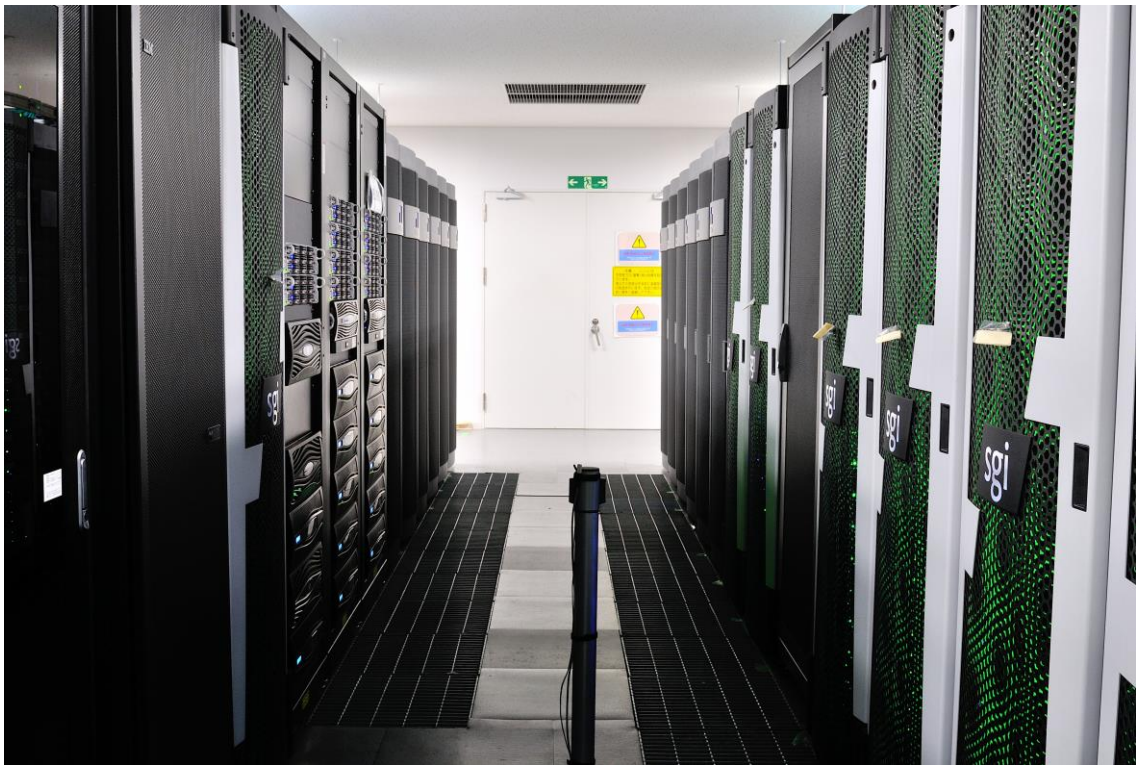


スーパーコンピュータシステム

平成 28 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。2012 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 UV1000 (総 CPU コア数 3,072) を、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 Sun Fire X4800 (総 CPU コア数 768) を採用していました。2016 年 1 月には、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバは SGI UV2000 (総 CPU コア数 1,024) および SGI C2112 (総 CPU コア数 3,000) へ、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバは DELL PowerEdge R930 (総 CPU コア数 640) へと移行されました。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 28 年度の 365 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、61 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 28 年度は 7 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

2017 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

特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎		1
リビングラジカル重合法を用いたボトルブラシの合成と高次構造の創製	榊原 圭太		2
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		3
次世代リビングラジカル重合制御剤の開発	中村 泰之		4
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一		5
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の研究	橋本 士雄磨		6
たんぱく質間相互作用を制御する合成分子の創製	大神田 淳子		7
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典		8
溶液および界面の振動分光学	長谷川 健		9
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆		10
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖		11
高効率有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と	中村 正治		12
遷移金属錯体の構造探索	竹内 勝彦		13
巨大DNAウイルスゲノムの解析	緒方 博之		14
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 Romai		16
ジャンボファージXacN1のゲノム解析	吉川 元貴		17
バイオインフォマティクスの手法を用いたリパクレオン投与マウスの腸内細菌叢の解析	西山 拓輝		18
ゲノムデータに基づく知識発見	黒西 愛		19
メタゲノムの組成に基づく比較法の開発	荒巻 拓哉		20
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		21
海洋メタゲノムから得られたウイルスゲノムの多様性に関する研究	西村 陽介		22
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也		23
三角不等式を制約として考慮した整数計画法による中央文字列と中心文字列の厳密解法的高速化	林田 守広		24
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾		25
生体分子情報データベースの開発	五斗 進		26
プロテオーム・データベースの構築	吉沢 明康		27
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	笹森 貴裕		28
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		29
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明	鈴木 裕子		30
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行		31
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		32
ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化と解析	田村 武幸		33

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素細線物質に関する理論計算	中江 隆博		34
------------------	-------	-------	----

防災研究所

海底圧力計を用いたヒクラング沈み込み帯における浅部スロー スリッスイベントの検出	村本 智也		35
---	-------	-------	----

理学研究科・理学部

ソフトマターの相転移ダイナミクス	荒木 武昭		36
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明		37

工学研究科・工学部

触媒有機化学に関する研究	辻 康之		38
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平		39
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹		40
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之		41
多孔性配位高分子の合成と性質	植村 卓史		42
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至		43
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦		44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	前田 尚生		45
分離プロセスの量子化学的研究	田門 肇		46
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫		47
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹		48
キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存 性らせん反転の機構解明	長田 裕也		49

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		50
軽金属・合金の力学特性	馬淵 守		51
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高		52

農学研究科・農学部

変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子		53
------------------	-------	-------	----

人間・環境学研究科

有機分子性結晶の気体吸着状態の解析	津江 広人		54
-------------------	-------	-------	----

長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析	上田 純平		55
-----------------------	-------	-------	----

生態学研究センター

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		56
--------------------------	-------	-------	----

物質—細胞統合システム拠点

多能性細孔物質の深化	日下 心平		57
------------	-------	-------	----

学際融合教育研究推進センター

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	吉元 健治		58
---------------------------	-------	-------	----

京都大学以外

グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発	松井 求		59
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史		60
典型元素を活用した機能性材料の開発	吾郷 友宏		61
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也		62

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		63
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣		70
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣		72
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		90
平成28年度研究課題一覧			95

特異な構造をもつ有機分子の電子的性質

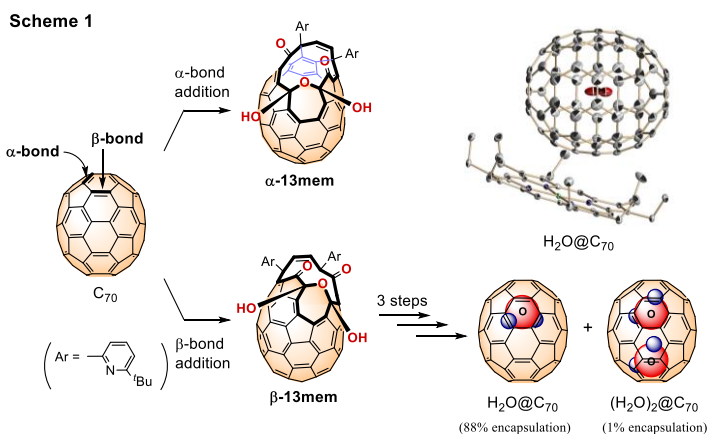
Electronic Properties of Organic Molecules with Novel Structure

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

当研究室ではフラーレンの炭素骨格の変換反応を機軸として、水分子を内包した C_{60} の有機化学的な合成法を開発した¹。一方、 C_{60} より大きな内部空間をもつ C_{70} に関する研究は大きく遅れを取っている。そこで本研究では、 C_{70} の大きな内部空間に二つの水分子を内包させたフラーレン C_{70} の合成ルートの開発に取り組んだ (Scheme 1)。

C_{70} 骨格の中で最も反応性の高い α 結合に対する構造修飾により、三段階の反応で得られた開口体 **α -13mem** は、高温高压条件下においても水分子を効率的に内部に導入できなかった。それとは対照的に、 β 結合に対する構造修飾により開口部を構築した **β -13mem** では、高压条件下において水分子の導入



が効率的に進行し、水一分子の内包体(88%)に加え、二分子内包体(1%)を生成することがわかった。この結果は、二種類の C_{70} 開口体(**α -13mem** および **β -13mem**)の開口部サイズが異なることを示唆している。そこで、モデル反応としてアルゴン原子の挿入に関する DFT 計算 (M06-2X/6-31G*)を実施したところ、 **β -13mem** ($\Delta E^\ddagger = 43.8$ kcal/mol) の方が **α -13mem** ($\Delta E^\ddagger = 48.7$ kcal/mol) と比較して活性化エネルギーが低く ($\Delta\Delta E^\ddagger = 4.9$ kcal/mol), **β -13mem** の開口部がより大きいことが示された。また、開口部を閉じることによって得られた $H_2O@C_{70}$ ならびに $(H_2O)_2@C_{70}$ の 1H NMR の化学シフトを比較すると、 $(H_2O)_2@C_{70}$ の骨格内部の水分子が 1.87 ppm 低磁場側にシフトしていることがわかった。これは内包された二つの水分子は C_{70} ケージ内部で水素結合を形成していることを示す結果である。理論計算により内包された水分子のケミカルシフト値を計算した結果 (GIAO-B3LYP/6-311G**// ONIOM (MP2/6-311++G** : M06-2X/6-31G*)), 水素結合をもつ水二量体は水単分子と比較して 1.61 ppm 低磁場側にシフトすることが再現されたことから、 C_{70} 骨格内部における水素結合の形成が明らかとなった。

1. Kurotobi, K.; Murata, Y. *Science*, **2011**, 333, 613.

発表論文(謝辞なし):

1. Zhang, R.; Murata, M.; Aharen, T.; Wakamiya, A.; Shimoaka, T.; Hasegawa, T.; Murata, Y. *Nat. Chem.* **2016**, 8, 435.

リビングラジカル重合法を用いたボトルブラシの合成と高次構造の創製
Fabrication of Supramolecular Structures of Molecular Bottlebrushes Synthesized through
Living Radical Polymerization

京都大学 化学研究所 高分子材料設計化学研究領域 榊原 圭太

研究成果概要

高密度に分枝鎖が導入された櫛型ポリマーはボトルブラシと呼ばれ、側鎖の排除体積効果により主鎖が伸張した剛直鎖として振舞う。また、異種側鎖が導入されたボトルブラシはヤヌス型ボトルブラシと呼ばれ、高次構造のビルディングブロックとして着目される。異なる溶液中におけるヤヌス型ボトルブラシのコンホメーションは、溶媒と側鎖の相互作用の差が主鎖の剛直性に与える影響の観点から興味を持たれるが、その報告例は極めて少ない。こうした背景の中、筆者らはこれまで、世界最大の植物バイオマスであるセルロースを主鎖とし、異種側鎖を位置選択的に導入した新規ヤヌス型ボトルブラシの創製を目指している。セルロースとは無水グルコース単位 (anhydroglucose unit; AGU) が β (1 $\rightarrow$ 4) 結合をした半剛直かつキラルな高分子であり、AGU あたり反応性の異なる 3 つの水酸基 (6 位 1 級水酸基、2,3 位 2 級水酸基) を有する。水酸基に置換基を導入したセルロース誘導体は、置換基がらせん状に配置される。ゆえに、セルロース系ヤヌス型ボトルブラシは、セルロース鎖に拘束されることで、らせん状シリンダー構造を形成すると考えた。本研究では、セルロースの水酸基に polystyrene (PSt) 鎖および poly(ethylene glycol) (PEG) 鎖を導入した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) の化学構造と側鎖高分子の局所分子形態の相関の解明を目指した。

各種セルロース系ボトルブラシを合成し、SEC-MAL 測定および小角X線散乱(SAXS)測定に供した。その結果、溶媒の品質、側鎖の分子量、および位置選択性によって、主鎖の剛直性や断面の平均二乗回転半径などの特性が変化することを確認した。本実験結果を説明すべく、モデル分子によるシミュレーションの検討を試みている。

発表論文(謝辞なし)

Y. Kinose, K. Sakakibara, Y. Tsujii, *Polym. Prep. Jpn.*, **65**, 3Pa013 (2016).

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

今年度の本研究では、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。我々は以前、冷却結晶化した架橋PDMSの広角X線回折(WAXD)測定を行い、結晶化前に与えた延伸倍率に応じて異なるWAXDパターンが出現する事を見出した。延伸倍率が大きい時と小さい時で異なるWAXDパターンが出現するのだが、それらの中間に対応する延伸倍率では回折スポットの位置が連続的に変化し、WAXDパターンが入れ替わるという、極めて特異な挙動が観察された。その際に構造変化がどのような機構で起こっているかは、極めて興味深い課題である。しかしPDMS結晶は未だ構造解析されていないため、具体的な分子の形に基づく議論が出来ない。そこで、独自のX線構造解析に着手した。

一昨年度までに、延伸下、 -100°C で冷却結晶化したPDMS試料のWAXDパターン(図1)を得ている。このWAXDパターンより決定した結晶の単位格子中に、分子を配置した場合のWAXDパターンをMaterials Studioによりシミュレーションした。しかしながら、この単位格子を用いる限り、実測のパターンを再現することは困難であった。そこで、透過型電子顕微鏡(TEM)中で未架橋のPDMSを冷却し、単結晶の電子線回折(ED)を得る事により、別途単位格子の決定を試みた。 $hk0$ 反射の配置から、PDMSには図2のEDパターン

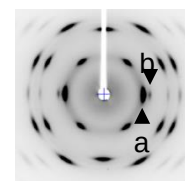


図1 延伸倍率6倍におけるPDMSのWAXDパターン。

に対応する単位格子を持つ、三種類の結晶型が存在すると考えられた。図1中aで示した反射は図2のcell 1中aで示した反射と対応している。また、cell 1からcell 3まで、多くの反射において回折角がほぼ一致しており、WAXDの繊維図形では区別が出来ない。従って、図1のWAXDパターンに出現した反射には、図2に示した三種類の単位格子によるものが混在している可能性がある。かつ、図1中bで示した赤道($hk0$)反射は図2に観察されないため、これらとは別に、伸長により誘起された別の結晶型も存在すると考えられる。上記のセル中でエネルギー的に安定であり、回折パターンの特徴を再現できる構造を、Materials Studioにより探索した結果。これら3種類の実測EDパターンをよく再現する構造を見つけることが出来た。

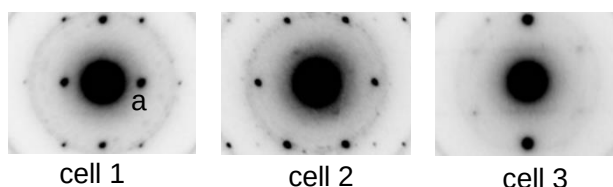


図2 PDMSのEDパターン。

発表論文 (研究終了後に投稿の予定)

次世代リビングラジカル重合制御剤の開発

Development of the next-generation controlling agent in living radical polymerization

京都大学化学研究所 高分子制御合成領域

中村泰之

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、新たなリビングラジカル重合制御剤の開発に係る化学反応機構の研究を行った。

有機テルル化合物、有機アンチモン化合物がリビングラジカル重合の制御剤として優れた性質を持つことをこれまでに明らかにしている。一方で新しい分子構造を持つ有機テルル、アンチモン化合物の開発は、重合制御能の向上や、重合反応の生成物であるポリマーの末端基の修飾などの観点から興味深い。重合制御能は化合物の C-Te または C-Sb 結合の結合解離エネルギーと密接な関係があることから、新しい制御剤の設計においてこれら結合解離エネルギーを見積もることは非常に有用である。

Gaussian ソフトウェアを用いて、種々の有機テルル、アンチモン化合物について C-Te 結合または C-Sb 結合の結合解離エネルギーを算出した。適当な大きさの結合解離エネルギーを持つ化合物については実際に合成を行い、重合制御能について検討を行った。

今後もより高い制御能や、新しい分子構造を持つ化合物の設計および反応性の予想のために計算サーバーを利用する予定である。

含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価Synthesis of Strained π -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

背景と目的

[n]シクロパラフェニレン ([n]CPP) は、シンプルにして無駄のない美しい構造を有し、多くの科学者を魅了している。特に、近年、CPPのボトムアップ合成法が報告されたのを契機として、CPPをはじめとした環状 π 共役系分子の化学が大きく発展している。¹⁾ 本研究では、CPPの曲面 π 電子系を π アレーン配位子として用いることで、CPPがRuに η^6 で π 配位したCPP-Ruサンドイッチ錯体の合成と同定に成功した。²⁾

結果

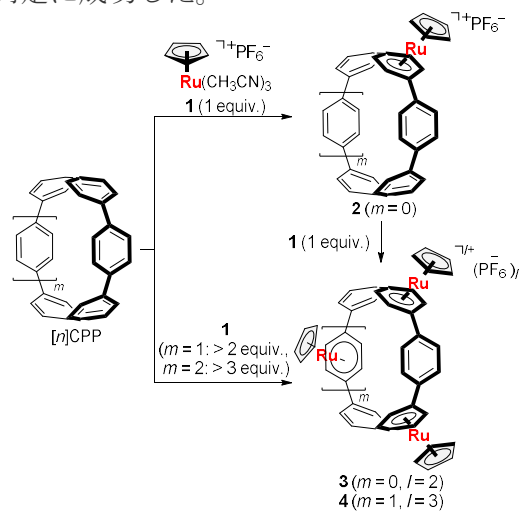
[5]CPP²⁾に 1 当量の Ru 錯体 **1** を作用させたところ、単核 Ru 錯体 **2** が高収率で得られた (Scheme 1)。また、2 当量の **1** を用いると、二核 Ru 錯体 **3** が得られた。一方、2 当量以上の **1** を用いてもさらなる錯形成は進行せず、**3** のみを得られた。さらに、[6]CPP と 3 当量以上の **1** との反応では、Ru 三核錯体 **4** が高収率で得られた。**3**, **4** とも構造異性体の生成が考えられるが、いずれにおいても単一の生成物を得られ、その構造は NMR、および X 線結晶構造解析により一義的に同定した。

多核錯体における高い位置選択性を明らかにするために、DFT 計算により可能な構造異性体の構造を求めた (Figure 1)。例えば、錯体 **4** では、**4** の他に、構造異性体 **4'**、**4''** が存在する。それらの熱力学的安定性を見積もると、実験で得られた **4** が異性体の中で最も熱力学的に安定であることが示された。

合成した錯体は CPP の物性と遷移金属の特徴を合わせ持つと考えられることから、CPP の選択的な官能基化への利用、特徴的な触媒機能や光、電子物性の発現といった観点から興味深いと考えている。

参考文献 (1) Yamago, S.; Kayahara, E.; Iwamoto, T. *Chem. Rec.* **2014**, *14*, 84.

発表論文 (謝辞あり) (2) Kayahara, E.; Patel, V. K.; Mercier, A.; Kündig, E. P.; Yamago, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 302.



Scheme 1. Synthesis of mono- and multinuclear ruthenium [5] and [6]CPP complexes.

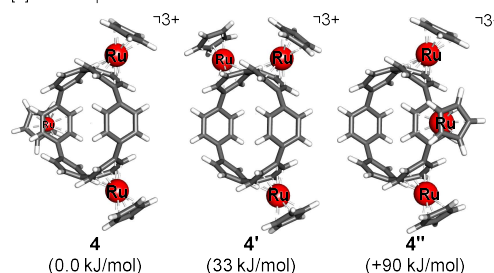


Figure 1. Calculated regioisomers of $[(Cp)Ru]_3[6]CPP^{3+}$ obtained by DFT calculation using the B3LYP/6-31G(d) (C, H) and LANL2DZ (Ru). The relative energy (kJ/mol) with respect to the most stable isomer is shown in parenthesis. Black, white, and red represent carbon, hydrogen, and ruthenium atoms, respectively.

サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の研究
Host-guest Chemistry of Cycloparaphenylenes with Different Diameters

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

我々は、 π 共役分子、中でも曲面 π 共役系を有する分子が積層した高次構造に興味を持って研究を行なっている。バッキーオニオンや多層カーボンナノチューブなど、積層した曲面間で働いている π - π 相互作用や、その構造がどのような要因により形成されるかについては必ずしも明らかではなく、これらの解決のためには、凹凸を持つ曲面 π 共役分子間の分子レベルでの相互作用の理解が重要であると考えている。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、多層曲面 π 共役炭素材料のモデル分子となりうるシクロパラフェニレン(CPP) 錯体の包接挙動について、理論計算による検討を行なった。

相互作用が予想される[n]CPP と[n+5]CPP ($n = 5-8, 10$)との包接錯体について、DFT 計算(ω B97X-D/6-31G*)による構造最適化計算を行なったところ、 n が 6 以上の場合、ホスト CPP とゲスト CPP の π 共役面が斜めに交差する、Planetary orbit 型の構造が最安定構造として得られた。一方、 n が 5 の場合にのみ、平行に少しずれた Russian doll 型の構造が得られ、Planetary orbit 型よりもわずかに安定であることがわかった。これは[5]CPP の場合では Russian doll 型に包接された際に相互作用により得られるエネルギーが、包接に伴う構造変化による歪みエネルギーを上回ったためと考えている。今後、これらの錯体の結晶化を試み、単結晶 X 線回折によりその結晶構造も明らかにすることで、理論との両面から包接挙動について解析を進める予定である。

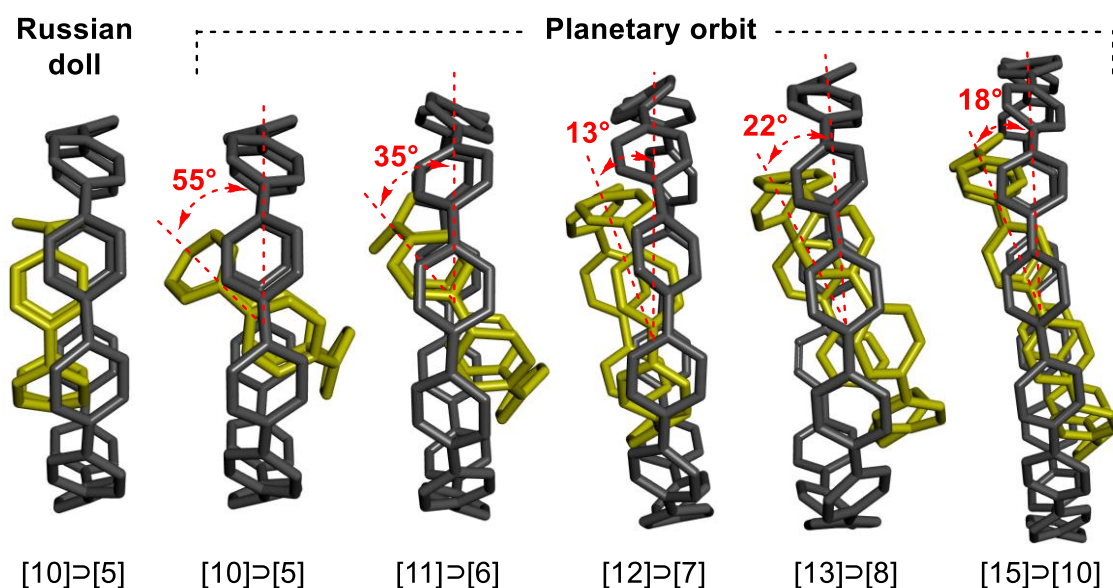


図 1. [n + 5]CPP⊃[n]CPP の構造

たんぱく質間相互作用を制御する合成分子の創製
Rational Design of Synthetic Agents that Control Protein-protein Interactions

京都大学 化学研究所 ケミカルバイオロジー領域

大神田淳子

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、K-Ras と、K-Ras の脂質翻訳後修飾を担うファルネシル転移酵素(FTase)およびゲラニルゲラニル化酵素(GGTase-I)との間に起こる過渡的 PPIs を阻害するアンカー型中分子を、生物学的に安定なイミダゾール含有ペプチドミメティクスを用いて合理設計し、生物活性を評価することを目的とした。

約 65 万以上のたんぱく質間相互作用(PPIs)の約 8 割が、分化・増殖、細胞死、老化等多様な生体反応を司る細胞内信号伝達系の構築に関わっている。近年、PPs の異常とがんや神経変性疾患等の関連が解明され、PPIs はポストゲノム時代の新薬の標的として広く注目されている。今後、PPI ネットワークの解明ならびに PPI 創薬をより推進してゆくためには、細胞透過型の分子プローブおよび PPI 阻害剤の設計法の抜本的な改革が必要である。本研究では、細胞で機能する中分子 PPI 阻害剤および検出プローブの開発の一環として、悪性腫瘍の原因因子である K-Ras たんぱく質の翻訳後修飾を対象とした新規阻害剤の合理設計と合成、酵素阻害活性評価を計画した。

K-Ras の翻訳後脂質修飾酵素であるファルネシル転移酵素(FTase)ならびにゲラニルゲラニル転移酵素(GGTase-I)の結晶構造に基づいて、活性ポケット認識モジュールを合理設計した。これまでの研究で、K-Ras の C 末端テトラペプチド配列 CVIM を模倣したペプチドミメティクスを含有する中分子 PPI 阻害剤が、細胞内の K-Ras の翻訳後修飾を阻害することを見出していた。しかし、活性中心の亜鉛イオンに配位するシステイン残基が酸化されやすく、化合物の安定性の向上が課題となっていた。そこで本研究では、システインに代わってイミダゾールを亜鉛イオン配位として用いる戦略を検討した。

まず CVIM の伸長構造を模倣するように設計した各種のイミダゾール含有誘導体と FTase のドッキングシミュレーションを実施し、イミダゾールとメチオニン残基を連結する土台として、6 員環含窒素複素環が良好な結果を与えることを見出した。また連結スペーサーとして、アミドよりも尿素型の誘導体が CVIM のコンホメーションにマッチする結果を与えた。続いて良好なスコアを与えたペプチドミメティクスを有機合成化学的に調製し、リコンビナント酵素を用いた *in vitro* 実験により阻害活性を評価した。その結果、尿素誘導体が 1nM 以下の低濃度で FTase を阻害することが分かった。この活性は、市販のペプチドミメティクス阻害剤 FTI-2148 のそれを凌駕するものである。

現在、本ペプチドミメティクスに酵素表面を認識する部位を導入した中分子 PPI 阻害剤の合成を検討中であり、細胞中の K-Ras 阻害活性と抗腫瘍活性の評価を行う予定である。

研究成果概要

有機分子の凝集状態における電荷輸送は、基礎的観点からだけでなく、有機エレクトロルミネッセンス(有機 EL)素子などへの応用の観点からも興味を持たれている。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の LAMMPS および Gaussian 09 プログラムを使用し、有機 EL 素子のホスト材料として広く用いられている 4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl (CBP, 図 1)について、分子の化学構造から電荷輸送プロセスの詳細を理解することを目的とした計算機シミュレーションを実施した[1]。

分子動力学シミュレーションにより、4000 分子の CBP からなる非晶構造を計算した。得られた非晶構造から再配置エネルギーと 2 分子間の電荷移動積分を計算した。さらに、Marcus 理論に基づいて、再配置エネルギーと電荷移動積分から 2 分子間の電荷移動速度定数を算出した。最後に、電荷移動速度定数を kinetic Monte Carlo 法に組み込むことで、CBP の非晶構造における電荷輸送過程をシミュレートし、電荷移動度(μ)の電界強度(F)依存性を算出した。分子動力学シミュレーションには LAMMPS を、再配置エネルギーと電荷移動積分の計算には Gaussian 09 を使用した。図 2 に計算結果と time-of-flight 法による測定結果(Matsusue, N., Suzuki, Y., & Naito, H., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, 3691, (2005))を示す。計算結果は測定結果と良好な一致を示した。本研究では、凝集構造中における電荷サイトのエネルギー的なばらつきに加えて、再配置エネルギーに分子が周囲の分子から受ける立体的な影響を考慮している。このことにより、実験結果と良好な一致を示す電荷移動度が得られたと考えられる。

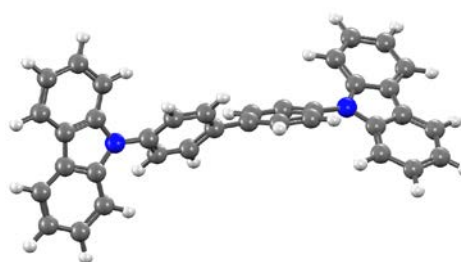


図 1. CBP の分子構造

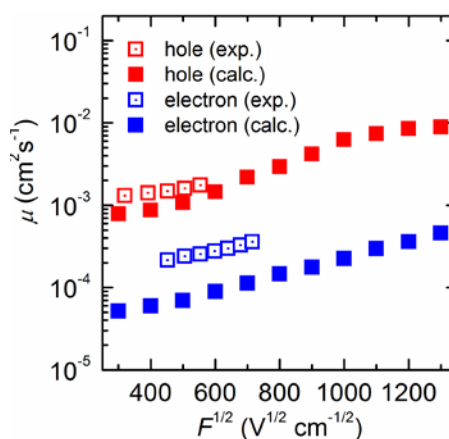


図 2. 電荷移動度の電界強度依存性

発表論文(謝辞あり)

[1] Uratani, H., Kubo, S., Shizu, K., Suzuki, F., Fukushima, T. & Kaji, H. *Sci. Rep.* **6**, 39128, (2016).

溶液および界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Solution and 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

有機薄膜太陽電池等のデバイスに用いられる有機半導体材料は、高分子および低分子材料に大別される。前者は有機溶媒等への溶解性が高く、溶液プロセスで安価で高面積に製膜できるものの、低結晶性であるためデバイス物性が低い。一方、後者は結晶性が高いことから高いデバイス物性を示すが、各種溶媒に難溶なため、真空蒸着等のコストが高い製膜法を用いざるを得ず、それぞれ一長一短である。近年、低分子材料に溶解性をもたせる官能基を導入し、両方の利点をあわせ持つ‘溶解性低分子’の開発が進められている。

本研究では、溶解性低分子材料である亜鉛テトラフェニルポルフィリン(ZnTPP)の溶液プロセスによる薄膜構造制御を目指し、①溶媒、②製膜法のパラメータにより‘製膜時間’に依存する構造変化を調べた。ZnTPPをはじめ、有機半導体材料は共役環を有するものが多く、薄膜中の分子配向により電荷移動度が異方性を示すことが多いため、デバイスの種類に応じた分子配向の制御も重要である。そこで、分子配向解析に実績のある赤外多角入射分解分光(pMAIRS)法¹⁾で解析を行った。この手法は、薄膜に平行(IP: in-plane)および垂直(OP: out-of-plane)方向の遷移モーメントを選択的に検出し、分子配向を定量的に議論できる。

製膜時間を制御した 4 種の ZnTPP 薄膜の IP および OP スペクトルには、いずれも二色比が見られた。共役環の配向解析が可能な $850\text{--}700\text{ cm}^{-1}$ の CH 面外変角振動(γCH)領域には、量子化学計算による帰属の結果、ポルフィリン由来とフェニル基由来の γCH バンドがあらわれていた。それぞれの配向角を見積もった結果、ポルフィリン環は製膜時間に依存せず face-on 配向していた。一方、フェニル環は製膜時間が短い時にはランダム配向し、製膜時間の増加に伴い edge-on 配向へ変化することがわかった。 γCH 振動のバンド位置は結晶構造を反映することが知られており、製膜時間が最も短いクロロホルム溶液でスピコート法により作製した薄膜は、 798 cm^{-1} にピークが現れ、製膜時間の増加に伴い、このピークが減少し、 802 cm^{-1} のピーク強度が増加した。これは、薄膜中には 2 種の結晶構造があり、存在比の変化を示唆する。微小角入射 X 線回折(GIXD)測定の結果、製膜時間が短い時には ZnTPP の単斜晶(CCDC Refcode: ZZZTAY03)が生成され、製膜時間の増加により、それとは異なる単斜晶(ZNTPOR03)へと変化することがわかった。分子配向の変化も、これら二つの結晶相の違いで説明できる。このようにして製膜時間を制御することで、ZnTPP 薄膜中での構造をコントロールすることができた。

参考文献 1) T. Hasegawa, *Anal. Chem.* 79, 4385-4389 (2007).

発表論文(謝辞なし)

1. M. Hada, N. Shioya, T. Shimoaka, K. Eda, M. Hada, and T. Hasegawa, *Chem. Eur. J.* 22, 16539-16546 (2016).

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

電子顕微鏡を用いて酸化鉄(ヘマタイト)結晶を高分解能観察すると、構造の一部に酸素欠損由来と考えられる周期的な縞模様が観察されることがある。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、Materials Studio を用いて欠陥部位の構造モデルの構築と当該部位における電子線エネルギー損失スペクトル(EELS)の解析を目的とした計算を試みた。

使用したソフトウェアは Materials Studio の CASTEP モジュールで、欠陥のない完全結晶のスーパーセルを元の構造として、一部の酸素原子を除去して構造最適化をかけることで、構造モデルを作成し、スペクトルの計算を試みている。

現時点では、実測のスペクトルを再現する構造モデルが得られておらず、解析が成功したとは言えない状況である。

原因として考えられる要素の一つとしては、試料中の電子線透過方向に対して無欠陥部位と酸素欠損部位が積層していることも考えられるが、観察されている酸素欠損部位の大きさから考えて影響は小さいと想定され、また、単純な信号の重畳では説明できないピークも見られている。

今後は詳細な電子顕微鏡像解釈により構造モデルをより正確に構築し、またスペクトル計算の条件を再検討するなどして、解析を継続していく予定である。

発表論文

なし

X 線管からのスペクトル解析

X-ray spectrum analysis from X-ray tube

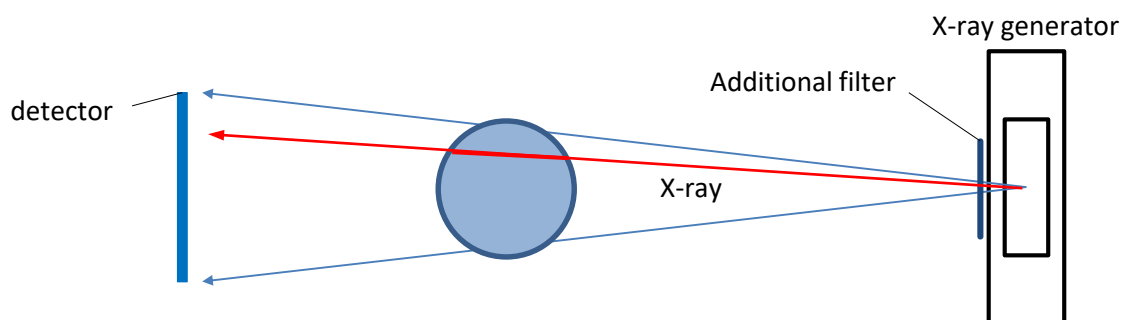
京都大学化学研究所 先端ビームナノ化学センター 構造分子生物科学 正岡聖

背景と目的

さまざまな管電圧で被写体に X 線管からのコーンビーム状の X 線束を照射してディテクタで得られる X 線の輝度値と計算によって得られる輝度値を比較し、よい CT 画質を得るのに最適な管電圧を見つける。

検討内容

実際の CT 撮影では、単純な物理ファントムにコーンビーム状の X 線束を照射し、ディテクタの各ピクセル位置での輝度値を計測した。そして、それと同様のジオメトリを数学ファントムで再現して、各ディテクタ位置での輝度値を計算し、両者を比較した。



結果

上記結果を比較することにより、実験値と計算値が一致することを確認した。そしてこれらの内、110～120kV 程度の管電圧で最もよい画質が得られた。

今後はビームハードニング現象を抑えるための対策も考えていきたいと考えている。

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 附属元素科学国際研究センター 中村 正治

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量子科学計算プログラム CASTEP (Material Studio) 利用して、首都大学野村研究室で開発された高効率ポリオレフィン重合触媒となるバナジウム(V) 錯体の電子状態計算と X 線吸収分光(XAS) スペクトルのシミュレーションを行った。

野村らは種々のバナジウムイミド錯体が MAO 存在下にエチレンおよびプロピレンの重合反応に高い活性を示すことを見出し、その重合機構の詳細を明らかにする目的で、溶液 XAS を用いた触媒中間体研究を進めてきた。本研究課題では、溶液中触媒種の分子構造推定のための基礎的方法論の確立を目的として、DFT 計算や単結晶 X 線構造解析から得られた触媒前駆体および中間体の分子構造を基に、CASTEP を用いて XAS スペクトルを算出し、実測のスペクトルとの比較分析を行った。その結果、図 1 に示す様に例えば V(NAd)Cl₃ 錯体の単結晶構造から算出した理論スペクトルと実測の XANES スペクトルが良い一致を示すことを見出した。

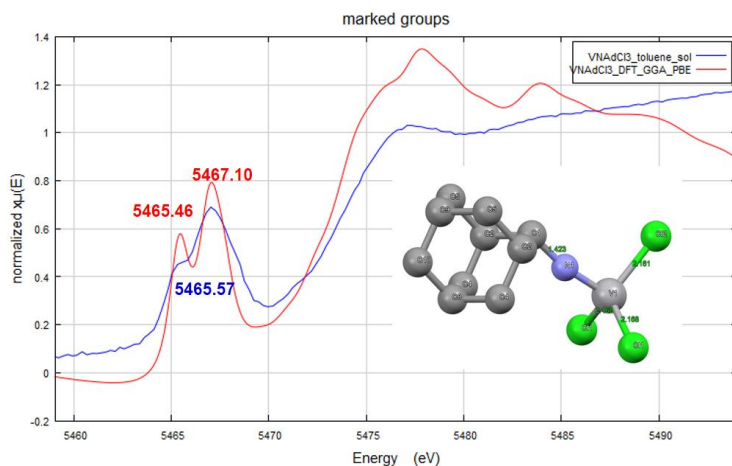


図1. V(NAd)Cl₃ 錯体のトルエン溶液 XAS スペクトル(青線)と DFT (GGA/PBE) 算出スペクトル(赤) ※吸収端をプリエッジで規格化

発表論文(謝辞なし): K. Nomura, T. Mitsudome, A. Igarashi, G. Nagai, K. Tsutsumi, T. Ina, T. Omiya, H. Takaya, S. Yamazoe, “Synthesis of (Adamantylimido)vanadium(V) Dimethyl Complex Containing (2-Anilidomethyl)pyridine Ligand and Selected Reactions: Exploring the Oxidation State of the Catalytically Active Species in Ethylene Dimerization”, *Organometallics*, **2017**, 36, 530–542.

遷移金属錯体の構造探索

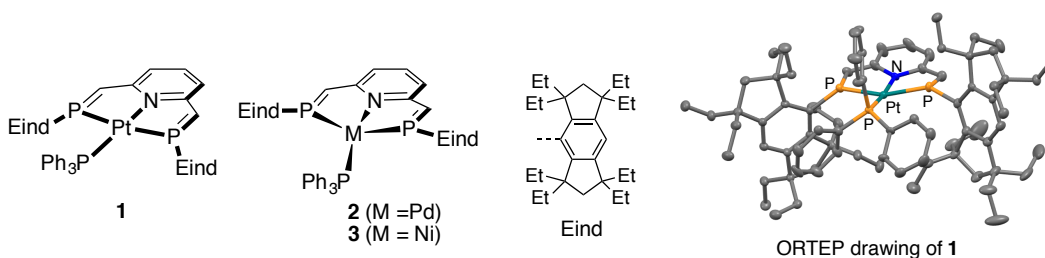
Investigation into the structures of organometallic compounds

京都大学 化学研究所 錯体触媒変換化学研究領域

竹内 勝彦

研究成果概要

四配位 d^{10} 錯体は四面体形構造をとる。これは錯体化学のいわば常識であり、すべての d 軌道が占有された状態において配位子場による幾何構造の安定化は起こらず、配位子間の立体反発を緩和できる錯体構造が有利になるためと説明される。これに対して、我々は、ピリジンを経典とする PNP ピンサー型ホスファルケン配位子(Eind₂-BPEP)を用いて平面正方形構造を有する Pt(0) 錯体を合成できることを見出した。たとえば、[Pt(PPh₃)(Eind₂-BPEP)] (**1**)の Pt 周りの結合角の和は $\Sigma(\text{Pt}) = 358.6^\circ$ であり、高い平面性を有していた。一方、同じ配位子をもつ Pd および Ni 錯体(**2**, **3**)は、 d^{10} ピンサー錯体に一般的な、歪んだ四面体形構造($\Sigma(\text{M}) = 369.8, 369.6^\circ$)であった。これらの構造の違いを理解するため、DFT 計算を用いて Pt 錯体 **1** と Pd 錯体 **2** の電子構造を解析した。その結果、中心金属の d 軌道と s 軌道の占有率に差が認められ、Pt の $5d$ 軌道の占有率が明らかに低下していることが分かった [Pt: $6s(0.62) + 5d(9.15)$; Pd: $5s(0.39) + 4d(9.37)$]。これは、重い原子核をもつ Pt に相対論効果に基づく強い s - d 混成が発現するためである。その結果、Pt 錯体では配位子との結合に d 軌道($d_{x^2-y^2}$)の寄与が大きくなり、この軌道の対称性を反映して平面四角形構造が有利になると理解される。錯体 **1** は HOMO/LUMO ギャップが極めて小さく、また高い平面性を有することから、配位高分子などへの応用が期待される。



発表論文(謝辞なし)

“A Square Planar Complex of Platinum(0)” Katsuhiko Takeuchi, Hiro-omi Taguchi, Ippei Tanigawa, Shota Tsujimoto, Tsukasa Matsuo, Hiromasa Tanaka, Kazunari Yoshizawa, and Fumiyuki Ozawa, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 15347-15350.

巨大 DNA ウイルスゲノムの解析
Genomics of giant DNA viruses

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

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、巨大 DNA ウイルスゲノム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)メガウイルス科の多様性をメタゲノムデータに基づき定量的に行った(李岩沢他、論文執筆中)、(2)京都大学農学研究科との共同研究により、大阪湾および *Tara Oceans* メタゲノムデータを利用して、1300 のウイルスゲノムを決定し(西村陽介他、論文 2 本投稿中)、海洋ウイルスの局所的生産について知見を得た(論文執筆中)、(3)メガウイルス科の DNA 複製酵素遺伝子の解析を行った(ロマン・ブラン＝マチュー他)、(4)広島大学との共同で *Ralstonia* ファージのゲノム解析を行った(三原知子、吉川元貴他)、(5)メタゲノムデータ MGENES の整備を行った(五斗進、荒巻拓哉、山下将平他)、(6)ウイルスーホストデータベースを開発した(山本留美子、黒西愛他、論文受理)、(7)細胞性生物とウイルス遺伝子の多様性比較(隈部彰彦他)を行った。ウイルス関連以外の研究では、(8)エパクレオンの腸内細菌に対する影響の評価(西山拓輝、五斗進他)、(9)珪藻、パルマ叢のゲノム解析(ロマン・ブラン＝マチュー、五斗進他)、(10)ポリケチド合成酵素機能予測法の開発(清水祐吾他)を行った。

発表論文(謝辞あり)

1. Shimizu Y., Ogata H., Goto S. Type III polyketide synthases: functional classification and phylogenomics. **ChemBioChem**, 18, 50-65 (2017).
2. Blanc-Mathieu R., Ogata H. DNA repair genes in the Megavirales pangenome. **Curr. Opin. Microbiol.**, 31, 94-100 (2016).
3. Mihara T., Nasr-Eldin M.A., Chatchawankanphanich O., Bhunchoth A., Phironrit N., Kawasaki T., Nakano M., Fujie M., Ogata H., Yamada T. A *Ralstonia solanacearum* phage phiRP15 is closely related to Viunlikeviruses and encodes 19 tRNA-related sequences. **Virol. Rep.**, 6, 61-73 (2016).
4. Bhunchoth A., Blanc-Mathieu R., Mihara T., Nishimura Y., Askora A., Phironrit N., Leksomboon C., Chatchawankanphanich O., Kawasaki T., Nakano M., Fujie M., Ogata H., Yamada, Y. Asian jumbo phages, phiRSL2 and phiRSF1, infect *Ralstonia solanacearum* and show common features of phiKZ-related phages. **Virology**, 494, 56-66 (2016).
5. Mihara T., Nishimura Y., Shimizu Y., Nishiyama H., Yoshikawa G., Uehara H., Hingamp P., Goto S., Ogata H. Linking virus genomes with host taxonomy. **Viruses**, 8, 66 (2016).

発表論文(謝辞なし)

6. Roux S., Brum J.R., Dutilh B.E., Sunagawa S., Duhaime M.B., Loy A., Poulos B.T., Solonenko N., Lara E., Poulain J., Pesant S., Kandels-Lewis S., Dimier C., Picheral M., Searson S., Cruaud C., Alberti A., Duarte C.M., Gasol J.M., Vaque D.; Tara Oceans Coordinators, Bork P., Acinas S.G., Wincker P., Sullivan M.B. Ecogenomics and potential biogeochemical impacts of globally abundant ocean viruses. **Nature**, 537, 689-693 (2016).
7. Forster D., Dunthorn M., Mahe F., Dolan J.R., Audic S., Bass D., Bittner L., Boutte C., Christen R., Claverie J.-M., Decelle J., Edvardsen B., Egge E., Eikrem W., Gobet A., Kooistra W.H.C.F., Logares R., Massana R., Montresor M., Not F., Ogata H., Pawlowski J., Pernice M.C., Romac S., Shalchian-Tabrizi K., Simon N., Richards T.A., Santini S., Sarno D., Siano R., Vaulot D., Wincker P., Zingone A., de Vargas C., Stoeck T. Benthic protists: the under-charted majority. **FEMS Microbiol Ecol.**, 92, fiw120 (2016).
8. Guidi L., Chaffron S., Bittner L., Eveillard D., Larhlimi A., Roux S., Darzi Y., Audic S., Berline L., Brum J., Coelho L.P., Espinoza J.C., Malviya S., Sunagawa S., Dimier C., Kandels-Lewis S., Picheral M., Poulain J., Searson S.; Tara Oceans Consortium Coordinators, Stemmann L., Not F., Hingamp P., Speich S., Follows M., Karp-Boss L., Boss E., Ogata H., Pesant S., Weissenbach J., Wincker P., Acinas S.G., Bork P., de Vargas C., Iudicone D., Sullivan M.B., Raes J., Karsenti E., Bowler C., Gorsky G. Plankton networks driving carbon export in the oligotrophic ocean. **Nature**, 532, 465-470 (2016).

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

I have been using the super computer for four different works:

1/ To perform homology search (using diamond) of 116 M unique genes fragment against a reference database made of all known representative amino acid sequences.

2/ To assemble the genome sequence of *Thalassiosira nordenskioeldii* from Pacbio sequence data. This work is done in collaboration with Dr. Akira Kuwata (Tohokku National Fisheries Research Institute, Japan).

3/ To assembled and annotate the genome sequence of 3 recently characterized double-stranded DNA viruses infecting *Prymnesium kappa* (*Haptophyte*). Genome sequences of these 3 giant viruses are expected to help characterized *Megaviridae*: an emerging family of eukaryotic viruses. This work is done in collaboration with Pr. Ruth-Anne Sandaa (Institute of Biology, Bergen University, Norway).

4/ To reconstruct the phylogeny of the PIP5K (Phosphoinositide Kinase) protein family in land plants. The output of this work led to the formulation of a hypothesis regarding the evolution of PIP5K3 in the model species *Arabidopsis thaliana*. Additional computational and experimental work are expected to precise its role and evolutionary history. This is a collaborative work with the laboratory of Pr. Takashi Aoyama (Institute for Chemical Research, Kyoto University, Japan).

ジャンボファージ XacN1 のゲノム解析
Genome analysis of jumbo phage XacN1

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、新規ジャンボファージ XacN1 のゲノム解析を行った。カンキツかいよう病は柑橘類における深刻な感染病の一つであり、病原菌である *Xanthomonas citri* が感染することで発生する。感染により、果実などに病斑を形成し商品価値を低下させるのに加え、落葉や枝枯れを起こして樹を衰弱させる。その防除には、従来、化学農薬が使われてきたが、環境汚染や残留農薬などが問題となっているため、安全な代替技術の開発が望まれている。XacN1 は *X. citri* に高い特異性を示す天敵ファージであり、ファージバイオコントロール(ファージにより病原性細菌を制御する)技術に有用であることが期待される。電子顕微鏡による観察の結果、XacN1 は直径約 140 nm の正二十面体頭部と 145 nm の伸縮性尾部からなる、大きなミオウイルス型粒子を示した。また、XacN1 は約 380 kbp のゲノムを持つことからジャンボファージ(ゲノムサイズが 200 kbp 以上のファージ)に含まれる。ジャンボファージは宿主の増殖を抑制しながら一定の共存状態を持続できるため、バイオコントロールに効果的であると言われている。本研究では、XacN1 のゲノムについて、コーディング候補領域(Open Reading Frame: ORF)の推定および機能アノテーションや tRNA 遺伝子の推定を行った。XacN1 のゲノム中に約 590 個の ORF が推定された。ORF のアノテーションにより、DNA 修復系遺伝子が多く見つかったほか、いくつかの遺伝子は宿主との特異的相互作用への関与が示唆された。また、宿主から水平伝播によって獲得した遺伝子は少ないと見積もられた。構造タンパク質を用いた分子系統解析により、XacN1 が他のジャンボファージの一部と進化的起源を共有することが示唆された。また、tRNA 遺伝子の推定により、ファージとしては最大数の tRNA 遺伝子が見出された。これらの tRNA 遺伝子は全てゲノム末端にあるリピート領域に存在し、20 種類全てのアミノ酸に対応していた。さらに、XacN1 がコードする tRNA 遺伝子のアンチコドンの種類はコドン頻度と関連があることが分かった。また、ファージのゲノムサイズと DNA 修復系遺伝子数の対応を調べた結果、ゲノムサイズと DNA 修復系遺伝子数に統計的に有意な正の相関が見られ、ジャンボファージがそれ以外のファージに比べて DNA 修復系遺伝子を多く持つことが明らかになった。この結果から、DNA 修復系遺伝子を多く保持することがジャンボファージに共通する特徴の一つであることが示唆された。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年度は共になし。

平成 28 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピューターシステム利用報告書

バイオインフォマティクス的手法を用いたリパクレオン投与マウスの腸内細菌叢の解析

Analysis of gut microbiota of Lipacreon treated mice using bioinformatics related methods

京都大学 化学研究所 化学生命科学研究領域 西山 拓輝

潰瘍性大腸炎は、難病に指定されている炎症性腸疾患である。根本的な治療方法は無いが、一例では潰瘍性大腸炎患者の症状がエレンタール(経腸成分栄養剤)の投与により緩和した[1]。また同じ炎症性腸疾患であるクローン病のモデルマウスではエレンタール投与により症状及び腸内細菌叢の変動が見られた[2]。したがって栄養供給、腸内細菌叢、潰瘍性大腸炎の症状の三者が互いに影響している可能性が考えられる。

筆者らは、この三者の関係の解明が潰瘍性大腸炎の原因解明に肝要であると考え、パンクレリパーゼ(リパクレオン)の投与による腸内細菌叢への栄養供給の増加が症状にどのような影響を及ぼすかについて調査した。リパクレオンは、膵疾患患者の消化能力の低下による栄養不足の改善に用いられる膵消化酵素補填剤である。本研究では、第一段階として正常マウスの腸内細菌叢に対するリパクレオンの影響を調べた。実験は近畿大学の櫻井俊治博士らのグループが行い、計算機解析・解釈を筆者が行った。

本研究では、コントロール群、リパクレオン投与群、エレンタール投与群のマウスの盲腸、横行結腸、糞便から得た腸内細菌叢の 16S rDNA を次世代シーケンサーで取得した(共同研究者により実施)。取得した配列を参照データベースの配列と比較し、97%以上の配列一致度を基準として操作的分類群に分類した。そして操作的分類群の組成を比較した。さらに、同じ生物学的分類が割り当てられた操作的類群を 1 つにまとめ、negative binomial Wald test により有意に変動した生物学的分類を同定した。また PICRUST を用いて、生物学的分類の組成から遺伝子機能の組成を予測し、KEGG ORTHOLOGY (KO) にまとめてそれらの推定相対頻度を求めた。

解析の結果、コントロール群とリパクレオン投与群の腸内細菌叢の組成が異なることが分かった。さらに、12 個の生物学的分類の相対頻度がコントロール群とリパクレオン投与群の間で有意に変化していた。また両投与群においていずれかの部位で顕著な増減を示した KO は 38 個あった。こうした変化の中には潰瘍性大腸炎の治療と関係が考えられるものもあった。将来的には潰瘍性大腸炎のモデルマウスを用いてリパクレオンの投与による腸内細菌叢の変動と潰瘍性大腸炎への影響を解析する予定である。

参考文献:[1] 武本優次ら, 1992, 栄養 - 評価と治療, 9:192-194; [2] Kajiura et al., 2009, Dig Dis Sci, 54:1892-1900

発表論文:本年度はなし

ゲノムデータに基づく知識発見

Knowledge Discovery Based on Genome Information.

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 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の分類法について検討した。

近年の配列決定技術の発達により、環境サンプルなどから数多くのウイルスゲノムの配列が決定されるようになったが、病原体の同定や、生態系の理解に役立てるためには得られたウイルスゲノムを正確に分類する必要がある。原核生物では、16S rDNA のような進化的に広く保存された配列を用いた分子系統解析により、生物間の遺伝学的・進化学的距離を比較することが出来る。一方、ウイルスはこうした共通遺伝子配列を持たないため、分類を決定することが難しい。

本研究の目的は、新たなウイルスゲノム配列を高速に分類する手法の開発である。ゲノムを比較する複数の尺度を考案し、ウイルスの各分類群に適した尺度と閾値を設定することで、様々な階級の分類（種・属・科・目など）に柔軟に対応した自動分類器を構築したいと考えている。今年度は平均ヌクレオチド一致度(Average nucleotide identity, ANI)[1]という尺度を用いて、ウイルスの種ごとに種内あるいは種間でどの程度の類似性がみられるのか、ANI の値からウイルスをどの程度分類できるのかを、2 種類の ANI 計算法を利用して検討した。

ゲノムネットの Virus-Host DB に収録されているウイルスゲノムの全ての2配列のペアについて ANI を計算し、各種のウイルスについて種内と種間のウイルス配列ペアの ANI の分布を調べた。全ての種内の ANI が種間の ANI より大きい種が最も多く、このような種では ANI の閾値を用いることでゲノム配列を容易に分類出来る。一方で、いくつかの種では、種間の ANI に種内の ANI よりも大きいものがあり、全ての種を ANI のみによって正確に分類することは難しいと考えられる。今後は他のいくつかの尺度も組み合わせて、分類の精度が向上するかを確かめたい。

発表論文 なし

参考文献

[1] Konstantinidis KT, Tiedje JM. (2005) Genomic insights that advance the species definition for prokaryotes. *Proc Natl Acad Sci USA*, 102(7), 2567-72.

メタゲノムの組成に基づく比較法の開発

Development of a method to compare metagenome based on composition

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

海水や土壌、ヒトの腸といった場所に存在する微生物の DNA を、培養せずに網羅的に配列決定し、解析することをメタゲノム解析と呼ぶ。本研究では、実験で得られた塩基配列やアミノ酸配列について調べる際に RefSeq などのデータベースから類似した配列を検索するのと同様に、得られたメタゲノムと類似したものをデータベースから検索することができれば有用であると考え、その方法を開発し、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実際に比較を行った。

具体的な比較法は次のとおりである。ゲノムネット(<http://www.genome.jp/>)において公開されているリファレンス遺伝子セット RefGene にクエリーとなるメタゲノム配列をマッピングし、マップされたリファレンス配列の情報から元のメタゲノムの生物学的、および機能的分類の組成を推定する。KEGG MGENES データベースのメタゲノムについてあらかじめこれらの組成を計算しておき、この組成とクエリーの組成との類似度をメタゲノムの類似度とした。

この方法を、公共データベースから得たメタゲノムサンプルをクエリーとして適用した。このサンプルは炎症性腸疾患の 1 つであるクローン病患者の腸内から採取されたもので、MGENES にも炎症性腸疾患の患者のメタゲノムが収録されている。クローン病と腸内細菌叢の関係は以前から指摘されており、MGENES の炎症性腸疾患のメタゲノムとその他のメタゲノムとではクエリーとの類似度が異なることが予想されたが、比較の結果そのような違いは認められなかった。

今後はこの比較法の改善、およびクローン病患者のメタゲノムと MGENES サンプルとの比較で違いが見られなかった理由についての解析を行う予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年は共になし。

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

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、京都大学農学研究科との共同でメガウイルス科の DNA ポリメラーゼ遺伝子を標的とするプライマーを用いて、アンプリコン解析を行いました。

メガウイルス科は、核細胞質性大型 DNA ウイルス(Nucleocytoplasmic Large DNA Virus, NCLDV)と称するウイルス群内の一系統群である。一般的には、粒子径が 0.2 マイクロメートル以上、ゲノム長 30 万塩基対以上で、真核生物を宿主として海洋に大量に存在することが先行研究により明らかにされている。海洋藻類への感染による物質循環への大規模な影響も予想されている。海洋微生物の多くが実験室で培養することが困難であり、その結果、海洋ウイルスの多くがやはり難培養である。その障壁を乗り越える技術が「次世代配列解析技術(NGS)による環境ゲノム解析」である。特に、NGS による「アンプリコン配列解析」は、特定のゲノム領域にみられる遺伝的変異を解析する解析手法である。アンプリコン配列解析を行うためには、標的遺伝子を増幅するための PCR プライマーが必要であるが、ウイルスは共通遺伝子 (e.g. 16 rRNA) を欠くことから、適切なプライマーが不足している。メガウイルスの生態的な理解は進んでいない。本研究では、新規設計したメガウイルス特異的高度縮退プライマーによるアンプリコン解析を行った。

大阪湾の細菌画分 DNA をテンプレートに、メガウイルスプライマー82 セットを用いて PCR を行った。82 個のメガプライマー対は DNA ポリメラーゼ C-末端の同一の領域を標的とする。しかし、プライマーの位置に多少の相違があるため、メガプライマーアンプリコン配列解析のための新規解析パイプラインを確立する必要がある。具体的には、プライマーの除去などの通常の操作に加えて、翻訳フレームの同定、末端整形処理、BLAST と PPLACER ソフトウェアを利用した非特異的増幅産物の除去等からパイプラインは構成される。そして、核酸配列レベル、タンパク質配列レベルで複数の配列類似度閾値を設けて CD-HIT により OTU (操作的分類単位) 化を行った。希釈曲線(Rarefaction curve)法を利用し、OTU 化のための適切な閾値を確定し、サンプルの α 多様性解析を行った。引き続き、サンプル間の β 多様性解析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)

本年度は共になし。

海洋メタゲノムから得られたウイルスゲノムの多様性に関する研究
Research of diversity of viral genomes obtained from marine metagenomes

京都大学 農学研究科 応用生物科学専攻 海洋分子微生物学分野 西村 陽介

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たバイオインフォマティクスパイプラインにより、大阪湾ウイルスメタゲノムと大規模海洋サンプリング計画である *Tara Oceans* のウイルスメタゲノムから、1,352 個の非冗長な完全長ウイルスゲノムを構築した。これらのゲノム及び、これまでに分離されたウイルスのゲノムに関して網羅的に比較解析を行った結果、得られたゲノムのうちほとんどが新規のものであり、これまでに報告された未分離ウイルスの完全長ゲノムと合わせて、新規 600 属を構成すると推定された。これまでのメタゲノム解析から海洋中に普遍的かつ大量に存在し、海洋微生物や物質循環に重大な影響を与えていることが示唆されてきた未知のウイルス群(ウイルスダークマター)は、分離培養が困難なことからゲノム配列を解読できなかったが、今回の解析でこれらのゲノム配列が大量に得られたと考えられる。また、今回得られたウイルスゲノムを用いて、それらのウイルスが感染する宿主を予測した結果、海洋に多く存在するが未分離である、ユーリ古細菌やガンマプロテオバクテリア綱 SAR86 クレードのウイルスがそれぞれ 58 個と 1 個含まれていると予測され、これらの微生物に感染するウイルスのゲノムが初めて明らかになった。

ウイルスゲノムには一般的に、自身を複製するための構造タンパク質や核酸合成酵素をコードする遺伝子がよく見られる。また、多くのシアノファージゲノムには光合成関連酵素がコードされていることが知られている。本研究で得られたウイルスゲノムの遺伝子の機能解析結果から、様々な生化学反応の補因子である鉄硫黄クラスターの合成酵素に加え、それを利用する複数の酵素をコードするゲノムが見つかるなど、機能的に関連する遺伝子が同一ゲノムに集中的に存在する例が複数発見された。これらのウイルスゲノムは、特定の海洋ウイルスが宿主の持つ様々な代謝過程に積極的に関与するという生存戦略を持つことを示唆している。

また、上記海洋ウイルス研究のために開発した ViPTree ウェブサーバーを一般公開した(<http://www.genome.jp/viptree>)。これは、ゲノム類似性を用いたウイルス分類や、関連するウイルスとの配列類似性についての可視化などを通じて、ウイルス研究者が新たに解読したウイルスゲノムの理解を促進するための解析ツールである。

発表論文(謝辞あり)

Nishimura Y, Watai H, Honda T, Mihara T, Omae K, Roux S, Blanc-Mathieu R, Yamamoto K, Hingamp P, Sako Y, Sullivan MB, Goto S, Ogata H, Yoshida T. Environmental viral genomes shed new light on virus-host interactions in the ocean. *mSphere*. (accepted)

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

我々は多くの生物情報ネットワークが持つスケールフリー(次数分布のべき乗則)という性質についてこれまで継続して研究してきた。近年は最小支配集合(MDS)を用いたスケールフリーネットワークの制御問題の定式化とその解析を行ってきた。今年度は MDS 中の頂点のうち、すべての MDS に含まれる必須頂点の高速な計算法を開発した。以前に我々が開発した必須頂点の計算法では頂点数の回数だけ MDS 計算を繰り返す必要があったが、事前処理において多くの必須頂点などを求めることにより繰り返しの回数を大幅に削減し、最大で 180 倍の高速化を達成した。この手法を大規模タンパク質相互作用ネットワークの解析に適用した結果、必須頂点は疾患などに関連の深いタンパク質に対応する傾向が高いことなどが見いだされた[1]。また、その研究と並行して、次数相関を持つネットワークの新たな解析法を開発した。この手法はネットワークを正則な部分グラフに分割し、正則部分グラフごとに解析を行い、最後にその結果を統合するというものである。この手法を MDS 解析に適用した結果、「負の次数相関がある場合、MDS サイズが小さくなる」などの性質が導かれた[2]。

一方、我々は遺伝子ネットワークの離散数理モデルであるブーリアンネットワークについても継続して研究してきた。ブーリアンネットワークの制御に必要な最小個数の頂点について研究を行い、整数計画法を用いた最小頂点数の計算手法を開発した。さらに短時間での制御に必要な制御頂点数について理論解析を行い、制御頂点数の上界を与える式を導出するとともに、多数の制御頂点が必要になる場合があることなどを導いた[3]。

発表論文(謝辞なし)

- [1] M. Ishitsuka, T. Akutsu, and J. C. Nacher: Critical controllability in proteome-wide protein interaction network integrating transcriptome, Scientific Reports, 6, 23541, 2016.
- [2] K. Takemoto and T. Akutsu: Analysis of the effect of degree correlation on the size of minimum dominating sets in complex networks, PLoS ONE, 11(6), e0157868, 2016.
- [3] W. Hou, T. Tamura, W-K. Ching, and T. Akutsu: Finding and analyzing the minimum set of driver nodes in control of Boolean networks, Advances in Complex Systems, 19, 1650006, 2016.

三角不等式を制約として考慮した整数計画法による
中央文字列と中心文字列の厳密解法的高速化

On triangle inequality constraints to integer linear programming for finding median and center strings for a probability distribution on a set of strings

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 林田守広

研究成果概要

本研究ではこれまで開発してきた、文字列の集合上の確率分布に対する中央文字列および中心文字列の整数計画法による厳密解法について、高速化を目的とした改良を行った。

有限個の文字からなるアルファベットを A とし、文字列の集合 A^* 上の確率分布を $p(s)$ とする。二つの文字列 s, t の間の距離を $d(s, t)$ とするとき、中央文字列 m はすべての文字列 s に対して $p(s)d(m, s)$ の和を最小とする A^* の元である。また中心文字列 c はすべての文字列 s における $p(s)d(c, s)$ の最大値を最小化する文字列であると定義される。距離としてレーベンシュタイン距離を選択するとき、中央文字列および中心文字列を求める問題はともに NP 困難となるので、整数計画法による厳密解法 ILPMed, ILPCen をそれぞれ提案した。

本研究では、レーベンシュタイン距離が三角不等式を満たすことを利用する。 $p(s) > 0$ となる文字列 s_1, s_2 と中央文字列あるいは中心文字列 t に三角不等式を適用することで、 $d(s_1, s_2) + d(s_2, t) \geq d(s_1, t)$ あるいは、 $d(s_1, t) + d(s_2, t) \geq d(s_1, s_2)$ が得られる。ここで $d(s_1, s_2)$ は定数であり、 $d(s_1, t)$ は整数計画問題における変数の線形式として表現される。そこでこれらの線形不等式を制約条件として ILPMed, ILPCen に付加した整数計画法による解法をそれぞれ ILPMedTri, ILPCenTri として提案する。

DNA あるいは RNA の塩基配列は 4 種類の文字からなっていることより $|A|=4$ としていくつかの A^* 上の確率分布を用いて計算時間を複数回計測しその平均と分散を ILPMed, ILPMedTri, ILPCen, ILPCenTri それぞれについて計算した。その結果、 $p(s) > 0$ となる文字列 s の数 N が 10 本程度で、それぞれの文字列の大きさ $|s|$ が 10 程度のとき、三角不等式を制約条件として加えた ILPMedTri, ILPCenTri の方が、元の ILPMed, ILPCen よりもそれぞれ約 1/10 程度の実行時間となった。三角不等式は常に満たされるものであり、厳密解であることを保ちつつ実行の高速化を実現した。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

Hayashida, M, and Koyano, H, Finding median and center strings for a probability distribution on a set of strings under Levenshtein distance based on integer linear programming, *submitted*.

ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析
Comprehensive analysis of polyketide synthase families

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 清水 祐吾

研究成果概要

本研究では、主要な二次代謝産物の一つであるポリケチドの生合成を担うポリケチド合成酵素(PKS)のうち III 型に分類されるものに着目し、その機能分類法を開発し、詳細で体系的な分類を確立した[1]。さらに、その応用として、機能分類を用いた植物 III 型 PKS の機能予測法の開発を試みた[2]。

まず、III 型 PKS の基質・反応・生成物等の機能情報を文献より収集、整理し、機能既知 PKS タンパク質配列の詳細な機能アノテーションを行った。III 型 PKS の多様な機能は主に、(1)取り得る開始基質、(2)伸長基質・回数の違い、(3)縮合後の分子内環化位置の組み合わせによってもたらされる。そのため、この 3 つの要素を化学的な性質に基づいて体系的に分類・単純化・記号化し、結びつけることで「反応タイプ」を定義した。これにより、広い基質特異性を持つ III 型 PKS の機能を簡潔にかつ客観的に表現することが可能になった。系統解析の結果、反応タイプとタンパク質の系統関係との間に弱い相関が見られたが、植物では、遺伝子重複後の独立な機能変化により多種多様なパラログが形成されており、配列類似性と反応の類似性が対応しない部分も多く見られた。

そこで、植物に頻出する 3 つの反応タイプに関わる酵素のアミノ酸配列を 2 つのアプローチでモデル化することで、植物 III 型 PKS のパラログの機能分類予測を試みた。1 つ目は、2 つの頻出反応タイプの酵素間で知られているタンパク質 3D 構造の差異部分にあたる 4 つのアミノ酸配列セグメントを組み合わせ、プロファイル隠れマルコフモデル(pHMM)を構築するものである。2 つ目は、同じ反応タイプの配列間で共進化している、機能的・構造的に重要であると考えられる残基ペアの相関度合いでプロファイル化する方法である。本研究では、相関が見られる残基ペアの位置を相互情報量に基づいて検出し、その位置ペアにおける相関度合いを測るための相関スコアを簡潔な式で定義した。HMM スコアと相関スコアを組み合わせ、線形判別分析により分類器を作成した結果、3 つの頻出反応タイプは全て正しく予測され、それ以外の反応タイプともおおよそ(64/70)区別することができた。この分類器を組み合わせた反応タイプ判別パイプラインを実装したツール pPAP は GenomeNet FTP にて一般に公開されている。

発表論文(謝辞あり)

[1] Shimizu, Y., Ogata, H., Goto, S., Type III Polyketide Synthases: Functional Classification and Phylogenomics, *ChemBioChem*, 18(1), 50–65 (2017)

[2] Shimizu, Y., Ogata, H., Goto, S., Discriminating the reaction types of plant type III polyketide synthases, *Bioinformatics*, in press, doi:10.1093/bioinformatics/btx112

生体分子情報データベースの開発

Development of Databases for Biomolecular Information

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 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/>) として広く公開している。平成 28 年度は、平成 27 年度に公開した改良版 MAPLE (メタゲノム機能評価ツール) [4] に更なる改良を加え、機能アノテーションに使用するホモロジー検索として、BLAST より高速な GHOST を利用できるようにした。また、プロテオームデータのレポジトリとなる jPOSTrepo を開発し、5 月に公開した[2]。jPOSTrepo は、プロテオームデータベースのコンソーシアムである ProteomeXchange に、アジア・オセアニア地域から初めて加入したデータベースであり、2017 年 2 月現在で既に 174 プロジェクトのデータセット (2.9TB) が登録され、対象生物種は 20 種にのぼる。その他、引き続き Virus-Host Database [5]、オーソログクラスタ DB OC、アミノ酸指標 DB AAindex を更新するとともに、ゲノムネットのデータベースを利用した解析を行った [1,3]。

発表論文(謝辞あり)

1. Nishimura, Y., Watai, H., Honda, T., Mihara, T., Omae, K., Roux, S., Blanc-Mathieu, R., Yamamoto, K., Hingamp, P., Sako, Y., Sullivan, M. B., Goto, S., Ogata, H. and Yoshida, T.; Environmental viral genomes shed new light on virus-host interactions in the ocean. *mSphere* **2**:e00359-16 (2017).
2. Okuda, S., Watanabe, Y., Moriya, Y., Kawano, S., Yamamoto, T., Matsumoto, M., Takami, T., Kobayashi, D., Araki, N., Yoshizawa, A. C., Tabata, T., Sugiyama, N., Goto, S. and Ishihama, Y.; jPOSTrepo: an international standard data repository for proteomes. *Nucleic Acids Res.* **45**:D1107-D1111 (2017).
3. Shimizu, Y., Ogata, H. and Goto, S.; Type III polyketide synthases: functional classification and phylogenomics. *ChemBioChem* **18**:50-65 (2017).
4. Takami, H., Taniguchi, T., Arai, W., Takemoto, K., Moriya, Y. and Goto, S.; An automated system for evaluation of the potential functionome: MAPLE version 2.1.0. *DNA Res.* **23**:467-475 (2016).
5. Mihara, T., Nishimura, Y., Shimizu, Y., Nishiyama, H., Yoshikawa, G., Uehara, H., Hingamp, P., Goto, S. and Ogata, H.; Linking virus genomes with host taxonomy. *Viruses* **8**:66 (2016).

発表論文(謝辞なし)

6. Kotera, M. and Goto, S.; Metabolic pathway reconstruction strategies for central metabolism and natural product biosynthesis. *Biophysics and Physicobiology* **13**:195-205 (2016).

プロテオーム・データベースの構築
Construction of proteome database

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
吉沢 明康

研究成果概要

本研究は、JST NBDC(科学技術振興機構・バイオサイエンスデータベースセンター)統合化推進プログラム「プロテオーム統合データベースの構築」jPOST 計画のための研究及び開発である。jPOST 計画は以下の 3 部分から構成される:

- 1) 論文発表と同時に公表が義務づけられた、(質量分析法による)プロテオーム測定データ(いわゆる“生データ”)の deposit site である「jPOST Repository」
- 2) Repository で公開されたデータを、独自に解析するための「再解析プロトコル」
- 3) 再解析プロトコルによって解析した結果を格納する「データベース」

サーバはライフサイエンス統合データベースセンター(DBCLS)の三島ブランチ(遺伝学研究所 DDBJ センター内)及び京都大学化学研究所に設置され、データ処理に化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用している。

本年度は上記 1) jPOST Repository (jPOSTrepo) の開発と改良、及び 2) 再解析プロトコルの開発を主に進めた。jPOST Repository は新潟大学及び DBCLS との協力により、2016 年 5 月 2 日に一般公開され、更にプロテオーム生データ・レポジトリの国際標準である ProteomeXchange consortium にも同 7 月 6 日から加盟した(アジア・オセアニア地区唯一)。

また再解析プロトコルの開発ためには、大別して

- (a) 偽陰性(False Negative)の減少
- (b) 質量分析データの特徴を利用して、信頼性の向上(偽陽性(False Positive)の減少)
- (c) データベースに新規データを順次追加することに対応できる統計的手法の開発

の 3 つの課題・目標が存在したが、主に本学薬学研究科との協力により、これら全てへの対応策と、更にそれを矛盾なく組み合わせたプロトコルの構築が完了した。現在、主に薬学研究科の共同研究者がこのプロトコルを実装中であり、今後來年度前半までの間にプロトコルの有効性を実証し、プロトコルの論文発表とデータベースの構築に移行する予定である。

発表論文(謝辞あり)

Okuda, S., *et al.* jPOSTrepo: an international standard data repository for proteomes. *Nucleic Acids Research*, **45** (D1, Database issue): D1107-D1111 (2017).

吉沢 明康. どのデータベースを使うか ~データベース検索と配列解析・誤解と難題~. *Proteome Letters*, **1** (2):63-80 (2016).

新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質

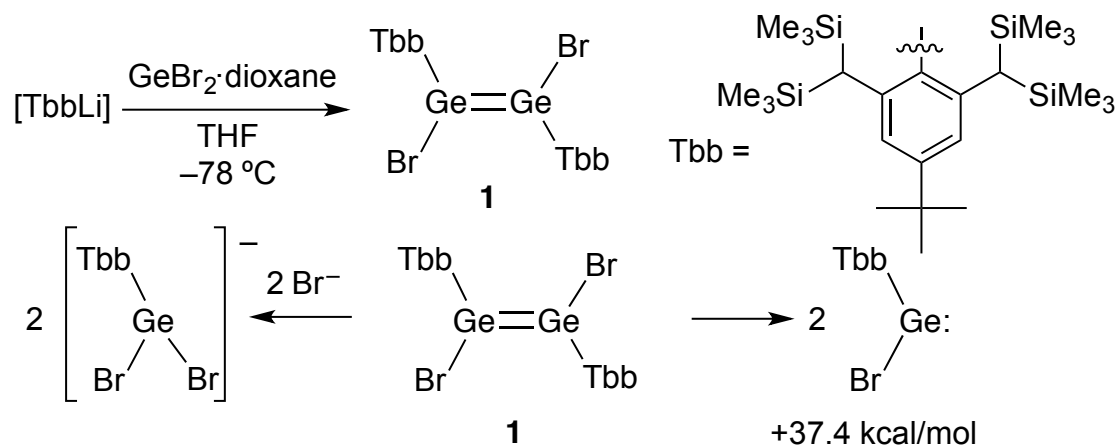
Theoretical Studies on the Properties of Novel Main Group Element Compounds

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 笹森 貴裕

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において、量子化学計算により、修飾可能な高周期 14 族元素間二重結合である 1,2-ジブロモジゲルメン ($\text{Ar}(\text{Br})\text{Ge}=\text{Ge}(\text{Br})\text{Ar}$) の結合解離について検討した。

一般に、高周期 14 族を含む多重結合化合物は反応性が高く、安定な化合物として合成・単離することは困難である。立体保護による安定化を施した安定な化合物も数多く知られており、我々は最近、かさ高い置換基として Tbb 基(図参照)を有するジブロモジゲルメン **1** の合成・単離に成功している。既報によれば、かさ高い置換基を有するジブロモジゲルメンは、溶液中ではブロモゲルミレン ($\text{Ar}(\text{Br})\text{Ge:}$) へと解離すると考えられている。しかし、**1** の温度可変 UV/vis スペクトルを測定しても変化しないことから、解離エネルギーは比較的大きく、解離は難しいのではないかと考えた。一方、種々実験結果を考察し、LiBr などのアルカリ金属ハロゲン化物の添加により解離が促進されていることが分かった。そこで、ジブロモジゲルメンの解離エネルギーを調べる目的で、各種量子化学計算を行った。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは、B3PW91-D3/6-311G(3df)<Br, Si, Ge>/6-311G(d)<others>を用いた。量子化学計算の結果、Tbb(Br)Ge=Ge(Br)Tbb が結合解離して Tbb(Br)Ge: を二分子生じる結合解離エネルギーは、37.4 kcal/mol であり、室温では解離困難なエネルギーであることが分かった。一方、**1** に対し、Br⁻イオンが近づき、二分子のゲルミレノイド[TbbGeBr₂]を生じる反応は、53.6 kcal/mol の発熱反応で有り、速やかに進行すると予想された。以上の様に、Ge=Ge 二重結合の解離は、ハロゲン化物イオンにより促進されることが実験的にも理論的にも示された。



発表論文(謝辞あり): 特になし

発表論文(謝辞なし): 特になし

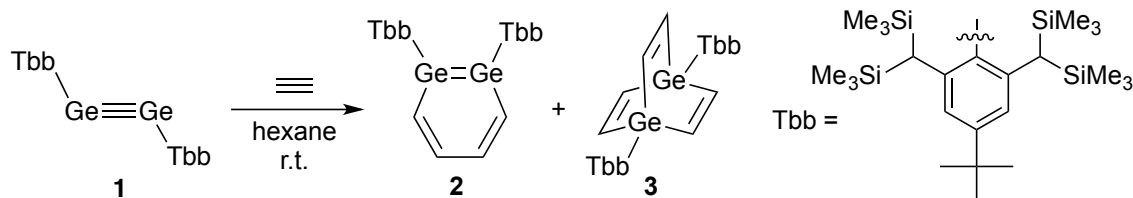
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

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 族元素であるゲルマニウムの三重結合化合物(ジゲルミン)の反応性を明らかにした。既に我々は、かさ高い置換基である Tbb 基(図参照)を活用することで、安定なジゲルミン **1** を合成・単離した。ジゲルミン **1** に対し、アセチレンを作用させたところ、1,2-ジゲルマベンゼン **2** とジゲルマバレン **3** が 61:22 の比で生成した。

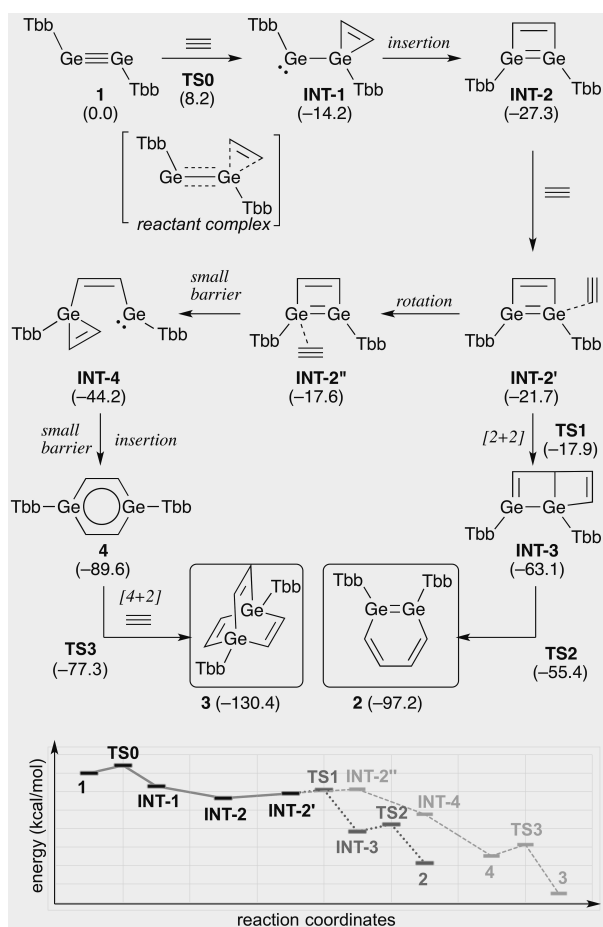


これらの生成機構と、**2** が優先して生じることを検証する目的で、本反応経路を理論計算により求めることとした。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは B3PW91/6-311G(3d,p)//B3PW91/3-21G(d)を用いた。分子モデルはリアル系について行うこととした。

上記量子化学計算の結果、**1** から共通の中間体 INT-2 を生じ、次のステップを律速として、**2** および **3** が生じることが分かった。活性化エネルギーは **2** を与える経路が **3** を与える経路よりも若干小さく、**2** が優先して生じることが示唆された。

発表論文(謝辞あり): Sugahara, T.; Guo, J.-D.; Sasamori, T.; Karatsu, Y.; Furukawa, Y.; Espinosa Ferao, A.; Nagase, S.; Tokitoh, N. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, *89*, 1375.

発表論文(謝辞なし): 特になし



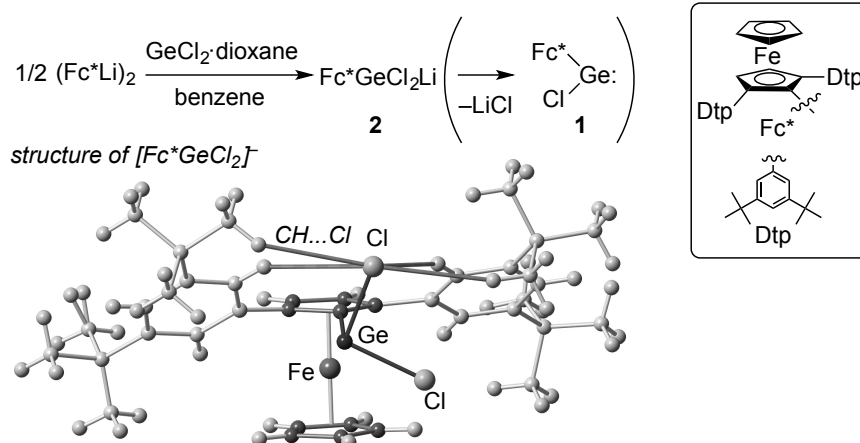
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明

Theoretical Studies on the Properties 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 鈴木 裕子

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族元素であるゲルマニウムの二価化学種(ゲルミレン)の性質を明らかにした。一般にゲルマニウム二価化学種、ゲルミレンは特に 4p 被占有軌道の高い求電子性に由来した高い反応性を示す。ゲルミレンを安定な化合物として合成・単離するためには、自己多量化を防ぐ立体保護基の導入が必要不可欠である。今回我々は、修飾可能なゲルミレンとしてクロロゲルミレンを目的化合物とし、立体保護を目的としてかさ高いフェロセニル基の導入を考え、かさ高いフェロセニルクロロゲルミレン(**1**)の合成・単離を目的として検討を行った。Fc*Li と GeCl₂·dioxane の反応により LiCl の脱離を伴い Fc*GeCl(**1**)の発生を検討したが、Fc*GeCl₂Li(**2**)から LiCl の脱離が比較的遅いことが分かった。反応混合物を THF から再結晶し、**2** の THF 錯体[Li(thf)₄]⁺[Fc*GeCl₂]⁻を単離することに成功し、X 線結晶構造解析により構造を明らかにした。ゲルマニウムは特徴的な三配位ピラミッド構造をしていることが分かったが、Ge が Cp 環から折れ曲がり鉄原子に近づいていた (Ge-Fe: 2.386(9) Å)。この近接距離をとる相互作用の要因を調べる目的で、各種構造最適化を行った。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは、M06-2x/6-311+G(2d)<Fe,Ge>/6-311G(d,p)<others>を用いた。量子化学計算の結果、Ge-Fe 原子間距離が比較的小さいのは、吸引的な相互作用が原因では無く、Dtp 基の CH 結合と Cl 原子間の強固な水素結合に起因して、立体的に Ge 原子が Fe の方向へ押し下げられている、立体的な要因であることが分かった。



発表論文(謝辞あり): 特になし

発表論文(謝辞なし): 特になし

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

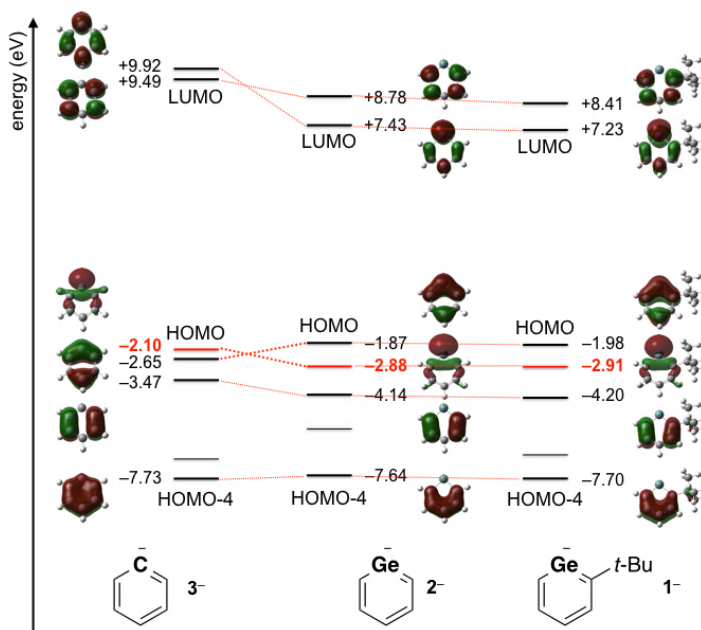
研究成果概要

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、我々が合成・単離することに成功したゲルマベンゼニルアニオン **1**⁻に関する性質解明を行なった。

1⁻は、フェニルアニオンのアニオン炭素をゲルマニウムに置き換えた化合物である。これまで高周期 14 族元素置換のベンゼン系化合物は、かさ高い置換基による多量化抑制なくしては安定な化合物として単離することは不可能であるとされてきたが、アニオン **1**⁻はそのような置換基を導入していないにもかかわらず極めて高い熱的安定性を有していた。

1⁻に関して種々の手法、基底関数を用いて、構造最適化・GIAO 計算・TD 計算および軌道の考察を行なった。構造最適化においては、どの手法、基底関数を用いても X 線結晶構造解析によって得られた構造パラメーターをよく再現していた。一方で、溶液中の挙動、特に TD 計算による紫外可視吸収スペクトルの再現性は基底関数(特に分散関数の有無)に大きく依存することがわかった。種々検討の結果、B3LYP/6-311G(2df,2p)//B3LYP/6-31G(d,p)にて GIAO および TD 計算を行なった場合に、それぞれ実験値をよく再現した。これらのことより上記計算モデルが実際の電子状態を適切に表現していることがわかった。

図には HF/6-31G(d,p)//B3LYP/6-31G(d,p)にて計算した **1** および置換基を排した **2**⁻と母体のフェニルアニオン **3**⁻の HOMO-4 ~ LUMO+1 を示す。**1**⁻と **2**⁻の間に大きな差異はなく、*t*-Bu 基が与える電子的効果は小さいと考えられる。特筆すべき点として、**3**⁻において HOMO にあたる非結合性軌道は、**1**⁻および **2**⁻では HOMO-1 に現れ、炭素の系とは大きく異なる電子状態を示すことがわかった。これは高周期元素における不活性電子対効果を強く反映した結果だと言える。



発表論文(謝辞あり)

Mizuhata, Y., Fujimori, S., Sasamori, T. & Tokitoh, N. Germabenzenylpotassium: A Germanium Analogue of a Phenyl Anion. *Angew. Chem. Int. Ed.*, in press. DOI: 10.1002/anie.201700801.

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

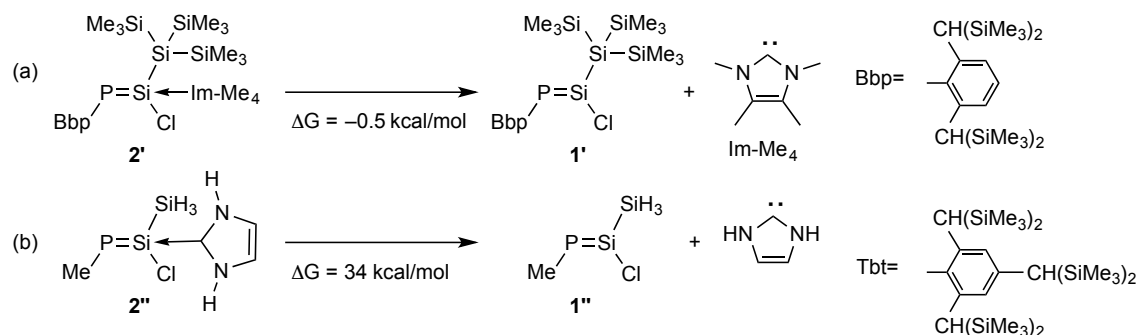
Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Elements Compounds

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において、量子化学計算により、高周期 14 族–15 族元素間二重結合であるホスファシレンの結合について検討した。一般に、高周期典型元素を含む多重結合化合物は反応性が高く、安定な化合物として合成・単離することは困難である。そこで、立体保護基導入により多量化を防ぐ速度論的安定化の手法や、NHC カルベンなど Lewis 塩基に配位などにより結合の反応性を下げる熱力学的安定化、の手法を活用することで、安定な化合物が数多く合成されるようになった。

我々は最近、クロロ基に加えかさ高いシリル基をケイ素上に、かさ高いアリール基をリン上に有するクロロホスファシレン誘導体 ($\text{TbtP}=\text{Si}(\text{Cl})(\text{Si}(\text{SiMe}_3)_3)$, **1**) の合成検討を行い、その結果、 Im-Me_4 (カルベン) の配位安定化を利用することで、クロロホスファシレン-NHC 錯体 ($\text{TbtP}=\text{Si}(\text{Cl})(\text{Si}(\text{SiMe}_3)_3)(\text{Im-Me}_4)$, **2**) の合成・単離に成功した。NHC である Im-Me_4 の配位により、その二重結合性がどの程度変化するか、および Im-Me_4 の配位を外して **1** の合成が可能かどうか、について、量子化学計算を用いて検証することとした。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは、B3PW91/6-31+G(d,p)を用いた。また、計算の簡略化のため、Tbt 基のパラ位の置換基を H で置き換えた Bbp 基をリン上に有するモデル (**1'**, **2'**) について量子化学計算を行った。その結果、**1'**における $\text{P}=\text{Si}$ 結合の WBI は 1.42 と二重結合性はかなり低い単結合よりは結合次数が高いことが分かった。また、 $\mathbf{2} \rightarrow \text{Im-Me}_4 + \mathbf{1}$ で現れる NHC 解離反応は 0.5 kcal/mol の発熱反応であり、反応が進行しうることが示唆された。一方、かさがかかなり小さいシンプルモデル (**1''**, **2''**) を用いた計算では、解離反応は 34 kcal/mol の吸熱反応であり、NHC 部位の解離にはかさ高さも大きな要因となることが示された。



発表論文(謝辞あり): Kyri, A. W.; Majhi, P. K.; Sasamori, T.; Agou, T.; Nesterov, V.; Guo, J.-D.; Nagase, S.; Tokitoh, N.; Streubel, R. *Molecules* **2016**, *21*, 1309.

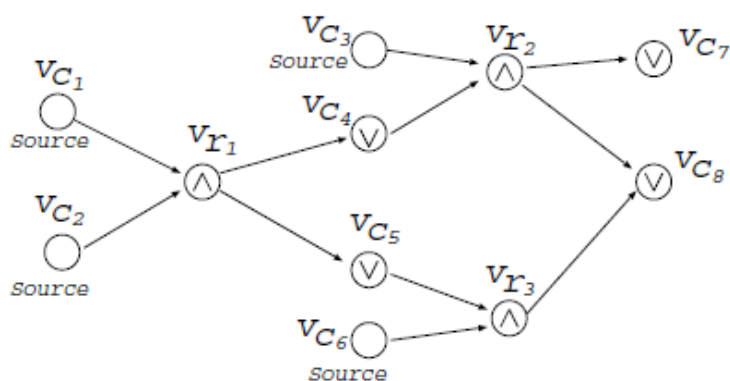
発表論文(謝辞なし): 特になし

ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化と制御
Mathematical model and analysis of biological networks on Boolean model

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ことを意味し、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を意味する。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。

本研究では癌細胞の遺伝子発現データを用いて、癌細胞において活発な遺伝子と抑制されている遺伝子を抽出し、代謝ネットワークのトポロジーを用いて、特に影響の大きな遺伝子を計算した。計算は京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムを用いて行った。

平成28年11月に台湾で開催された BIBE2016 において成果を口頭発表した。

ナノ炭素細線物質に関する理論計算
Theoretical studies on carbon nano-wire 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 中江隆博

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 ゴーラジカル重合型気相成長法(2Z-RPCVD 法)を開発し、アームチェア型 GNR のバンドギャップの分子幅依存性を実験的に明らかにした。アセン型 GNR は高機能半導体特性を示すことが理論予測されていたが、主鎖をベンゼン環の短軸方向に炭素-炭素結合をジグザグに成長させる必要があるため、従来合成が困難であった。

今回、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た。[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った。計算手法は Materials Studio 2016 QMERA モジュールを用いて Au(111)面上の Z 型分子ピラジカルの構造最適化を行った。その結果、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性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。

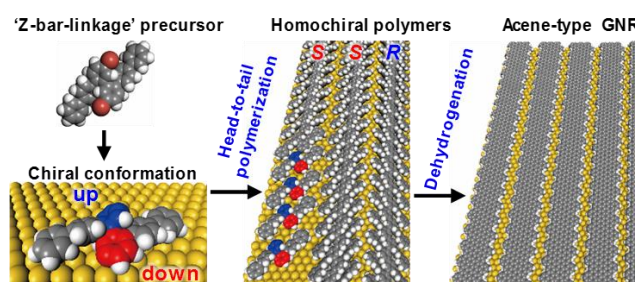


Figure 1. Synthesis of acene-type graphene nanoribbon from Z-bar linkage precursor.

発表論文(謝辞あり)

- [1] Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons,
H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *Nat. Chem.*, **2017**, 9(1), 57-63.

海底圧力計を用いたヒクラング沈み込み帯における浅部スロースリップイベントの検出

The Detection of Shallow Slow Slip events on the Northern Hikurangi Margin
using Ocean Bottom Pressure Recorders

京都大学 防災研究所 附属地震予知研究センター

村本 智也

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、非潮汐海洋変動によって変化する海底圧力について行った全球規模のシミュレーションの結果を利用して本研究はディスカッションを行なっている。

発表論文(謝辞なし)

1. Tomoya Muramoto, Yoshihiro Ito, Daisuke Inazu, Stuart Henrys, Laura Wallace, Stephen Bannister, Kimihiro Mochizuki, Ryota Hino, Syuichi Suzuki, Estimation of Small Slow Slip events on the Northern Hikurangi Margin, The workshop on Slow Earthquakes 2016, Tokyo, Japan, 2016/9/13. 英語；ポスター
2. Tomoya Muramoto, Yoshihiro Ito, Daisuke Inazu, Stuart Henrys, Laura Wallace, Stephen Bannister, Kimihiro Mochizuki, Ryota Hino, Syuichi Suzuki, Estimation of Small Slow Slip events on the Northern Hikurangi Margin, 日本地震学会 地震学夏の学校 2016, Kyoto, Japan, 2016/9/19. 日本語；ポスター
3. 村本智也, 伊藤喜宏, 稲津大祐, 日野亮太, 鈴木秀一, Stuart Henrys, Stephen Bannister, Laura Wallace, 海底観測によるヒクラング沈み込み帯で発生するスロースリップイベントの検出, 日本地震学会 2016 年度秋季大会, Aichi, Japan, 2016/10/6. 日本語；ポスター
4. Tomoya Muramoto, Yoshihiro Ito, Daisuke Inazu, Stuart Henrys, Laura Wallace, Stephen Bannister, Kimihiro Mochizuki, Ryota Hino, Syuichi Suzuki, Detection of Shallow Slow Slip events on the Northern Hikurangi Margin using Ocean Bottom Pressure Recorders, 2016 Taiwan-Japan Workshop on Crustal Dynamics, Tainan, Taiwan, 2016/11/14. 英語；ポスター
5. Tomoya Muramoto, Yoshihiro Ito, Daisuke Inazu, Stuart Henrys, Laura Wallace, Stephen Bannister, Kimihiro Mochizuki, Ryota Hino, Syuichi Suzuki, Detection of Shallow Slow Slip events on the Northern Hikurangi Margin using Ocean Bottom Pressure Recorders, American Geophysics Union 2016 Fall Meeting, San Francisco, California, USA, 2016/12/15. 英語；口頭

ソフトマターの相転移ダイナミクス

Phase transition dynamics in soft matters

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 荒木 武昭

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、ソフトマターの相転移ダイナミクスに関する研究、特に液晶の秩序化に対する不純物の効果について研究を行った。一般に不純物を添加すると、ネマチック液晶相の配向秩序度は低下することが知られている。低温でネマチック相を示す、4-Cyano-4'-pentylbiphenyl(5CB)に、不純物として、azobenzene を添加する。azobenzene には、*cis* 体、*trans* 体があるが、この間の異性化によって、液晶秩序化がどのように変化するか調べたい。分子系が異なるが、類似の実験では、*trans* 体のときに比べ、*cis* 体のときに、液晶秩序度が下がることが報告されており、これは分子形状の違い、すなわち、液晶相と相性のいい棒状形状であるか否かに、起因するものと考えられている。全原子の分子動力学シミュレーションを行うために、5CB と azobenzene の分子形状、分子力場を知らなければならない。しかしながら、本研究に適したものがなかったため、スパコンシステムの gaussian を用いて、分子構造を最適化し、電荷分布を得た。

図 1 は、gaussian を用いて得られた分子力場に基づいて行った分子動力学計算のスナップショットである。分子動力学計算には、GROMACS を用いて計算を行った。左図は 5CB のみの場合、中央と右図は、それぞれ *cis* 体、*trans* 体の azobenzene を重量分率 10.7%含む混合系である。温度は、300K とした。数値計算の結果、ネマチック秩序度は、0.814(5CB のみ)、0.588(5CB+ azobenzene-*cis*)、0.692(5CB+azobenzene-*trans*) となり、実験と同じく、azobenzene-*cis* を添加した場合に、液晶秩序が大きく下がる傾向があることが分かった。特に分子の凝集などは見られていない(下段図)。また、秩序度の減少が小さかった *trans* 体の場合も、5CB 分子とともに揃っているわけではないという予備的な結果を得られた。今後は、詳細な温度・濃度依存性を調べるとともに、その物理的機構について明らかにしていきたい。



図 1 液晶秩序度に対する不純物の効果に関する分子動力学シミュレーションのスナップショット。左：液晶分子 (5CB) のみ、中央：*cis* 体の azobenzene 添加。右：*trans* 体の azobenzene を添加。下段は不純物の分布のみを取り出したもの。

発表論文 (研究終了後、投稿予定)

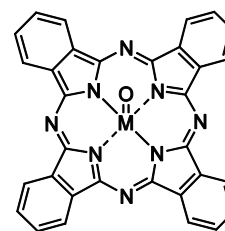
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析

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

チタニルフタロシアニン、バナジルフタロシアニンのラジカルアニオンから成る同形構造の塩(Me_4P^+)[$\text{M}^{\text{IV}}\text{O}(\text{Pc}^{\cdot-})$] $^-\cdot(\text{TPC})_{0.5}\cdot\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ ($\text{M} = \text{Ti}$ (**1**), V (**2**); $\text{TPC} = \text{tritycene}$)を合成した。これらの塩はフタロシアニンラジカルトリアニオン $\text{Pc}^{\cdot-}$ に特徴的な吸収帯を示し、さらに 1450 nm 付近にも吸収帯が観測された。X 線構造解析の結果、 π ダイマー{[$\text{M}^{\text{IV}}\text{O}(\text{Pc}^{\cdot-})$] $^-\cdot$ } $_2$ が形成されていることが分かった。またこれらの塩の磁化率を測定したところ、**1** は 300 K で $\text{Pc}^{\cdot-}$ 上の 1



MOPc: $\text{M} = \text{Ti}$ (**1**), V (**2**)

つの $S = 1/2$ のスピンの対称する $0.364 \text{ emu K mol}^{-1}$ の $\chi_{\text{M}}T$ 値を示した。また、 $J/k_{\text{B}} = -123.0 \text{ K}$ の反強磁性相互作用が見積もられた。一方、**2** は 300 K で V^{IV} と $\text{Pc}^{\cdot-}$ 上の 2 つの $S = 1/2$ のスピンの対称する $0.617 \text{ emu K mol}^{-1}$ の $\chi_{\text{M}}T$ 値を示した。さらに、VOPc 分子内には、 $J_{\text{intra}}/k_{\text{B}} = -15.2 \text{ K}$ 、VOPc 分子間には、 $J_{\text{inter}}/k_{\text{B}} = -105.0 \text{ K}$ の反強磁性的相互作用が働いていると見積もられた。以上の光学的、磁氣的性質について、CAM-B3LYP 汎関数で理論的解析を行ったところ、1450 nm 付近の吸収帯は MOPc 分子間における半占軌道－半占軌道間、または半占軌道－最低非占有軌道間の電荷移動遷移に帰属された。また、分子内の磁氣的相互作用の方が、分子間の磁氣的相互作用よりも小さいという実験結果が支持された [4]。

発表論文(謝辞あり)

1. Y. Yoshida, K. Isomura, H. Kishida, Y. Kumagai, M. Mizuno, M. Sakata, T. Koretsune, Y. Nakano, H. Yamochi, M. Maesato, G. Saito, **Chem. Eur. J.**, 22(17), 6023-6030 (2016).
2. D. V. Konarev, A. V. Kuzmin, Y. Nakano, S. S. Khasanov, M. Ishikawa, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **Dalton Trans.**, 45(26), 10780-10788 (2016).
3. Y. Yoshida, K. Isomura, M. Maesato, T. Koretsune, Y. Nakano, H. Yamochi, H. Kishida, G. Saito, **Cryst. Growth Des.**, 16(10), 5994-6000 (2016).
4. D. V. Konarev, Y. Nakano, S. S. Khasanov, A. V. Kuzmin, M. Ishikawa, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **Cryst. Growth Des.**, 17(2), 753-762 (2017).
5. D. V. Konarev, S. S. Khasanov, M. Ishikawa, Y. Nakano, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **Chem. Asian J.**, (2017), DOI: 10.1002/asia.201700138.

発表論文(謝辞なし)

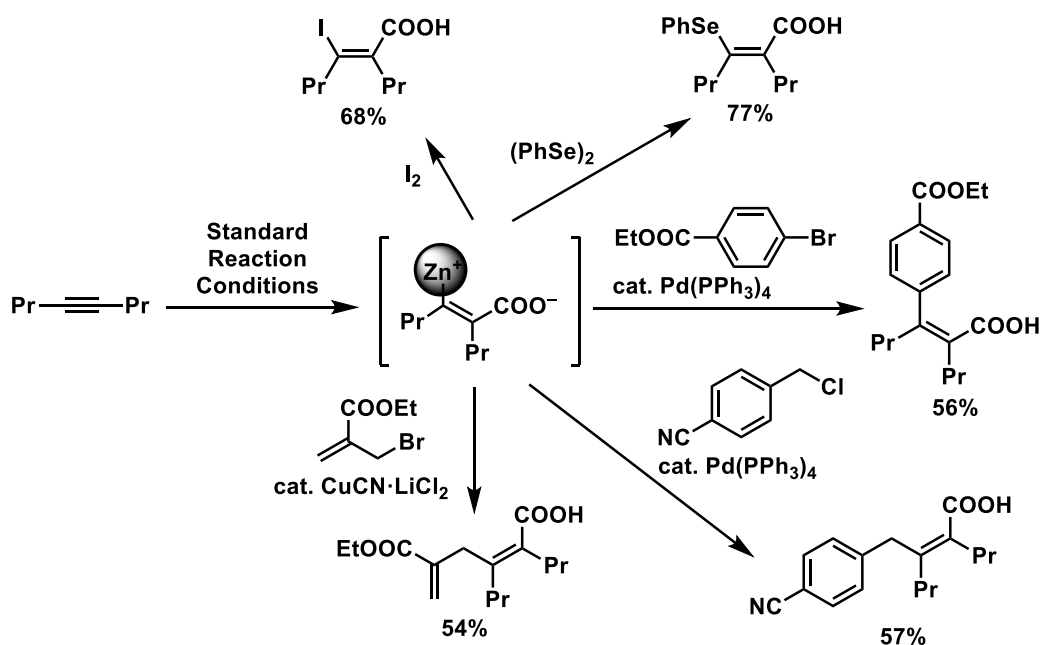
6. D. V. Konarev, S. I. Troyanov, A. V. Kuzmin, Y. Nakano, M. Ishikawa, M. A. Faraonov, S. S. Khasanov, A. L. Litvinov, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **Inorg. Chem.**, 56(4), 1804-1813 (2017).

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

有機亜鉛化合物は選択的な反応性を有し、有用な有機合成試剤である。我々は最近、二酸化炭素雰囲気下、10 mol% の $\text{CoI}_2(\text{dppf})$ を触媒に用いることにより、1.5 等量の亜鉛金属粉末、10 mol% の酢酸亜鉛、10 mol% の Et_4NI 共存下、40 °Cなる反応条件下において、アルキンに亜鉛部位とカルボキシル部位を同時に導入可能な新規カルボキシ亜鉛化反応を見出した。得られた化合物のビニル亜鉛部位は求電子剤と反応し、種々の有用化合物を与えた。すなわち、下図に示したようにヨウ素との反応によりビニルヨウ化物、ジセレンドとの反応によりビニルセレン化合物が得られた。さらに、パラジウム触媒存在下においてアリールおよびベンジル臭化物とのクロスカップリング反応にも成功した。また、アリル臭化物との反応により、対応するアリル生成物が得られた。本反応はジフェニルアセチレンなどの配位性の強いアルキンとの反応は進行しなかった。しかし、反応溶液にアクリル酸誘導体を加えることにより、アルキン、アクリル酸誘導体、二酸化炭素、亜鉛の4成分カップリング反応が進行した。



発表論文(謝辞なし)

1) K. Nogi, T. Fujihara, J. Terao, Y. Tsuji, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 5547 (2016).

電極触媒の電子状態解析
Electronic Structures of Electrocatalysts

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 工業電気化学分野 宮崎 晃平

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、次世代の電気化学エネルギーデバイスであるアルカリ形燃料電池および金属-空気二次電池で用いられる酸素電極触媒の電子状態解析を行った。

特にペロブスカイト型酸化物を中心に、酸化物イオン以外のハロゲンなどのアニオンが混合した複合アニオン化合物に関する電子状態計算を行った。その結果、複合化によって酸素の電子状態が変調を受け、結果として触媒活性が向上することが明らかになった。

今後は、ハロゲン以外のアニオンの混合が複合アニオン化合物の電子状態に与える影響について、より詳細に検討を進める予定である。

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

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻分子理論化学講座 佐藤 徹

【研究成果概要】 蛍光分子の周辺環境は、蛍光量子収率・励起状態寿命・発光波長などの発光特性を決める重要な因子である。[5] ヘリセン誘導体 **1** は、CH₃Cl 溶液中においては蛍光速度定数 k_r と無輻射速度定数 k_{nr} のいずれもが小さく発光しないが、heptane 溶液中においては **2** と同程度の蛍光を示すことが実験により示された。本研究ではこれら [5] ヘリセン誘導体における発光特性の差異について振電相互作用の観点から検討した。

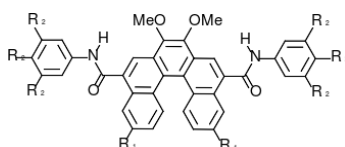


図 1: [5] ヘリセン誘導体. **1** ($R_1=H$, $R_2=C_8H_{17}O$), **2** ($R_1=MeO$, $R_2=C_8H_{17}O$), **3** ($R_1=H$, $R_2=MeO$), **4** ($R_1=MeO$, $R_2=MeO$).

B3LYP/6-31G(d) レベルで TD-DFT 法によりヘリセン誘導体 **1** および **2** をそれぞれモデル化した **3** および **4** の各励起状態の構造最適化を行った。これらの計算には Gaussian09 Rev. C.01 を用いた。また、励起状態における振動緩和と内部転換による無輻射過程について検討するため、振電相互作用定数計算と振電相互作用密度解析 [1-3] を行った。振電相互作用定数計算ならびに振電相互作用密度解析は自作プログラムにより行った。

3 の蛍光は HOMO-LUMO 遷移、**4** は NHOMO-LUMO 遷移に帰属された。**3** は Stokes シフトすなわち振動緩和が大きく、S₁ と S₀ の間の Franck-Condon 因子が小さくなり、蛍光過程が抑制されていると考えられる。**3** の対角振電相互作用定数は大きく、このことは **3** が S₁ において大きな振動緩和を示すことと一致している。**3** が電荷移動 (CT) 型の励起であるのに対し、**4** ではヘリセンでの局所励起 (LE) 型の励起である。**3** で蛍光が観測されない原因は、大きな振動緩和により Franck-Condon 因子が低減し、蛍光過程が抑制されていることにある。これは **3** ではヘリセンと置換基の HOMO がエネルギー的に接近しており、ヘリセン由来の軌道がフロンティア準位 (置換基の HOMO 由来) より安定化されていることによる。以上のことから極性溶媒中では **1** の蛍光状態である CT 型励起状態は、大きく安定化され蛍光過程が抑制されていることが示唆された。

[1] T. Sato *et. al.*, *J. Phys. Chem. A* **112**,758 (2008). [2] T. Sato *et. al.*, *J. Phys.: Conf. Ser.* **428**, 012010 (2013). [3] M. Uejima *et. al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 14244 (2014).

【発表論文】 (謝辞あり) (1) Tohru Sato, *J. Comput. Chem. Jpn.* **14**, 189-192 (2016). (謝辞なし) (2) Yohei Hattori, Tetsuro Kusamoto, Tohru Sato, Hiroshi Nishihara, *Chem. Comm.* **52**, 13393-13396 (2016). (3) Takashi Hirose, Natsuki Ito, Hiromu Kubo, Tohru Sato, Kenji Matsuda, *J. Mater. Chem. C* **4**, 2811-2819 (2016). (4) Tohru Sato, Naoki Haruta, Kazuyoshi Tanaka, *Chem. Phys. Lett.* **652**, 157-161 (2016).

化学反応と電子物性に関する理論的研究

Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻量子機能化学講座 笛野 博之

研究成果概要

(RSiO_{1.5})₈ の組成式を持つ POSS (Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane: Figure 1) はケージ状骨格から成る特異な分子であり、ケージ内部に広がる全対称的な (A_{1g}) 球状の LUMO を持つ。その LUMO は POSS の励起状態において特異な寄与をする可能性が示唆されている[1]。このような全対称的空軌道は、高压下の固体結晶のなかの空隙部分にも存在するとされており、ここに格子を構成する原子からはずれた電子が収容されて結晶中の一部にアニオン部分が存在するイオン性化合物となることが分かっている[2]。以上のことから、POSS の LUMO に余剰電子を収容した POSS アニオンのオリゴマーのスピン特性は興味深い。本研究では二つのメチレン基を介して接続した POSS アニオン間におけるスピン相関についての理論的な考察を行った[3]。

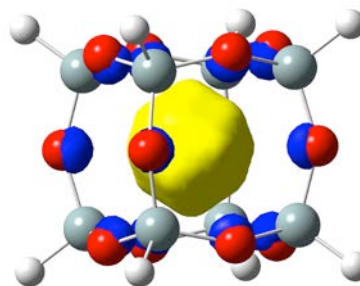


Figure 1. POSS structure with (HSiO_{1.5})₈, and its LUMO.

POSS2量体を考え、Gaussian09 ソフトを用いて B3LYP/6-31+G**法により構造最適化を行い。閉殻一重項、閉殻一重項、および開殻三重項状態に関するスピン相関の解析を行った。相対エネルギー値の比較から、POSS2量体ジアニオンでは開殻三重項状態が最も安定であり、ついで開殻一重項、閉殻一重項の順に不安定になっている。また開殻三重項の二つの SOMO、および開殻一重項の二つの SOMO はそれぞれ縮退している。縮退していることから、これら二つの開殻構造では Hund の規則が効いて三重項状態が安定化している。一方、閉殻一重項の一つの軌道(HOMO)に詰めた二個の余剰電子の相関はスピン相関よりも不安定化をもたらす。POSS2量体ジアニオンにおけるスピン相関は、反磁性的<反強磁性的<強磁性的の順に優位となることが結論できる。

[1] Laine, R. M. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 3708(2010).

[2] See, e.g., Miao, M. S.; Hoffmann, R. *Acc. Chem. Res.* **47**, 1311(2014).

[3] 田中一義・笛野博之・中 建介 第 63 回高分子討論会予稿集, 1F06 (2014).

発表論文(謝辞無し)

S. Goda, M. Nikai, M. Ito, D. Hashizume, K. Tamao, A. Okazawa, N. Kojima, H. Fueno, K. Tanaka, Y. Kobayashi, T. Matsuo, *Chem. Lett.* **45**, 634–636 (2016).

多孔性配位高分子の合成と性質

Synthesis and properties of porous coordination polymers

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻

機能化学講座 北尾 岳史

【背景と目的】

吸着材や分離剤として利用されている多孔性材料は、その骨格とゲスト分子との相互作用を制御することで吸着能や分離能の向上が期待できる。多孔性配位高分子は非常に設計性の高い多孔性材料であり、金属イオンと有機配位子の組み合わせを適切に行うことで、細孔の形状、次元性、表面環境を様々に作り分けることが可能である。これらの特徴を利用して実際に系統的に合成した多孔性配位高分子において、異なる吸着能が得られた。これらの細孔の形状や大きさは大差ないため、ゲスト分子と細孔壁の相互作用の違いに起因するものと考えられる。その相互作用の情報を得ることを目的として量子化学計算を行った。このように理論的な解析を行うことで実際の合成の重要な指針を与えることができる。

【検討内容】

今回合成した多孔性配位高分子において、エタノールの吸着挙動に顕著な違いが見られたため、それぞれの多孔性配位高分子の有機配位子とエタノール分子との相互作用の違いが、用いた有機配位子によるものと確認するため、エタノール分子を有機配位子近傍で様々な位置に配置し、Gaussian を用いて構造最適化を行った。使用した基底関数は 6-31++G**, 計算方法は MP2 である。物理吸着はその吸着エネルギーが小さく分散力が重要となることが多いため、これらの計算条件を用いた。本来は分子間力の評価であり、吸着エネルギーの評価には基底関数重なり誤差 (BSSE) の考慮が必要となるが、今回はエネルギーの評価ではなく配位子による差の有無の確認であるため、BSSE に関しては考慮していない。

【結果と考察】

計算の結果、エタノール分子の吸着量が少ない多孔性配位高分子を構成する有機配位子上では、ゲスト分子は安定化を受けないことが明らかとなった。一方、吸着量の大きい配位高分子を構成する有機配位子上では、エタノール分子は配位子上で安定化した。このことから、多孔性配位高分子の吸着量は、細孔の形状や大きさだけでなく、細孔表面の環境によっても影響を受けることを確認し、吸着能を制御する上で重要な指針を得ることに成功した。

【発表論文・参考論文】

なし

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 廣瀬 崇至

研究成果概要

単一の分子を電子素子として応用することを目指す分子エレクトロニクス分野は、より高度な動作原理をもつデバイスおよび究極の省エネルギーデバイスを実現する観点から近年大きな注目を集めている。本研究では、フォトクロミック分子であるジアリールエテン **1** および **2** の分子配列をグラファイト基板上において観測し、その光応答性を検討した。

化合物 **1** と **2** の閉環体は、チエニル基の置換位置に由来して曲がり角が大きく異なる分子構造を有している。Materials Studio を用いた分子動力学計算により、化合物 **2c** と比較して化合物 **1c** はより安定な分子配列を形成することが示唆された (Figure 1)。化合物 **1** の開環体および閉環体の分子配列形成プロセスが高い協同性を有することに由来して、数%の僅かな光異性化反応によって完全な分子配列の形成・消失を誘起できることが明らかとなり、3 段階の分子配列状態を高感度かつ可逆に光制御することが可能となった (Figure 2)。

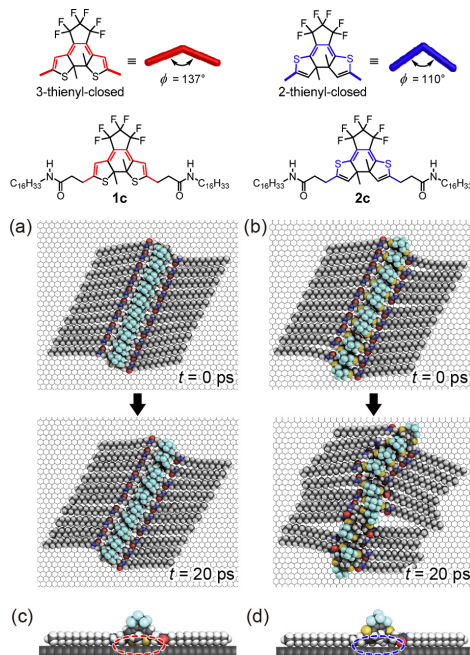


Figure 1. Molecular dynamics (MD) simulations of the orderings of 10 molecules of **1c** and **2c** on graphite substrate during 20 ps (force field: Dreiding).

発表論文(謝辞なし)

1. N. Maeda, T. Hirose, S. Yokoyama, K. Matsuda, *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 9317–9325.
2. N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *in press*.

Highly Photoresponsive System based on Cooperative Assembly

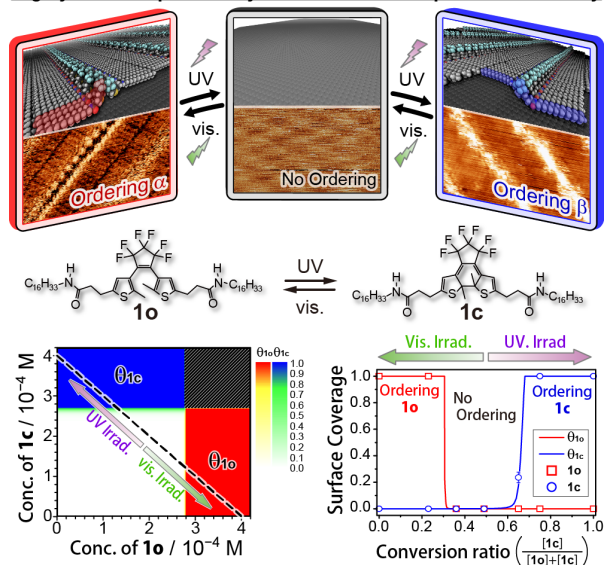


Figure 2. Phototriggered transformation of molecular orderings formed at the octanoic acid/graphite interface, which is caused by photoisomerization reaction of photochromic diarylethene.

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

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 西谷 暢彦

研究成果概要

分子を構成単位とするナノデバイスの構築に向けて、固液界面における分子の自己組織化が注目されている。固液界面では溶液を平面基板上に滴下するだけで自発的に分子配列を形成できるという簡便性がある。本研究ではオクタン酸/高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 界面における分子配列形成挙動を走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて観察した。

長鎖アルキルと水素結合部位を有する棒状化合物 **1u–3u** を設計・合成し、置換基の種類や位置が、固液界面における分子配列の形成濃度や配列形状に与える影響について調査した (Figure 1a)。それぞれのオクタン酸溶液を調製し、オクタン酸/HOPG 界面における配列形成を STM により観察した結果、ヒドロキシフェニル基を有するウレア誘導体 **2u** について異方的なドメイン成長が観察された (Figures 1b and 1c)。この異方的なドメイン成長の原因を調査するために、得られた配列像及び配列の格子定数を参考にし、Materials Studio を用いた MM/MD 計算により分子配列モデルを作成した (Figures 1d–1g)。最適化した分子モデルから、**2u** の配列中のウレア・ヒドロキシ基はそれぞれ水素結合を形成しており、ドメイン長軸方向と水素結合方向が一致していることが分かった。これらの結果より、**2u** の配列形成プロセスにおいて、配列カラム内方向の吸着速度がカラム間方向の吸着速度よりも速いことが示唆された。

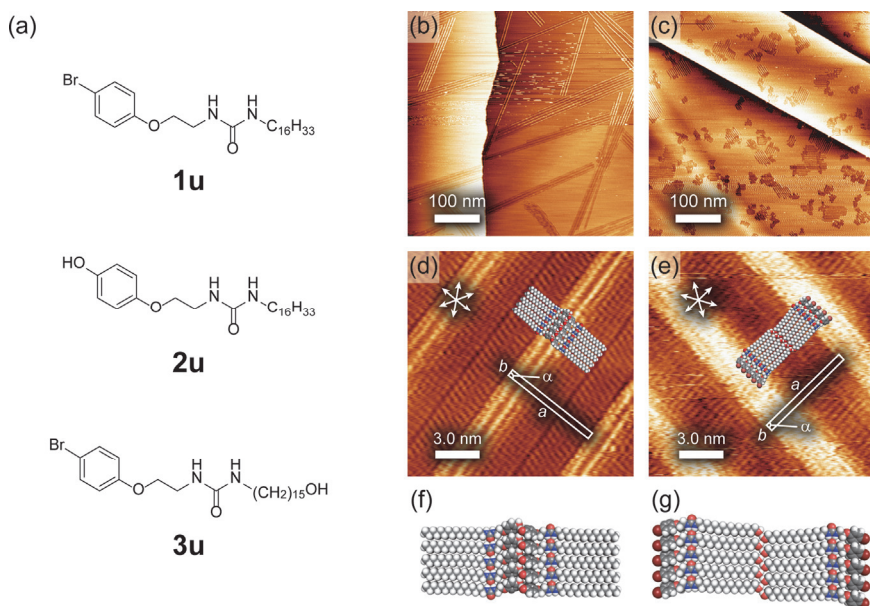


Figure 1. (a) Molecular structures of **1u–3u**. STM images of (b) **2u** and (c) **3u**. High-resolution STM images and molecular models of the 2-D ordering of (d) **2u** and (e) **3u**. Enlarged molecular models of (f) **2u** and (g) **3u**, which were simulated by MM/MD calculations.

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 前田 尚生

研究成果概要

固液界面において機能性分子を配列させる試みは、分子エレクトロニクス観点から近年非常に大きな注目を集めている。形成した配列は走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて単分子レベルの分解能で観測することができる。本研究ではキラルな分子であるジアリールエテン閉環体を用いて二次元分子配列中におけるエナンチオマー混合状態の調査を行った。

ジアリールエテン閉環体は、中心部位の絶対構造に由来して (*R,R*) 体と (*S,S*) 体のエナンチオマーを有する。化合物 **1** のラセミ混合物は HOPG 基板上で 6 方向の配列形成が見られたのに対して、化合物 **2** は 3 方向の配列を形成することが分かった (Figure 1a, 2a)。Materials Studio を用いた分子動力学計算により、化合物 **1** と **2** は基板上で異なるコンフォメーションをとることが示唆された (Figure 1b, 2b)。分子配列を形成する濃度領域を詳細に調査することにより、化合物 **1** は固液界面で (*R,R*) 体と (*S,S*) 体が自然分晶することが示唆されたのに対して、化合物 **2** は (*R,R*) 体と (*S,S*) 体がランダムに混ざった混晶を形成することが示唆された (Figure 1c, 2c)。

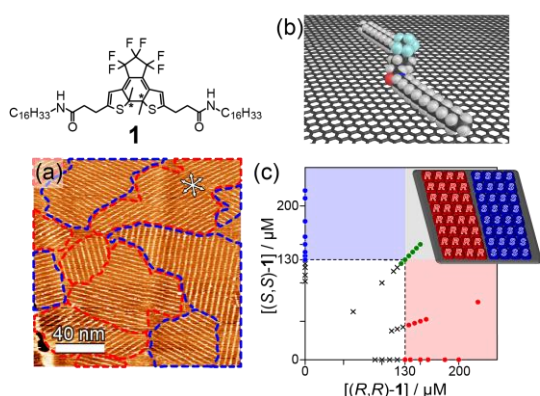


Figure 1. (a) STM image of *rac*-1 (b) MM model of (*R,R*)-1 (force field: Dreiding) (c) 2-D solubility phase diagram for **1**.

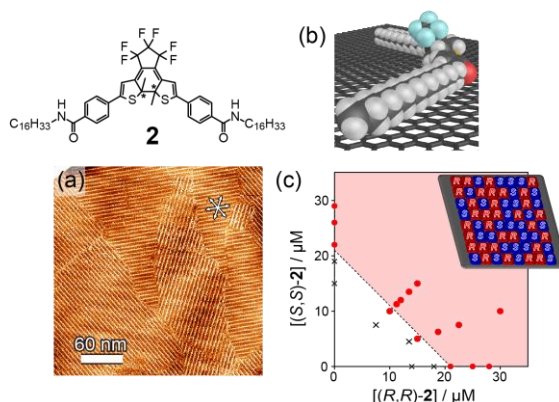


Figure 2. (a) STM image of *rac*-2 (b) MM model of (*R,R*)-2 (force field: Dreiding) (c) 2-D solubility phase diagram for **2**.

発表論文(謝辞なし)

N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 2371-2375.

分離プロセスの量子化学的研究
Quantum Chemical Studies on Separation Processes

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 田門 肇

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、吸着剤と吸着質の分子間相互作用や、乾燥過程における分子の動的挙動など、吸着工学や乾燥工学などにおける微視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分子シミュレーションを用いて検討を行うことを目的としている。今年度はアミロースとアミロペクチンの水和状態について、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。

α -グルコースが直鎖状に結合した糖鎖高分子のアミロースと、アミロースが相互に結合した分岐構造を有するアミロペクチンは、デンプンの主成分である。デンプンは加水・加熱により膨潤して糊化し、糊化したデンプンを放置すると収縮して老化する。アミロースの含有量の高いデンプンほど老化しやすいこと、デンプンに糖を添加すると老化が抑制されることなどが知られている。これらの現象においては、糖鎖の構造の違いによって生じる水和状態の違いが大きく影響していると考えられる。本研究では、そうした微視的構造の違いに着目した検討を行うため、分子動力学(MD)計算を実施した。モデル物質としてアミロースおよびアミロペクチンを低分子化して得られるアミロースオリゴマーならびにアミロペクチンオリゴマーを取り上げ、両オリゴマー水溶液中における水分子の動的挙動や水-糖間の相互作用などを検討した。

アミロースオリゴマーのモデルは、96 個の α -グルコースが側鎖を持たずに結合したオリゴマーを取り上げた。アミロペクチンオリゴマーのモデルは、 α -グルコースが 36 個結合して主鎖を形成し、主鎖の 7 番目のグルコースに糖残基数 30 の側鎖が結合し、その側鎖の 13 番目のグルコースに糖残基数 18 の側鎖が結合し、さらに主鎖の 25 番目のグルコースに糖残基数 12 の側鎖が別途結合した糖残基数 96 のオリゴマーを取り上げた。これらのオリゴマー各 2 本ずつを用いて、オリゴマーの質量濃度が 5~90 wt%の水溶液について、5℃、50℃の各温度条件下における MD 計算を実施した。計算プログラムは Amber 14 を使い、分子力場は糖鎖には GLYCAMを、水分子には TIP3Pを適用して、NPTアンサンブルで 10 ns の MD 計算を行った。

2 種類のオリゴマー水溶液に対して、オリゴマー濃度と水の自己拡散係数 D の関係を求めたところ、70 wt%と 80 wt%において、アミロースオリゴマー水溶液中に比べアミロペクチンオリゴマー水溶液中の方が D の値が顕著に小さくなった。その原因を調べるため、オリゴマーに近接する水分子 1 個あたりの水-オリゴマー間水素結合数を求めたところ、アミロペクチンオリゴマー水溶液中における水素結合数の方が顕著に大きかった。この結果として、アミロペクチンオリゴマー水溶液中の方が水分子の拡散が抑制され、 D の値が小さくなったと考えられる。さらに、水分子 1 個あたりの水素結合数に差が生じるのは、両オリゴマーに近接する水分子数の差によるのではなく、水-オリゴマー間の全水素結合数の差に由来することがわかった。

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。アガロースの凝固過程では、アガロース鎖が 2 重らせんを形成することが知られている。そこで、アガロオリゴ糖が同様の会合状態を形成するか否かについて検討した。

糖残基数 6 のアガロオリゴ糖を取り上げ、複数の糖鎖が存在する場合の動的挙動について、Amber 14 プログラムを用いて検討した。分子力場はアガロオリゴ糖には GAFF、水分子には TIP3P を適用した。1つのセル内に糖鎖が1～4本存在する場合について、1 atm、糖鎖の質量濃度が 0.6, 5.7 wt%、温度が 25, 75℃の各条件における 100 ns の NPT アンサンブル MD 計算を実施し、糖鎖長 L [Å]や糖鎖間距離 D [Å]などを求め、アガロオリゴ糖の水中における動的挙動を調べた。

計算結果から、複数のアガロオリゴ糖が会合し得ることがわかった。また、経時変化に伴う糖鎖長 L の分布を求めたところ、会合の有無・濃度・温度によらず概ね平均長約 26 Å の χ^2 分布となることがわかった。

次に、アガロオリゴ糖の糖鎖数 2 本、濃度 5.7 wt%、温度 25℃の条件における MD 計算結果から、二重らせん構造形成について検討した結果の概要を記述する。糖鎖の動的挙動の検討結果から、二重らせん構造となる場合の要件の一つは、糖鎖間距離 D の値が 7 Å 程度以下であることがわかった。今回の 100 ns の計算結果では、2本の糖鎖は初期配置においては約 30 Å 離れているが、約 2 ns で D が 7 Å 程度以下という要件を満たした。さらに、アガロースの結晶構造から得られた二重らせん構造内の原子間の位置関係と、MD 計算で得られたアガロオリゴ糖内の原子間の位置関係を比較したときの一致率の経時変化を調べた。その結果、7-12 ns および 13-17ns の期間に 75 %以上の高い一致率を示した。即ち、これらの期間においては二重らせん構造を形成していると言える。

多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移

Adsorption-induced structural transition of porous coordination polymer

京都大学大学院 工学研究科化学工学専攻 界面制御工学分野 田中 秀樹

多孔性錯体 (PCP) の中には、そのフレームワーク構造の柔軟性ゆえに、あるガス圧において構造転移を伴うステップ状の吸着等温線を示すものが存在する。この挙動はゲート吸着と呼ばれ、僅かな圧力変化によって大きな吸着量変化が得られることから、ガス分離・貯蔵プロセスのための新規吸着材料として期待されている。本研究では、そのフレームワーク構造とゲート吸着挙動との相関を解明すること、また、所望のゲート吸着特性を有する PCP の設計指針を提示することを目的とし、積層型 PCP の一種である Cubpp ($[\text{Cu}(\text{BF}_4)_2(1,3\text{-bis}(4\text{-pyridyl})\text{propane})_2]_n$) への CO_2 ゲート吸着を対象とする自由エネルギー解析を行った。

In situ X 線構造解析により決定された、ゲート吸着前後の Cubpp のフレームワーク構造を用いた DFT-D 計算を実施することで、ポテンシャルエネルギー変化 (内部エネルギー変化 ΔU^{host} として近似) を計算した。また、各フレームワーク構造を用いた grand canonical Monte Carlo (GCMC) シミュレーションによって、 CO_2 の仮想吸着等温線 N^{guest} を求めた。ここで、 CO_2 の force field には LJ12-6 およびクーロンポテンシャルを仮定し、Cubpp については、吸着実験との比較により精密化した UFF $\{\sigma_{\text{UFF},j}\}$, $\{0.58\epsilon_{\text{UFF},j}\}$ (j : 原子種) と、DFT 計算 (GGA-PBE/DNP) より求めた部分電荷 $\{q_j\}$ を用いた。

DFT-D 計算により、 $\Delta U^{\text{host}} = 5.87 \text{ kJ/mol-MU}$ [MU: monomer unit] を得た。また、温度 268–278 K における GCMC シミュレーションから得られた各 N^{guest} を積分し、実験によって求められたゲート吸着圧において、系の自由エネルギーがゼロとなる Cubpp フレームワークのヘルムホルツ自由エネルギー変化 ΔF^{host} を算出した。さらに、各温度における ΔF^{host} に対して ΔU^{host} を切片とする直線をフィッティングし、その傾きからフレームワークのエントロピー変化 $\Delta S^{\text{host}} = 16.1 \text{ J}\cdot\text{mol-MU}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ を決定した。ここで、Cubpp への CO_2 ゲート吸着では、その吸着量が飽和吸着量の約 40% に過ぎないことから、Cubpp のモノマーが連なる結晶構造の中で、モノマーと CO_2 分子間の相互作用の有無に関する配置のエントロピーが生じるものと考えられる。そこで、ボルツマンの公式によって、ゲート吸着前後の配置のエントロピー差を推算したところ、 $6.2 \text{ J}\cdot\text{mol-MU}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ となり、 ΔS^{host} の約 40% を占める有意量であることが分かった。そして、これより熱振動に起因するエントロピー変化量を求めると ($16.1 - 6.2 = 9.9 \text{ J}\cdot\text{mol-MU}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) となった。以上の結果は、ゲート吸着におけるホストフレームワークの ΔS^{host} は、種々の要素により発生し、ゲート吸着挙動を制御するにあたって、重要な因子となるべきことを示唆するものである。

キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の機構解明

Elucidation of the Mechanism of Solvent-dependent Helix Inversion of
Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s with Chiral Side Chains

工学研究科 合成・生物化学専攻 長田裕也

研究成果概要

我々はこれまでに、ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の主鎖らせん不斉制御について研究を行ってきた。ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の側鎖としてキラル置換基を導入することで、主鎖に一方向巻きらせん構造を誘起することができるほか、溶媒の違いに応じて主鎖の不斉らせん構造が完全に反転することなど、本骨格に特徴的な現象を見出している [1]。例えば、(R)-2-オクチルオキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)は、n-オクタン中において完全な左巻き構造をとるが、シクロオクタン中では完全な左巻き構造をとる。[1c]。最近の研究では、不斉増幅型触媒 [2] や、不斉光学材料 [3] への応用についても報告している。本研究では、キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の立体構造について検討を行った。

(R)-2-オクチルオキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)について、分子動力学計算による構造推定を行った。計算には BIOVIA Materials Studio を用い、分子力場として COMPASS II を用いた。まず繰り返しユニットについて配座解析を行い、安定配座を用いて右巻き構造と左巻き構造のモデルを構築し、さらにポリマー全体の構造最適化を行った。現在、計算結果と量子ビーム散乱実験の結果に基づき、溶媒依存性らせん反転の機構の解析を進めている。また、量子化学計算を利用した環状キラル化合物の物性解析についても検討を進め、通常検出の難しい重水素の配置に基づいたキラル化合物の、振動円二色性スペクトル解析による絶対構造解明に成功した [4]。

発表論文(謝辞なし)

- [1] (a) Yamada, T.; Nagata, Y.; Suginome, M. *Chem. Commun.* **2010**, 46, 4914-4916 (b) Nagata, Y.; Yamada, T.; Adachi, T.; Akai, Y.; Yamamoto, T.; Suginome, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 10104-10113. (c) Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Suginome, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 15901-15904.
- [2] Ke, Y.-Z.; Nagata, Y.; Yamada, T.; Suginome, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 9333-9337.
- [3] Nagata, Y.; Uno, M.; Suginome, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 7126-7130.

発表論文(謝辞あり)

- [4] Miura, T.; Nakamuro, T.; Stewart, S. G.; Nagata, Y.; Murakami, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* in press.

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

熔融 CsCl-AlCl₃ 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。

本年度は、さらにユニットセルのサイズを 2 倍に拡大してイオン数を倍増した (8×CsAlCl₄) 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 700 K での構成イオンの軌道を、現在までのところ 0.7 ps にわたり計算している。初期原子配置には CsAlCl₄ 結晶の XRD によって求められた構造を用いた。

AlCl-AlCl₃ (A: alkaline metals) の形の熔融塩において、1:1 の組成付近での Al(III) イオンのとる錯体構造は長らく議論的となっているが (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)), A = Cs では、FIG. 1 に示すとおり、かねてから主張されている AlCl₄⁻ アニオン構造のみが存在するわけではなく、四面体 AlCl₄⁻ アニオン構造面帳点共有で連なった Al₂Cl₇⁻ 構造を含むことがわかった。1:1 組成を境として、前者の構造から後者へと急激に変化し、当該組成では両者が存在しうることが示唆される。

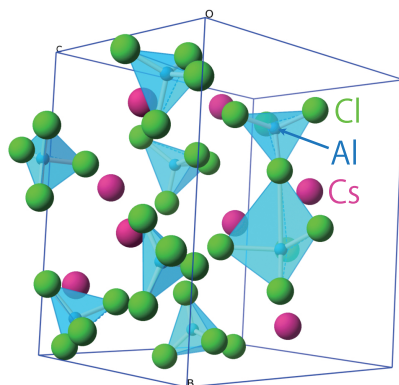


FIG. 1 Ionic configurations after 0.7 ps calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K.

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

Yoshihide Sakanaka, Akira Murata, Takuya Goto, Kan Hachiya

“Electrodeposition of porous Si film from SiO₂ in molten BaCl₂-CaCl₂-NaCl”

Journal of Alloys and Compounds, volume 695, pp. 2131-2135 (2017).

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 馬渕守

研究成果概要

マグネシウム(Mg)をはじめとした軽金属材料の力学特性向上に向けて、粒界への添加元素の偏析挙動を調べる事が重要となる。近年、Mg の双晶に添加元素が周期的に偏析することが実験的に明らかになった。一方で二重双晶といった複雑な粒界構造を持つ場合の偏析挙動については十分に調べられていない。本研究では、Mg の $\{10\bar{1}1\}$ 双晶及び $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ – $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶へのイットリウム(Y)の偏析挙動を、分子動力学(MD)計算及びモンテカルロ(MC)計算を用いて計算した。

本研究でのMD計算に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 SCIGRESS を用いた。Mg の $\{10\bar{1}1\}$ – $\{10\bar{1}2\}$ 双晶モデルを作製したのち、分子動力学計算を用いて 10ps の安定化計算を行った。計算の際のアンサンブルは NVT アンサンブル(N:原子数、V:セルの体積、T:系の温度)を用いて、温度は 5K 及に制御した。原子間相互作用ポテンシャルは AMEAM ポテンシャル[1]を用いて計算を行った。その後、MC 計算によって Y の偏析挙動を計算した。MC 計算ではランダムな Mg 原子を Y に置換し、微小変位を与え、メトロポリスアルゴリズムを用いて置換の採択/棄却を判定した。これを 50MC ステップ繰り返し計算した。

MD 及び MC シミュレーションの結果、単純な双晶である $\{10\bar{1}1\}$ 双晶モデル及び $\{10\bar{1}2\}$ 双晶モデルにおいては、Y は双晶界面に周期的に偏析することが確認された。Y の原子半径は Mg よりも大きく、このため Y は粒界中の自由体積が大きいサイトに偏析することが分かった。一方で $\{10\bar{1}1\}$ – $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶モデルにおいては、偏析サイトの自由体積が大きいだけでなく、そのサイトの結合長のばらつき(異方性ファクタ)が小さく、最短の結合長が長く、配位数が大きいサイトに偏析しやすいことが明らかになった。以上のように、二重双晶における偏析挙動は単純な双晶に比べ複雑である事が明らかとなった。

発表論文:なし

参考文献:[1] W. Hu, B. Zhang, B. Huang, F. Gao, and D. J. Bacon, J. Phys. Condens. Mater. **13**, 1193 (2001)

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・力学特性においてなど、バルクの金属にはない性質が現れる。ナノポーラス金に SAM(6-メルカプト 1-ヘキサノール)を修飾し硬さ試験を行ったところ、SAM 修飾ナノポーラス金の硬さが SAM を修飾しないナノポーラス金に比べ減少するという結果が得られた。硬さ減少のメカニズムは、SAM に含まれる硫黄原子によってナノポーラス金表面の金原子の結合状態が変化したこと起因すると考えられるが、その詳細は分かっていない。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おいて第一原理計算(ソフトウェア:CASTEP)を利用し、ナノポーラス金の硬さ減少のメカニズム解明に取り組んだ。

金(111)面を 12 層積層させた金原子 96 個からなるセル(純 Au モデル)を作成し、またすべり面の金原子一個を硫黄原子一個と置換したモデル (Au-S) モデルを用意した。これらのモデルに対して安定化計算を行った。カットオフエネルギーは 320 eV、k 点は $3 \times 5 \times 1$ に設定して計算を行った。各モデルに対して第一原理せん断試験を行い、転位がすべり面上をバーガスベクトル分移動するのに必要なエネルギー (γ_{us} ; USFE) を計算した。また、USFE のうちひずみに起因するエネルギー $\gamma_{us, strain}$ 及び化学結合に起因するエネルギー $\gamma_{us, chemical}$ をそれぞれ計算した。

USFE を計算した結果、Au-S モデルの USFE は純 Au モデルの USFE よりも低かった。このことから、第一原理計算においても SAM 修飾によってナノポーラス金の硬さが低下することが確認された。また、Au-S モデルの $\gamma_{us, strain}$ は Au-S モデルの γ_{us} よりも大きく、 $\gamma_{us, chemical}$ は γ_{us} よりも小さかった。S 原子は Au 原子よりも電気陰性度が大きく、S 原子は周囲の Au 原子から電子を奪う。このため S 原子の周囲の Au-Au 結合は弱められ、 $\gamma_{us, chemical}$ が低下したと考えられる。以上から、SAM 修飾によってナノポーラス金表面の Au-Au 結合が弱められ、転位の移動が促進された結果、ナノポーラス金の強度低下につながったことが第一原理計算によって明らかになった。

発表論文(謝辞なし):Mechanical characterization of nanoporous Au modified with self-assembled monolayers, N.Miyazawa, J. Ishimoto, M. Hakamada and M. Mabuchi, Applied Physics Letters (2016) 109, 261905.

平成 28 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 農学研究科 森林科学専攻 生物繊維学分野

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、3 次元配向させる条件の最適を行った。最適化条件で作製した 3 次元配向体による単結晶構造解析結果をケンブリッジデータベースのデータと比較し、3 次元配向体作製法の有用性を示した。

発表論文(謝辞あり)

Chiaki Tsuboi, Fumiko Kimura, Tatsuya Tanaka, and Tsunehisa Kimura, Cryst. Growth Des. 2016, 16, 2810–2813.

発表論文(謝辞なし)

Shu Tsukui, Fumiko Kimura, Katsuhiro Kusaka, Seiki Baba, Nobuhiro Mizuno, and Tsunehisa Kimura, Acta Cryst. (2016). D72, 823–829.

有機分子性結晶の気体吸着状態の解析
Analysis of the gas sorption state of organic molecular crystal

京都大学 大学院人間・環境学研究科 関連環境学専攻 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、有機分子性結晶を基体とする気体吸着材料の開発を目的として、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特性の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端と C 末端の両方を保護した Boc-L-Met-L-AlaOMe (以下, **MAP** 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判明している。

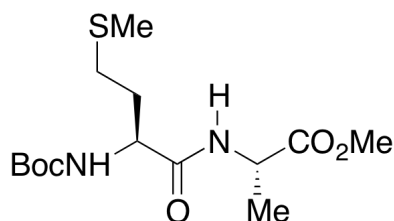


図1 **MAP** の分子構造

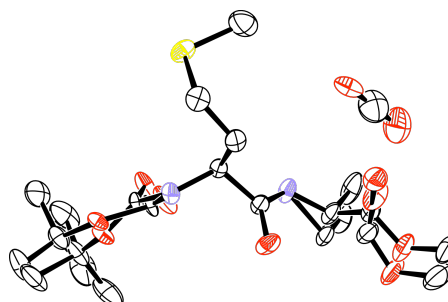


図2 **MAP** の CO₂ 吸着状態の OTREP 図

本研究では, **MAP** が示す気体吸着特性を解明することを目的として, **MAP** が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い, 結晶を構成する **MAP** と結晶中に吸着された二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の解析を行った。ここでは, 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た。

単結晶X線構造解析の結果, **MAP** の結晶中に二酸化炭素が吸着された状態を原子レベルで可視化することに成功した(図2)。二酸化炭素の周辺には, 四分子の **MAP** が近接しており, これらとの分子間相互作用によって, **MAP** の結晶中に二酸化炭素が吸着されていることが示唆された。そこで, 計算化学アプリケーション Materials Studio 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構造最適化を行った後, Gaussian 09 を用いて二次の摂動法による *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い, **MAP** と二酸化炭素との間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果, 分散力が, 両者の間に働く分子間相互作用の主たるものであり, **MAP** による高選択的な二酸化炭素の吸着挙動は, 同相互作用によって発現していることが明らかとなった。

長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析
Analysis of electron trap level in persistent phosphors

京都大学 人間・環境学研究科 関連環境学専攻

上田 純平

研究成果概要

長残光蛍光体とは、励起光を遮断後も、数時間から十数時間という長い時間発光し続ける発光材料であり、夜光塗料として時計の文字盤や避難誘導標識に使用されている。現在、市場に出回っている長残光蛍光体の 8 割は、1993 年に根本特殊化学株式会社によって開発された $\text{SrAl}_2\text{O}_4\text{:Eu}^{2+}\text{-Dy}^{3+}$ である。この長残光蛍光体をブレイクスルーに、様々な長残光蛍光体がトライアンドエラーにより、研究開発がされてきたが、開発から約 20 年以上たった現在でも $\text{SrAl}_2\text{O}_4\text{:Eu}^{2+}\text{-Dy}^{3+}$ が最大輝度、最長時間を示す残光蛍光体である。長残光蛍光体の設計には、発光中心イオン、ホスト伝導帯、欠陥トラップ準位のエネルギー位置関係が重要であり、これまでスペクトロスコピーの手法を用いてエネルギー準位の決定&予測を行ってきた。しかしながら、実験データからだけでは欠陥トラップの同定やそのエネルギー準位の予測は簡単ではない。本研究では、量子計算ソフトによる欠陥準位の計算を用いることで、欠陥準位に関して考察し、新規長残光蛍光体の開発を行うことを目的としている。今後、酸素欠陥や希土類イオンの電子トラップ中心のエネルギー準位の計算を行う予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

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

京都大学 生態学研究センター 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、琵琶湖沖の水中に生息する細菌およびウイルスのメタゲノム解析を行った。2016年の5月から12月にかけて琵琶湖沖定点(35°12'58"N 135°59'55"E; 水深 73 m)の表水層(5 m)および深水層(65 m)より採水を行い、細菌画分(0.2~5.0μm)とウイルス画分(0.2μm 未満)それぞれからDNAを抽出・精製し、Miseq (2×300bp)によるショットガンシーケンスを行った。得られたリードは、スーパーコンピュータシステム上にて、SPAdes 3.10.0 を用いてアセンブルした。

ウイルスについては、表水層・深水層合わせて50以上の完全長とみられるゲノムが得られ、5000以上のゲノム断片(>5kbp)が得られた。総じて、表水層と深水層のウイルス群集は異なっていたが、一部両水深層に共通して出現するウイルスも存在した。この傾向は宿主(細菌)群集でも見られることから、各ウイルスの分布パターンは、それぞれの宿主の分布パターンを反映していると考えられる。季節変動も見られ、安定した環境と思われていた深水層でも、ウイルス群集は季節的に大きく変化していることが明らかとなった。また表水層では夏季のシアノバクテリアの優占に合わせて多数のシアノファージとみられる断片が見られた一方、深水層では深水層特異的な細菌系統(CL500-11、MG1 等)を宿主にするとみられるウイルスの断片が複数見つかった。今後はこれらのウイルスが宿主の現存量や代謝能に及ぼす影響に注目し、その生態系・物質循環へのインパクトを明らかにする予定である。

細菌メタゲノムにおいては、SPAdes でアセンブリされた塩基配列断片に対し、4-mer およびサンプル間のカバレッジの差異を用いてクラスタリングする手法(binning)を用いた。これにより、各細菌系統のMAG(Metagenome Assembled Genome)を構築し、琵琶湖の表水層および深水層に生息する優占的な細菌系統のゲノムを90%以上のCompletenessで得ることができた。今後は個々の細菌系統のゲノム情報からその生理代謝能を分析し、生態系・物質循環における機能や重要性を明らかにする予定である。

発表論文

なし (1月からの利用であったため論文発表は来年度の予定)

多能性細孔物質の深化

Development of multifunctional porous materials

京都大学 物質-細胞統合システム拠点 北川グループ 日下 心平

【研究成果概要】

多孔性材料は古代エジプトの時代(活性炭)から現代まで(ゼオライトなど)に至る長きにわたって人類の生活に不可欠なものとして利用されてきた。もし、活性炭やゼオライトが担ってきた貯蔵、分離、変換などの機能について、それらを凌駕する、もしくは全く新しい多孔性機能を有する材料が創製されれば、人類の生活に革新的な変化をもたらす事が期待される。そのためには、微少空間を持つ物質の合成、構造、性質についての新しいサイエンスの開拓が必要である。

我々は、有機配位子と金属イオンが自己組織化プロセスによって組み上がる結晶性の多孔体:多孔性配位高分子(Porous Coordination Polymer:PCP)を足場として、多様な機能空間のデザインを試み、新現象・新機能の探索を行っている。PCP はその骨格構造に均一な細孔(直径数 Å~数 nm)を有し、そこへ様々な気体分子を吸着させ取り込むことができる。さらに、一部の PCP は、ガス吸着に伴い結晶格子が変形する「ソフトな」挙動を見せる。この結晶格子の変形はガス種選択的に起こり、通常、ある一定のガス圧力以上になると急激に格子が変形(開孔)し吸着が起こる。この現象は「ゲート型吸着」と呼ばれている。

既にあらゆる種類の PCP が開発され、多様なガ斯特異的ゲート吸着が報告されているが、そのメカニズムはそれぞれ異なる。種々のゲート型吸着メカニズムを理解するためには、格子変形に伴うエネルギーと、ガス吸着による安定化エネルギー(吸着エネルギー)の両者を考慮する必要がある。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、PCP の結晶構造を基にしてガス分子の吸着サイトを予測し、ゲート開閉前後のエネルギー変化とガス吸着エネルギーの計算を行った。

あるゲート型吸着を示す PCP について、Material Studio の DMol³ パッケージを用いた密度汎関数法(LDA, VWN)による構造最適化、続いて Adsorption Locator パッケージを用いた Simulated-Annealing 法によるガス吸着サイトのモンテカルロ探索を行った。得られたガス吸着状態の構造を基に、一点計算(GGA, PBE)によりエネルギーを求め、PCP の構造変形にまつわるエネルギーと、吸着エネルギーの関係を明らかにした。これらの結果から、PCP の構造変形に伴うエネルギーはガス吸着エネルギーにより補填され、システム全体としての見かけの吸着エネルギーは非常に小さく抑えられていることが明らかとなった。この知見は、PCP への選択的吸脱着を利用した将来のガス分離技術開発において、分離プロセス全体のエネルギーコストを下げるための有用な知見となる。

【発表論文】

N. Hosono, S. Kusaka, S. Kitagawa, *in preparation*.

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

Large-Scale Simulations for Polymer Phase Separation

京都大学学際融合教育研究推進センター 吉元健治

研究成果概要

下排水処理に用いられる高分子分離膜の内部には微細な孔(穴)が多数存在し、そのサイズや形状等で分離性能が決定する。我々の研究目的は、分離膜内の細孔構造をシミュレーションで予測することである。我々は高分子溶液の粘弾性を考慮した新しい相分離モデルを開発し、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分離膜の形成シミュレーションに取り組んでいる。

その結果の一例を Fig.1, 2 に示す。Fig.1 は高分子、溶媒、水の三成分が一様混合状態からスピノーダル分解を経て、相分離した際の計算結果である。従来モデル同様に高分子溶液の粘性のみを考慮した Fig.1(a)では、相分離後円形のドメインが形成された。これは界面張力が支配的なためである。一方で我々の提案する粘弾性を考慮した Fig.1(b)においては、高分子鎖の絡み合いにより弾性が生じるため、界面張力による変形が起こり難くなり、高分子のネットワーク構造が形成された。また、Fig.2 は NIPS(非溶媒誘起相分離)法を想定し、初期状態として高分子溶液と水との接触を与えた際の相分離結果である。高分子溶液の粘性のみを考慮した Fig.2(a)においては、界面張力の影響を受けて円形の細孔が形成された。一方で粘弾性を考慮した Fig.2(b)においては、弾性の影響により細孔が円形になるのを抑制された。その結果、実際の膜に見られるネットワーク構造が形成されやすくなった。

今後は NIPS 法における詳細な膜構造の形成メカニズムの解明に向けて、より詳細に検討を進めるとともに、二次元から三次元シミュレーションへの拡張を進める予定である。

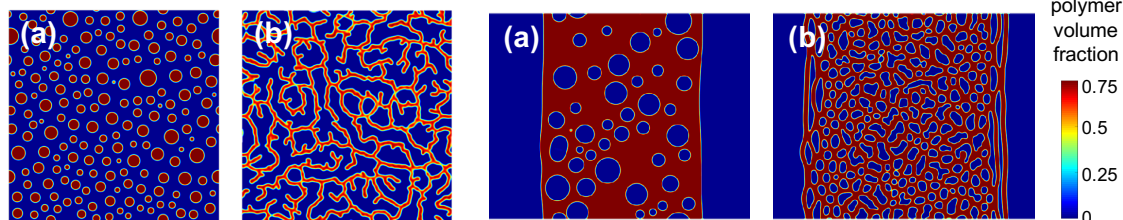


Fig.1 Phase separation in Bulk conditions:
(a) viscous and (b) viscoelastic solution

Fig.2 Phase separation in NIPS:
(a) viscous and (b) viscoelastic solution

発表論文:なし

グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発

Development and application of the novel phylogenetic method based on graph theory

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

分子系統学における今日の難題の一つは「著しく分化した遺伝子群の進化解析」である。特にタンパク質スーパーファミリーレベルの系統樹を再構築可能な方法は未だに存在しない。進化的関係がある遺伝子群であっても、互いの配列距離が著しく遠い場合は informative な多重配列アライメントの作成は難しく、それらを前提とする従来法の適用もまた困難なためである。そこで本研究において、新たな系統解析手法「Graph Splitting 法 (GS 法)」を考案した。GS 法は、まずペアワイズアライメントに基づいて配列類似性グラフを構築し、次にそのグラフを再帰的に分割することで系統樹を得る—つまり部分配列の類似関係を進化情報に変換する方法である。この操作は、多重配列アライメントに起因する従来からの諸問題を回避する。

GS 法と一連の従来手法 (近隣結合法、最大節約法、最尤法、およびベイズ法) の性能を比較するために大規模な進化シミュレーションを行った。この比較解析は、膨大な計算コストがかかる 1) 進化シミュレーション (INDELible など)、2) 配列アライメント (BLAST、Mafft など)、3) 系統樹再構築 (RAxML、MrBayes など) といった各計算素過程をさらに数千回単位で繰り返す行うものであったため、スーパーコンピュータを用いることで初めて実現することができた。

比較解析の結果、進化距離が互いに遠い遺伝子群については GS 法が最良な系統解析手法であることが示された。同時に、これまで系統解析が困難とされてきた条件 (e.g. long branch attraction) において、GS 法が最も頑健な性能を示すことも分かった。また、実データへの適用例として TIM バレルスーパーファミリーの系統解析を行ったところ、高い内部枝支持率を持つ GS 系統樹が得られ、さらにこの GS 系統樹は他の系統樹よりも確からしい系統樹であることが三次構造解析より統計的に有意に示された。

発表論文 (謝辞あり)

なし

発表論文 (謝辞なし)

なし

平成 28 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

ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析

Metagenomic analysis of human intestinal microbiota

東京工業大学 生命理工学院 山田研究室

上田 敦史

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、次世代シーケンサーによるディープシーケンシングのデータのアセンブルを行った。現在、遺伝子予測、機能アサインメントを行っている。

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

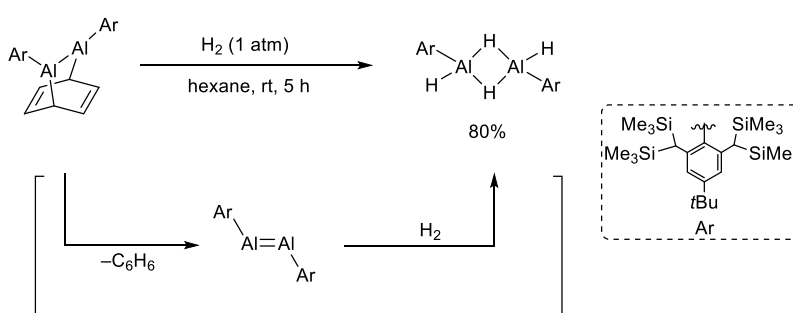
Development of functional materials by taking advantage of main group elements

茨城大学工学部生体分子機能工学科 吾郷 友宏

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、アルミニウム二重結合分子による水素分子活性化反応について量子化学計算を用いた検討を行った。

我々のグループでは、アルミニウム二重結合分子であるジアルメン (Ar-Al=Al-Ar) の性質に関する研究を行っており、これまでに温和な条件でのジアルメン発生法を開発している。さら



に本法を用いることで、ジアルメンと種々の有機・無機小分子や遷移金属錯体との反応を検討してきた。今回、ジアルメンと水素分子との反応において、常温・常圧で水素分子がジアルメンと反応し、ジヒドロアルマン二量体 ($[\text{ArAlH}(\mu\text{-H})]_2$) が高収率で得られることを見出した。

ジヒドロアルマン二量体の構造を明らかにするために、Gaussian 09 を用いた密度汎関数法 (DFT) による二量体の構造最適化と Al-H 伸縮振動数の予測を行い、さらに Gauge-independent atomic orbital (GIAO) 法による ^1H NMR 化学シフトの計算を行った。これらの計算結果を各種分光法および単結晶 X 線結晶構造解析と組み合わせることで、ジヒドロアルマン二量体の構造を明らかにした。DFT には B3PW91 を採用し、構造最適化と振動数計算には 6-31G(d) を、GIAO 計算には 6-311+G(2d,p) を基底関数に用いた。

ジヒドロアルマン二量体の最適化構造は X 線構造解析の結果と良い一致を示した。ATR 法で測定した固体状態での Al-H 伸縮振動数は、末端ヒドリド側で 1872 cm^{-1} 、架橋ヒドリド側で 1358 cm^{-1} であり、スケールリングを加味すると計算値 ($1922, 1420\text{ cm}^{-1}$) と近い値であった。また重ベンゼン中での ^1H NMR スペクトルでは、末端ヒドリドは 4.89 ppm 、架橋ヒドリドは 4.49 ppm にシグナルを示し、これらの値も二量体についての計算値である 5.32 ppm および 5.15 ppm と比較的近い値であったことから、溶液中でも結晶構造と同様の二量体構造をとっていることがわかった。

発表論文(謝辞あり)

“Activation of Dihydrogen by Masked Doubly Bonded Aluminum Species”, Koichi Nagata, Takahiro Murosaki, Tomomohiro Agou, Takahiro Sasamori, Tsukasa Matsuo, and Norihiro Tokitoh, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55(41), 12877-12880 (2016).

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、アルコールによるアミンの N-アルキル化に対し種々のアルミナ担持 Pd 系合金 ($\text{Pd}_x\text{M}_y/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{M} = \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Ga}$ など) の触媒特性を検討し、その中で PdZn 合金が特に高い活性および選択性を示すことを見出している。この反応の進行には、反応性の高いアミンを保持したままアルコールを活性化することが必要とされるが、PdZn がなぜアルコールを優先的に活性化するかの原因は分かっていなかった。

今回の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た検討においては、一連の Pd 系合金触媒の中で中程度の選択性を示した Pd_2Ga 合金の表面における O 原子および N 原子の吸着エネルギーを計算した。(020)、(202)、(210) など様々な表面上の Pd_2Ga hollow サイト上に O および N その結果、O と N の吸着エネルギー差はいずれの場合も約 32 kJmol^{-1} であり、 Pd_2Ga 表面では O の吸着がやや有利であることが判明した。この結果を、既に得られている Pd(111)、PdCu(110)、PdZn(111) 面上での結果と合わせて、吸着エネルギー差と各触媒を用いた際の目的生成物の選択性(アルコール活性化による目的生成物の生成速度とアミン活性化による副生成物の生成速度の比)との関係をプロットした結果を図1を下に示す。

横軸は右に行くほど酸素の吸着が有利になること、縦軸は上に行くほど目的生成物の選択性が高くなることに対応する。両者の間に良い正の相関が得られたことから、O 原子で配位するアルコールの吸着が有利なほどアルコールが優先的に活性化され、目的の反応が進行することが示された。すなわち、PdZn 上では、oxophilic な Zn が存在することによりアルコールの吸着及び活性化が優先的に進行し、高い選択性を示したものと考えられる。

この様に理論計算を用いた検討により、有用な合金触媒の作用機構を明らかにすることに成功した。

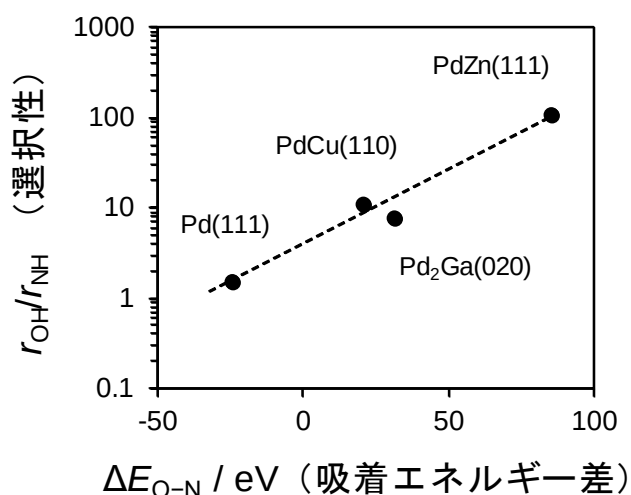


図1. O と N の吸着エネルギー差と選択性の関係



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SGI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

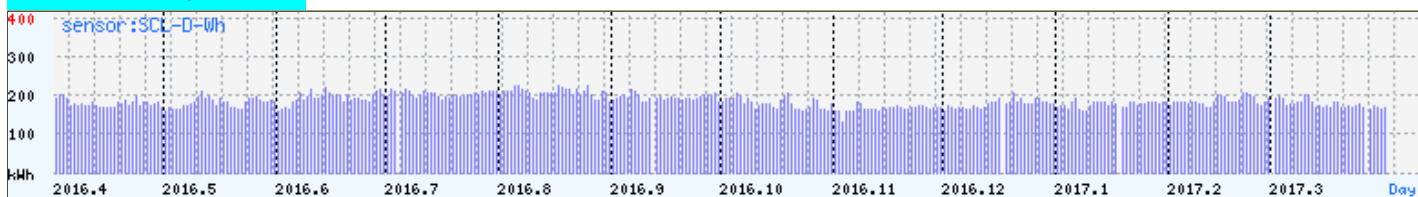
システム名	稼働状況													年間運転時間(h)			システム運転状況
	Day	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dec	Jan	Feb	Mar	稼働	保守	運休	
大規模共有メモリサーバ (uv1/uv2)	1													8749.0 (h)	11.0 (h)		システム稼働率 : 99.9 %
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	1													8630.0 (h)	130.0 (h)		システム稼働率 : 98.5 %
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
GPUクラスタ (pk01-pk14)	1													8760 (h)			システム稼働率 : 100 % (システム停止なし)
	10																
	20																
	30																
	1																
	10																

● 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)
大規模共有メモリサーバ (uv1/uv2)	4月	720:00			720:00	100 %
	5月	744:00			744:00	100 %
	6月	709:00		11:00	720:00	98 %
	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	8749:00		11:00	8760:00	99.9 %
	月平均	729:05		0:55	730:00	99.9 %
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	4月	720:00			720:00	100 %
	5月	614:00		130:00	744:00	82 %
	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 %

GPUクラスタ (pk01-pk14)	2月	672:00			672:00	100 %
	3月	744:00			744:00	100 %
	計	8630:00		130:00	8760:00	98.5 %
	月平均	719:10		10:50	730:00	98.5 %
	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

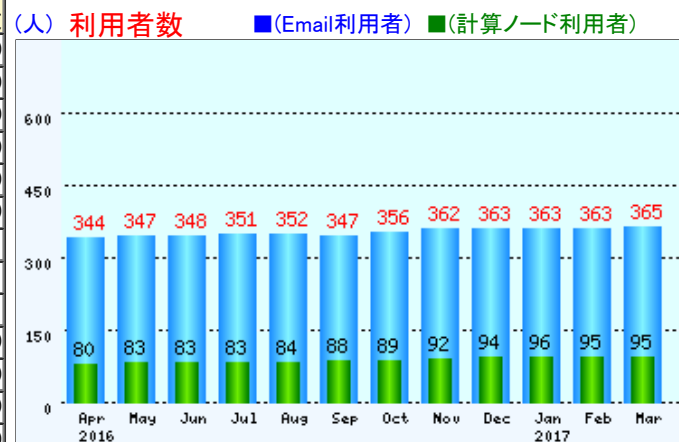
スーパーコンピュータシステム

- ☒ 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SGI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	166	(41)	(29)
2	エネルギー理工学研究所	2	(1)	(2)
3	生存圏研究所	1	(1)	(1)
4	防災研究所	2	(1)	(1)
5	宇治地区事務局	104		(14)
6	理学研究科・理学部	10	(7)	(7)
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	3	(3)	(3)
11	工学研究科・工学部	46	(17)	(15)
12	エネルギー科学研究科	5	(5)	(5)
13	農学研究科・農学部	9	(7)	(3)
14	総合人間学部			
15	人間・環境学研究科	3	(2)	(2)
16	数理解析研究所			
17	情報学研究科			
18	生命科学研究科			
19	学術情報メディアセンター			
20	生態学研究センター	1	(1)	(1)
21	物質・細胞統合システム拠点	2	(1)	(1)
22	次世代開拓研究ユニット			
23	先端医工学研究ユニット	2		
24	触媒・電池元素戦略ユニット			
25	iPS細胞研究所			
26	ウイルス研究所			
27	産官学連携本部	2	(2)	(2)
28	学際融合教育研究推進センター	1	(1)	(1)
29	その他	6	(5)	(3)



● 部局別のCPU使用時間

項番	部 局 名	共有メモリーサーバ	CPUクラスタ	GPUクラスタ	ログインノード
1	化学研究所	6945日21時間30分	26402日14時間34分	2314日13時間37分	10日13時間10分
2	エネルギー理工学研究所		4日12時間29分	08時間46分	
3	生存圏研究所				
4	防災研究所				00時間02分
5	宇治地区事務局				
6	理学研究科・理学部	864日02時間34分	75日13時間54分		06時間50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		00時間01分		00時間13分
11	工学研究科・工学部		1583日20時間16分	274日19時間33分	08時間25分
12	エネルギー科学研究科		1898日21時間15分	41日20時間20分	14時間23分
13	農学研究科・農学部	52日15時間07分	1141日20時間50分	42日00時間08分	11時間20分
14	総合人間学部				
15	人間・環境学研究科				
16	数理解析研究所				
17	情報学研究科				
18	生命科学研究科				
19	学術情報メディアセンター				
20	生態学研究センター	78日04時間07分	50日00時間24分	15日10時間12分	01時間25分
21	物質・細胞統合システム拠点				
22	次世代開拓研究ユニット				
23	先端医工学研究ユニット				

24	触媒・電池元素戦略ユニット				
25	iPS細胞研究所				
26	ウイルス研究所				
27	産官学連携本部	730日17時間33分			00時間01分
28	学際融合教育研究推進センター	7日10時間49分	19364日12時間20分	1424日21時間15分	17時間16分
29	その他	848日07時間18分	2677日04時間13分	12日09時間02分	3日00時間18分



システム稼働状況

スーパーコンピュータシステム

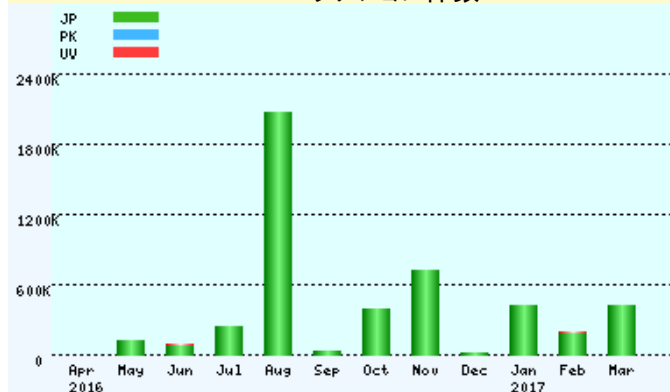
- システム稼働時間
- 部門別利用状況
- バッチジョブ処理状況
- 応用ソフトウェア利用状況

日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

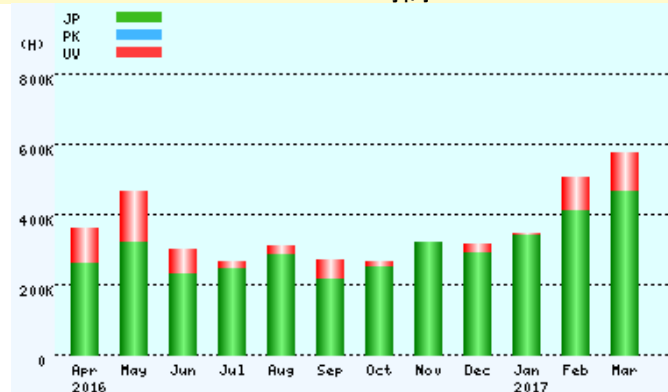
● バッチジョブ実行時間 (大規模共有メモリサーバ)

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	7359255	41	22311
2	総CPU時間	217755日18時間23分	152日15時間04分	45335日16時間33分
3	平均CPU時間	0時間46分	5日6時間18分	1日15時間46分
4	最大CPU時間	12日8時間04分	2日12時間41分	25日4時間37分
5	平均ジョブ実行時間	0時間09分	1日1時間51分	2時間08分
6	最大ジョブ実行時間	18時間12分	12時間08分	16時間04分
7	平均ジョブ待ち時間	0時間00分	0時間00分	1時間07分
8	最大ジョブ待ち時間	4時間16分	0時間00分	3時間26分

(件) バッチジョブ件数

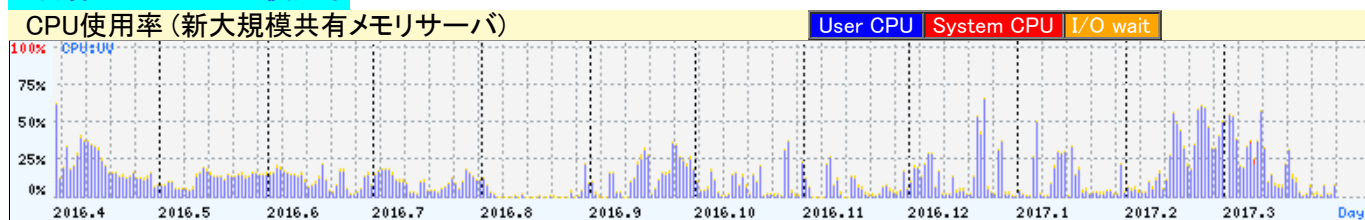


(時間) CPU時間

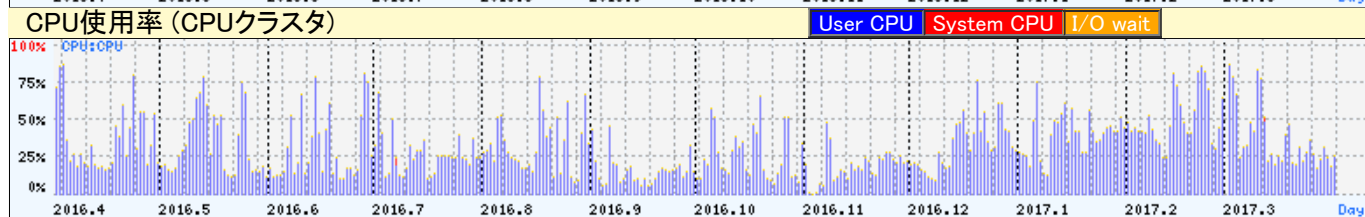


● 計算サーバのCPU使用率

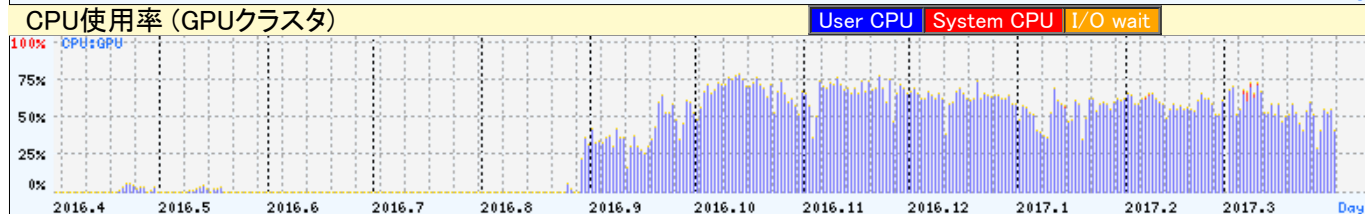
CPU使用率 (新大規模共有メモリサーバ)



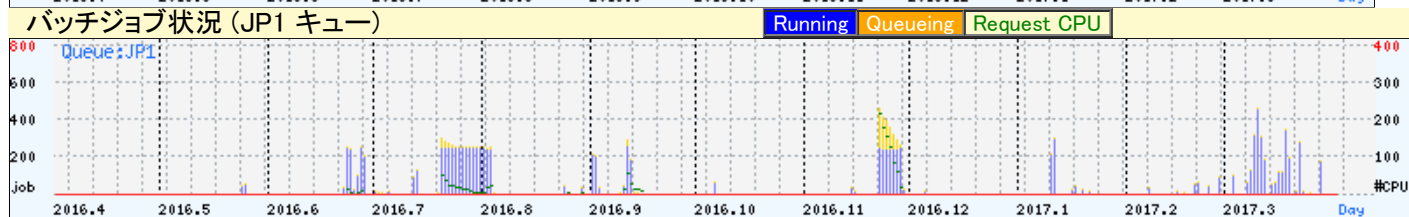
CPU使用率 (CPUクラス)



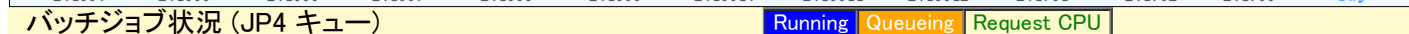
CPU使用率 (GPUクラス)

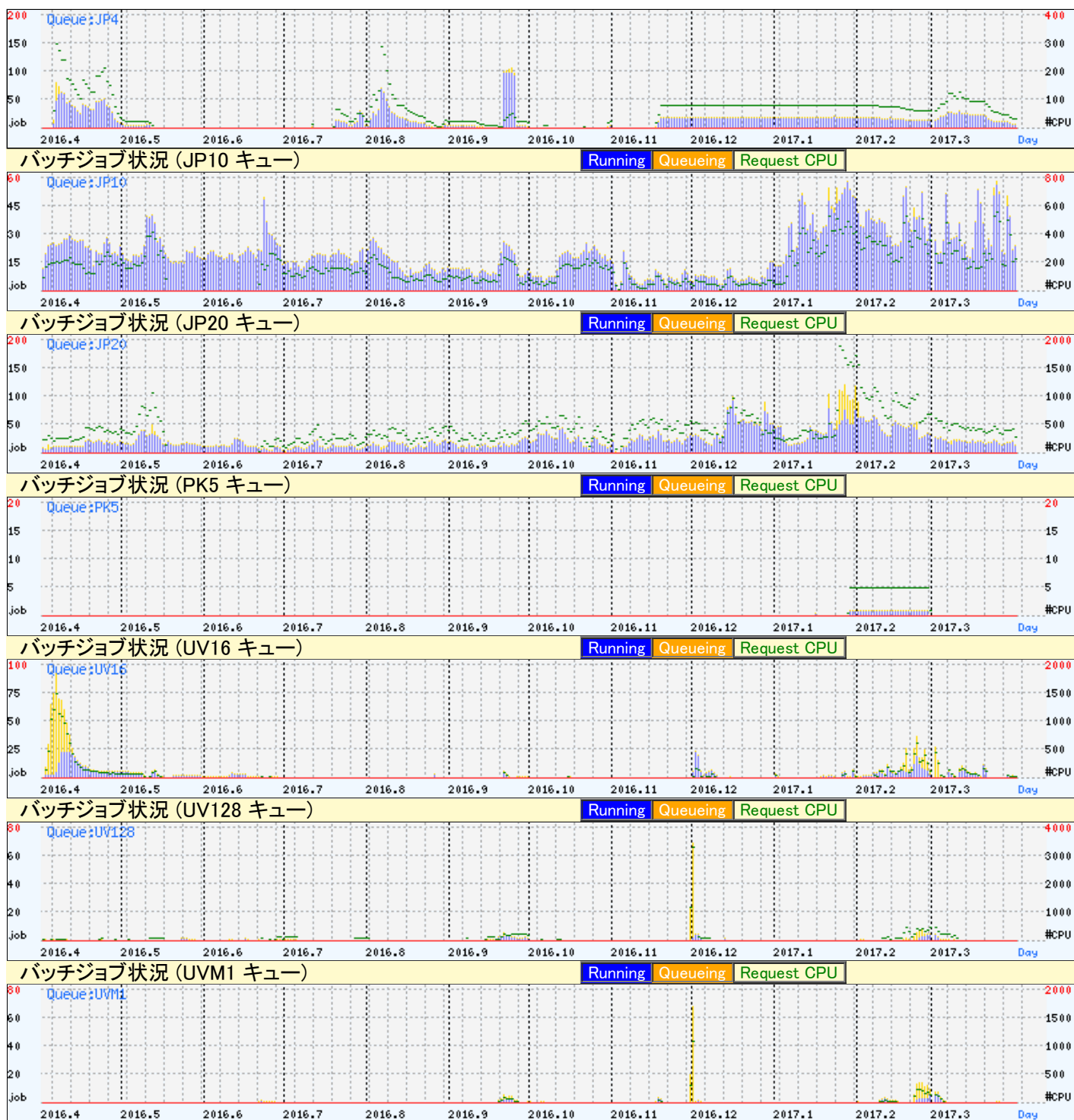


バッチジョブ状況 (JP1 キュー)



バッチジョブ状況 (JP4 キュー)





● 月別のCPU使用時間とバッチジョブ件数(2016年度)

月	CPU使用率	CPU時間	バッチジョブ件数	CPU時間h	CPU使用率(%)
4月	31.3 %	21831日16時間31分	12825		
5月	26.7 %	23276日02時間48分	123152		
6月	24.3 %	17060日21時間22分	90011		
7月	20.9 %	13183日00時間20分	253341		
8月	23.3 %	16979日06時間46分	2084503		
9月	17.8 %	11572日14時間53分	34623		
10月	24.3 %	15393日05時間11分	391494		
11月	18.1 %	10125日17時間24分	728938		
12月	30.5 %	18715日06時間56分	20148		
1月	32.8 %	17143日15時間58分	422503		
2月	44.5 %	23146日16時間28分	197270		
3月	33.5 %	14378日12時間13分	424344		
年度計	-	202806日16時間55分	4783152		
月平均	27.3 %	16900日13時間24分	398596		



システム稼働状況

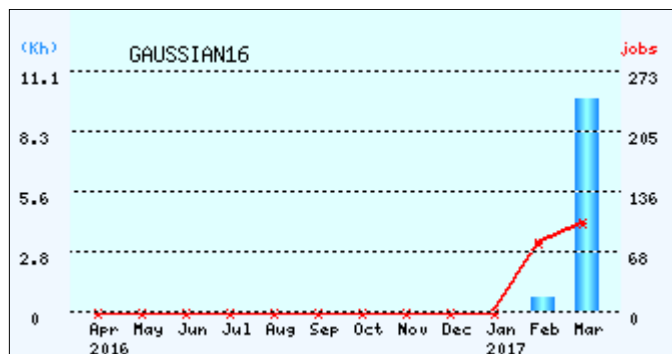
スーパーコンピュータシステム

- ☒ 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

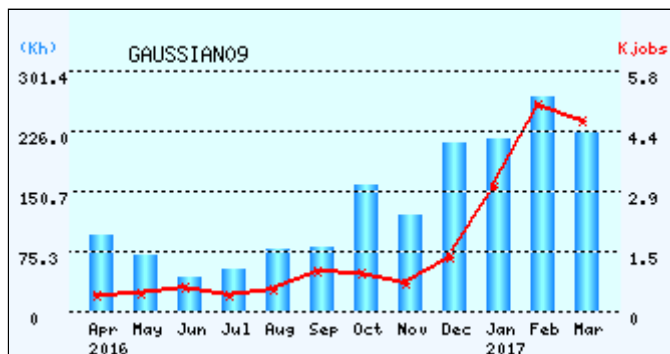
日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 応用ソフトウェア利用時間 (ジョブ件数とCPU時間)

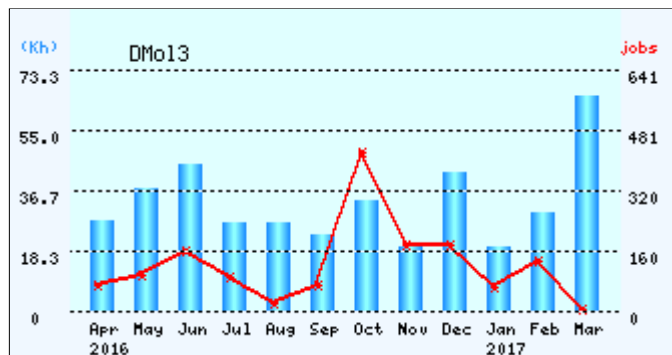
ジョブ件数とCPU時間



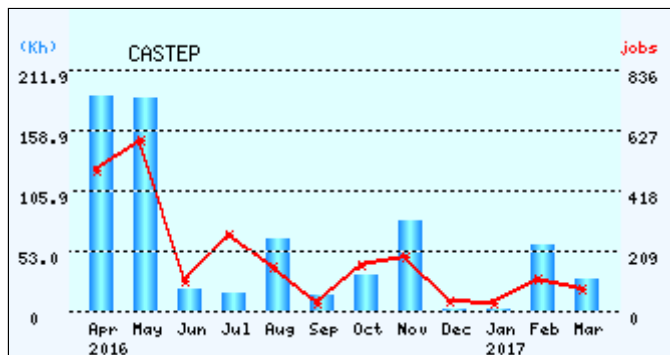
ジョブ件数とCPU時間



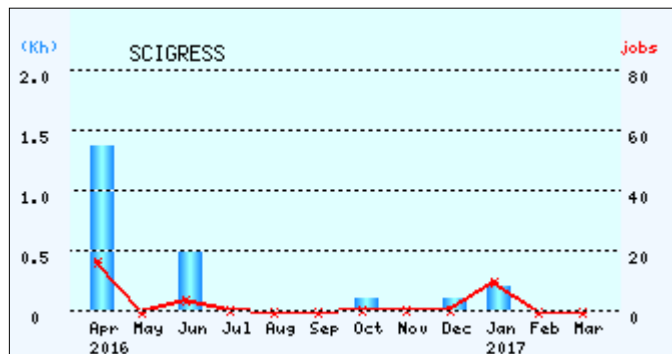
ジョブ件数とCPU時間



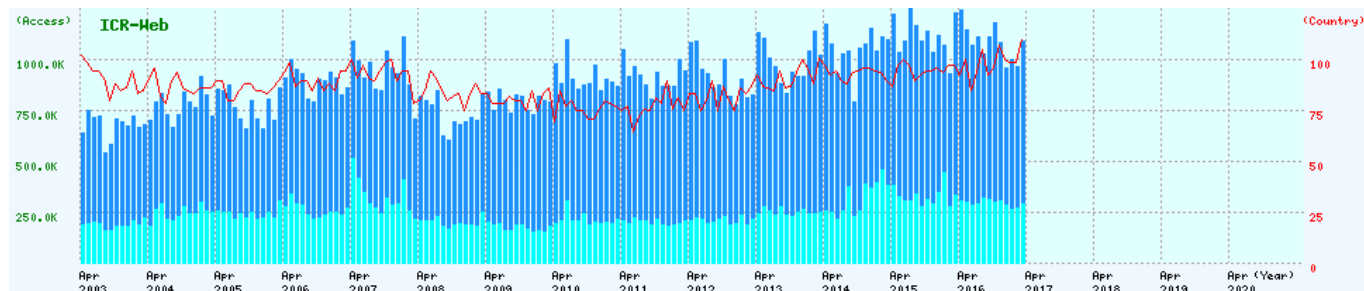
ジョブ件数とCPU時間



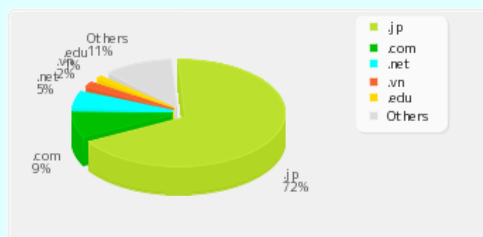
ジョブ件数とCPU時間



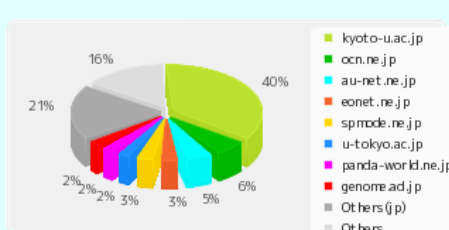
月別の利用件数と利用国数



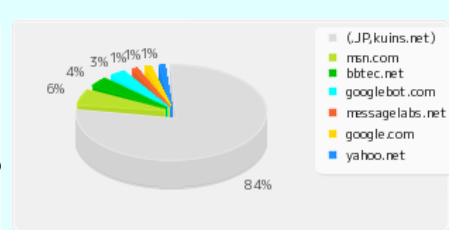
国別の利用件数(2016年度)



上位50機関の利用件数(2016年度)



上位50機関の利用件数(2016年度)



注)・kuins.net は JPDメインに含みます。

・上位50機関の利用件数グラフは、上位50機関の総利用件数を100%とした比率です。

2016年度 主な機関別の利用件数

ドメイン名	総件数	化学研究所情報	研究室情報	スパコン情報
2ij.net	30077	3345	11672	15060
access-internet.ne.jp	46212	8145	19809	18258
aist.go.jp	35784	10828	12745	12211
ap.nuro.jp	30571	5220	8907	16444
asahi-net.or.jp	65722	12000	23355	30367
au-net.ne.jp	452614	103907	188660	160047
baidu.com	26522	4316	2715	19491
bbtec.net	345858	63138	105357	177363
dion.ne.jp	111424	19058	47739	44627
eonet.ne.jp	283457	65178	97716	120563
genome.ad.jp	177704	12403	2351	162950
google.com	54401	9051	24993	20357
googlebot.com	263980	108796	60344	94840
hinet.net	24572	3887	5756	14929
hitachi.co.jp	30684	3567	7191	19926
hokudai.ac.jp	71700	7477	27570	36653
home.ne.jp	74885	12411	37550	24924
infoweb.ne.jp	97023	26305	26851	43867
kanazawa-u.ac.jp	48678	7354	12311	29013
kddi.ne.jp	51899	5841	21523	24535
keio.ac.jp	32303	5539	13791	12973
kobe-u.ac.jp	28686	3538	11550	13598
kyoto-u.ac.jp	3614889	682174	751950	2180765
kyushu-u.ac.jp	54976	8844	24309	21823
mesh.ad.jp	88665	14991	34087	39587
message.labs.net	66631	12074	22210	32347
msn.com	554336	163063	208080	183193
nagoya-u.ac.jp	102740	10597	41831	50312
nttpc.ne.jp	69250	10453	31399	27398
ocn.ne.jp	543748	91748	207995	244005
openmobile.ne.jp	36436	8423	13897	14116
osaka-u.ac.jp	127019	27101	50127	49791
osakafu-u.ac.jp	26640	3185	13147	10308
panda-world.ne.jp	178428	34748	75623	68057
plala.or.jp	135967	32516	51646	51805
shinshu-u.ac.jp	22256	1849	9552	10855

so-net.ne.jp	96307	15997	33923	46387
spmode.ne.jp	281633	51175	126406	104052
titech.ac.jp	60630	8176	31330	21124
tohoku.ac.jp	88901	18504	40136	30261
tsukuba.ac.jp	22667	3009	11413	8245
tus.ac.jp	28810	4825	10370	13615
u-tokyo.ac.jp	184976	36424	95513	53039
ucom.ne.jp	100862	13796	41520	45546
vectant.ne.jp	45581	7934	17845	19802
yahoo.net	53782	8232	23072	22478
yournet.ne.jp	22227	4548	7963	9716
zaq.ne.jp	61419	9893	29206	22320
Others or unknown	1050282	180358	387637	482287



2016年度 ゲノムネットサービス利用統計

西川 和嗣(日本SGI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 DISEASE	ヒト疾患
	KEGG DRUG	医薬品
	KEGG DGROU	医薬品グループ
	KEGG ENVIRON	生薬、天然物など

ゲノムネットデータベースリソース

サービス	内容
Virus-Host DB	ウィ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	ウィルスゲノムのproteomic treeを生成
OC Viewer	KEGG OC (KEGG Ortholog Cluster) へのインタフェース
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
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
PathComp	化合物間の反応経路計算
PathSearch	類似反応経路検索

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ー（ページ）をノード、エントリー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ーはデータベース名とエントリー名（またはアクセッション番号）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	
disease	病気	KEGG DISEASE（日本語）
drug	医薬品	KEGG DRUG（日本語）
dgroup	医薬品グループ	
environ	生薬・天然物、環境物質、ほか	KEGG ENVIRON（日本語）
expression	マイクロアレイ遺伝子発現プロファイル	著者による登録

その他のDBGETデータベース (カテゴリー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
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 (カテゴリー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 (カテゴリー4)

LinkDBで検索可能なデータベースは以下のとおりです。
http://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

表1 国別のWWW利用件数 (2016年度)

国名 (ドメイン名)	総件数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgens)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	8180	7724	(0)	(0)	(82)	(10)	(0)	(0)	(0)	455	(38069)	1
Andorra (ad)	1280	1246	(0)	(0)	(6)	(8)	(0)	(0)	(0)	28	(12)	6
United Arab Emirates (ae)	20437	18398	(39)	(0)	(400)	(62)	(0)	(0)	(2)	1907	(16)	132
aerospace (aero)	264	194	(27)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	70	(0)	0
Afghanistan (af)	3	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Antigua and Barbuda (ag)	339	290	(0)	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	24
Anguilla (ai)	2	2	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Albania (al)	20116	17432	(59)	(0)	(118)	(112)	(2)	(10)	(0)	2624	(5)	60
Armenia (am)	21904	14492	(2)	(0)	(154)	(64)	(0)	(0)	(5)	7348	(408)	64
Netherlands Antilles (an)	503	478	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	24
Angola (ao)	906	830	(2)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	57	(25)	19
Argentina (ar)	720365	605166	(90)	(0)	(25910)	(3390)	(6)	(6)	(16)	111369	(13976)	3830
American Samoa (as)	1113	870	(7)	(0)	(0)	(24)	(0)	(0)	(0)	243	(0)	0
Asia (asia)	904	702	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(2)	202	(0)	0
Austria (at)	1032282	858510	(402)	(0)	(12330)	(4506)	(0)	(28)	(123)	170971	(3091585)	2801
Australia (au)	4225718	3782727	(4230)	(24)	(241838)	(118032)	(10)	(24)	(106825)	432896	(17789818)	10095
Aruba (aw)	701	600	(1)	(0)	(24)	(0)	(0)	(0)	(0)	74	(1)	27
Aland (ax)	70	70	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Azerbaijan (az)	5253	4980	(1)	(0)	(16)	(12)	(0)	(0)	(0)	240	(0)	33
Bosnia Hercegovina (ba)	10322	9502	(1)	(0)	(1152)	(4)	(0)	(0)	(0)	641	(24)	179
Bangladesh (bd)	30706	24548	(3)	(0)	(1518)	(90)	(0)	(2)	(0)	5979	(0)	179
Belgium (be)	1304664	860600	(268)	(10)	(16606)	(6965)	(2)	(42)	(48)	439313	(624618)	4751
Burkina Faso (bf)	92	68	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	24
Bulgaria (bg)	78064	64487	(59)	(0)	(950)	(456)	(6)	(10)	(2)	13221	(7145)	356
Bahrain (bh)	2323	2088	(1)	(0)	(26)	(0)	(0)	(0)	(0)	224	(0)	11
bitnet (bitnet)	89	80	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	0
Business (biz)	541781	524752	(232)	(0)	(1366)	(12235)	(10)	(10)	(0)	16766	(3253)	263
Benin (bj)	14	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bermuda (bm)	938	768	(0)	(0)	(12)	(14)	(0)	(0)	(0)	122	(0)	48
Brunei Darussalam (bn)	4819	4186	(16)	(0)	(10)	(20)	(0)	(0)	(0)	594	(1)	39
Bolivia (bo)	9360	6332	(16)	(0)	(26)	(40)	(0)	(0)	(0)	2714	(40)	314
Brazil (br)	4738184	3795624	(2191)	(4)	(86076)	(142414)	(90)	(234)	(301)	905730	(11272686)	36830
Bahamas (bs)	234	206	(3)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	27	(0)	1
Bhutan (bt)	5639	5474	(9)	(0)	(2672)	(0)	(0)	(0)	(0)	72	(0)	93
Botswana (bw)	1750	1612	(2)	(0)	(22)	(4)	(0)	(0)	(0)	129	(1)	9
Belarus (by)	120882	115458	(25)	(0)	(348)	(180)	(8)	(18)	(20)	5301	(9)	123
Belize (bz)	21	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	15	(0)	0
Canada (ca)	3832876	3426454	(1487)	(12)	(1077429)	(10381)	(10)	(104)	(1301)	396234	(10557693)	10188
Catalan (cat)	23406	19894	(8)	(0)	(362)	(67)	(0)	(2)	(1)	3487	(3)	25
Cocos Islands (cc)	593972	510798	(540)	(0)	(3018)	(233)	(0)	(4)	(1)	83145	(116007)	29
Congo (cd)	5	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Central African Republic (cf)	8	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Switzerland (ch)	2688979	2277392	(8655)	(20)	(214828)	(6883)	(18)	(22)	(35237)	402626	(2147528)	8961
Cote D'Ivoire (ci)	2778	2452	(2)	(0)	(38)	(10)	(0)	(0)	(0)	205	(3)	121
Cook Islands (ck)	4	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Chile (cl)	372799	305185	(56)	(0)	(6510)	(1559)	(0)	(20)	(45)	64537	(111491)	3077
club (club)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Cameroon (cm)	2834	2170	(1)	(0)	(132)	(2)	(0)	(0)	(0)	618	(5)	46
China (cn)	10545623	6093536	(122676)	(0)	(135652)	(31613)	(598)	(1056)	(66)	4444790	(4218065)	7297
Colombia (co)	884874	756307	(131)	(0)	(22412)	(3124)	(0)	(10)	(27)	124251	(1661372)	4316
Commercial (com)	397039336	303722525	(11438766)	(3501)	(2562819)	(1815176)	(3191)	(9253)	(26751)	91962753	(25794577)	1354058
cooperative (coop)	237	156	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	81	(39)	0
Costa Rica (cr)	25378	20696	(2)	(0)	(552)	(78)	(0)	(0)	(0)	4511	(65)	171
Cuba (cu)	14826	12900	(0)	(0)	(260)	(80)	(0)	(0)	(0)	1503	(103)	423
Cape Verde (cv)	182	160	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	19	(0)	3
Curacao (cw)	1330	1250	(1)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	(0)	21	(0)	59
Christmas Island (cx)	16	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0
Cyprus (cy)	17583	15814	(0)	(0)	(38)	(158)	(0)	(0)	(0)	1605	(12)	164
Czechoslovakia (cz)	751908	555844	(2187)	(14)	(15660)	(21730)	(20)	(54)	(82)	189131	(1374697)	6933
Germany (de)	15468197	12384587	(31165)	(188)	(207629)	(336839)	(118)	(348)	(15306)	2931842	(14190991)	151768
Denmark (dk)	981145	809527	(153)	(0)	(10632)	(4090)	(0)	(28)	(71)	168035	(735390)	3583
Dominica (dm)	12	10	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Dominican Republic (do)	14279	12150	(14)	(0)	(24)	(66)	(0)	(0)	(0)	1827	(3)	302
Algeria (dz)	962	732	(0)	(0)	(26)	(4)	(0)	(2)	(0)	229	(394)	1
Ecuador (ec)	15926	12518	(4)	(0)	(614)	(56)	(0)	(0)	(0)	2886	(0)	522
USA Educational (edu)	24930659	20405856	(1712)	(76)	(543155)	(2634868)	(34)	(362)	(115013040)	4466564	(48386369)	58239
Estonia (ee)	117593	97236	(13)	(0)	(1562)	(405)	(0)	(2)	(2)	19579	(23853)	778

Egypt (eg)	19356	16866	(3)	(0)	(302)	(54)	(0)	(0)	(0)	2377	(75)	113
Spain (es)	3689036	2503954	(762)	(4)	(125341)	(54116)	(4)	(52)	(272)	1179163	(4475044)	5919
Ethiopia (et)	34	34	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
European Union (eu)	25870705	23524275	(89554)	(88)	(17098)	(43935)	(92)	(214)	(200)	2305930	(512834)	40500
Finland (fi)	935761	832038	(135)	(4)	(10192)	(166075)	(4)	(24)	(59)	101134	(373840)	2589
Fiji (fj)	773	740	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	27	(0)	6
Falkland Islands (fk)	48	24	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	24
Micronesia (fm)	196	136	(6)	(0)	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	54	(0)	6
Faroe Islands (fo)	462	378	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	84	(0)	0
France (fr)	8903930	5874101	(895)	(2)	(179278)	(26146)	(24)	(134)	(1803)	3014276	(3987039)	15553
Gabon (ga)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
gbl (gbl)	1216	992	(38)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	166	(2)	58
Georgia (ge)	10378	8843	(1)	(0)	(86)	(26)	(0)	(0)	(0)	1236	(1)	299
Guernsey (gg)	70	70	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(7)	0
Ghana (gh)	5617	4627	(7)	(0)	(134)	(22)	(0)	(2)	(0)	894	(4828)	96
Greenland (gl)	157	148	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	1
Gambia (gm)	78	74	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
USA Government (gov)	1121802	942119	(47)	(0)	(28402)	(3271)	(16)	(42)	(1553)	176096	(22091567)	3587
Equatorial Guinea (ga)	594	44	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	550	(0)	0
Greece (gr)	698372	572957	(164)	(4)	(11860)	(2501)	(0)	(2)	(19)	122920	(298617)	2495
South Georgia (gs)	49	24	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	0
Guatemala (gt)	22608	19848	(15)	(0)	(70)	(106)	(0)	(2)	(0)	2513	(399)	247
Guyana (gy)	1712	1482	(0)	(0)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	164	(0)	66
Hong Kong (hk)	629986	489314	(294)	(0)	(10455)	(2274)	(2)	(44)	(63)	124621	(356437)	16051
Honduras (hn)	2070	1796	(2)	(0)	(4)	(4)	(0)	(0)	(0)	225	(0)	49
Croatia (hr)	119831	108579	(16)	(0)	(14152)	(392)	(0)	(2)	(3)	9830	(13945)	1422
Haiti (ht)	9	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Hungary (hu)	841996	719282	(6410)	(0)	(10896)	(309717)	(2)	(320)	(212)	112091	(79482)	10623
Indonesia (id)	245357	195240	(386)	(0)	(2098)	(1889)	(4)	(10)	(6)	48098	(43318)	2019
Ireland (ie)	557788	442632	(25)	(0)	(5032)	(2693)	(2)	(4)	(32)	113575	(58102)	1581
Israel (il)	520763	376847	(67)	(0)	(7398)	(2067)	(0)	(16)	(29)	140309	(215437)	3607
Isle of Man (im)	48	22	(0)	(0)	(4)	(4)	(0)	(0)	(0)	26	(0)	0
India (in)	3661182	2766431	(349673)	(146)	(121058)	(159375)	(8)	(52)	(466)	884357	(970723)	10394
Information domains (info)	176947	144230	(386)	(0)	(2240)	(392)	(8)	(10)	(0)	32502	(347)	215
International (int)	768	450	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	242	(0)	76
British Indian Ocean Territory (io)	172940	113666	(3523)	(8)	(3412)	(2689)	(90)	(180)	(34)	56277	(27288)	2997
Iran (ir)	253072	170811	(65)	(2)	(4724)	(1755)	(0)	(4)	(9)	81467	(13805)	794
Iceland (is)	110477	91467	(23)	(0)	(576)	(468)	(0)	(0)	(44)	18683	(4879)	327
Italy (it)	4160780	2957905	(2145)	(12)	(72543)	(365145)	(42)	(104)	(5155)	1192942	(1430050)	9933
Bailiwick of Jersey (je)	144	90	(0)	(0)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	53	(0)	1
Jamaica (jm)	50	50	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Jordan (jo)	30592	27118	(42)	(0)	(2006)	(78)	(2)	(2)	(0)	3173	(12)	301
Japan (jp)	81321472	45534948	(7966604)	(151352)	(3137968)	(1437921)	(909)	(3044)	(300089)	35624472	(27748039)	162052
Kenya (ke)	18733	16888	(2)	(0)	(258)	(54)	(0)	(0)	(0)	1518	(108)	327
Kyrgyzstan (kg)	2438	2204	(6)	(0)	(2)	(10)	(0)	(0)	(1)	200	(0)	34
Cambodia (kh)	6723	4159	(218)	(0)	(92)	(16)	(0)	(0)	(0)	2507	(0)	57
Korea (kr)	3726371	2642554	(1527)	(4)	(147427)	(27825)	(0)	(28)	(689)	1073993	(1609483)	9824
Kuwait (kw)	6186	5952	(0)	(0)	(1498)	(10)	(0)	(0)	(0)	158	(0)	76
Cayman Islands (ky)	251	202	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	24
Kazakhstan (kz)	27658	22014	(26)	(0)	(174)	(104)	(2)	(0)	(0)	5393	(67)	251
Lao People's Democratic Republic (la)	3989	3714	(4)	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	275	(0)	0
Lebanon (lb)	20490	15072	(0)	(0)	(434)	(16)	(0)	(0)	(0)	5411	(166)	7
Saint Lucia (lc)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Liechtenstein (li)	4611	2464	(15)	(0)	(12)	(182)	(0)	(0)	(0)	2145	(0)	2
limited (limited)	416	380	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	36	(0)	0
Sri Lanka (lk)	13763	8578	(5)	(0)	(346)	(176)	(0)	(0)	(4)	5053	(8)	132
Lesotho (ls)	6975	5400	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1575	(0)	0
Lithuania (lt)	192690	159662	(11)	(0)	(780)	(762)	(0)	(0)	(0)	32364	(58464)	664
Luxembourg (lu)	178305	157670	(158)	(22)	(412)	(949)	(0)	(0)	(12)	20467	(540338)	168
Latvia (lv)	15633	12996	(24)	(0)	(84)	(74)	(0)	(0)	(0)	2377	(12)	260
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	3154	2876	(4)	(0)	(102)	(16)	(0)	(0)	(0)	202	(0)	76
Morocco (ma)	7511	6760	(2)	(0)	(146)	(42)	(0)	(0)	(0)	644	(513)	107
Monaco (mc)	20094	17270	(12)	(0)	(564)	(104)	(0)	(2)	(0)	2713	(4409)	111
Moldova (md)	50189	25337	(36)	(0)	(290)	(273)	(0)	(4)	(0)	24574	(97)	278
Montenegro (me)	13876	8273	(172)	(0)	(46)	(72)	(0)	(0)	(0)	5415	(3)	188
Madagascar (mg)	3743	2412	(6)	(0)	(34)	(18)	(0)	(0)	(0)	1236	(0)	95
Marshall Islands (mh)	29	24	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	0
USA Military (mil)	104056	91185	(1147)	(2)	(832)	(622)	(0)	(2)	(16)	12445	(20229)	426
Macedonia (mk)	5850	5242	(0)	(0)	(14)	(24)	(0)	(0)	(0)	562	(1)	46
Mali (ml)	170	58	(38)	(0)	(97)	(4)	(0)	(0)	(0)	105	(0)	7

Myanmar (mm)	127	78	(1)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	47	(0)	2
Mongolia (mn)	1209	906	(13)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	302	(0)	1
Macau (mo)	183	168	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	15	(0)	0
Montserrat (ms)	1349	882	(5)	(0)	(14)	(6)	(0)	(0)	(0)	433	(0)	34
Malta (mt)	1235	1232	(0)	(0)	(614)	(8)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Mauritius (mu)	931	884	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	42	(0)	5
Maldives (mv)	282	264	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	1
Malawi (mw)	88	88	(0)	(0)	(14)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mexico (mx)	4667757	3520383	(682)	(4)	(47948)	(14383)	(6)	(94)	(91)	1135922	(1177798)	11452
Malaysia (my)	389775	334290	(416)	(0)	(6726)	(1046)	(0)	(6)	(5)	54222	(382999)	1263
Mozambique (mz)	1679	946	(1)	(0)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	696	(0)	37
Namibia (na)	1546	1180	(1)	(0)	(84)	(0)	(0)	(0)	(0)	317	(0)	49
New Caledonia (nc)	4534	3384	(6)	(0)	(220)	(16)	(0)	(0)	(0)	1123	(2)	27
Network (net)	249805596	181461025	(919962)	(10497)	(941277)	(1526801)	(638)	(1598)	(213011)	67751137	(15676291)	593434
Network (network)	405	260	(0)	(0)	(14)	(2)	(0)	(0)	(0)	145	(0)	0
Nigeria (ng)	20779	18922	(4)	(0)	(344)	(236)	(2)	(4)	(0)	1644	(59)	213
Nicaragua (ni)	11976	10212	(17)	(0)	(36)	(38)	(0)	(0)	(0)	1597	(59)	167
Netherlands (nl)	3144561	2582556	(1450)	(30)	(55562)	(73827)	(20)	(58)	(435)	554211	(4170126)	7794
Norway (no)	1708590	1500143	(541)	(1)	(77629)	(2520)	(0)	(24)	(88)	206883	(961369)	1564
Nepal (np)	13204	11732	(11)	(0)	(484)	(40)	(0)	(0)	(0)	1410	(2)	62
Niue (nu)	2291	406	(0)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	1883	(40)	2
New Zealand (nz)	398499	324159	(580)	(34)	(9424)	(2280)	(0)	(6)	(13)	71755	(145148)	2585
Oman (om)	12217	9826	(0)	(0)	(876)	(189)	(0)	(0)	(0)	2196	(8252)	195
online (online)	5	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	2
Organizations (org)	15147189	11615481	(2865)	(4)	(28271)	(5304624)	(16)	(32)	(2824)	3519485	(2535623)	12223
Panama (pa)	763	572	(0)	(0)	(12)	(2)	(0)	(0)	(0)	136	(0)	55
Peru (pe)	106357	96096	(58)	(0)	(3266)	(368)	(0)	(2)	(0)	9179	(48)	1082
French Polynesia (pf)	1047	768	(50)	(14)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	274	(0)	5
Papua New Guinea (pg)	161	154	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	5
Philippines (ph)	116616	91839	(130)	(0)	(1564)	(664)	(2)	(0)	(0)	23269	(49818)	1508
Pakistan (pk)	283128	242895	(110)	(0)	(27308)	(1436)	(2)	(14)	(14730)	38046	(409643)	2187
Poland (pl)	1798633	1391327	(1390)	(9)	(27309)	(7199)	(10)	(56)	(59)	398984	(1374257)	8322
St. Pierre and Miquelon (pm)	36	32	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	2
Puerto Rico (pr)	65	64	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
professional (pro)	2140	944	(7)	(0)	(16)	(18)	(2)	(0)	(0)	1155	(441)	41
Palestinian territories (ps)	4284	4102	(0)	(0)	(114)	(6)	(0)	(0)	(0)	172	(1)	10
Portugal (pt)	967218	774819	(144)	(0)	(15254)	(6988)	(2)	(18)	(203)	188431	(1068734)	3968
Palau (pw)	666	360	(28)	(0)	(2)	(72)	(0)	(0)	(0)	301	(0)	5
Paraguay (py)	9302	6696	(25)	(0)	(66)	(17)	(0)	(0)	(0)	2286	(152)	320
Qatar (qa)	58	56	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Reunion (re)	736	558	(2)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	174	(62)	4
Romania (ro)	186276	166098	(192)	(0)	(1350)	(1512)	(78)	(84)	(3)	18371	(3277)	1807
Republic of Serbia (rs)	68805	56295	(22)	(0)	(624)	(188)	(2)	(8)	(0)	11063	(648)	1447
Russian Federation (ru)	10444939	9308867	(1859)	(23)	(683231)	(53208)	(36)	(301324)	(206)	1089882	(325309)	46190
run (run)	252	226	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(2)	26	(21)	0
Rwanda (rw)	564	530	(4)	(0)	(28)	(2)	(0)	(0)	(0)	31	(0)	3
Saudi Arabia (sa)	13061	11668	(140)	(8)	(186)	(54)	(0)	(0)	(0)	1253	(37)	140
Solomon Islands (sb)	45	38	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Seychelles (sc)	429	372	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	21	(0)	36
Sudan (sd)	30	20	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	0
Sweden (se)	1646951	1362414	(833)	(0)	(81737)	(20458)	(6)	(114)	(6272)	281548	(4777082)	2989
Singapore (sg)	841177	565185	(1382)	(3)	(22050)	(10102)	(6)	(10)	(186)	274043	(600135)	1949
St. Helena (sh)	356	216	(11)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	140	(0)	0
Slovenia (si)	77742	70540	(13)	(0)	(434)	(126)	(0)	(2)	(1)	6526	(2822)	676
Slovakia (sk)	117653	92313	(51)	(0)	(3208)	(387)	(0)	(2)	(1)	22707	(64501)	2633
Sierra Leone (sl)	114	112	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
San Marino (sm)	113	108	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	1
Senegal (sn)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Suriname (sr)	37	34	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Sao Tome and Principe (st)	6378	3944	(546)	(0)	(40)	(26)	(2)	(0)	(7)	2177	(0)	257
USSR (su)	39733	33721	(27)	(0)	(76)	(304)	(0)	(0)	(0)	5667	(18085)	345
El Salvador (sv)	513	450	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	53
Sint Maarten (sx)	178	130	(1)	(0)	(0)	(10)	(0)	(0)	(0)	30	(0)	18
Syrian Arab Republic (sy)	32	32	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Turks and Caicos Islands (tc)	904	818	(2)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	84	(1)	2
telephone (tel)	16	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0
Togo (tg)	13	10	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Thailand (th)	566060	484033	(1832)	(9)	(20625)	(1585)	(6)	(24)	(7)	77941	(3052651)	4086
Tajikistan (tj)	924	184	(0)	(0)	(0)	(20)	(0)	(0)	(0)	740	(0)	0

Tokelau (tk)	519	384	(7)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	114	(0)	21
Timor-Leste (tl)	174	174	(0)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
tld (tld)	610	550	(0)	(0)	(16)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	50
Turkmenistan (tm)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tonga (to)	515	378	(21)	(0)	(0)	(30)	(0)	(0)	(2)	137	(0)	0
Turkey (tr)	583085	479974	(952)	(12)	(6910)	(2263)	(2)	(10)	(38)	99100	(44969)	4011
travel (travel)	3	2	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Trinidad and Tobago (tt)	1307	1166	(0)	(0)	(26)	(0)	(0)	(0)	(0)	109	(0)	32
Tuvalu (tv)	28778	18328	(1001)	(7)	(54)	(20)	(0)	(0)	(4)	9284	(6)	1166
Taiwan (tw)	4565072	4144176	(3479)	(0)	(79052)	(220678)	(2)	(76)	(197)	416122	(2084784)	4774
Tanzania (tz)	437	424	(0)	(0)	(14)	(0)	(0)	(2)	(0)	9	(0)	4
Ukrainian SSR (ua)	1752399	1113679	(2777)	(3)	(4436)	(3234)	(18)	(60)	(427)	630959	(236901)	7761
Uganda (ug)	7655	5362	(10)	(0)	(66)	(23)	(0)	(0)	(0)	2227	(1)	66
United Kingdom (uk)	5792157	4606337	(3543)	(36)	(114289)	(200673)	(40)	(142)	(47685)	1163922	(44384434)	21898
USA (us)	60694	53233	(20)	(0)	(1966)	(248)	(0)	(0)	(2)	5786	(1880)	1675
Uruguay (uy)	119917	92553	(9)	(0)	(1196)	(428)	(0)	(2)	(4)	24677	(121299)	2687
Uzbekistan (uz)	9102	7910	(6)	(0)	(72)	(20)	(0)	(0)	(0)	1181	(1)	11
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	59	24	(0)	(0)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	35	(0)	0
Venezuela (ve)	6824	5930	(10)	(0)	(108)	(8)	(0)	(0)	(0)	730	(0)	164
Virgin Islands (U.S.) (vi)	350	276	(3)	(0)	(0)	(8)	(2)	(2)	(0)	48	(1)	26
Viet Nam (vn)	25187976	16486542	(295934)	(14509)	(203479)	(30021)	(351)	(727)	(1526)	8684189	(3404243)	17245
Vanuatu (vu)	42	36	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	1
Samoa (ws)	1223	938	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	255	(252)	30
Yemen (ye)	4011	3452	(25)	(0)	(6)	(44)	(0)	(0)	(0)	502	(4)	57
Yugoslavia (yu)	34317	28470	(0)	(0)	(454)	(160)	(0)	(0)	(0)	5720	(321)	127
South Africa (za)	1501669	1437233	(101)	(0)	(798870)	(1502)	(2)	(6)	(29)	61474	(103210)	2962
Zambia (zm)	215	106	(24)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	87	(0)	22
Zimbabwe (zw)	5791	5452	(0)	(0)	(114)	(32)	(0)	(2)	(0)	256	(1)	83
Others or unknown	282477078	190054615	(2572966)	(9223)	(6077172)	(1000876)	(3436)	(8051)	(508110)	91760282	(164286514)	662181
合 計	1224543581	888557442	(23856282)	(189925)	(18462319)	(16261630)	(10023)	(328511)	(116306212)	332569261	(458574681)	3416878

表2 主な機関別のWWW利用件数(2016年度 上位50ドメイン)

ドメイン名	総件数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgenes)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
yahoo.net	215009478	155167551	(97526)	(250)	(409046)	(635)	(64)	(150)	(658)	59523908	(1678)	318019
msn.com	167299245	125312283	(6552418)	(1503)	(170186)	(187483)	(1026)	(2592)	(406)	41835793	(12472)	151169
googlebot.com	95333332	73689802	(1875610)	(430)	(1425740)	(2686)	(112)	(555)	(1835)	20893159	(8030)	750371
baidu.com	73555967	54632573	(2393136)	(4)	(166311)	(2016)	(136)	(554)	(910)	18834698	(3985)	88696
archive.org	14221240	10829506	(112)	(4)	(9460)	(5300670)	(10)	(18)	(2)	3383882	(77)	7852
exabot.com	13010056	12815275	(43)	(2)	(481272)	(92)	(10)	(8)	(106)	194539	(74)	242
rev.ponaytelecom.eu	11829262	10810592	(41642)	(30)	(8026)	(3307)	(24)	(88)	(66)	1000705	(2602)	17965
amazonaws.com	9226264	7640985	(251231)	(122)	(18719)	(872352)	(150)	(430)	(15966)	1564417	(19297050)	20862
yandex.com	8474230	7230480	(74421)	(316)	(21835)	(1360)	(152)	(330)	(431)	1065659	(7396)	178091
genome.ad.jp	7050639	6317414	(3956)	(389)	(431244)	(1332235)	(13)	(190)	(1916)	671515	(72340)	61710
ocn.ne.jp	6324320	2029053	(1249244)	(50971)	(45880)	(4909)	(6)	(68)	(115)	4290734	(284040)	4533
132.com.vn	5696207	744	(629)	(0)	(634)	(72)	(4)	(10)	(0)	5695436	(27146)	27
kclab.jgn2plus.jp	5604433	3893332	(5574)	(0)	(4384)	(0)	(0)	(2)	(0)	1710980	(0)	121
com.cn	5056914	2970976	(7231)	(0)	(19965)	(3139)	(230)	(386)	(5)	2085045	(157122)	893
comcast.net	5039991	4467459	(2193)	(18)	(64220)	(1302833)	(14)	(100)	(15187)	557218	(2178480)	15314
spmode.ne.jp	4741842	1068624	(877962)	(5578)	(3778)	(432)	(0)	(12)	(4)	3672543	(91)	675
0.vpsville.ru	4462232	4443862	(424)	(0)	(648675)	(47082)	(0)	(301250)	(4)	17851	(0)	519
au-net.ne.jp	4368678	1345061	(742756)	(3719)	(36899)	(1479)	(6)	(18)	(38)	3018950	(153052)	4667
webmeup.com	4335207	3060963	(24016)	(37)	(6802)	(178478)	(26)	(24)	(0)	1273031	(505)	1213
google.com	3732885	2980220	(105866)	(605)	(37997)	(7533)	(12)	(1064)	(217)	673163	(6320)	79502
p.mail.ru	3559683	3474211	(189)	(18)	(750)	(175)	(18)	(8)	(60)	56423	(187)	29049
gdbnet.ad.jp	3441127	3364258	(38574)	(0)	(3762)	(1506)	(752)	(1504)	(26)	75353	(0)	1516
hgc.jp	2936627	160408	(8041)	(200)	(11778)	(696)	(0)	(0)	(16)	2775723	(10839)	496
clients.your-server.de	2723425	1931604	(24102)	(56)	(35367)	(21455)	(74)	(134)	(116)	684995	(52821)	106826
bbtec.net	2602059	918789	(495983)	(8198)	(51530)	(1421)	(6)	(24)	(6)	1680128	(282689)	3142
blackboard.com	2289905	1553244	(39)	(0)	(210)	(13)	(0)	(1114)	(3115)	736204	(0)	457
haichar.univ-lyon1.fr	2274386	1544184	(6)	(0)	(6)	(39)	(0)	(0)	(2)	730202	(4581)	0
sbcglobal.net	2268677	2106912	(1484)	(10)	(26269)	(10332)	(14)	(60)	(337)	155220	(229152)	6545
ntu.edu.tw	2261732	2213982	(35)	(0)	(5488)	(2975)	(0)	(4)	(25)	46748	(907648)	1002
17.com.vn	2228588	2228124	(754)	(0)	(466)	(1144)	(0)	(0)	(0)	443	(325)	21
jhmi.edu	2114841	2098196	(20)	(0)	(4148)	(2014360)	(0)	(0)	(6)	16424	(137313)	221
panda-world.ne.jp	2081980	579003	(390438)	(4237)	(2502)	(250)	(0)	(2)	(2)	1502354	(73132)	623
cox.net	2049622	1472234	(443)	(4)	(24039)	(2909)	(54)	(78)	(50)	573626	(1668691)	3762
hinet.net	2023042	1214078	(14151)	(19)	(18447)	(28015)	(10)	(78)	(42)	804106	(689303)	4858
163data.com.cn	1963337	1004512	(14314)	(0)	(47175)	(7962)	(168)	(264)	(23)	956570	(1161465)	2255
sogou.com	1863816	1813693	(251)	(0)	(6661)	(1062)	(12)	(40)	(147)	38774	(71)	11349
rr.com	1819935	1567175	(2068)	(22)	(33545)	(6896)	(18)	(54)	(93)	242575	(334168)	10185
dion.ne.jp	1688006	674497	(257343)	(5391)	(22805)	(1008)	(4)	(28)	(130)	1008214	(4462)	5295
uq.edu.au	1653410	1557239	(14)	(0)	(36810)	(43569)	(0)	(2)	(2451)	95523	(10193313)	648
kyoto-u.ac.jp	1631707	1255686	(32059)	(246)	(437882)	(2138)	(4)	(498)	(16)	363949	(938270)	12072
prod-infinity.com.mx	1575318	1252875	(287)	(0)	(14408)	(5049)	(4)	(44)	(20)	317311	(45023)	5132
nig.ac.jp	1557464	1538520	(43)	(2)	(9288)	(30398)	(0)	(0)	(25598)	15310	(3078453)	3634
pbil-deb.univ-lyon1.fr	1522279	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1522271	(0)	0
tmc.edu	1501978	1449893	(12)	(0)	(4033)	(1343)	(0)	(4)	(88)	51728	(1593741)	357
ahrefs.com	1474551	1325147	(4131)	(4)	(172)	(21)	(0)	(0)	(2)	148462	(53)	942
plala.or.jp	1435220	511715	(238056)	(4011)	(15173)	(801)	(2)	(10)	(19)	922376	(4244)	1129
eonet.ne.jp	1357865	631866	(184128)	(3756)	(71008)	(798)	(8)	(24)	(6)	725296	(29294)	703
hostpro.com.ua	1327010	784188	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	542808	(0)	14
biologie.uni-frankfurt.de	1316952	1313396	(32)	(0)	(1228)	(3624)	(2)	(6)	(0)	3530	(4342)	26
47.com.vn	1281301	1279788	(4216)	(434)	(624)	(808)	(0)	(0)	(0)	1490	(63)	23

表3 国別のWWWアクセスノード数 (2016年度)

国名 (ドメイン名)	ノード数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgens)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	26	25	(0)	(0)	(4)	(3)	(0)	(0)	(0)	13	(3)	1
Andorra (ad)	55	50	(0)	(0)	(3)	(2)	(0)	(0)	(0)	10	(2)	4
United Arab Emirates (ae)	1304	1123	(26)	(0)	(39)	(16)	(0)	(0)	(1)	319	(9)	100
aerospace (aero)	17	11	(7)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	0
Afghanistan (af)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Antigua and Barbuda (ag)	37	33	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	4
Albania (al)	324	270	(42)	(0)	(22)	(33)	(1)	(5)	(0)	129	(4)	18
Armenia (am)	590	503	(2)	(0)	(18)	(10)	(0)	(0)	(2)	148	(7)	28
Netherlands Antilles (an)	10	9	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Angola (ao)	119	101	(2)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	37	(1)	19
Argentina (ar)	9970	8618	(47)	(0)	(708)	(550)	(3)	(2)	(6)	2719	(128)	585
American Samoa (as)	24	17	(5)	(0)	(0)	(5)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	0
Asia (asia)	21	14	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(1)	8	(0)	0
Austria (at)	11841	10270	(99)	(0)	(1086)	(710)	(0)	(9)	(33)	3408	(501)	260
Australia (au)	32275	28867	(938)	(4)	(2952)	(1696)	(4)	(11)	(64)	8747	(1361)	909
Aruba (aw)	83	69	(1)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	22	(1)	6
Aland (ax)	5	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Azerbaijan (az)	116	98	(1)	(0)	(3)	(4)	(0)	(0)	(0)	32	(0)	8
Bosnia Hercegovina (ba)	562	514	(1)	(0)	(40)	(2)	(0)	(0)	(0)	132	(3)	71
Bangladesh (bd)	687	588	(3)	(0)	(95)	(28)	(0)	(1)	(0)	161	(0)	27
Belgium (be)	14860	13408	(150)	(1)	(1088)	(740)	(1)	(10)	(22)	3763	(474)	558
Burkina Faso (bf)	4	4	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
Bulgaria (bg)	2222	1995	(18)	(0)	(63)	(58)	(3)	(3)	(1)	414	(23)	88
Bahrain (bh)	128	112	(1)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	30	(0)	10
bitnet (bitnet)	5	5	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Business (biz)	969	793	(47)	(0)	(63)	(115)	(5)	(5)	(0)	386	(7)	52
Benin (bj)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bermuda (bm)	21	17	(0)	(0)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	2
Brunei Darussalam (bn)	304	253	(10)	(0)	(4)	(4)	(0)	(0)	(0)	78	(1)	31
Bolivia (bo)	535	433	(15)	(0)	(7)	(13)	(0)	(0)	(0)	120	(2)	38
Brazil (br)	51994	44543	(407)	(1)	(3631)	(2752)	(16)	(56)	(93)	14770	(1476)	4081
Bahamas (bs)	22	20	(2)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	1
Bhutan (bt)	90	79	(9)	(0)	(45)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	4
Botswana (bw)	108	99	(2)	(0)	(4)	(1)	(0)	(0)	(0)	31	(1)	10
Belarus (by)	1515	1294	(10)	(0)	(36)	(34)	(3)	(5)	(20)	347	(7)	36
Belize (bz)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Canada (ca)	40014	36811	(747)	(2)	(4528)	(1785)	(4)	(40)	(78)	11261	(1288)	1224
Catalan (cat)	182	156	(5)	(0)	(14)	(18)	(0)	(1)	(1)	68	(2)	8
Cocos Islands (cc)	200	143	(46)	(0)	(38)	(17)	(0)	(1)	(1)	121	(7)	7
Congo (cd)	5	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Switzerland (ch)	18479	16261	(326)	(5)	(1572)	(1067)	(8)	(10)	(88)	5468	(1030)	445
Cote D'ivoire (ci)	307	267	(2)	(0)	(11)	(2)	(0)	(0)	(0)	85	(2)	46
Cook Islands (ck)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Chile (cl)	5049	4547	(22)	(0)	(575)	(301)	(0)	(7)	(11)	1313	(109)	217
club (club)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Cameroon (cm)	197	176	(1)	(0)	(10)	(1)	(0)	(0)	(0)	42	(1)	11
China (cn)	77990	55066	(7213)	(0)	(6012)	(3189)	(215)	(269)	(39)	39236	(1804)	1478
Colombia (co)	10998	10020	(54)	(0)	(1071)	(555)	(0)	(4)	(11)	2241	(223)	403
Commercial (com)	299689	228665	(27395)	(944)	(20374)	(9162)	(692)	(1513)	(1634)	114271	(9616)	20953
cooperative (coop)	18	13	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(1)	0
Costa Rica (cr)	391	350	(2)	(0)	(46)	(25)	(0)	(0)	(0)	95	(4)	19
Cuba (cu)	135	128	(0)	(0)	(17)	(19)	(0)	(0)	(0)	26	(7)	15
Cape Verde (cv)	26	20	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	4
Curacao (cw)	70	61	(1)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	12
Christmas Island (cx)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Cyprus (cy)	438	394	(0)	(0)	(8)	(19)	(0)	(0)	(0)	83	(7)	23
Czechoslovakia (cz)	10308	9321	(212)	(2)	(1007)	(519)	(10)	(27)	(44)	2880	(338)	954
Germany (de)	94518	80792	(1507)	(30)	(8954)	(5874)	(41)	(110)	(264)	29888	(3787)	2351
Denmark (dk)	6858	6228	(50)	(0)	(627)	(522)	(0)	(13)	(21)	2004	(389)	236
Dominica (dm)	5	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1

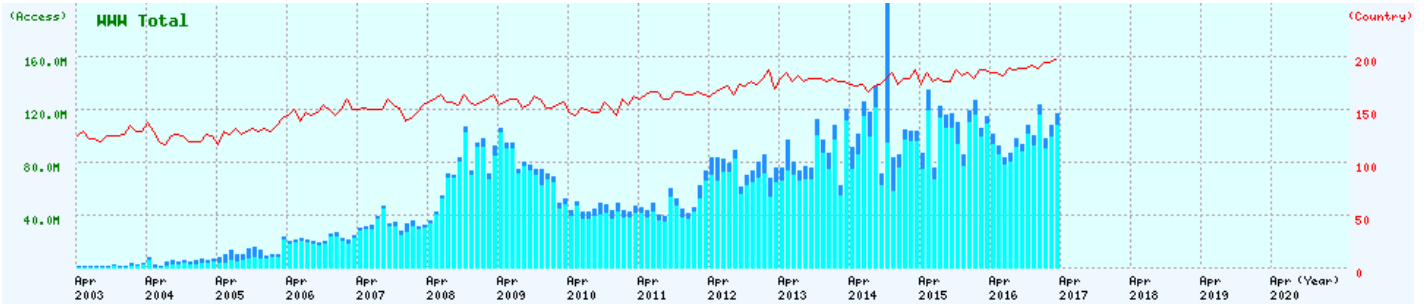
Dominican Republic (do)	836	711	(9)	(0)	(5)	(13)	(0)	(0)	(0)	166	(1)	48
Algeria (dz)	32	30	(0)	(0)	(3)	(2)	(0)	(1)	(0)	8	(1)	1
Ecuador (ec)	629	569	(4)	(0)	(37)	(14)	(0)	(0)	(0)	99	(0)	42
USA Educational (edu)	176266	163626	(591)	(10)	(23746)	(11703)	(11)	(142)	(573)	45049	(7933)	3387
Estonia (ee)	1871	1668	(12)	(0)	(97)	(62)	(0)	(1)	(1)	434	(30)	101
Egypt (eg)	928	855	(3)	(0)	(56)	(17)	(0)	(0)	(0)	149	(8)	16
Spain (es)	17733	16234	(86)	(1)	(2596)	(1515)	(2)	(22)	(46)	5182	(1208)	546
Ethiopia (et)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
European Union (eu)	10340	9173	(5111)	(66)	(2633)	(500)	(40)	(66)	(110)	7320	(802)	4981
Finland (fi)	11675	10816	(45)	(1)	(600)	(533)	(1)	(6)	(18)	2131	(293)	210
Fiji (fj)	48	41	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	11	(0)	6
Falkland Islands (fk)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
Micronesia (fm)	18	11	(3)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	3
Faroe Islands (fo)	24	22	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	0
France (fr)	30926	28166	(298)	(1)	(3900)	(2350)	(10)	(46)	(57)	8652	(1341)	1173
gbl (gbl)	82	80	(30)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	54	(2)	23
Georgia (ge)	634	537	(1)	(0)	(8)	(13)	(0)	(0)	(0)	150	(1)	38
Guernsey (gg)	10	10	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(2)	0
Ghana (gh)	278	244	(6)	(0)	(22)	(6)	(0)	(1)	(0)	61	(5)	22
Greenland (gl)	16	12	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	2
Gambia (gm)	7	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
USA Government (gov)	6473	5941	(27)	(0)	(905)	(567)	(3)	(18)	(40)	1861	(573)	158
Equatorial Guinea (gq)	4	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Greece (gr)	10160	8870	(46)	(1)	(576)	(358)	(0)	(1)	(10)	2727	(255)	527
South Georgia (gs)	8	3	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	0
Guatemala (gt)	760	666	(10)	(0)	(15)	(25)	(0)	(1)	(0)	136	(5)	31
Guyana (gy)	104	96	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	20	(0)	5
Hong Kong (hk)	6169	5438	(182)	(0)	(646)	(333)	(1)	(17)	(14)	2054	(256)	81
Honduras (hn)	111	101	(2)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	23	(0)	5
Croatia (hr)	3908	3073	(12)	(0)	(64)	(58)	(0)	(1)	(2)	1340	(36)	341
Haiti (ht)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Hungary (hu)	8923	7930	(175)	(0)	(494)	(333)	(1)	(50)	(41)	2210	(206)	675
Indonesia (id)	5895	5126	(224)	(0)	(212)	(167)	(2)	(3)	(3)	1444	(46)	371
Ireland (ie)	4181	3775	(15)	(0)	(368)	(358)	(1)	(2)	(12)	1145	(146)	91
Israel (il)	6791	6139	(27)	(0)	(656)	(383)	(0)	(6)	(8)	1658	(157)	359
Isle of Man (im)	6	3	(0)	(0)	(1)	(2)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
India (in)	29377	26001	(468)	(6)	(4528)	(1432)	(1)	(22)	(73)	7896	(622)	1556
Information domains (info)	1003	743	(143)	(0)	(60)	(47)	(3)	(3)	(0)	356	(11)	44
International (int)	19	16	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	3
British Indian Ocean Territory (io)	1639	1304	(163)	(3)	(182)	(179)	(33)	(50)	(15)	941	(100)	537
Iran (ir)	4420	3805	(17)	(1)	(389)	(276)	(0)	(1)	(4)	1277	(149)	83
Iceland (is)	1076	982	(12)	(0)	(62)	(71)	(0)	(0)	(12)	314	(19)	32
Italy (it)	39292	35323	(370)	(3)	(3663)	(1934)	(18)	(36)	(76)	9853	(1443)	1470
Bailiwick of Jersey (je)	19	12	(0)	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	1
Jamaica (jm)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Jordan (jo)	1367	1238	(16)	(0)	(111)	(19)	(1)	(1)	(0)	220	(10)	44
Japan (jp)	2872630	372830	(2568717)	(4764)	(37661)	(8992)	(78)	(455)	(306)	2643937	(2892)	5445
Kenya (ke)	316	296	(2)	(0)	(30)	(11)	(0)	(0)	(0)	78	(5)	36
Kyrgyzstan (kg)	236	204	(6)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(1)	44	(0)	11
Cambodia (kh)	379	262	(101)	(0)	(17)	(3)	(0)	(0)	(0)	146	(0)	11
Korea (kr)	18480	17045	(73)	(1)	(3994)	(1203)	(0)	(12)	(49)	5378	(640)	265
Kuwait (kw)	71	67	(0)	(0)	(17)	(4)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	5
Cayman Islands (ky)	30	23	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	3
Kazakhstan (kz)	1111	942	(20)	(0)	(32)	(15)	(1)	(0)	(0)	249	(12)	36
Lao People's Democratic Republic (la)	18	18	(3)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	0
Lebanon (lb)	274	245	(0)	(0)	(23)	(3)	(0)	(0)	(0)	60	(4)	7
Saint Lucia (lc)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Liechtenstein (li)	40	36	(0)	(0)	(1)	(3)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	2
limited (limited)	1	1	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Sri Lanka (lk)	109	102	(3)	(0)	(29)	(7)	(0)	(0)	(1)	31	(2)	13

Lesotho (ls)	23	17	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Lithuania (lt)	3052	2704	(9)	(0)	(99)	(108)	(0)	(0)	(0)	832	(28)	218
Luxembourg (lu)	859	745	(23)	(1)	(52)	(105)	(0)	(0)	(5)	328	(51)	24
Latvia (lv)	626	563	(5)	(0)	(8)	(11)	(0)	(0)	(0)	128	(4)	38
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	239	215	(2)	(0)	(11)	(4)	(0)	(0)	(0)	30	(0)	8
Morocco (ma)	431	376	(2)	(0)	(24)	(8)	(0)	(0)	(0)	114	(5)	34
Monaco (mc)	390	261	(9)	(0)	(19)	(19)	(0)	(1)	(0)	181	(3)	7
Moldova (md)	1209	1018	(15)	(0)	(39)	(38)	(0)	(1)	(0)	334	(16)	48
Montenegro (me)	210	169	(28)	(0)	(4)	(9)	(0)	(0)	(0)	64	(2)	9
Madagascar (mg)	169	150	(5)	(0)	(5)	(2)	(0)	(0)	(0)	40	(0)	18
Marshall Islands (mh)	3	2	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
USA Military (mil)	877	726	(94)	(1)	(39)	(52)	(0)	(1)	(6)	280	(17)	29
Macedonia (mk)	399	352	(0)	(0)	(4)	(8)	(0)	(0)	(0)	109	(1)	45
Mali (ml)	8	6	(3)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	1
Myanmar (mm)	16	12	(1)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	1
Mongolia (mn)	47	41	(6)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	1
Macau (mo)	8	4	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Montserrat (ms)	26	23	(2)	(0)	(2)	(3)	(0)	(0)	(0)	14	(0)	5
Malta (mt)	27	26	(0)	(0)	(11)	(1)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Mauritius (mu)	58	54	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	5
Maldives (mv)	23	20	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	1
Malawi (mw)	7	7	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mexico (mx)	41145	36580	(249)	(1)	(2734)	(2312)	(2)	(43)	(34)	10002	(541)	1207
Malaysia (my)	3534	3170	(93)	(0)	(382)	(168)	(0)	(3)	(3)	987	(111)	271
Mozambique (mz)	85	73	(1)	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	10
Namibia (na)	109	96	(1)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	32	(0)	17
New Caledonia (nc)	87	74	(4)	(0)	(7)	(2)	(0)	(0)	(0)	20	(1)	4
Network (net)	726006	411288	(261736)	(395)	(26096)	(14377)	(208)	(448)	(556)	372112	(7288)	18054
Network (network)	19	17	(0)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Nigeria (ng)	433	410	(3)	(0)	(23)	(37)	(1)	(1)	(0)	77	(2)	17
Nicaragua (ni)	369	321	(11)	(0)	(4)	(10)	(0)	(0)	(0)	77	(4)	21
Netherlands (nl)	26396	23904	(222)	(1)	(1978)	(1981)	(9)	(24)	(107)	7232	(899)	925
Norway (no)	7041	6196	(57)	(1)	(510)	(392)	(0)	(9)	(26)	2025	(333)	160
Nepal (np)	533	477	(9)	(0)	(36)	(8)	(0)	(0)	(0)	114	(2)	34
Niue (nu)	36	30	(0)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	8	(2)	2
New Zealand (nz)	4710	4069	(263)	(3)	(351)	(259)	(0)	(3)	(4)	1273	(97)	196
Oman (om)	374	323	(0)	(0)	(20)	(10)	(0)	(0)	(0)	116	(4)	41
online (online)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Organizations (org)	7345	6688	(232)	(2)	(899)	(542)	(8)	(12)	(107)	2299	(559)	373
Panama (pa)	25	24	(0)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	4
Peru (pe)	1126	984	(15)	(0)	(38)	(50)	(0)	(1)	(0)	242	(6)	51
French Polynesia (pf)	49	41	(5)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	20	(0)	6
Papua New Guinea (pg)	17	16	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	2
Philippines (ph)	1032	933	(62)	(0)	(134)	(53)	(1)	(0)	(0)	370	(39)	124
Pakistan (pk)	2943	2666	(26)	(0)	(617)	(196)	(1)	(5)	(12)	823	(60)	205
Poland (pl)	26588	23588	(204)	(4)	(1426)	(1102)	(5)	(18)	(17)	6652	(462)	1378
St. Pierre and Miquelon (pm)	4	3	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Puerto Rico (pr)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
professional (pro)	42	28	(5)	(0)	(2)	(1)	(1)	(0)	(0)	20	(1)	5
Palestinian territories (ps)	213	200	(0)	(0)	(13)	(2)	(0)	(0)	(0)	26	(1)	9
Portugal (pt)	10034	8993	(47)	(0)	(617)	(558)	(1)	(5)	(22)	2665	(358)	584
Palau (pw)	54	44	(5)	(0)	(1)	(10)	(0)	(0)	(0)	24	(0)	3
Paraguay (py)	419	347	(22)	(0)	(7)	(7)	(0)	(0)	(0)	102	(8)	33
Qatar (qa)	4	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Reunion (re)	47	41	(1)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	16	(2)	4
Romania (ro)	7664	6823	(90)	(0)	(142)	(194)	(26)	(29)	(2)	2041	(37)	860
Republic of Serbia (rs)	4621	4084	(15)	(0)	(91)	(46)	(1)	(3)	(0)	1393	(25)	673
Russian Federation (ru)	29532	23632	(759)	(16)	(1283)	(891)	(16)	(46)	(81)	8431	(878)	1865
run (run)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(1)	1	(2)	0
Rwanda (rw)	36	32	(3)	(0)	(4)	(1)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	3
Saudi Arabia (sa)	602	536	(7)	(1)	(23)	(15)	(0)	(0)	(0)	142	(1)	28
Solomon Islands (sb)	6	5	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0

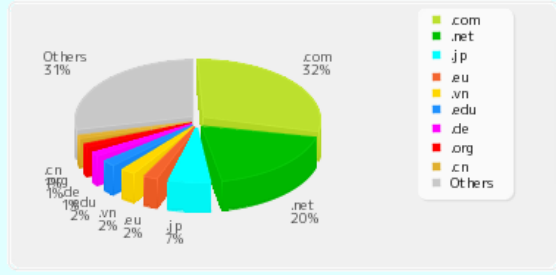
Seychelles (sc)	101	82	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	18
Sudan (sd)	4	2	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Sweden (se)	17327	15462	(165)	(0)	(1659)	(1090)	(3)	(31)	(70)	5073	(729)	292
Singapore (sg)	6953	6021	(469)	(1)	(795)	(285)	(3)	(4)	(19)	1942	(180)	289
St. Helena (sh)	27	15	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	0
Slovenia (si)	733	674	(7)	(0)	(41)	(27)	(0)	(1)	(1)	167	(23)	32
Slovakia (sk)	4274	3896	(28)	(0)	(200)	(83)	(0)	(1)	(1)	851	(46)	311
Sierra Leone (sl)	7	7	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
San Marino (sm)	15	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Suriname (sr)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Sao Tome and Principe (st)	31	25	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	6
USSR (su)	293	254	(6)	(0)	(21)	(34)	(0)	(0)	(0)	92	(12)	13
El Salvador (sv)	29	25	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	3
Sint Maarten (sx)	17	13	(1)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	2
Syrian Arab Republic (sy)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Turks and Caicos Islands (tc)	44	33	(1)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	14	(1)	2
telephone (tel)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Togo (tg)	8	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Thailand (th)	19441	16878	(1261)	(1)	(1556)	(323)	(3)	(8)	(4)	3916	(148)	536
Tajikistan (tj)	33	31	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Tokelau (tk)	15	15	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	7
Timor-Leste (tl)	8	8	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
tld (tld)	43	42	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	2
Turkmenistan (tm)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tonga (to)	37	29	(7)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(1)	17	(0)	0
Turkey (tr)	15372	13870	(147)	(2)	(685)	(485)	(1)	(5)	(8)	3098	(214)	607
Trinidad and Tobago (tt)	177	155	(0)	(0)	(7)	(0)	(0)	(0)	(0)	34	(0)	9
Tuvalu (tv)	423	236	(179)	(2)	(12)	(6)	(0)	(0)	(1)	224	(3)	16
Taiwan (tw)	20762	18360	(793)	(0)	(2150)	(1092)	(1)	(20)	(43)	6376	(1109)	470
Tanzania (tz)	34	30	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(1)	(0)	9	(0)	4
Ukrainian SSR (ua)	5306	4579	(114)	(1)	(230)	(204)	(4)	(6)	(10)	1482	(52)	403
Uganda (ug)	197	151	(8)	(0)	(15)	(6)	(0)	(0)	(0)	80	(1)	3
United Kingdom (uk)	52314	44885	(323)	(5)	(5249)	(3333)	(17)	(50)	(180)	16768	(2679)	1161
USA (us)	2707	2434	(14)	(0)	(104)	(41)	(0)	(0)	(1)	420	(12)	131
Uruguay (uy)	1416	1220	(8)	(0)	(82)	(77)	(0)	(1)	(2)	371	(47)	76
Uzbekistan (uz)	215	186	(5)	(0)	(10)	(7)	(0)	(0)	(0)	57	(1)	9
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	3	2	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Venezuela (ve)	333	256	(2)	(0)	(9)	(4)	(0)	(0)	(0)	91	(0)	12
Virgin Islands (U.S.) (vi)	13	11	(1)	(0)	(0)	(1)	(1)	(1)	(0)	3	(1)	2
Viet Nam (vn)	188884	95444	(90307)	(184)	(9824)	(3600)	(131)	(212)	(55)	113377	(1103)	2622
Vanuatu (vu)	10	9	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Samoa (ws)	43	32	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(1)	6
Yemen (ye)	247	206	(5)	(0)	(3)	(7)	(0)	(0)	(0)	50	(3)	6
Yugoslavia (yu)	136	129	(0)	(0)	(37)	(32)	(0)	(0)	(0)	52	(9)	8
South Africa (za)	5332	4823	(37)	(0)	(643)	(191)	(1)	(3)	(12)	1301	(104)	302
Zambia (zm)	36	25	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	14	(0)	4
Zimbabwe (zw)	207	185	(0)	(0)	(13)	(6)	(0)	(1)	(0)	48	(1)	21
Others or unknown	1119119	884670	(82459)	(458)	(93905)	(44749)	(1150)	(1993)	(1332)	422632	(24925)	35975
合 計	6349220	2994823	(3057183)	(6928)	(298276)	(142668)	(2808)	(6057)	(6630)	4000509	(85096)	129237

月別の利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

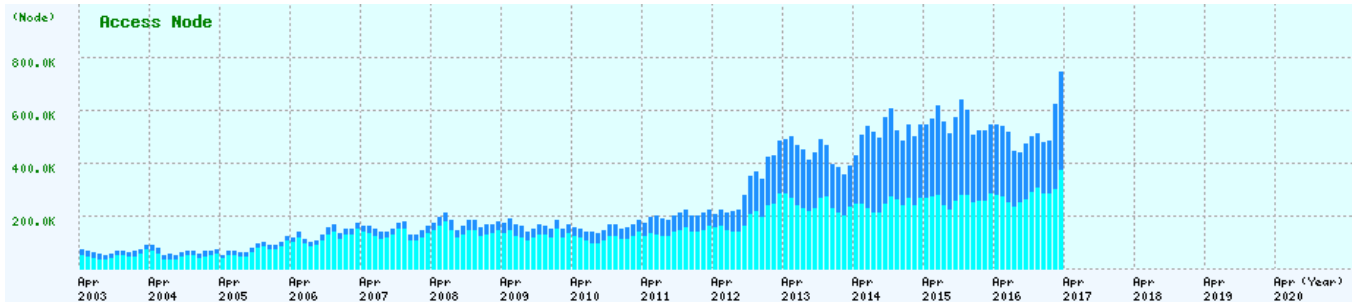


国別のWWW利用件数(2016年度)

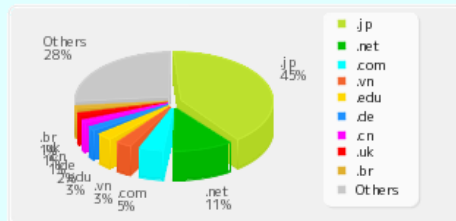


アクセスノード数の推移

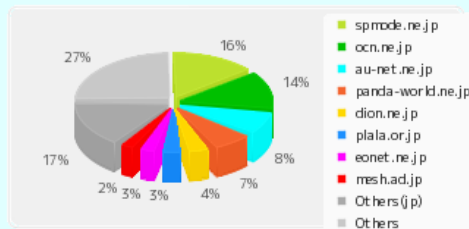
日本以外からのノード数 日本からのノード数



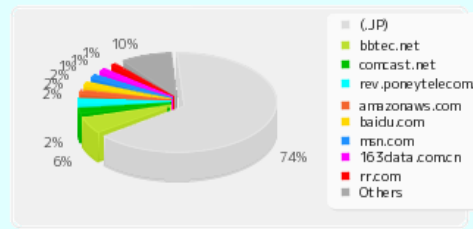
国別のアクセスノード数(2016年度)



上位50機関のアクセスノード数(2016年度)



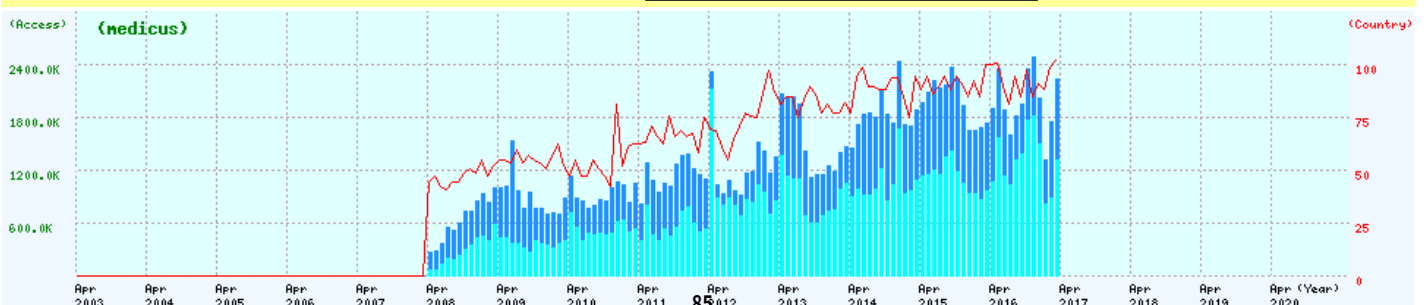
上位50機関のアクセスノード数(2016年度)



注)・上位50機関のアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

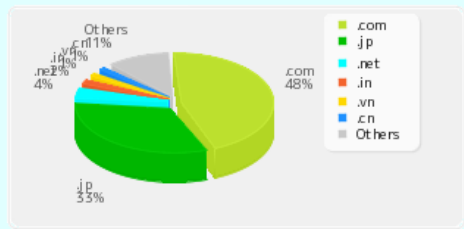
月別のMEDICUS利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

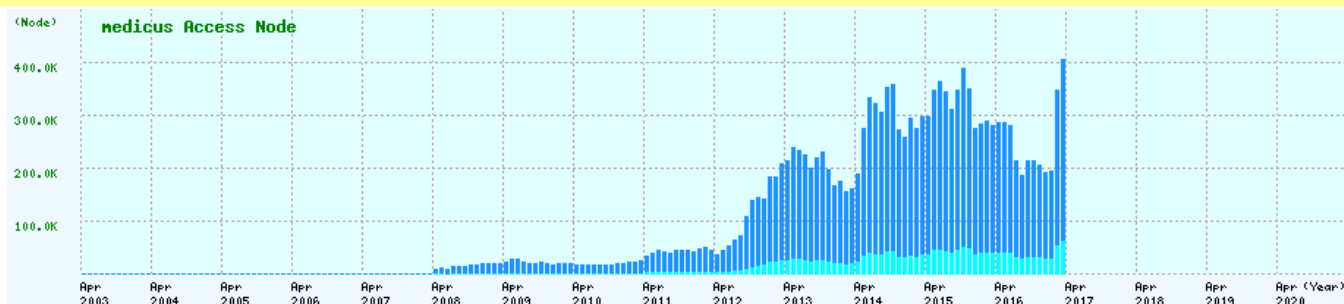


A pie chart illustrating the distribution of top-level domains (TLDs) among the top 1000 websites. The chart is divided into seven segments, each representing a different TLD and its corresponding percentage of the total. The segments are: .com (48%), .jp (35%), .net (4%), .vn (2%), .cn (2%), .in (1%), and Others (11%). The segments are color-coded: .com is light green, .jp is dark green, .net is cyan, .vn is orange, .cn is blue, .in is red, and Others is grey.

TLD	Percentage
.com	48%
.jp	35%
.net	4%
.vn	2%
.cn	2%
.in	1%
Others	11%

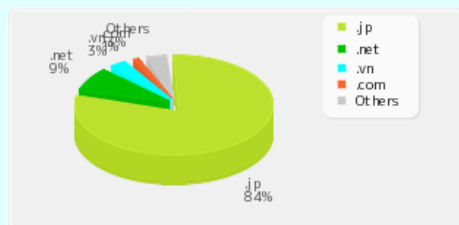


日本以外からのノード数 日本からのノード数

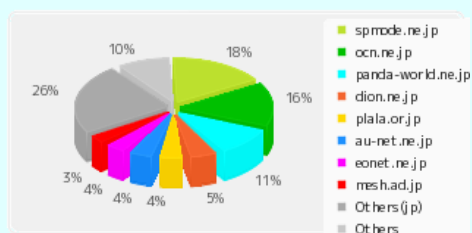


A 3D pie chart illustrating the distribution of domain types. The largest segment is 'jp' at 84%, followed by '.com' at 14%, '.net' at 9%, '.vn' at 3%, and 'Others' at 3%. A legend on the right side of the chart identifies the colors for each category: green for 'jp', dark green for '.net', cyan for '.vn', orange for '.com', and grey for 'Others'.

Domain Type	Percentage
jp	84%
.com	14%
.net	9%
.vn	3%
Others	3%

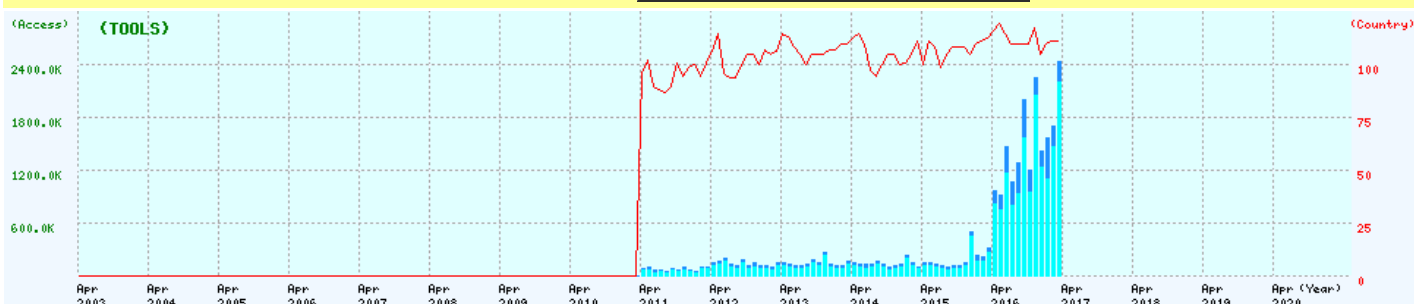


上位50機関のMEDICUSアクセスノード数(2016年度)



注)・上位50機関のMEDICUSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

日本以外からの件数	日本からの件数	国数
-----------	---------	----



Others 45%

jp 17%

com 14%

ca 6%

net 5%

za 4%

ru 4%

edu 3%

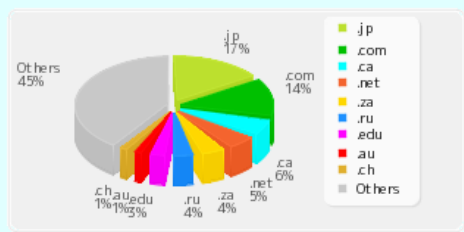
au 2%

ch 1%

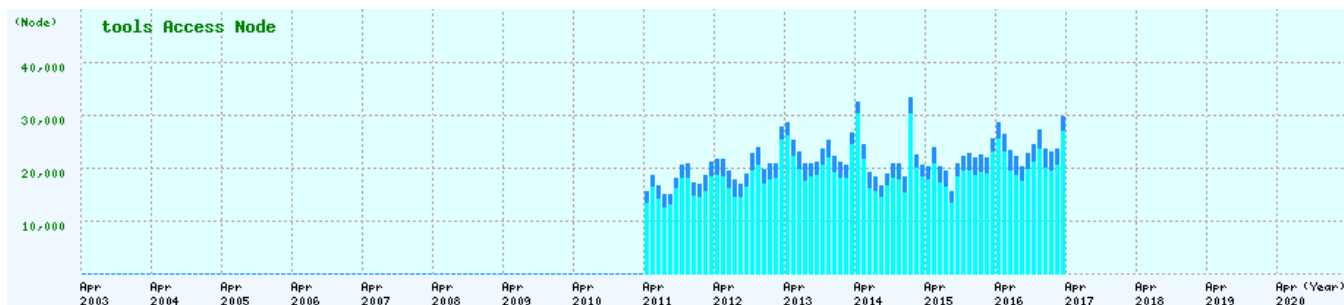
Others 45%

Legend:

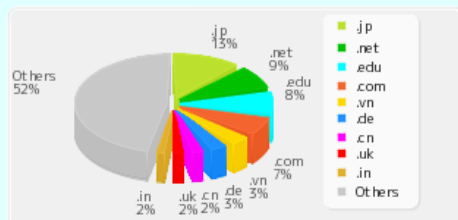
- jp
- com
- ca
- net
- za
- ru
- edu
- au
- ch
- Others



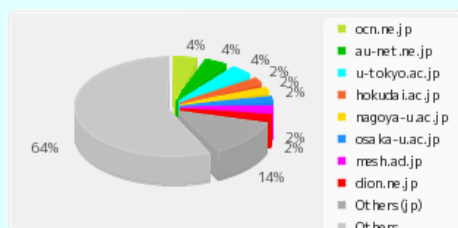
日本以外からのノード数	日本からのノード数
1000	1000
2000	2000
3000	3000
4000	4000
5000	5000
6000	6000
7000	7000
8000	8000
9000	9000
10000	10000



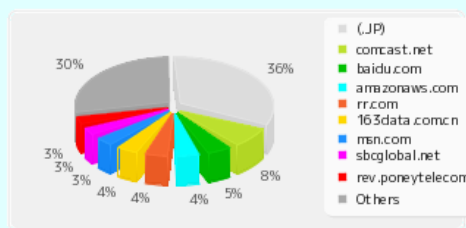
国別のTOOLSアクセスノード数(2016年度)



上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2016年度)

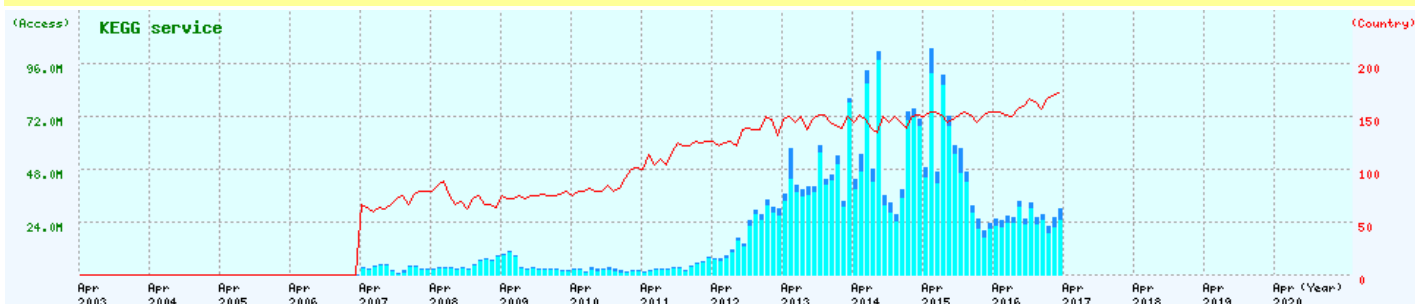


上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2016年度)

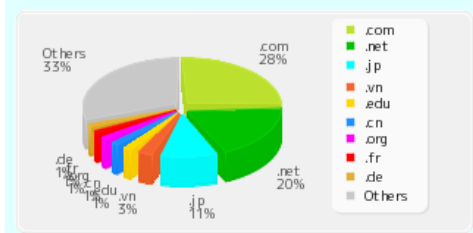


注)・上位50機関のTOOLSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

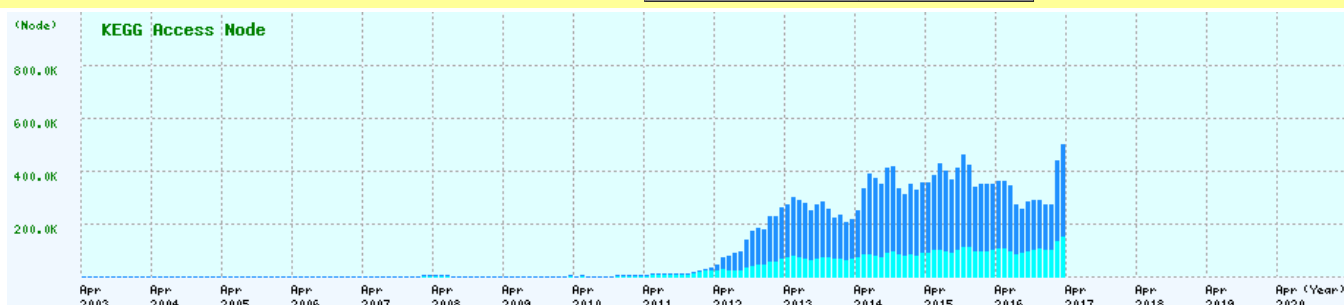
月別の KEGG利用件数 日本以外からの件数 日本からの件数 国数



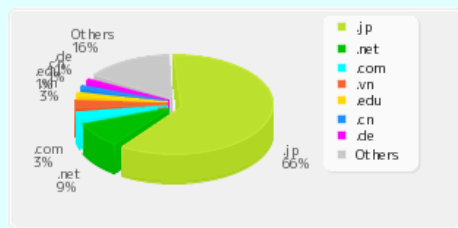
国別の KEGG利用件数(2016年度)



KEGGアクセスノード数の推移 日本以外からのノード数 日本からのノード数

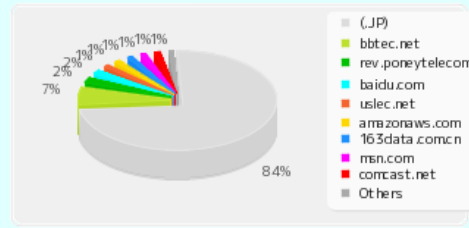
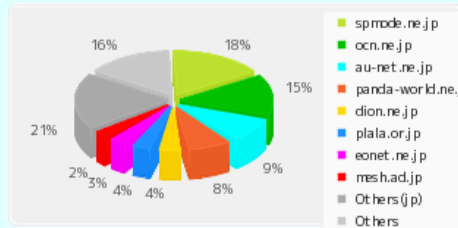


国別の KEGGアクセスノード数(2016年度)



上位50機関の KEGGアクセスノード数(2016年度)

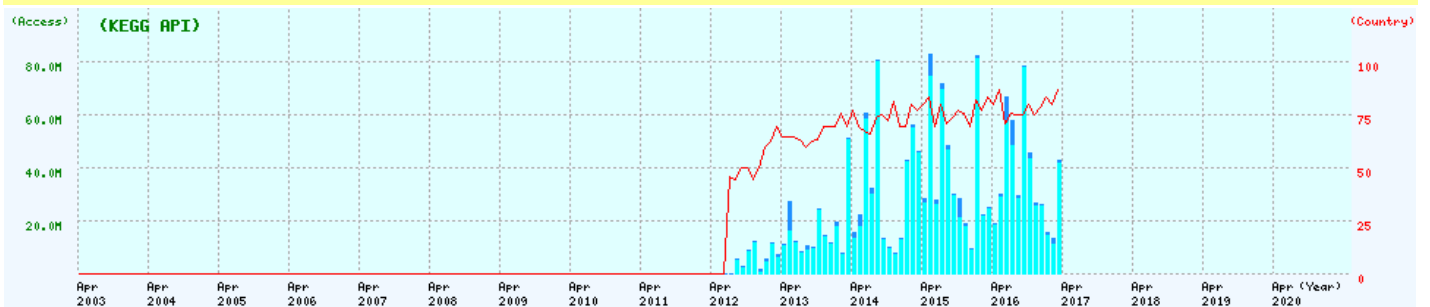
上位50機関の KEGGアクセスノード数(2016年度)



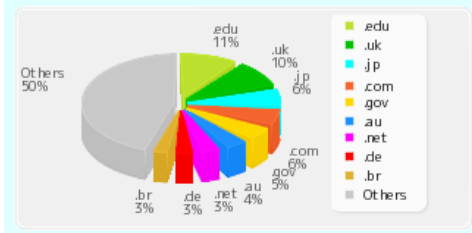
注)・上位50機関の KEGGアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別の KEGG API 利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

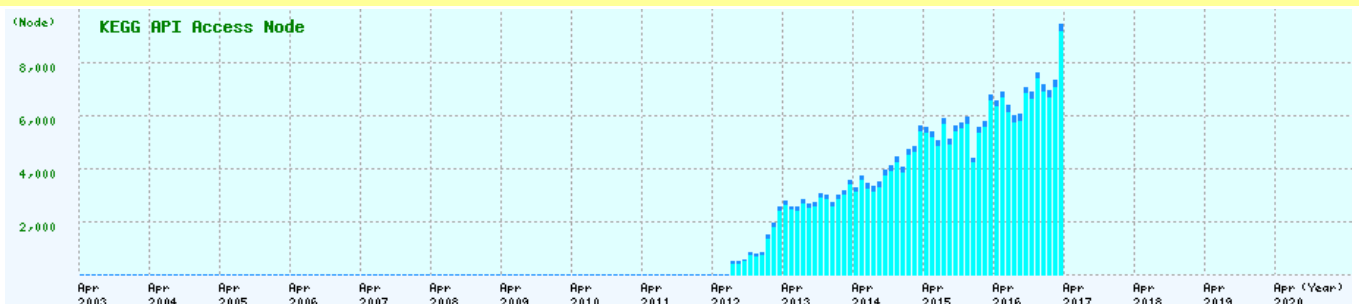


国別の KEGG API 利用件数(2016年度)

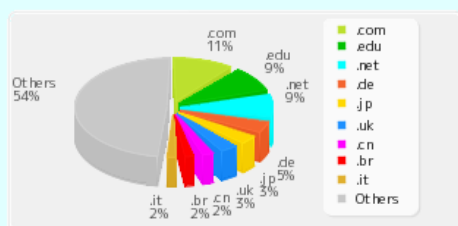


KEGG API アクセスノード数の推移

日本以外からのノード数 日本からのノード数

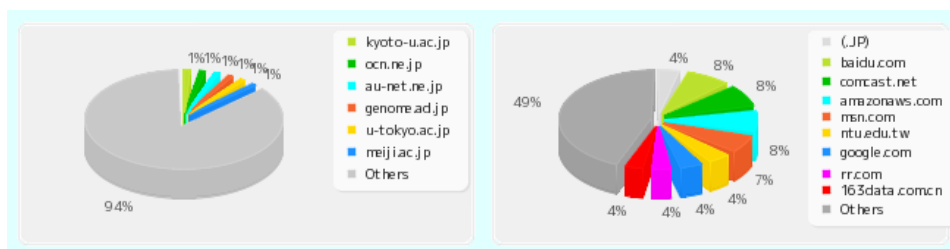


国別の KEGG API アクセスノード数(2016年度)



上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2016年度)

上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2016年度)



注)・上位50機関の KEGG API アクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

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稼働開始		
1992.01.14	1日	スーパーコンピュータ利用説明会(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ラボラトリー披露式		
1992.02.27	1日	スーパーコンピュータ利用説明会(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	48名	CTCラボ社 今村 浩三
1992.11.18	1日	UniChem1.1 講習会	16名	日本クレイ社 田村 祐介
1992.11.24	1日	BIOSYM 講習会	8名	変化システム社 片岡 良一
1992.12.01	2日	FORTRAN 講習会	25名	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利用説明会	約50名	
1993.04.20	1日	データベース利用講習会	32名	化学研究所 荻原 淳
1993.05.18	3日	UNICOS 講習会	18名	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.06.15	3日	C言語入門 講習会	8名	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.07.13	1日	QUANTA/CHARMm 講習会	14名	CTCラボ社 今村 浩三
1993.07.28	1日	Insight2/Discover 講習会	9名	変化システム社 片岡 良一
1993.10.19	1日	UniChem2.0 講習会	4名	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.10.21	1日	FORTRAN/C 最適化講習会	8名	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.11.24	1日	CHARMm22 講習会(応用編)	11名	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	7名	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利用説明会	56名	
1994.05.27	1日	AVS 講習会	4名	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	7名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.14	2日	UNIX 講習会	16名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.29	1日	UniChem2.0 講習会	4名	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	10名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.09.27	1日	QUANTA4.0/CHARMm22.2 講習会	15名	CTCラボ社 今村 浩三
1994.10.21	1日	FORTRAN90 講習会	5名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.11.18	1日	UniChem2.3 講習会	1名	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	10名	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利用説明会(宇治地区)	30名	
1995.04.19	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会	21名	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利用説明会(吉田地区)	29名	
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)	78名	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	16名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.19	0.5日	UNIX入門	15名	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.25	1日	QUANTA/CHARMm	5名	CTCラボ社 高橋 伸一
1995.06.02	1日	UNIX応用	7名	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 末綱 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・ビヨンド(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・ビヨンド(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・ビヨンド(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

平成28年度研究課題一覽

【京都大学】

化学研究所	物質創製化学研究	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
化学研究所	物質創製化学研究	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
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学

[illegible]

化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学

化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成

化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成

化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 無機フォトリソ材料
化学研究所 材料機能化学研究 無機フォトリソ材料
化学研究所 材料機能化学研究 無機フォトリソ材料
化学研究所 材料機能化学研究 無機フォトリソ材料
化学研究所 材料機能化学研究 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
化学研究所 材料機能化学研究 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
化学研究所 材料機能化学研究 ナノスピントロニクス

[illegible]

村田 靖次郎
村田 靖次郎
村田 靖次郎
若宮 淳志
村田 理尚
川端 猛夫
山中 正浩

林 一 広
古田 巧
笠松 幸司
寺西 利治
寺西 利治
寺西 利治
佐藤 良太
坂本 雅典
猿山 雅亮
Trinh Thang Thuy
川脇 徳久

辻井 敬亘
大野 工司
榊原 圭太

山子 茂
上中 和代

高見 佐織
登阪 雅聡
中村 泰之
茅原 栄一
橋本 士雄磨

PATEL VIJAY KUMAR
李 文娟
藤田 健弘
水落 憲和
正井 博和
森下 弘樹
藤原 正規
小野 輝男
小野 輝男
山口 美保
楠田 敏之
カブジン キム

森山 貴広
二木 史朗
二木 史朗
田中 由美
今西 未来
武内 敏秀
河野 健一
平竹 潤
渡辺 文太
上村 美由紀
青山 卓史
青山 卓史
安田 敬子
柘植 知彦
加藤 真理子
寺本 日出美
上杉 志成
佐藤 慎一
大神 田 淳子
Perron Amelie
竹本 靖
中島 光惠
茅 迪
高屋 潤一郎
浅野 理沙
八塚 研治
ペンダシ リンガルベロ

新規フラーレン誘導体の電子的性質
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質
フラーレンの構造変換に関する研究
機能性 π 共役系化合物の開発
新しい π 電子共役系の設計, 合成, および性質
軸性不斉エノラートを用いる4置換炭素の不斉構築
4-ピロリジン-ピリジン型分子触媒による化学選択的アシル化反応
の理論的解析
非掲載
水素結合ネットワークで形成されるキラル構造の DFT 計算
C-N軸性不斉エノラートの長寿命化
化学研究所連絡用
精密無機合成化学
不斉化学
無機ナノ粒子の精密合成と機能デバイスへの応用
ナノ粒子超構造の構築
可視光応答性水分解光触媒の開発
物質創製化学研究系 精密無機合成化学研究領域
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
高分子ブラシの構造と物性
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
リビングラジカル重合法を用いたボトルブラシの合成と高次構造の創製
精密合成反応の設計
研究に関する書類整理及び事務全般・国際シンポジウムの企画立案
E-mail利用
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察
次世代リビングラジカル重合制御剤の開発
歪んだ π 共役化合物の合成とその物性評価
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト・ゲスト化学の研究
超分子化学的アプローチによる環状 π 共役分子の創製
新規重合開始剤および関連反応開発に関する研究
新規ラジカル重合の開発
ダイヤモンド中のNV中心を用いた研究
機能性アモルファス材料の創製
ダイヤモンド発光中心を利用した光ナノ材料研究
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
ナノスピントロニクス
ナノスピントロニクスの研究
ナノスピントロニクス研究に関する事務補佐
極低温物性化学実験室の管理
電流誘起スピンダイナミクスを利用した省エネルギー次世代デバイスの開発
高周波スピントロニクスデバイスの研究
機能性人工蛋白質の創出
機能性ペプチドの創製
生体機能設計化学の研究支援
亜鉛ファンゲータンパク質を用いた転写制御分子の創製
ペプチドの膜透過
ペプチドの膜透過
gamma-Glutamyltranspeptidase 阻害剤の合成と応用
酵素阻害剤の設計と合成研究
生体触媒化学の研究支援
植物の細胞内の情報伝達
分子生物学
分子生物学
植物環境応答制御機構の分子基盤
植物形態形成に関わる細胞内情報伝達機構の解析
植物分子生物学の研究
植物分子生物学: 小分子化合物を起爆剤とした生物学の研究
ケミカルバイオロジー
たんばく質間相互作用を制御する合成分子の創製
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
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	チュン シーキム ワトソン	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 deLeon 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	Le Khanh Toan	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 Thi 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	Pe BeverlyAlog Kathleen	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	勝田 陽介	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	竹野谷 美穂子	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	古田 智行	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	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	奥田 聡	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	福島 達也	有機半導体材料の局所および凝集構造に関する固体NMR研究
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
化学研究所	環境物質化学研究	水圏環境解析化学	梅谷 重夫	新規配位子の分子設計
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	長谷川 健	溶液および界面の振動分光学
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	長谷川 健	界面の振動分光
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	松林 伸幸	生体高分子の水和
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	若井 千尋	膜に吸着した水分子のダイナミクスのNMRによる解析
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	下赤 卓史	凝縮系の振動分光学
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	中原 勝	超臨界水の化学
化学研究所	環境物質化学研究	分子微生物科学	栗原 達夫	低温菌の低温適応機構の解析
化学研究所	環境物質化学研究	分子微生物科学	栗原 達夫	極限環境微生物の生理機能解析
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	竹中 幹人	量子ビームによる高分子構造解析
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	竹中 幹人	高分子物質科学のホームページ
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	石田 華子	Eメールの利用
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	西田 幸次	高分子電解質溶液の構造
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	井上 倫太郎	散乱法による高分子ダイナミクス
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	小川 紘樹	量子ビームを用いた高分子構造解析
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	金谷 利治	アモルファス高分子のダイナミクス
化学研究所	複合基盤化学研究	高分子物質科学	金谷 利治	高分子物質科学領域のホームページ
化学研究所	複合基盤化学研究	分子レオロジー	渡辺 宏	からみ合い高分子の分子レオロジー
化学研究所	複合基盤化学研究	分子レオロジー	松宮 由実	高分子系の流動誘電緩和
化学研究所	複合基盤化学研究	分子レオロジー	土肥 佑也	環状高分子の分子レオロジー
化学研究所	複合基盤化学研究	分子レオロジー	梶川 幸恵	研究室事務用
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	粒子ビーム科学	岩下 芳久	加速器研究のための3D 電磁場計算
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	レーザー物質科学	阪部 周二	レーザー物質科学
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	レーザー物質科学	西島 慶	レーザー物質科学
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	レーザー物質科学	橋田 昌樹	レーザー物質科学
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	レーザー物質科学	中宮 義英	レーザー物質科学
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	複合ナノ解析化学	根本 隆	EELSスペクトルの計算機シミュレーション
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	構造分子生物科学	伊藤 嘉昭	X線スペクトルの微細構造
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	構造分子生物科学	藤井 知実	タンパク質のX線結晶構造解析
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	構造分子生物科学	正岡 聖	X線管からのスペクトル解析
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	構造分子生物科学	梅咲 則正	XAFS分光法によるガラス材料の構造解析
化学研究所	先端ビームナノ科学センタ	構造分子生物科学	永井 一弘	太陽電池パネルの破損原因分
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	中村 正治	新たな機能および反応性を有する有機金属化合物による次世代合成化学の開拓
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	中村 正治	高効率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
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	高谷 光	メタル化ペプチドを用いる多金属元素集積型分子デバイスの創製
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	岩本 貴寛	合成化学を基盤とした新規金属触媒の開発
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	磯崎 勝弘	分子性金属活性種の解析手法の開発と超分子反応場の構築・反応制御
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	LAKSMIKANTA ADAK	レアメタルを凌駕する鉄触媒による精密有機合成化学の開拓
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	鈴木 毅	新規な鉄触媒有機反応の開拓とそれらを用いる機能性材料の開発
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	松田 博	人工漆材料の高効率合成のための研究
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	Fan Lulu	潜在的付加価値を持つ新規含芳香族ポリマー材料の創製
化学研究所	元素科学国際研究センター	有機分子変換化学	ピンチュエラ フランチェスカ	木質バイオマスの高度利用を志向した金属ナノ粒子触媒の開発
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	小澤 文幸	研究・教育
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	小澤 文幸	遷移金属／典型元素相乗系錯体の創製と機能に関する研究
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	池田 奈緒子	元素科学研究にかかわる事務処理
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	竹内 勝彦	遷移金属錯体の構造探索
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	脇岡 正幸	遷移金属触媒による π 共役系高分子の構造制御合成
化学研究所	元素科学国際研究センター	遷移金属錯体化学	竹内 勝彦	Eメールの利用
化学研究所	元素科学国際研究センター	光ナノ量子元素科学	金光 義彦	光ナノ科学
化学研究所	元素科学国際研究センター	光ナノ量子元素科学	金光 義彦	光ナノ元素科学
化学研究所	元素科学国際研究センター	光ナノ量子元素科学	永田 貴美子	光ナノ元素科学
化学研究所	元素科学国際研究センター	光ナノ量子元素科学	井原 章之	ナノ構造光物性
化学研究所	元素科学国際研究センター	無機先端機能化学	島川 祐一	無機機能性材料の合成と評価
化学研究所	元素科学国際研究センター	無機先端機能化学	島川 祐一	機能性酸化物材料の研究
化学研究所	元素科学国際研究センター	無機先端機能化学	菅 大介	機能性遷移金属酸化物の研究
化学研究所	元素科学国際研究センター	無機先端機能化学	齊藤 高志	無機固体化学の研究
化学研究所	元素科学国際研究センター	無機先端機能化学	市川 能也	遷移金属酸化物薄膜の合成と物性
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	緒方 博之	巨大DNAウィルスゲノムの解析
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	緒方 博之	巨大DNAウィルスゲノムの解析

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
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
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
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

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
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
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
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

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
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
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

[illegible]

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
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 生命知識工学
化学研究所 材料機能化学研究 無機フोटオニクス材料
エネルギー理工学研究所 エネルギー機能変換研究部門
エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
生存圏研究所生存圏開発創成系宇宙圏航行システム工学分

防災研究所 地震防災研究部門
防災研究所 附属地震予知研究センター

[illegible]

伊藤 悦子
Blanc-Mathieu Romain
吉川 元貴
西山 拓輝

愛宕平沢
西巻将沢
黒荒山下
李岩

西村 陽介
阿久津 達也
林田 守広

馬見塚 拓
 Nguyen Canh Hao
 八代 幸造
 大槻 薫
 大槻 薫
 大槻 薫
 藤橋 明子
 上村 由紀
 濱田 芽里
 武平 時代
 中村 かおり
 中野 友佳子
 井上 純子
 五斗 進
 清水 祐吾
 五斗 進
 吉沢 貴康
 笹森 貴裕
 郭 晶東
 鈴木 裕子
 水畑 吉行
 時任 宣博
 田村 武幸

五斗進
山田誠
林寛
松田一成
中江隆博
小島崇寛
山口皓平

倉田 真宏
村本 智也

森勝二
平井良昌
町美稚子
竹本由紀
大隅庸弘
南雲円
八代幸造
松山晋治
隅井大槻薫
大平直子
由井佳子
延原由紀
太田浩二
大村慶子
宮本真理子
酒井博美
上地恭子
中西洋子
立花則子
上道京子
大山慶子
野田麻紀
高橋知世
廣庭朋世
福田明子
高谷真知子
東城初和

[illegible]

宇治地区事務局	総務課	澤田 尚美	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	糸田 理江	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	池田 純子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	松岡 奈緒	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	奥村 香織	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	松本 真紀	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	安村 純子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	辻 久美子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	桶谷 真理子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	竹辺 公子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	岡田 哲也	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	奥山 大基	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	中村 亜都子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	小森 陽子	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	百井 彬乃	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	福澤 陽司	E-mail利用
宇治地区事務局	総務課	三代 由姫	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	中村 昌也	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	永田 幸司	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	中野 留美子	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	早崎 裕子	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	大西 正子	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	三木 好未	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	松重 優子	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	糸井 昭代	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	柿本 紗也子	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	鵜飼 健司	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	関本 篤司	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	数内 裕樹	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	森田 将也	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	守 泰孝	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	池田 竜也	E-mail利用
宇治地区事務局	経理課	岩坪 佳苗	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	森田 勇二	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	中野 進治	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	上野山 直子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	高田 早津紀	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	有井 秀幸	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	楠見 牧子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	平田 美穂	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	橋本 伸	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	井上 祐樹	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	八木 裕美	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	大戸 瑞穂	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	杉山 かおり	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	谷川 禅	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	福島 典子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	北川 伸代	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	中谷 浩美	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	織田 真澄	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	鹿間 順子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	李 風英	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	木下 亜紀子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	好川 佳子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	今野 創祐	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	宮内 徹也	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	田中 克卓	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	龍 智佳子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	新井 智子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	有賀 諒	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	中野 直子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	河上 愛	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	今村 美鈴	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	井出 恵美子	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	太田 妃登美	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	大下 美圭	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	天野 真希	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	田上 款	E-mail利用
宇治地区事務局	研究協力課	吉岡 佐知子	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	岡田 修一	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	畑中 力	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	山田 博	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	高橋 英樹	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	島原 健治	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	北村 修	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	西島 千賀	E-mail利用
宇治地区事務局	施設環境課	濱本 文平	E-mail利用

農学研究科・農学部 農学専攻
農学研究科・農学部 森林科学専攻
農学研究科・農学部 森林科学専攻
農学研究科・農学部 応用生命科学専攻
農学研究科・農学部 応用生物科学専攻
農学研究科・農学部 応用生物科学専攻
農学研究科・農学部 地域環境科学専攻
農学研究科・農学部 地域環境科学専攻
人間・環境学研究科 相關環境学専攻
人間・環境学研究科 相關環境学専攻
人間・環境学研究科 相關環境学専攻
生態学研究センター 生態学研究部門
物質－細胞統合システム拠点 今堀グループ
物質－細胞統合システム拠点 北川グループ
先端医工学研究ユニット 研究部門
先端医工学研究ユニット 研究部門
産官学連携本部
産官学連携本部
学際融合教育研究推進センター

【京都大学以外】

中央大学 理工学部 物理学科
東京大学大学院 理学系研究科 生物科学専攻
東京電機大学 工学部 環境化学科
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

丸山 伸之
菊地 弘晃
木村 史子
植田 充美
吉田 天士
吉田 天士
赤松 美紀
小川 雄一
津江 広人
上田 純平
高橋 弘樹
岡崎 友輔
今堀 博
日下 心平
近藤 輝幸
木村 祐
湊 丈俊
山中 俊朗
吉元 健治

田口 善弘
松井 求
山本 哲也
上田 敦史
吾郷 友宏
古川 森也

植物種子タンパク質の構造と機能
一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析
変調磁場による微結晶の三次元配向
コンビナトリアル・バイオ工学
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
生理活性物質の構造活性相関
全反射減衰テラヘルツ時間領域分光法を用いた細胞計測
有機分子性結晶の気体吸着状態の解析
長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析
優先富化現象を示す有機化合物の検索
琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析
人工光合成系の開発
多能性細孔物質の深化
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
高感度Gd-MRI造影剤のPEG化および抗体修飾によるDDS構築
革新型蓄電池の反応機構解明
電池材料のラマンスペクトルの計算
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

主成分分析を用いた教師なし学習による変数選択法
グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発

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

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>