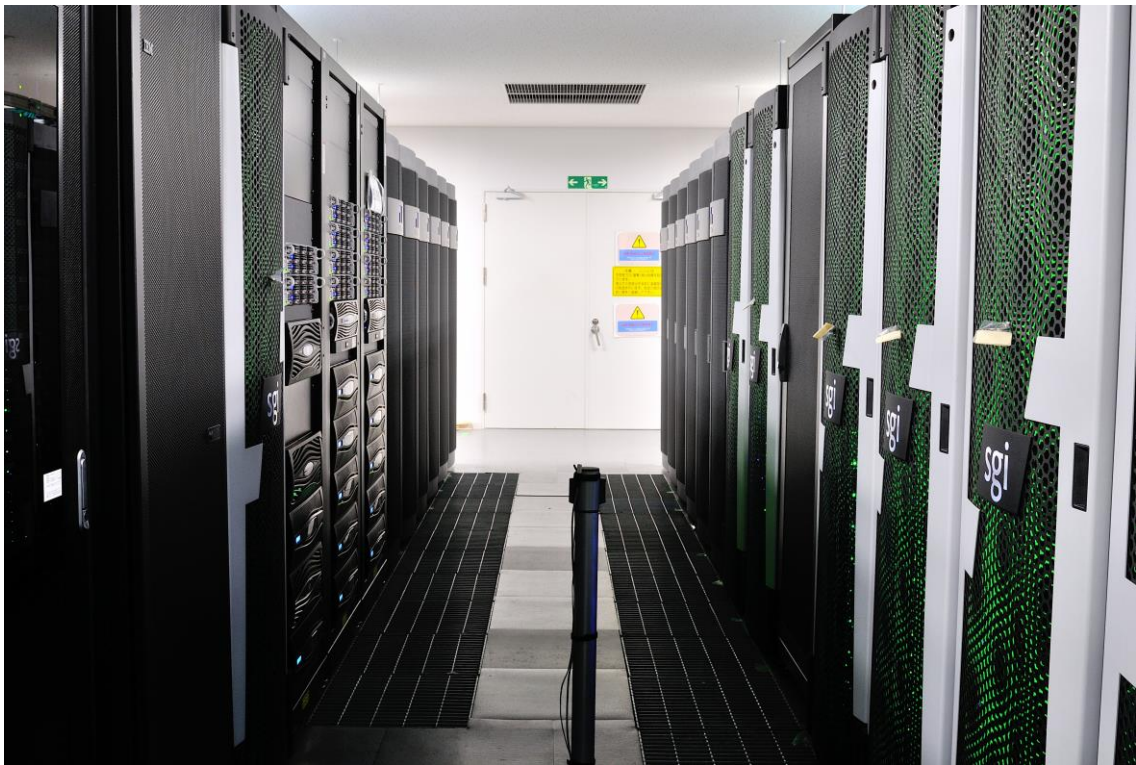


スーパーコンピュータシステム

平成 29 年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

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

この報告書は、平成 29 年度の 356 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、71 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 29 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

2018 年 3 月

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

化学研究所

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博		1
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行		2
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		3
第三元素添加による新奇規則合金相Fe-Pdナノ粒子の創製	松本 憲志		4
リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの合成と高次構造の創製	榊原 圭太		5
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		6
環状 π 共役分子の合成とその物性	茅原 栄一		7
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		8
新規ラジカル重合の開発	藤田 健弘		9
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典		10
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆		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合成	中村 正治		12
遷移金属錯体の構造探索	竹内 勝彦		13
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	エルナンデス ロドリゴ		14
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也		15
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖		16
多官能基性化合物の位置選択的分子変換	上田 善弘		17
巨大DNAウィルスゲノムの解析	緒方 博之		18
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romain		20
メタゲノミクスを利用した海洋プランクトン生態系に関する研究	遠藤 寿		22
ウィルスゲノムの解析	吉川 元貴		23
16SrRNA遺伝子を標的としたアンプリコン配列の解析によるパンクレリパーゼ投与マウスの腸内細菌叢の解析	西山 拓輝		24
ゲノムデータに基づく知識発見	黒西 愛		26
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		27
隠れマルコフモデルによるホモロジー検索に基づくタンパク質機能推定法	荒巻 拓哉		28
共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析	加藤 恭崇		29
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究	金子 博人		30
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		31
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発	田村 武幸		32

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		33
------------------	-------	------	----

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		34
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明		35
量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析	野田 泰斗		36

工学研究科・工学部

近赤外色素を用いる光音響腫瘍イメージング	三木 康嗣		37
半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発	東 正信		38
触媒有機化学に関する研究	辻 康之		39
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平		40
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹		41
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之		42
13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明	伊藤 峻一郎		43
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至		44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦		45
多孔性配位高分子の合成と性質	植村 卓史		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
クラスターイオンビームと固体表面の相互作用	龍頭 啓充		49
Ti表面上へのN ₂ 吸着エネルギーの計算	小林 洋治		50
酸水素化物への表面吸着と反応	唐 亜		51
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構造解明	長田 裕也		52

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		53
軽金属・合金の力学特性	馬淵 守		54
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高		55

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		56
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？	吉田 天士		57
極限環境における微生物ゲノム解析	中川 聡		58

人間・環境学研究科

硫黄を含むジペプチド保護体のCO ₂ 吸着状態の解析	津江 広人		59
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		60

高等研究院

有機構造体を用いたイオン伝導体合成	堀毛 悟史		61
-------------------	-------	-------	----

産官学連携本部

蓄電池材料の構造と物性	湊 丈俊		62
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗		63

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		64
---------------------------	-------	-------	----

京都大学以外

生体分子情報データベースの開発	五斗 進		65
グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発	松井 求		66
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史		67
ウイルスゲノムの多様性に関する研究	西村 陽介		68
典型元素を活用した機能性材料の開発	吾郷 友宏		69
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也		70
カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築	藪崎 純子		71
密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志		72
ゲノム解読	半田 佳宏		73
菌類の系統解析	齋藤 勝晴		74

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		75
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣		80
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣		82
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		100
平成29年度研究課題一覧			105

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

Theoretical studies on the reactions of novel main group elements compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 時任 宣博

研究成果概要

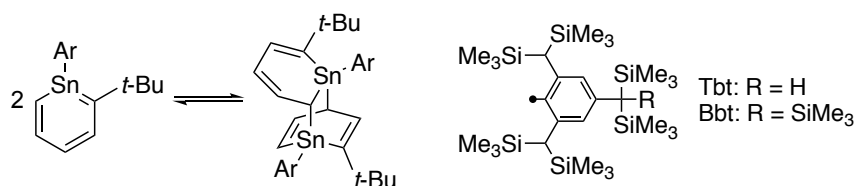
本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スズ核置換ベンゼン(スタンナベンゼン)の性質の解明を行った。

スズ原子上にかさ高いアリール基である Tbt 基および Bbt 基、スズ原子の隣接炭素原子上に *tert*-ブチル基を有するスタンナベンゼンは溶液中単量体と二量体の平衡状態にある。その熱力学的パラメーターを温度変化 ^1H NMR スペクトル測定の結果より算出すると、Tbt の系で $\Delta H^\circ = -21.9 \pm 0.2 \text{ kcal mol}^{-1}$ / $\Delta S^\circ = -50.0 \pm 0.5 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 、Bbt の系で $\Delta H^\circ = -20.5 \pm 0.3 \text{ kcal mol}^{-1}$ / $\Delta S^\circ = -56.7 \pm 0.8 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ となった。またこの平衡反応には溶媒効果がほとんど見られないことも明らかにしている。

本反応の詳細を明らかにするために、Tbt 基を有する単量体、二量体のリアル分子を用いた検証を行った。構造最適化および振動数計算を B3LYP, B3LYP-D3, B3PW91, B3PW91-D3, M062X, TPSSTPSS, TPSSTPSS-D3 の計算手法、および基底関数として Sn 原子に対し Lanl2DZ、その他の原子に対し 6-31G(d)を用いて行った。二量体に関しては X 線結晶構造解析によって明らかにした構造を初期構造としている。

その結果、分散力を考慮しない計算手法(B3LYP, TPSSTPSS)では、 ΔG° は正に大きな値となり、現実の系を正しく記述していないと考えられる結果が得られた(B3PW91 では安定構造を得られなかった)。また、分散力を考慮した B3LYP-D3, B3PW91-D3, M062X, TPSSTPSS-D3 では、 $\Delta H^\circ = -40 \sim -53 \text{ kcal mol}^{-1}$ 、 $\Delta S^\circ = -65 \sim -71 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ となり、 ΔG° の値は負に大きな値となった。 ΔH° の再現性が乏しいことが本系の問題であり、実験的に構造が明らかになっていないスタンナベンゼン単量体の実際の構造と最適化構造に大きな乖離がある可能性がある。

現在、単量体のスペクトル測定と計算による予測の評価を進めており、これらの結果を総合して、単量体の性質を適切に記述できる計算手法、基底関数を明らかにし、上記熱力学的パラメーターの解釈を行いたいと考えている。



高周期典型元素を含む新規結合様式の創出

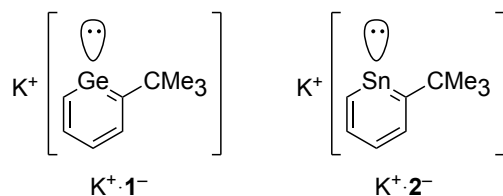
Synthesis of Compounds Having Novel Bonds of Heavier Main Group Elements

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 水畑 吉行

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、筆者らがごく最近合成・単離することに成功した高周期 14 族元素核置換フェニルアニオン(「重いフェニルアニオン」)の性質に関する検証を行った。

既にその合成を達成しているゲルマニウム類縁体 $K^+ \cdot 1^-$ に加え、スズ類縁体 $K^+ \cdot 2^-$ の合成にも成功し、そのスペクトルの性質および構造を明らかにした。X 線単結晶構造解析の結果、 $K^+ \cdot 2^-$ 中のカリウム原子は、 SnC_5 環の上下に η^6 型、また Sn に対して η^1 型に配され、無限構造を形成していた。



一方で、フリーアニオン 2^- に対する構造最適化を Gaussian 09 {B3LYP/lanl2-DZ[Sn],6-31G(d,p)[CH]}にて行ったところ、その最適化構造は X 線単結晶構造解析による実測値と極めて良い一致を示した。このことから、対カチオンであるカリウム原子が SnC_5 環に対して与える電子的効果は小さいことが示唆される。

また、 2^- に対する GIAO および TD 計算 {B3LYP/4333111/433111/4311[Sn], 6-311G(2df,2p)[CH]}による NMR ケミカルシフトおよび紫外可視吸収スペクトル(THF 中)の検証を行ったところ、こちらも実測と良い一致を示した。このことは THF 溶液において、 $K^+ \cdot 2^-$ がフリーアニオンに近い電子状態を有していることを示しており、カリウム原子が THF によって完全に溶媒和された分離イオン対 $[K^+(thf)_n] \cdot 2^-$ の寄与が大きいと考えられる。

さらに 2^- の芳香族性を評価するために、上記と同様の GIAO 計算を用いて NICS(1)の計算を行った。その結果、 2^- での値は-7.26 と、 1^- の-8.10、ベンゼンの-10.86 に比べてその絶対値は小さくなっているものの、十分な芳香族性を有していることが明らかになった。

発表論文(謝辞あり)

Shiori Fujimori, Yoshiyuki Mizuhata, Norihiro Tokitoh, “Heavy Phenyllithium and -sodium: Synthesis and Characterization of Germanium Analogues of Phenyl Anion ('Germabenzeyl Anions')”, *submitted*.

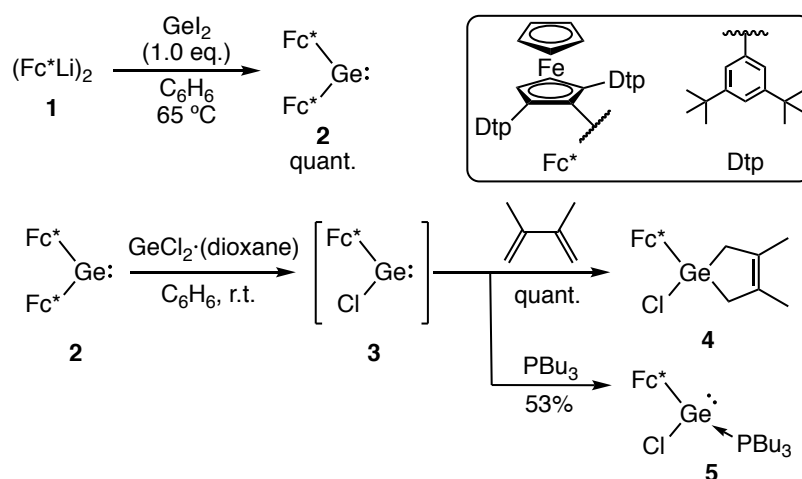
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

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、溶液中でも二量化しない安定なゲルミレンとして、立体保護と酸化還元状態の安定化を目的としてかさ高いフェロセニル基の導入を考え、かさ高いビス(フェロセニル)ゲルミレン(**2**)の合成・単離を目的として検討を行った。単離した(Fc^*Li)₂と GeI_2 の反応により $\text{Fc}^*_2\text{Ge}:$ (**2**)を合成・単離することに成功した。さらに、ゲルミレン **2** は $\text{GeCl}_2\cdot\text{dioxane}$ との反応により置換基交換を起こし、クロロゲルミレン **3** を生じることが判った。クロロゲルミレン **3** の発生は、ブタジエンやホスフィンとの捕捉反応により確認した。この反応機構を理論化学的に調べるために、Gaussian 09 プログラムを用い、反応経路計算を行った。計算レベルは、M06-2x/6-311+G(2d)(Fe, Ge, Cl); 6-311G(d,p)(C, H) // M06-2x/lanl2dz+f(Fe); 3-21G*(Ge, Cl, C, H); 6-311G(3d)(Fe,Ge)を用いた。その結果、この置換基交換反応の反応障壁は 29.5 kcal/mol と算出された。しかし、ジオキサンの配位の効果を加味した計算を行うと、その障壁は 15.3 kcal/mol まで下がり、室温でも十分に進行する反応であることがわかった。



発表論文(謝辞あり): Suzuki, Y.; Sasamori, T.; Guo, J.-D.; Tokitoh, N. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 364.

発表論文(謝辞なし): 特になし

第三元素添加による新奇規則化合物相 Fe-Pd ナノ粒子の創製
Creation of Novel Fe-Pd Ordered Alloy Nanoparticles by Introducing Third Element

京都大学 化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
松本 憲志

研究成果概要

今年度はまだほとんど計算を実行することができなかったため、記載できる成果はない。今後の研究計画としては、本年度に引き続き、下記に記すように新奇相の形成駆動力の解明を行う予定である。

ナノサイズ化や典型元素添加によって、準安定な金属結晶相の形成が多数報告されている。しかし、それらの準安定相は既知の結晶構造を有していることが大半である。Fe-Pd 系合金の場合、他の合金相でも確認されたことのない未踏の結晶相を含めた数々の準安定相が理論的には提案されているものの、実際は安定相である $L1_0$ -FePd 相と 1_2 -FePd₃ 相の金属間化合物、および 1 -FePd 固溶合金相のみが報告されている。本研究では、第三元素の添加により、Fe-Pd の副格子があたかも 1_0 -FePd 相と fcc-Pd 相のユニットセルが c 軸に交互配列したような新奇 FePd₃ 規則化合物ナノ粒子の創製に成功し、その規則相が報告例のない配列秩序を有することを明らかにした。そこで、本システムで利用可能な計算ソフトウェアである CASTEP を利用し、新奇 FePd₃ 規則化合物相のギブス自由エネルギーを明らかにし、この新奇相の熱力学的安定性を明らかにするとともに、期待され得る物性を明らかにするために電子状態密度の解明を行っていきたい。これらを明らかにすることで、機能性材料である新奇相に関する新たなメカニズムの構築が実現できるかもしれない。

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

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

研究成果概要

セルロースは、自然界においてらせん状のマイクロフィブリルを形成し、その誘導体はコレステリック液晶を示す。ゆえに、セルロースがらせん状高次構造、例えばマイクロ相分離構造、の発現に有望な分子骨格と考えられる。しかしながら、セルロースは DNA やタンパク質のような特異的水素結合ペアを持たないため、高次構造形成の観点からは、これまで積極的に利用されていなかった。こうした背景の中、我々はこれまで、セルロースの自己組織化の実現には位置選択的誘導体化が鍵であることに着目し、この手法をマイクロ相分離に拡張することでセルロース主鎖に起因するらせん状高次構造が得られると考え、研究を遂行してきた。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、異種側鎖が位置選択的に導入されたセルロース系ヤヌス型ボトルブラシの設計、および溶液中で形成される高次構造形成の解析を行っている。

まず、セルロースを主鎖とし、側鎖に polystyrene 及び poly(ethylene glycol)を有するボトルブラシ（セルロース系ヤヌス型ボトルブラシ）を合成した。次に、その希薄溶液中における分子鎖特性を明らかにするため、小角 X 線散乱測定（SAXS）とサイズ排除クロマトグラフィー-多角度光散乱測定（SEC-MALS）測定を行った。SAXS 測定により、セルロース系ヤヌス型ボトルブラシを円柱状とみなしたときの断面方向の平均二乗回転半径（ Sc^2 ）と直径（ d ）を、SEC-MALS 測定により平均二乗回転半径（ $\langle S^2 \rangle$ ）の重合度（DP）依存性を明らかにした。これらの結果を総合的に考察したところ、セルロース系ヤヌス型ボトルブラシのコンホメーションがらせんみみず鎖モデルにより良好に再現できることを見出した。この挙動はセルロース系ヤヌス型ボトルブラシの一次構造や溶媒などの環境に大きく依存した。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年度は共になし

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

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

京都大学化学研究所 高分子制御合成研究領域 登阪雅聡

研究成果概要

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

昨年度の時点で、我々は透過型電子顕微鏡(TEM)中で PDMS を冷却することにより単結晶を得て、その制限視野電子線回折(SAED)パターン(図 1)から、4種類の結晶構造が存在することを明らかにした。この SAED パターンからは、結晶の ab 面内における分子充填の情報が得られるが、 c 軸方向の情報は欠損している。そこで c 軸方向の情報はバルク試料からの X 線回折(WAXD)パターン(図 2)より推定することで、エネルギー的に安定であり、かつ、回折パターンの特徴を再現できる構造モデルを Materials Studio を用いて探索した。その結果、確からしい構造を見つけるに至っている。

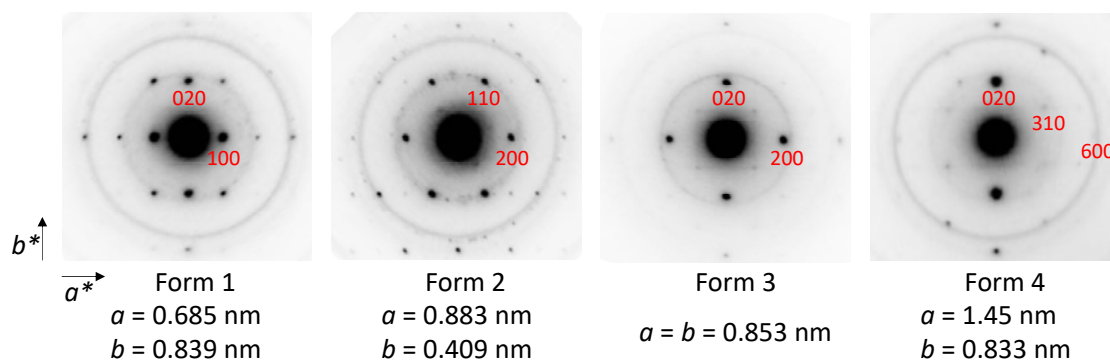


図 1 PDMS 単結晶の SAED パターン(既報)

今年度は、モデルの正確性を高めるため、さらに TEM 中で生成させた PDMS 単結晶の観察を進めた。その過程で、上に述べた4種類とは異なる ED パターンを示す、新しい結晶型が見つかった。この結晶型(Form 5)についても、構造モデルを探索している最中である。

発表論文 (研究終了後に投稿の予定)

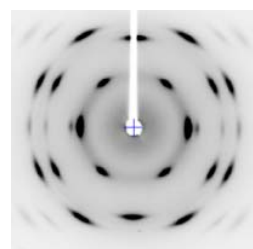


図 2 -100°C、延伸倍率 6 倍における架橋 PDMS の WAXD パターン

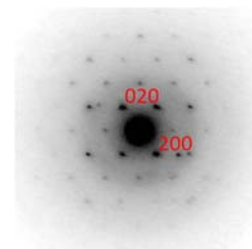


図 3 PDMS 単結晶の新しい SAED パターン

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

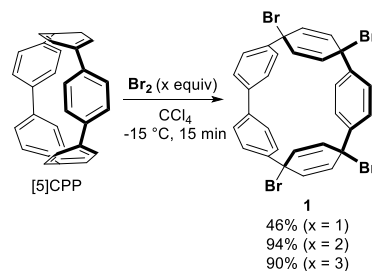
京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成研究領域 茅原 栄一

背景と目的

シクロパラフェニレン (CPP) は、その化学が近年大きく進展し、様々な環サイズの CPP や CPP 誘導体の合成が可能になっている。¹⁾ さらに、CPP の大量合成が可能になったことから、入手容易な CPP を原料とした CPP 誘導体の合成は、汎用性の高い CPP 誘導体の合成法として期待されている。本研究では、求電子的反応のモデルとして、CPP と臭素との反応について検討した。さらに、生成物の変換反応について検討した。²⁾

結果

[5]CPP に対し、1 当量の臭素を、-15 °C で 15 分作用させた (Scheme 1)。その結果、[5]CPP の向かい合う 2 つのベンゼン環の 1,4-位が臭素化された付加生成物が 46% 得られた。さらに、2 当量の臭素を用いると、の収率が 94% に向上した。また、2 当量以上の臭素を用いても が得られ、他の臭化生成物は得られなかった。



Scheme 1. Bromination of [5]CPP.

CPP の臭素化反応の反応性、選択性
の原因を明らかにするために、DFT 計算を行った (Figure 1)。臭素の一付加反応による の生成は、87kJ/mol 発熱的であった。さらに、 に対してもう一分子の臭素が反応し となる反応は、さらに 108 kJ/mol の発熱であったことから、反応が一付加体では止まらず、二付加体まで進行することが示唆された。一方、 の位置異性体 ' は よりも 117kJ/mol も不安定であったことから、生成物の安定性が反応の進行と生成物の位置選択性を決めていることが分かった。なお、三付加体 、3' の生成は、エントロピーの寄与を考慮すると、 の生成よりも吸熱的であり、臭素の三付加体は得られなかった実験結果とよい一致を示していた。

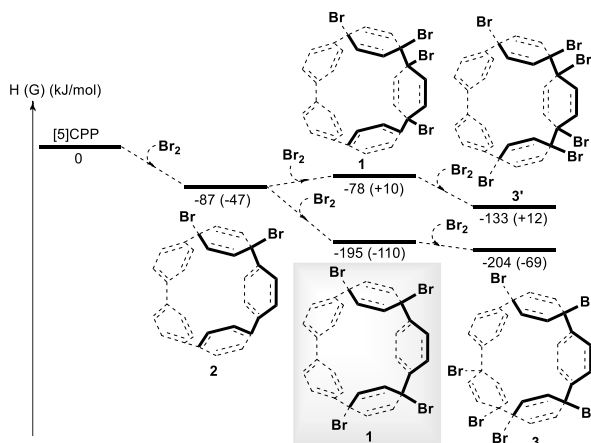


Figure 1. Calculated stabilities of the isomers of adducts obtained by DFT calculations using the B3LYP/6-31G*. Values in parentheses are the relative Gibbs energies at 298.15 K under one atmosphere of pressure.

また、 の変換反応により、単置換、多置換 CPP 誘導体の合成にも成功した。

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

発表論文 謝辞あり (2) Kayahara, E.; Qu, R.; Yamago, S. *n e . hem. nt.* , , 10428.

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。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。

NMR 測定を用いて、実験的に相互作用が観測された $[n]$ CPP と $[n+5]$ CPP ($n = 5-8, 10$) との各包接錯体について、DFT 計算 (ω B97X-D/6-31G*) により Kohn-Sham 軌道を可視化した。結果、一部ではホストとゲスト CPP 両方に広がる軌道が見られた。このことは、ホスト-ゲスト分子間での電子的な相互作用の存在を示唆しており、これらを利用した電子材料などとしての応用も将来的に期待できると考えられる。

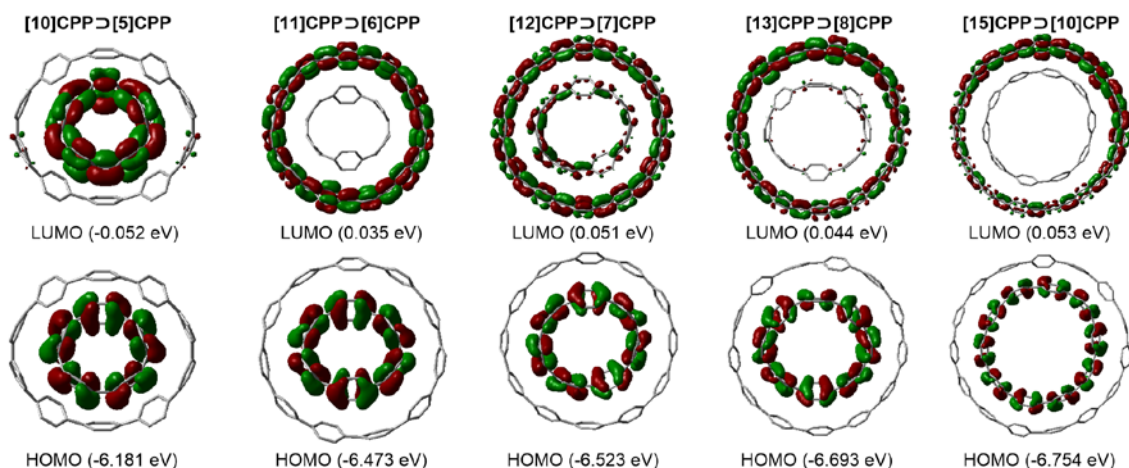


図 1. $[n+5]$ CPP $\supset$ $[n]$ CPP の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO)

発表論文 (謝辞あり)

“Shortest Double-Walled Carbon Nanotubes Composed of Cycloparaphenylenes”

Hashimoto, S.; Iwamoto, T.; Kurachi, D.; Kayahara, E.; Yamago, S. *ChemPlusChem* **2017**, *82*, 1015-1020 (vip article).

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

京都大学 化学研究所 高分子制御合成領域

藤田 健弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新規ラジカル重合の開発に関わる反応機構の研究を行った。

新規ラジカル重合を開発するにあたり、モノマーと成長末端ラジカルの反応性を理解することは極めて重要である。これらの反応性を調べるために、Gaussian ソフトウェアを用いて成長反応の遷移状態を求め、活性化エネルギーを算出した。得られた結果は実験結果と良い一致を示した。今後もより詳細に重合機構を明らかにするために計算サーバーを利用する予定である。

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

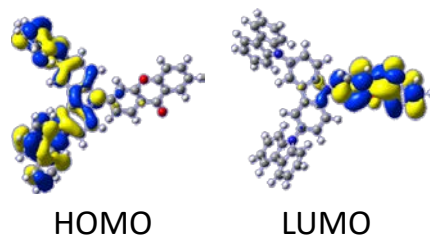
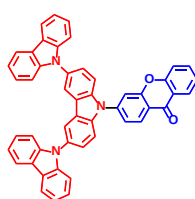
京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域

梶 弘典

研究成果概要

熱活性型遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 材料は、有機 EL 素子中で生じる一重項および三重項励起状態を 100%の効率で光に変換できる発光材料として、近年、注目を集めている。TADFを効率的に発現させるためには、発光過程において重要となる一重項励起状態および三重項励起状態のエネルギー差 (ΔE_{ST})を小さくし、なおかつ一重項励起状態と基底状態間の振動子強度を大きくすればよいことが知られている。そのためには発光材料の HOMO と LUMO を適度に空間分離させるような分子設計が要求される。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、量子化学計算ソフトを用いた ΔE_{ST} ならびに振動子強度の相対比較と HOMO、LUMO の可視化に基づく材料探索を実施した。量子化学計算には Linux 版 Gaussian 09 プログラムを、HOMO、LUMO の可視化には Windows 版 GaussView 5 を用いた。

材料探索の結果、電子ドナーである bicarbazol と電子アクセプターである xanthone を組み合わせた CCX-II において、 ΔE_{ST} の計算値が 50 meV と小さくなることから、CCX-II は TADF を示すことが示唆



された。さらに、最低励起一重項状態と基底状態間の振動子強度が

Figure 1. CCX-II の分子構造ならびに HOMO、LUMO の分布。

0.13 と大きいことから、CCX-II は高い発光効率を示すことが示唆された。CCX-II を発光材料として、有機 EL 素子 (素子構造 ITO (50 nm)/TAPC (70 nm)/CDBP (10 nm)/6 wt% CCX-II:PPF (20 nm)/PPF (10 nm)/BmPyPhB (30 nm)/LiQ (1 nm)/Al (80 nm)) を真空蒸着法により作製した。上記の方法で作製した有機 EL 素子は高効率な青色発光を示し、最大で 25.9% の高い外部量子効率を示した[1]。

発表論文 (謝辞あり)

[1] Blue organic light-emitting diodes realizing external quantum efficiency over 25% using thermally activated delayed fluorescence emitters. Miwa, T., Kubo, S., Shizu, K., Komino, T., Adachi, C. & Kaji, H., *Sci. Rep.*, 7, 284 (2017).

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

京都大学 化学研究所 複合ナノ解析化学

根本 隆

研究成果概要

電子顕微鏡法と電子エネルギー損失分光法を組み合わせることで、nm オーダーの微小結晶の構造を観察すると同時に局所領域の元素分析やバンド構造、イオンの価数の解析などが可能となる。更には、空間分解能を犠牲にするかわりに大きなカメラ長を設定することで、角度分解スペクトルの測定も可能である。しかしながら、電子エネルギー損失分光法で得られるスペクトルには様々な情報が重畳してして現れることから、その解釈は単純でなく、詳細な情報を解析する上では計算によるシミュレーションとの比較検討が必須である。

最終的なシミュレーションには主として WIEN2k ソフトウェアによる第一原理計算を主として行っているが、有機物結晶のスペクトルを計算する上では、その計算の元となる構造が問題となる。X 線結晶構造解析で得られる構造では、電子密度を元にした解析を行うため、水素原子の原子核位置と X 線解析で得られる電子密度中心が大きくずれるためである。そこで、WIEN2k による計算に先立ち、X 線構造解析結果をもとに、Materials Studio の DMol パッケージを主として使用して、構造最適化を試みた。

本年度は主としてフタロシアニン系の化合物を中心に構造最適化を行った場合と、行わなかった場合の比較を行った。

結果としては、予め構造最適化を行った場合のほうがより WIEN2k における計算が安定し、計算の発散が抑えられるとともに、より実験値と近い計算スペクトルが得られることが明らかとなった。

現在、より詳細な解析を行っており、結晶に対する電子線入射方位の影響の度合いなどについて実験値との比較検討を行っている。

発表論文

なし

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

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有機分子変換化学領域 中村 正治

研究成果概要

当研究室では、フッ化鉄と N-ヘテロサイクリックカルベン(NHC)配位子を用いることでビアリールカップリング反応¹やアリール-アルキルカップリング反応²が効率よく進行することを見出している。今回、DFT 計算によりアリール-アルキルカップリング反応における反応機構解析を行ったところ、鉄アート錯体を中間体とする Fe^{II}/Fe^{IV} の触媒サイクルで反応が進行していることが示唆された (Figure 1)。つまり、(NHC)Fe^{II}F₂ と MeMgCl との反応により生成するアート錯体[(NHC)Fe^{II}F₂Me]MgCl に対して、ハロゲン化アリールが酸化的付加することで(NHC)Fe^{IV}F₂MePh が生成する。その後、(NHC)Fe^{IV}F₂MePh からの還元的脱離により生成物を与える。なお、フッ素アニオンおよび NHC 配位子はそれぞれ強い π -ドナー性と σ -ドナー性を有していることから、本反応では高原子価鉄中間体の安定化に寄与していると考えている。

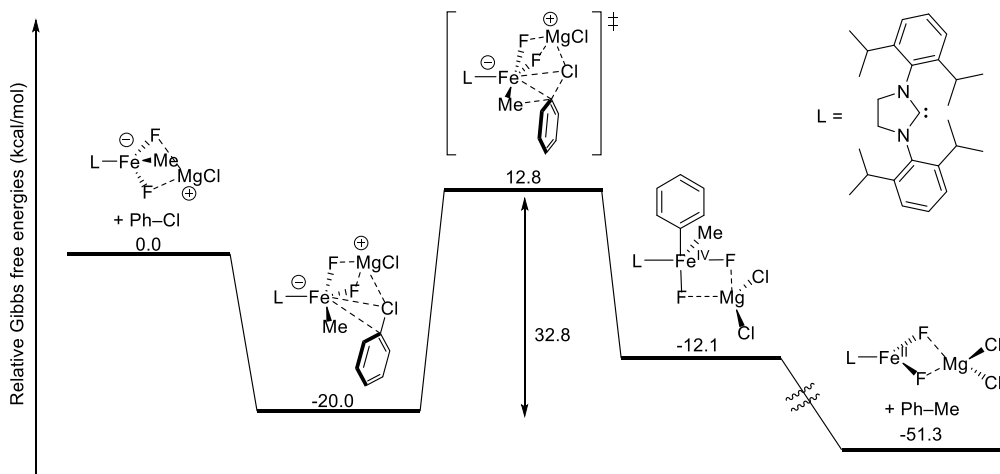


Figure 1. Energy diagram for oxidative addition and reductive elimination at the B3LYP/6-31G(d) level of theory.

参考論文

- (1) a) Hatakeyama, T.; Nakamura, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 9844–9845. b) Hatakeyama, T.; Hashimoto, S.; Ishizuka, K.; Nakamura, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 11949–11963.
- (2) Agata, R.; Iwamoto, T.; Nakagawa, N.; Isozaki, K.; Hatakeyama, T.; Takaya, H.; Nakamura, M. *Synthesis* **2015**, *47*, 1733–1740.

遷移金属錯体の構造探索

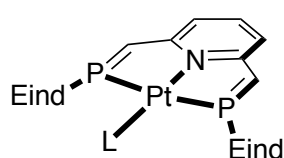
Investigation into the structures of organometallic compounds

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

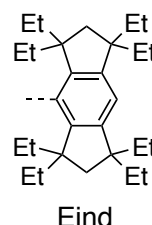
研究成果概要

最近我々は、ピリジンを母核とする PNP ピンサー型ホスファアルケン配位子 Eind₂-BPEP を有する四配位白金(0)錯体 [Pt(L)(Eind₂-BPEP)] (**1**, L = PPh₃) が、形式 d¹⁰ 錯体としては特異な平面四角形構造をもつことを見出した。また、この構造特異性の要因が、重い原子核を持つ白金に現れる顕著な相対論効果にあることを、パラジウム類縁体との比較と DFT 計算による分子軌道の考察によって示した。錯体構造の特異性は ³¹P NMR データにも反映され、錯体 **1** のシグナル (δ 104.7, C₆D₆) は、ホスファアルケン錯体としては異常な高磁場シフトを示した。

本研究では種々の配位子 L を有する錯体 **2-6** を合成し、化学シフトと錯体構造に及ぼす L の効果を調べた。その結果、L の π 受容性の順 (L = CO (δ 127.3) > CN^tBu (δ 110.5) ≈ PPh₃ (δ 105.6) ≈ PMe₃ (δ 101.2) > 3,5-lutidine (δ 98.2) ≈ DMAP (δ 95.1)) に低磁場シフトが起こることがわかった。配位子上の置換基による立体的影響を抑えた CO 及び py 錯体のモデル化合物を用いて DFT 計算を行った結果、CO 錯体では少し非平面化した構造が π 逆供与によって安定化されること、また π 逆供与によって P=C 結合が短縮し、³¹P NMR シグナルが低磁場シフトすることを明らかにした。



L = PPh₃ (**1**)
 DMAP (**2**)
 3,5-lutidine (**3**)
 PMe₃ (**4**)
^tBuNC (**5**)
 CO (**6**)



発表論文: 準備中

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
Hernandez-Velazquez Rodrigo

研究成果概要

In regard to my project:

- I try to decipher which NCLDV's viruses (also named Megavirales) present in the epipelagic oceans infect eukaryotic hosts, conducting co-occurrence association analyses. For such task I am using a matrix containing the abundance information of both 18S rRNA genes and polymerase B marker genes, the former corresponding to eukaryotes and the later to viruses. Since typical correlation analyses are prone to strong biases caused by compositional effects, approaches considering the nature of the data are being used.

To conduct this research project I make use of the SuperComputer System of Institute for Chemical Research, Kyoto University. I am using the software SparCC¹ that considers compositional effects on datasets, and very recently I have started using fastspar which is the c++ implementation of SparCC¹. In the coming days for the same purpose I will start using CoNet² which combines several correlation methods and weighting strategies.

References

1 Friedman J, Alm EJ: Inferring correlation networks from genomic survey data.

PLoS Comput Biol. 2012; 8(9): e1002687

2 Faust K and Raes J. CoNet app: inference of biological association networks using Cytoscape [version 2; referees: 2 approved] F1000Research 2016, 5:1519 (doi: 10.12688/f1000research.9050.2)

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

我々はこれまで生物情報ネットワークの解析について、スケールフリーネットワークとブーリアンネットワークという数理モデルを主対象に研究を行ってきた。平成 29 年度も引き続きこれらについて研究を継続した。

スケールフリーネットワークは次数分布がべき乗則にほぼ従うネットワークのことで、多くの生物情報ネットワークがこの性質を持つとされている。我々は近年、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。昨年度は無向ネットワークを対象に 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が、今年度は有向ネットワークを対象に必須頂点の高速な計算法を開発した。昨年度同様、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 176 倍の高速化を達成し、その結果として 65,000 頂点からなる大規模ネットワークに対し必須頂点を計算することが可能となった。さらに、この手法を 70 種の植物の代謝ネットワーク解析に適用し、必須頂点に対応する酵素には重要な役割を果たす多いことなどが見出された[1]。

ブーリアンネットワークは遺伝子ネットワークの離散数理モデルであり、近年、その制御などについて多くの研究が行われている。我々は昨年度は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ったが、今年度はネットワークの状態観測に必要な最小個数の頂点について研究を行った。しかし、一般には多数の頂点が必要となる場合があることが知られているので、定常状態を識別するのに必要な頂点数とその決定のためのアルゴリズムについて研究を行った。その主要な結果の一つとして「2種類の異なる動的定常状態は2個の頂点の動的挙動を観測することにより区別できる」ということを中国剰余定理を用いて導いた。これらの結果をもとに定常状態を識別するためのアルゴリズムを開発し、いくつかのネットワークモデルに適用した結果、多くの場合に比較的少ない個数の頂点の挙動を観測することにより静的および動的な定常状態を識別することが可能であることがわかった[2]。

発表論文(謝辞なし)

- [1] M. Ishitsuka, T. Akutsu, and J. C. Nacher: Critical controllability analysis of directed biological networks using efficient graph reduction, Scientific Reports, 7, 14361, 2017.
- [2] X. Cheng, T. Tamura, W-K. Ching and T. Akutsu. Discrimination of singleton and periodic attractors in Boolean networks, Automatica, 84, 205-213, 2017.

X 線管からのスペクトル解析

X-ray spectrum analysis from X-ray tube

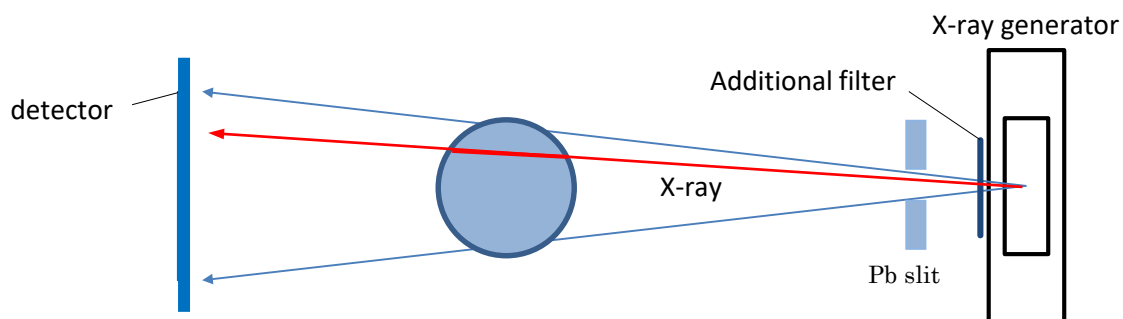
京都大学 化学研究所 先端ビームナノ化学センター 原子分子構造研究領域 正岡 聖

背景と目的

被写体に X 線管からのコーンビーム状の X 線束を照射して CT 撮影を行う場合、各測定画像における散乱線による輝度値の増加が、CT 画像に影響を及ぼすことが分かっている。ディテクタの手前にグリッドを設置して、斜めから入射する X 線(つまり、散乱線)をカットすることによって散乱線の影響を抑えることができるが、ここでは、グリッドを使用するのではなく計算によって散乱線の影響を抑えてきれいな CT 画像を得るための計算を行った。

検討内容

下図のように鉛スリットで X 線管から照射される X 線の照射領域を制限して被写体に X 線を照射し、ディテクタ領域が X 線照射領域より大きくなるようなジオメトリで、被写体を 1 回転させながら測定画像を計算した。CT 画像再構成は X 線照射領域のみを使用する。1 つは得られた測定画像をそのまま再構成し、もう 1 つは照射領域外の値を散乱線による輝度値とみなして、それを照射領域内の輝度値から差し引くことによって散乱線による影響を取り除いてできる測定画像を再構成した。この両者の CT 画像を比較した。



結果

上記結果を比較することにより、散乱線の影響を取り除いてできる測定画像を再構成した CT 画像の方が、アーチファクトの少ないかなりよい画像が得られた。

今後は散乱線による影響を取り除く方法をもっと最適化していきたいと考えている。

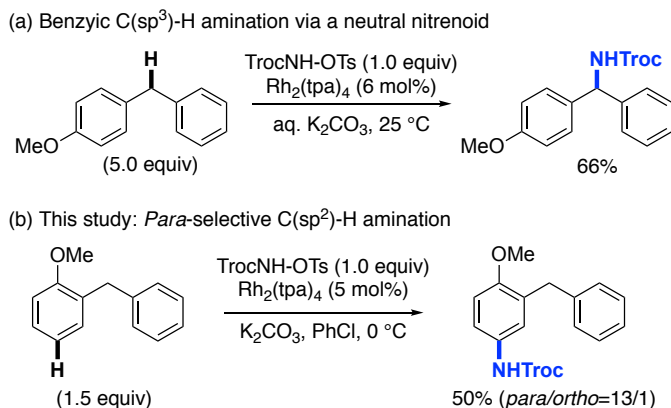
多官能基性化合物の位置選択的分子変換

Site-Selective Molecular Transformation of Multi-Functionalized Compounds

京都大学化学研究所 精密有機合成化学研究領域 上田 善弘

研究成果概要

窒素官能基は医薬品や天然物の生物活性や、機能性材料の機能発現に関わる重要な官能基である。近年、最も直接的な窒素官能基導入法として、C-H アミノ化反応が活発に研究されている。ロジウム二核錯体はナイトレノイドを形成することで、C(sp³)-H アミノ化反応を進行させることが古くから知られており、天然物合成にも広く利用されてきた (Scheme 1a)。本研究では C(sp³)-H 存在下、アルコシアレーンの分子間 C(sp²)-H アミノ化がパラ位選択的に進行することを見出した (Scheme 1b)。本反応はベンゼン環のみならず、ピリジンやピリミジン等のヘテロ環化合物においてもアルコシ基パラ位選択的に進行した。また、多数の C(sp³)-H 結合を有する代表的なホスト分子として知られる、カリックスアレーン誘導体の直接的かつ位置選択的 C(sp²)-H アミノ化を行うことができた。本反応が化学選択的かつ位置選択的に進行する要因を探るべく、反応機構解析を行った。速度論的同位体効果およびラジカルプローブ実験から本反応がロジウムナイトレノイドに対する芳香族求電子置換反応によって進行することが示唆された。そこで、DFT 計算によって遷移状態探索を行うと、活性化エネルギーは 11.3 kcal/mol とそれほど高い障壁を有していないことがわかり、本経路の妥当性を示すことができた (Figure 1)。多官能基性天然物等の直接的かつ位置選択的 C-H アミノ化への展開が期待される



Scheme 1. Dirhodium-Catalyzed C-H Amination

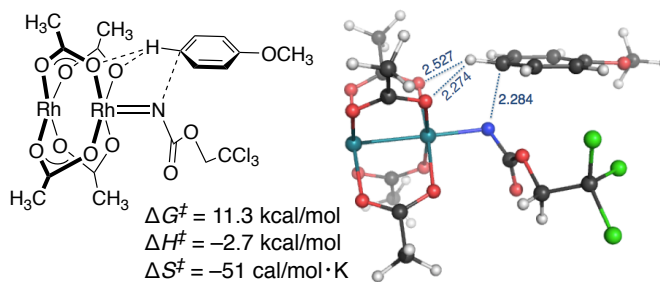


Figure 1. A Proposed Transition State

発表論文(謝辞あり)

K. Arai, Y. Ueda, K. Morisaki, T. Furuta, T. Sasamori, N. Tokitoh, T. Kawabata, *Chem. Commun.*, in press. DOI:10.1039/C7CC09952E

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、巨大ウイルスおよびウイルスゲノムの解析・関連ツール開発を行うと同時に、微生物生態学関連のバイオフィンフォマティクス研究を行った。

具体的には、(1)メガウイルス科の定量的多様性解析(三原知子他、李岩沢他、Florian Proding 他)、(2)北極圏における巨大ウイルスの生物地理(遠藤寿他)、(3)東京理科大との共同による巨大ウイルス・メデューサウイルスのゲノム解析(吉川元輝他)、(4)生物炭素ポンプを駆動する真核ウイルスの同定(ロマン・ブラン＝マチュー、金子博人他)、(5)農学研究科との共同研究による、大阪湾および Tara Oceans メタゲノムデータを利用したウイルスゲノムの決定(西村陽介他)と、海洋ウイルスの局所的生産、日周変動の解析(吉田天士他)、(6)広島大学との共同の *Ralstonia* ファージ XacN1 のゲノムの解析(吉川元貴他)、(7)ウイルスーホストデータベースの開発(山本留美子他)、(8)ウイルスゲノムの分類法の開発(西村陽介他、黒西愛他)。ウイルス関連以外の研究では、(9)近畿大学との共同により、リパクレオン及びガンキリンが腸内細菌叢に及ぼす影響の評価(西山拓輝他)、(10)腸内細菌叢のネットワーク解析(加藤恭崇他)、(11)KO の予測ツールの開発(荒巻拓哉他)、(12)メタゲノム解析ツールの開発(高見英人、五斗進他)、(13)珪藻、パルマ叢のゲノム解析(ロマン・ブラン＝マチュー他)、(14)青山研との共同による PIP5K の分子進化解析(ロマン・ブラン＝マチュー他)、(15)ポリケチド合成酵素機能予測法の開発(清水祐吾他)、(16)MGENES と OC データベースの整備を行った(五斗進他)。

発表論文(謝辞あり)

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

Nishiyama H., Nagai T., Kudo M., Okazaki Y., Azuma Y., Watanabe T., Susumu G., Ogata H., Sakurai T. Supplementation of pancreatic digestive enzymes alters the composition of intestinal microbiota in mice. Biochem. Biophys. Res. Commun., pii: S0006-291X(17)32108-3., (2017).

Matsui T., Yoshikawa G., Mihara T., Chatchawankanphanich O., Kawasaki T., Nakano M., Fujie M., Ogata H., Yamada T. Replications of two closely related groups of jumbo phages

show different level of dependence on host-encoded RNA polymerase. *Front. Microbiol.*, 8, 1010, doi:10.3389/fmicb.2017.01010 (2017).

Nishimura Y., Yoshida T., Kuronishi M., Uehara H., Ogata H., Goto S. ViPTree: the viral proteomic tree server. *Bioinformatics*, 33, 2379-2380, doi:10.1093/bioinformatics/btx157 (2017).

Shimizu Y., Ogata H., Goto S. Discriminating the reaction types of plant type III polyketide synthases. *Bioinformatics*, 33, 1937-1943, doi:10.1093/bioinformatics/btx112 (2017).

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., Yoshida T. Environmental viral genomes shed new light on virus-host interactions in the ocean. *mSphere*, 2, e00359-16 (2017).

発表論文(謝辞なし)

Carradec Q., Pelletier E., Da Silva C., Alberti A., Seeleuthner Y., Blanc-Mathieu R., Lima-Mendez G., Rocha F., Tirichine L., Labadie K., Kirilovsky A., Bertrand A., Engelen S., Madoui M.-A., Meheust R., Poulain J., Romac S., Richter D., Yoshikawa G., Dimier C., Kandels-Lewis S., Picheral M., Searson S., Tara Oceans Coordinators, Jaillon O., Aury J.-M., Karsenti E., Sullivan M.B., Sunagawa S., Bork P., Not F., Hingamp P., Raes J., Guidi L., Ogata H., de Vargas C., Iudicone D., Bowler C., Wincker P. A global ocean atlas of eukaryotic genes. *Nat. Commun.*, 9, 373, doi:10.1038/s41467-017-02342-1 (2018).

海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究

Research in evolution and ecology of marine planktonic communities

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

研究成果概要

My current projects are as follow:

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

To conduct these research projects I make use of the SuperComputer System of Institute for Chemical Research, Kyoto University. I am using various software to reconstruct phylogenies (phylobayes, RaXML, etc3 package), to assemble genomes (Spades and ABySS), to trim and map short read sequences (trimmomatic, bowtie, bwa), to perform sequence alignment and manipulation (Diamonds, Blast, Seqtk, Emboss) and to run my own scripts for parsing and downstream analysis.

発表論文(謝辞あり)

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* 2,e00359-16 (2017)

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 T., Two asian jumbo phages, ϕ RSL2 and ϕ RSF1, infect *Ralstonia solanacearum* and show common features of ϕ KZ-related phages. *Virology* **494**, 56-66 (2016)

発表論文(謝辞なし)

Carradec Q, Pelletier E, Da Silva C, Alberti A, Seeleuthner Y, Blanc-Mathieu R, Lima-Mendez G, Rocha F, Tirichine L, Labadie K, Kirilovsky A, Bertrand A, Engelen S, Madoui MA, Méheust R, Poulain J, Romac S, Richter DJ, Yoshikawa G, Dimier C, Kandels-Lewis S, Picheral M, Searson S; Tara Oceans Coordinators, Jaillon O, Aury JM, Karsenti E, Sullivan MB, Sunagawa S, Bork P, Not F, Hingamp P, Raes J, Guidi L, Ogata H, de Vargas C, Iudicone D, Bowler C, Wincker P., A global ocean atlas of eukaryotic genes. *Nat Commun.* **9**, 373 (2018)

平成 29 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

メタゲノミクスを利用した海洋プランクトン生態系に関する研究
Study on the ecology of marine phytoplankton using metagenomics

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、巨大核細胞質 DNA ウイルス (NCLDV) の全球的な分布と多様性を解明する目的で、大規模な海洋調査 *Tara Oceans Expedition* で得られたメタゲノムデータを解析した。結果、NCLDV が真核生物の分布が両極域で減少することを明らかにした。また、北極海の NCLDV 群集において、固有種の割合が極めて高かったことが示唆された。

本研究において、群集構造解析に必要なリファレンス系統樹の作成には *mafft* や *RaXML* を使用し、遺伝子カタログから NCLDV 由来の DNA ポリメラーゼ B (polB) 遺伝子を抽出する処理においては *hmmer* や *pplacer* といったソフトウェアを使用した。また、本システムの計算資源を利用して、自身で作成したスクリプトを実行した。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

Endo H, Hattori H, Mishima T, Hashida, G, Sasaki H, Nishioka J, and Suzuki K. Phytoplankton community responses to iron and CO₂ enrichment in different biogeochemical provinces of the Southern Ocean. *Polar Biol.*, doi:10.1007/s00300-017-2130-3, 2017.

ウイルスゲノムの解析

Viral genome analysis

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、新規ウイルスゲノムの解析を行った。具体的には、青枯病菌に感染するファージ ϕ RP12 および ϕ RP31、カンキツかいよう病菌に感染するファージ XacN1、アカントアメーバに感染する巨大ウイルス Medusavirus のそれぞれについて、ゲノムを決定し、タンパク質遺伝子の推定と機能予測・tRNA 遺伝子の予測を行った。さらに、分子系統解析などのバイオインフォマティクス解析を行った。

ϕ RP12 および ϕ RP31 に関しては、RNA ポリメラーゼ (RNAP) の β および β' サブユニット遺伝子の系統発生解析を行い、祖先ウイルスにおいて起こった遺伝子重複の結果として、ビリオン RNAP と初期発現 RNAP の遺伝子が生じたことを分子系統学的に明らかにした[1]。

XacN1 に関しては、既知のウイルスとしては最多の tRNA 遺伝子を持ち、これらは 20 種類全てのアミノ酸に対応していることが明らかになった。さらに、tRNA 遺伝子とコドン利用頻度の適合性に関する解析を行った結果、XacN1 が持つ tRNA 遺伝子は自身のコドン頻度が宿主のコドン頻度よりも高いコドンに対応する傾向が見出された[2]。

Medusavirus に関しては、核細胞質性大型 DNA ウイルス (Nucleocytoplasmic Large DNA Virus, NCLDV) に共通して保存されている遺伝子群 (コア遺伝子) 47 個のうち 15 個を保持することが判明した。また、分子系統解析により、Medusavirus が既知のウイルスファミリーと進化的に遠い関係にあることが明らかになった。

発表論文(謝辞あり)

- [1] Matsui, T., Yoshikawa, G., Mihara, T., Chatchawankanphanich, O., Kawasaki, T., Nakano, M., Fujie, M., Ogata, H., and Yamada T., Replications of two closely related groups of jumbo phages show different level of dependence on host-encoded RNA polymerase. *Front. Microbiol.*, **8**, 1010 (2017).
- [2] Yoshikawa, G., Askora, A., Blanc-Mathieu, R., Kawasaki, T., Li, Y., Nakano, M., Ogata, H., and Yamada T., *Xanthomonas citri* jumbo phage XacN1 exhibits a wide host range and high complement of tRNA genes. *Sci. Rep.* (accepted).

発表論文(謝辞なし)

なし。

16S rRNA 遺伝子を標的としたアンプリコン配列の解析による
パンクレリパーゼ投与マウスの腸内細菌叢の解析
Analysis of intestinal microbiota of pancrelipase treated mice
by 16S rRNA gene amplicon sequencing

京都大学化学研究所化学生命科学研究領域 西山 拓輝

膵消化酵素補充剤は、慢性膵炎患者等において膵外分泌不全により不足している消化酵素を補充することで食物の消化不良を緩和する薬である。本薬剤の主な作用機序は食物消化の補助だと考えられている。しかし、慢性膵炎モデルマウスを用いた研究では本疾患の発生に腸内細菌が関わっていることが示唆されており^{1,2}、慢性膵炎患者と健常者の間で腸内細菌叢の細菌組成が異なることが知られている^{3,4}。従って、膵消化酵素補充剤は消化不良の改善に加え、腸内細菌叢の組成にも影響する事で治療効果を発揮するとの仮説を立てた。本研究は近畿大学の櫻井俊治博士のグループと行った共同研究であり、実験は櫻井俊治博士等が行い、計算機解析・解釈は筆者が行った。

本仮説の検証のため、パンクレリパーゼ(膵消化酵素補充剤)投与群とコントロール群のマウスを用意した。これらの各個体の盲腸、横行結腸、糞便から腸内細菌の 16S rRNA 遺伝子を抽出し、PCR で増幅したアンプリコンの配列を次世代シーケンサー (Illumina MiSeq) で解析した。取得した遺伝子配列をリファレンスデータベースの遺伝子配列と比較し、配列一致度が 97%以上の遺伝子配列を同じ操作的分類群に分類した。これらの操作的分類群を基に各サンプルの細菌組成の類似度(β 多様性)を weighted UniFrac 距離⁵を用いて評価した。また、同じ生物学的分類が割り当てられた操作的分類群を 1 つにまとめ、DESeq2 の negative binomial Wald test⁶により有意に変動した生物学的分類群を同定した。

各サンプル間の β 多様性を評価し、主座標分析で解析した結果、パンクレリパーゼ投与群とコントロール群の間で腸内細菌叢の細菌組成が大きく異なることが分かった。さらに、10 個の生物学的分類群の相対頻度がパンクレリパーゼ投与群とコントロール群の間で有意($FDR < 0.1$)に変化していた。これらの内、腸内壁の保護に役立つことが知られている *Akkermansia muciniphila*⁷ の相対頻度がパンクレリパーゼ投与群において最も顕著に増加していた。本研究は、既存の作用機序に加え腸内細菌叢の細菌組成の変化を引き起こすことで膵消化酵素補充剤が効果を発揮することを示唆した。

参考文献:

1. A. Ochi, A.H. Nguyen, A.S. Bedrosian, et al., MyD88 inhibition amplifies dendritic cell capacity to promote pancreatic carcinogenesis via Th2 cells, J. Exp. Med. 209 (2012)

1671e1687.

2. T. Watanabe, Y. Sadakane, N. Yagama, et al., Nucleotide-binding oligomerization domain 1 acts in concert with the cholecystokinin receptor agonist, cerulein, to induce IL-33-dependent chronic pancreatitis, *Mucosal Immunol.* 9 (2016) 1234e1249.
3. S.M. Jandhyala, A. Madhulika, G. Deepika, et al., Altered intestinal microbiota in patients with chronic pancreatitis: implications in diabetes and metabolic abnormalities, *Sci. Rep.* 7 (2017) 43640.
4. M. Signoretti, R. Roggiolani, C. Stornello, et al., Gut microbiota and pancreatic diseases, *Minerva Gastroenterol. Dietol.* 63 (2017) 399e410.
5. C. Lozupone, R. Knight, UniFrac: a new phylogenetic method for comparing microbial communities, *Appl. Environ. Microbiol.* 71 (2005) 8228e8235.
6. M.I. Love, W. Huber, S. Anders, Moderated estimation of fold change and dispersion for RNA-seq data with DESeq2, *Genome Biol.* 15 (2014) 550.
7. C. Grander, T.E. Adolph, V. Wieser, et al., Recovery of ethanol-induced *Akkermansia muciniphila* depletion ameliorates alcoholic liver disease, *Gut* (2017), <https://doi.org/10.1136/gutjnl-2016-313432>.

発表論文(謝辞あり):

H. Nishiyama, T. Nagai, M. kudo, Y. Okazaki, Y. Azuma, T. Watanabe, S. Goto, H. Ogata, Supplementation of pancreatic digestive enzymes alters the composition of intestinal microbiota in mice, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 495 (2018) 273-279

ゲノムデータに基づく知識発見

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、ウイルスゲノム配列の分類法の検討を行った。ウイルスの分類は、ウイルスの形態、宿主域、ゲノムの構成(DNA/RNA、1本鎖/2本鎖)、複製機構、核酸・アミノ酸配列の類似性など、さまざまな基準の組み合わせから決定されている。病原体の同定や、生態学的な解析を行う際に、ウイルスの分類は不可欠な第一歩である。最近、ウイルスの分類・命名の国際組織である国際ウイルス分類委員会(ICTV)では、メタゲノム解析から見つかった配列情報のみが見つかったウイルスも公式の分類体系に組み入れられるようになり、配列情報に基づいた正確なウイルス分類の必要性は高まってきている。

新たなウイルス配列を得たとき、既存のウイルス配列との配列比較から、そのウイルスと最も良く似たウイルス配列を見つけることが出来る。しかし、そのウイルスを分類しようとした時、既知ウイルスと同じ種のウイルスである、または同じ属の違う種である、ということは最もよく似ていることだけから判断することは出来ない。そこで我々は、既存のウイルス配列の種、属、科、目それぞれの類似性の閾値を設定して、正確な分類を実現することを考えた。また、ウイルスはかなり多様なため、このときの類似性の閾値はウイルスグループごとに異なると考えられる。

本研究では、Virus-Host DB (<http://www.genome.jp/virushostdb/>)に収録されている既知ウイルスの 8198 ゲノムの全配列 vs 全配列の配列類似性を計算し、ウイルスグループごとの配列類似性の閾値(下限値)を算出した。次に、8198 ゲノムからランダムに選んだ 20%の配列をクエリ、残りの配列をレファレンスとして、クエリと最も高い配列類似性を持つレファレンス配列(ベストヒット)の分類情報をクエリに割り当てる方法と、ベストヒットの分類情報を配列類似性がレファレンスウイルスの種・属・科・目のそれぞれの閾値を満たす場合のみ割り当てる方法を比較した。その結果、閾値を用いた方法ではベストヒットのみを用いた場合より正確に分類することが出来た。

発表論文(謝辞あり) なし

発表論文(謝辞なし) 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

This research was conducted in collaboration with Graduate School of Agriculture of Kyoto University. Megaviridae is a proposed family of eukaryotic viruses classified in the group of nucleocytoplasmic large double-stranded DNA viruses (NCLDV). They possess large genomes and atypical gene content as compared to other viruses. Genomic data suggest that the diversity of Megaviridae is vast and perhaps greater than that of cellular organisms. In the present work, we aimed at characterizing the diversity of Megaviridae at ecologically different sites using high-throughput sequencing analysis of PCR-amplified DNA polymerase family B (PolB) gene.

PolB is encoded in all available Megaviridae genome sequences but its high level of divergence makes it impossible to design a single PCR primer pair that would amplify all known Megaviridae PolB sequences. To overcome this limitation, we designed 82 degenerate primer pairs that target a conserved domain of PolB in 923 PolB sequences of isolated and environmental Megaviridae species. In silico tests demonstrated that this set of primer pairs specifically covers 97.4% of the 923 PolB sequences.

We tested all 82 primer pairs on 5 environmental DNA samples extracted from water samples collected at Osaka Bay, Japan Sea, Miyuki hot spring and a mangrove site of Ishigaki island. A preliminary analysis of the reads from Osaka Bay sample revealed that there are >5,000 OTUs for Megaviridae at 97%-identity clustering. Estimates of Megaviridae species diversity in these 5 environments will be presented along with the bioinformatics pipeline we developed to analysis this unique dataset.

隠れマルコフモデルによるホモロジー検索に基づくタンパク質機能推定法

Functional annotation of protein sequences by hidden Markov model

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

研究成果概要

KEGG Orthology (KO) は遺伝子を機能と配列類似性を元に分類したもので、各 KO の ID (K 番号) と遺伝子を対応させることで機能アノテーションを行える。機能未知のタンパク質配列と KO を対応させるツールとしては、現在 BlastKOALA と GhostKOALA が主に使われており、一般に正確性では前者、計算時間では後者がより優れる。

本研究では既存のツールに代わる新たな手法として、HMMER を利用したタンパク質機能推定法の確立を目指している。各 KO のレファレンス配列からその KO 固有のプロファイル HMM を作成し、クエリのタンパク質の検索に用いた。検索結果のスコアが各 KO に決められた閾値を超えた場合にその配列は当該 KO に含まれると推定した。

本手法の評価のため、まず KEGG GENES の原核生物の遺伝子からいくつかの属を抜き取り、残りの配列からプロファイル HMM を作成した。そして抜き取った属のうち KO が手動でアノテーションされている生物種の遺伝子を選び、それをクエリとしてアノテーションを行った。また同じクエリを BlastKOALA、GhostKOALA を用いて同様にアノテーションした。

この結果、BlastKOALA、GhostKOALA はいずれも K 番号がついた遺伝子の 90% 以上を正しくアノテーションしたが、本手法では 87% だった。一方実行時間は本手法が BlastKOALA の約 60 倍、GhostKOALA の約 1.3 倍速かった。

以上より、HMMER を用いたタンパク質機能アノテーションは計算時間の点で従来手法よりも優れていることがわかった。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年は共になし。

平成 29 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

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

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

研究成果概要

本研究では、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、腸内メタゲノムの情報に基づいて、腸内細菌の共起ネットワークにおける各種統計値を計算した。

近年、次世代シーケンサーの発達で微生物叢のゲノム解析が可能となり、腸管内の細菌叢の生理的機能に対する理解が飛躍的に進んでいる。そして、腸内細菌叢が疾患の発症をはじめとする生体现象と深く関与することが明らかになりつつある。共起ネットワークはノード間の共起性・共存性を表すために、ソーシャルネットワークを初め様々な分野で利用されている解析手法である。本研究では、細菌の共存関係と疾患との関係性に関する考察を得ることを目的として、細菌の共起ネットワークを構築し、ネットワークの幾何学的な特徴を表す各種統計値の計算を試みた。

今後は、今回の手法を用いて、様々な疾患について腸内細菌叢と疾患の関係性についての考察を得るべく研究を進めていく方針である。

発表論文（謝辞あり）

発表論文（謝辞なし）

本年度は共になし。

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

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

研究成果概要

本年度私は、種間相互作用の解析から海洋微生物の生態系の環境への影響に迫るために、スーパーコンピュータシステムを利用して 2 つの異なる仕事を行った。

1/ 地球規模のメタゲノムデータセットを用いた海洋ウイルスの共起ネットワークの再構築。海洋探査船タラ号による地球規模のサンプリングで得られたメタゲノムデータセット (Sunagawa *et al.*, 2015) を用いて、WGCNA 法 (Langfelder and Horvath, 2008) により海洋ウイルスの重み付き共起ネットワークを再構築した。この共起ネットワークと、同じく海洋探査船タラ号により得られた地球規模の生物炭素ポンプのデータセット (Guidi *et al.*, 2016) を結び付けて、生物炭素ポンプを駆動する海洋ウイルスを同定するべく現在研究を進めている。生物炭素ポンプとは、プランクトンが深海に沈降することにより二酸化炭素が海洋に固定される現象であり、海洋微生物の生態系が生物炭素ポンプに及ぼす影響は環境変動の観点からも注目されている。

2/ 大阪湾での 24 時間サンプリングで得られたサンプルのアンプリコン解析。大阪湾での 24 時間サンプリングで得られたサンプルの 16S rRNA 遺伝子アンプリコンを用いて、各時間における海洋微生物の組成を計算し、海洋微生物生態系の時間帯における変化の解析に役立てた。この研究は、京都大学農学研究科の海洋分子微生物学研究室との共同であり、発表済みである (Yoshida *et al.*, 2018)。

発表論文 (謝辞あり)

Yoshida, T. *et al.* Locality and diel cycling of viral production revealed by a 24 h time course cross-omics analysis in a coastal region of Japan. *IMSE J.* doi:10.1038/s41396-018-0052-x (2018)

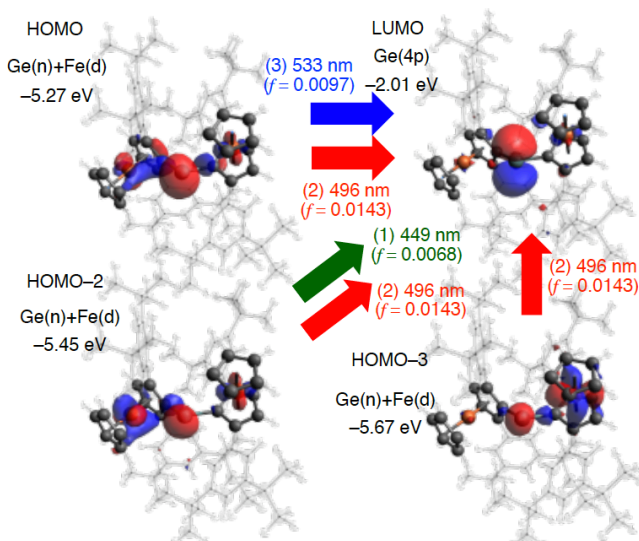
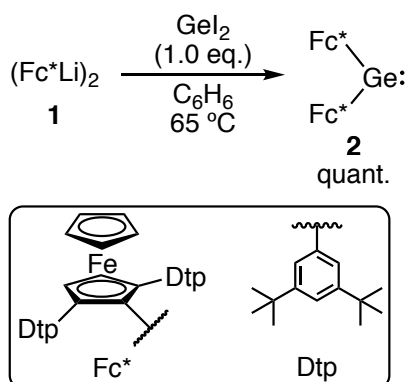
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明

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、溶液中でも二量化しない安定なゲルミレンとして、立体保護と酸化還元状態の安定化を目的としてかさ高いフェロセニル基の導入を考え、かさ高いビス(フェロセニル)ゲルミレン(**2**)の合成・単離を目的として検討を行った。単離した(Fc^*Li)₂と GeI_2 の反応により Fc^*_2Ge (**2**) を合成・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。ゲルミレン **2** は UV/vis スペクトルにおいて、約 405 nm および 475 nm に二つの特徴的な吸収をしめし、THF 中とトルエン中のスペクトルで顕著な変化は見られなかった。そこで、吸収の由来となる電子遷移を知る目的で、Gaussian 09 プログラムを用い、TDDFT 計算を行った。計算レベルは、TD-B3PW91/6-311G(C, H); 6-311G(3d)(Fe, Ge)を用いた。その結果、これらの遷移は、n-p 遷移、d-p 遷移が混じった吸収であることがわかり、弱い n-p 遷移は比較的大きな d-p 遷移と吸収が重なっているために顕著な溶媒効果が観測されなかったことが判った。



発表論文(謝辞あり): Suzuki, Y.; Sasamori, T.; Guo, J.-D.; Tokitoh, N. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 364.

発表論文(謝辞なし): 特になし

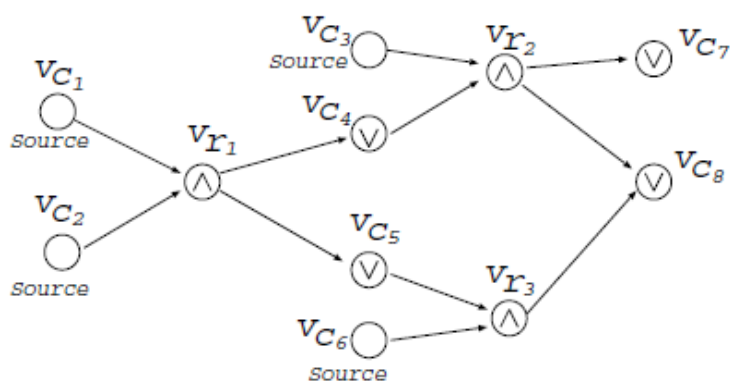
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発

Developing control methods for biological networks on mathematical models

京都大学化学研究所数理生物情報 田村 武幸

研究成果概要

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



ブーリアンモデルの代謝ネットワークにおいては各ノードに0か1が割り当てられる。化合物に1が割り当てられれば、その化合物は生成可能あるいは存在するということを意味し、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、ブーリアンモデルのみならず実数値モデルでも、ネットワークを制御する手法の計算を行った。

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 ゾーン気相成長法(2Z-CVD 法)を開発した。2Z-CVD 法により GNR を高効率合成することでボトムアップ型 GNR 薄膜の単離が可能となり、実験的な物性計測に成功している。

今回、アームチェア型 GNR の多層構造について低温 STM 観察により詳細な配項構造を明らかにした。[1] 低温 STM 観察において、分子幅の異なる 5-AGNR と 7-AGNR の最上層について、幅のせまい 5-AGNR では通常予期される face-on 配向を取っていたが、一方で幅の広い 7-AGNR において Edge-on 配向が観察された。多層 GNR の配向の違いに関して、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 DFTB+モジュールを用いて Au(111)面上の face-on GNR および、face-on GNR 上に face-on または edge-on 配向した GNR のエネルギーを計算し、生成エネルギーの差分をセル内の GNR 分子で規格化することで、相対安定化エネルギーを求めた。その結果、5-AGNR では GNR 上に face-on 配向が有利であることに対し、7-AGNR では GNR 上では edge-on 配向が有利であることが明らかとなり、実験結果を支持した。

また、ばね状の有機分子が分子歪みを駆動力とする新しい形式の骨格変換反応を見出し、分子の平面化エネルギーが駆動力であることを示した。[2]

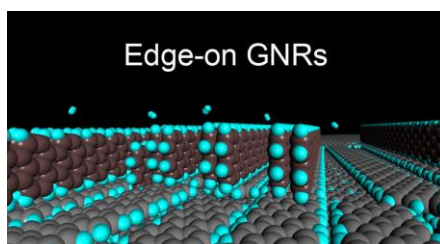


Figure 1. Orientation of multi-layered 7-AGNR.

発表論文(謝辞あり)

- [1] T. Kojima, Y. Bao, C. Zhang, S. Liu, H. Xu, T. Nakae, K. P. Loh, H. Sakaguchi, Langmuir 2017, 33(40), 10439-10445.
- [2] A. Shiotari., T. Nakae, K. Iwata, S. Mori, T. Okujima, H. Uno, H. Sakaguchi, Y. Sugimoto Nat. Commun. 2017, 8, 16089.

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

汎用分子動力学シミュレーションを用いて、ネマチック液晶に対する不純物効果、外場応答に対するスリッパリー層の効果を調べた。バルクの液晶分子は、アスペクト比 3 の Gay-Berne 粒子を用いる。また、壁は同じ Gay-Berne 粒子を x 軸方向に揃えたもので記述することにする。これにより、外場やスリッパリー層がない状態では、 x 軸方向に向いたプラナー配向を示すことが予想される。デフォルトのシミュレーションソフトでは、Gay-Berne 粒子に対して、外場によって配向を制御することができなかった。そこでソースを編集し、外場 E を掛けることができるように改造した。不純物は、0%~10%の Gay-Berne 粒子を任意に選び、Lennard-Jones 粒子で置き換えることで導入することにした。GB 粒子と壁粒子間、GB 粒子と LJ 粒子、LJ 粒子と壁間の相互作用の強さは任意に変えることができる。

図 1 は、不純物を含まない系(左)と含む系(右)の粒子は一のスナップショットである。緑粒子は GB 粒子を表し、右図では、不純物粒子が分かるよう半透明にした。青粒子は壁の粒子、灰粒子は不純物である。相互作用の強さは、 $\epsilon_{GG} = 1, \epsilon_{GW} = 0.25, \epsilon_{GL} = 0.5, \epsilon_{LL} = 1, \epsilon_{WL} = 3$ とした。(G は GB 粒子、W は壁粒子、L は LJ 粒子を表す)。温度は、 $T/\epsilon_{GG} = 0.9$ としており、バルクではネマチック相を表す。不純物がない系では、外場に対し、フレデリクス転移と電場消去後、もとの配向に戻ることが確認できた。一方、不純物を含む系では、ネマチック秩序が壁付近で減少しており、特に不純物が壁を覆いつくすときには、アンカリング強度が極めて小さくなり、外場に対して変形したのち復元力を示さないことが分かった。

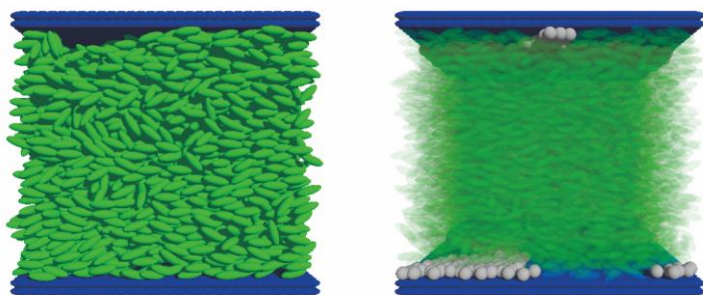


図 1 分子動力学シミュレーションによる不純物を含まないネマチック液晶と(左)と含む系(右)のスナップショット。不純物の数密度は 10%

発表論文 (謝辞あり)

Armand Barbotab and Takeaki Araki, “Colloidal suspensions in one-phase mixed solvents under shear flow”, *Soft Matter* **13**, 5991-5921 (2017).

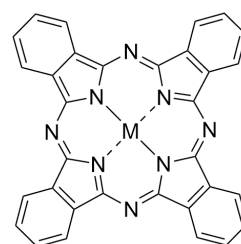
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析

Design and theoretical analysis of molecular conducting and magnetic materials

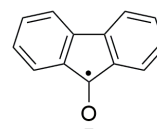
京都大学大学院理学研究科化学専攻 分子性材料分科 中野 義明

研究成果概要

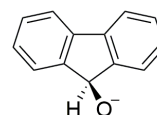
$\text{Al}^{\text{III}}\text{Cl}(\text{Pc}^{2-})$ 、 $\text{Ga}^{\text{III}}\text{Cl}(\text{Pc}^{2-})$ を $(\text{Bu}_4\text{N}^+)\text{Br}^-$ の存在下、*o*-ジクロロベンゼン中で、過剰量のナトリウムフルオレンケチル $\text{Na}^+(\text{Fl}=\text{O}^-)$ で還元したところ、 $(\text{Bu}_4\text{N}^+)_2[\text{M}^{\text{III}}(\text{HFl}=\text{O}^-)(\text{Pc}^{3-})]^- (\text{Br}^-) \cdot 1.5\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ ($\text{M} = \text{Al} ()$ and $\text{Ga} ()$)を得た。UV-Vis-NIR スペクトルを測定したところ、1000 nm 付近の強い吸収と Q 帯、Soret 帯のブルーシフトといった Pc^{3-} に特徴的なスペクトルが観測され、これらの塩に Pc^{3-} が含まれていることを示している。また、赤外スペクトルを測定したところ、 $\text{Na}^+(\text{Fl}=\text{O}^-)$ で観測された C=O 伸縮モードに帰属されるバンドが、 $\text{HFl}=\text{O}^-$ では観測されなかった。X 線構造解析の結果、 $\text{HFl}=\text{O}^-$ の酸素原子が金属イオンに配位していることが分かった。また、 $\text{HFl}=\text{O}^-$ の酸素原子がフルオレン平面から面外に位置し、C-O 結合長がフルオレンやフルオレンケチルの C-O 結合長よりも長いことが分かった。そこで、UM11/6-31+G(d,p) レベルで二重項状態の $[\text{Al}^{\text{III}}(\text{HFl}=\text{O}^-)(\text{Pc}^{3-})]^-$ 、一重項状態と三重項状態の $[\text{Al}^{\text{III}}(\text{Fl}=\text{O}^-)(\text{Pc}^{3-})]^{2-}$ の構造最適化を行ったところ、二重項状態の $[\text{Al}^{\text{III}}(\text{HFl}=\text{O}^-)(\text{Pc}^{3-})]^-$ が実験結果を再現し、スピン密度は Pc^{3-} に局在していることを明らかにした。



MPc (M = Al and Ga)



$\text{Fl}=\text{O}^-$



$\text{HFl}=\text{O}^-$

発表論文(謝辞あり)

1. D. V. Konarev, S. S. Khasanov, M. Ishikawa, Y. Nakano, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **Chem. Asian J.**, 12(8), 910-919 (2017)

発表論文(謝辞なし)

2. L. Chung Liu, Y. Jiang, H. M. Mueller-Werkmeister, C. Lu, G. Moriena, M. Ishikawa, Y. Nakano, H. Yamochi, R. J. D. Miller, **Chem. Phys. Lett.**, 683, 160-165 (2017)
3. Y. Yoshida, Y. Nakamura, H. Kishida, H. Hayama, Y. Nakano, H. Yamochi, G. Saito, **CrystEngComm** 19(26), 3626-3632 (2017)
4. D. V. Konarev, M. A. Faraonov, A. V. Kuzmin, S. S. Khasanov, Y. Nakano, S. I. Norko, M. S. Batov, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, **New J. Chem.** 41(14), 6866-6874 (2017)
5. Y. Nakano, Y. Takahashi, K. Ishida, M. Ishikawa, H. Yamochi, M. Uruichi, **Mater. Chem. Front.**, DOI: 10.1039/c7qm00575j

量子化学計算と固体 NMR を用いた新規無機物質の構造解析
Structure analysis of novel inorganic materials by using quantum chemical computing and
solid-state NMR

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子構造化学研究室
野田 泰斗

研究成果概要

酸化物に代表される無機化合物は広範な用途に用いられているが、構造の基本となる配位構造が限定されていることなどから得られる機能には大きな制約がある。このような現状の中、物質中に酸素(O²⁻)、窒素(N³⁻)、水素(H⁻)などのアニオンが複数含まれる「複合アニオン化合物」では、特異な局所構造が得られることなどの優位な点がある。この点を活かすことにより様々な分野において既存とは全く異なる機能が発現する可能性がある。複合アニオン化合物では局所構造の解析と制御が鍵になると考えられるが、現状の技術では複合アニオン化合物の特異な局所構造を得ることは難しい。例えば、標準的な X 線回折は酸素と窒素の区別がつかず、中性子線回折は酸素とフッ素を識別することは困難である。また、酸素水化物中の H-イオンの化学シフト位置は電子が多いため負の値を示しそうであるが正の値をとり、通常の H+イオンと区別することが困難である。NMR は物質が結晶でも非結晶でも局所構造を探ることのできる強力な手法であるが、既存物質の情報を基に信号を帰属しており、全くの新規物質の場合には信号の帰属が著しく難しい場合がある。そこで MS の NMR CASTEP を用いた DFT 計算により、新規化合物の NMR 信号予測ならびに信号を帰属し局所構造の同定を行うことを目的に利用を開始した。

今後の研究計画

本年は申請者が DFT 計算を行ったことがなかったため、既報の物質と計算結果を再現できるか検証するところから始めた。切断エネルギーや逆ベクトル点の設定だけではなく、構造最適化が大きく結果に影響することがわかった。今後は、本年得られた構造最適化や計算条件の最適化方法を活かして、新規物質の構造決定を行っていく予定である。具体的には、遷移金属酸水素化物や窒素ドーピング硫化燐ガラスセラミックスなどをターゲット物質として考えている。

近赤外色素を用いる光音響腫瘍イメージング
Photoacoustic Tumor Imaging Utilizing Near-Infrared Dyes

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 三木康嗣

研究成果概要

光および光音響イメージングは、腫瘍の早期発見を可能にする手法として近年注目されている。これらの撮像法を利用し腫瘍を可視化するためには、腫瘍特異的に蓄積し、生体透過性の高い近赤外光を吸収することで信号を発する造影剤が必要である。ボロンジピロメテンの二量体 (TBD と略す) は、近赤外領域において高いモル吸光係数を示し、蛍光および光音響信号を発することから、生体内腫瘍イメージングの造影分子として適する。本研究では、我々が開発したヒアルロン酸修飾法を利用し、ヒアルロン酸に TBD を結合した造影剤 **1** を開発した (Figure 1a)。マウスの尾静脈より造影剤 **1** を投与したところ、移植した腫瘍組織に効果的に蓄積した。光イメージングでは、シグナル・ノイズ比が 1.5 倍程度とあまり良い結果ではなかったが、光音響イメージングでは腫瘍周辺の信号強度が約 2.5 倍強調される結果となった (Figures 1b-e)。腫瘍集積性、血中滞留性はおのおの 17.8 %ID/g、15.6 %ID と高い値を示した。

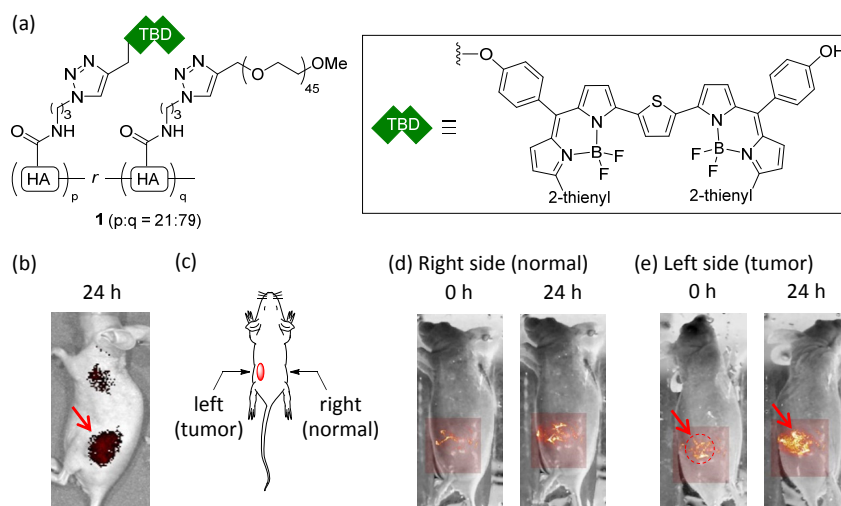


Figure 1. (a) TBD-grafted amphiphilic hyaluronic acid derivative **1**. (b) Fluorescence images (cps) of tumor-bearing mice 24 h after injection of **1** (100 μ L of a PBS solution, [TBD] = 5.0×10^{-4} M). (c) PA images were taken from a right side (non-tumor-bearing side) and a left side (tumor-bearing side). Representative PA images of tumor-bearing mice before and 24 h after injection of **1** taken from (d) a right side and (e) a left side. Arrows point out tumor sites. Mouse colon cancer cells (colon 26, 1×10^6 , RIKEN) were subcutaneously inoculated into the lower back of nude mice 1 week before imaging.

発表論文(謝辞なし) Miki, K.; Enomoto, A.; Inoue, T.; Nabeshima, T.; Saino, S.; Shimizu, S.; Matsuoka, H.; Ohe, K. *Biomacromolecules* **2017**, *18*, 249-256.

半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発
Development of efficient photocatalysts for water splitting

京都大学大学院 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 阿部研究室 東 正信

研究成果概要

これまでに、 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ が可視光照射下にて水を安定して酸化し、適切な水素生成系光触媒と組み合わせることで、可視光での水の全分解を実証してきた。この光触媒の価電子帯上端 (VBM) は、従来の酸化物やオキシハライド BiOX ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) と比べて大きく負側に位置していた。DFT 計算の結果から、本物質の VBM は幅広く分散した O-2p 軌道によって占められており、VBM が非酸素アニオン種で構成される従来の混合アニオン化合物とは異なっていた。VBM が酸素の軌道で形成されていることが水の酸化に対する高い安定性に寄与した可能性が考えられる。しかし、その特異的なバンド構造を有する起源は分かっておらず、この起源の解明は安定な可視光応答型光触媒の設計指針につながる事が期待される。

そこで本研究では、 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ と同型の Sillen-Aurivillius 型構造を有する $\text{Bi}_4\text{MO}_8\text{X}$ ($\text{M} = \text{Nb}, \text{Ta}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) について、カチオン種やアニオン種がバンド構造や光触媒活性に与える影響および安定性について検討した。可視光下における酸素生成活性評価の結果、全ての試料が水の酸化に対して高い安定性を示した。電気化学測定及び DFT 計算の結果、カチオン種やアニオン種を変えてもバンド構造にほとんど影響を与えず、 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ と同様に、いずれの $\text{Bi}_4\text{MO}_8\text{X}$ も価電子帯上端 (VBM) は主に O-2p 軌道によって占められており、これらの VBM は従来の酸化物やオキシハライドと比べて大きく負側に位置していることが明らかになった。さらに $\text{Bi}_4\text{MO}_8\text{X}$ は共通して、ペロブスカイト側に位置する Bi-6s が O-2p 軌道と強く相互作用する傾向が見られていた。この VBM が押し上げられる現象は、Bi-6s 軌道が O-2p 軌道と相互作用する Revised Lone Pair (RLP) モデルによって解釈することができ、本系においても、RLP モデルに基づく相互作用により、結果として VBM が従来の酸化物と比べ負側に形成されたと考えられる。こうした Bi-6s と O-2p 軌道の強い相互作用は、従来のオキシハライド (BiOX) では見られておらず、 $\text{Bi}_4\text{MO}_8\text{X}$ の基本骨格である Sillen-Aurivillius 型構造がこうした Bi-6s と O-2p 軌道の相互作用に重要な役割を果たしていると考えられる。この結果は、適切なバンドレベルと安定性を有する光触媒の開発に対して、有用な設計指針となることが期待される。

発表論文(謝辞あり)

- 1) H. Kunioku, M. Higashi, C. Tassel, D. Kato, O. Tomita, H. Kageyama,* and R.Abe*, *Chem. Lett.* 2017, **46**, 583–586.
- 2) H. Kunioku, M. Higashi, O. Tomita, M. Yabuuchi, D. Kato, H. Fujito, H. Kageyama,* and R.Abe*, *J. Mater. Chem. A*, 2018, **6**, 3100-3107.

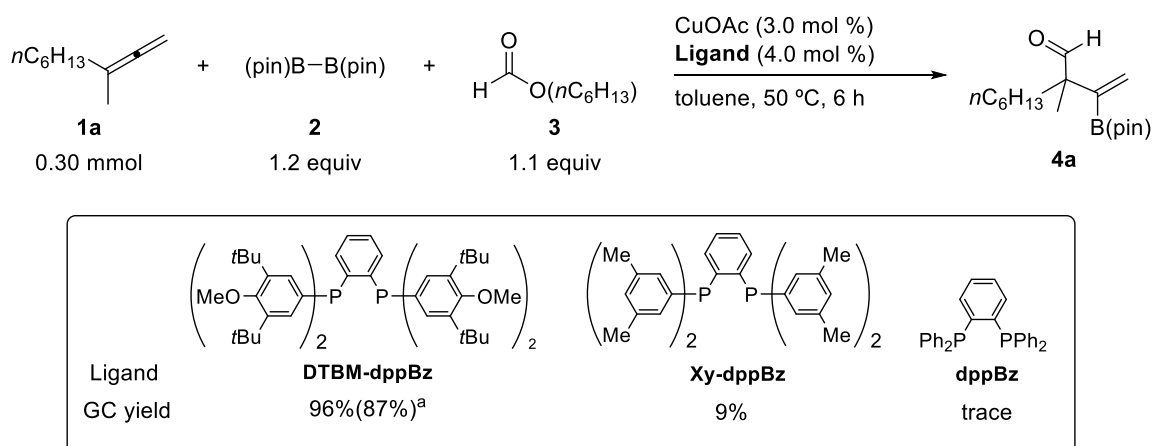
触媒有機化学に関する研究
Studies on Catalytic Organic Chemistry

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

1,2-ジエン (**1a**)、ビスピナコラートジボロン (**2**)、ギ酸ヘキシル (**3**) を基質として用い、反応条件の最適化を行った。その結果、酢酸銅(I)、配位子として DTBM-dppBz を用い、トルエン溶媒中 50 °C で 6 時間反応させることによりボラホルミル化反応が進行し、生成物 **4a** が高収率で得られた(スキーム 1)。一方、立体的に小さな dppBz、Xy-dppBz を配位子として用いた場合、収率が大幅に低下することが分かった。

Scheme 1. Ligand Effect of Boraformylation of Allene **1**.



基質適用範囲を検討したところ、様々な 1,2-ジエンで目的の反応が進行することが分かった。アセタールを有するアレンや、塩素官能基を有するアレンに対しては良好な収率で目的物が得られた。一方、ヨウ素官能基やエステル部位を有するアレンでは反応性が低下し、中程度の収率となった。本反応では、まず、 $B_2(pin)_2$ と銅カルボキシレートが反応しボリル銅種が生成する。次にこのボリル銅種がアレンに付加し、ボリル基置換アリル銅種が生じる。続いてこのアリル銅種とギ酸エステルが六員環遷移状態を経由しアリル銅種の γ 位で反応することにより中間体が生成する。本中間体から銅アルコキシドが脱離することで目的生成物が得られ、続く $B_2(pin)_2$ との反応により、ボリル銅種が再生することで触媒サイクルが完結すると考えられる。

発表論文(謝辞なし)

1) Fujihara, T.; Sawada, A.; Yamaguchi, T.; Terao, J.; Tsuji, Y. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, 56, 1539–1543.

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。また、酸素欠損の生成エネルギーについても、理論的説明を得ることができた。

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】触媒設計やその反応機構の理解には、触媒の表面での反応分子の吸着構造を解明することが必要である。通常の理論研究では、表面モデルと吸着分子のさまざまな初期構造から出発し、構造最適化計算を行い最安定構造を求めるというアプローチがとられる。表面モデルの計算結果から、分子の吸着位置が予測できることが望ましいが、フロンティア軌道は非局在化する傾向が強く、適用が困難である。

振電相互作用密度 (VCD)[1] は、フロンティア軌道理論では予測困難であるような反応の領域選択性を説明することに成功している [2,3]。本研究では、光触媒 Ag/Ga₂O₃[4] における CO₂ の吸着構造について、VCD 解析を Ag/Ga₂O₃ 表面に適用し、CO₂ の吸着反応の領域選択性を検討した。

Ga₂O₃ の結晶構造 [5] から中心の Ga 原子とそれに配位する 6 つの O 原子からなる八面体サイトを 8 個切り出し、末端の O 原子を H 原子で終端することで Ga₂O₃ の表面をモデル化した。次に、Ag1 原子を表面モデルに配置して DFT 計算により構造最適化と振動解析を行った。本研究では触媒から CO₂ への電荷移動を想定し、電荷移動状態として cation 状態での force 計算を DFT 計算により行った。これらの結果から反応座標 ξ の方向を計算し、振電相互作用密度 η を計算した。最後に、CO₂ を表面に配置し DFT 計算により構造最適化を行った。 ξ および η の計算は当研究室で開発したプログラムを用い、DFT 計算にはプログラムパッケージ Gaussian09 Rev.E01(計算レベル B3LYP/6-31G(d,p)) を用いた。Ag のみ計算レベルを B3LYP/LANL2TZ とし、内殻電子による効果を擬ポテンシャルで置き換えた。

得られた VCD は Ag 原子と Ag 近傍の O 原子に分布していた。これより、Ag 原子と Ag 近傍の O 原子にわたる領域で CO₂ 分子が吸着すると予想される。また、この領域選択性は構造最適化計算により得られた安定構造と一致した。

このことは、VCD 理論が固体表面における吸着反応の領域選択性の問題にも適用できることを示している。

- [1] T. Sato *et. al.*, *J. Phys. Chem. A* **112**, 758 (2008).
- [2] T. Sato *et. al.*, *Chem. Phys. Lett.* **531**, 257 (2012).
- [3] N. Haruta *et. al.*, *Tetrahedron Lett.* **56**, 590 (2015).
- [4] K. Teramura *et al.*, *Catal. Sci. Technol.*, **6**, 1025 (2016).
- [5] S. Geller, *J. Chem. Phys.* **33**, 676 (1960).

【発表論文】

(謝辞あり)

- (1) Tohru Sato *et al.*, *Sci. Rep.* **7**, 4820 (2017).

(謝辞なし)

- (2) Paulo F. M. Oliveira *et al.*, *Tetrahedron* **73**, 2305 (2017).
- (3) Paulo F. M. Oliveira *et al.*, *ChemistrySelect* **1**, 984 (2016).
- (4) Pablo Solis-Fernandez *et al.*, *ACS Nano* **10**, 2930 (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

大環状構造を有する芳香族アミン化合物はイオン化ポテンシャルが小さく、発生したラジカルカチオンが安定であることが知られておる。下図のテトラアザ[14]m,p,m,p-シクロファン (TAC) のジカチオン種はスピン三重項状態が基底状態となる高スピン分子である。また、ホウ素原子を含む π 共役系分子は、ホウ素原子の p 軌道に起因した光物性を示すことが知られており、窒素原子とホウ素原子をフェニレンで架橋した分子では、電子アクセプターとして働くホウ素原子部位と電子ドナーとして働く窒素原子部位の組み合わせで分子内電荷移動遷移に基づく発光特性が発現する。本研究では TAC の結合様式を変えずに4個の窒素原子のうち2個をホウ素原子で置換した大環状分子 **1** 及び **2** を新規に合成し、ホウ素原子と窒素原子の骨格内における配置の違いが電子物性に与える影響を調べることを目的とした。

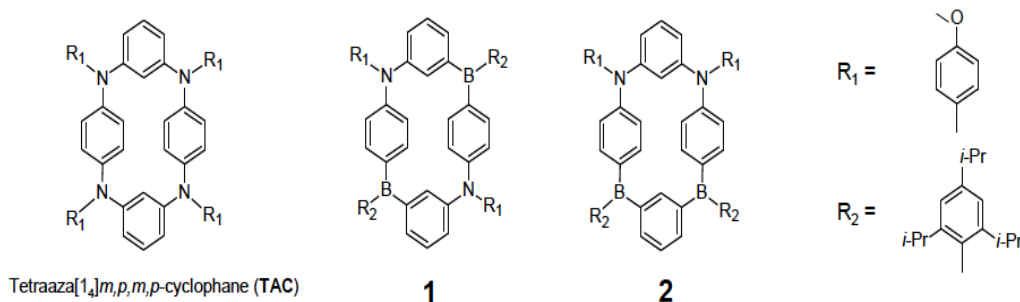


Figure 1. TAC, molecules **1** and **2**.

分子 **1**, **2** のイソプロピル基とメトキシ基をそれぞれ水素原子で置換したモデル分子 **1'**, **2'** について量子化学計算を行った。計算方法には B3LYP/6-31G*法を用い、Gaussian09 プログラムを使用した。**1'** の HOMO は主にトリフェニルアミン上、LUMO は主にホウ素原子上に存在する。また TD-DFT 計算の結果、400 ~ 450nm 付近に窒素原子周辺からホウ素原子周辺への分子内電荷移動遷移に基づく吸収がみられた。**2'** の HOMO は主にメタフェニレンジアミン上、LUMO は主にホウ素原子上に存在し、385, 424nm 付近に窒素原子周辺からホウ素原子周辺への分子内電荷移動遷移に基づく吸収がみられた。これらのことは分子**1**と**2**が溶液でも固体でも発光することに関連付けられる。

発表論文(謝辞あり)

A. Ito, M. Uebe, R. Kurata, S. Yano, H. Fueno T. Matsumoto, Chem. Asian J., *in press*.

13 族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明

Investigation of optical properties of organometallic complexes containing group 13 elements

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 重合化学分野 伊藤 峻一郎

研究成果概要

固体発光性分子は、有機ELや化学センサーなどへの応用が期待され、広く研究されている。当研究室ではこれまで Figure 1 に示す 13 族元素ジイミン錯体およびその共役系高分子を合成してきた¹⁻³。これらの分子が、溶液状態よりも固体状態でより強い発光を示すという凝集誘起型発光(AIE)

特性や、結晶化によりその発光強度が増大するという結晶化誘起型発光(CIE)特性を示すことを報告してきた。今回、そのような錯体の発光特性について、密度汎関数法(DFT)計算によって解析した。

各種アルミニウム錯体に関して、Gaussian 16 を用いて、DFT 並びに時間依存(TD-)DFT 計算を行った。計算レベルは、長距離相互作用を考慮した(TD-)CAM-B3LYP を用いた。まず、基底関数として 6-31+G(d,p)をもちいて基底状態の構造最適化並びに振動計算を実行し、次いで基底関数を 6-311+G(d,p)に変更し、 S_0-S_1 電子遷移を計算した。続いて励起状態についても同様に構造最適化および振動計算、電子遷移計算を行った。その結果、アルミニウム上の配位子の違いによって、励起状態における分子の構造緩和過程が全く異なることが示唆された。現在、計算結果を詳細に解析し、固体発光分子の分子設計について検討している。

また、各種ホウ素錯体およびその多量体についても同様の DFT 計算を行い、それらの光学特性の評価について検討を進めている。

発表論文(謝辞あり)

現在論文執筆中

発表論文(謝辞なし)

[1] Yoshii, R.; Hirose, A.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 18131–18139.

[2] Ito, S.; Hirose, A.; Yamaguchi, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *J. Mater. Chem. C* **2016**, 4, 5564–5571.

[3] Ito, S.; Hirose, A.; Yamaguchi, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Polymers* **2017**, 9, 68–78.

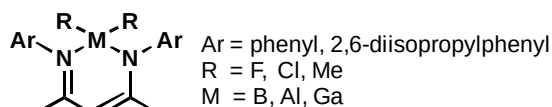


Figure 1. Chemical structures of group 13 diimine complexes.

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

単一分子のキラリティーが超分子構造体のキラリティーにどのように影響するかは、超分子化学における重要な課題の1つである。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 **1-3** の合成を行い、固液界面において形成される二次元分子配列のキラリティーについて走査型トンネル顕微鏡を用いて検討を行った。

フォトクロミック化合物であるジアリールエテンは、紫外光照射に伴い(*R,R*)-体および(*S,S*)-体のエナンチオマーを生じる (Figure 1a)。これまでの研究により、化合物 **1c** と **2c** は、オクタン酸/グラファイト界面においてエナンチオマーの自然分晶 (conglomerates)、および、固溶体 (pseudoracemates) の二次元結晶を形成することが明らかとなった (Figure 1b,c)。これに対して、左右非対称の構造を持つ化合物 **3c** はラセミ結晶 (racemates) を形成することが STM 観察により示唆された (Figure 1d)。Materials Studio を用いた分子力学計算により、化合物 **3c** のラセミ結晶分子配列を再現することに成功した。

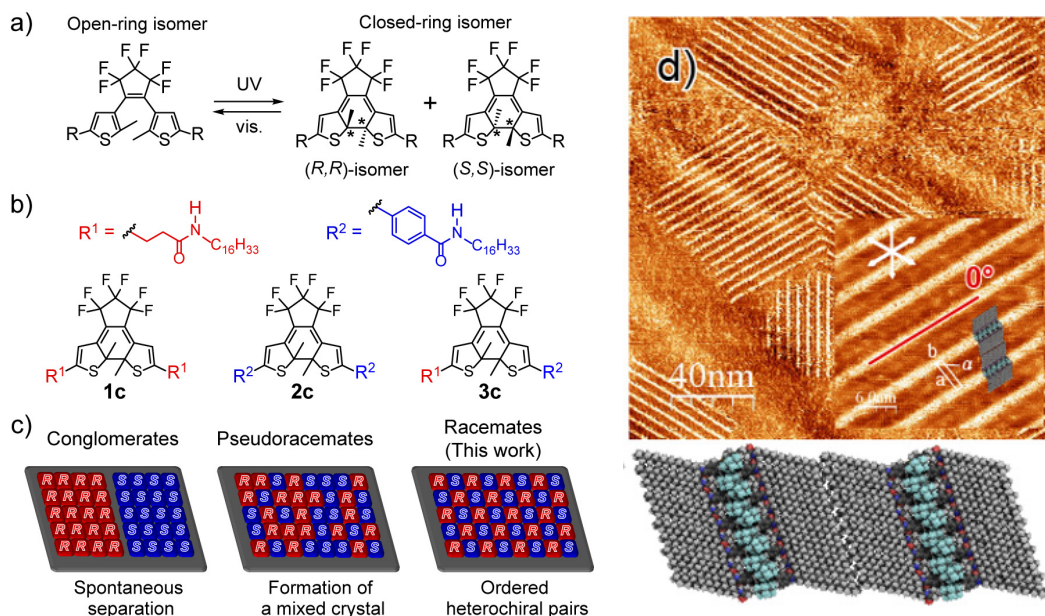


Figure 1. (a) Photoisomerization reaction of diarylethenes. (b) Chemical structures of diarylethenes and (c) their manner of 2D chiral self-assemblies formed at the liquid/graphite interface. (d) STM image of **3c** at the octanoic acid/graphite interface (top) and molecular model (bottom).

発表論文(謝辞なし)

1. N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 2371–2375
2. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Langmuir* **2017**, 33, 9151–9159.

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、固液界面における自己組織化が注目されている。我々は近年、固液界面での協同的組織化プロセスにおいて、水素結合などの分子間相互作用が配列安定化に与える影響を定量的に評価する手法を報告した。^[1]

本研究では、多方向の相互作用が配列ドメインのサイズや形状に与える影響に関して走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて評価を行った。芳香環コアの側鎖にアミド基、ウレア基を持つ化合物 **1a**, **1u** に対してヒドロキシ基を芳香環、アルキル鎖末端にそれぞれ導入した化合物 **2a**, **2u**, **3a**, **3u** を合成した (Figure 1a)。化合物のオクタン酸/グラファイト界面での配列形成を STM で観察した結果、アミド誘導体と比較して、ウレア誘導体は顕著に小さな配列ドメインを形成することが認められた (Figure 1b–g)。被覆率の濃度依存性を核生成–伸長モデルを用いて評価したところ、ウレア誘導体はアミド誘導体に対して核生成平衡定数が非常に大きく、この違いが小さなドメイン形成に寄与することが示唆された。

さらに **2u** についてアスペクト比が約 10 の異方的なドメイン形成が観察された (Figure 1f)。実験的に得られた配列の格子定数を参考に、Materials Studio を用いた MM/MD 計算によって作成した配列モデルから、**2u** の配列ではウレア基およびヒドロキシ基の水素結合方向がドメイン成長方向と一致することが確認された。これより **2u** の異方的ドメイン成長はウレア基とヒドロキシ基による多方向の水素結合ネットワーク形成に由来することが示唆された。^[2]

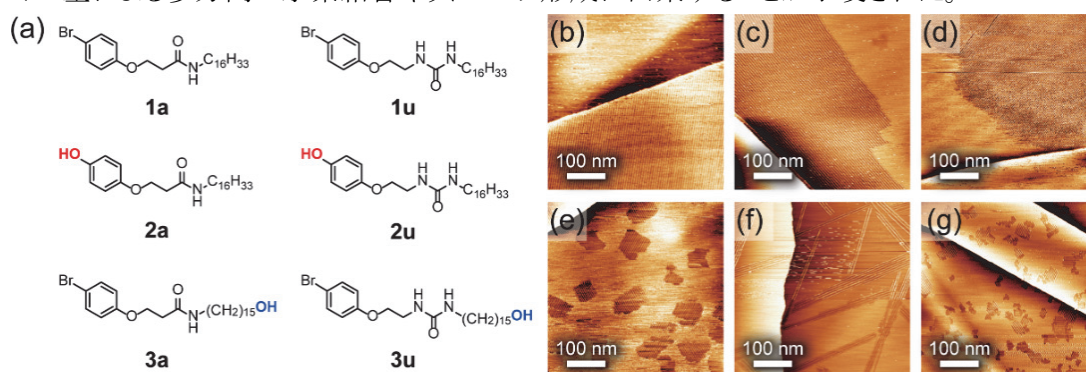


Figure 1. (a) Chemical structures of compounds **1a–3a** and **1u–3u**. STM images of the 2-D ordering of (b) **1a**, (c) **2a**, (d) **3a**, (e) **1u**, (f) **2u**, and (g) **3u** at the octanoic acid/HOPG interface.

発表論文 (謝辞なし)

[1] N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Asian J.* **2015**, *10*, 1926–1931.

[2] N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Langmuir* **2017**, *33*, 9151–9159.

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 植村 卓史

【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、ベンゼン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ベンゼン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、ベンゼン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、ベンゼン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、ベンゼン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

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

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

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

MD 計算には Amber 14 を用いた。糖残基数 6 のアガロオリゴ糖を取り上げ、糖鎖 1, 2 本、糖鎖の質量濃度 0.6, 5.7 wt%、NaCl の質量濃度 0, 1.1 wt%、の各場合について、NPT アンサンブル (1 atm, 25°C, 75°C) の MD 計算を実施した。なお糖鎖 2 本の系では、糖濃度 0.6, 5.7 wt%の各場合に糖鎖がそれぞれ 40 Å, 20 Å 離れて独立に水和した状態を初期配置とした。2 本の糖鎖の会合状態について、糖鎖間距離 D [Å] や 2 本の糖鎖がなす角度 θ [deg]などを求めた。さらに、各条件下において 2 本の糖鎖がなす構造について、2 重らせん構造からの乖離しやすさを検討した。

2 本の糖鎖は初期配置では独立に水和していても、NaCl イオンの有無によらず会合し、会合に要する時間もイオンの有無には依存しなかった。一方、2 本の糖鎖がなす角 θ の経時変化を調べたところ、会合後は糖鎖の動きが抑制されるため、例えば約 150° を中心として 120° から 180° の間で θ の値が振動するが、数 ns から数十 ns の時間スケールで大幅な構造変化が生じて 2 本の糖鎖の向きが最初の会合状態から完全に反転することがあり、その場合例えば θ の値が約 150° を中心とした振動から約 30° を中心とした振動へと大幅に変化する場合があった。このような大幅な変化が生じる回数は NaCl 濃度 0 wt%の系の方が 1.1 wt%の系よりも多かった。さらに、会合後の経過時間に対して、2 本の糖鎖がなす構造が 2 重らせん構造から大幅に乖離した延べ時間の割合(乖離率)を求めると、NaCl 濃度 1.1 wt%の方が 0 wt%に比べて小さくなった。これより NaCl イオンが共存する方が糖鎖が乖離しにくいと考えられる。

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

多孔性配位高分子(PCP)は、骨格構造の柔軟性ゆえに、ゲート吸着と呼ばれる構造膨張を伴うガス分子の包摂挙動を示す。このゲート吸着におけるステップ状の急激な吸着量変化は、小さな圧力スイングによって大きな working capacity (w)を得ることを可能とし、さらに近年、その構造膨張に伴う吸熱が、ガス吸着熱の一部を相殺することで、正味の発熱量を低減できることが明らかとなってきた。この作用はゲート脱着(構造収縮による発熱+ガス脱着による吸熱)においても成立することから、短時間での吸脱着を繰り返す rapid pressure swing adsorption (PSA)等の吸着分離プロセスにおいて、吸/脱着を阻害する吸着材の温度上昇/降下の抑制をし、 w の増大をもたらすことが期待される。そこで本研究では、PCPの一種である ELM-11 に着目し、CO₂ 分離回収技術開発において注目されている CO₂/CH₄ 分離を想定した評価を行った。

以下の CO₂/CH₄分離のための PSA 操作(温度 298 K)を仮定した：(i) 500 kPa における原料ガス(CO₂:CH₄ = 50:50)の供給・吸着、(ii) 250 kPa への塔内減圧、(iii) 250 kPa の純 CO₂ ガスによる洗浄、(iv) 5 kPa での脱着、(v) 5 kPa の純 CH₄ ガスによるパージ。本研究では、操作(i)における CO₂ 選択率、および操作(iv)における熱収支を考慮した w を算出し、rigid な骨格構造を持つ材料のなかで最も有望な CO₂分離材料とされる HKUST-1 と ELM-11 との比較検討を行った。ここで、操作(iv)では十分に短いサイクルタイムの実現を想定し、断熱条件を仮定した。ELM-11 の CO₂・CH₄単成分吸着等温線および CO₂・CH₄混合着等温線は、ゲート吸着後の構造(open 構造)に対する grand canonical Monte Carlo シミュレーションによって求め、ELM-11 の比熱は、量子化学計算に基づいたフォノン解析により評価した。また、HKUST-1 の各物性については実験結果を用い、CO₂・CH₄混合吸着等温線については IAST 法により算出した。

【CO₂選択率】操作(i)における ELM-11の CO₂吸着量は HKUST-1の1/3程度であるものの、CO₂選択率は82.3と非常に大きな値となった。これは、ELM-11の open 構造が CO₂分子の包摂に適した空隙サイズ・相互作用を有しているためと考えられる。

【C_w選択率】操作(iv)は、断熱条件における 250 kPa から 5 kPa への脱着過程であって、熱力学的に等価な以下の経路により w を求めた：(I) 298 K における 250 kPa から 5 kPa への等温脱着過程、(II) 過程(I)での吸熱による吸着材の温度降下に伴う再吸着過程(5 kPa)。HKUST-1 は過程(I)において 9.48 mmol/g の CO₂が脱着し、247 J/g の吸熱が発生する。一方、ELM-11 では 3.57 mmol/g の CO₂が脱着し、132 J/g の吸熱が発生するものの、ELM-11 の収縮によって 55.7 J/g の発熱が生じるために、正味の吸熱量は 76.2 J/g となる。この吸熱の減少が、過程(II)における吸着材の温度降下 Δ および再吸着量に効果的に作用し、ELM-11 では $\Delta = 63.7$ K、 $w = 2.56$ mmol/g となるのに対して、HKUST-1 では $\Delta = 79.4$ K、 $w = 1.88$ mmol/g となって、ELM-11 の w が HKUST-1 に対して優越することが明らかとなった。

クラスターイオンビームと固体表面の相互作用

Interaction between cluster ion beams and solid surfaces

京都大学大学院工学研究科附属光・電子理工学教育研究センター 龍頭啓充

研究成果概要

本研究は多原子分子を材料としたクラスターイオンと固体表面の相互作用について調べることを目的としている。クラスターイオンビームを加速し、固体表面に照射すると高温・高圧の反応場が形成されることが分子動力学計算により示されてきた。また最近、クラスターイオンが固体表面に衝突する際に微弱な発光が生じることが分かり、このスペクトルを解析することにより、クラスターイオンが固体表面に衝突する際の高温状態を実験的に観測することが出来た。この高温・高圧の反応場が多原子分子を材料とするクラスターと固体表面との衝突で形成される場合は、クラスターを構成する分子と固体表面の原子との間で強い化学反応が生じることが予想される。そこで代表的な多原子分子を材料とするクラスターであるエタノールが銅、タンタル、プラチナ等金属の表面に衝突する過程について Materials Studio を用いたシミュレーションを行った。

はじめに銅、タンタルまたはプラチナの表面を準備した後、真空中にエタノールを配置し、CASTEP の Dynamics 計算を行った。エタノールクラスターイオンビームを銅、タンタル、プラチナ等の表面に照射する実験では、金属薄膜の成膜後、大気曝露せず真空中に保ったままで照射した場合のスパッタ率が、成膜後に一度大気中に取り出し、後に照射した場合に比べて高いことが分かっているが、今回行ったシミュレーションは大気曝露せず真空中を保ったままでエタノールを照射した場合に相当する。エタノール分子が金属表面に垂直に近づく初速度として 50 Å/ps、100 Å/ps、150 Å/ps、200 Å/ps または 300 Å/ps を与え、0.5 fs または 1 fs 間隔でシミュレーションを行った。初速度及び標的金属試料の違いにより、エタノール分子中の水素の乖離の状況や、エタノール分子中の水素、酸素、炭素原子が金属表面原子と結合する状況に違いが見られた。

発表論文(謝辞なし)

1. H. Ryuto, Y. Shimizu, M. Yamaoka, D. Shimizu, D. Yamamoto, M. Takeuchi, F. Musumeci, “Sputtering and photon emission of metal surface induced by cluster ion collision”, International Union of Material Research Societies-The 15th International Conference on Advanced Materials (IUMRS-ICAM2017), Aug. 27-Sept. 1, 2017, Kyoto.

Ti 表面上への N₂ 吸着エネルギーの計算
Calculation of N₂ adsorption energies on Ti surfaces

京都大学 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 小林 洋治

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を利用し、Ti, TiH₂, TiN 表面上に対する N₂ 分子の分子吸着エネルギー、および吸着乖離エネルギーを計算した。普段我々は N₂ と H₂ から NH₃ を合成する Haber-Bosch 触媒の研究を行っているが、TiH₂ で思いがけない触媒活性を発見した。通常 Ti 金属を始めとする Ti 系化合物では N₂ の吸着乖離エネルギーが強すぎることで触媒活性を妨げていると考えられているので、TiH₂ ではヒドリドの効果により吸着乖離エネルギーが検証しているのではないかと、という仮説を確認するために本課題の計算を行った (Fig. 1 参照)。計算は全て Materials Studio 中の CASTEP パッケージを用いて行われた。その結果、Table 1 から見れるように、TiH₂ 上の吸着熱は特に小さくなく、ヒドリドからの電子的な効果は特に見られなかった。活性の要因は表面上の吸着水素種など、新たな可能性が考えられるようになり、今後の研究の足がかりとなった。

Table 1. Calculated adsorption heats on close-packed surfaces, N-N distances, and work functions

¹ Ads. Site	² Heat of ads. (kJ/mol) Diss. End-on N ₂	N-N dist. (Å)	³ W. F. (eV)
Ru-A	-114	-136	1.138
Ru-B	-66	-165	1.144
Ti-A	443	95	1.162
Ti-B	460	86	1.160
TiH ₂ -A	534	142	1.173
TiH ₂ -B	374	99	1.162
TiN-A	356	97	1.159
N ₂ (gas)	—	—	1.104

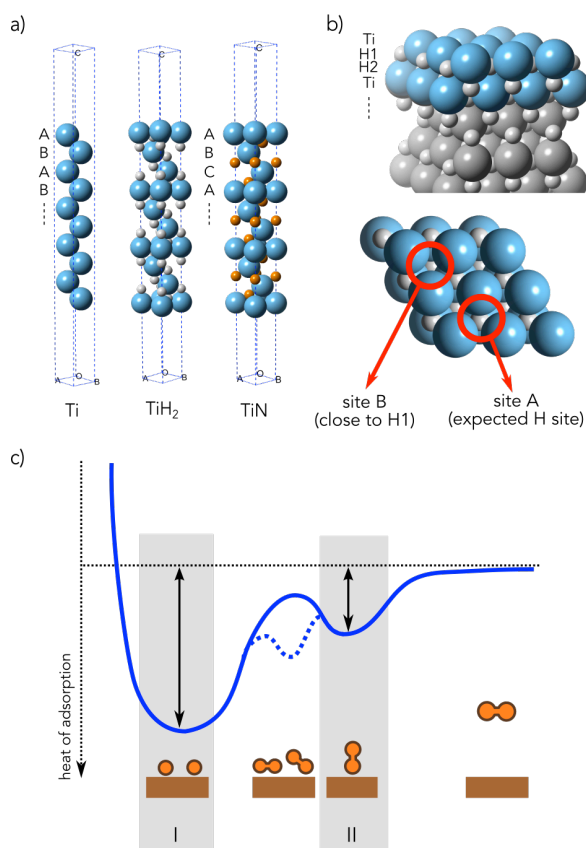


Figure 1. 計算に使用されたスラブ構造の a) Ti 001_{hcp}, TiH₂ 111_{fcc}, TiN 111_{fcc} 構造. b) 複数の吸着サイトを考慮した後、c) I および II の吸着状態のエネルギーを計算により求めた。

発表論文 (謝辞あり)

Kobayashi, Y.; Tang, Y.; Kageyama, T.; Yamashita, H.; Masuda, N.; Hosokawa, S.; Kageyama, H. "Titanium-based hydrides as heterogeneous catalysts for ammonia synthesis", *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 18240-18246.

酸水素化物への表面吸着と反応
Surface reactions and adsorption on oxyhydrides

京都大学 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 Ya Tang

研究成果概要

Heterogeneous catalytic CO₂ methanation is a promising CO₂ conversion reaction that it typically uses oxide-supported transition metals as the catalysts. For these heterogeneous catalysts, tremendous efforts have been dedicated to tuning the particle size, surface area, or cation compositions of the oxides. We have taken an oxide, barium titanate (BaTiO₃) and converted it to its oxyhydride, BaTiO_{2.4}H_{0.6}. In the presence of Ni or Ru, the presence of hydride enhances the catalytic activity of CO₂ methanation by 2~7 times. We find the hydride here seems to be adequately stabilized in the perovskite oxide lattice despite the water-rich environment. Based on our kinetic analysis, we discuss the reaction mechanisms that are different from the conventional oxides and show that the lattice hydride improves the hydrogen adsorption on metal surface. However, unlike NH₃ synthesis, the role of hydride anion in CO₂ methanation reactions is still unclear. It is not trivial to gain a complete picture of the mechanism, but some simple DFT calculations offer us answers to focused questions. In other words, does the incorporation of hydride anion into BaTiO₃ improve the adsorption (or decrease the chemisorption energy) of CO₂ molecular on the oxyhydride surface?

Hence, I have been using supercomputer for the following works:

- 1/ To build the stable slab structures of BaTiO₃ and BaTiO_{3-x}H_x ;
- 2/ Put CO₂ molecular onto different oxide or oxyhydride surface and perform the DFT calculations to obtain the chemisorption energy;

$$E_{chem}^{CO_2} = E_{CO_2+slab} - E_{CO_2} - E_{slab}$$
where, $E_{chem}^{CO_2}$ is the adsorption energy of CO₂ molecular, E_{CO_2+slab} is the energy of CO₂ and slab structures, E_{CO_2} and E_{slab} is the energy of CO₂ molecular and slab structure, respectively. These surface calculations are still on the way.

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

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 長田裕也

研究成果概要

生体内に存在する DNA やタンパク質といった生体高分子にもらせん構造は数多く存在し、様々な生体機能を発現するために重要や役割を果たしている。一般にこれら生体高分子のらせん構造は、左巻きあるいは右巻きのどちらかに定まっており、例えば DNA の二重らせん構造や、タンパク質を構成する α ヘリックス構造は右巻き構造を有しており、右巻き左巻きが入れ替わることはほとんど無い。一方で合成高分子の場合では、溶解させる溶媒の種類によってらせん構造が右巻き／左巻きと反転する場合があることが明らかにされつつあるものの、溶媒の種類によって、何故らせん構造が反転するのかという原理については全く明らかになっておらず、新たな機能性材料開発に向けて大きな課題となっていた。

本研究では、まず(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分子モデル構築を行った。計算には BIOVIA Materials Studio を用い、分子力場として COMPASS II を用いた。まず繰り返しユニットについてコンフォメーション解析を行い、安定配座を組み合わせることで右巻き／左巻き構造ポリマーの分子モデルを構築し、さらにポリマー全体について同じ力場を用いて構造最適化を行った。続いて、右巻き／左巻き構造を有するポリマー溶液に対して小角中性子散乱を行い、分子モデルに基づいた散乱パターンのシミュレーションと比較することで、右巻き／左巻き構造を持つ合成らせん高分子の構造の推定に至った。

解析の結果、溶液中で高分子が周囲との相互作用を持たないときには側鎖がコンパクトに縮まり左巻き構造をとることが分かった。一方、適切な溶媒を用いることで側鎖が外側に引き出された場合には右巻き構造をとることが明らかになった。この成果は小角散乱測定と計算科学的手法の組み合わせによって、合成らせん高分子の側鎖コンフォメーションを含めた詳細な構造を明らかにした初めての例であり、らせん反転の機構に溶媒と高分子の側鎖との相互作用が、深く関わっていることを明確に示した初めての結果である。

発表論文(謝辞あり)

“Elucidating the Solvent Effect on the Switch of the Helicity of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s: A Conformational Analysis by Small-Angle Neutron Scattering”

Yuuya Nagata, Tsuyoshi Nishikawa, Michinori Suginome, Sota Sato, Masaaki Sugiyama, Lionel Porcar, Anne Martel, Rintaro Inoue, and Nobuhiro Sato, *J. Am. Chem. Soc.*, **8**, in press.

DOI: 10.1021/jacs.7b11626

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-AlCl_3 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。

昨年度に引き続き ($8 \times \text{CsAlCl}_4$) を配置したユニットセルでの計算を行った。

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

本年度は、構成イオンの座標の計算を 1 ps にいたるまで行った。

$A\text{Cl-AlCl}_3$ (A : alkaline metals) 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の的となっている (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)), $A = \text{Cs}$ の場合に、かねてから主張されている 1:1 組成を境に、 AlCl_4^- アニオン構造のみの構造から、四面体 AlCl_4^- アニオン構造面帳点共有で連なった Al_2Cl_7^- 構造を含む構造へと急激に変化し、当該組成では両者が存在しうる。

FIG. 1 にイオン配置の一例を示す。

AlCl_4^- アニオンの連なる間に Cs^+ カチオンが挟まれている。 AlCl_4^- アニオン中の Al, Cs^+ とともに相対的に動きは小さく、Cl の動きは大きいため、頻繁に Cl の交換が起こっている。

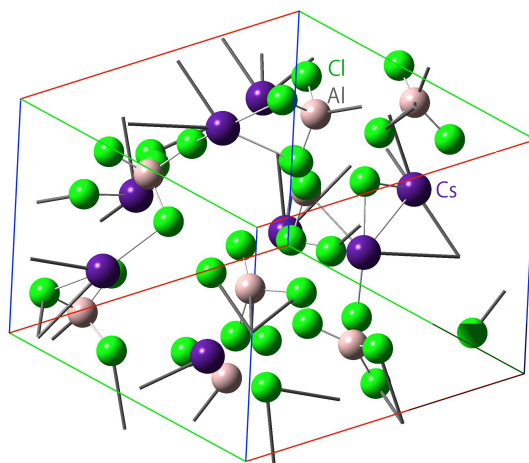


FIG. 1 Ionic configurations after 0.98 ps calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl_3 at 700 K

発表論文(謝辞あり、謝辞なし)

該当なし

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

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 馬淵 守

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、マグネシウム(Mg)の偏析二重双晶とらせん転位の相互作用の分子動力学シミュレーションを行った。

Mg は次世代の軽量金属構造材料として注目を集めているが、延性が低く加工性に乏しいという欠点がある。Mg は塑性変形の過程において、 $\{10\bar{1}1\}$ – $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶における粒界三重点に転位が堆積し、破壊の起点になることが知られている。Mg の延性向上にはアルミニウム(Al)やイットリウム(Y)などの添加元素を固溶させることが有効であるが、そのメカニズムには不明な点が多い。以上から二重双晶での破壊における添加元素の影響を調べることは重要であると言える。本研究では Mg の $\{10\bar{1}1\}$ – $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶に Al 及び Y を偏析させ、粒界三重点への転位の堆積挙動を分子動力学シミュレーションによって解析した。

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 Mg-Y においては AMEAM ポテンシャル[1]、Mg-Al においては MEAM ポテンシャル[2]を用いて計算を行った。その後、MC 計算によって添加元素の偏析挙動を計算した。MC 計算ではランダムな Mg 原子を添加元素に置換し、それらに微小変位を与え、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。偏析二重双晶にらせん転位を導入し、セル全体にせん断ひずみを与えることでらせん転位を二重双晶に向かって伝搬させた。

計算の結果、二重双晶に偏析した Y は双晶転位を放出させ、Al は部分転位の移動を抑制させることによって、いずれの場合も粒界三重点への転位の堆積を妨げることが分かった。Y と Al の双晶転位との相互作用の違いは、Mg-Y はひずみ効果、Mg-Al は化学結合効果が支配的であることに起因すると考えられる。以上から、添加元素は粒界三重点への転位の堆積を妨げることで延性向上に寄与すると考えられる。

発表論文: N. Miyazawa, S. Suzuki, M. Mabuchi, and Y. Chino, J. Appl. Phys. , 165103 (2017).

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

[2] B. Jelinek, S. Groh, M. F. Horstemeyer, J. Houze, S. G. Kim, G. J. Wagner, A. Poitra, and M. I. Bask, Phys. Rev. B 85(1), 245102 (2012).

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。最近、SAM(4-アミノチオフェノール)を修飾したナノポーラス金上に固定したラッカーゼが、2,6-ジメトキシフェノール(DMP)を分解する酵素活性が何も修飾しないナノポーラス金に比べ高くなるという実験結果が得られた。しかしながら、その詳しいメカニズムは明らかになっていない。本研究では分子動力学計算(ソフトウェア: Discovery Studio) 及びドッキングシミュレーションを用いて、SAM 上に固定したラッカーゼと DMP の結合エネルギーを計算し、酵素活性の向上メカニズムの解明に取り組んだ。

Protein Data Bank よりラッカーゼの計算モデル(PDB ID: 1V10)を入手し、分子動力学計算を用いて安定化計算を行った。半径 40nm の球状に水溶媒の中心にラッカーゼを配置した。エネルギー極小化計算を Steepest Descent algorithm で 200,000 ステップ、Conjugate Gradient algorithm でそれぞれ 200,000 ステップ行った。温度を 50K から 300K 及び 350K に徐々に上昇させ、NVT アンサンブルのもとで 1ns 平衡化計算を行ったのち、10ns の NVT 計算を行った。ラッカーゼはアミド結合を介して SAM と結合するが、本研究ではラッカーゼ表面に露出しているカルボキシル基及び C-terminal と SAM を結合させ、それぞれ結合エネルギーを計算した。その結果最も結合エネルギーの低いサイトは Glu91 であったため、SAM とラッカーゼの結合サイトは Glu91 とした。また、ドッキングシミュレーションを用いて DMP とラッカーゼの結合サイト及び立体的な結合状態を決定した。計算の結果、DMP は T1 銅付近の結合サイトである T1 サイトで最も安定に結合した。

300K と 350K でラッカーゼと SAM の結合エネルギーを計算した結果、両者が同程度の負のエネルギーを示すことが明らかになった。また、ラッカーゼを重ね合わせ(superimpose)して観察した結果、SAM との結合によってラッカーゼの構造が変化していることが明らかになった。以上から、ラッカーゼは SAM と結合することで構造が変化し、エネルギー的に安定化したと考えられる。また、ラッカーゼと DMP のドッキングシミュレーションの結果、疎水結合エネルギーが SAM 修飾ラッカーゼの場合で大きく低下していた。このことから、酵素活性向上の原因は疎水相互作用の向上に起因すると考えられる。

発表論文(謝辞なし):Molecular dynamics study of laccase immobilized on self-assembled monolayer-modified Au, N. Miyazawa, M. Tanaka, M. Hakamada and M. Mabuchi, J. Mater. Res. (2017) 52, 12848.

平成 29 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、種々の磁場印加方法で 3 次元配向させる条件の最適を行った。

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

発表論文(謝辞あり)

Magnetically textured powders—an alternative to single-crystal and powder X-ray diffraction methods

Fumiko Kimura, and Tsunehisa Kimura

CrystEngComm, 2018, 20, 861-872

発表論文(謝辞なし)

Biaxial Magnetic Orientation of Zinc Citrate as Nucleating Agent of Poly(L-lactic acid)

Sachi Teranishi, Ryosuke Kusumi, Fumiko Kimura, Tsunehisa Kimura, Kazuaki Aburaya, and Masataka Maeyama

Chem. Lett. 2017, 46, 830–832

ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？

Are viruses elementary particles which maintain and produce microbial diversity in marine environments?

京都大学 農学研究科 応用生物科学専攻 吉田 天士

研究成果概要

海洋で微生物ウイルスは宿主への感染を通じ物質循環に影響を及ぼす。しかし、ウイルス株は培養可能な一部の宿主に由来し、環境で真に卓越するウイルス-微生物系の知見は限定的である。我々はウイルスメタゲノムより 1000 を超える新規の完全長ウイルスゲノム (EVGs) の構築に成功した。本研究では、これらのウイルスが宿主と相互作用をしているのか否かを明らかにするために、宿主微生物画分の RNA を網羅的に解析するメタトランスクリプトーム解析により、ウイルス転写の動態を明らかにした。

大阪湾定点で 3 時間毎に取水した試料をフィルターで順次分画後、3 μ m 宿主微生物画分 (3 μ m <, >0, 2 μ m) より全 RNA を抽出した。RiboZero (Illumina) を用いて rRNA を除去した後、これを鋳型に 2 本鎖 DNA を合成して、ライブラリーを構築しを MiSeq (Illumina) で配列決定した。ウイルスの転写量を算出するため、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ウイルスゲノムに得られたシーケンスリードをマッピングした。

その結果、大阪湾で比較的高頻度に観察されるウイルス粒子は、その大部分が現場で活発に複製された産物であることが明らかとなった。ウイルス活性とウイルス粒子の増殖の間に時間差があることが分かりました。海の有機物供給源である光合成細菌感染ウイルスでは、昼間に遺伝子発現の活性が高く、その後、宿主内で大量の粒子を形成して、深夜から明け方に宿主を殺し（溶菌し）、有機物とともに宿主細胞の外に出ていく様子が明らかになりました。

発表論文(謝辞あり)

Locality and diel cycling of viral production revealed by a 24 h time course cross-omics analysis in a coastal region of Japan. ISME J. (2018) 10.1038/s41396-018-0052-x

極限環境における微生物ゲノム解析
Microbial genomics in extreme environments.

京都大学 大学院農学研究科 応用生物学専攻 海洋環境微生物学分野 中川 聡

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、深海底熱水活動域に特異的に棲息する無脊椎動物の難培養性共生微生物を対象としてメタゲノム解析を実施した。

深海底熱水活動域は、暗黒・高圧かつ超高温の有毒熱水が噴出する極限環境にありながら、化学合成独立栄養細菌の一次生産に立脚した豊かな生態系を育んでいる。世界各地の深海底熱水活動域から 500 種を超える無脊椎動物が報告されているが、深海底熱水活動域に固有のものの多くが特定の化学合成独立栄養細菌を細胞内あるいは細胞外に有しており、それらと強い共生関係を築いている。それら、無脊椎動物と共生関係にある化学合成独立栄養細菌は純粋培養が困難であり、その生理生態学的性状や進化的特性はほとんど知られていない。

今回、深海底熱水活動域に棲息する無脊椎動物の難培養性共生微生物の性状を解明するため、メタゲノム解析を実施した。CLC genomics workbench を用いてアセンブルした配列データから、遺伝子領域の予測および遺伝子機能のアノテーションを行うことにより、複数種類の難培養性共生微生物のゲノムをほぼ解読するとともに、多数の新規遺伝子を同定することに成功した。

本解析データを利用したプロテオーム解析も実施中であり、今後は当該共生微生物の特性について、より詳細に解析を進める予定である。

発表論文:なし(1 ヶ月程度の利用であり、今後行いたい)

硫黄を含むジペプチド保護体の CO₂ 吸着状態の解析

Analysis of the CO₂ sorption state of protected dipeptide containing sulfur atom

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

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に幅広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端と C 末端の両方を保護した Boc-L-Met-L-AlaOMe (以下、**1** と略記。図 1) の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。また、**1** の結晶が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い(図2)、結晶を構成する**1**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結果、**1** と二酸化炭素との間には主として分散力が働いていることが判明している。

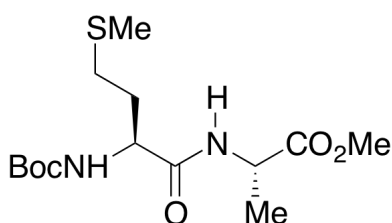


図1 **1** の分子構造

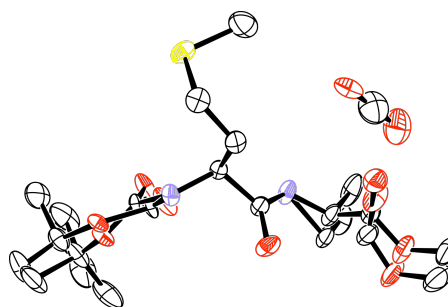


図2 **1** の CO₂ 吸着状態の OTREP 図

本研究では、**1** が示す二酸化炭素に対する親和性をより詳細に解明することを目的として、**1** と二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の再解析を行った。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。

具体的には、結晶中で二酸化炭素とその周辺に存在する四分子の **1** との分子間相互作用を解析した。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最適化を行った後、Gaussian 09 を用いて MP2 レベルで BSSE 補正を加えたエネルギー分割計算を行った。その結果、二酸化炭素と **1** との分子間相互作用には、軌道の重なりが原因となる短距離力とクーロン力が原因となる長距離力が関与しており、前者は斥力として働いている一方、後者は引力として働い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ークスルーに、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、スペクトロスコピーによりこれらのエネルギー準位の決定&予測を行ってきた。本研究では、量子計算ソフトによるバンド構造計算により、長残光蛍光体の機構の理解を深めることを目的としている。

今回、 $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{2+}$ 橙色蛍光体において、長残光特性を付加させるために、真空基準束縛エネルギー準位図を構築し、最適電子トラップ中心が Tm^{3+} と Sm^{3+} であると予測した。実際に、 Tm^{3+} を $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{2+}$ 蛍光体に共添加することで、その残光強度は 9300 倍も向上した。CASTEP を用いた、バンド構造計算により、 $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7$ の伝導帯下端は、主に Ca の 4s 軌道により形成され、励起光によって Eu^{2+} の電子がこの伝導帯を介して Tm^{3+} へ移動していることを明らかにした。

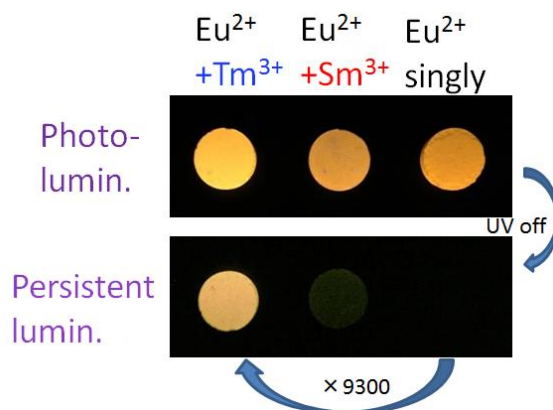


Figure 1. Images of photoluminescence and persistent luminescence in $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7$ doped with Eu^{2+} , $\text{Eu}^{2+}\text{-Sm}^{3+}$ and $\text{Eu}^{2+}\text{-Tm}^{3+}$.

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

- [1] J. Ueda, R. Maki, and S. Tanabe, *inorg. chem.* 56, 10353 (2017).

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

京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 堀毛 悟史

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、共有結合から組み上がる有機の結晶性高次元構造体 (Covalent organic framework, COF と呼ぶ) の構造推定、シミュレーションを行った。対象とした COF は Benzene-1,3,5-tricarbaldehyde+1,4-diaminobenzene (COF-Ph)、および Benzene-1,3,5-tricarbaldehyde+1,4-diaminonaphthalene (COF-Naph) であり、それぞれ粉末 X 線回折測定より回折ピークのアサインを行った。そのデータをもとに、下記の要領で構造推定を検討した。

COF-1、COF-2 いずれも同様の二次元構造を有するヘキサゴナル構造であることが推定されたため、過去のレポートを参考にし、空間群 $P6/m$ 、セルパラメータ $a = b = 25.00 \text{ \AA}$, $c = 5.00 \text{ \AA}$ と設定し、Material Studio Reflex Plus module を用いて開始した。ミスリードを防ぐため、始めは空間群を $P1$ に落とし、その後好適化において Material Studio Forcite molecular dynamics module (Universal force fields) を用いて検討を行い、最後は Pawley フィッティングで最適化したところ、COF-Ph においては $a = b = 22.4202 \text{ \AA}$ and $c = 3.3565 \text{ \AA}$, Rwp of 1.90% and Re of 1.98% とよい収束を示し、実験の粉末 X 線回折結果とも良い一致を示した。同様に COF-Naph では $a = b = 22.7117 \text{ \AA}$, $c = 3.4960 \text{ \AA}$ のセルパラメータを算出でき、同様に良い一致を得ることができた。以上の検討により、全体の結晶構造を高精度で推定することができた。この構造は他にガス吸着測定や固体 NMR などから多角的にその信頼性を検討し、間違いがないことを確かめている。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

G. Zhang, M. Tsujimoto, D. Packwood, N.T. Duong, Y. Nishiyama, K. Kadota, S. Kitagawa, S. Horike, Construction of a Hierarchical Architecture of Covalent Organic Frameworks via a Postsynthetic Approach, J. Am. Chem. Soc., 140 (2018) 2602-2609.

蓄電池材料の構造と物性

Structure and Physical Properties of Materials for Rechargeable Batteries

産官学連携本部 湊 丈俊

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、蓄電池の電極や電解液に用いる材料構造と物性を解析する研究を行った。近年、環境・エネルギーの観点から蓄電池への興味が高まっている。リチウムイオン電池は高いエネルギー密度を有し、現在最も普及した蓄電池として小型電子機器などに広く使用されている。更に、電気自動車や再生可能エネルギーの貯蔵などその利用が拡大するに従って、電池性能の更なる向上が強く望まれている。蓄電池において、電極と電解液の界面の物性および反応は性能に大きな影響を与える(参考文献1)が、不明な点があり未だ多くを想像に頼っている。本研究課題では、リチウムイオン電池の電極として用いられる炭素と電解液の溶媒の界面構造を液中動作周波数変調原子間力顕微鏡で直接観察し、その構造を密度汎関数計算で解析した。その結果、溶媒分子が炭素上で超構造を形成し安定に吸着する様子を明らかにした(発表論文1)。

また、コンバージョン反応を進行するフッ化物系の活物質は、充放電反応中にフッ化物相と金属相の2相が混在する状態を形成する。本研究課題では、この2層界面の安定性について密度汎関数で計算し、2相界面が形成されるとフッ化物相と金属相が乖離する傾向があることを明らかとした(発表論文2)

さらに、リチウムイオン電池に比べ非常に高いエネルギー密度を有すると期待される革新型蓄電池として「フッ化物シャトル二次電池」という新しい電池の開発に取り組み、電解液への添加物とフッ化物イオンとの相互作用を密度汎関数で解析した。その結果、添加物がフッ化物イオンと安定構造を形成することを明らかとした(発表論文3)。

発表論文(謝辞あり)

- [1] Taketoshi Minato, Yuki Araki, Kenichi Umeda, Toshiro Yamanaka, Ken-ichi Okazaki, Hiroshi Onishi, Takeshi Abe, Zempachi Ogumi, Interface Structure Between Tetraglyme and Graphite, *J. Chem. Phys.* **147**, 124701 (2017).
- [2] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Difference of Rate Performance Between Discharge and Charge Reactions for Bismuth Fluoride Electrode in Lithium-ion Battery, *J. Electroanal. Chem.* **806**, 82-87 (2017).
- [3] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Electrochemical Performance of a Bismuth Fluoride Electrode in a Reserve-type Fluoride Shuttle Battery, *J. Electrochem. Soc.* **164**, A3702-A3708 (2017).

参考論文

- [1] Taketoshi Minato and Takeshi Abe, Surface and Interface Sciences of Li-ion Batteries -Research Progress in Electrode-Electrolyte Interface-, *Prog. Surf. Sci.*, **92**, 240-280 (2017).

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

京都大学 産官学連携本部

山中 俊朗

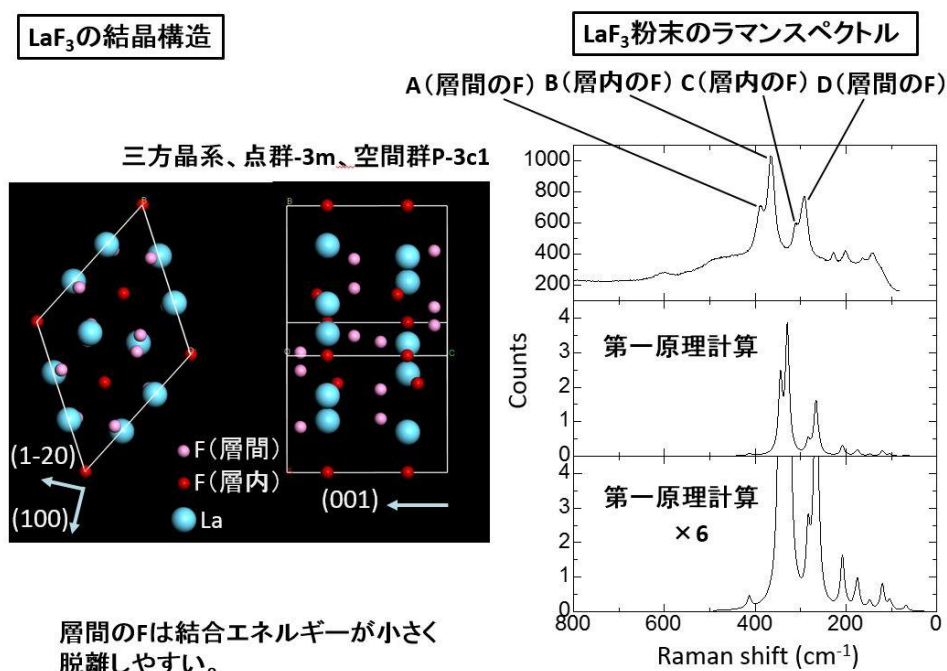
研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、いくつかの電池材料のラマンスペクトルの計算を試みた。

FePO_4 は電子状態がメタリックになり、計算ができなかった。

LaF_3 では図に示すように計算結果が実験結果を非常によく再現した。

それぞれのピークを層内のフッ素の振動、層間のフッ素の振動、ランタンの振動などに同定することができた。この解析により、脱フッ化過程では層間のフッ素が脱離することが推測された。



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

昨年度に引き続き、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、下排水処理に用いられる高分子分離膜の形成シミュレーションに取り組んだ。本年度は、対象系を二次元から三次元に拡張し、三成分(高分子、溶媒、水)の相分離シミュレーションを行った。

シミュレーション結果の一例として、三次元バルク系(128×128×128 グリッド)から得られる相分離構造を Fig. 1 に示す。高分子と溶媒と水の初期組成は、Fig. 1(a)に示すようにスピノーダル領域内に設定した。時間経過とともに相分離は進行し、高分子濃厚相と水濃厚相のドメインが系内に形成されていく様子が確認された。Fig. 1(b-d) に、相分離が十分に進んだ時点での高分子ドメイン(赤橙色)の空間分布を表す。高分子のせん断弾性率($\tilde{G}_0$)が比較的小さい場合、複数の高分子ドメインが界面張力によって大きく変形し、一つのドメインを合一した[Fig. 1(b)]。一方、 $\tilde{G}_0$ が大きくなると、より微細で複雑に連結した高分子ドメインが形成された[Fig. 1(c), (d)]。これは、界面張力により高分子ドメインが変形する際、 $\tilde{G}_0$ が大きいほど弾性応力が増加し、その変形が抑制されるためである。

今後は、高分子分離膜の代表的な製法である NIPS(非溶媒誘起相分離)法を想定した系で三次元シミュレーションを行い、詳細な膜構造の形成メカニズムの解明する予定である。

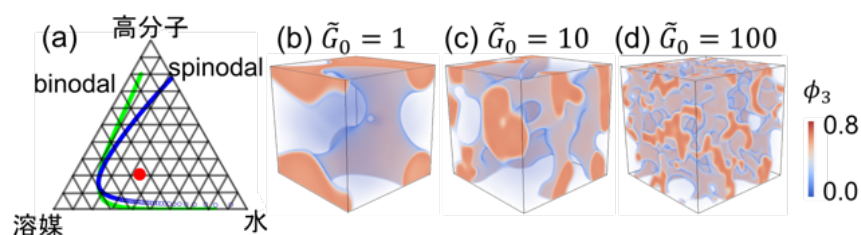


Fig. 1 高分子/溶媒/水の三成分混合溶液のバルク系での三次元シミュレーション: (a) 三角相図上での初期組成、(b-d) 相分離した高分子ドメインのモルフォロジ。

発表論文:なし(現在執筆中)

生体分子情報データベースの開発

Development of Databases for Biomolecular Information

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、生体分子情報データベースおよびバイオインフォマティクス技術の開発に取り組み、その成果をゲノムネット (<http://www.genome.jp/>) から広く公開している。平成 29 年度は、ウイルスゲノム系統解析のためのツールを開発し、ViPTree として公開した (<http://www.genome.jp/viptree/>) [2]。ViPTree では、Virus-Host Database に登録されているリファレンスウイルスゲノムの Proteomic tree が予め計算され、それを利用者の好みに応じて表示する。また、利用者がアップロードしたウイルスゲノムが Proteomic tree 上のどこに位置するかを計算し表示する。メタゲノムなどから新規ウイルスゲノムを同定した後にそれがどのようなウイルスかを調べるのに役に立つツールである。

また、引き続き開発を進めている MAPLE システムを応用し、溶菌酵素生産菌 *Lysobacter enzymogenes* M497-1 の遺伝子機能予測を試みた。MAPLE で代謝ポテンシャルを解析し、充足率が 100% に満たないモジュールをリストアップしたところ、充足率が 80% 以上かつ *Q* 値が 0.5 以下のものが 14 個あった。そのうち、近縁 *Lysobacter* 属で充足率が 100% のものは Ornithine biosynthesis (M00028)のみであった。そこで、このモジュールの抜けの部分 (アミノ酸 N-アセチル転移酵素) に対応する遺伝子を、ゲノムネットの遺伝子機能相関解析ツール GENIES で探索したところ、LEN_3144 が候補に含まれていた。アミノ酸配列やゲノム上の位置などをさらに調べたところ、この酵素遺伝子の候補として適当であることが判明した。逆に、近縁 *Lysobacter* でこの酵素に割り当てられている遺伝子が、実際には LEN_3144 のオーソログではなく、近縁 *Lysobacter* の機能割り当ての見直しが必要であることも判明した。

その他、ゲノムネットのメタゲノム・ゲノムデータを活用した解析と予測ツールの開発を行った [1,3]。

発表論文(謝辞あり)

1. Nishiyama, H., Nagai, T., Kudo, M., Okazaki, Y., Azuma, Y., Watanabe, T., Goto, S., Ogata, H. and Sakurai, T.; Supplementation of pancreatic digestive enzymes alters the composition of intestinal microbiota in mice. *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **495**:273-279 (2017).
2. Nishimura, Y., Yoshida, T., Kuronishi, M., Uehara, H., Ogata, H. and Goto, S.; ViPTree: the viral proteomic tree server. *Bioinformatics*, **33**:2379-2380 (2017).
3. Shimizu, Y., Ogata, H. and Goto, S.; Discriminating the reaction types of plant type III polyketide synthases. *Bioinformatics*, **33**:1937-1943 (2017).

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

「タンパク質スーパーファミリーレベルにおける系統樹の再構築」は進化学上の重要な課題の一つであるが、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を作成することが難しく、この問題を一般的に解決できる手法は知られていなかった。そこで我々は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。

本研究では、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) と GS 法の性能を比較する為に、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、大規模計算を行なっている。昨年度は進化シミュレーションに基づき、系統樹の予測精度と計算時間について検証し、GS 法がいずれについても従来手法を上回る性能を持つことを示した。本年度は、実際にタンパク質スーパーファミリーの進化過程を解き明かすことが GS 法によって可能になることを示すべく、様々な実データに GS 法を適用した。まず、最も大きく、かつ多様性に富むスーパーファミリーである G タンパク質共役受容体 (GPCR) に GS 法を適用したところ、これまでタンパク質の立体構造に基づいて予想されていた従来の系統樹と整合的な系統樹が構築され、さらに同一の機能が複数回獲得されたことが示唆されるなど、興味深い新規知見が得られた。また最大の転写因子ファミリーである HTH 転写因子ファミリーに GS 法を適用したところ高い内部枝支持率を持つ確からしい系統樹が得られ、平行進化を含む複雑な進化過程が示唆された。

発表論文 (謝辞あり)

なし

発表論文 (謝辞なし)

なし

平成 29 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

ヒト腸内細菌のメタゲノム解析

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遺伝子予測、機能アサインメントを行った。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

ウイルスゲノムの多様性に関する研究
Research on genomic diversity of viruses

東京工業大学 生命理工学院 山田研究室 西村 陽介

研究成果概要

本研究では、昨年度に引き続き新規ウイルスゲノムの多様性を明らかにするためのウェブサーバーである ViPTree の開発を行った[1]。さらに、ViPTree を用いてヒト腸内環境や、大阪湾の海水中に含まれるウイルスの多様性に関する研究を行った[2]。ViPTree は、ゲノム配列の類似性を用いてウイルス分類を行うツールである。配列類似性を数値化・可視化する機能を提供することによって、ユーザーが同定した新規ウイルスゲノムの理解を促進する。

環境中には大量の未分離ウイルス群(ウイルスダークマター)が存在している。本研究では、ヒト糞便サンプルや、海水サンプルに関してメタゲノム解析を行い、大量のウイルスゲノムを同定した。得られたウイルスゲノムに対して ViPTree などの解析パイプラインを用いることによって、ヒト腸内環境や大阪湾の海水中に存在するウイルスの多様性は非常に大きく、未知のウイルスが多く含まれていることが示された。さらに、大阪湾の海洋ウイルスの研究[2]においては、時系列のメタゲノム解析と共に、メタトランスクリプトーム解析・群集構造解析を行った。解析結果から、海洋ウイルスの産生は主に同所的に行われていることや、ウイルス産生が日周性を持っていることが示された。

発表論文(謝辞あり)

1. Nishimura Y, Yoshida T, Kuronishi M, Uehara H, Ogata H, Goto S. ViPTree: the viral proteomic tree server. *Bioinformatics*. 2017 Mar 30;33(15):2379-80.
2. Yoshida T, Nishimura Y, Watai H, Haruki N, Morimoto D, Kaneko H, Honda T, Yamamoto K, Hingamp P, Sako Y, Goto S. Locality and diel cycling of viral production revealed by a 24 h time course cross-omics analysis in a coastal region of Japan. *The ISME journal*. 2018 Jan 30:1.

典型元素を活用した機能性材料の開発

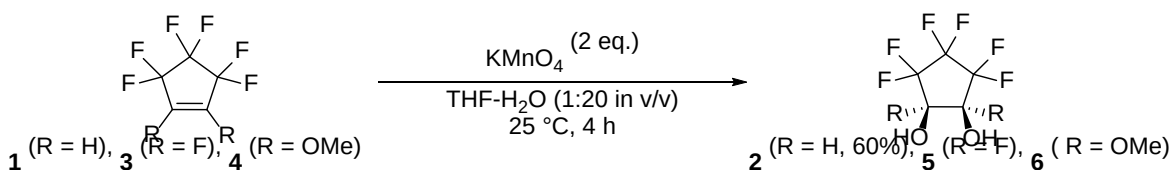
Development of functional materials by taking advantage of main group elements

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

我々は最近、HFC 溶剤の一つである 3,3,4,4,5,5-ヘキサフルオロシクロペンテン(**1**)を過マンガン酸カリウムで酸化することで、ポリフルオロ環状 1,2-ジオール **2** が得られることを見出しており (Scheme 1)、**2** のフッ素化ポリマー合成への利用を行っている。一方、**1** と類似した構造を有するヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **3** および **4** では、対応するジオール **5** および **6** は得られず原料回収となっており、置換基 R によってアルケンの反応性に顕著な差異が見られた。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、ヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **1**, **3** および **4** の反応性について理論化学的検討を行った。

Scheme 1



ヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **1,3** および **4** の構造最適化は、*Gaussian 16* を用いて B3PW91/6-31G(d) レベルで行った。最適化構造について、NBO6.0 を用いて Natural population analysis (NPA) 電荷を計算したところ、酸化反応が進行した **1** に比べ、**3** および **4** では、アルケン炭素原子の電子密度が低下していることがわかった (Table1)。**3** および **4** では、フッ素置換基またはメトキシ基のために、アルケン部位の電子密度が低下したものと考えられる。一方、**1** の HOMO は **3** および **4** に比べ低下していた。以上より、**3** および **4** ではアルケン部位の電子密度が低下しているため、求電子的な過マンガン酸イオンとの反応が進行しなかったものと考えられる。現在、**3** および **4** と過酸化水素などの求核的な酸化剤との反応の検討を行っている。

Table 1. Summary of the theoretical calculations

	Q^a/e	HOMO energy level/eV
1	-0.26	-8.96
3	+0.31	-8.48
4	+0.20	-6.64

^aNPA charge of the alkene carbon atoms.

発表論文 (謝辞あり)

T. Agou, R. Ohata, H. Fukumoto and T. Kubota, *submitted*.

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、RhBi/SiO₂ 触媒がジエン類の水素化において高い位置・化学選択性を示し、対応する内部アルケンを高収率で与えることを見出している。この選択性発現のメカニズムに関し、RhBi 規則性合金上の特異的な表面原子配列が寄与していると考えられていたが、その詳細については明らかにされていなかった。

今回京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、RhBi の様々な露出面に関して詳細な DFT 計算を行うことで、その選択性発現機構の解明を試みた。種々の面に対し表面エネルギーを計算したところ、RhBi(110)および(102)面の露出がこの順で支配的であることが示唆された。またこれらの面に吸着させたCOの振動数は、実験値と良い一致を示したことから、これらの面の露出が支持された。次に、RhBi(110)面上における1,4-hexadiene 吸着種と水素付加されたアルキル中間体の最適化構造、および水素拡散と水素付加の様子を検討した。内部 C=C 結合部位における Rh-C 原子間距離は末端側のそれと比べ長くなることが判明した。これは内部側では原子半径の大きな Bi とアルキル基との立体反発が生じるためであると考えられる。次にこれらの過程における活性化エネルギーを計算し、エネルギーダイアグラムを作成した(図)。その結果、内部 C=C 結合への水素化は末端側へのそれに対し著しく活性化障壁が高くなることが判明した。これらの結果は、位置選択性が Bi の立体障害に基づく速度論支配によって決定されることを示唆している。以上の様に、RhBi 上では、表面の特異的な原子配列によって位置および化学選択的なジエンの水素化を可能とすることが実証された。

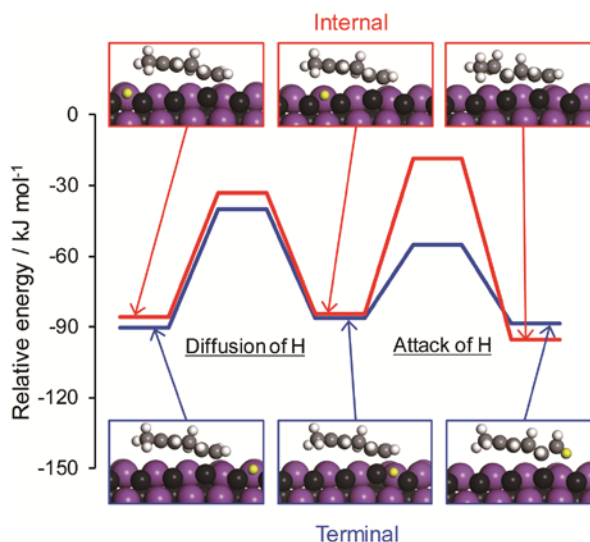


図. RhBi(110)面上における1,4-hexadiene
水素化のエネルギーダイアグラム

発表論文(謝辞あり)

"Regio- and Chemoselective Hydrogenation of Dienes to Monoenes Governed by a Well-Structured Bimetallic Surface"

M. Miyazaki, S. Furukawa, T. Komatsu, *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 18231.

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

Pathway reconstruction of carotenoid biosynthesis using Carotenoids DB Chemical Fingerprints

藪崎純子

研究成果概要

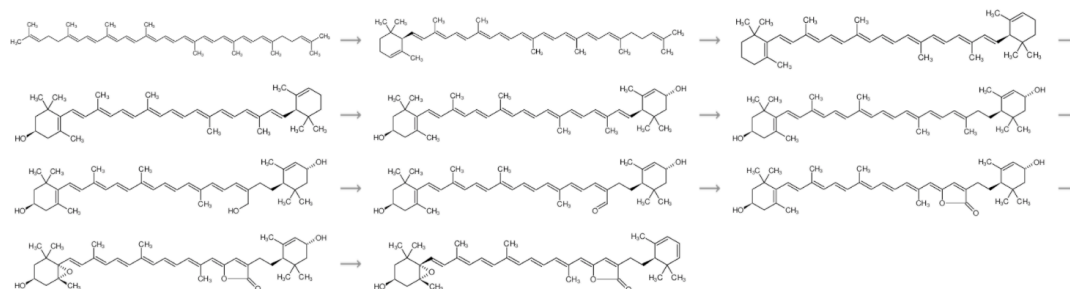
我々は、独自に開発したカロテノイド DB 化学フィンガープリント (正式には Carotenoids DB Chemical Fingerprint)を用いてカロテノイドの生合成経路の再構築を行なった。我々が構築した Carotenoids Database には 2018 年 2 月現在 1174 の天然のカロテノイドが収録されている。各カロテノイドには、我々の開発した独自のフィンガープリントが定義されている。詳しくは http://carotenoiddb.jp/Entries/Carotenoid_DB_Chemical_Fingerprint_Help.pdf を参照。また同データベースには 424 件の酵素・非酵素のカロテノイドの反応データ

(<http://carotenoiddb.jp/Reaction/list1.html>)、117 件のカロテノイド生合成パスウェイ

(<http://carotenoiddb.jp/Pathway/list1.html>) を収録した。カロテノイドの既知の生化学酵素反応系において、どのようなフィンガープリント変化が起こっているかを調べた結果、類似の酵素反応では同一のフィンガープリント変化が起こっていることが認められた。この結果を踏まえ、現在収録されているカロテノイドの全対全のフィンガープリントをスーパーコンピュータを用いて比較し、フィンガープリントの差集合が既知のフィンガープリント変化と同一のペアを抽出した。それらのペアの中から眼によるキュレーションにより尤もらしい反応ペアを反応予測プログラムの元データの一部とした。それに既知の酵素反応ペアを加えカロテノイドの生合成パスウェイの再構築プログラムを 2 通り実装した。一つは全経路探索をスーパーコンピュータを用いて行なったものである。以下のプログラムで尤度を決めてそのデータをスコアリングした。

http://carotenoiddb.info/search_theoretical_pathway2.cgi を参照。もう一つは全経路探索ではないが高速のものである。http://carotenoiddb.jp/search_possible_pathways_light.cgi を参照。それらのプログラムのデータから、尤もらしいと思われるパスウェイを眼でキュレーションした。結果、2018 年 2 月現在、これまで 570 の生物種における 383 のカロテノイドについて上記の 2 通りのプログラムによりパスウェイ再構築が得られた。以下にその一例プラシノ藻 *Mantoniella squamata* のカロテノイド Anhydrouriolide のパスウェイ再構築結果を示す。

CA00674 (Anhydrouriolide) biosynthesis pathway
 Path: CA00043 (Lycopene) → CA00298 (d-Carotene) → CA00587 (α-Carotene) → CA00592 (Zeinoxanthin) → CA00597 (Lutein) → CA00617 (Dihydrolutein) → CA00610 (Micromonol) → CA00625 (Micromonol) → CA00671 (Deepoxyuriolide) → CA00673 (Uriolide) → CA00674 (Anhydrouriolide)
 The basis: CB000010, CB000033, CB000033, CB000033, Proposed reaction, CB000035, CB000045, CB000074, CB000074, CB000074
 Probable necessary gene products: CrtL-e(5.5.1.18), LCY-e(5.5.1.18) → LCY-b, CrtL(5.5.1.19), CrtL-b(5.5.1.19), CrtL-e(5.5.1.19) → LUT5/CYP97A3, CrtR-b → LUT1/CYP97C1 → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product



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

福岡工業大学 工学部 生命環境科学科 蒲池高志

研究成果概要

現在ガソリン車の排ガスに含まれる NO_x を還元する触媒として Pd、Pt、Rh などのレアメタルが使われている。これらレアメタルに大きく依存しない社会の構築は長期的課題であり、「元素戦略」として様々な取り組みがなされている。本研究では、密度汎関数法を用いた網羅的な計算により、NO_x を還元する触媒として最適な2成分合金を探索している。これまでの計算から、N-O 結合開裂の活性化エネルギーは金属の表面エネルギーと関連していることが明らかとなっている。そこで、密度汎関数計算に基づいた AFLOW データベースに登録されている 337 種類の2成分合金について、最も安定な面の表面エネルギーを京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP プログラムを用いて決定した。現在、この計算結果から有望と予想される2成分合金について、N-O 結合開裂の活性化エネルギーや反応熱を計算しており、将来的には新触媒の開発につなげたい。

発表論文(謝辞なし)

1. “TiO₂-Supported Re as a General and Chemoselective Heterogeneous Catalyst for Hydrogenation of Carboxylic Acids to Alcohols”
T. Toyao, S. M. A. H. Siddiki, A. S. Touchy, W. Onodera, K. Kon, Y. Morita, T. Kamachi, K. Yoshizawa, K. Shimizu, *Chemistry – A European Journal*, **23**, 1001-1006, (2017). Selected as "Cover Article"
2. “メタン活性化を目指したインフォマティクス”
蒲池高志、斎藤雅史、辻雄太、吉澤一成, *Journal of Computer Chemistry Japan*, **16**, 147-148, (2017)
3. “Combined theoretical and experimental study on alcoholysis of amides on CeO₂ surface: A catalytic interplay between Lewis acid and base sites”
T. Kamachi, S. M. A. H. Siddiki, Y. Morita, Md. N. Rashes, K. Kon, T. Toyao, K. Shimizu, K. Yoshizawa, *Catalysis Today*, **303**, 256-262, (2018).

ゲノム解読
Genome Sequencing

株式会社 生物技研 半田 佳宏

研究成果概要

次世代シーケンサーの発達により、モデル生物に限らず非モデル生物のゲノム配列を解読することが比較的容易になった。本年度は、ある魚類と陸上植物のゲノム配列を明らかにするため、イルミナ社製の次世代シーケンサーを用いて膨大な塩基情報を取得した。その後、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、ALLPATHS-LG や SOAPdenovo を用いてゲノムアセンブルを行った。

発表論文(謝辞あり)

・なし

発表論文(謝辞なし)

・なし

菌類の系統解析
Phylogenetic analysis of fungi

信州大学農学部 齋藤勝晴

研究成果概要

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

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし



- 2017年度 -

システム稼働状況

スーパーコンピュータシステム

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

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

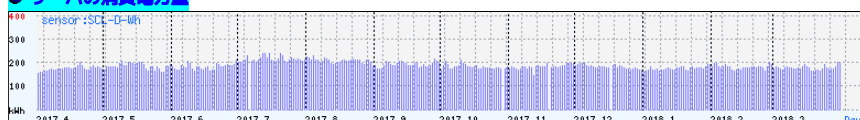
● システム稼働時間

システム名	稼働状況													年間運転時間(h)			システム運転状況
	Day	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dec	Jan	Feb	Mar	稼働	保守	連休	
大規模共有メモリスサーバ (uv1/uv2)	1														8751.1	8.9	システム稼働率 : 99.9 %
	5														(h)	(h)	
	10																
	15																
	20																
	25																
	30																
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	1														8753.3	6.7	システム稼働率 : 99.9 %
	5														(h)	(h)	
	10																
	15																
	20																
	25																
	30																
GPUクラスタ (pk01-pk14)	1														8760		システム稼働率 : 100 %(システム停止なし)
	10														(h)		
	20																
	30																
	1																
	10																
	20																

● 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	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	663:05		8:55	672:00	98 %
	3月	744:00			744:00	100 %
	計	8751:05		8:55	8760:00	99.9 %
	月平均	729:15		0:44	729:59	99.9 %
	4月	720:00			720:00	100 %
CPUクラスターサーバ (jp001-jp134)	5月	744:00			744:00	100 %
	6月	720:00			720:00	100 %
	7月	737:20		6:40	744:00	99 %
	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	8753:20		6:40	8760:00	99.9 %
	月平均	729:26		0:33	729:59	99.9 %
	4月	720:00			720:00	100 %
GPUクラスター (pk01-pk14)	5月	744:00			744:00	100 %
	6月	720:00			720:00	100 %
	7月	744:00			744:00	100 %
	8月	744:00			744:00	100 %
	9月	720:00			720:00	100 %
	10月	744:00			744:00	100 %
	11月	720:00			720:00	100 %
	12月	744:00			744:00	100 %
	1月	744:00			744:00	100 %
	2月	672:00			672:00	100 %
	3月	744:00			744:00	100 %
	計	8760:00			8760:00	100.0 %
	月平均	730:00			730:00	100.0 %

● サーバの消費電力量





システム稼働状況

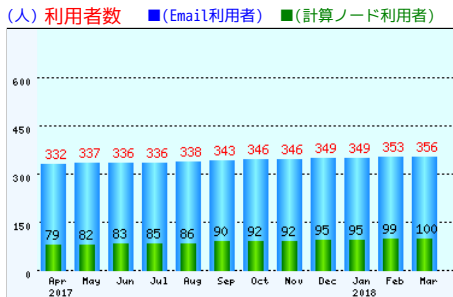
スーパーコンピュータシステム

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

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

● 利用者数の月別推移

項番	部 局 名	利用者 (人)	計算ノード 利用者数	アプリ 登録者数
1	化学研究所	151	(39)	(151)
2	エネルギー理工学研究所	2	(1)	(2)
3	生存圏研究所			
4	防災研究所	3	(2)	(3)
5	宇治地区事務局	100		(100)
6	理学研究科・理学部	10	(6)	(10)
7	医学研究科・医学部	2	(1)	(2)
8	附属病院			
9	再生医科学研究所			
10	薬学研究科・薬学部	5	(3)	(5)
11	工学研究科・工学部	47	(21)	(47)
12	エネルギー科学研究科	5	(5)	(5)
13	農学研究科・農学部	5	(3)	(5)
14	総合人間学部			
15	人間・環境学研究科	3	(2)	(3)
16	経済研究所	1		(1)
17	数理解析研究所			
18	情報学研究科	2		(2)
19	生命科学研究科			
20	学術情報メディアセンター			
21	生態学研究センター	1	(1)	(1)
22	高等研究院	2	(2)	(2)
23	次世代開拓研究ユニット			
24	先端医工学研究ユニット			
25	触媒・電池元素戦略ユニット			
26	iPS細胞研究所			
27	ウイルス研究所			
28	福井謙一記念研究センター			
29	産官学連携本部	2	(2)	(2)
30	学際融合教育研究推進センター	1	(1)	(1)
31	その他	14	(11)	(14)



● 部局別のCPU使用時間

項番	部 局 名	共有メモリスサーバ	CPUクラスタ	GPUクラスタ	ロゲインノード
1	化学研究所	4066日02時間28分	53320日21時間04分	2925日22時間35分	22日16時間01分
2	エネルギー理工学研究所		289日09時間36分	11日18時間30分	00時間13分
3	生存圏研究所				
4	防災研究所			543日07時間55分	08時間48分
5	宇治地区事務局				
6	理学研究科・理学部		13時間59分	06時間03分	01時間00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		22時間14分	01時間32分	00時間02分
11	工学研究科・工学部	1094日05時間59分	1153日00時間29分	236日09時間00分	1日03時間40分
12	エネルギー科学研究科		16474日02時間02分	659日14時間38分	03時間48分
13	農学研究科・農学部	4日10時間10分	833日03時間20分	200日13時間33分	22日02時間18分
14	総合人間学部				
15	人間・環境学研究科				
16	経済研究所				
17	数理解析研究所				
18	情報学研究科				
19	生命科学研究科				
20	学術情報メディアセンター				
21	生態学研究センター	411日19時間45分	20日18時間43分	1日02時間23分	03時間55分
22	高等研究院				
23	次世代開拓研究ユニット				
24	先端医工学研究ユニット				
25	触媒・電池元素戦略ユニット				
26	iPS細胞研究所				
27	ウイルス研究所				
28	福井謙一記念研究センター				
29	産官学連携本部	13092日19時間23分			04時間03分
30	学際融合教育研究推進センター	6509日09時間56分	02時間13分		00時間10分
31	その他	300日02時間03分	3995日03時間55分	563日02時間42分	47日22時間43分



システム稼働状況

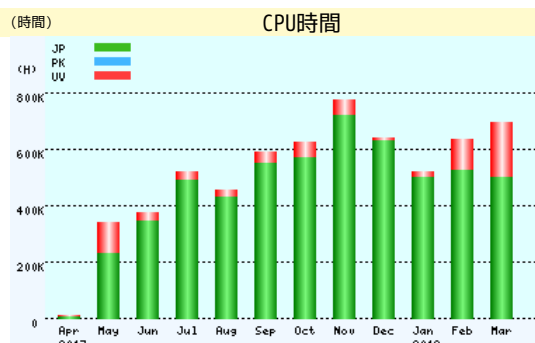
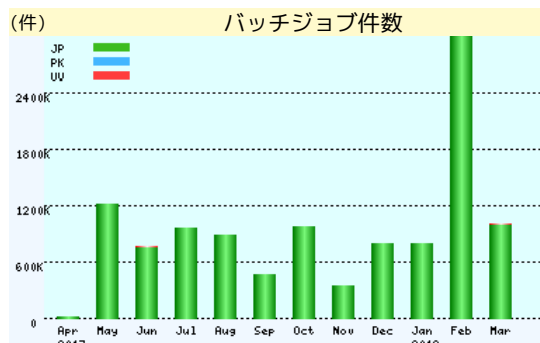
スーパーコンピュータシステム

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

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

● バッチジョブ実行時間 (大規模共有メモリサーバ)

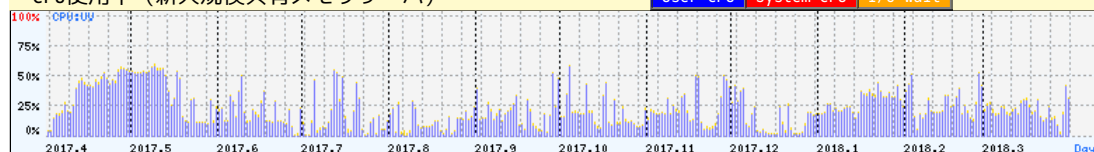
項番	項目	JP1,JP4,JP10,JP20 キュー	PK5 キュー	UVM1,UV16,UV128 キュー
1	総ジョブ件数	11985069	257	28003
2	総CPU時間	230086日22時間05分	274日13時間18分	28307日16時間14分
3	平均CPU時間	0時間28分	1日1時間32分	1日1時間38分
4	最大CPU時間	18日17時間52分	5時間19分	88日12時間34分
5	平均ジョブ実行時間	0時間04分	1日2時間00分	1時間01分
6	最大ジョブ実行時間	22時間35分	5時間31分	20時間02分
7	平均ジョブ待ち時間	0時間00分	8時間36分	0時間04分
8	最大ジョブ待ち時間	3時間52分	2時間46分	4時間07分



● 計算サーバのCPU使用率

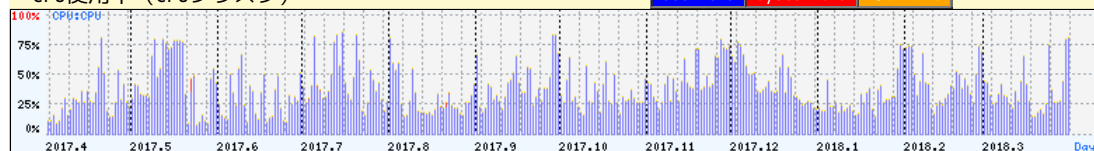
CPU使用率 (新大規模共有メモリサーバ)

User CPU System CPU I/O wait



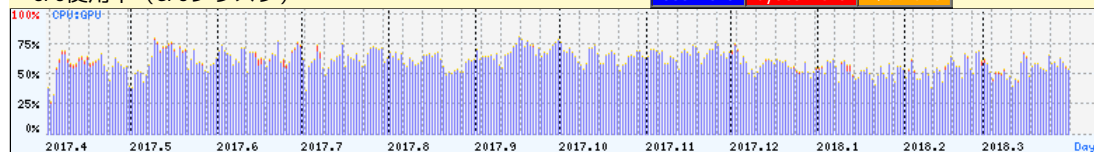
CPU使用率 (CPUクラス)

User CPU System CPU I/O wait



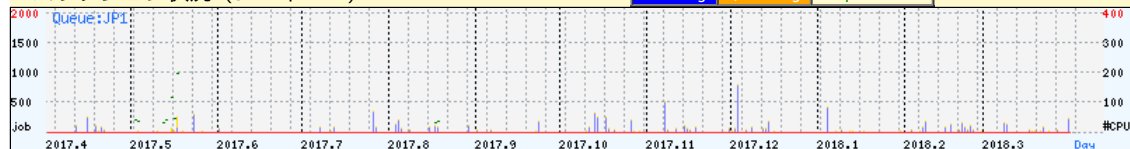
CPU使用率 (GPUクラス)

User CPU System CPU I/O wait



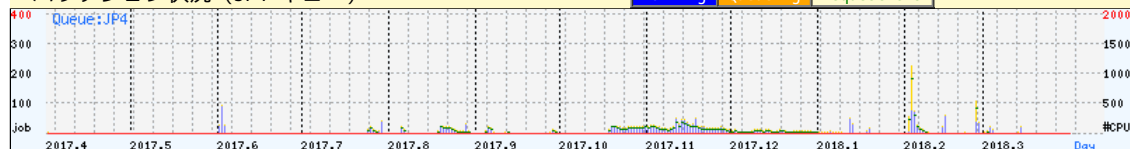
バッチジョブ状況 (JP1 キュー)

Running Queueing Request CPU



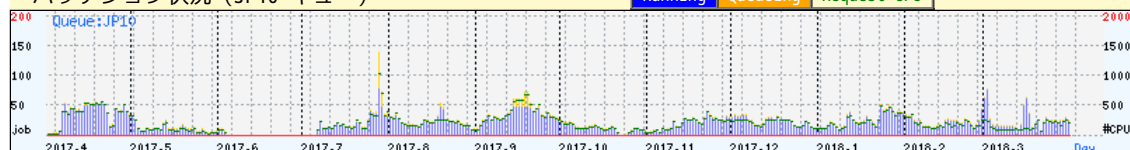
バッチジョブ状況 (JP4 キュー)

Running Queueing Request CPU



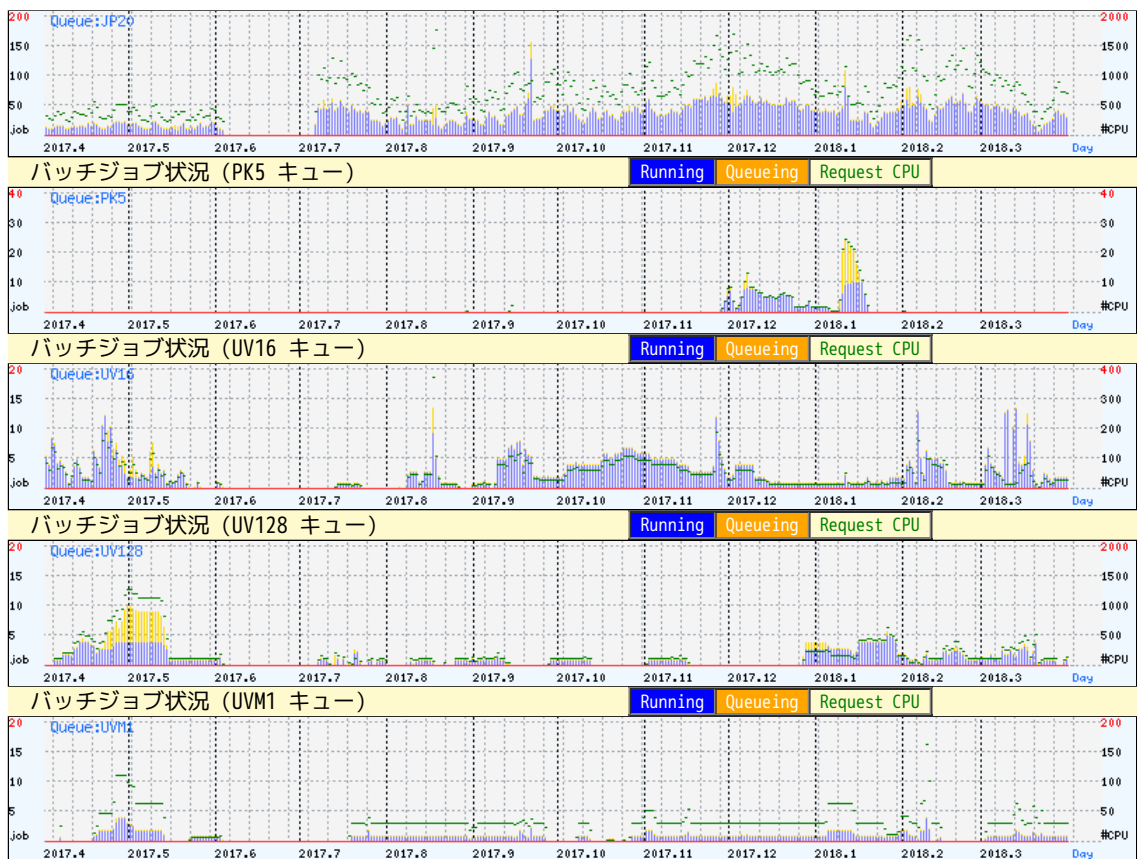
バッチジョブ状況 (JP10 キュー)

Running Queueing Request CPU



バッチジョブ状況 (JP20 キュー)

Running Queueing Request CPU



● 月別のCPU使用時間とバッチジョブ件数(2017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	39.7 %	15048日12時間07分	17016		
5月	44.8 %	19616日10時間35分	1216722		
6月	28.6 %	20907日14時間15分	766312		
7月	39.2 %	20511日03時間03分	965771		
8月	27.9 %	14009日09時間35分	896604		
9月	38.8 %	21726日09時間09分	478793		
10月	32.5 %	18649日01時間42分	984267		
11月	43.5 %	23668日05時間51分	353604		
12月	37.6 %	19320日22時間23分	807399		
1月	32.0 %	20635日03時間07分	804190		
2月	41.4 %	18514日22時間59分	3714088		
3月	34.1 %	18684日15時間32分	1008563		
年度計	-	231292日10時間23分	12013329		
月平均	36.7 %	19274日08時間51分	1001110		



システム稼働状況

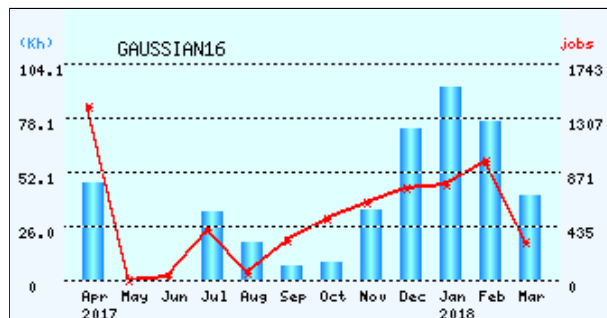
スーパーコンピュータシステム

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

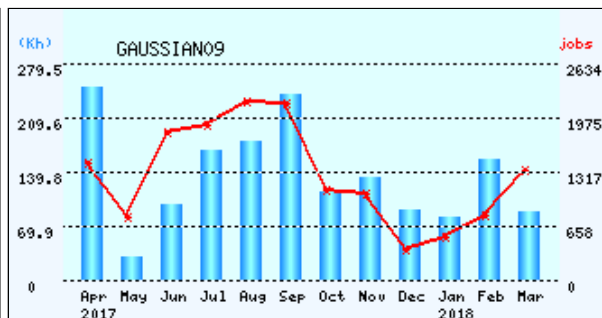
日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 応用ソフトウェア利用時間（ジョブ件数とCPU時間）

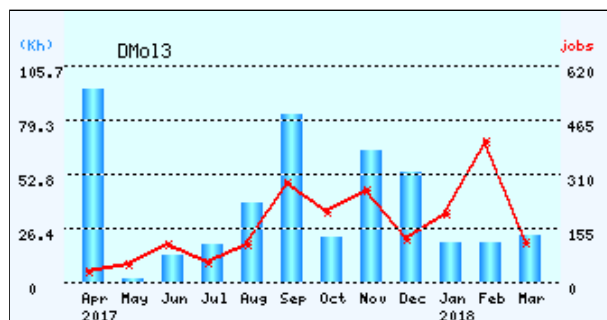
ジョブ件数とCPU時間



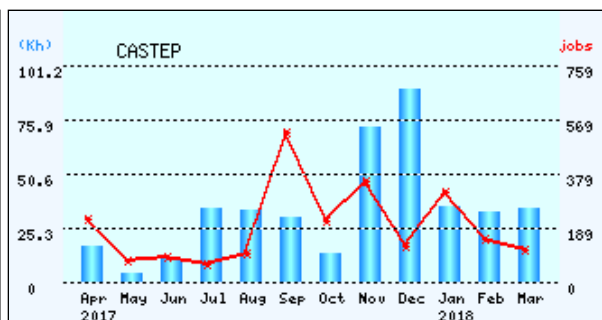
ジョブ件数とCPU時間



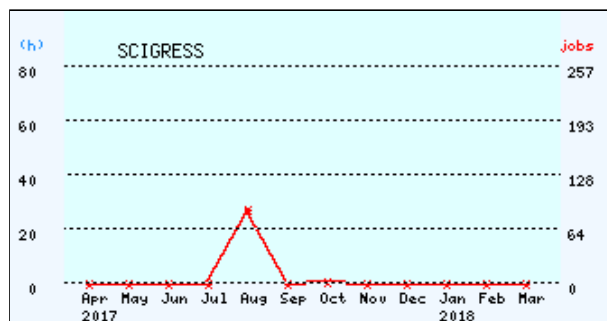
ジョブ件数とCPU時間



ジョブ件数とCPU時間



ジョブ件数とCPU時間



WWWサービスの利用状況

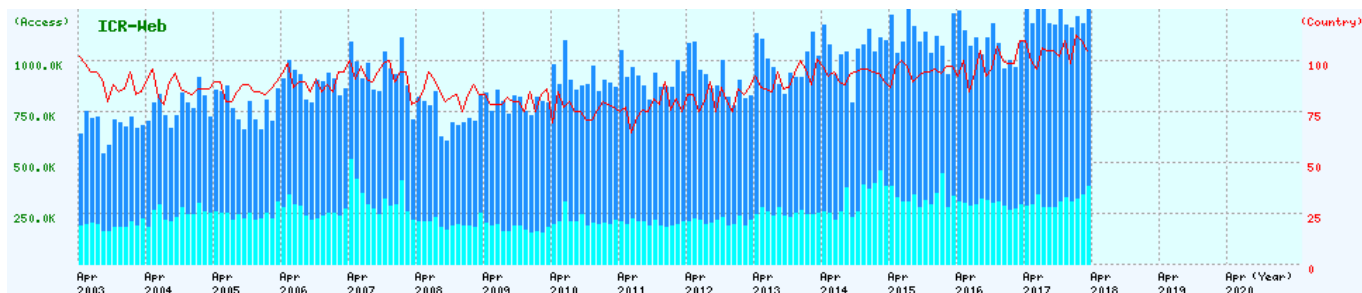
日本ヒューレット・パッカード株式会社 西川 和嗣

月別の利用件数と利用国数

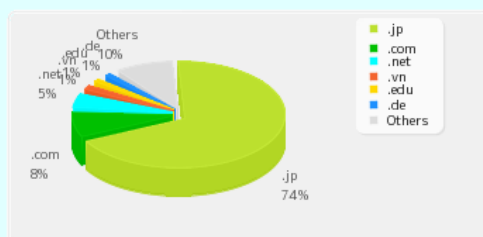
日本以外からの件数

日本からの件数

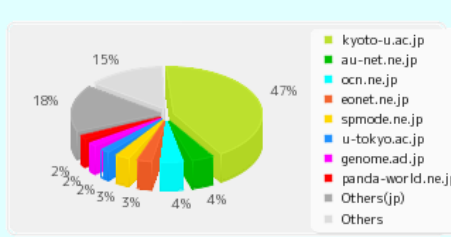
国数



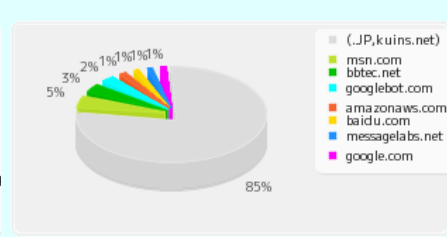
国別の利用件数(2017年度)



上位50機関の利用件数(2017年度)



上位50機関の利用件数(2017年度)



注) ・.kuins.net は JPドメインに含みます。

・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。

2017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
access-internet.ne.jp	34633	7111	11917	15605
amazonaws.com	146485	14741	53121	78623
ap.nuro.jp	34427	10122	10424	13881
asahi-net.or.jp	60498	11509	21749	27240
au-net.ne.jp	466746	106127	192749	167870
baidu.com	80990	7487	6695	66808
bbtec.net	350873	66948	119653	164272
clients.your-server.de	25289	3394	789	21106
dion.ne.jp	122050	28310	50004	43736
dti.ne.jp	76139	4960	5218	65961
eonet.ne.jp	313973	71261	124237	118475
genome.ad.jp	179843	12506	3520	163817
google.com	54757	12913	17388	24456
googlebot.com	256966	76164	55721	125081
hokudai.ac.jp	52721	9323	26378	17020
home.ne.jp	88778	15157	40368	33253
infoweb.ne.jp	89083	21152	34867	33064
kanazawa-u.ac.jp	42614	6165	15135	21314
kcn.ne.jp	25384	4596	12807	7981
kddi.ne.jp	62494	6169	25073	31252
keio.ac.jp	29974	9115	13196	7663
kyoto-u.ac.jp	4997019	708730	785948	3502341
kyushu-u.ac.jp	60689	10871	31491	18327
mesh.ad.jp	88890	17028	32772	39090
messagelabs.net	69169	14628	25647	28894
mit.edu	35195	26898	5831	2466
msn.com	496262	83465	156864	255933
nagoya-u.ac.jp	96978	13762	57115	26101

nttpc.ne.jp	72533	9748	30098	32687
ocn.ne.jp	465411	87216	188338	189857
openmobile.ne.jp	42292	12781	14588	14923
osaka-u.ac.jp	141057	39865	54888	46304
osakafu-u.ac.jp	27032	4020	12715	10297
panasonic.com	33260	4897	18762	9601
panda-world.ne.jp	178225	36444	76316	65465
plala.or.jp	128383	32582	50682	45119
riken.go.jp	27552	3285	13641	10626
so-net.ne.jp	96043	19773	35188	41082
sony.co.jp	25181	13965	4790	6426
spmode.ne.jp	305433	61557	134008	109868
titech.ac.jp	61670	10454	32103	19113
tohoku.ac.jp	97577	30343	38646	28588
tus.ac.jp	30337	7061	11542	11734
u-tokyo.ac.jp	201915	50458	101490	49967
ucom.ne.jp	85446	14018	33466	37962
vectant.ne.jp	47123	8449	20417	18257
yahoo.net	30644	5751	11017	13876
zaq.ne.jp	76942	26127	28633	22182
Others or unknown	1175731	221162	430571	523998

KEGG 生命システム情報統合データベース

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

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

ゲノムネットデータベースリソース

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

ケミカル情報解析

サービス	内 容
------	-----

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

DBGET/LinkDB: ゲノムネット統合データベース検索システム

DBGET は世界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	
network	疾患関連のネットワーク要素	KEGG NETWORK
variant	ヒト遺伝子バリエーション	KEGG VARIANT
disease	ヒト疾患	KEGG DISEASE
drug	医薬品	KEGG DRUG
dgroup	医薬品グループ	
environ	生薬・天然物、環境物質、ほか	KEGG ENVIRON
expression	マイクロアレイ遺伝子発現プロフィール	著者による登録

その他のDBGETデータベース（カテゴリー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	NCBI
	refpep	
uniprot	swissprot	ExPASy / EBI
	trembl	
refgene	rg001	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3)

ゲノムネットでキーワード検索のみできるデータベースは以下の通りです。

データベース		内 容	元サイト
insdc	genbank	核酸塩基配列	NCBI
	ddbj		国立遺伝学研究所
	embl		EBI
ncbi-gene		Entrez 遺伝子データベース	NCBI
unigene		UniGene 遺伝子データベース	NCBI
ensembl		真核ゲノムアノテーション	Ensembl
hgnc		ヒト遺伝子名	HGNC
brc-dna		ヒト完全長cDNAクローン	理研BRC
brc-epd		植物の完全長cDNAクローン	理研BRC
go		遺伝子オントロジー	GO
interpro		タンパク質ファミリー・ドメイン	EBI
omim		遺伝病	NCBI
pubchem		PubChem 化合物データベース	NCBI
chebi		ChEBI 化合物データベース	EBI
pdb-ccd		PDB リガンド辞書	PDB
lipidmaps		脂質代謝	LIPIDMAPS
lipidbank		脂質	LipidBank
knapsack		植物二次代謝産物	KNAPSAcK
hmdb		ヒトメタボローム	HMDB
3dmet		天然化合物の立体構造	3DMET
drugbank		医薬品とターゲット	DrugBank
ligandbox		医薬品の立体構造	LigandBox
sider		医薬品の副作用	SIDER

LinkDB検索のみ可能なデータベース (カテゴリ4)

LinkDBで検索可能なデータベースは以下のとおりです。
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 (2017年度)

国名 (ドメイン名)	総件数	www	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgene)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	3862	3484	(2)	(0)	(10)	(6)	(0)	(0)	(0)	378	(26)	0
Andorra (ad)	1541	1468	(0)	(0)	(26)	(0)	(0)	(0)	(4)	40	(13)	33
United Arab Emirates (ae)	32794	27324	(135)	(0)	(1250)	(128)	(0)	(0)	(0)	5037	(37495)	433
aerospace (aero)	543	348	(31)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	195	(0)	0
Afghanistan (af)	71	48	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	22
Antigua and Barbuda (ag)	396	334	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	53	(0)	9
Albania (al)	6371	4761	(27)	(0)	(34)	(24)	(2)	(0)	(1)	1340	(0)	270
Armenia (am)	25210	16958	(15)	(0)	(80)	(42)	(0)	(0)	(0)	7924	(62)	328
Netherlands Antilles (an)	328	250	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	53
Angola (ao)	677	528	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	107	(2)	42
Argentina (ar)	876276	709468	(195)	(0)	(17898)	(3400)	(22)	(46)	(2)	143014	(90910)	23794
American Samoa (as)	432	281	(28)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	148	(9)	3
Asia (asia)	198	106	(11)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	91	(0)	1
Austria (at)	1076113	905192	(549)	(16)	(17181)	(9718)	(4)	(22)	(23)	164219	(1664773)	6702
Australia (au)	3189243	2700623	(4654)	(24)	(68387)	(216562)	(2)	(30)	(128)	456767	(5376458)	31853
Aruba (aw)	757	506	(1)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(1)	98	(0)	153
Aland (ax)	5	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Azerbaijan (az)	1750	1520	(1)	(0)	(6)	(6)	(0)	(0)	(0)	143	(1)	87
Bosnia Hercegovina (ba)	10712	8622	(2)	(0)	(774)	(22)	(0)	(0)	(0)	1820	(142)	270
Barbados (bb)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bangladesh (bd)	21367	14800	(19)	(0)	(1282)	(74)	(0)	(0)	(0)	6301	(41)	266
Belgium (be)	1182225	989214	(671)	(14)	(70063)	(4851)	(2)	(10)	(3096)	166157	(326987)	26854
Burkina Faso (bf)	185	158	(0)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	24
Bulgaria (bg)	138272	120797	(53)	(0)	(1802)	(440)	(0)	(0)	(0)	16090	(79655)	1385
Bahrain (bh)	1828	1652	(3)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	139	(0)	37
Burundi (bi)	57	48	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	9
bitnet (bitnet)	72	72	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Business (biz)	553979	532016	(129)	(0)	(746)	(8494)	(30)	(32)	(2)	21496	(6978)	467
Benin (bj)	7	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Bermuda (bm)	158	132	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	26	(0)	0
Brunei Darussalam (bn)	4167	3702	(26)	(0)	(32)	(2)	(0)	(0)	(0)	348	(0)	117
Bolivia (bo)	9026	7346	(49)	(0)	(50)	(22)	(2)	(2)	(0)	856	(1)	824
Brazil (br)	4759976	3599007	(3510)	(0)	(78471)	(20087)	(24)	(102)	(52)	1108295	(3746414)	52674
Bahamas (bs)	81	76	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	0
Bhutan (bt)	5943	5738	(24)	(0)	(2982)	(0)	(0)	(0)	(0)	109	(0)	96
Botswana (bw)	5191	4890	(3)	(0)	(148)	(4)	(0)	(0)	(0)	84	(1)	217
Belarus (by)	52749	45988	(55)	(0)	(266)	(196)	(2)	(0)	(2)	5200	(164)	1561
Belize (bz)	38	30	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Canada (ca)	4533256	4119964	(1956)	(16)	(633925)	(14197)	(6)	(90)	(225)	385788	(6959309)	27504
Catalan (cat)	29470	24194	(12)	(0)	(298)	(429)	(0)	(0)	(1)	5221	(27758)	55
Cocos Islands (cc)	34703	11294	(1604)	(0)	(1436)	(22)	(0)	(0)	(0)	23406	(2)	3
Congo (cd)	61	54	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	3
Central African Republic (cf)	10	10	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Switzerland (ch)	6389400	3786825	(3699)	(0)	(33573)	(7035)	(24)	(80)	(6314)	2588977	(3964957)	13598
Cote D'ivoire (ci)	5096	4066	(8)	(0)	(128)	(12)	(2)	(2)	(0)	563	(0)	467
Cook Islands (ck)	75	62	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	13
Chile (cl)	451854	371125	(61)	(0)	(8782)	(1394)	(4)	(12)	(3)	74973	(65539)	5756
club (club)	352	246	(27)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	96	(0)	10
Cameroon (cm)	685	550	(1)	(0)	(66)	(0)	(0)	(0)	(0)	34	(0)	101
China (cn)	46792541	42146930	(198442)	(17)	(225636)	(69960)	(446)	(862)	(177967)	4632164	(93222391)	13447
Colombia (co)	1174429	1042396	(169)	(0)	(120586)	(4811)	(2)	(16)	(9)	120506	(1976732)	11527
Commercial (com)	415221900	277139352	(10795975)	(2984)	(1634051)	(2025178)	(3815)	(8298)	(68334)	136309672	(28733437)	1772876
cooperative (coop)	1191	1152	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	39	(0)	0
Costa Rica (cr)	20816	16854	(15)	(0)	(1180)	(58)	(0)	(0)	(0)	3214	(40)	748
Cuba (cu)	9632	8856	(0)	(0)	(554)	(50)	(0)	(2)	(0)	442	(13101)	334
Cape Verde (cv)	14	12	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Curacao (cw)	597	464	(2)	(0)	(24)	(0)	(0)	(0)	(0)	54	(0)	79
Christmas Island (cx)	36	16	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	20	(0)	0
Cyprus (cy)	26709	21680	(11)	(2)	(152)	(124)	(0)	(0)	(0)	4808	(446)	221
Czechoslovakia (cz)	1040226	877926	(732)	(0)	(17123)	(4704)	(22)	(86)	(70)	148060	(1244011)	14240
Germany (de)	21716288	17447709	(105760)	(105)	(356712)	(1262212)	(228)	(536)	(17957)	3982769	(31980871)	285810
Denmark (dk)	1190352	963040	(209)	(0)	(56304)	(4650)	(0)	(18)	(11)	221257	(1328473)	6055

Dominica (dm)	8	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Dominican Republic (do)	21110	16602	(33)	(2)	(194)	(60)	(0)	(0)	(0)	4114	(6)	394
Algeria (dz)	630	614	(1)	(0)	(150)	(8)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	3
Ecuador (ec)	87341	76505	(76)	(0)	(662)	(348)	(0)	(2)	(0)	7552	(46542)	3284
USA Educational (edu)	30779943	26652911	(3106)	(54)	(757002)	(3711762)	(118)	(514)	(722648)	3763836	(88626994)	363196
Estonia (ee)	112206	95395	(53)	(0)	(2714)	(202)	(0)	(2)	(0)	14904	(13278)	1907
Egypt (eg)	18193	15920	(43)	(0)	(762)	(108)	(0)	(0)	(2)	2064	(0)	209
Eritrea (er)	16	16	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Spain (es)	2928055	2426756	(993)	(2)	(129200)	(68093)	(30)	(94)	(2149)	488511	(1952201)	12788
Ethiopia (et)	42	42	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
European Union (eu)	23745389	21380747	(92199)	(21)	(35638)	(1208610)	(180)	(394)	(219)	2308829	(188416)	55813
Finland (fi)	892545	752061	(309)	(2)	(14966)	(3269)	(0)	(18)	(12)	133274	(341681)	7210
Fiji (fj)	717	538	(6)	(0)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	45	(0)	134
Falkland Islands (fk)	14	14	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Micronesia (fm)	366	224	(27)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	140	(0)	2
Faroe Islands (fo)	101	92	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	0
France (fr)	8728614	5705814	(1736)	(15)	(197573)	(721867)	(36)	(172)	(18735)	2990435	(3878066)	32365
Gabon (ga)	40	8	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	32	(0)	0
gbl (gbl)	107	68	(3)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	22	(0)	17
Georgia (ge)	12370	11413	(9)	(0)	(254)	(16)	(0)	(0)	(0)	557	(2)	400
Guernsey (gg)	101	94	(0)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Ghana (gh)	3296	3138	(10)	(0)	(426)	(8)	(2)	(2)	(0)	132	(0)	26
Greenland (gl)	810	798	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	4
Gambia (gm)	118	112	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	1
USA Government (gov)	1265232	1011704	(100)	(0)	(45570)	(3465)	(10)	(12)	(22)	242703	(5221595)	10825
Equatorial Guinea (gq)	94	40	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	53	(0)	1
Greece (gr)	536914	459678	(167)	(2)	(7434)	(1832)	(2)	(12)	(0)	70964	(567329)	6272
South Georgia (gs)	92	0	(17)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	92	(0)	0
Guatemala (gt)	25485	20866	(48)	(0)	(130)	(56)	(0)	(0)	(0)	3710	(0)	909
Guyana (gy)	2656	2336	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	204	(1)	116
Hong Kong (hk)	1230991	1039384	(444)	(0)	(85078)	(15431)	(0)	(18)	(13)	188704	(9131607)	2903
Honduras (hn)	1367	1146	(36)	(0)	(16)	(18)	(0)	(6)	(0)	117	(0)	104
host (host)	130	0	(122)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	130	(0)	0
Croatia (hr)	80892	69998	(51)	(0)	(632)	(458)	(2)	(2)	(8)	7235	(37713)	3659
Hungary (hu)	668130	598066	(937)	(32)	(8036)	(151158)	(2)	(10)	(456)	61846	(812803)	8218
Indonesia (id)	311862	261024	(1192)	(18)	(7743)	(1314)	(2)	(2)	(1)	46833	(23978)	4005
Ireland (ie)	506971	407979	(79)	(0)	(18851)	(1826)	(0)	(2)	(16)	96026	(40619)	2966
Israel (il)	497779	420817	(89)	(0)	(9831)	(2202)	(0)	(18)	(19)	70283	(7752484)	6679
Isle of Man (im)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
India (in)	5814851	3756981	(319541)	(35)	(162196)	(30061)	(20)	(118)	(854)	816688	(1507450)	1241182
Information domains (info)	201199	137291	(1121)	(0)	(2154)	(614)	(16)	(14)	(0)	62843	(30)	1065
International (int)	608	500	(2)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	36	(2)	72
British Indian Ocean Territory (io)	470984	344883	(16215)	(3)	(4984)	(9554)	(142)	(244)	(18)	123419	(7027)	2682
Iran (ir)	358058	299789	(38)	(0)	(5400)	(1436)	(2)	(4)	(19188)	56849	(73307)	1420
Iceland (is)	132756	113206	(15)	(0)	(1204)	(494)	(0)	(24)	(6)	19102	(5509)	448
Italy (it)	4487957	3478860	(5238)	(107)	(228027)	(231247)	(36)	(102)	(5537)	986324	(8144716)	22773
Bailiwick of Jersey (je)	86	82	(0)	(0)	(22)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Jamaica (jm)	67	66	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Jordan (jo)	20857	19068	(71)	(0)	(950)	(64)	(0)	(0)	(0)	1302	(11)	487
Japan (jp)	141480520	55076201	(19596737)	(185718)	(2996516)	(1535008)	(980)	(2894)	(283491)	86209633	(34791584)	194686
Kenya (ke)	20338	15510	(31)	(0)	(916)	(52)	(0)	(0)	(0)	3436	(10156)	1392
Kyrgyzstan (kg)	3861	3292	(24)	(0)	(12)	(2)	(0)	(0)	(0)	374	(104)	195
Cambodia (kh)	9665	5694	(935)	(0)	(42)	(4)	(0)	(0)	(0)	3796	(0)	175
Korea (kr)	4605725	2898394	(634)	(8)	(278348)	(32096)	(2)	(36)	(25)	1694568	(5599921)	12763
Kuwait (kw)	5355	5026	(0)	(0)	(1722)	(2)	(0)	(0)	(0)	257	(0)	72
Cayman Islands (ky)	306	248	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	55	(0)	3
Kazakhstan (kz)	42291	34729	(114)	(4)	(84)	(148)	(0)	(0)	(3)	6911	(61)	651
Lao People's Democratic Republic (la)	5102	4218	(40)	(0)	(12)	(20)	(0)	(0)	(0)	858	(0)	26
Lebanon (lb)	10035	8692	(2)	(0)	(392)	(26)	(0)	(0)	(0)	1169	(159)	174
Liechtenstein (li)	1934	1744	(1)	(0)	(6)	(8)	(0)	(0)	(0)	153	(119)	37
limited (limited)	15	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	15	(0)	0
Sri Lanka (lk)	5537	4544	(11)	(0)	(268)	(8)	(0)	(0)	(0)	746	(163)	247
Lesotho (ls)	4	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Lithuania (lt)	142705	121674	(945)	(0)	(2272)	(592)	(0)	(2)	(0)	19032	(862)	1999

Luxembourg (lu)	252020	199496	(69)	(0)	(25848)	(16533)	(2)	(0)	(6)	52227	(63047)	297
Latvia (lv)	14316	12120	(14)	(0)	(220)	(34)	(0)	(0)	(0)	1807	(5)	389
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	4165	3670	(3)	(0)	(88)	(14)	(0)	(0)	(0)	371	(3)	124
Morocco (ma)	11599	9448	(8)	(0)	(322)	(50)	(0)	(0)	(0)	1980	(46)	171
Monaco (mc)	7617	6474	(29)	(0)	(256)	(24)	(0)	(0)	(0)	904	(44571)	239
Moldova (md)	42715	33762	(35)	(0)	(562)	(150)	(2)	(4)	(0)	8431	(665)	522
Montenegro (me)	44033	29766	(1663)	(0)	(792)	(30)	(4)	(4)	(0)	13270	(8)	997
Madagascar (mg)	3071	2556	(14)	(0)	(222)	(12)	(0)	(0)	(0)	312	(5)	203
Marshall Islands (mh)	17	0	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	0
USA Military (mil)	109354	83288	(996)	(0)	(1806)	(322)	(0)	(0)	(0)	25438	(33767)	628
Macedonia (mk)	4324	3705	(21)	(0)	(64)	(20)	(2)	(4)	(0)	393	(0)	226
Mali (ml)	598	498	(38)	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	100	(0)	0
Myanmar (mm)	319	250	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	23	(0)	46
Mongolia (mn)	3000	2386	(3)	(0)	(72)	(2)	(0)	(0)	(0)	583	(1)	31
Macau (mo)	94	70	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	24	(0)	0
mobile (mobi)	14	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mauritania (mr)	37	36	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Montserrat (ms)	4050	3116	(38)	(0)	(162)	(6)	(0)	(0)	(0)	910	(9)	24
Malta (mt)	1270	1194	(2)	(0)	(362)	(0)	(0)	(0)	(0)	74	(0)	2
Mauritius (mu)	1235	1078	(2)	(0)	(30)	(0)	(0)	(0)	(0)	92	(23)	65
Maldives (mv)	226	144	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	75	(0)	7
Malawi (mw)	65	64	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Mexico (mx)	24045011	23439420	(1128)	(23)	(77578)	(24499)	(4)	(132)	(6921)	570257	(2066996)	35334
Malaysia (my)	321506	266191	(1184)	(19)	(8924)	(1013)	(2)	(6)	(0)	53025	(65268)	2290
Mozambique (mz)	597	412	(6)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	136	(0)	49
Namibia (na)	1750	1486	(6)	(0)	(168)	(0)	(0)	(2)	(0)	149	(0)	115
Name (name)	5	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
New Caledonia (nc)	3792	3310	(8)	(0)	(424)	(22)	(0)	(0)	(0)	364	(61)	118
Network (net)	249038886	183725940	(1867530)	(9393)	(1138735)	(1169745)	(620)	(1424)	(1154954)	64780024	(11569146)	532922
Network (network)	13094	12644	(16)	(0)	(38)	(12)	(0)	(0)	(0)	423	(1)	27
Nigeria (ng)	17430	16354	(0)	(0)	(216)	(200)	(0)	(0)	(0)	672	(815)	404
Nicaragua (ni)	5606	4860	(15)	(0)	(50)	(6)	(0)	(0)	(0)	333	(1)	413
Netherlands (nl)	3138199	2580976	(1427)	(4)	(68330)	(25953)	(40)	(66)	(16)	535282	(4889844)	21941
Norway (no)	2684576	2574852	(1380)	(0)	(15049)	(2359)	(0)	(16)	(12)	106337	(336226)	3387
Nepal (np)	14235	11714	(46)	(0)	(404)	(136)	(0)	(0)	(0)	2263	(16)	258
Niue (nu)	3412	2844	(4)	(0)	(54)	(26)	(0)	(0)	(0)	529	(0)	39
New Zealand (nz)	437263	375093	(2173)	(16)	(8010)	(1945)	(0)	(4)	(0)	57854	(845491)	4316
Oman (om)	16380	13237	(10)	(0)	(420)	(145)	(0)	(0)	(0)	2846	(3851)	297
online (online)	706	292	(53)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	413	(0)	1
Organizations (org)	29160606	25469691	(2640)	(17)	(66066)	(18386631)	(26)	(48)	(2121)	3676515	(2138018)	14400
Panama (pa)	674	626	(0)	(0)	(4)	(12)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	48
Peru (pe)	98074	86752	(32)	(0)	(372)	(258)	(2)	(0)	(0)	7645	(605)	3677
French Polynesia (pf)	3056	1636	(22)	(0)	(64)	(0)	(0)	(0)	(0)	1388	(4)	32
Papua New Guinea (pg)	218	162	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	28	(0)	28
Philippines (ph)	82258	55265	(168)	(0)	(1578)	(246)	(0)	(0)	(0)	25239	(61189)	1754
Pakistan (pk)	467303	403886	(288)	(4)	(74491)	(1786)	(0)	(20)	(106919)	58684	(1300022)	4733
Poland (pl)	2095779	1366277	(1115)	(14)	(29076)	(10165)	(16)	(20)	(29)	716198	(1911515)	13304
St. Pierre and Miquelon (pm)	33	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(3)	2
professional (pro)	2884	1994	(45)	(0)	(16)	(18)	(0)	(0)	(0)	890	(3)	0
Palestinian territories (ps)	3592	3328	(0)	(0)	(106)	(2)	(0)	(0)	(0)	215	(0)	49
Portugal (pt)	1205356	1063730	(170)	(0)	(30396)	(4357)	(0)	(12)	(55)	135388	(2085532)	6238
Palau (pw)	215	184	(1)	(0)	(12)	(10)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	6
Paraguay (py)	23145	17654	(49)	(0)	(40)	(78)	(0)	(0)	(0)	4010	(11405)	1481
Qatar (qa)	130	104	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	24
Reunion (re)	1367	1126	(4)	(0)	(8)	(6)	(0)	(0)	(0)	208	(0)	33
Romania (ro)	156710	133889	(208)	(0)	(1018)	(1408)	(54)	(122)	(0)	18072	(26869)	4749
Republic of Serbia (rs)	74607	63199	(62)	(2)	(1100)	(241)	(6)	(12)	(0)	8131	(15203)	3277
Russian Federation (ru)	2291211	1681598	(2249)	(28)	(59626)	(91851)	(42)	(4454)	(1285)	576863	(1852012)	32750
Rwanda (rw)	1713	1606	(7)	(0)	(468)	(0)	(0)	(0)	(0)	88	(0)	19
Saudi Arabia (sa)	13961	11966	(57)	(0)	(222)	(50)	(0)	(0)	(0)	1777	(1)	218
Solomon Islands (sb)	180	124	(14)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	56	(0)	0
Seychelles (sc)	159	112	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	30
Sudan (sd)	199	168	(0)	(0)	(68)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	24
Sweden (se)	5189193	4939702	(1523)	(0)	(52260)	(7754)	(0)	(86)	(5583)	242404	(4481673)	7087
Singapore (sg)	544925	455917	(2170)	(0)	(22822)	(1843)	(4)	(10)	(3)	84460	(139328)	4548

St. Helena (sh)	384	346	(0)	(0)	(44)	(0)	(0)	(0)	(0)	38	(322)	0
Slovenia (si)	106228	96089	(10)	(0)	(932)	(234)	(0)	(2)	(0)	8403	(39170)	1736
Slovakia (sk)	171004	148469	(70)	(0)	(15181)	(1144)	(4)	(4)	(4172)	18370	(22608)	4165
Sierra Leone (sl)	38	36	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
San Marino (sm)	621	602	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	1
Senegal (sn)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Suriname (sr)	16	12	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	1
Sao Tome and Principe (st)	185	156	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	29	(0)	0
USSR (su)	38539	28105	(189)	(0)	(126)	(144)	(0)	(0)	(0)	9936	(751)	498
El Salvador (sv)	662	508	(2)	(0)	(22)	(0)	(0)	(0)	(0)	78	(0)	76
Sint Maarten (sx)	275	164	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	108	(0)	3
Syrian Arab Republic (sy)	19	18	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Swaziland (sz)	6	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Turks and Caicos Islands (tc)	993	938	(0)	(0)	(134)	(8)	(0)	(0)	(0)	52	(0)	3
tech (tech)	61	26	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	35	(0)	0
technology (technology)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Togo (tg)	16	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Thailand (th)	723371	581179	(5413)	(2)	(62435)	(2139)	(32)	(42)	(0)	133242	(2286836)	8950
Tajikistan (tj)	199	166	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	15	(0)	18
Tokelau (tk)	2050	1856	(6)	(0)	(194)	(42)	(6)	(8)	(0)	140	(7)	54
Timor-Leste (tl)	67	34	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	31	(0)	2
tld (tld)	645	598	(0)	(0)	(44)	(2)	(0)	(0)	(0)	44	(78)	3
Turkmenistan (tm)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tunisia (tn)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tonga (to)	257	122	(16)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	104	(0)	31
Turkey (tr)	738508	542165	(2275)	(10)	(10962)	(3346)	(2)	(12)	(11)	188259	(3553807)	8084
travel (travel)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Trinidad and Tobago (tt)	2043	1856	(0)	(0)	(14)	(0)	(0)	(0)	(0)	102	(0)	85
Tuvalu (tv)	49035	31217	(1917)	(2)	(556)	(34)	(2)	(0)	(0)	17314	(3)	504
Taiwan (tw)	6013714	5646378	(5639)	(0)	(67155)	(584148)	(10)	(66)	(188585)	357610	(1113830)	9726
Tanzania (tz)	455	340	(3)	(0)	(8)	(2)	(0)	(0)	(0)	39	(0)	76
Ukrainian SSR (ua)	583809	467422	(5437)	(0)	(8024)	(1446)	(4)	(26)	(96)	110473	(554169)	5914
Uganda (ug)	4246	3578	(41)	(0)	(154)	(6)	(0)	(0)	(0)	475	(0)	193
United Kingdom (uk)	7428416	6118870	(1623)	(46)	(400747)	(138851)	(12)	(54)	(82)	1270471	(12803331)	39075
USA (us)	85492	73949	(91)	(6)	(3618)	(290)	(6)	(6)	(0)	7045	(137)	4498
Uruguay (uy)	99076	82452	(15)	(0)	(958)	(522)	(0)	(0)	(0)	14562	(1643)	2062
Uzbekistan (uz)	6440	5506	(67)	(8)	(190)	(22)	(0)	(0)	(0)	798	(0)	136
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	8	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Venezuela (ve)	4655	3996	(1)	(0)	(22)	(16)	(0)	(0)	(0)	359	(0)	300
Virgin Islands (U.S.) (vi)	114	112	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Viet Nam (vn)	17982696	6562035	(616622)	(5947)	(374507)	(27751)	(462)	(1016)	(91701)	11360257	(20010333)	60404
Vanuatu (vu)	48	22	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	23	(0)	3
Samoa (ws)	2057	1184	(228)	(0)	(20)	(2)	(0)	(0)	(0)	512	(0)	361
Yemen (ye)	4837	4150	(19)	(0)	(12)	(39)	(0)	(6)	(0)	542	(1)	145
Yugoslavia (yu)	33301	30476	(17)	(0)	(692)	(102)	(0)	(0)	(0)	2463	(22)	362
South Africa (za)	320434	250684	(173)	(4)	(10441)	(782)	(10)	(0)	(2)	64916	(52745)	4834
Zambia (zm)	325	236	(11)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	86	(0)	3
Zimbabwe (zw)	4699	3958	(2)	(0)	(18)	(0)	(0)	(2)	(0)	289	(1)	452
Others or unknown	318569847	210413174	(3375130)	(10070)	(11993134)	(2420780)	(3594)	(7488)	(491383)	107128476	(357154396)	1028197
合 計	1415527877	965742584	(37066290)	(214816)	(22999834)	(34324307)	(11191)	(30144)	(3381560)	443591550	(781161133)	6193743

表2 主な機関別のWWW利用件数 (2017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	200083697	149130442	(35381)	(35)	(257227)	(412)	(24)	(50)	(206)	50726023	(827)	227232
msn.com	195118542	110860463	(5572757)	(1431)	(83733)	(114223)	(1148)	(3330)	(284)	83952601	(32587)	305478
baidu.com	62145540	43441199	(2328397)	(0)	(119892)	(1571)	(294)	(828)	(1102)	18623805	(5202)	80536
com.cn	39730307	38307627	(8471)	(0)	(21672)	(45162)	(184)	(348)	(58)	1421468	(547573)	1212
archive.org	27598815	24393340	(268)	(1)	(850)	(18380195)	(2)	(6)	(4)	3199737	(550)	5738
amazonaws.com	27519361	25042141	(334247)	(162)	(83526)	(769046)	(380)	(732)	(1180)	2375075	(866133)	102145
googlebot.com	24071532	19519591	(2038167)	(265)	(178925)	(14782)	(96)	(270)	(860)	4145580	(11590)	406361
spmode.ne.jp	14494530	2466566	(2692000)	(7044)	(11114)	(420)	(4)	(8)	(2)	12026941	(191)	1023
ocn.ne.jp	14411992	3766370	(2759328)	(57946)	(90231)	(5822)	(10)	(46)	(168)	10629224	(535697)	16398
dgsc.unam.mx	13425771	13327470	(6)	(0)	(8534)	(2660)	(0)	(34)	(5988)	92494	(30054)	5807
yandex.com	13703970	11892266	(44580)	(179)	(18538)	(2053)	(330)	(320)	(598)	1225618	(5961)	586086
googleusercontent.com	12958299	12593951	(18222)	(30)	(6110)	(14749)	(26)	(116)	(35)	361683	(2815298)	2665
au-net.ne.jp	12676901	2848721	(2298423)	(21243)	(97151)	(1857)	(4)	(12)	(88)	9818583	(156577)	9597
ahrefs.com	10946671	10638950	(34796)	(7)	(4054)	(171)	(4)	(8)	(55)	286810	(289)	20911
accurascience.com	10246170	10246170	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
bbtec.net	9300365	2035461	(1418364)	(7380)	(48237)	(2113)	(6)	(24)	(15)	7259631	(370925)	5273
prgmr.com	7786279	2122532	(0)	(0)	(248)	(76)	(0)	(0)	(10853)	5663723	(2417614)	24
sabeyigx.com	7010589	242	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	7010347	(4322304)	0
cablevision.net.mx	6920122	6875206	(62)	(0)	(3826)	(9412)	(0)	(6)	(317)	42389	(77590)	2527
panda-world.ne.jp	6317738	1404091	(1169151)	(4564)	(3934)	(630)	(0)	(10)	(0)	4911408	(13166)	2239
exabot.com	5859937	5764849	(24)	(0)	(247214)	(49)	(4)	(2)	(23)	94993	(34)	95
kclab.jgn2plus.jp	5813464	3995864	(15176)	(0)	(16630)	(2)	(0)	(2)	(2)	1817492	(0)	108
iparadigms.net	5698824	5693772	(2)	(0)	(2896)	(4)	(0)	(0)	(0)	4828	(64)	224
rutgers.edu	5496622	5223922	(670)	(0)	(30414)	(2388)	(104)	(200)	(848)	24754	(63659)	247946
clients.your-server.de	5012866	2670108	(66184)	(61)	(92396)	(12994)	(132)	(194)	(217)	2178485	(347)	164273
google.com	4750589	3219905	(238960)	(582)	(39816)	(19348)	(12)	(170)	(113)	1445687	(8111)	84997
plala.or.jp	4429249	981437	(668545)	(7141)	(25597)	(1372)	(2)	(6)	(3)	3446624	(10996)	1188
dion.ne.jp	4126745	1107499	(731741)	(4326)	(28790)	(771)	(10)	(26)	(3)	3016389	(22584)	2857
comcast.net	3935760	3384712	(5401)	(129)	(80750)	(352055)	(8)	(62)	(254363)	515313	(2107128)	35735
sogou.com	3835410	3741209	(705)	(1)	(8146)	(3272)	(24)	(44)	(232)	39499	(199)	54702
jhmi.edu	3516830	3491718	(43)	(0)	(5460)	(3336027)	(0)	(2)	(0)	24429	(1758661)	683
ncku.edu.tw	3293353	3283754	(25)	(0)	(3376)	(396)	(0)	(0)	(0)	7563	(1330)	2036
hsi14.kabel-badenwuerttemberg.de	3287023	3285544	(356)	(0)	(798)	(1508)	(22)	(32)	(3)	1070	(41)	409
genome.ad.jp	3261134	2841763	(3056)	(627)	(454452)	(924526)	(34)	(84)	(307)	374993	(392343)	44378
eonet.ne.jp	3232850	1093450	(509911)	(4495)	(79495)	(1690)	(8)	(18)	(8)	2138232	(1896580)	1168
gdbnet.ad.jp	2922823	2878826	(1712)	(0)	(4240)	(1698)	(846)	(1696)	(0)	42293	(0)	1704
mesh.ad.jp	2913156	738194	(438043)	(9589)	(67917)	(646)	(0)	(2)	(0)	2174483	(39957)	479
zjnetcom.com	2786174	174796	(357)	(0)	(10379)	(360)	(8)	(16)	(6)	2611242	(9461053)	136
163data.com.cn	2776065	1480568	(117783)	(1)	(121346)	(16026)	(210)	(380)	(41)	1292498	(33633977)	2999
apple.com	2639915	2087042	(267)	(1)	(463430)	(4)	(0)	(4)	(0)	552828	(17)	45
home.ne.jp	2571929	646975	(656744)	(1257)	(29814)	(736)	(0)	(2)	(0)	1922500	(2426)	2454
hpc2n.umu.se	2540402	2540402	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(248)	0	(7079)	0
secureserver.net	2439150	1762512	(605)	(0)	(408)	(380460)	(4)	(28)	(0)	675725	(2)	913
mail.ruddog.eu	2373984	1146039	(12)	(0)	(42)	(1094877)	(0)	(4)	(0)	1227848	(0)	97
so-net.ne.jp	2332439	580044	(356801)	(2979)	(10704)	(1851)	(0)	(8)	(137)	1751644	(36860)	751
rr.com	2267791	1834519	(6245)	(92)	(68582)	(13215)	(4)	(42)	(13103)	413988	(310918)	19284
ritsumei.ac.jp	2215989	2005225	(1906)	(0)	(27488)	(470614)	(0)	(8)	(0)	210303	(4267)	461
bjtelecom.net	2220679	2090845	(1046)	(0)	(7890)	(6436)	(6)	(34)	(38)	120882	(23369)	8952
webmeup.com	2043858	1438707	(369)	(4)	(604)	(30)	(10)	(20)	(6)	604410	(8)	741
ns.imr.no	2024153	2016512	(3)	(0)	(18)	(8)	(0)	(0)	(0)	7617	(13890)	24

表3 国別のWWWアクセスノード数 (2017年度)

国名 (ドメイン名)	ノード数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgenes)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	25	23	(2)	(0)	(4)	(1)	(0)	(0)	(0)	8	(2)	0
Andorra (ad)	59	54	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(1)	10	(2)	9
United Arab Emirates (ae)	1928	1561	(102)	(0)	(52)	(18)	(0)	(0)	(0)	635	(10)	195
aerospace (aero)	18	9	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	0
Afghanistan (af)	5	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Antigua and Barbuda (ag)	91	86	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	4
Albania (al)	362	314	(24)	(0)	(10)	(9)	(1)	(0)	(1)	98	(0)	33
Armenia (am)	726	614	(7)	(0)	(15)	(5)	(0)	(0)	(0)	207	(9)	56
Netherlands Antilles (an)	25	21	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	4
Angola (ao)	171	140	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	82	(2)	42
Argentina (ar)	11399	9826	(95)	(0)	(710)	(608)	(4)	(8)	(1)	3601	(112)	1205
American Samoa (as)	47	29	(13)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	23	(1)	3
Asia (asia)	3	1	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Austria (at)	12760	10840	(272)	(6)	(1110)	(703)	(1)	(8)	(5)	3776	(510)	429
Australia (au)	40910	35746	(2623)	(3)	(3050)	(1761)	(1)	(15)	(42)	11335	(1560)	2030
Aruba (aw)	111	92	(1)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(1)	29	(0)	16
Aland (ax)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Azerbaijan (az)	139	114	(1)	(0)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	41	(1)	13
Bosnia Hercegovina (ba)	572	484	(2)	(0)	(27)	(4)	(0)	(0)	(0)	189	(2)	80
Barbados (bb)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bangladesh (bd)	807	643	(13)	(0)	(105)	(25)	(0)	(0)	(0)	252	(3)	45
Belgium (be)	16895	15410	(323)	(2)	(1433)	(699)	(1)	(5)	(7)	3900	(424)	1015
Burkina Faso (bf)	7	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Bulgaria (bg)	2591	2300	(28)	(0)	(88)	(55)	(0)	(0)	(0)	565	(32)	189
Bahrain (bh)	185	160	(3)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	55	(0)	22
Burundi (bi)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
bitnet (bitnet)	12	12	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Business (biz)	1172	977	(57)	(0)	(59)	(63)	(5)	(5)	(1)	435	(24)	53
Benin (bj)	4	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Bermuda (bm)	15	12	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Brunei Darussalam (bn)	394	311	(16)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	147	(0)	62
Bolivia (bo)	607	512	(30)	(0)	(11)	(8)	(1)	(1)	(0)	128	(1)	66
Brazil (br)	78364	58113	(679)	(0)	(4165)	(2953)	(10)	(40)	(23)	32188	(1721)	5981
Bahamas (bs)	9	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Bhutan (bt)	104	90	(11)	(0)	(27)	(0)	(0)	(0)	(0)	26	(0)	21
Botswana (bw)	142	128	(3)	(0)	(9)	(2)	(0)	(0)	(0)	43	(1)	16
Belarus (by)	2080	1750	(47)	(0)	(42)	(24)	(1)	(0)	(2)	519	(10)	122
Belize (bz)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Canada (ca)	47762	44017	(1328)	(6)	(5685)	(1672)	(2)	(34)	(23)	12940	(1307)	2030
Catalan (cat)	212	195	(5)	(0)	(24)	(13)	(0)	(0)	(1)	62	(6)	11
Cocos Islands (cc)	268	197	(46)	(0)	(25)	(4)	(0)	(0)	(0)	135	(1)	2
Congo (cd)	11	9	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	3
Central African Republic (cf)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Switzerland (ch)	19424	17361	(563)	(0)	(1553)	(1047)	(7)	(22)	(16)	5299	(1255)	673
Cote D'ivoire (ci)	560	461	(3)	(0)	(7)	(2)	(1)	(1)	(0)	204	(0)	125
Cook Islands (ck)	4	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
Chile (cl)	5298	4679	(38)	(0)	(541)	(248)	(1)	(6)	(2)	1503	(145)	376
club (club)	51	35	(15)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	31	(0)	3
Cameroon (cm)	69	59	(1)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	21	(0)	17
China (cn)	231059	210001	(7266)	(10)	(6657)	(3152)	(150)	(243)	(58)	36769	(2939)	2158
Colombia (co)	13108	12009	(83)	(0)	(1070)	(741)	(1)	(7)	(5)	2840	(319)	837
Commercial (com)	398578	308352	(61639)	(846)	(27928)	(10751)	(857)	(1738)	(1537)	156593	(13409)	30414
cooperative (coop)	13	12	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	3	(0)	0
Costa Rica (cr)	435	384	(7)	(0)	(20)	(18)	(0)	(0)	(0)	113	(2)	44
Cuba (cu)	138	135	(0)	(0)	(17)	(12)	(0)	(1)	(0)	19	(6)	22

Cape Verde (cv)	8	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Curacao (cw)	100	86	(1)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	22	(0)	10
Christmas Island (cx)	5	1	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Cyprus (cy)	491	427	(1)	(1)	(20)	(19)	(0)	(0)	(0)	126	(7)	34
Czechoslovakia (cz)	11628	10587	(345)	(0)	(1193)	(633)	(11)	(35)	(26)	3038	(359)	1352
Germany (de)	102335	88847	(3311)	(34)	(9798)	(5796)	(80)	(157)	(136)	29631	(4629)	4014
Denmark (dk)	7577	6918	(118)	(0)	(677)	(534)	(0)	(9)	(4)	2112	(305)	323
Dominica (dm)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Dominican Republic (do)	1089	918	(17)	(1)	(14)	(16)	(0)	(0)	(0)	287	(1)	96
Algeria (dz)	32	28	(1)	(0)	(5)	(2)	(0)	(0)	(0)	11	(0)	3
Ecuador (ec)	2467	2214	(33)	(0)	(86)	(67)	(0)	(1)	(0)	440	(16)	206
USA Educational (edu)	193303	180947	(1211)	(8)	(24849)	(11687)	(16)	(142)	(303)	46288	(9731)	5336
Estonia (ee)	1958	1752	(35)	(0)	(125)	(45)	(0)	(1)	(0)	465	(61)	189
Egypt (eg)	831	753	(15)	(0)	(57)	(20)	(0)	(0)	(1)	140	(0)	31
Eritrea (er)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Spain (es)	18933	17500	(150)	(1)	(3109)	(1483)	(8)	(24)	(23)	5297	(1025)	1008
Ethiopia (et)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
European Union (eu)	11990	10604	(4546)	(18)	(2372)	(470)	(61)	(93)	(100)	8576	(534)	4359
Finland (fi)	11996	11048	(151)	(1)	(656)	(532)	(0)	(4)	(5)	2307	(411)	368
Fiji (fj)	73	63	(6)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	13
Falkland Islands (fk)	2	2	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Micronesia (fm)	22	7	(16)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	19	(0)	2
Faroe Islands (fo)	13	11	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
France (fr)	38033	34348	(836)	(2)	(4863)	(2376)	(10)	(47)	(25)	10149	(1643)	2135
Gabon (ga)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
gbl (gbl)	13	11	(3)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	5
Georgia (ge)	803	697	(5)	(0)	(12)	(6)	(0)	(0)	(0)	214	(2)	77
Guernsey (gg)	25	24	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Ghana (gh)	191	151	(9)	(0)	(7)	(3)	(1)	(1)	(0)	63	(0)	23
Greenland (gl)	33	28	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	4
Gambia (gm)	11	10	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
USA Government (gov)	8049	7388	(55)	(0)	(1156)	(568)	(2)	(6)	(6)	2108	(625)	323
Equatorial Guinea (gq)	10	7	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	1
Greece (gr)	11121	9771	(68)	(1)	(549)	(353)	(1)	(5)	(0)	2938	(290)	813
South Georgia (gs)	7	0	(7)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Guatemala (gt)	909	789	(40)	(0)	(19)	(11)	(0)	(0)	(0)	183	(0)	71
Guyana (gy)	135	122	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	41	(1)	22
Hong Kong (hk)	6904	6096	(223)	(0)	(637)	(381)	(0)	(8)	(8)	2116	(424)	150
Honduras (hn)	147	126	(6)	(0)	(2)	(4)	(0)	(2)	(0)	30	(0)	12
host (host)	1	0	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Croatia (hr)	4212	3655	(41)	(0)	(85)	(63)	(1)	(1)	(1)	1126	(37)	528
Hungary (hu)	9843	8700	(293)	(2)	(377)	(234)	(1)	(4)	(8)	2511	(151)	929
Indonesia (id)	10374	8749	(706)	(1)	(261)	(189)	(1)	(1)	(1)	2711	(38)	651
Ireland (ie)	4408	3989	(43)	(0)	(365)	(268)	(0)	(1)	(6)	1116	(158)	150
Israel (il)	7455	6808	(54)	(0)	(689)	(367)	(0)	(6)	(11)	1860	(228)	563
India (in)	32481	28148	(904)	(6)	(4627)	(1245)	(5)	(37)	(17)	9905	(533)	2767
Information domains (info)	974	663	(166)	(0)	(46)	(22)	(6)	(5)	(0)	383	(27)	54
International (int)	22	17	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(2)	2
British Indian Ocean Territory (io)	1409	1032	(433)	(3)	(161)	(132)	(55)	(58)	(4)	872	(21)	178
Iran (ir)	4309	3815	(23)	(0)	(425)	(252)	(1)	(2)	(5)	1190	(257)	96
Iceland (is)	1155	1048	(13)	(0)	(54)	(97)	(0)	(3)	(2)	319	(15)	41
Italy (it)	46000	40924	(804)	(6)	(4751)	(1876)	(15)	(38)	(38)	12654	(1355)	3010
Bailiwick of Jersey (je)	7	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Jamaica (jm)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Jordan (jo)	1726	1559	(35)	(0)	(57)	(16)	(0)	(0)	(0)	277	(2)	92
Japan (jp)	6276676	678189	(6832219)	(4845)	(38235)	(9483)	(68)	(377)	(186)	5886514	(3359)	7741
Kenya (ke)	480	426	(20)	(0)	(55)	(12)	(0)	(0)	(0)	153	(7)	94
Kyrgyzstan (kg)	371	314	(20)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	85	(1)	17
Cambodia (kh)	984	671	(293)	(0)	(69)	(2)	(0)	(0)	(0)	391	(0)	31

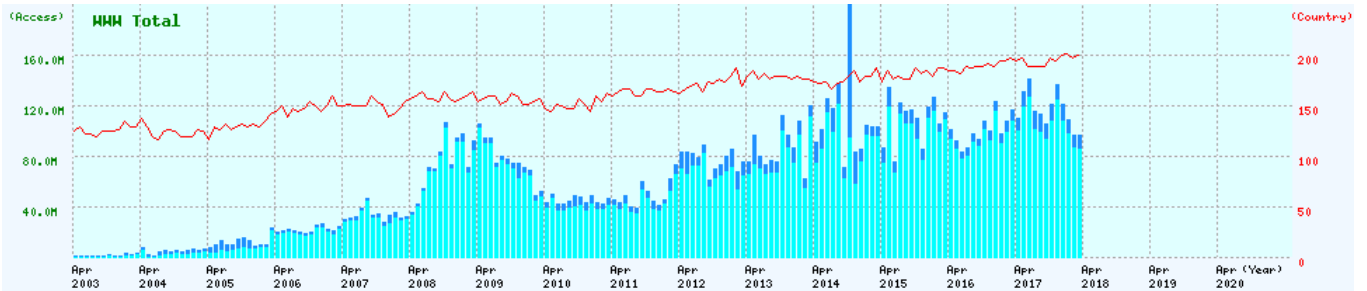
Korea (kr)	20302	18942	(111)	(1)	(4048)	(1290)	(1)	(15)	(10)	5289	(663)	391
Kuwait (kw)	107	103	(0)	(0)	(42)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	4
Cayman Islands (ky)	43	31	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	3
Kazakhstan (kz)	1856	1625	(48)	(1)	(22)	(31)	(0)	(0)	(2)	368	(6)	63
Lao People's Democratic Republic (la)	24	20	(11)	(0)	(2)	(4)	(0)	(0)	(0)	15	(0)	4
Lebanon (lb)	415	391	(2)	(0)	(20)	(8)	(0)	(0)	(0)	67	(3)	24
Liechtenstein (li)	75	64	(0)	(0)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	21	(3)	14
Limited (limited)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Sri Lanka (lk)	112	105	(7)	(0)	(19)	(2)	(0)	(0)	(0)	38	(3)	24
Lesotho (ls)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Lithuania (lt)	3209	2832	(29)	(0)	(139)	(78)	(0)	(1)	(0)	828	(16)	308
Luxembourg (lu)	759	655	(35)	(0)	(70)	(61)	(1)	(0)	(4)	276	(98)	41
Latvia (lv)	809	726	(13)	(0)	(15)	(8)	(0)	(0)	(0)	158	(2)	65
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	449	394	(3)	(0)	(7)	(4)	(0)	(0)	(0)	80	(2)	20
Morocco (ma)	388	313	(6)	(0)	(25)	(8)	(0)	(0)	(0)	139	(3)	48
Monaco (mc)	313	240	(25)	(0)	(19)	(10)	(0)	(0)	(0)	103	(7)	10
Moldova (md)	1488	1290	(25)	(0)	(48)	(30)	(1)	(2)	(0)	402	(14)	101
Montenegro (me)	354	239	(73)	(0)	(15)	(2)	(1)	(1)	(0)	155	(6)	27
Madagascar (mg)	230	178	(13)	(0)	(12)	(2)	(0)	(0)	(0)	89	(2)	37
Marshall Islands (mh)	3	0	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
USA Military (mil)	830	670	(113)	(0)	(45)	(41)	(0)	(0)	(0)	296	(25)	20
Macedonia (mk)	521	407	(4)	(0)	(4)	(2)	(1)	(1)	(0)	187	(0)	100
Mali (ml)	18	16	(3)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	1
Myanmar (mm)	12	11	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	1
Mongolia (mn)	52	47	(3)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	15	(1)	3
Macau (mo)	11	5	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	0
mobile (mobi)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mauritania (mr)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Montserrat (ms)	27	24	(8)	(0)	(5)	(2)	(0)	(0)	(0)	16	(3)	0
Malta (mt)	31	26	(2)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	2
Mauritius (mu)	119	99	(2)	(0)	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	41	(1)	22
Maldives (mv)	31	23	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	7
Malawi (mw)	6	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Mexico (mx)	45837	41582	(653)	(3)	(3375)	(2458)	(2)	(48)	(30)	10710	(606)	2159
Malaysia (my)	4673	3883	(328)	(2)	(397)	(140)	(1)	(2)	(0)	1541	(71)	473
Mozambique (mz)	130	99	(6)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	58	(0)	25
Namibia (na)	173	143	(3)	(0)	(12)	(0)	(0)	(1)	(0)	57	(0)	25
Name (name)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
New Caledonia (nc)	79	66	(6)	(0)	(5)	(3)	(0)	(0)	(0)	28	(3)	12
Network (net)	1464379	514641	(911471)	(446)	(28849)	(13691)	(176)	(397)	(228)	1029814	(7891)	26510
Network (network)	90	76	(6)	(0)	(4)	(3)	(0)	(0)	(0)	32	(1)	6
Nigeria (ng)	274	254	(0)	(0)	(18)	(11)	(0)	(0)	(0)	50	(28)	25
Nicaragua (ni)	375	323	(13)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	64	(1)	25
Netherlands (nl)	30058	27224	(429)	(2)	(2155)	(1753)	(13)	(23)	(9)	7569	(1176)	1463
Norway (no)	7929	7134	(75)	(0)	(618)	(371)	(0)	(6)	(4)	1981	(487)	251
Nepal (np)	856	696	(34)	(0)	(24)	(13)	(0)	(0)	(0)	251	(4)	102
Niue (nu)	55	49	(3)	(0)	(6)	(4)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	4
New Zealand (nz)	5973	4810	(739)	(4)	(423)	(267)	(0)	(1)	(0)	1889	(92)	310
Oman (om)	613	523	(9)	(0)	(35)	(24)	(0)	(0)	(0)	219	(8)	87
online (online)	16	9	(9)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	1
Organizations (org)	8500	7685	(364)	(4)	(1056)	(586)	(7)	(15)	(67)	2487	(729)	507
Panama (pa)	26	25	(0)	(0)	(1)	(2)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	3
Peru (pe)	1103	981	(18)	(0)	(40)	(34)	(1)	(0)	(0)	221	(5)	86
French Polynesia (pf)	97	58	(17)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	51	(1)	9
Papua New Guinea (pg)	26	19	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	4
Philippines (ph)	1005	880	(92)	(0)	(120)	(44)	(0)	(0)	(0)	426	(47)	177
Pakistan (pk)	4863	4340	(64)	(1)	(898)	(231)	(0)	(8)	(7)	1368	(89)	519
Poland (pl)	29891	26522	(306)	(2)	(1451)	(1018)	(5)	(10)	(10)	7557	(498)	2085
St. Pierre and Miquelon (pm)	8	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(1)	2

professional (pro)	51	41	(1)	(0)	(2)	(4)	(0)	(0)	(0)	18	(1)	0
Palestinian territories (ps)	271	249	(0)	(0)	(11)	(1)	(0)	(0)	(0)	49	(0)	14
Portugal (pt)	11877	10633	(103)	(0)	(853)	(528)	(0)	(4)	(6)	3327	(388)	1004
Palau (pw)	19	13	(1)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Paraguay (py)	596	501	(40)	(0)	(12)	(16)	(0)	(0)	(0)	154	(16)	89
Qatar (qa)	8	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Reunion (re)	83	68	(3)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	32	(0)	10
Romania (ro)	8602	7340	(87)	(0)	(117)	(156)	(23)	(32)	(0)	2963	(42)	1341
Republic of Serbia (rs)	5194	4410	(29)	(1)	(90)	(56)	(1)	(2)	(0)	1849	(20)	940
Russian Federation (ru)	32355	26493	(1260)	(13)	(1512)	(850)	(17)	(18)	(92)	8987	(1150)	2583
Rwanda (rw)	94	80	(6)	(0)	(29)	(0)	(0)	(0)	(0)	22	(0)	10
Saudi Arabia (sa)	617	515	(17)	(0)	(21)	(14)	(0)	(0)	(0)	163	(1)	47
Solomon Islands (sb)	13	10	(5)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Seychelles (sc)	61	35	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	15
Sudan (sd)	11	10	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Sweden (se)	18470	16680	(260)	(0)	(2005)	(1050)	(0)	(23)	(36)	4965	(834)	592
Singapore (sg)	8043	6113	(1433)	(0)	(481)	(235)	(1)	(4)	(2)	2892	(197)	524
St. Helena (sh)	25	21	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(1)	0
Slovenia (si)	851	774	(6)	(0)	(57)	(53)	(0)	(1)	(0)	214	(30)	66
Slovakia (sk)	4938	4486	(42)	(0)	(239)	(93)	(2)	(2)	(4)	1000	(46)	439
Sierra Leone (sl)	5	5	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
San Marino (sm)	21	18	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	1
Senegal (sn)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Suriname (sr)	4	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	1
Sao Tome and Principe (st)	17	15	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
USSR (su)	385	335	(10)	(0)	(17)	(24)	(0)	(0)	(0)	106	(13)	29
El Salvador (sv)	42	39	(2)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	6
Sint Maarten (sx)	26	23	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	3
Syrian Arab Republic (sy)	4	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Swaziland (sz)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Turks and Caicos Islands (tc)	59	48	(0)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	1
tech (tech)	11	9	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
technology (technology)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Togo (tg)	6	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Thailand (th)	23973	18673	(3750)	(1)	(2067)	(370)	(14)	(19)	(0)	6960	(159)	894
Tajikistan (tj)	30	28	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	9
Tokelau (tk)	22	19	(1)	(0)	(3)	(3)	(1)	(1)	(0)	9	(2)	1
Timor-Leste (tl)	9	5	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	2
tld (tld)	53	50	(0)	(0)	(4)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(1)	2
Turkmenistan (tm)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tunisia (tn)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tonga (to)	33	19	(8)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	4
Turkey (tr)	16676	14631	(229)	(2)	(870)	(503)	(1)	(6)	(4)	4403	(253)	1337
travel (travel)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Trinidad and Tobago (tt)	193	167	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	35	(0)	15
Tuvalu (tv)	668	206	(460)	(1)	(15)	(5)	(1)	(0)	(0)	509	(1)	18
Taiwan (tw)	22248	19516	(1258)	(0)	(2321)	(950)	(5)	(20)	(13)	6954	(1260)	532
Tanzania (tz)	58	44	(3)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	7
Ukrainian SSR (ua)	6328	5457	(162)	(0)	(313)	(159)	(1)	(7)	(7)	1800	(58)	472
Uganda (ug)	171	146	(19)	(0)	(12)	(3)	(0)	(0)	(0)	45	(0)	15
United Kingdom (uk)	51663	47497	(570)	(6)	(5775)	(3196)	(3)	(25)	(32)	12819	(2815)	1626
USA (us)	3711	3476	(43)	(1)	(103)	(53)	(0)	(0)	(0)	450	(6)	195
Uruguay (uy)	1679	1473	(10)	(0)	(98)	(96)	(0)	(0)	(0)	459	(28)	135
Uzbekistan (uz)	259	212	(20)	(1)	(13)	(5)	(0)	(0)	(0)	69	(0)	16
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Venezuela (ve)	323	250	(1)	(0)	(2)	(4)	(0)	(0)	(0)	82	(0)	21
Virgin Islands												

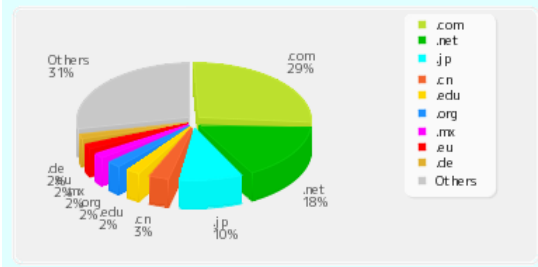
(U.S.) (vi)	6	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Viet Nam (vn)	975636	720395	(248387)	(230)	(10087)	(3921)	(183)	(295)	(52)	280364	(1632)	4673
Vanuatu (vu)	13	8	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	3
Samoa (ws)	77	65	(2)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	12
Yemen (ye)	272	236	(6)	(0)	(2)	(9)	(0)	(2)	(0)	55	(1)	9
Yugoslavia (yu)	192	176	(5)	(0)	(39)	(22)	(0)	(0)	(0)	84	(6)	28
South Africa (za)	5769	5055	(79)	(1)	(545)	(201)	(5)	(0)	(1)	1554	(95)	526
Zambia (zm)	46	32	(9)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	22	(0)	3
Zimbabwe (zw)	281	249	(2)	(0)	(5)	(0)	(0)	(1)	(0)	67	(1)	47
Others or unknown	7741152	7409165	(143933)	(419)	(112437)	(47869)	(1285)	(2243)	(902)	580982	(35183)	64235
合 計	18307824	10917078	(8240118)	(6945)	(339135)	(146570)	(3140)	(6439)	(4164)	8313312	(106907)	205124

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

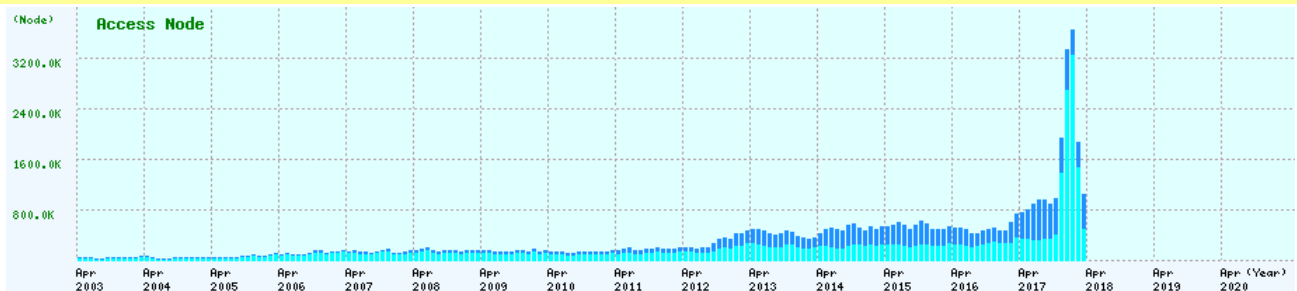


国別のWWW利用件数(2017年度)

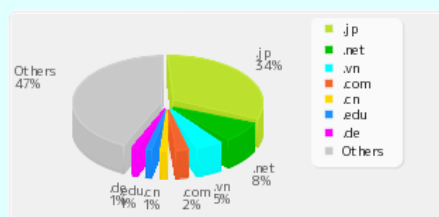


アクセスノード数の推移

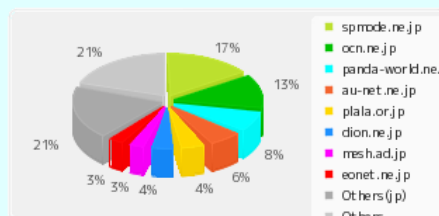
日本以外からのノード数 日本からのノード数



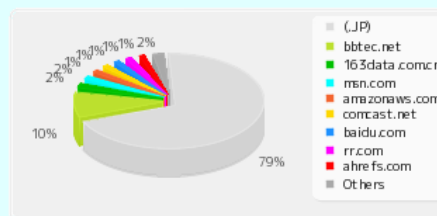
国別のアクセスノード数(2017年度)



上位50機関のアクセスノード数(2017年度)



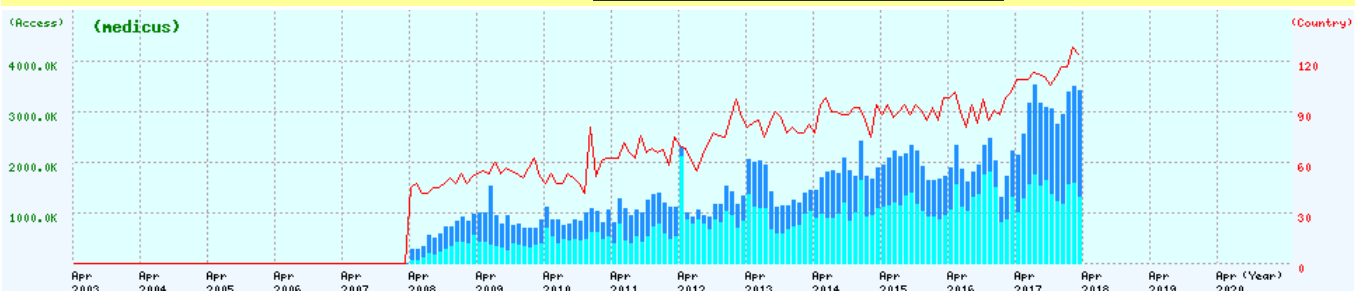
上位50機関のアクセスノード数(2017年度)



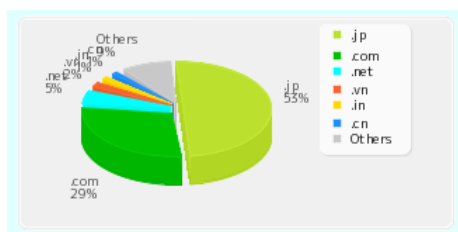
注)・上位50機関のアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

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



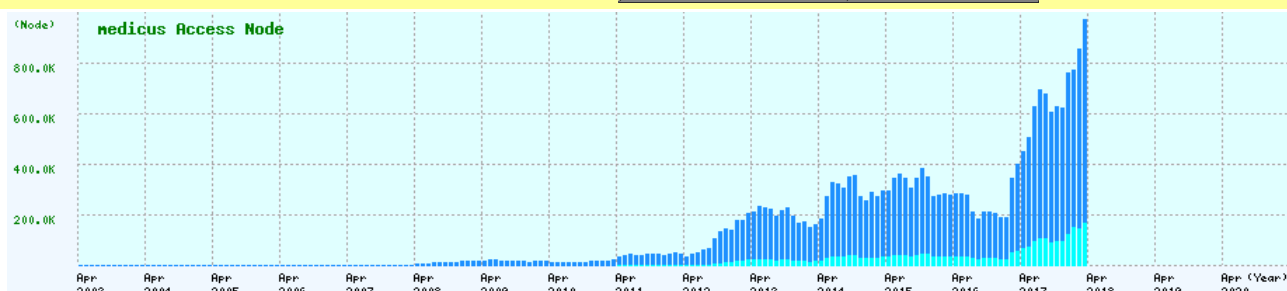
国別のMEDICUS利用件数(2017年度)



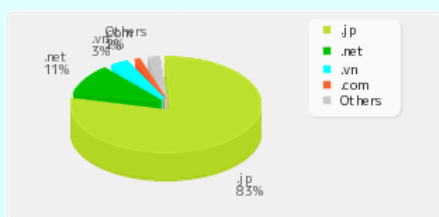
MEDICUSアクセスノード数の推移

日本以外からのノード数

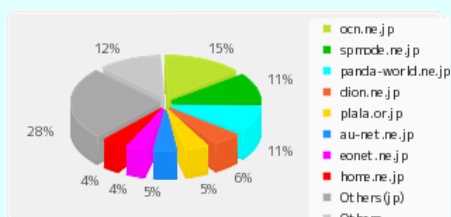
日本からのノード数



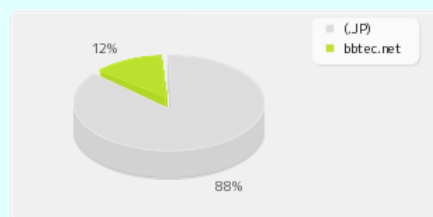
国別のMEDICUSアクセスノード数(2017年度)



上位50機関のMEDICUSアクセスノード数(2017年度)



上位50機関のMEDICUSアクセスノード数(2017年度)



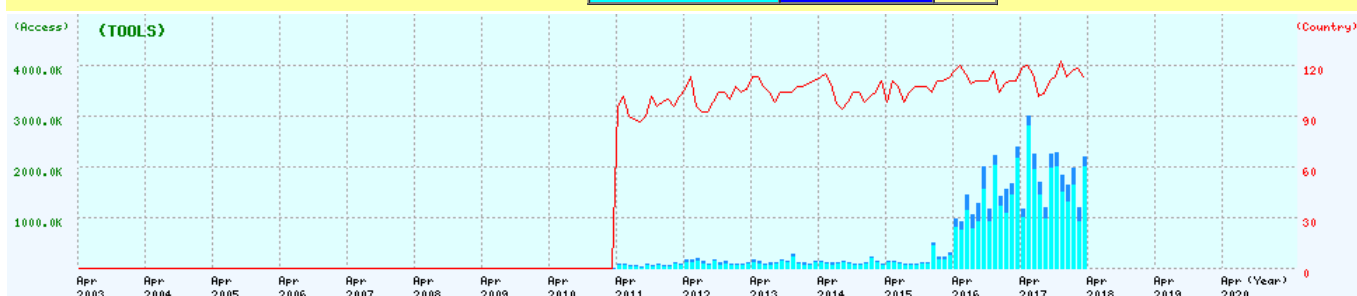
注)・上位50機関のMEDICUSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別のTOOLS利用件数

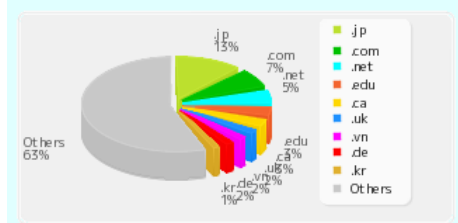
日本以外からの件数

日本からの件数

国数



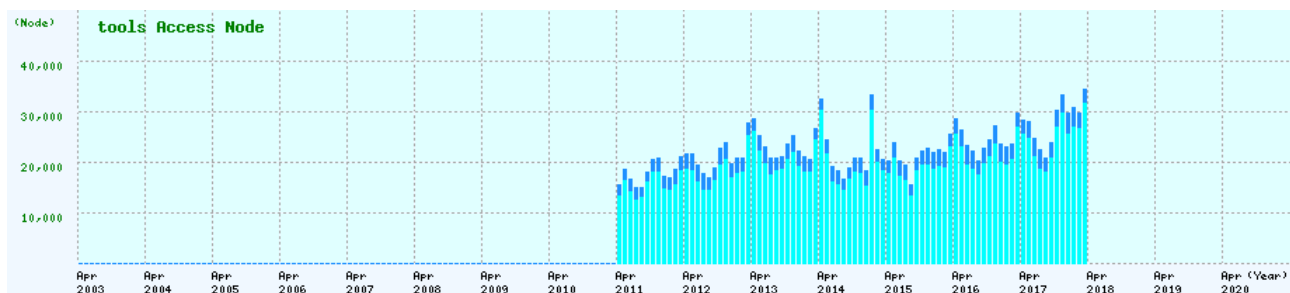
国別のTOOLS利用件数(2017年度)



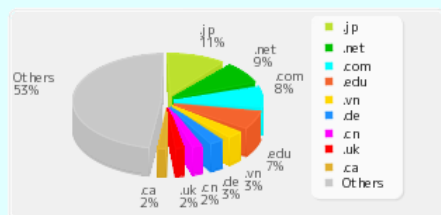
TOOLSアクセスノード数の推移

日本以外からのノード数

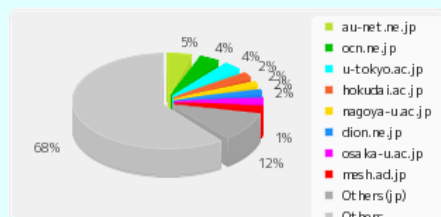
日本からのノード数



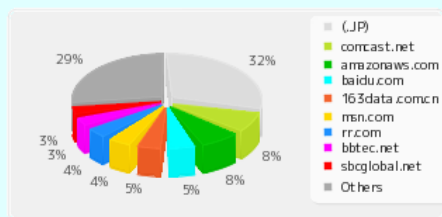
国別のTOOLSアクセスノード数(2017年度)



上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2017年度)



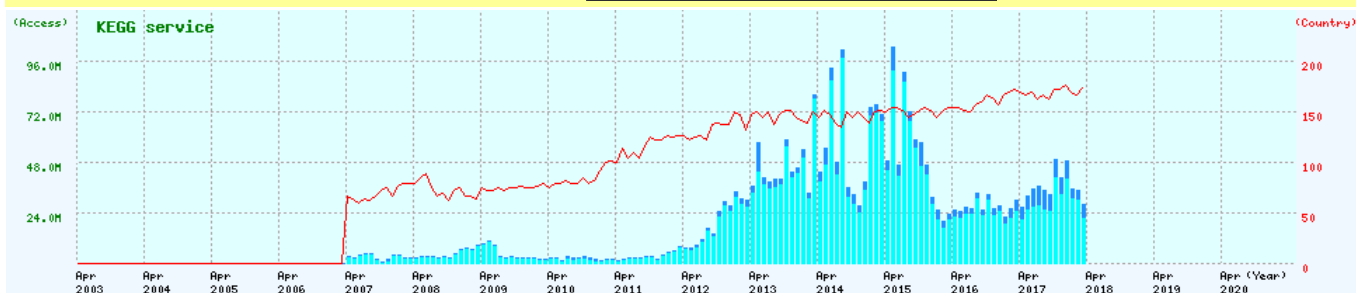
上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2017年度)



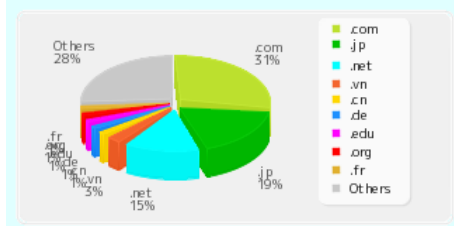
注)・上位50機関のTOOLSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

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

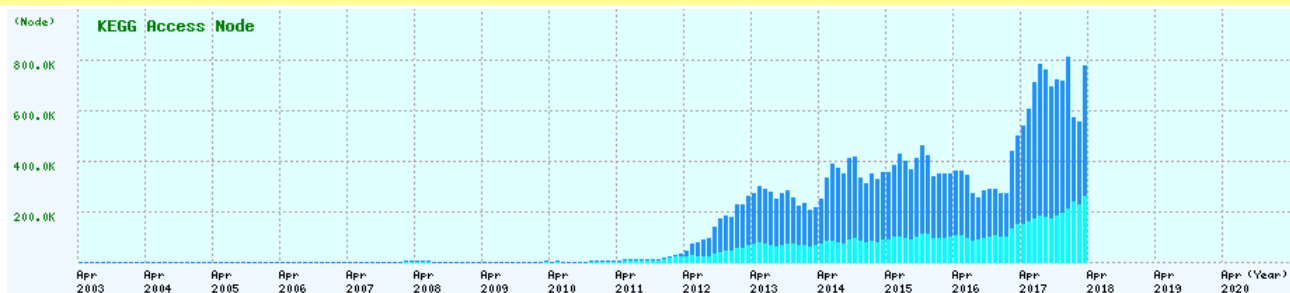


国別の KEGG利用件数(2017年度)

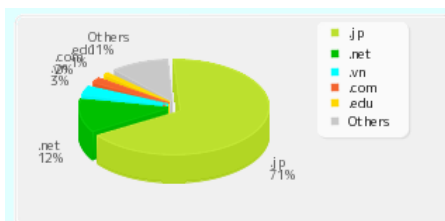


KEGGアクセスノード数の推移

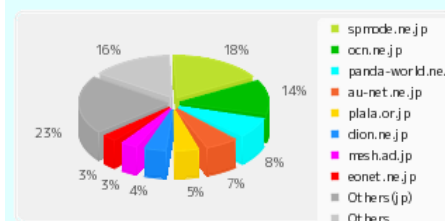
日本以外からのノード数 日本からのノード数



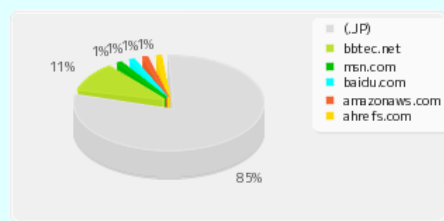
国別の KEGGアクセスノード数(2017年度)



上位50機関の KEGGアクセスノード数(2017年度)



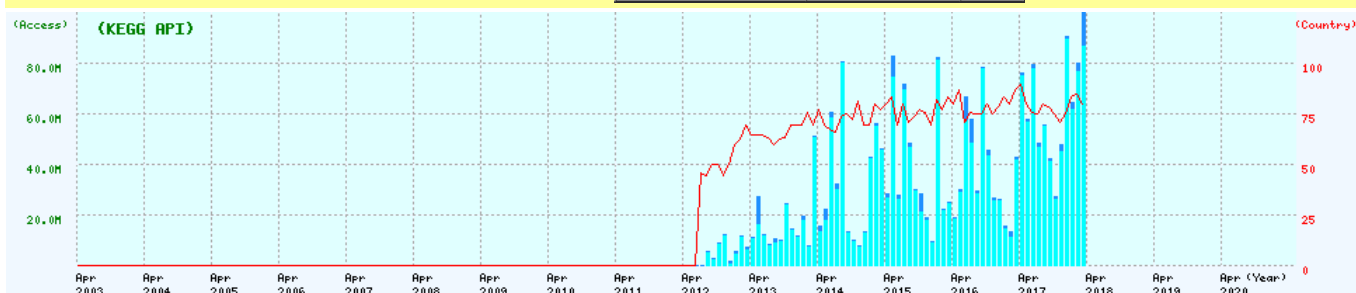
上位50機関の KEGGアクセスノード数(2017年度)



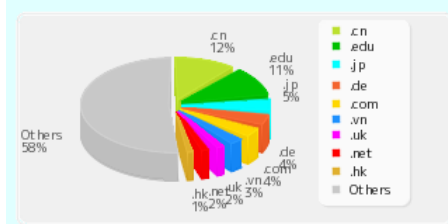
注) ・上位50機関の KEGGアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

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

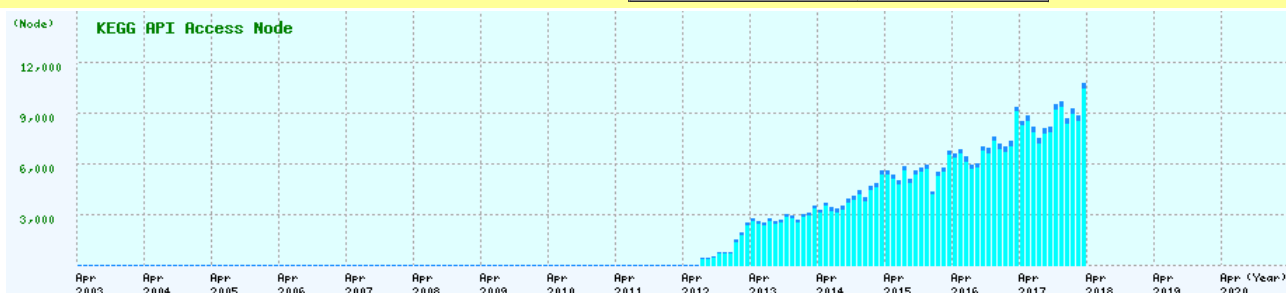


国別の KEGG API 利用件数(2017年度)

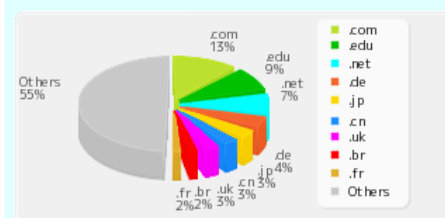


KEGG API アクセスノード数の推移

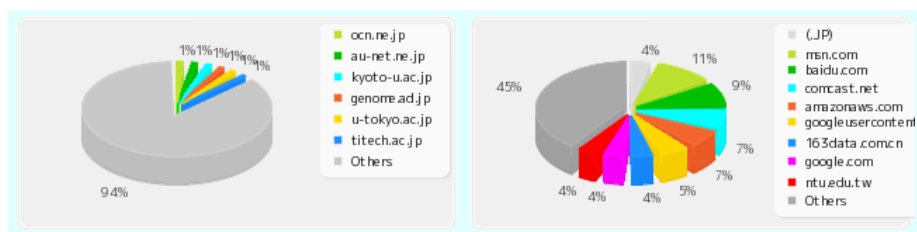
日本以外からのノード数 日本からのノード数



国別の KEGG API アクセスノード数(2017年度)



上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2017年度) 上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2017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	菱化システム社 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	菱化システム社 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・ピヨンド(株) 瀧本まゆみ
2012 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2012.06.15	1日	計算サーバ利用講習会	6名	日本SGI(株) 福本 淳司
2012.06.29	1日	並列化プログラミング講習会	4名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2012.07.05	1日	AVS/Express Viz講習会	1名	サイバネットシステム(株) 松岡 憲昭
2012.07.13	1日	SCIGRESS講習会	3名	富士通(株) TCソリ事業本部 大輔
2012.09.04	1日	Discovery Studio	7名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.09.05,06	2日	Materials Studio	5名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2012.09.14	0.5日	Gaussian	16名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2012.09.20	0.5日	Mathematica	15名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2012.09.25	1日	DS Developer Client講習会	2名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.12.13	0.5日	Reaxys講習会	10名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本まゆみ
2013 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2013.07.03	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2013.07.23	1日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2013.07.25	2日	Materials Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2013.07.30	0.5日	Mathematica 講習会	2名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2013.09.18	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2014.07.18	1日	Discovery Studio 講習会	3名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.23	2日	Materials Studio 講習会	13名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2014.08.27	0.5日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.30	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	2名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2014.09.03	0.5日	Gaussian 講習会	5名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014.10.16	0.5日	Mathematica 講習会	1名	日本電子計算(株) 産業事業部 伊藤 雅将
2014.11.06	0.5日	Reaxys講習会	1名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本 まゆみ
2015 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2015.06.17	0.5日	Gaussian 講習会	9名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2015.07.14	2日	Materials Studio 講習会	10名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2015.07.16	1日	Discovery Studio 講習会	9名	BIOVIA 高岡 雄司
2015.08.07	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔
2016 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2016.05.13	0.5日	第1回ゲノムネット講習会京大化研スパコン利用法	27名	日本SGI(株)上原英也、京大化研 緒方博之・五斗進
2016.07.05	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2016.07.06	2日	Materials Studio 講習会	16名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2016.07.20	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2016.09.02	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔
2016.09.15	0.5日	Mathematica 講習会	1名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2016.11.18	0.5日	Reaxys講習会	3名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2016.11.25	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2017 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2017.07.11	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2017.07.12	2日	Materials Studio 講習会	6名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2017.07.20	0.5日	Reaxys講習会	2名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2017.09.07	0.5日	Gaussian 講習会	15名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2017.09.15	0.5日	バイオユーザのための化研スパコンシステム利用法	23名	日本ヒューレット・パカード(株) 上原 英也

平成29年度研究課題一覽

化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学
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

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
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	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学
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

[illegible]

時任	宣博
笹森	貴裕
水畑	吉行
鈴木	裕子
郭晶	東
村田	靖次郎
村田	靖次郎
村田	靖次郎
若宮	淳志
村田	理尚
橋川	祥史
川端	猛夫
山中	正浩

林	一	広
古	田	巧
上	田	善弘
寺	西	利治
寺	西	利治
寺	西	利治
坂	本	雅典
佐	藤	良太
猿	山	雅亮
Trinh	Thuy	
松	本	憲志
川	脇	徳久
辻	井	敬亘
大	野	工司
榊	原	圭太

山子	茂
高見	佐織
登阪	雅聡
中村	泰之
茅原	栄一
橋本	士雄
PATEL	KUMAR
李	文娟
藤田	健弘
水落	憲和
森下	弘樹
藤原	正規
小野	輝男
小野	輝男
山口	美保
楠田	敏之
森山	貴広
塩田	陽一
二木	史朗
二木	史朗
田中	由美
今西	未来
河野	文一
渡辺	健太
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
Perron	Amelie
竹本	靖
中島	光恵
茅 迥	
浅野	理沙
八塚	研治
Mendoza	Aileen
Vu Hue	
Pe Kathleen	
ブンザラン	ルービ
勝田	陽介

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
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出
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
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
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
三次元 π 共役系の合成と性質に関する研究
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-ピロ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
 β -hairpin型架橋ペプチド
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
多官能基性化合物の位置選択的分子変換
化学研究所連絡用
精密無機合成化学
不斉化学
ナノ粒子超構造の構築
無機ナノ粒子の精密合成と機能デバイスへの応用
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
第三元素添加による新奇規則化合金相Fe-Pdナノ粒子の創製
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
高分子ブランの構造と物性
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ヤヌス型ボルブラスの合成と高次構造の創製
精密合成反応の設計

[illegible]

[illegible]

中村 正治
高谷 光
岩本 貴寛
磯崎 勝弘
LAKSMIKANTA ADAK
松田 博
ピンチエテ フランチェスカ
ゲルツツツアー ヤン
小澤 文幸
小澤 文幸
池田 奈緒子
竹内 勝彦
脇岡 正幸
竹内 勝彦
金光 義彦
金光 義彦
永田 貴美子
廣理 英基
井原 章之
島川 祐一
島川 祐一
市川 能也
菅 大介
齊藤 高志
緒方 博之
緒方 博之
伊藤 悦子
Blanc-Mathieu Romain
遠藤 寿
吉川 元貴
西山 拓輝

ナノ構造光物性
無機機能性材料の合成と評価
機能性酸化物材料の研究
遷移金属酸化物の合成と物性
機能性遷移金属酸化物の研究
無機固体化学の研究
巨大DNAウィルスゲノムの解析
バイオインフォマティクス
秘書業務
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究
メタゲノミクスを利用した海洋プランクトン生態系に関する研究
ウィルスゲノムの解析
16SrRNA遺伝子を標的としたアンブリコン配列の解析によるパンクレリ
パーゼ投与マウスの腸内細菌叢の解析
ゲノムデータに基づく知識発見
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ブリコン解析
隠れマルコフモデルによるホモロジー検索に基づくタンパク質機能推定
海洋巨大ウイルスとその宿主の多様性解析について
共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究
ケルト海の堆積物中におけるウィルスの系統解析
ケルト海の堆積物中におけるRNAウイルスの系統解析
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究

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
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 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 化学研究所共通
化学研究所 化学研究所共通
化学研究所 化学研究所共通
化学研究所 化学研究所共通
化学研究所 化学研究所共通
化学研究所 化学研究所共通
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
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

防災研究所 附属地震予知研究センター

[illegible]

阿久津 達也
田村 武幸
馬見塚 拓
Nguyen Hao
八代 幸造
藤橋 明子
上村 美由紀
武平 時代
中村 かおり
中野 友佳子
濱岡 芽里
松田 一成
中江 隆博
倉田 真宏
村本 智也

劉 弋鋒
森 勝二
廣 二
町 美彦
村 稚子
上 加代子
若 裕美
八 幸造
松 善治
井 粍
大 直子
由 佳子
延 由紀
原 浩二
太 慶子
大 眞理子
村 博美
宮 恭子
本 則子
酒 京子
井 慶子
上 眞紀
地 朋世
立 明子
花 眞知子
上 初和
道 尚美
大 純子
山 眞紀
野 純子
庭 眞美
廣 公理子
庭 眞子
高 眞子
谷 眞知子
東 初和
城 尚美
澤 純子
田 眞紀
田 眞紀
松 眞子
本 眞子
安 眞子
村 眞子
辻 眞子
久 眞子
桶 眞子
竹 眞子
辺 眞子
岡 眞子
田 眞子
奥 眞子
山 眞子
中 眞子
村 眞子
小 眞子
森 眞子
三 眞子
元 眞子
野 眞子
中 眞子
村 眞子
永 眞子
田 眞子
中 眞子
野 眞子
大 眞子
西 眞子
三 眞子
木 眞子
柿 眞子
本 眞子
尾 眞子
崎 眞子
崎 眞子
森 眞子
田 眞子
守 眞子
泰 眞子
池 眞子
田 眞子
岩 眞子
松 眞子
落 眞子
越 眞子
福 眞子
田 眞子
小 眞子
西 眞子
上 眞子
野 眞子
有 眞子
井 眞子
楠 眞子
見 眞子
福 眞子
田 眞子
平 眞子
橋 眞子
本 眞子
井 眞子
上 眞子

生物情報ネットワークの解析と制御
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発
機械学習に基づく生体分子パスウェイの解析
バイオインフォマティクス
広報関係業務
質量分析業務
同窓会事務関連業務
広報関係業務
広報関係業務
広報関係業務
半導体ナノ構造のイメージング分光
ナノ炭素細線物質に関する理論計算
地震時における構造物の破壊
海底圧力計を用いたヒ克蘭ギ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
津波地震に伴う前震活動

[illegible]

宇治地区事務部 研究協力課	日下部 忠繁	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	八木 裕美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	大戸 瑞穂	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	杉山 かおり	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	谷川 禅	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	福島 典子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	北川 伸代	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	中谷 浩美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	織田 真澄	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	鹿間 順子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	李 風英	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	木下 亜紀子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	好川 佳子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	飯田 智子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	宮内 徹也	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	龍 智佳子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	新井 智子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	有賀 諒	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	伊勢脇 純子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	中野 直子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	井出 恵美子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	太田 妃登美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	大下 美圭	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	原田 ひろみ	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	森西 桂子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	田上 款	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	吉岡 佐知子	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	岡田 修一	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	西川 知延	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	山田 博	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	高橋 英樹	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	西浦 利行	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	北村 修	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	古田 学	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	西島 千賀	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	濱本 文平	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	隅谷 佳孝	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	北脇 朋樹	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	山本 潮	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	松本 春奈	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	松田 比登美	E-mail利用
宇治地区事務部 総合環境安全管理センタ	清水 節子	E-mail利用
宇治地区事務部 総合環境安全管理センタ	宮井 信和	E-mail利用
理学研究科 理学部 物理学・宇宙物理学専攻	寺嶋 孝仁	遷移金属酸化物薄膜の合成と物性
理学研究科 理学部 物理学・宇宙物理学専攻	荒木 武昭	ソフトマターの相転移ダイナミクス
理学研究科 理学部 化学専攻	北川 宏	遷移金属錯体の分子シミュレーション
理学研究科 理学部 化学専攻	田口 真彦	生体分子系の分子シミュレーション
理学研究科 理学部 化学専攻	渡邊 一也	
理学研究科 理学部 化学専攻	藤橋 雅宏	
理学研究科 理学部 化学専攻	野田 泰斗	
理学研究科 理学部 化学専攻	朝光 世煌	
理学研究科 理学部 化学専攻	中野 義明	量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析
理学研究科 理学部 化学専攻	野木 馨介	がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発
医学研究科 医学部 人間健康科学系専攻	奥野 恭史	分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析
医学研究科 医学部 人間健康科学系専攻	石田 祥一	遷移金属触媒を用いたヘテロ環化合物の再構築反応開発
医学研究科 医学部 医学・医科学専攻	古川 喜規	創薬のための合成反応予測
薬学研究科 薬学部 薬科学専攻	竹本 佳司	
薬学研究科 薬学部 薬学専攻	長島 卓也	細胞の生存と死を決定する制御システムの数理モデル化
薬学研究科 薬学部 医薬創成情報科学専攻	大野 浩章	モレキュラードッキングシミュレーションを用いた薬物有害事象メカニズムの推定
薬学研究科 薬学部 医薬創成情報科学専攻	掛谷 秀昭	生物活性化化合物の創製を指向した有機化学研究
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	松本 充弘	ケモインフォマティクスおよびバイオインフォマティクスを活用したケミカルバイオロジー研究
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	上野 哲也	計算化学的手法による有機物の熱物性・輸送特性予測
工学研究科 工学部 マイクロエンジニアリング専攻	立花 明知	計算化学を活用した有機物の分子レベル挙動に関する研究
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	西川 雅章	原子分子相互作用系に関する理論的研究
工学研究科 工学部 電子工学専攻	竹内 繁樹	先進複合材料用高分子の構造と力学特性に関する分子解析
工学研究科 工学部 材料化学専攻	木村 俊作	光子を用いた量子情報科学に関する研究
工学研究科 工学部 材料化学専攻	宇治 広隆	ポリペプチドのコンホメーションに関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	大江 浩一	ヘリックスペプチドの電気的特性の解析
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	三木 康嗣	含窒素複素環をニトレン前駆体とする触媒
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	岡本 和紘	近赤外色素を用いる光音響腫瘍イメージング
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	陰山 洋	遷移金属触媒を用いた新規変換反応の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	野尻 聡子	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	タッセル セドリック	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	小林 洋治	Ti表面上へのN2吸着エネルギーの計算

工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	高津 浩	固体化学
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	山本 隆文	低温還元法を用いた鉄酸化物の合成
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	唐 亜	酸水素化物への表面吸着と反応
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	近藤 輝幸	高次生体イメージング先端テクノハブプロジェクト研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	木村 祐	高感度Gd-MRI造影剤のPEG化および抗体修飾によるDDS構築
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	阿部 竜	高効率可視光応答型光触媒系の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	阿部 竜	高効率可視光応答型光触媒系の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	東 正信	半導体光触媒を用いた高効率水分分解システムの開発
工学研究科 工学部 経理事務センターAクラスター事務区会計掛	東 正信	物質エネルギー化学専攻の研究推進
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	辻 康之	触媒有機化学に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	遷移金属錯体触媒を利用する二酸化炭素固定化反応の開拓
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	銅触媒を用いる新規分子変換反応の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	宮崎 晃平	電極触媒の電子状態解析
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	小久見 善八	リチウムイオン電池に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	江口 浩一	炭化水素の低温燃焼触媒の研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	伊藤 彰浩	開設分子の電子構造に関する理論的研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	佐藤 徹	振電相互作用に関する理論的研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	細川 三郎	金属酸化物ナノ粒子の合成とその応用
工学研究科 工学部 分子工学専攻	笹野 博之	化学反応と電子物性に関する理論的研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	今堀 博	人工光合成系の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	梅山 有和	光合成モデル化合物の合成
工学研究科 工学部 分子工学専攻	東野 智洋	有機分子を用いた新規な機能性材料の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	関 修平	新規パイ共役系の物性化学研究
工学研究科 工学部 高分子化学専攻	伊藤 峻一郎	13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	吉田 潤一	有機合成
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	長田 裕也	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構造解明
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	廣瀬 崇至	HOPG基板上における分子配列のモデリング
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	西谷 暢彦	HOPG基板上における分子配列のモデリング
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	植村 卓史	多孔性配位高分子の合成と性質
工学研究科 工学部 化学工学専攻	鈴木 哲夫	吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討
工学研究科 工学部 化学工学専攻	田中 秀樹	多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移
工学研究科 工学部 化学工学専攻	山本 量一	ソフトマターの研究
工学研究科 工学部 光・電子理工学教育研究センター	龍頭 啓充	クラスターイオンビームと固体表面の相互作用
工学研究科 工学部 附属グローバル・リーダーシップ大学院工学教育推進センター	大嶋 光昭	新規研究課題の調査探索手法および目標設定に関する研究
エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻	蜂谷 寛	エネルギー機能材料の電子構造と光物性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	馬淵 守	軽金属・合金の力学特性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	楠田 啓	材料界面・表面の電子論的研究
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	袴田 昌高	多孔質金属の表面特性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	陳 友晴	ボラス金属の機能解明
農学研究科 農学部 森林科学専攻	木村 史子	変調磁場による微結晶の三次元配向
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	植田 充美	コンビナトリアル・バイオ工学
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	吉田 天士	ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	吉田 天士	ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	中川 聡	極限環境における微生物ゲノム解析
農学研究科 農学部 地域環境科学専攻	赤松 美紀	生理活性物質の構造活性相関
人間 環境学研究科 相關環境学専攻	津江 広人	硫黄を含むジペプチド保護体のCO2吸着状態の解析
人間 環境学研究科 相關環境学専攻	上田 純平	長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析
人間 環境学研究科 相關環境学専攻	高橋 弘樹	優先富化現象を示す有機化合物の検索
経済研究所 客員研究部門	西川 静華	
情報学研究科 システム科学専攻	下平 英寿	
情報学研究科 システム科学専攻	奥野 彰文	
学際融合教育研究推進センター	岡崎 友輔	琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 北川グループ	日下 心平	多能性細胞物質の深化
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 堀毛グループ	堀毛 悟史	有機構造体を用いたイオン伝導体合成
産官学連携本部	湊 丈俊	蓄電池材料の構造と物性
産官学連携本部	山中 俊朗	電池材料のラマンスペクトルの計算
学際融合教育研究推進センター	吉元 健治	高分子溶液の相分離に関する大規模なシミュレーション
情報・システム研究機構 データサイエンス共同利用基盤施設 ライフサイエンス統合データベースセンター	五斗 進	生体分子情報データベースの開発
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	グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発
東京電機大学 工学部 環境化学科	山本 哲也	
東京工業大学 生命理工学院 黒川・中島・山田研究室	上田 敦史	ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析
東京工業大学 生命理工学院 黒川・中島・山田研究室	西村 陽介	ウイルスゲノムの多様性に関する研究
茨城大学 工学部 生体分子機能工学科	吾郷 友宏	典型元素を活用した機能性材料の開発
北海道大学 触媒科学研究所	古川 森也	規則性合金の触媒作用に関する理論的研究
産業技術総合研究所 関西センター 機能性ガラスグループ	正井 博和	機能性アモルファス材料の創製
久留米工業高等専門学校	黒飛 敬	
東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻生命環境科学系なし	吉本 敬太郎	核酸アプタマーの高次構造予測
	藪崎 純子	カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築
福岡工業大学 工学部 生命環境科学科	蒲池 高志	密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索
株式会社 生物技研	半田 佳宏	ゲノム解説
信州大学 農学部	齋藤 勝晴	菌類の系統解析

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>