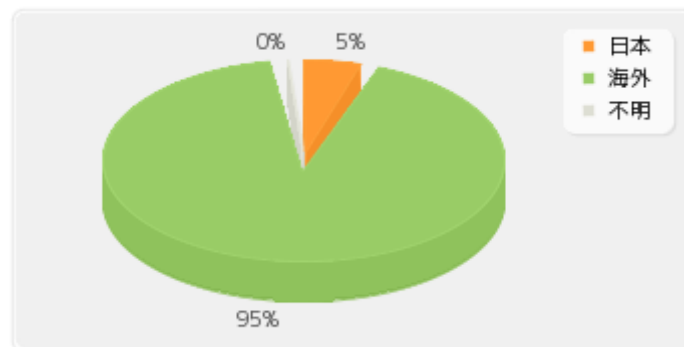
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のMGENES利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 09時51分



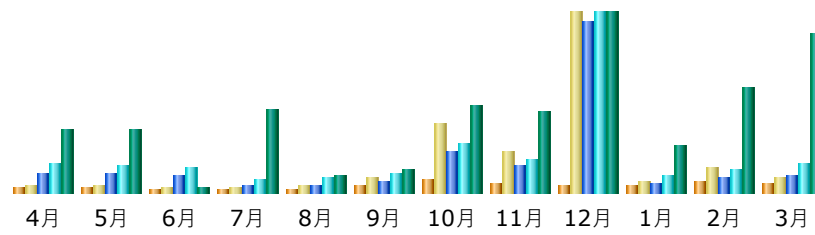
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	2,077	3,786	8,563	19,376	1.10 GB
5月	2,814	4,563	15,432	35,470	1.74 GB
6月	1,957	4,652	8,187	27,028	1.75 GB
7月	2,076	4,473	10,156	29,232	1.56 GB
8月	1,831	2,790	5,175	19,458	848.91 MB
9月	1,916	2,740	5,331	18,984	769.32 MB
10月	2,175	3,263	6,415	21,260	839.93 MB
11月	2,505	4,039	6,536	23,593	1.05 GB
12月	2,082	3,558	25,892	38,427	1.05 GB
1月	1,902	3,022	5,996	19,594	728.80 MB
2月	2,156	3,179	4,912	21,473	696.69 MB
3月	1,685	2,627	5,734	17,327	788.56 MB
合計	25,176	42,692	108,329	291,222	12.82 GB



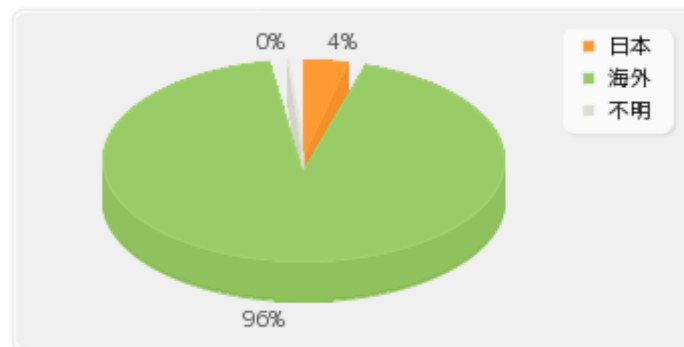
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のOC利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 09時57分



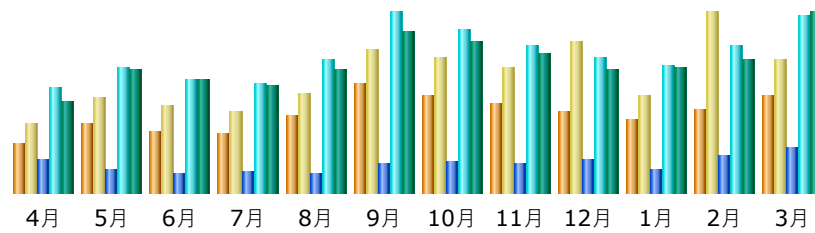
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	393	637	4,693	6,606	32.03 GB
5月	382	581	4,426	6,304	31.70 GB
6月	312	479	4,055	5,996	2.45 GB
7月	308	521	1,549	3,270	42.52 GB
8月	299	643	1,723	3,392	8.30 GB
9月	714	1,272	2,514	4,330	12.00 GB
10月	1,207	6,116	9,787	11,451	44.29 GB
11月	867	3,635	6,138	7,692	41.59 GB
12月	652	16,081	40,185	42,293	91.94 GB
1月	613	950	1,965	3,941	24.15 GB
2月	920	2,209	3,348	5,397	53.70 GB
3月	737	1,288	4,212	6,905	81.00 GB
合計	7,404	34,412	84,595	107,577	465.67 GB



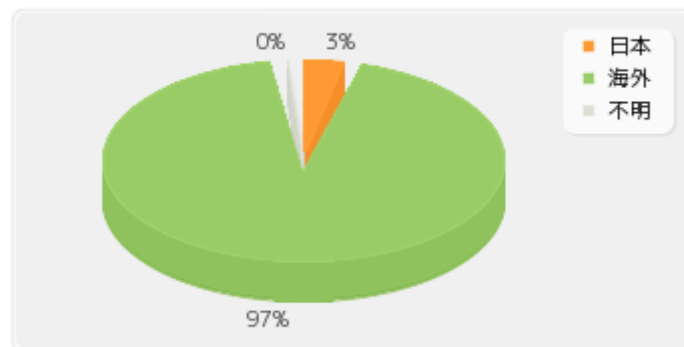
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のVirus-Host DB利用状況（2018年度）

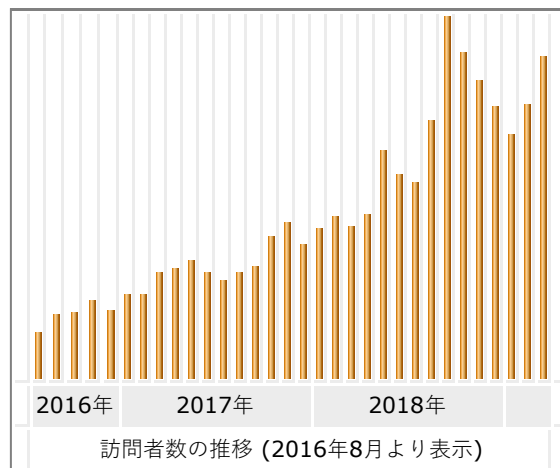
更新日時：2019年4月3日 10時30分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	5,875	8,279	35,387	112,391	2.21 GB
5月	8,157	11,482	23,427	133,300	2.97 GB
6月	7,311	10,524	19,993	118,760	2.70 GB
7月	7,036	9,609	22,281	114,588	2.56 GB
8月	9,277	11,799	20,804	141,361	2.97 GB
9月	12,984	17,177	30,111	190,863	3.88 GB
10月	11,692	16,089	32,878	173,275	3.64 GB
11月	10,745	14,925	29,859	154,984	3.33 GB
12月	9,805	18,101	35,269	143,275	2.96 GB
1月	8,733	11,734	25,396	133,931	3.02 GB
2月	9,837	21,573	39,632	155,389	3.20 GB
3月	11,572	16,024	47,133	187,013	4.33 GB
合計	113,024	167,316	362,170	1,759,130	37.76 GB



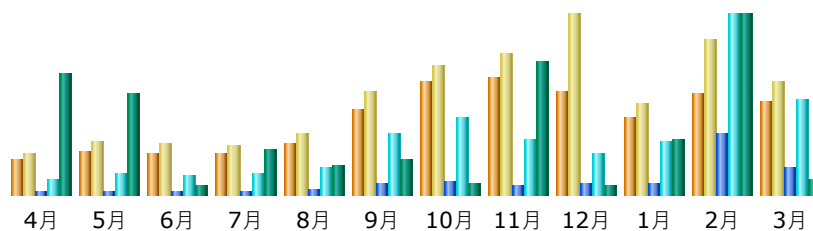
国内外の利用比率（2018年度）



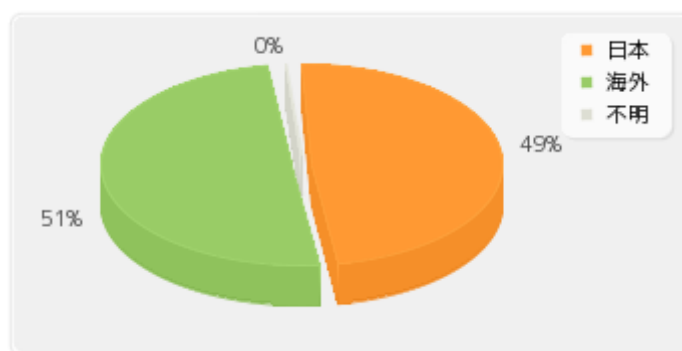
訪問者数の推移（2016年8月より表示）

# 月別のTaxonomy利用状況（2018年度）

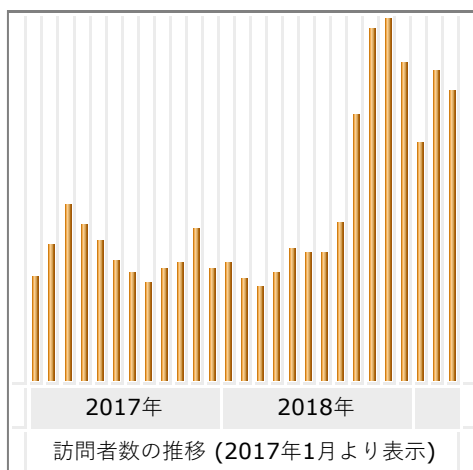
更新日時：2019年4月3日 10時25分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	508	621	864	5,359	2.38 GB
5月	630	794	1,174	7,161	2.01 GB
6月	612	751	1,043	6,412	177.50 MB
7月	611	723	1,144	6,995	930.84 MB
8月	748	890	1,531	8,958	577.24 MB
9月	1,270	1,518	3,682	20,840	696.68 MB
10月	1,679	1,908	4,391	26,364	229.52 MB
11月	1,724	2,074	3,393	19,091	2.62 GB
12月	1,521	2,662	3,529	14,191	171.71 MB
1月	1,134	1,334	3,686	18,217	1.10 GB
2月	1,481	2,278	20,585	61,503	3.56 GB
3月	1,386	1,671	9,212	32,452	314.36 MB
合計	13,304	17,224	54,234	227,543	14.70 GB



国内外の利用比率（2018年度）

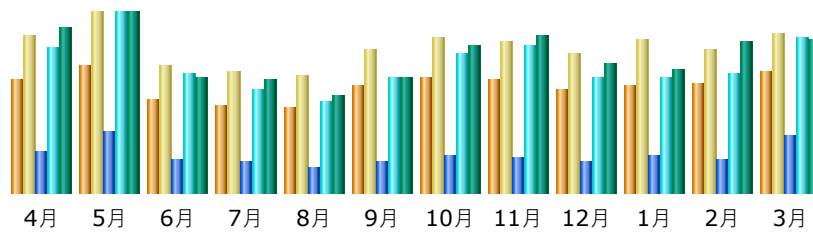


訪問者数の推移（2017年1月より表示）

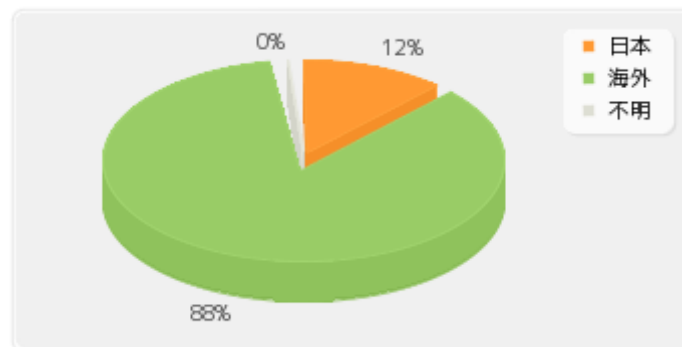


# 月別のReaction Ontology利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 10時11分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,460	2,021	7,369	26,390	366.12 MB
5月	1,620	2,314	11,129	32,692	397.86 MB
6月	1,204	1,632	6,036	21,513	255.97 MB
7月	1,106	1,558	5,731	18,710	249.09 MB
8月	1,098	1,504	4,513	16,476	215.36 MB
9月	1,367	1,848	5,793	20,816	254.66 MB
10月	1,488	1,992	6,821	25,249	326.25 MB
11月	1,460	1,940	6,309	26,565	348.48 MB
12月	1,335	1,789	5,683	20,712	283.98 MB
1月	1,374	1,968	6,598	20,896	272.17 MB
2月	1,396	1,829	5,977	21,739	335.63 MB
3月	1,563	2,055	10,235	28,140	338.83 MB
合計	16,471	22,450	82,194	279,898	3.56 GB

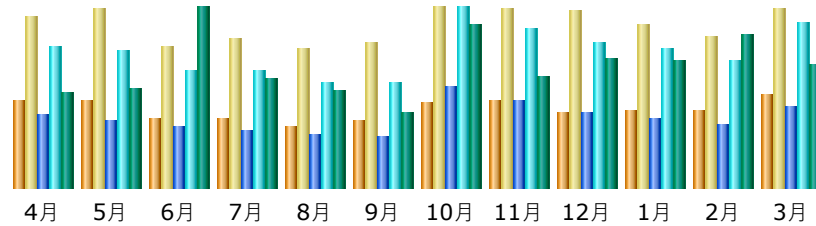


国内外の利用比率（2018年度）

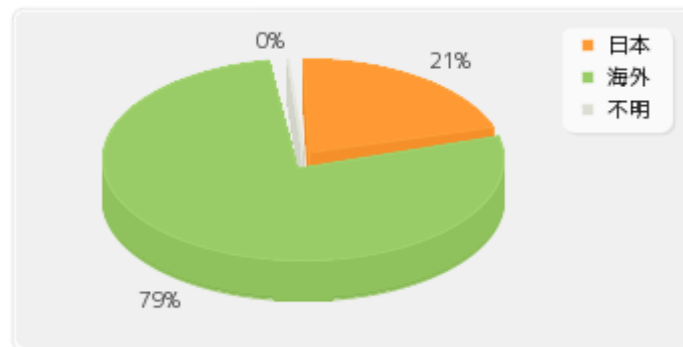
# 月別のSequence Analysis利用状況（2018年度）

(BLAST / FASTA / MOTIF / MAFFT / CLUSTALW / PRRN / TREE)

更新日時：2019年4月3日 10時22分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	30,042	59,312	495,721	963,045	20.08 GB
5月	30,252	61,913	460,288	929,016	20.74 GB
6月	23,534	49,053	408,961	800,572	38.03 GB
7月	23,691	51,614	391,119	790,934	23.08 GB
8月	21,302	47,793	360,174	721,538	20.55 GB
9月	23,503	50,113	342,575	711,534	16.01 GB
10月	29,685	62,226	689,563	1,225,914	34.35 GB
11月	30,142	61,675	592,587	1,083,247	23.62 GB
12月	25,684	61,097	511,970	988,208	27.11 GB
1月	26,677	56,250	468,931	942,796	26.69 GB
2月	26,345	52,373	428,274	860,148	32.30 GB
3月	32,371	62,027	549,323	1,121,192	26.18 GB
合計	323,228	675,446	5,699,486	11,138,144	308.75 GB



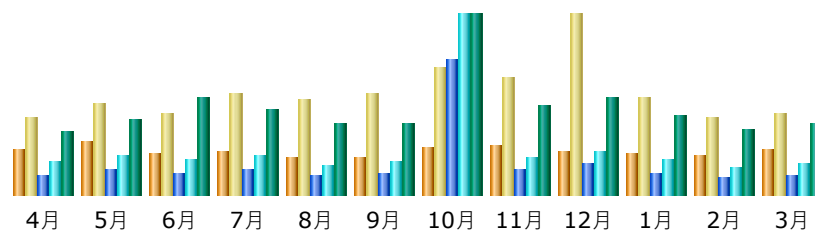
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のサービス訪問者数比較（2018年度）

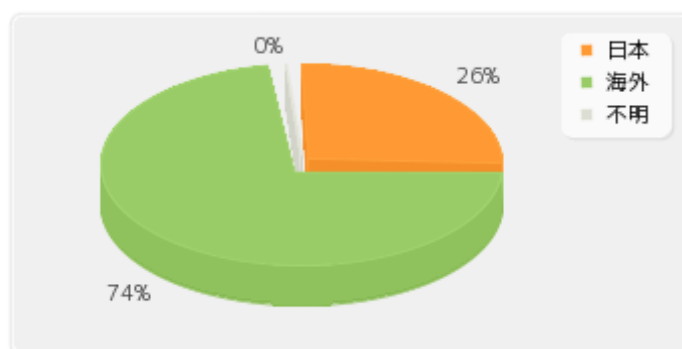
月	BLAST	FASTA	MOTIF	MAFFT	CLUSTALW	PRRN	TREE
4月	4,845	1,183	4,035	809	22,748	459	621
5月	5,579	1,294	4,068	833	22,354	445	580
6月	4,438	998	3,391	572	17,050	345	725
7月	4,567	991	3,405	517	17,133	335	1,133
8月	3,893	873	2,965	562	15,366	299	437
9月	3,937	899	3,254	511	16,990	343	438
10月	4,976	1,134	4,066	859	21,489	469	486
11月	5,176	1,123	3,764	874	22,288	480	768
12月	4,567	1,035	3,326	629	18,884	361	993
1月	4,420	1,077	3,489	608	19,864	357	748
2月	4,189	989	3,605	572	19,270	386	539
3月	4,901	1,099	3,868	720	24,457	436	733
合計	55,488	12,695	43,236	8,066	237,893	4,715	8,201

## 月別のBLAST利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月1日 19時36分



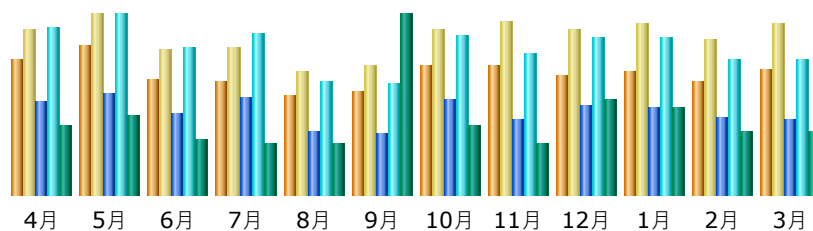
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	4,845	8,239	47,129	77,128	3.39 GB
5月	5,579	9,729	58,365	92,626	4.01 GB
6月	4,438	8,613	50,651	80,761	5.19 GB
7月	4,567	10,701	61,144	94,246	4.61 GB
8月	3,893	10,055	43,676	68,785	3.77 GB
9月	3,937	10,805	49,302	76,101	3.77 GB
10月	4,976	13,505	317,529	424,788	9.68 GB
11月	5,176	12,428	58,362	89,018	4.77 GB
12月	4,567	19,237	72,753	102,969	5.22 GB
1月	4,420	10,459	51,417	80,652	4.27 GB
2月	4,189	8,331	38,695	61,417	3.54 GB
3月	4,901	8,748	43,263	71,083	3.83 GB
合計	55,488	130,850	892,286	1,319,574	56.05 GB



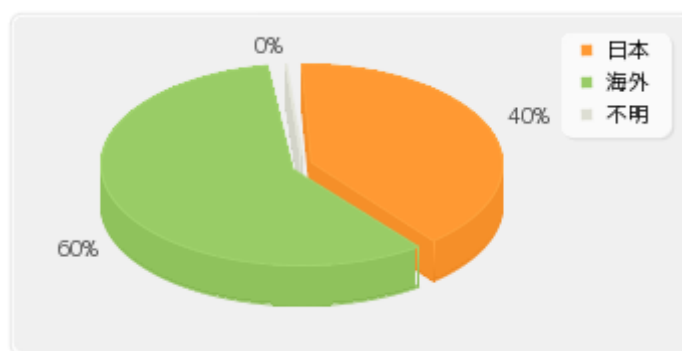
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のFASTA利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 10時59分



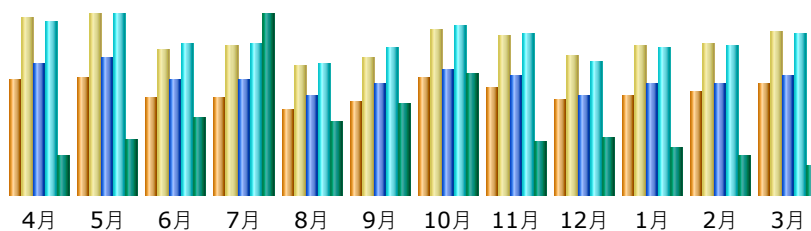
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,183	1,439	4,358	7,720	225.76 MB
5月	1,294	1,573	4,723	8,368	253.13 MB
6月	998	1,274	3,803	6,861	176.93 MB
7月	991	1,285	4,497	7,455	167.52 MB
8月	873	1,075	2,972	5,284	163.75 MB
9月	899	1,128	2,870	5,175	582.74 MB
10月	1,134	1,438	4,388	7,412	223.42 MB
11月	1,123	1,511	3,527	6,577	166.64 MB
12月	1,035	1,446	4,130	7,341	309.59 MB
1月	1,077	1,493	4,010	7,291	283.52 MB
2月	989	1,359	3,573	6,233	203.58 MB
3月	1,099	1,493	3,491	6,272	202.02 MB
合計	12,695	16,514	46,342	81,989	2.89 GB



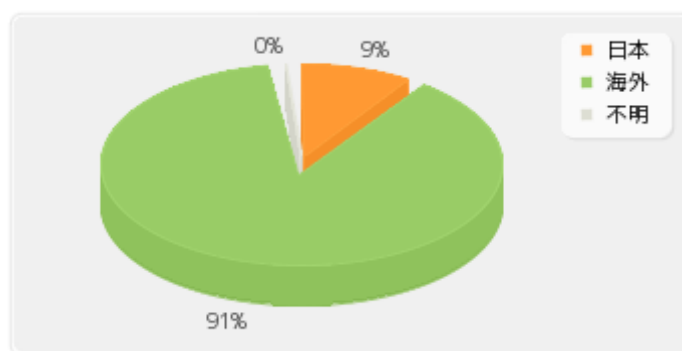
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のMOTIF利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 09時54分



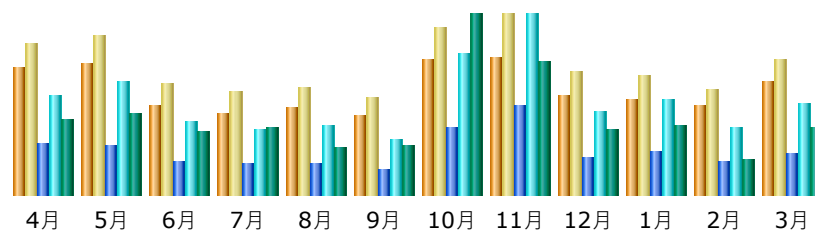
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	4,035	6,153	25,150	33,175	1.19 GB
5月	4,068	6,281	26,137	34,485	1.67 GB
6月	3,391	5,067	22,050	29,024	2.38 GB
7月	3,405	5,191	21,966	28,918	5.51 GB
8月	2,965	4,483	19,015	25,147	2.22 GB
9月	3,254	4,798	21,167	27,998	2.80 GB
10月	4,066	5,777	23,816	32,298	3.70 GB
11月	3,764	5,556	22,817	30,776	1.62 GB
12月	3,326	4,820	19,135	25,443	1.73 GB
1月	3,489	5,221	21,077	28,254	1.46 GB
2月	3,605	5,261	21,088	28,561	1.19 GB
3月	3,868	5,674	22,695	30,733	925.22 MB
合計	43,236	64,282	266,113	354,812	26.36 GB



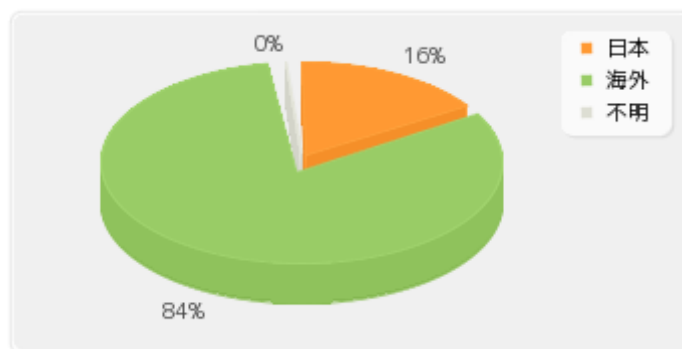
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のMAFFT利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 16時01分



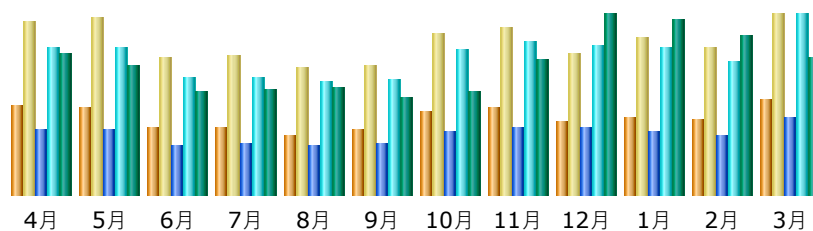
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	809	963	3,947	7,821	57.18 MB
5月	833	1,016	3,881	8,817	61.82 MB
6月	572	710	2,561	5,674	47.96 MB
7月	517	662	2,501	5,174	51.02 MB
8月	562	679	2,493	5,390	35.91 MB
9月	511	619	2,031	4,362	37.77 MB
10月	859	1,070	5,243	11,098	137.10 MB
11月	874	1,152	6,912	14,132	101.58 MB
12月	629	788	2,982	6,579	49.46 MB
1月	608	765	3,428	7,419	52.76 MB
2月	572	669	2,525	5,301	26.72 MB
3月	720	867	3,203	7,192	50.91 MB
合計	8,066	9,960	41,707	88,959	710.19 MB



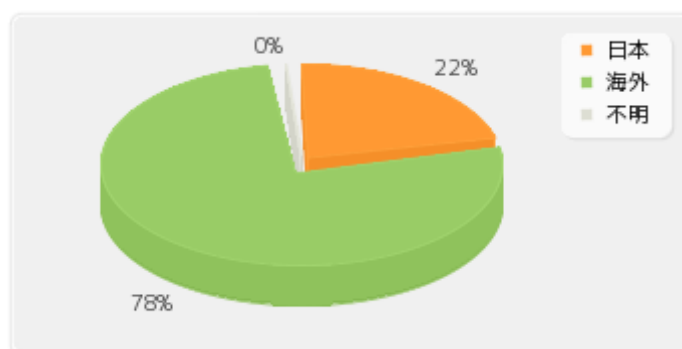
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のCLUSTALW利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 09時42分



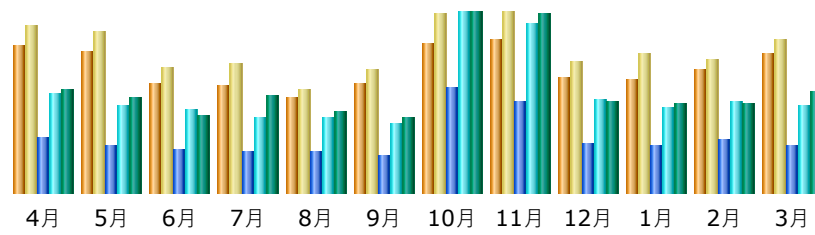
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	22,748	44,653	317,070	723,511	8.41 GB
5月	22,354	45,807	313,721	716,733	7.75 GB
6月	17,050	35,254	240,864	568,332	6.15 GB
7月	17,133	35,981	245,936	576,206	6.31 GB
8月	15,366	32,729	239,457	552,552	6.41 GB
9月	16,990	33,437	245,332	563,119	5.77 GB
10月	21,489	41,750	310,215	707,378	6.16 GB
11月	22,288	43,003	326,734	750,341	8.09 GB
12月	18,884	36,426	328,731	734,657	10.75 GB
1月	19,864	40,320	313,190	723,988	10.43 GB
2月	19,270	37,773	285,122	655,092	9.47 GB
3月	24,457	46,435	380,844	881,647	8.16 GB
合計	237,893	473,568	3,547,216	8,153,556	93.87 GB



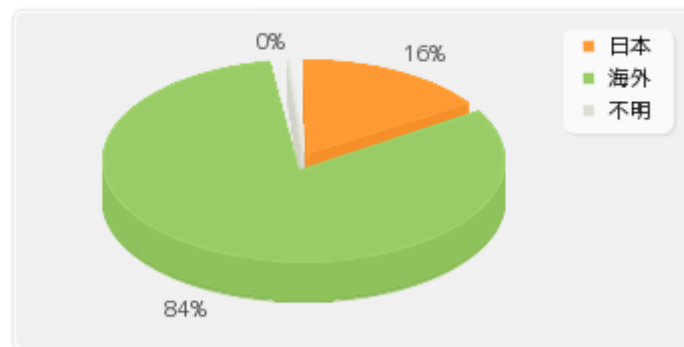
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のPRRN利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 10時08分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	459	527	1,362	2,469	10.58 MB
5月	445	504	1,177	2,139	9.85 MB
6月	345	395	1,083	2,058	7.95 MB
7月	335	402	1,006	1,849	9.89 MB
8月	299	325	1,021	1,883	8.38 MB
9月	343	389	915	1,740	7.71 MB
10月	469	559	2,606	4,476	18.53 MB
11月	480	565	2,279	4,183	18.32 MB
12月	361	409	1,224	2,290	9.38 MB
1月	357	435	1,176	2,112	9.06 MB
2月	386	415	1,328	2,261	9.07 MB
3月	436	481	1,144	2,172	10.36 MB
合計	4,715	5,406	16,321	29,632	129.08 MB

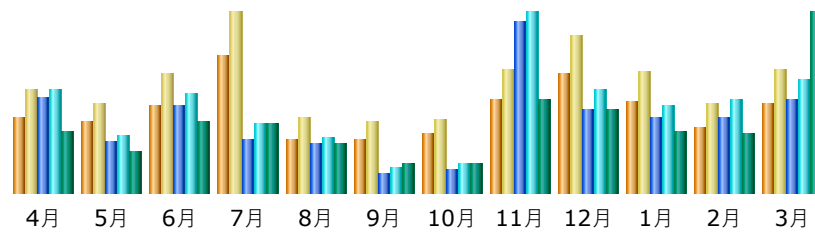


国内外の利用比率（2018年度）

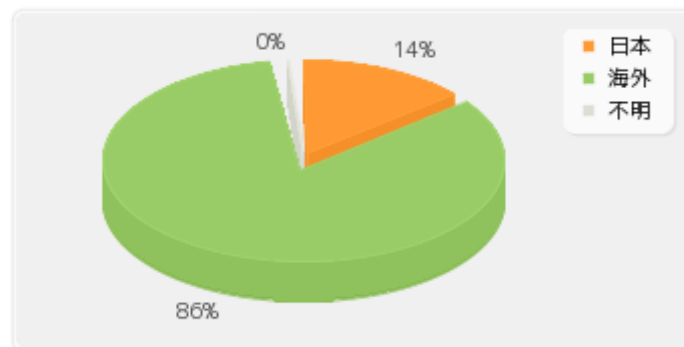


# 月別のTREE利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 10時47分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	621	858	97,011	103,566	236.37 MB
5月	580	733	52,721	57,853	159.75 MB
6月	725	988	87,638	99,909	270.82 MB
7月	1,133	1,490	53,920	69,812	264.67 MB
8月	437	613	50,709	56,279	188.23 MB
9月	438	593	18,924	24,490	113.39 MB
10月	486	610	23,163	28,518	113.35 MB
11月	768	1,026	173,008	182,702	357.82 MB
12月	993	1,295	84,282	103,943	318.72 MB
1月	748	1,007	75,206	87,784	237.57 MB
2月	539	741	75,632	94,567	225.75 MB
3月	733	1,011	94,368	115,132	692.41 MB
合計	8,201	10,965	886,582	1,024,555	3.10 GB

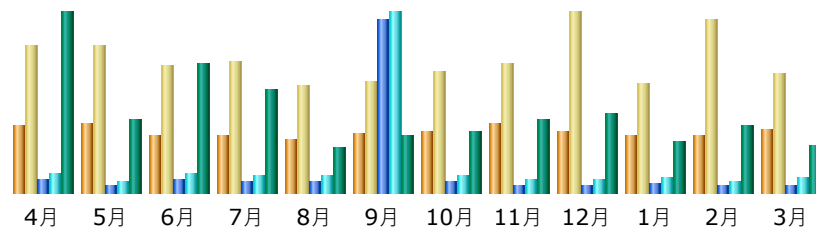


国内外の利用比率（2018年度）

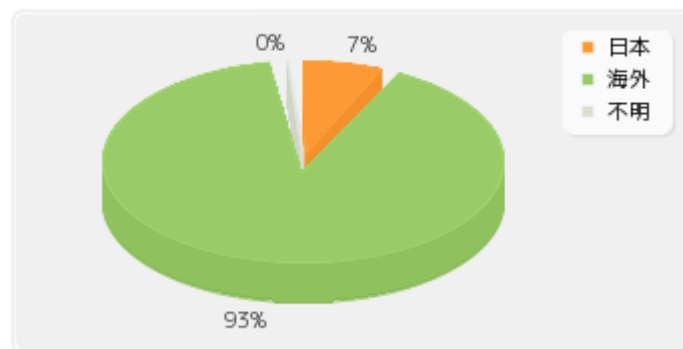
# 月別のGenome Analysis利用状況（2018年度）

(ViPTree / KAAS / MAPLE / EGassembler / GENIES / DINIES)

更新日時：2019年4月2日 11時28分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	4,924	10,907	140,336	217,808	33.17 GB
5月	5,059	10,927	85,233	134,725	13.39 GB
6月	4,169	9,417	153,662	210,802	23.60 GB
7月	4,204	9,741	138,397	196,996	19.14 GB
8月	3,883	7,853	138,989	197,732	8.31 GB
9月	4,344	8,197	2,021,873	2,092,553	10.50 GB
10月	4,526	8,910	132,148	200,453	11.14 GB
11月	5,067	9,542	83,459	151,719	13.52 GB
12月	4,518	13,300	88,265	141,495	14.57 GB
1月	4,153	8,073	106,887	165,714	9.47 GB
2月	4,230	12,848	84,277	139,009	12.31 GB
3月	4,704	8,842	74,136	162,948	8.56 GB
合計	53,781	118,557	3,247,662	4,011,954	177.69 GB



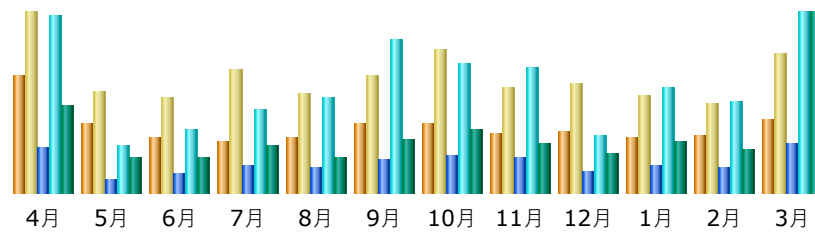
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のサービス訪問者数比較（2018年度）

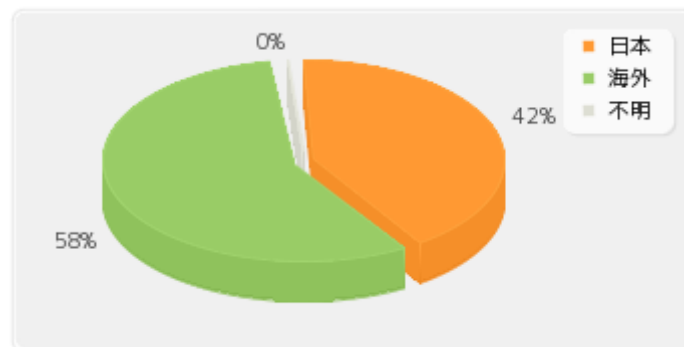
月	ViPTree	KAAS	MAPLE	EGassembler	GENIES	DINIES
4月	388	3,566	455	734	222	204
5月	226	3,649	759	683	227	251
6月	185	3,173	297	658	162	168
7月	170	3,297	286	572	155	191
8月	180	2,915	295	635	175	168
9月	231	2,980	352	906	162	173
10月	230	3,247	485	665	164	191
11月	197	3,524	532	866	144	166
12月	204	3,404	588	647	171	187
1月	181	3,225	251	660	162	178
2月	191	3,015	544	713	173	169
3月	240	3,539	496	704	180	166
合計	2,623	39,534	4,844	8,443	2,097	2,212

# 月別のVipTree利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月3日 10時34分



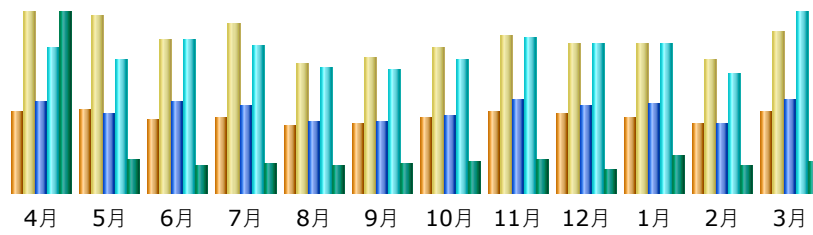
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	388	596	10,044	40,465	648.20 MB
5月	226	337	2,845	10,787	265.08 MB
6月	185	313	4,116	14,453	257.27 MB
7月	170	409	6,252	18,709	353.68 MB
8月	180	327	5,764	21,585	260.50 MB
9月	231	387	7,491	34,852	397.30 MB
10月	230	471	8,324	29,262	470.74 MB
11月	197	348	8,092	28,310	368.91 MB
12月	204	364	4,935	12,934	288.28 MB
1月	181	322	5,998	23,705	385.18 MB
2月	191	296	5,519	20,667	312.00 MB
3月	240	460	11,313	40,972	1.30 GB
合計	2,623	4,630	80,693	296,701	5.22 GB



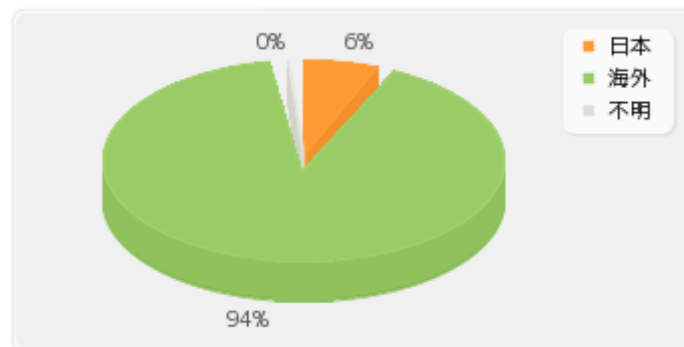
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のKAAS利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 11時34分



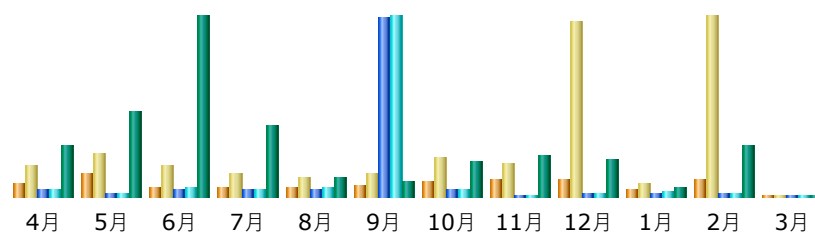
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,566	7,839	52,905	83,390	27.09 GB
5月	3,649	7,716	45,718	76,740	4.90 GB
6月	3,173	6,648	52,602	88,570	4.21 GB
7月	3,297	7,327	50,020	84,564	4.39 GB
8月	2,915	5,647	40,482	72,200	4.13 GB
9月	2,980	5,874	41,163	70,988	4.33 GB
10月	3,247	6,304	43,976	76,525	4.67 GB
11月	3,524	6,874	53,598	89,691	4.97 GB
12月	3,404	6,524	50,352	85,468	3.52 GB
1月	3,225	6,468	51,418	85,274	5.64 GB
2月	3,015	5,762	39,299	68,842	4.09 GB
3月	3,539	7,010	53,282	103,711	4.54 GB
合計	39,534	79,993	574,815	985,963	76.48 GB



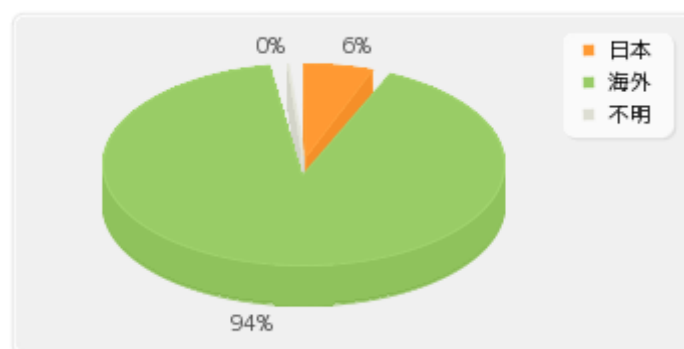
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のMAPLE利用状況（2018年度）

更新日時：2019年3月4日 11時27分



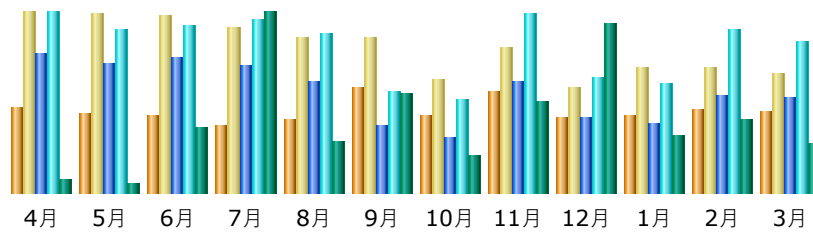
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	455	1,031	66,256	77,505	4.60 GB
5月	759	1,425	25,290	30,406	7.64 GB
6月	297	1,012	85,380	91,923	16.03 GB
7月	286	740	71,514	78,160	6.38 GB
8月	295	629	83,505	89,960	1.60 GB
9月	352	754	1,967,328	1,977,054	1.35 GB
10月	485	1,274	74,229	84,481	3.12 GB
11月	532	1,060	11,946	17,329	3.70 GB
12月	588	5,763	26,374	32,160	3.28 GB
1月	251	456	43,129	46,101	860.51 MB
2月	544	5,958	30,500	34,536	4.49 GB
3月	0	0	0	0	0
合計	4,844	20,102	2,485,451	2,559,615	53.02 GB



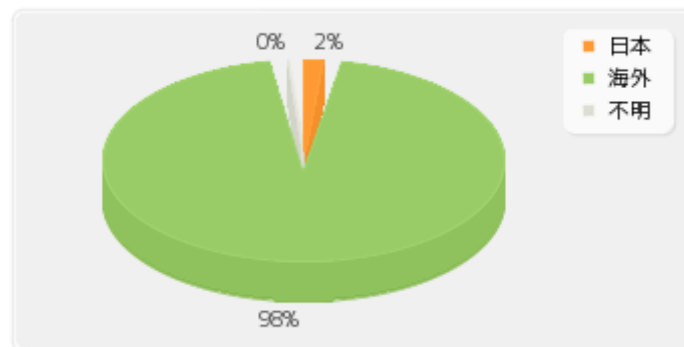
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のEGassembler利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 10時43分



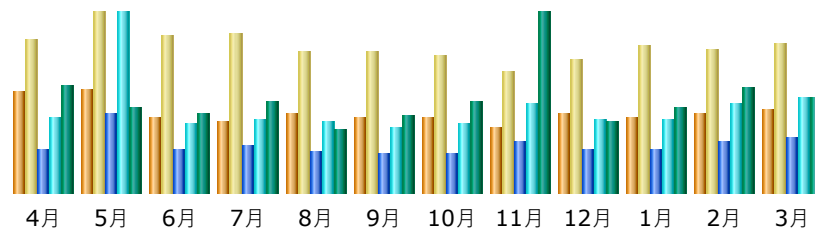
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	734	1,551	9,777	12,724	622.85 MB
5月	683	1,537	9,104	11,473	426.54 MB
6月	658	1,529	9,547	11,823	2.86 GB
7月	572	1,428	8,984	12,162	7.84 GB
8月	635	1,340	7,866	11,310	2.18 GB
9月	906	1,327	4,693	7,183	4.29 GB
10月	665	976	3,861	6,605	1.64 GB
11月	866	1,244	7,808	12,706	4.00 GB
12月	647	899	5,248	8,176	7.36 GB
1月	660	1,069	4,847	7,774	2.45 GB
2月	713	1,079	6,893	11,454	3.21 GB
3月	704	1,032	6,690	10,656	2.14 GB
合計	8,443	15,011	85,318	124,046	38.99 GB



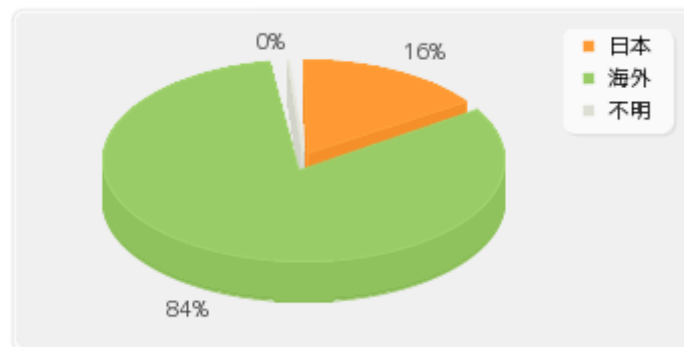
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のGENIES利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 11時32分



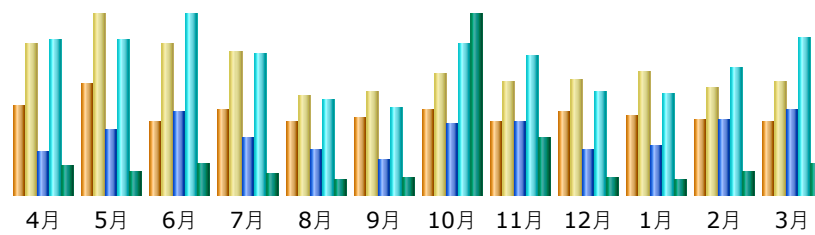
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	222	336	679	1,192	74.26 MB
5月	227	394	1,248	2,828	59.33 MB
6月	162	345	684	1,099	55.07 MB
7月	155	347	736	1,156	63.46 MB
8月	175	307	643	1,129	43.49 MB
9月	162	307	619	1,027	53.75 MB
10月	164	302	605	1,092	62.68 MB
11月	144	266	798	1,397	124.72 MB
12月	171	292	677	1,146	49.81 MB
1月	162	322	685	1,155	58.21 MB
2月	173	311	803	1,402	72.37 MB
3月	180	328	849	1,502	65.67 MB
合計	2,097	3,857	9,026	16,125	782.82 MB



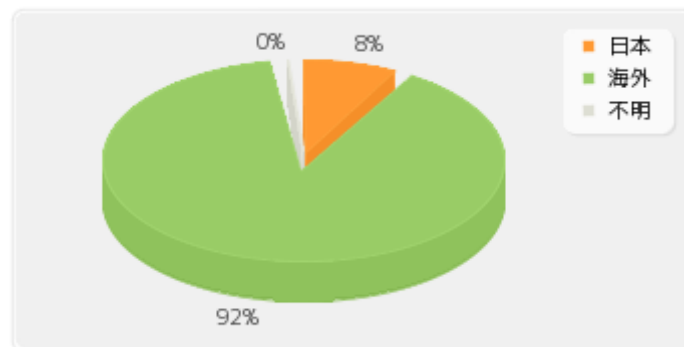
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のDINIES利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 10時31分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	204	342	728	2,599	201.11 MB
5月	251	409	1,090	2,582	158.84 MB
6月	168	343	1,382	3,003	218.60 MB
7月	191	326	936	2,362	139.21 MB
8月	168	227	749	1,577	108.23 MB
9月	173	234	568	1,447	119.21 MB
10月	191	275	1,185	2,530	1.21 GB
11月	166	259	1,227	2,323	391.23 MB
12月	187	262	761	1,717	122.58 MB
1月	178	278	801	1,700	109.48 MB
2月	169	242	1,254	2,104	152.17 MB
3月	166	256	1,419	2,624	209.29 MB
合計	2,212	3,453	12,100	26,568	3.10 GB



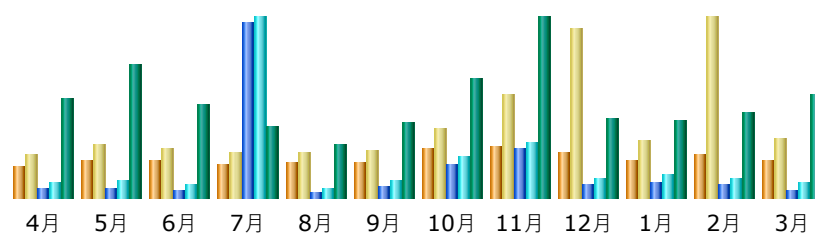
国内外の利用比率（2018年度）



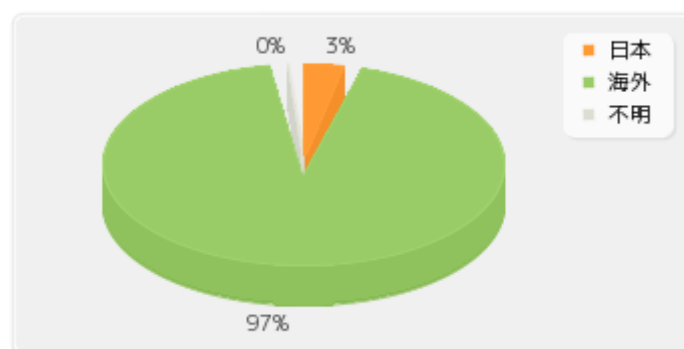
# 月別のChemical Analysis利用状況（2018年度）

(SIMCOMP / SUBCOMP / KCaM / PathComp / PathSearch / PathPred / E-zyme)

更新日時：2019年4月2日 09時31分



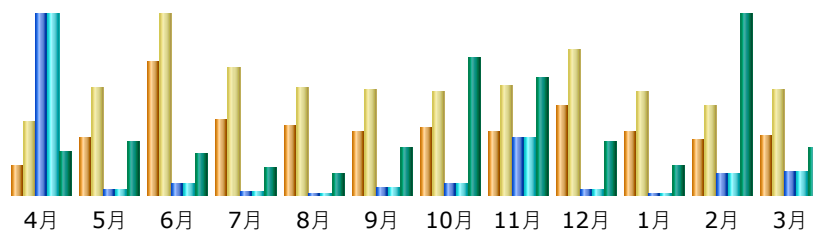
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,398	1,905	9,912	18,524	489.93 MB
5月	1,597	2,284	10,507	19,026	659.75 MB
6月	1,579	2,149	7,415	15,980	469.49 MB
7月	1,482	1,952	205,987	212,768	353.97 MB
8月	1,493	2,006	5,525	11,289	267.63 MB
9月	1,520	2,089	12,992	21,049	378.62 MB
10月	2,099	3,031	40,079	47,761	591.31 MB
11月	2,195	4,513	57,906	65,400	899.41 MB
12月	1,994	7,394	14,192	23,375	393.95 MB
1月	1,658	2,464	17,882	26,343	380.17 MB
2月	1,856	7,865	14,327	21,507	427.04 MB
3月	1,616	2,540	8,952	17,010	512.24 MB
合計	20,487	40,192	405,676	500,032	5.69 GB



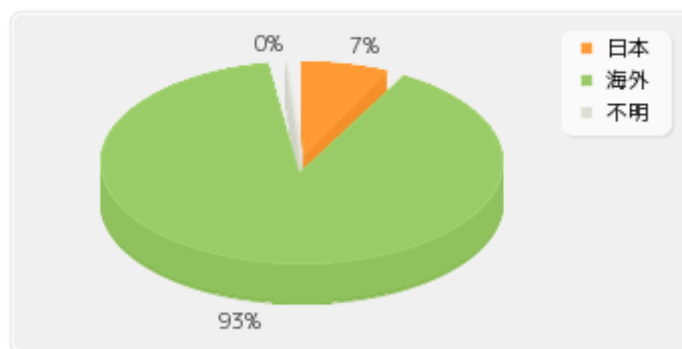
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のGenomeNet API利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月1日 17時49分



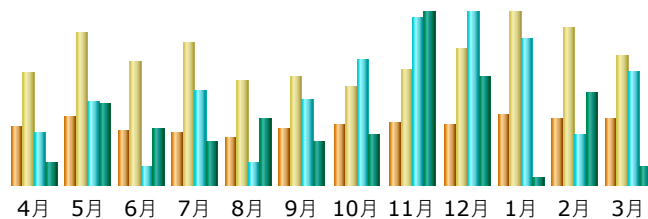
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	574	1,428	6,639,474	6,639,474	2.41 GB
5月	1,096	2,080	185,822	185,822	2.90 GB
6月	2,570	3,499	421,049	421,049	2.23 GB
7月	1,472	2,462	89,949	89,949	1.51 GB
8月	1,324	2,064	50,684	50,684	1.17 GB
9月	1,217	2,043	246,358	246,358	2.58 GB
10月	1,301	2,017	374,388	374,388	7.60 GB
11月	1,239	2,126	2,125,201	2,125,201	6.49 GB
12月	1,726	2,802	172,401	172,404	2.98 GB
1月	1,224	2,004	52,430	52,431	1.62 GB
2月	1,062	1,747	784,684	784,686	10.03 GB
3月	1,132	2,032	845,324	845,325	2.61 GB
合計	15,937	26,304	11,987,764	11,987,771	44.12 GB



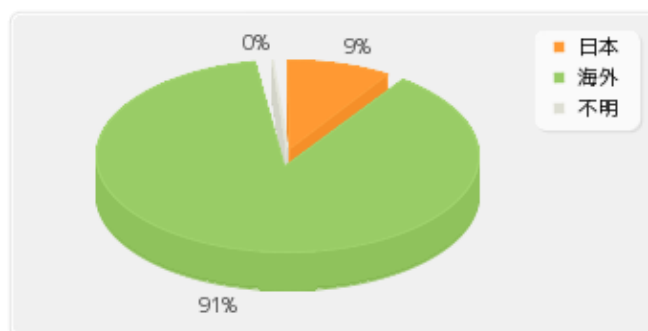
国内外の利用比率（2018年度）

## 月別のFTPサービス利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 11時11分



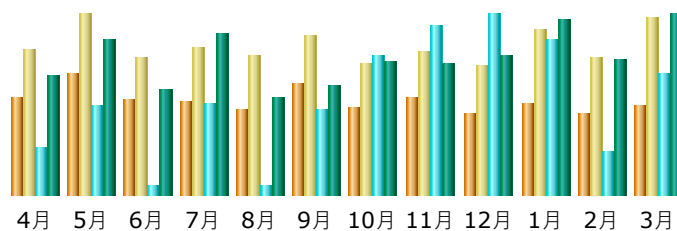
月	訪問者	訪問数	件数	バイト	/db/community/ (件数 バイト)	/db/mgenes/ (件数 バイト)	/db/rclass/ (件数 バイト)	/db/refgene/ (件数 バイト)	/db/virushostdb/ (件数 バイト)	/kegg/ (件数 バイト)	/tools/ (件数 バイト)
4月	327	624	14,008	95.49 GB	2,577 1.42 GB	50 16.30 MB	81 105.86 MB	63 4.43 GB	254 677.29 MB	518 2.87 GB	97 70.79 MB
5月	384	852	22,517	338.61 GB	1,504 2.58 GB	36 4.51 MB	29 213.82 MB	35 238.71 GB	516 1.35 GB	611 3.69 GB	47 548.40 KB
6月	306	692	4,732	239.61 GB	1,455 18.11 GB	14 5.17 MB	27 165.40 MB	8 14.74 KB	656 1.97 GB	475 2.54 GB	13 120.04 KB
7月	293	796	25,433	177.53 GB	3,685 2.60 GB	33 7.22 MB	24 96.91 MB	17 31.33 KB	842 2.23 GB	564 3.84 GB	69 27.32 MB
8月	266	588	5,744	273.92 GB	2,138 8.07 GB	33 7.40 MB	20 153.76 MB	20 36.86 KB	546 1.59 GB	470 2.36 GB	80 79.24 MB
9月	317	607	22,722	181.14 GB	2,117 5.41 GB	20 6.94 MB	20 90.28 MB	16 29.48 KB	283 725.12 MB	465 2.60 GB	71 54.08 MB
10月	337	548	33,791	208.14 GB	2,274 2.74 GB	17 3.90 MB	17 72.21 MB	9 16.58 KB	478 1.44 GB	537 3.13 GB	35 469.12 KB
11月	350	650	44,982	719.13 GB	6,426 28.05 GB	30 6.07 MB	27 198.88 MB	11 20.27 KB	349 873.32 MB	510 3.04 GB	37 439.59 KB
12月	336	761	46,329	455.04 GB	5,514 12.48 GB	32 5.79 MB	16 24.66 MB	9 21.84 KB	273 780.22 MB	494 3.24 GB	110 57.34 MB
1月	386	964	39,326	31.32 GB	4,057 1.82 GB	20 6.08 MB	26 137.03 MB	16 46.31 KB	407 1.15 GB	533 4.14 GB	94 109.83 MB
2月	365	882	13,495	389.68 GB	3,148 1.63 GB	36 7.28 MB	19 97.07 MB	19 55.00 KB	314 916.78 MB	485 3.25 GB	123 44.35 MB
3月	374	725	30,868	77.47 GB	2,825 4.38 GB	16 4.71 MB	28 379.41 MB	8 23.16 KB	254 609.10 MB	633 4.29 GB	79 26.80 MB
合計	4,041	8,689	303,947	3187.08 GB	37,720 89.27 GB	337 81.38 MB	334 1.69 GB	231 243.15 GB	5,172 14.20 GB	6,295 38.99 GB	855 471.30 MB



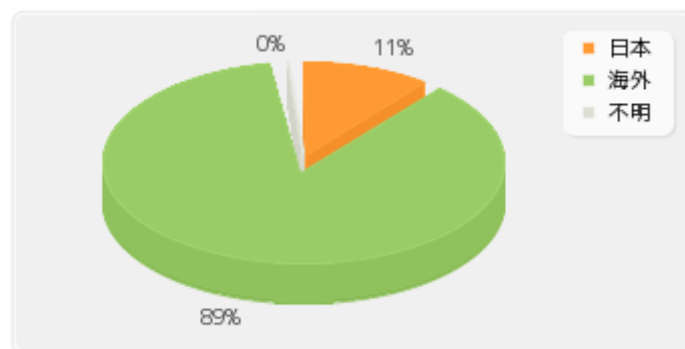
国内外の利用比率（2018年度）

# 月別のMEDICUS FTP利用状況（2018年度）

更新日時：2019年4月2日 11時23分



月	訪問者	訪問数	件数	バイト
4月	123	184	10,382	2.90 GB
5月	153	229	19,291	3.75 GB
6月	120	175	2,076	2.54 GB
7月	119	186	19,720	3.90 GB
8月	108	177	2,136	2.37 GB
9月	141	202	18,585	2.66 GB
10月	111	166	30,230	3.23 GB
11月	124	182	37,022	3.16 GB
12月	104	165	39,201	3.37 GB
1月	116	210	33,940	4.26 GB
2月	103	174	9,318	3.28 GB
3月	112	224	26,291	4.37 GB
合計	1,434	2,274	248,192	39.80 GB



国内外の利用比率（2018年度）

# 講習会等開催履歴

## 1991 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1992.01.04		スーパーコンピューター稼働開始		
1992.01.14	1日	スーパーコンピューター利用説明会(宇治地区)	約70名	
1992.01.28	2日	QUANTA 講習会	15名	CTCラボ社 今村 浩三
1992.02.19	1日	スーパーコンピューターラボラトリー披露式		
1992.02.27	1日	スーパーコンピューター利用説明会(京大、ゲノム)	約50名	
1992.02.27	2日	QUANTA 講習会	17名	CTCラボ社 今村 浩三

## 1992 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1992.06.02	1日	CHARMm 講習会	<a href="#">48名</a>	CTCラボ社 今村 浩三
1992.11.18	1日	UniChem1.1 講習会	<a href="#">16名</a>	日本クレイ社 田村 祐介
1992.11.24	1日	BIOSYM 講習会	<a href="#">8名</a>	菱化システム社 片岡 良一
1992.12.01	2日	FORTRAN 講習会	<a href="#">25名</a>	日本クレイ社 木下 利博

## 1993 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1993.04.19	1日	スーパーコンピューター利用説明会	約50名	
1993.04.20	1日	データベース利用講習会	<a href="#">32名</a>	化学研究所 荻原 淳
1993.05.18	3日	UNICOS 講習会	<a href="#">18名</a>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.06.15	3日	C言語入門 講習会	<a href="#">8名</a>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.07.13	1日	QUANTA/CHARMm 講習会	<a href="#">14名</a>	CTCラボ社 今村 浩三
1993.07.28	1日	Insight2/Discover 講習会	<a href="#">9名</a>	菱化システム社 片岡 良一
1993.10.19	1日	UniChem2.0 講習会	<a href="#">4名</a>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.10.21	1日	FORTRAN/C 最適化講習会	<a href="#">8名</a>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.11.24	1日	CHARMm22 講習会(応用編)	<a href="#">11名</a>	CTCラボ社 今村 浩三
1994.01.28	1日	ドキュメントツール講習会	<a href="#">7名</a>	日本クレイ社 飯坂 剛一

## 1994 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1994.04.19	1日	スーパーコンピューター利用説明会	<a href="#">56名</a>	
1994.05.27	1日	AVS 講習会	<a href="#">4名</a>	旭化成情報システム社 山口 宏
1994.06.24	1日	FORTRAN最適化 講習会	<a href="#">7名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.14	2日	UNIX 講習会	<a href="#">16名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.29	1日	UniChem2.0 講習会	<a href="#">4名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.09.21	1日	ドキュメントツール 講習会	<a href="#">10名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.09.27	1日	QUANTA4.0/CHARMm22.2 講習会	<a href="#">15名</a>	CTCラボ社 今村 浩三
1994.10.21	1日	FORTRAN90 講習会	<a href="#">5名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.11.18	1日	UniChem2.3 講習会	<a href="#">1名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.02.17	1日	ドキュメントツール 講習会	<a href="#">10名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂

## 1995 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1995.04.18	0.5日	スーパーコンピューター利用説明会(宇治地区)	<a href="#">30名</a>	
1995.04.19	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会	<a href="#">21名</a>	京都大学化学研究所 秋山 泰
1995.04.25	0.5日	スーパーコンピューター利用説明会(吉田地区)	<a href="#">29名</a>	
1995.04.25	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会(吉田地区)	<a href="#">78名</a>	京都大学化学研究所 秋山 泰
1995.05.19	0.5日	ネットワーク入門	<a href="#">16名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.19	0.5日	UNIX入門	<a href="#">15名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.25	1日	QUANTA/CHARMm	<a href="#">5名</a>	CTCラボ社 高橋 伸一
1995.06.02	1日	UNIX応用	<a href="#">7名</a>	日本クレイ社 佐藤 一茂

1995.07.28	1日	UniChem	5名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.11	1日	C言語入門	5名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.24	1日	FORTRAN最適化	5名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.25	1日	Fortran90	4名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.09.01	1日	ドキュメントツール	2名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.09.14	0.5日	ネットワーク入門	4名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.10.20	0.5日	WWW講習会	13名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.11.15	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会(病院地区)	51名	京都大学化学研究所 金久 實
1995.11.17	0.5日	C R A Yツール	3名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.12.13	0.5日	QUANTA-NMRオプション説明会	3名	CTCラボ社 高橋 伸一
1996.02.14	1日	QUANTA/CHARMm	18名	CTCラボ社 高橋 伸一
1996.03.14	1日	ドキュメントツール	2名	日本クレイ社 佐藤 一茂

### 1996 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1996.04.19	0.5日	スーパーコンピュータ利用説明会	8名	
1996.05.16	0.5日	UNIX入門	9名	日本クレイ社 福本 淳司
1996.05.17	0.5日	ネットワーク入門	12名	日本クレイ社 福本 淳司
1996.05.22	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会(吉田地区)	4名	京都大学化学研究所 五斗 進
1996.06.21	1日	UniChem	11名	日本クレイ社 福本 淳司
1996.06.28	1日	QUANTA/CHARMm	8名	CTCラボ社 高橋 伸一
1996.07.16	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会	36名	京都大学化学研究所 五斗 進
1996.07.25	1日	Fortran90	2名	日本クレイ社 福本 淳司
1996.09.26	1日	FORTRAN最適化	2名	日本クレイ社 福本 淳司
1996.10.02	1日	ドキュメントツール	5名	日本クレイ社 福本 淳司

### 1997 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1997.04.15	0.5日	スーパーコンピュータ利用説明会	39名	
1997.06.12	1日	Origin2000最適化	12名	日本SGIクレイ社 芦沢 芳夫
1997.06.19	1日	ネットワーク入門	15名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.06.19	1日	UNIX入門	16名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.07.17	1日	UniChem	10名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.09.04	1日	Fortran90	4名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.09.08	1日	QUANTA/CHARMm	6名	CTCラボ社 盛 崇
1997.09.11	1日	C言語入門	4名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.09.17	1日	Cerius2基礎	3名	CTCラボ社 安田 誠
1997.09.24	1日	InsightII/Discover基礎	3名	CTCラボ社 長浜 明子
1997.10.16	1日	ドキュメントツール	3名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.12.18	1日	MIPSproFortranプログラミング	6名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1997.12.09	1日	QUANTA/CHARMm応用	1名	CTCラボ社 盛 崇
1997.12.15	1日	Cerius2基礎	2名	CTCラボ社 安田 誠
1997.12.26	1日	InsightII/Discover応用	1名	CTCラボ社 長浜 明子
1998.01.12	1日	QUANTA/Biodolvmer	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.01.13	1日	QUANTA/Homologv	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.01.23	1日	InsightII/Homologv	1名	CTCラボ社 盛 崇

### 1998 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1998.04.21	1日	InsightII/Discover基礎	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.04.22	1日	InsightII/Discover応用	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.04.21	0.5日	スーパーコンピュータ利用説明会	22名	京都大学化学研究所 金久 實
1998.05.14	0.5日	パソコンからの利用	9名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1998.05.14	0.5日	UNIX入門	5名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1998.05.15	1日	UNIX応用	5名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1998.05.22	1日	UNIX入門	5名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1998.06.19	1日	HTML入門	7名	日本SGIクレイ社 福本 淳司
1998.06.23	1日	FORTRAN最適化	5名	日本SGIクレイ社 福本 淳司

1998.07.17	1日	UniChem	10名	日本SGI社 福本 淳司
1998.08.07	1日	HTML入門	5名	日本SGI社 福本 淳司
1998.08.12	1日	HTML入門	3名	日本SGI社 福本 淳司
1998.07.14	1日	InsightII/Discover基礎	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.07.15	1日	InsightII/Discover応用	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.09.29	1日	QUANTA/CHARMm	8名	CTCラボ社 盛 崇
1998.09.11	1日	InsightII/Discover基礎	7名	CTCラボ社 盛 崇
1998.10.02	1日	Cerius2基礎	6名	CTCラボ社 盛 崇
1998.10.30	1日	C言語入門	4名	日本SGI社 福本 淳司
1998.12.18	1日	ドキュメントツール	3名	日本SGI社 福本 淳司
1998.12.24	1日	VIDEOシステムの利用	4名	住商エレクトロニクス 倉田 真宏

### 1999年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1999.04.22	1日	スーパーコンピュータ利用説明会	15名	京都大学化学研究所 五斗 進
1999.06.23	1日	QUANTA/CHARMm	2名	住商エレクトロニクス 盛 崇
1999.06.24	1日	Cerius2基礎	9名	菱化システム 千葉 貢治
1999.06.25	1日	InsightII/Discover基礎	5名	菱化システム 千葉 貢治
1999.11.12	1日	UNIX入門	5名	日本SGI社 福本 淳司
1999.11.19	1日	UNIX応用	5名	日本SGI社 福本 淳司

### 2000年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2000.04.21	1日	スーパーコンピュータ利用説明会	5名	京都大学化学研究所 金久 實
2000.05.17	1日	UNIX入門	7名	日本SGI社 西川 和嗣
2000.05.25	1日	ホモロジーモデリング	3名	菱化システム 千葉 貢治
2000.05.24	1日	UNIX応用	2名	日本SGI社 西川 和嗣
2000.05.18	1日	UNIX入門	3名	日本SGI社 西川 和嗣
2000.06.15	1日	UniChem	5名	日本SGI社 西川 和嗣
2000.07.18	1日	Cerius2基礎	2名	菱化システム 佐藤 史一
2000.07.19	1日	InsightII/Discover基礎	3名	菱化システム 濱田 史子
2000.09.21	1日	HTML入門	3名	日本SGI社 西川 和嗣
2000.12.07	1日	ドキュメントツール	1名	日本SGI社 西川 和嗣

### 2001年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2001.05.24	1日	UNIX入門	7名	日本SGI社 上原 英也
2001.05.31	1日	C言語入門	6名	日本SGI社 西川 和嗣
2001.07.05	1日	Cerius2基礎	5名	菱化システム 佐藤 史一
2001.07.06	1日	InsightII/Discover基礎	5名	菱化システム 濱田 史子
2001.08.23	1日	UniChem	3名	日本SGI社 西川 和嗣
2001.12.11	1日	スーパーコンピュータ利用説明会	17名	日本SGI社 西川 和嗣

### 2002年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2002.04.25	1日	UNIX入門	8名	日本SGI社 西川 和嗣
2002.05.23	1日	Materials Studio講習会	7名	日本SGI社 西川 和嗣
2002.07.25	1日	SpaceFinder	2名	ダイキン工業 未綱 聖
2002.07.26	1日	Origin並列化プログラミング	7名	日本SGI社 松本 明子
2002.09.26	1日	HTML入門	4名	日本SGI社 山崎 正道
2002.10.25	1日	MPI/OpenMP	8名	日本SGI社 松本 明子
2002.11.28	1日	C言語入門	4名	日本SGI社 山崎 正道

### 2003年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2003.05.07	1日	UNIX入門	5名	日本SGI社 山崎 正道
2003.06.06	1日	HTML入門	2名	日本SGI社 山崎 正道
2003.07.23	1日	Materials Studio/CASTEP	8名	アクセルリス株式会社 稲田 安治
2003.08.25	1日	InsightII/Homology Modeling	7名	アクセルリス株式会社 Hongwei Huang
2003.09.26	1日	VMD基礎	3名	日本SGI社 山崎 正道

### 2004 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2004.05.25~27	3日	MDL/ISIS化学情報データベース	13名	日本MDLインフォメーションシステムズ 岸本、羽島、橋野、有田
2004.07.14~16	3日	Materials Studio	9名	アクセルリス株式会社 アクセルリス アプリケーションサイエン
2004.09.02~03	2日	InsightII/CHARMm, Homology	14名	アクセルリス株式会社 アクセルリス アプリケーションサイエン
2004.12.07	1日	Cerius2入門	2名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン

### 2005 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2005.05.24	1日	UNIX入門	7名	日本SGI 山崎 正道
2005.05.26	1日	HTML入門	8名	日本SGI 山崎 正道
2005.06.15	1日	Materials Studio/Discover	7名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2005.06.16	1日	CASTEP	3名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2005.07.21	1日	MDL-ISIS化学情報データベース	9名	日本MDLインフォメーションシステムズ 日本MDLエンジニア
2005.10.27	1日	QUANTA/DSセミナー	2名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2005.10.28	1日	InsightII/Homology Modeling	15名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン

### 2006 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2006.06.14	1日	Materials Studio/基礎	13名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2006.06.15	1日	Materials Studio/応用	13名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2006.07.19	1日	InsightII/CHARMm	1名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン

### 2007 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2007.06.19	1日	Materials Studio/Visualizer	1名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2007.06.19	1日	Materials Studio/Discover, Amorphous cell	2名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2007.06.20	1日	Materials Studio/CASTEP	2名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2007.06.20	1日	Materials Studio/Discover_BTCL入門	3名	アクセルリス株式会社 アクセルリス・アプリケーションサイエン
2007.07.26,27	2日	Elsevier MDL ISIS/Isentris化学情報データベース	16名	Elsevier MDL Elsevier MDL エンジニア

### 2008 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2008.05.29	1日	Gaussian入門	14名	日本SGI(株) HPCサービス事業本部 五十木 秀一
2008.06.19	1日	MOPAC入門	4名	富士通(株) バイオIT事業開発本部 鮫島圭一郎
2008.07.31	2日	Materials Studio	4名	アクセルリス(株) 稲田 安治
2008.08.07	1日	Q-Chem入門	2名	ビヨンド・コンピューティング(株) 田島 澄恵
2008.08.26	1日	Mathematica	4名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2008.09.11	1日	IMSL	1名	日本ビジュアルニューメリックス(株) 技術部 須賀恵美子
2008.11.06	1日	Altix並列化プログラミング	1名	日本SGI(株) HPCサービス事業本部 五十木 秀一
2008.11.14	1日	Isentris概要	7名	シミックステクノロジーズジャパン(株) カスタマーケア部 吉岡

### 2009 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2009.08.07	1日	AVS/Express Viz	1名	(株)KGT 松岡 憲昭
2009.08.26	1日	Discovery Studio	4名	アクセルリス(株) 斎藤 丈
2009.08.27	1日	Materials Studio/Discover, Amorphous cell	9名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2009.08.28	1日	Materials Studio/CASTEP	8名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2009.10.23	1日	Isentris概要	6名	シミックステクノロジーズジャパン(株) 出羽 俊和
2009.11.20	1日	Reaxys概要	15名	エルゼビアジャパン(株) エンジニア

### 2010 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2010.07.30	1日	AVS/Express Viz	1名	(株)KGT 松岡 憲昭
2010.08.03	2日	Materials Studio/基礎	3名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2010.08.05	1日	Discovery Studio	3名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2010.10.15	1日	Mathematica	5名	日本電子計算(株) 産業システム本部 伊藤雅将
2010.11.11	1日	Reaxys概要	24名	エルゼビアジャパン(株) Elsevier MDL エンジニア
2010.11.11	1日	Isentris/DiscoveryGate	12名	シミックステクノロジーズジャパン(株) アプリ担当 出羽 俊和

### 2011 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
-----	----	-----	-----	-----------



2011.07.21	1日	Mathematica	3名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2011.09.14,15	2日	Materials Studio	15名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2011.09.16	1日	Discovery Studio	11名	アクセルリス(株) 高岡 雄司
2011.10.21	1日	Reaxys概要	4名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本まゆみ

### 2012 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2012.06.15	1日	計算サーバ利用講習会	6名	日本SGI(株) 福本 淳司
2012.06.29	1日	並列化プログラミング講習会	4名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2012.07.05	1日	AVS/Express Viz講習会	1名	サイバネットシステム(株) 松岡 憲昭
2012.07.13	1日	SCIGRESS講習会	3名	富士通(株) TCソリ事業本部 大輔
2012.09.04	1日	Discovery Studio	7名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.09.05,06	2日	Materials Studio	5名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2012.09.14	0.5日	Gaussian	16名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2012.09.20	0.5日	Mathematica	15名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2012.09.25	1日	DS Developer Client講習会	2名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.12.13	0.5日	Reaxys講習会	10名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本まゆみ

### 2013 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2013.07.03	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2013.07.23	1日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2013.07.25	2日	Materials Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2013.07.30	0.5日	Mathematica 講習会	2名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2013.09.18	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵

### 2014 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2014.07.18	1日	Discovery Studio 講習会	3名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.23	2日	Materials Studio 講習会	13名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2014.08.27	0.5日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.30	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	2名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2014.09.03	0.5日	Gaussian 講習会	5名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014.10.16	0.5日	Mathematica 講習会	1名	日本電子計算(株) 産業事業部 伊藤 雅将
2014.11.06	0.5日	Reaxys講習会	1名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本 まゆみ

### 2015 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2015.06.17	0.5日	Gaussian 講習会	9名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2015.07.14	2日	Materials Studio 講習会	10名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2015.07.16	1日	Discovery Studio 講習会	9名	BIOVIA 高岡 雄司
2015.08.07	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔

### 2016 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2016.05.13	0.5日	第1回ゲノムネット講習会京大化研スパコン利用法	27名	日本SGI(株)上原英也、京大化研 緒方博之・五斗進
2016.07.05	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2016.07.06	2日	Materials Studio 講習会	16名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2016.07.20	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2016.09.02	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔
2016.09.15	0.5日	Mathematica 講習会	1名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2016.11.18	0.5日	Reaxys講習会	3名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2016.11.25	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一

### 2017 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2017.07.11	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2017.07.12	2日	Materials Studio 講習会	6名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2017.07.20	0.5日	Reaxys講習会	2名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2017.09.07	0.5日	Gaussian 講習会	15名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2017.09.15	0.5日	バイオユーザのための化研スパコンシステム利用法	23名	日本ヒューレット・パカード(株) 上原 英也

**2018 年度の講習会等開催記録**

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2018.07.17	1日	Discovery Studio 講習会	3 名	BIOVIA 高岡 雄司
2018.07.18	2日	Materials Studio 講習会	13 名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2018.07.20	0.5日	Mathematica 講習会	1 名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2018.09.11	0.5日	Gaussian 講習会	19 名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2018.09.13	0.5日	SCIGRESS 講習会	1 名	富士通(株) 高橋 篤也
2018.10.25	0.5日	バイオユーザのための化研スパコンシステム利用法	26 名	日本ヒューレット・パッカード(株) 上原 英也
2018.11.16	0.5日	Materials Science Suite 講習会	11 名	シュレーディングー(株) 永田 徹哉

平成30年度研究課題一覧

(京大大学所属)

化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	時任 宣博	新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	水畑 吉行	高周期典型元素を含む新規結合様式の創出
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	高橋 まさえ	フラットで完璧な $\pi$ 共役二次元シート「シリセン」の理論設計とその物性探索
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	新規フラレン誘導体の電子的性質
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	特異な構造をもつ有機分子の電子的性質
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	フラレンの構造変換に関する研究
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	廣瀬 崇至	新規構造を有する $\pi$ 共役系化合物の構造有機化学
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	橋川 祥史	三次元 $\pi$ 共役系の合成と性質に関する研究
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	安達 愛結美	内包フラレンの有機合成
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	上田 善弘	多官能基性化合物の位置選択的分子変換
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	化学研究所連絡用
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	不斉化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	坂本 雅典	ナノ粒子超構造の構築
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	佐藤 良太	無機ナノ粒子の精密合成と機能デバイスへの応用
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	猿山 雅亮	可視光応答性水分解光触媒の開発
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	Trinh Thuy	物質創製化学研究系 精密無機合成化学研究領域
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	松本 憲志	第三元素添加による新奇規則合金相Fe-Pdナノ粒子の創製
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	川脇 徳久	新規なヘテロ接合ナノ粒子合成経路の開発と人工光合成系への展開
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	高畑 遼	単一構造カドミウムカルコゲニドクラスター群の精密合成と光物性評価
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	劉 明翰	E-mail利用
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	辻井 敬亘	高分子ブラシの構造と物性
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	大野 工司	リビングラジカル重合法による新規機能性高分子の合成
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	榎原 圭太	リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボルブラシの合成と高次構造の創製
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	山子 茂	精密合成反応の設計
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	高見 佐織	E-mail利用
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	登阪 雅聡	透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	茅原 栄一	環状 $\pi$ 共役分子の合成とその物性
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	橋本 土雄磨	CPP, CPP誘導体の合成と三次元構造体への展開と、超分子構造体の合成と機能探索
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	李 文娟	新規重合開始剤および関連反応開発に関する研究
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	藤田 健弘	新規ラジカル重合の開発
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトニクス材料	水落 憲和	ダイヤモンド中のNV中心を用いた研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトニクス材料	森下 弘樹	ダイヤモンド発光中心を利用した光ナノ材料研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトニクス材料	藤原 正規	ダイヤモンドを用いた量子情報およびバイオイメージング研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトニクス材料	林 寛	E-mail利用
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	小野 輝男	ナノスピントロニクス
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	小野 輝男	ナノスピントロニクスの研究
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	山口 美保	ナノスピントロニクス研究に関する事務補佐
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	楠田 敏之	極低温物性化学実験室の管理
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	森山 貴広	高周波スピントロニクスデバイスの研究
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	塩田 陽一	ナノスピントロニクス
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	二木 史朗	機能性人工蛋白質の創出
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	二木 史朗	機能性ペプチドの創製
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	二木 史朗	ペプチド
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	田中 由美	生体機能設計化学の研究支援
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	今西 未来	亜鉛ファンゲータータンパク質を用いた転写制御分子の創製
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	河野 健一	ペプチドの膜透過
化学研究所	生体機能化学研究	生体触媒化学	山口 信次郎	植物ホルモンの分子機構
化学研究所	生体機能化学研究	生体触媒化学	渡辺 文太	酵素阻害剤の設計と合成研究
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	青山 卓史	植物の細胞内の情報伝達
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	青山 卓史	分子生物学
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	安田 敬子	分子生物学
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	柘植 知彦	植物環境応答制御機構の分子基盤
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	加藤 真理子	植物形態形成に関わる細胞内情報伝達機構の解析
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	寺本 日出美	植物分子生物学の研究
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	上杉 志成	ケミカルバイオロジー: 小分子化合物を起爆剤とした生物学の研究
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	佐藤 慎一	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	Perron Amelie	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	竹本 靖	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	安保 真裕	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	中島 光恵	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	ブンザラン ルービー	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	八塚 研治	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	Mendoza Aileen	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	Vu Hue	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	茅 迪	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	高嶋 一平	ケミカルバイオロジー
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	梶 弘典	有機非晶質科学の研究
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	梶 弘典	有機デバイスの基礎科学と高機能化
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	志津 功将	理論化学、計算化学に基づいた新規有機デバイス材料の開発
化学研究所	環境物質化学研究	水圏環境解析化学	宗林 由樹	水圏微量元素の研究





宇治地区事務部	研究協力課	井上 祐樹	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	福田 光宏	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	後藤 慶太	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	春木 淳	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	山本 啓	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	橋本 伸	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	日下部 忠繁	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	八木 裕美	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	大戸 瑞穂	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	杉山 かおり	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	新井 智子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	永田 明世	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	谷川 禪	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	福島 典子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	北川 伸代	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	中谷 浩美	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	鹿間 順子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	木下 亜紀子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	柴田 由香里	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	宮内 徹也	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	伊勢脇 純子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	小澤 亜耶	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	中野 直子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	井出 恵美子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	太田 妃登美	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	大下 美圭	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	原田 ひろみ	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	森西 桂子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	沢田 裕美	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	工藤 亜矢	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	大西 愛	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	田上 款	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	吉岡 佐知子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	山本 和人	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	西川 知延	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	小林 宏隆	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	南雲 円	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	西浦 利行	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	古田 学	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	西島 千賀	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	濱本 文平	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	北脇 朋樹	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	山本 潮	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	松本 春奈	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	金澤 真美子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	清水 節子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	宮井 信和	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	寺嶋 孝仁	遷移金属酸化物薄膜の合成と物性
理学研究科	理学部 物理学・宇宙物理学専攻	荒木 武昭	ソフトマターの相転移ダイナミクス
理学研究科	理学部 物理学・宇宙物理学専攻	渡邊 一也	E-mail利用
理学研究科	理学部 化学専攻	藤橋 雅宏	E-mail利用
理学研究科	理学部 化学専攻	朝光 世煌	がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発
理学研究科	理学部 化学専攻	野木 馨介	遷移金属触媒を用いたヘテロ環化合物の再構築反応開発
理学研究科	理学部 化学専攻	野田 泰斗	量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析
理学研究科	理学部 化学専攻	中野 義明	分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	奥野 恭史	創薬のための合成反応予測
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	石田 祥一	E-mail利用
医学研究科	医学部 医学・医科学専攻	古川 喜規	細胞の生存と死を決定する制御システムの数理モデル化
薬学研究科	薬学部 薬科学専攻	瀧川 紘	高反応性化学種を活用する有機合成化学
薬学研究科	薬学部 薬科学専攻	長島 卓也	モレキュラードッキングシミュレーションを用いた薬物有害事象メカニズムの推定
薬学研究科	薬学部 医薬創成情報科学専攻	大野 浩章	生物活性化合物の創製を指向した有機化学研究
薬学研究科	薬学部 医薬創成情報科学専攻	掛谷 秀昭	ケモインフォマティクスおよびバイオインフォマティクスを活用したケミカルバイオロジー研究
薬学研究科	薬学部 薬科学専攻	竹本 佳司	E-mail利用
工学研究科	工学部 機械理工学専攻	内藤 悠太	エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価
工学研究科	工学部 機械理工学専攻	上野 哲也	計算化学を活用した無機物の分子レベル挙動に関する研究
工学研究科	工学部 マイクロエンジニアリング専攻	立花 明知	原子分子相互作用系に関する理論的研究
工学研究科	工学部 航空宇宙工学専攻	吉川 侑汰	プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析
工学研究科	工学部 電子工学専攻	重松 英	IV族半導体へのスピン注入物性測定
工学研究科	工学部 電子工学専攻	竹内 繁樹	光子を用いた量子情報科学に関する研究
工学研究科	工学部 材料化学専攻	木村 俊作	ポリペプチドのコンホメーションに関する研究
工学研究科	工学部 材料化学専攻	宇治 広隆	ヘリックスペプチドの電気的的特性の解析
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	大江 浩一	含窒素複素環をニトロ前駆体とする触媒
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	三木 康嗣	カーボンナノリングとカーボンナノチューブの相互作用
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	岡本 和紘	遷移金属触媒を用いた新規変換反応の開発

工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	岡本 和紘	有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	陰山 洋	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	野尻 聡子	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	タッセル セトリック	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	小林 洋治	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	高津 浩	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	山本 隆文	低温還元法を用いた鉄酸化物の合成
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	中島 崇秀	新規液相ヒドリの合成
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	樋熊 亮輔	溶液中におけるヒドリドイオンの単離
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	唐 亜	酸水素化合物への表面吸着・反応
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	近藤 輝幸	高次生体イメージング先端テクノハブプロジェクト研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	木村 祐	高感度Gd-MRI造影剤のPEG化および抗体修飾によるDDS構築
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	阿部 竜	高効率可視光応答型光触媒系の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	阿部 竜	高効率可視光応答型光触媒系の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	東 正信	光触媒・光電極による高効率水分解システムの開発
工学研究科 工学部 経理事務センターAクラスター事務区会計掛	東 正信	物質エネルギー化学専攻の研究推進
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	辻 康之	触媒有機化学に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	遷移金属錯体触媒を利用する二酸化炭素固定化反応の開拓
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	銅触媒を用いる新規分子変換反応の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	小久見 善八	リチウムイオン電池に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	江口 浩一	炭化水素の低温燃焼触媒の研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	伊藤 彰浩	開殻分子の電子構造に関する理論的研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	細川 三郎	金属酸化物ナノ粒子の合成とその応用
工学研究科 工学部 分子工学専攻	今堀 博	人工光合成系の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	梅山 有和	光合成モデル化合物の合成
工学研究科 工学部 分子工学専攻	東野 智洋	有機分子を用いた新規な機能性材料の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	櫻井 庸明	有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価
工学研究科 工学部 高分子化学専攻	伊藤 峻一郎	13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	松田 建児	HOPG基板上における分子配列のモデリング
工学研究科 工学部 化学工学専攻	鈴木 哲夫	吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討
工学研究科 工学部 化学工学専攻	田中 秀樹	多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移
工学研究科 工学部 化学工学専攻	山本 量一	ソフトマターの研究
工学研究科 工学部 附属工学基盤教育研究センター	大嶋 光昭	E-mail利用
工学研究科 工学部 化学工学専攻	引間 悠太	ATR-FTIR法を用いた高分子成形プロセスの品質管理法の開発
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	長田 裕也	溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	西川 雅章	エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	松本 充弘	計算化学的手法による有機物の熱物性・輸送特性予測
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	上野 哲也	計算化学を活用した有機物の分子レベル挙動に関する研究
エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻	蜂谷 寛	エネルギー機能材料の電子構造と光物性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	馬淵 守	軽金属・合金の力学特性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	楠田 啓	材料界面・表面の電子論的研究
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	袴田 昌高	多孔質金属の表面特性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	陳 友晴	ポーラス金属の機能解明
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	木村 史子	変調磁場による微結晶の三次元配向
農学研究科 農学部 森林科学専攻	久住 亮介	磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	植田 充美	コンビナトリアル・バイオ工学
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	吉田 天士	ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	吉田 天士	ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
農学研究科 農学部 地域環境科学専攻	赤松 美紀	生理活性物質の構造活性相関
人間 環境学研究科 人間環境学専攻	津江 広人	有機分子性結晶の気体吸着特性の解析
人間 環境学研究科 人間環境学専攻	廣戸 聡	三次元π共役分子の合成の機能性の創出
人間 環境学研究科 人間環境学専攻	上田 純平	長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析
人間 環境学研究科 人間環境学専攻	高橋 弘樹	優先富化現象を示す有機化合物の検索
高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 堀毛グループ	堀毛 悟史	有機構造体を用いたイオン伝導体合成
高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 藤田グループ	藤田 大士	自己集合を利用したタンパク質のカプセル化
高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 Sivaniyahグループ	ウチイ	混合マトリクス膜中のガス輸送特性に関する計算機シミュレーション
高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 北川グループ	細野 暢彦	多能性細孔物質の深化
福井謙一記念研究センター 理論研究部門	佐藤 徹	振電相互作用に関する理論的研究
産官学連携本部	湊 丈俊	蓄電池材料の構造と物性
産官学連携本部	山中 俊朗	電池材料のラマンスペクトルの計算
産官学連携本部	CelikKucuk Asuman	蓄電池の電解液中のイオン間相互作用の計算科学的検討
学際融合教育研究推進センター	吉元 健治	高分子溶液の相分離に関する大規模なシミュレーション

(京都大学以外所属)

情報・システム研究機構 データサイエンス共同利用基盤施設  
 東京大学 大気海洋研究所 地球表層圏変動研究センター  
 東京大学大学院 理学系研究科 生物科学専攻岩崎研究室  
 東京工業大学 生命理工学院 山田研究室  
 茨城大学 工学部 生体分子機能工学科  
 北海道大学 触媒科学研究所  
 久留米工業高等専門学校  
 福岡工業大学 工学部 生命環境科学科  
 株式会社生物技研  
 信州大学 農学部  
 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 生物プロセス研究部門  
 株式会社KRI ナノ構造制御研究部  
 広島大学大学院 工学研究科 機械物理工学専攻

五斗 進  
 西村 陽介  
 松井 求  
 上田 敦史  
 吾郷 友宏  
 古川 森也  
 黒飛 敬  
 蒲池 高志  
 半田 佳宏  
 齋藤 勝晴  
 岡崎 友輔  
 中江 隆博  
 Carles Serrat

生体分子情報データベースの開発とその応用  
 遺伝子情報を用いた海洋生態系研究  
 グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用  
 ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析  
 典型元素を活用した機能性材料の開発  
 規則性合金の触媒作用に関する理論的研究  
 密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索  
 ゲノム解析  
 共生菌のゲノム解析  
 琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析  
 炭素材料の物性研究  
 高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅

東京大学 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻  
東京大学 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻  
株式会社ゲノムアナリティクスジャパン  
東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門  
東京大学大学院 理学系研究科 生物科学専攻

(無所属)

笠原 雅弘  
藤野 健  
八谷 剛史  
平野 敏行  
浜口 悠貴

藪崎 純子

スギゲノムの解読と解析  
スギゲノムの解読と解析

タンパク質の電子状態計算  
アミノアシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源

カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築



京都大学化学研究所  
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp>