

スーパーコンピュータシステム

令和元年度

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。2020年1月に導入されたシステムは、ゲノムネット計算サーバシステム A として HPE Superdome Flex(総 CPU コア数 1,152)、ゲノムネット計算サーバシステム B および化学計算サーバとして HPE Apollo 2000(総 CPU コア数 5,680)、ゲノムネット公開サーバとゲノムネット開発サーバとして HPE ProLiant DL560(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 (<https://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、令和元年度の 381 名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、82 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、令和元年度は 10 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

2020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
<https://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<https://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
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	水畑 吉行	2
完璧な π 共役二次元シートを持つフラットシリセンの設計	高橋 まさえ	3
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	4
軸性不斉DMAP型触媒の開発と絶対配置の推定	上田 善弘	5
リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの創製	榊原 圭太	6
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	7
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	8
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	9
界面の振動分光学	長谷川 健	10
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	11
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成	中村 正治	12
機能性高分子合成を指向した遷移金属錯体触媒の開発	脇岡 正幸	13
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	14
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	15
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	16
海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究	遠藤 寿	18
ウイルスの多様化と生物進化の関係の解明	吉川 元貴	20
腸内微生物群集が炎症性腸疾患に及ぼす影響の解明	西山 拓輝	21
浦ノ内湾におけるブルーム形成植物プランクトンとメガウイルス科の群集季節変動の解析	Prodinger Florian	22
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	23
巨大ウイルスの分離と比較ゲノム解析	吉田 亘騎	24
パルマ藻・珪藻の比較ゲノム解析	伴 広輝	25
メタゲノムを利用したNCLDVの新規補助代謝遺伝子の探索	宮崎 うらら	26
バイオインフォマティクス実習	チョウ ルイシヤン	27
赤潮期間中囲まれた湾でメタバーコーディングを使って二つのメガウイルス科群集の比較	夏 駿	28

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	29
--------------	-------	-------	----

防災研究所

SSEに伴う海面地殻変動の推定	井上 智裕	30
<u>理学研究科</u>			
環状ピロール-イミダゾールポリアミドの合成と評価	廣瀬 優希	31
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	32
ヘテロ環化合物の再構築反応開発	野木 馨介	33
<u>工学研究科</u>			
エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価	内藤 悠太	34
近赤外円偏光発光材料の創出	三木 康嗣	35
有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成	岡本 和紘	36
層状アンチモン化合物の構造シミュレーション	新井 一功	37
可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発	鈴木 肇	38
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平	39
有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価	筒井 祐介	40
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	41
HOPG基板上における分子配列のモデリング	松田 建児	42
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	43
ポリエチレングリコールで修飾したピリジン配位子の開発	藤原 哲晶	44
計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測	松本 充弘	45
琵琶湖水中におけるウイルスメタゲノム解析	沈 尚	46
<u>エネルギー科学研究科</u>			
エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	47
生体系物質の原子・電子解析	馬淵 守	48
材料界面・表面の原子～電子論的研究	楠田 啓	49
金属材料の表面特性	袴田 昌高	50
金属表面の物性解析	陳 友晴	51
<u>農学研究科</u>			
磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発	久住 亮介	52
一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究	吉田 天士	53
効率的な有用物質生産に向けた真核微細藻類のゲノム解析	澤山 茂樹	54
量子化学計算によるリグニンモデル化合物の間接電解反応機構の解析	平野 義貴	55
<u>人間・環境学研究科</u>			

三次元 π 共役分子の合成の機能性の創出	廣戸 聡	56
ガラス長残光蛍光体における残光メカニズムの解明	上田 純平	57
有機分子性結晶の気体吸着特性の解析	津江 広人	58

高等研究院

金属錯体ソフトマテリアルの創成	古川 修平	59
水素貯蔵を示す水素化物含有金属-有機構造体の合成	堀毛 悟史	60
自己集合を利用したタンパク質のカプセル化	藤田 大士	61
多能性細孔物質の深化	大竹 研一	62

福井謙一記念研究センター

振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	64
-----------------	------	-------	----

産官学連携本部

固液界面を反応場とする化学反応	湊 丈俊	65
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗	67

京都大学以外

生体分子情報データベースの開発とその応用	五斗 進	68
遺伝子情報を用いた海洋生態学研究	西村 陽介	69
グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用	松井 求	70
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史	71
MAGsによる、腸内細菌叢比較ゲノム解析	中村 祐哉	72
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	73
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生合成パスウェイの再構築	藪崎 純子	74
密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志	76
湖沼に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析	岡崎 友輔	77
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	78
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	79
タンパク質の電子状態計算	平野 敏行	80
アミノアシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源	浜口 悠貴	81
機能性高分子材料の創生	三田 文雄	82
計算化学を活用した天然物の合成研究	占部 大介	83
液々界面での電子移動反応の研究	平野 智倫	84

生態学的ビッグデータを用いた生物多様性の創出・維持機構の研究	久保田 康裕	85
高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響	武智 恭世	86
ゼロ金利制約のあるDSGEモデルのパラメータ推定	砂川 武貴	87
 <u>スーパーコンピュータシステム</u>			
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	88
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	94
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	95
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	130
令和元年度研究課題一覧		136

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

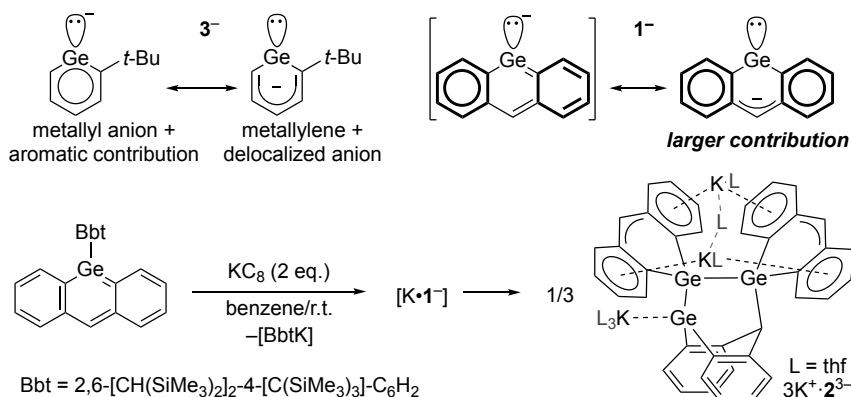
京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 時任 宣博

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、筆者らがごく最近合成・単離することに成功したゲルマニウム核置換アントリルアニオン $\mathbf{1}^-$ の三量体 $3\mathbf{K}^+\cdot\mathbf{2}^{3-}$ の性質に関する検証を行った。

筆者らはこれまでにフェニルアニオンのアニオン炭素をゲルマニウムに置換した $\mathbf{3}$ を安定な化合物として合成・単離することに成功している。 $\mathbf{3}$ はフェニルアニオンと同様、芳香族性を示す環状共役を有する一方で、フェニルアニオンでは重要ではない二価化学種性の関与、すなわち $\mathbf{3}$ におけるゲルミレンの性質がその構造等に大きな影響を及ぼしていることを明らかにした。ベンゼン縮環を施した $\mathbf{1}$ とすることで、周辺芳香環の芳香族性の増大に伴いゲルマニウム中心の二価化学種性が増大すると予想される。それを検証すべく実際にその合成を試みたところ、アニオン同士が非対称に三量化するという特異な様式で $3\mathbf{K}^+\cdot\mathbf{2}^{3-}$ が得られることが明らかとなった。この結果は、 $\mathbf{1}$ のゲルマニウム中心が高反応性の二価化学種性を有しているためと考えられる。

三量体 $3\mathbf{K}^+\cdot\mathbf{2}^{3-}$ の電子状態を評価するために、対カチオンを排した $\mathbf{2}^{3-}$ の構造最適化を Gaussian 09 [B3LYP/6-31G(d,p)] にて行った。その構造は、X 線結晶構造



解析によって得られた構造と大きく異なっており、 $\mathbf{2}^{3-}$ の構造は、対カチオンとの相互作用に大きく影響を受けていることが明らかとなった。

発表論文(謝辞あり)

- (1) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. A Mixed-Anion System Consisting of a Germyl Anion and Anions Delocalized on Conjugated Carbon Ring Skeletons. *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 6284-6289.
- (2) Yanagisawa, T.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Syntheses and Structures of Novel λ^3, λ^3 -Phosphanylalumanes Fully Bearing Carbon Substituents and Their Substituent Effects. *Inorganics* **2019**, *7*, 132.

新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質

Synthesis of Novel Low-coordinated Compounds of 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

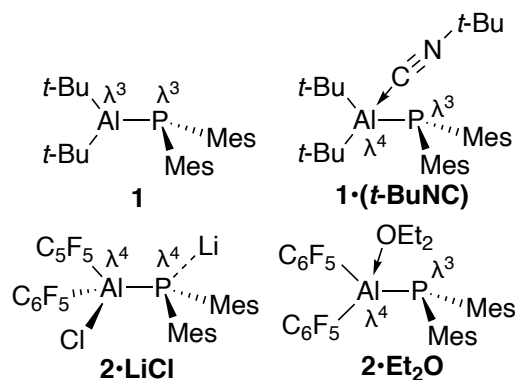
研究成果概要

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三配位アルミニウム–三配位リンからなる単結合化合物 (λ^3, λ^3 -ホスファニルアルマン) の性質に関する検証を行った。

13 族元素と 15 族元素のようにルイス酸とルイス塩基とが直接結合した化合物は、炭化水素や二酸化炭素などの小分子と有効な軌道相互作用を獲得できると考えられるため、通常変換が困難な小分子を我々が利用できる形に化学反応で変換する「小分子活性化反応」が期待できる。しかし、これらの結合の間には π 性相互作用が働くため、ルイス酸とルイス塩基の機能は失活してしまう。実際、第二周期元素であるホウ素を含む化学種であるアミノボラン(N-B)やホスファニルボラン(P-B)がその結合の間に大きな相互作用を有し、二重結合性を示すことに対して、その高周期元素類縁体である λ^3, λ^3 -ホスファニルアルマンは、その結合の伸長に起因して相互作用が減少するため、結合を有しながらも高いルイス酸とルイス塩基の機能を発現できると考えられる。しかし λ^3, λ^3 -ホスファニルアルマンは、合成例が非常に限定されている上に、反応性の観点からの研究はほとんど行われていない。

合成に成功した λ^3, λ^3 -ホスファニルアルマン類

1 および **2** の電子状態を評価するために、構造最適化を Gaussian 09 [B3LYP-D3/6-31G(d)]にて行った。その構造は、X 線結晶構造解析によって得られた構造をよく再現した。その構造を基に、NBO6.0 による結合の評価および TD 計算 [B3LYP-D3/6-311+G(d,p)//B3LYP-D3/6-31G(d)] による吸収スペクトルの解析を行った。



発表論文(謝辞あり)

- (1) Yanagisawa, T.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Syntheses and Structures of Novel λ^3, λ^3 -Phosphanylalumanes Fully Bearing Carbon Substituents and Their Substituent Effects. *Inorganics* **2019**, 7, 132.
- (2) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. A Mixed-Anion System Consisting of a Gernyl Anion and Anions Delocalized on Conjugated Carbon Ring Skeletons. *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 6284-6289.

完璧な π 共役二次元シートを持つフラットシリセンの設計

Design of flat silicene with perfect π -conjugate 2D sheet

京都大学化学研究所物質創製化学研究系有機元素化学研究領域

高橋まさえ

研究成果概要

「ケイ素版グラフェン」とも呼ばれる新材料「シリセン」は、炭素原子の代わりに同じ 14 族であるケイ素原子を使った二次元単原子層シートです。グラフェンは電子構造にエネルギーギャップがないため、論理回路への応用が望めなく、シリセンの実現が切望されています。しかし、シリセンは、平面構造のグラフェンとは異なり、一部の原子が浮き上がって座屈した凹凸構造をとるため、空気中できわめて不安定です。研究代表者は、極最近、平面構造のシリセン分子の理論設計に成功し、論文発表しました[M. Takahashi *Sci. Rep.* **2017**, 7, 10855.]。

本研究は研究代表者が設計したフラットな構成単位をベースに二次元に拡張したフラットなシリセンを構築し、その物性を探索することを目的としています。第一原理計算による物質設計では、最適化構造を求めたのちに、その構造がポテンシャル曲面上で極小点にある安定な構造であることを振動解析により確認する必要があります。周期系の第一原理計算において、格子定数も含めた構造最適化とその振動解析の可能なアプリケーションは限られています。京都大学化学研究所のスーパーコンピュータにはこの目的にかなったアプリケーション (Materials Studio) が公開されています。

2018年度は、分子の第一原理計算ソフトにより設計発表したシリセン分子の結果と、Materials Studio のような周期系の第一原理計算ソフトを用いた結果について、いくつかの条件をクリアしすり合わせを行いました。2019年度は、2018年度に確立した条件で、平面ケイ素 2 次元シートの設計に着手しました。2019年6月には国際会議 ICMAT 2019 で、11月には ICMS 2019 で招待講演を行いました。ケイ素を 2 次元に敷き詰めたシリセンは凹凸構造をとり、空気中できわめて不安定です。平面構造に制限し、平面構造を有するシリセン分子の理論設計において研究代表者が示した指針に基づき、考えられる限りの二次元シートを設計し計算しました。しかし、単純な二次元への拡張では目的とする平面構造は得られず難航しました。現在、一つの系について、平面構造が安定となるシリセンシートの設計に成功しました。ディラックコーンは相対論的效果を入れなくても僅かにギャップが開き、バンド構造は半金属の性質を示唆していました。今後、相対論的效果、スピン密度および他の系の可能性について検討します。

発表論文 (謝辞なし)

• M. Takahashi, H. Matsui, Y. Ikemoto, M. Suzuki, N. Morimoto, *Sci. Rep.* **2019**, 9, 13104.

特異な構造をもつ有機分子の電子的性質

Electronic Properties of Organic Molecules with Novel Structure

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 構造有機化学領域 村田 靖次郎

研究成果概要

水素結合は生体分子・超分子錯体形成における重要な非共有結合相互作用の1つであり、ドナー原子の性質に応じて軌道相互作用または静電相互作用が結合形成に関与する。しかし、OH/ π 相互作用を適切に評価できるモデル分子系はなく、気相中における理論研究に強く依存しており、実験研究は大きく立ち遅れている。我々は、エチレン-水錯体を理想的なモデル分子系と捉え、その迅速な解離・再結合および再配向を立体的アプローチにより制約した単一水分子モデルを構築した。すなわち、C₆₀ 骨格に隔離した単一水分子と骨格上の二重結合との OH/ π 相互作用を、水分子の回転挙動の観点から評価し、理論的解釈を行なった。

まず、モデル分子となる H₂O@1 を合成し、温度可変 ¹H NMR 測定を行なった。内包された水分子のシグナルは温度降下とともに低磁場側へシフトすることがわかり (Figure 1a), 低温下では OH/ π 相互作用をもつオレフィン-水錯体の構造特性の寄与が大きくなると考えられる。緩和時間測定の結果 (*o*-dichlorobenzene-*d*₄, 800 MHz), 縦および横緩和時間比 T_1/T_2 が低温下において極めて大きな値をもつことがわかり、水分子の運動性が著しく抑制されることがわかった (Figure 1b)。

この OH/ π 相互作用の起源を明らかにするために、NPA, NBO, AIM 計算等を行なった結果、内包された水分子の配向に依存し、OH/ π 結合形成に寄与する主要な相互作用が静電相互作用から軌道相互作用へと切り替わることがわかった (Figure 1c)。

発表論文 (謝辞なし)

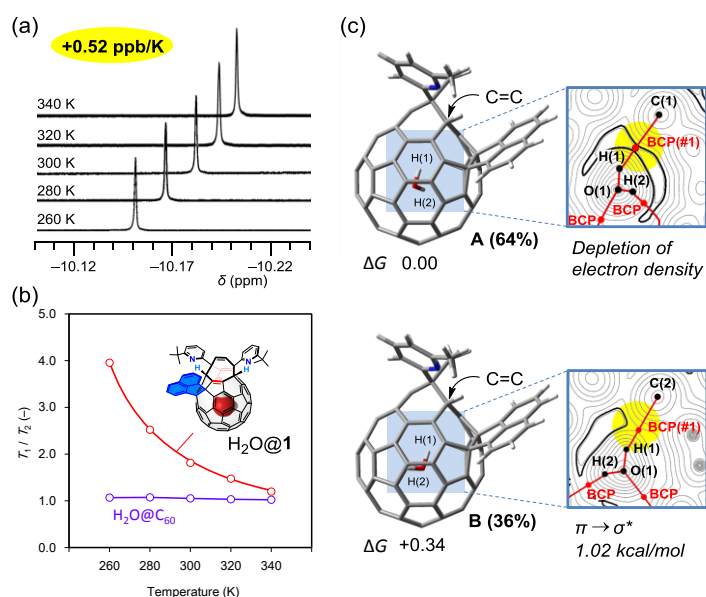
Hashikawa, Y.; Murata, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 12928–12938.

Figure 1. (a) VT ¹H NMR spectra (ODCB-*d*₄, 800 MHz), (b) relaxation time ratio, and (c) optimized structures and electron density maps at the M06-2X/6-31G(d,p) level of theory.

軸性不斉 DMAP 型触媒の開発と絶対配置の推定

Development of Axially Chiral DMAP-Type Catalysts and Analysis of Axial Configuration

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

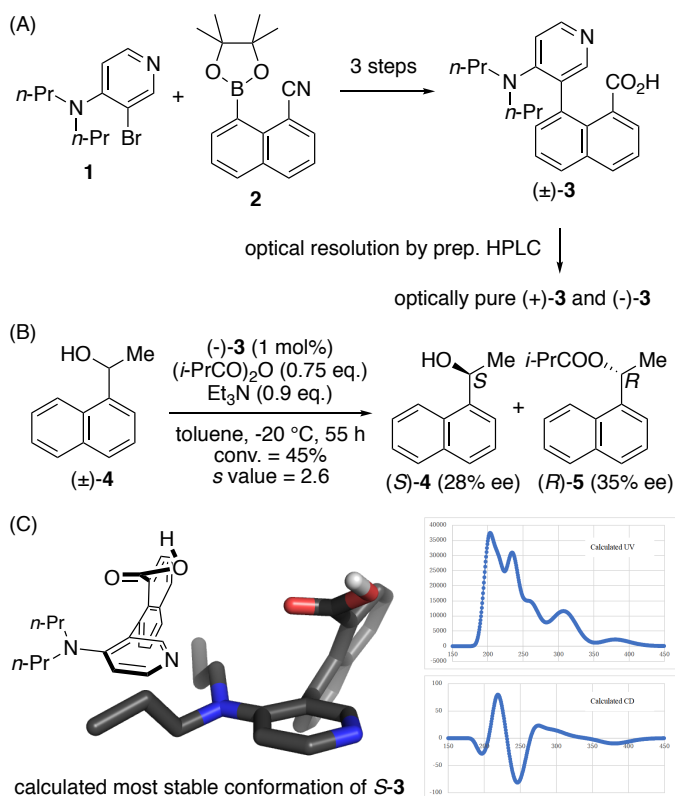
研究成果概要

4-ジメチルアミノピリジン (DMAP) は水酸基のアシル化に汎用される求核触媒である。触媒とアシルドナーとから生成するアシルピリジニウムイオンが触媒活性中間体と想定され、水酸基が活性アシル基に求核付加する律速段階において、カウンターアニオンが一般塩基触媒として水酸基の脱プロトン化に関与する遷移状態が提唱されている。新たな不斉 DMAP 型触媒として軸不斉及び一般塩基触媒作用が期待されるカルボキシル基をピリジン環近傍に有する触媒 **3** を設計・合成した (図

A)。HPLC により光学活性体を単離後、不斉アシル化触媒としての性能を評価すると、中程度の選択性で **4** の速度論的光学分割が進行した (図 B)。単離した触媒の絶対構造の推定のため、実測および計算の CD スペクトルの比較を行った。

MacroModel による配座探索および gaussian 16 による DFT 計算 (B3LYP/6-31G(d,p)) により、17 個の安定配座を導出した。17 個の安定配座それぞれの UV および CD スペクトルを TD-DFT 法で計算し、エネルギー差から Boltzmann 分布を考慮して平均化したところ、図 C に示す結果となった。実測の UV および CD スペクトルとの比較を行ったが、絶対配置の決定には至らなかった。

今後より詳細な解析により、絶対配置の決定を行いたい。



発表論文(謝辞あり) なし

発表論文(謝辞なし)

R. Nishino, S. Hamada, R. Elghareeb, Y. Ueda, T. Kawabata, T. Furuta, *Chirality*, *in press*. DOI: 10.1002/chir.23207.

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創製

Preparation of Molecular Janus-type Bottlebrushes by 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

互いに非相溶な高分子からなる共重合体は、自己組織化によりマイクロ相分離構造を発現する。高密度に異種側鎖を有する楕型ポリマーであるヤヌス型ボトルブラシは、特徴的な一次構造に由来する、直鎖状ブロック共重合体とは異なるマイクロ相分離構造の形成挙動を示すことが、近年明らかにされている。ヤヌス型ボトルブラシにおけるマイクロ相分離構造の形成因子は、主として側鎖の特性(密度および体積分率)により理解される。一方、セルロースは半剛直かつキラリな主鎖を有する高分子であり、ある種の誘導体は主鎖のキラリティに起因したらせん状の高次構造(コレステリック液晶等)を形成する。この分子鎖特性をマイクロ相分離系に拡張すべく、本研究では、セルロース鎖への異種高分子の高置換度かつ位置選択的な導入により、側鎖の密度および相対位置が制御されたヤヌス型ボトルブラシ(セルロース系ヤヌス型ボトルブラシ)を設計・合成した。得られたヤヌス型ボトルブラシのキャスト膜を作製し、小角 X 線散乱(SAXS)測定および透過型電子顕微鏡(TEM)観察によりマイクロ相分離構造の評価を行った。得られた相分離構造スケールは側鎖長に比較して大きく、セルロース主鎖の一次構造を反映したマイクロ相分離構造形成の可能性を示唆した。一方、ヤヌス構造ではないセルロース系ボトルブラシ(2,3 位にメチル基、6 位にポリスチレン鎖を有するセルロース)の溶液特性についても調べ、セルロースの特性を反映した剛直性を明らかとした¹⁾。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

- 1) Y. Kinose, K. Sakakibara, H. Ogawa, Y. Tsujii, “Main-Chain Stiffness of Cellulosic Bottlebrushes with Polystyrene Side Chains Introduced Regioselectively at the O-6 Position”, *Macromolecules*, **2019**, 52, 8733-8740.

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

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

京都大学化学研究所 高分子制御合成研究領域 登阪雅聡

研究成果概要

今回は、所属研究室で開発された技術によりワンポットで合成される、多分岐高分子の分子モデリングを行った。従来の技術において、モノマーと多官能分岐剤により合成された多分岐ポリマーは、構造の分布が非常に広がるという問題があった。しかし当研究室の技術では、重合して高分子内部に取り込まれた後に活性となる分岐剤を用いることにより、構造の分布が狭い多分岐高分子を合成する事が出来る[1]。

この技術で合成された多分岐高分子が三次元的にどのような構造になっているかを明らかにするため、Materials Studio を用いて構造モデルの構築とダイナミックシミュレーションを行った。最初は粗視化シミュレーションにより、同一の総モノマー数(500個)で分岐数の異なる3種類の構造を比較した。この場合は3種類とも回転半径 R_g が同じという結果が得られた。これは予想と異なる結果であり、粗視化モデルに分子鎖の剛直性が反映されていないためだと考えられた。

そこで、実際の分子構造(今回はポリメチルアクリレート: PMA)をそのまま用いたダイナミックシミュレーションを実施した。分岐点間のモノマー数は3~68であるが、この範囲において分岐点間の部分鎖は非常に剛直に振る舞っていた。この剛直性を検証するため、モノマー数を3~500まで変えた直鎖状の PMA についてもダイナミックシミュレーションを行い、鎖長と R_g の関係を調べた。その結果、Fig. 1 に示すように、モノマー数 150 程度まで両者の間に比例関係が示された。この比例関係は、分子鎖が剛直に振る舞っていることを示すため、分岐高分子に見られた振る舞いは信頼できると考えられた。最終的に Fig. 2 に示すように、分岐高分子における分岐の程度 (generation) が増すにつれて R_g が小さくなるという結果が得られた。

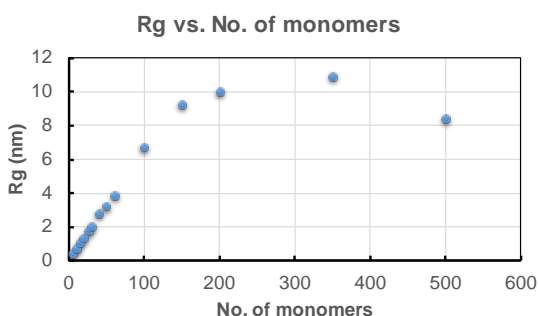


Fig. 1. モノマー数と R_g の関係

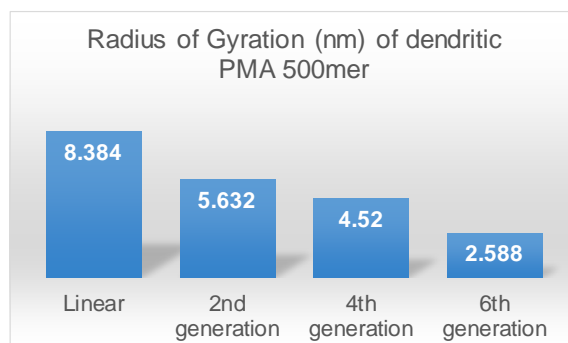


Fig. 2. 分岐の程度と R_g の関係

参考文献

[1] Lu, Y.; Nemoto, T.; Tosaka, M.; Yamago, S. *Nature Commun.* **2017**, *8*, 1863.

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

[n]シクロパラフェニレン ([n]CPP) は、最近、大量合成法が確立されたことから、その反応性の解明やデバイスへの応用の可能性が大きく広がっている。本研究では CPP の歪んだ炭素-炭素 (C-C) 結合に着目し、遷移金属錯体との反応について検討を行ったところ、環サイズの小さな[5],[6]CPP の 2 つの C-C 結合が 0 価白金錯体により活性化されることを見出した。そこで、DFT 計算による反応のサイズ依存性を考察した。

まず、[n]CPP ($n = 5-8$) の C-C 結合に対して、Pt(PMe₃)₂ が段階的に挿入する機構の探索を行った (Table 1)。その結果、CPP の C-C 結合に白金が配位した後に、3 中心遷移状態を経由し、単核錯体 **1** が生成する経路が見つかった。さらに、**1** から、同様に白金錯体の配位と挿入により、二核錯体 **2** が生成した。**1**、**2** が生成

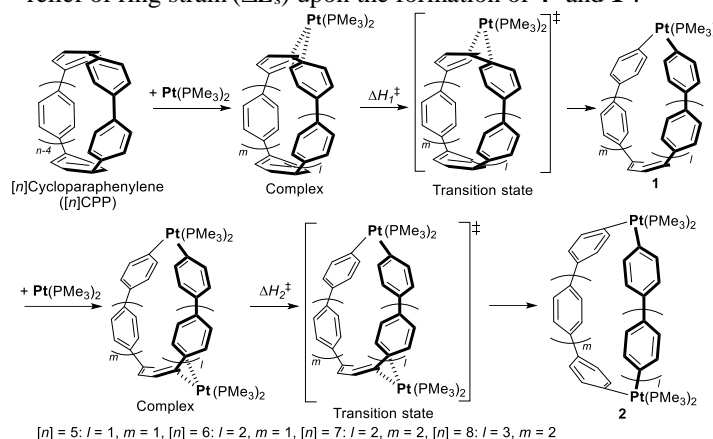
する際の活性化エンタルピーと生成エンタルピーは、環サイズが大きくなると発熱性が小さくなった。この傾向は実験で明らかになった反応性の傾向と一致していた。さらに、反応の駆動力が CPP の歪みエネルギーの解消であると考えられることから、反応における歪みエネルギーの変化を計算した。その結果、いずれの環サイズの CPP でも、大きく歪みエネルギーが解消されており、特に、小さな CPP における歪みエネルギーの大きな解消が反応の駆動力になっていることが分かった。

発表論文(謝辞あり)

1) Kayahara, E.; Hayashi, T.; Takeuchi, K.; Ozawa, F.; Ashida, K.; Ogoshi, S.; Yamago, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 11418-11421.

2) Kawanishi, T.; Ishida, K.; Kayahara, E.; Yamago, S. *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 2082-2091.

Table 1. Activation enthalpy (ΔH^\ddagger), heat of formation (ΔH), and relief of ring strain (ΔE_s) upon the formation of **4'** and **1'**.



Substrate (n)	ΔH_1^\ddagger [a]	ΔH_2^\ddagger [a]	ΔH_1 [a]	ΔH_2 [a]	$\Delta E_{s(1)}$ [b]	$\Delta E_{s(2)}$ [b]
5	45	43	-141	-154	-182	-199
6	66	47	-104	-135	-147	-175
7	79	56	-83	-126	-126	-154
8	95	69	-62	-107	-108	-150

[a] Relative energies are given in kJ mol⁻¹ with respect to the substrate. [b] $\Delta E_{s(1)}$ or $\Delta E_{s(2)}$ are defined as $\Delta E_{s(1)}$ or $\Delta E_{s(2)}$ = strain energy of **1** or **2** - strain energy of [n]CPP or **1**, respectively.

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

Singlet Fission (SF) は 1 つの一重項励起子が 2 つの三重項励起子に分裂する現象である。SF による三重項励起子の増感効果は、有機デバイスの高機能化に有用であり、SF を活用することで励起子生成効率を向上させた太陽電池や有機 EL 素子が報告されている。有機デバイスのさらなる高機能化を目指し、SF 過程における基礎科学の解明と高効率な SF 材料の開発が進められている。

SF 過程で重要な役割を担うと考えられている三重項励起子の対 $^1(T_1T_1)$ は多電子励起状態である。そのため、 $^1(T_1T_1)$ の電子状態を計算するためには、多電子励起配置を考慮した量子化学計算が必要である。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに実装されている量子化学計算ソフトウェア QChem を使用して、テトラセン 2 量体ならびにテトラセン誘導体について多電子励起状態を計算し、SF 効率における構造活性相関および SF を促進する振動モードを明らかにした。

テトラセンの結晶構造データから抽出した隣接するテトラセン 2 分子について、QChem を使用して密度汎関数法 (ω B97X-D/6-31G(d)) による構造最適化および振動解析を行った。その際、炭素原子の核座標は固定し、水素原子の核座標のみ最適化した。続いて、得られた最適化構造について、QChem に実装されている RAS-CI 法を用いて多電子励起状態を計算した。活性空間は 4 軌道 4 電子とし、基底関数は 6-31G(d) とした。

RAS-CI 法による計算結果から、片方のテトラセンに一重項励起子が局在した励起状態 $^1(S_1S_0)$ と $^1(T_1T_1)$ の間のエネルギー差が小さく、 $^1(S_1S_0) \rightarrow ^1(T_1T_1)$ 内部転換により SF が促進されることが示唆された。 $^1(S_1S_0) \rightarrow ^1(T_1T_1)$ 内部転換速度を調べるために、 $^1(S_1S_0)$ と $^1(T_1T_1)$ の間の振電相互作用を計算したところ、Fig. 1 に示す回転モードが強い振電相互作用を示し、 $^1(S_1S_0) \rightarrow ^1(T_1T_1)$ 内部転換速度に大きく寄与していることがわかった。さらに、 $^1(S_1S_0)$ と $^1(T_1T_1)$ の間の波動関数の空間重なりを調べたところ、その分布がテトラセン 2 分子にまたがって大きく広がっており、このことが強い振電相互作用の起源であることが明らかになった。

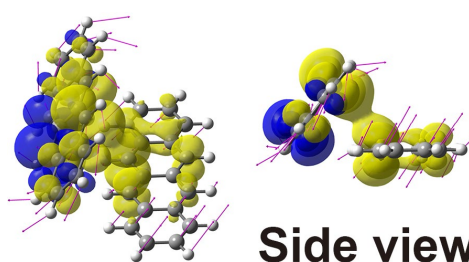


Figure 1. Arrows show the mixed-rotational mode largely contributing to the $^1(S_1S_0) \rightarrow ^1(T_1T_1)$ internal conversion rare. The blue and yellow distributions show spatial overlap between wavefunctions of $^1(S_1S_0)$ and $^1(T_1T_1)$.

界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Surface Chemistry

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学領域 長谷川 健

研究成果概要

有機半導体薄膜の製膜手法として、安価で大面積に製膜できるウェットプロセスがしばしば用いられるが、ペンタセン(PEN)に代表される低分子有機半導体は有機溶媒に難溶であるため、ウェットプロセスの適用が困難である。このような材料では、可溶性の前駆体化合物の薄膜を作製した後、熱もしくは光によって転化させて、目的とする化合物の薄膜を得る前駆体法が有用である。PEN の代表的な可溶性前駆体として、熱処理により PEN に転化する 13,6-*N*-Sulfinylacetamidopentacene (SAP)がある[1]。転化が完全に進行した PEN 薄膜に関しては、X 線回折 (XRD) 等を用いた研究により、結晶状態や分子配向が明らかになっている[2]。しかし、SAP から PEN への熱転化反応の過程については、結晶性が低い SAP は XRD による解析が困難という背景もあり、定量的な議論が行われていない。

本研究では、結晶性によらず分子配向の議論が可能で、赤外 p 偏光多角入射分解分光 (pMAIRS) 法[3]を用いた検討を行った。スピコート法により SAP 薄膜を作製し、それらを種々の温度 (111~194°C) で加熱し、pMAIRS スペクトルを測定した。スペクトル変化について量子化学計算を用いて解析した結果、SAP の減少にともない PEN が増加するとともに、PEN の配向化が進行することがわかった。また、PEN のスペクトル解析により Thin-Film 相と Bulk 相の 2 種の存在が示唆された。熱転化反応における SAP および 2 種の PEN、計 3 成分の量変化を調べるため、pMAIRS スペクトルを無配向スペクトルに変換後、ケモメトリックスの一種である classical-least squares (CLS) 回帰法[4]による解析を行った。その結果、転化によって PEN の Thin-Film 相と Bulk 相が同時に生成するが、最終的に Thin-Film 相がすべて高配向の Bulk 相へと構造転移することがわかった[5]。

薄膜試料の赤外バンド強度は、量だけでなく分子配向にも依存するため、ケモメトリックスの適用は困難であったが、薄膜の面内および面外のスペクトルが同一の縦軸スケールで得られる pMAIRS の特徴をうまく生かし、薄膜試料中の成分の定量的な議論に成功した[5]。

参考文献

[1] A. Afzali, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 8812 (2002)., [2] Y. Murai, et al., *Appl. Phys. Express* **4**, 121603 (2011)., [3] T. Hasegawa, *Anal. Chem.* **79**, 4385 (2007)., [4] T. Hasegawa, *Quantitative Infrared Spectroscopy for Understanding of a Condensed Matter*. Springer, Tokyo (2017).

発表論文(謝辞なし)

[5] N. Shioya, R. Fujiwara, K. Tomita, T. Shimoaka and T. Hasegawa, *J. Phys. Chem. A* (2020) in press. (DOI: 10.1021/acs.jpca.0c00111)

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 先端ビームナノ科学センター 複合ナノ解析化学 根本 隆

研究成果概要

走査透過型電子顕微鏡(STEM)法と電子エネルギー損失分光(EELS)法を組み合わせることにより、原子オーダーの局所構造、局所分析が可能であり、更に光源として単色化した電子源を用いることにより、エネルギー損失が数 meV の低エネルギー損失領域の分光が可能となってきている。この領域には分子振動や格子振動などに由来するスペクトルが得られる筈であるが、スペクトルには様々な情報が重畳され、その解釈においては、計算科学的手法を併用してモデルを構築することが必須となっている。

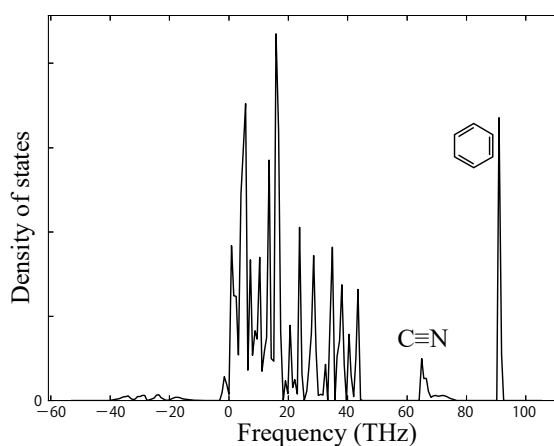
本年度は、主として有機金属錯体結晶を対象として、低エネルギー損失領域のスペクトルの解釈を行った。測定した対象は金属イオンを共有して配位した有機物がネットワークを形成しており、分子単体ではなく、結晶を対象とした第一原理計算による結晶中のフォノンの挙動の解析を目標とした。

計算は WIEN2k と Phonopy のソフトウェアを組み合わせで行った。

計算対象が有機物質であるため、対称性が低く、変数の多い計算となるのに加え、各原子座標に様々な方位で微小変位を加えて力場を計算することになるため、研究室の計算環境では半年間程度の計算が必要と見込まれたため、スーパーコンピュータシステムを使用した。計算にあたっては、研究室の計算環境で計算の初期パラメータの生成を行い、計算過程で最も時間のかかる SCF 計算の段階のみをスパコンで行った。各変位毎の計算は独立しており、APC キューを利用して 130 個の計算を順次実施した。計算時間は、実時間で約 2 週間であった。

右図に計算によって得られた低エネルギー損失領域の状態密度分布を示す。明瞭な分子振動由来のピークが再現できていることがわかる。

現在は、計算結果のとりまとめと詳細な解析を行っており、計算パラメータの調整などを実施している。



効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成

Design and Synthesis of Metal Catalysts toward Efficient Organic Molecular Transformation

京都大学化学研究所 中村 正治

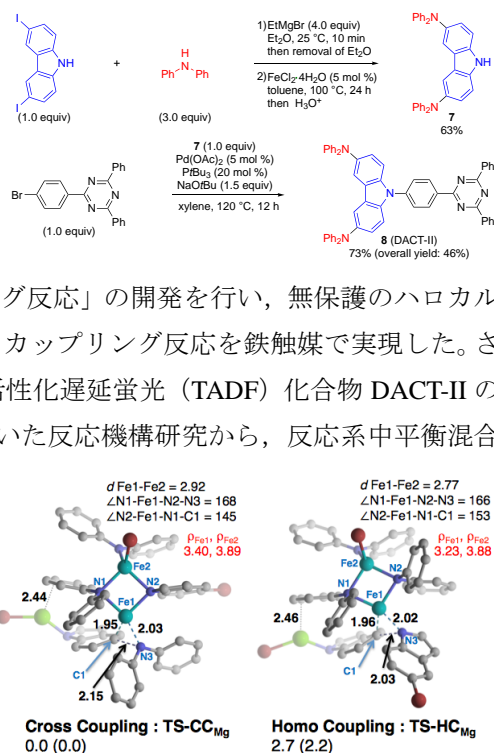
研究成果概要

クロスカップリング反応は工業化学プロセスにおける最も重要な基盤化学技術の一つであり、液晶やEL材料、医農薬品の分子骨格構築に幅広く利用されている。従来のクロスカップリング反応はパラジウム等の貴金属触媒を用いて行われてきたが、地殻埋蔵量が少なく、地域偏在性も高い貴金属の利用は持続的な社会構築という観点から必ずしも望ましいことではない。加えて、貴金属の多くは生態系への悪影響が懸念される環境負荷の大きな元素であり、実用プロセスにおいては製品への残留度が問題になることが多い。我々はこの様な問題を解決するために、遷移金属の中で最も高い地殻埋蔵量を有する鉄に着目した触媒開発に取り組んできた。鉄は安定供給が可能であるだけでなく、毒性が極めて低いという特徴を有する。さらに、イオン化傾向が高い鉄は、酸性や塩基性水溶液による簡単な洗浄操作によって残留濃度を ppb オーダーに減らすことができるという実用上の利点を有する。

上述の背景から、我々の研究グループでは、鉄を触媒としたクロスカップリング反応の開発に取り組み、これまでに熊田—玉尾—Corriu, 鈴木—宮浦, 根岸, 菌頭カップリング反応などの炭素—炭素結合生成反応を実現してきた。本課題では、官能基選択的な炭素—窒素結合生成反応「鉄触媒 C—N カップリング反応」の開発を行い、無保護のハロカルバゾールと様々なジアリールアミンの選択的な C—N カップリング反応を鉄触媒で実現した。さらに京都大学化学研究所梶らによって開発された熱活性化遅延蛍光 (TADF) 化合物 DACT-II の短段階合成への応用を示した (上図)。DFT 計算を用いた反応機構研究から、反応系中平衡混合物として存在する複数の鉄二核テトラアミド中間体のうちの一つから選択的な還元的脱離が起こることによって、単一の生成物が得られることが明らかとなった (右図)。さらなる触媒開発・反応設計へと繋がる知見を与える結果である。京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにより、迅速な検討ができた。

発表論文(謝辞なし)

“Iron-Catalyzed Chemoselective C—N Coupling Reaction: A Protecting-Group-Free Amination of Aryl Halides Bearing Amino or Hydroxy Groups.” Aoki, Y.; Toyoda, T.; Kawasaki, H.; Takaya, H.; Sharma, A. K.; Morokuma, K.; Nakamura, M. *Asian J. Org. Chem.* **2020**, DOI: 10.1002/ajoc.201900641



機能性高分子合成を指向した遷移金属錯体触媒の開発

Development of Transition Metal Catalysts for Synthesis of Functional Polymers

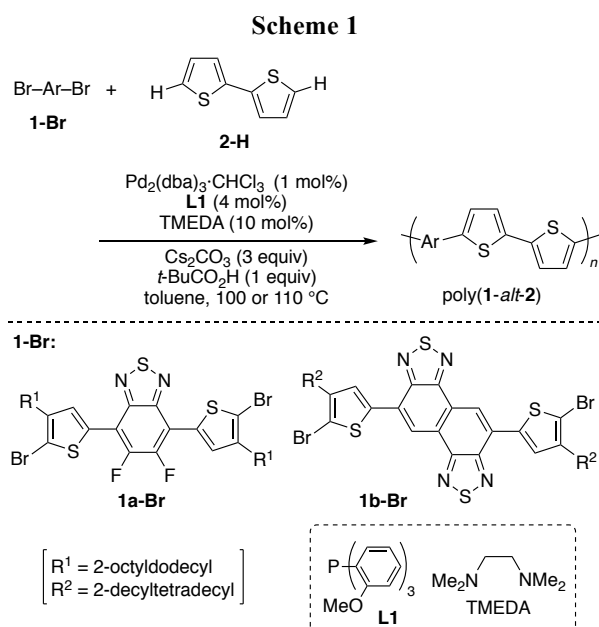
京都大学化学研究所 附属元素科学国際研究センター 脇岡 正幸

研究成果概要

ドナー・アクセプター型交互共重合体 (DA ポリマー) は、有機薄膜太陽電池 (OPV) の半導体材料として優れた特性を示す。我々は、 $P(2\text{-MeOC}_6\text{H}_4)_3$ (**L1**) の hemilabile な配位子特性を利用して直接的アリール化重合 (DArP) に高性能なパラジウム触媒が調製できることを見出し、様々な DA ポリマーを簡便かつ高精度に合成できることを示してきた。特に、配位子 **L1** に TMEDA を組み合わせた混合配位子触媒を開発し、C-H 結合活性化を素反応とする DArP が抱えていたポリマーの分岐・架橋・不溶化の問題を劇的に改善できることを明らかにした。本研究では、混合配位子触媒を用いることにより、2,2'-ビチオフェン骨格を有する DA ポリマーの DArP 合成について検討した。

Scheme 1 にしたがって DArP 合成を行った結果、不溶化物の副生を伴うことなく、目的とするポリマーが高収率で得られた (poly(**1a-alt-2**): 81%, $M_n = 88,100$ (PDI = 3.7); poly(**1b-alt-2**): 70%, $M_n = 43,800$ (PDI = 3.5))。poly(**1a-alt-2**)については、 $^1\text{H NMR}$ を用いた構造解析を行うことができ、ホモカップリング結合の割合は 1.1%に留まり、分岐や架橋が存在していないことが明らかとなった。

続いて、生成ポリマーと文献に従って合成した右田-Stille 型クロスカップリング重合生成物 (poly(**1a-alt-2**)^{Stille}: $M_n = 73,200$ (PDI = 1.7); poly(**1b-alt-2**)^{Stille}: $M_n = 43,600$ (PDI = 2.4)) について、光学的性質を調べたところ、合成法に関係なく、同じ骨格をもつポリマーは同等の値を示すことがわかった。さらに、poly(**1b-alt-2**)と poly(**1b-alt-2**)^{Stille} について、n 型半導体 PC₇₁BM を組み合わせて、OPV を作製して評価したところ、同程度の光電変換効率 PCE を示すことがわかった (poly(**1b-alt-2**): 9.0(1)%, poly(**1b-alt-2**)^{Stille}: 9.3(2)%)。



発表論文(謝辞なし)

Wakioka, M.; Morita, H.; Ichihara, N.; Satio, M.; Osaka, I.; Ozawa, F. *Macromolecules* **2020**, *53*, 158.

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

京都大学化学研究所数理生物情報研究領域 阿久津 達也

研究成果概要

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

BN は遺伝子ネットワークの離散数理モデルである。今年度は BN の確率的拡張である PBN(Probabilistic Boolean Network)を 0-1 発現データの時刻(t,t+1)間の時間変化のサンプルデータから推定する問題について、以前に我々が行った研究の拡張を行った。以前の研究では部分的なパターンの出現回数の情報を利用していなかったが、今年度の研究では、その出現回数に関する情報を活用することで、より広いクラスの PBN に対してブール関数群の正確な推定(同定)が可能となることを示した[1]。特に以前の設定では1個の頂点に2個の関数が割り当てられていた場合でも同定不可能な場合があったが、今回の設定は妥当な仮定のもとで1個の頂点に3個の関数が割り当てられている場合でも同定可能であることを示した。一方、4個の関数が割り当てられている場合には、同定不可能となることも示した。

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。このスケールフリーネットワークに関して、我々が近年発展させてきた最小支配集合(MDS)を用いたネットワーク制御手法・理論の拡張と応用を行った。以前の研究で確率的に辺が故障(利用不可となる)するようなネットワークに対して確率的最小支配集合(PMDS)を定義し、その計算手法やサイズの解析を行ったが、今年度はそれと代謝ネットワークのフラックス解析を組み合わせた解析手法を開発した。その結果をいくつかの腫瘍細胞の公開データに適用したところ、「正常細胞と比較して腫瘍細胞の方が代謝ネットワークを制御しやすい傾向にある」という興味深い仮説を得ることができた[2]。もちろん、これは仮説であり実験などによる検証が必要であるが、これまで提案、拡張してきたMDSに基づくネットワーク解析手法の有用性を示す新たな成果を得ることができた。

発表論文(謝辞なし)

- [1] T. Akutsu and A. A. Melkman, Identification of the structure of a probabilistic Boolean network from samples including frequencies of outcomes, *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 30(8), 2383-2396, 2019.
- [2] J-M. Schwartz, H. Otokuni, T. Akutsu, and J. C. Nacher, Probabilistic controllability approach to metabolic fluxes in normal and cancer tissues, *Nature Communications*, 10, 2725, 2019.

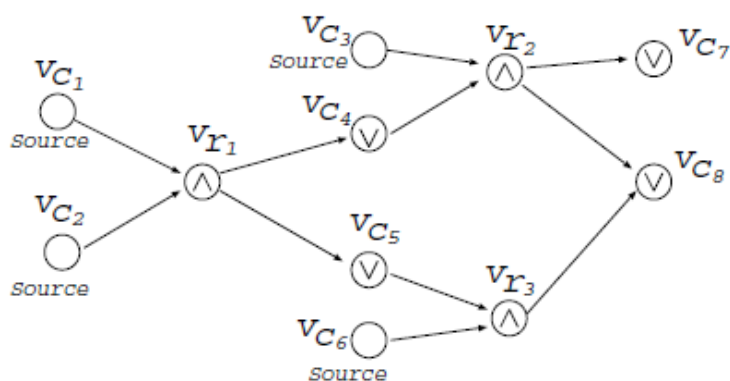
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発

Developing control methods for biological networks on mathematical models

京都大学化学研究所数理生物情報 田村 武幸

研究成果概要

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



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

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

研究成果概要

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、巨大ウイルスのゲノム・メタゲノム解析を行うと同時に、微生物生態学関連のバイオインフォマティクス研究を行った。

具体的には、(1) 東京理科大との共同研究によるメドゥーサウイルスのゲノム解析(吉川元貴)、トランスクリプトーム解析(張瑞軒)、巨大ウイルス分離とゲノム解析(吉田亘騎、Romain Blanc-Mathieu)、(2) 生物炭素ポンプと真核ウイルスの関係(Roman Blanc-Mathieu、金子博人、遠藤寿)、(3) 京都大学農学研究科、高知大学との共同研究による、メガウイルス科ウイルスの多様性及び生物地理・環境動態の解析(李岩沢、Florian Proding、夏駿、孟令杰)、(4) 北極圏における真核生物と巨大ウイルスの生物地理(遠藤寿、夏駿)、(5) NCLDV の実験及び理論による宿主同定(孟令傑)、(6) 仏国 CNRS との共同で巨大ウイルス環境ゲノム中の新規遺伝子探索(宮崎うらら)、(7) ウイルス-宿主データベースの開発(山本留美子)。ウイルス関連以外の研究では、(8) 珪藻、パルマ叢のゲノム解析(Roman Blanc-Mathieu、伴広輝)、(9) リモートセンシングデータからの海洋微生物群集構造の予測法開発(金子博人)、(10) 近畿大学との共同により、ガンキリンが腸内細菌叢に及ぼす影響の評価(西山拓輝)、潰瘍性大腸炎患者の抗 TNF- α 療法後の長期寛解と腸内細菌叢の関連解析(西山拓輝)、潰瘍性大腸炎患者の便移植療法による腸内細菌叢の変動解析(橋本謙太郎)、(11) KO の予測ツールの開発(荒巻拓哉)を行った。

発表論文(謝辞あり)

1. Yoshikawa G., Blanc-Mathieu R., Song C., Kayama Y., Mochizuki T., Murata K., Ogata H., Takemura M. Medusavirus, a novel large DNA virus discovered from hot spring water. *J. Virol.*, 93, e02130-18 (2019).
2. Li Y., Endo H., Gotoh Y., Watai H., Ogawa N., Blanc-Mathieu R., Yoshida T., Ogata H. The earth is small for “leviathans”: long distance dispersal of giant viruses across aquatic environments. *Microbes Environ.* 34, 334-339 (2019).
3. Okazaki Y., Nishimura Y., Yoshida T., Ogata H., Nakano S. Genome-resolved viral and cellular metagenomes revealed potential key virus-host interactions in a deep freshwater lake. *Environ. Microbiol.* doi: 10.1111/1462-2920.14816. (2019).
4. Aramaki T., Blanc-Mathieu R., Endo H., Ohkubo K., Kanehisa M., Goto S., Ogata H. KofamKOALA: KEGG ortholog assignment based on profile HMM and adaptive score

- threshold. *Bioinformatics* btz859, doi: 10.1093/bioinformatics/btz859 (2019).
5. Sakurai T., Nishiyama H., Nagai T., Goto S., Ogata H., Kudo M. Deficiency of Gankyrin in the small intestine is associated with augmented colitis accompanied by altered bacterial composition of intestinal microbiota. *BMC Gastroenterology*, 20 12 (2020).

発表論文(謝辞なし)

海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究

Biogeography of eukaryotic phytoplankton and giant viruses across the global ocean

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

研究成果概要

本研究では、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、大規模海洋調査で採取されたメタゲノムデータ、および全球規模の環境メタゲノムから構築した **Metagenome Assembled Genomes (MAGs)** の解析を行った。

核細胞質性大型 DNA ウイルス(NCLDV)は土壌や水圏等の環境に広く分布し、海洋では主に原生生物を宿主とすることが知られている。本課題では、国際海洋調査プロジェクト *Tara Oceans* で採取されたメタゲノムデータから構築された遺伝子カタログを用い、DNA ポリメラーゼ B ファミリー遺伝子を指標として NCLDV の生物地理分布および宿主分類群の推定を行った。また、近年公表された NCLDV のメタゲノム再構築ゲノム(MAG)から、予測された真核生物宿主由来と見られる遺伝子を抽出し、新規のウイルス-宿主関係に関して解析した。

発表論文(謝辞あり)

1. Li, Y. *et al.* The Earth Is Small for "Leviathans": Long Distance Dispersal of Giant Viruses across Aquatic Environments. *Microbes Environ* **34**, 334-339, doi:10.1264/jsme2.ME19037 (2019).
2. Aramaki, T. *et al.* KofamKOALA: KEGG ortholog assignment based on profile HMM and adaptive score threshold. *Bioinformatics*, doi:10.1093/bioinformatics/btz859 (2019).

発表論文(謝辞なし)

1. Xia, X., Cheung, S., Endo, H., Suzuki, K. & Liu, H. Latitudinal and Vertical Variation of Synechococcus Assemblage Composition Along 170 degrees W Transect From the South Pacific to the Arctic Ocean. *Microb Ecol* **77**, 333-342, doi:10.1007/s00248-018-1308-8 (2019).
2. Yan, D., Endo, H. & Suzuki, K. Increased temperature benefits growth and photosynthetic performance of the sea ice diatom *Nitzschia cf. neglecta* (Bacillariophyceae) isolated from saroma lagoon, Hokkaido, Japan. *Journal of Phycology*, doi:10.1111/jpy.12846 (2019).
3. Endo, H. & Suzuki, K. Spatial Variations in Community Structure of Haptophytes Across the Kuroshio Front in the Tokara Strait. *Kuroshio Current: Physical, Biogeochemical, and*

Ecosystem Dynamics, 207-221 (2019).

4. Ibarbalz, F. M. *et al.* Global Trends in Marine Plankton Diversity across Kingdoms of Life. *Cell* **179**, 1084-1097 e1021, doi:10.1016/j.cell.2019.10.008 (2019).

ウイルスの多様化と生物進化の関係の解明

Elucidation of the relationship between viral diversification and biological evolution

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、ウイルスの進化の時間スケールを反映した系統樹(timetre)を構築し、多様化率の解析を行った。

具体的には、Virus-Host DB に含まれるピコルナウイルス科(*Picornaviridae*)について、1A (VP4)、1B (VP2)、1C (VP3)、1D (VP1)、2C (ヘリカーゼ)、3C (プロテアーゼ)、及び 3D (RNA 依存性 RNA ポリメラーゼ)の各タンパク質の遺伝子配列を取得した。これらの各領域について、MAFFT を用いてアライメントを構築し、HMMER を用いてプロファイル隠れマルコフモデル(プロファイル HMM)を作成した。さらに、Virus-Host DB に対してプロファイル検索を行い、ウイルスホモログを同定した。こうして得られた各領域の遺伝子配列について、MAFFT を用いてアライメントを作成し、RaxML を用いて最尤法に基づく分子系統樹を構築した。その結果、1C、2C、3C、及び 3D が各系統でよく保存され、多様化率の解析に適しているとの示唆を得た。各系統樹について、RelTime を用いて各ノードの相対分岐年代を推定し、多様化率の解析を行った。今後は、生物とウイルスの多様化速度の変化を比較することで、生物・ウイルス間の相互作用が多様化を促したのかを検証する予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年度は共になし。

腸内微生物群集が炎症性腸疾患に及ぼす影響の解明
Analysis on the role of intestinal microbiota in inflammatory bowel disease

京都大学 化学研究所 化学生命科学研究領域 西山拓輝

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、バイオインフォマティクス技術により、炎症性腸疾患と腸内微生物群集との関係性について調査した。

炎症性腸疾患とは、腸内にて慢性的に炎症が持続する疾患であり、潰瘍性大腸炎及びクローン病などが含まれる。いずれも原因は不明だが、炎症性腸疾患患者やモデルマウスなどの腸内細菌群集を対象とした近年のメタゲノム研究により、これらの疾患の病態に腸内微生物の群集構造の変化が深く関与していることが示唆されている。報告者は腸内微生物の内、細菌と溶原性ファージの相互関係に着目し、これらの炎症性腸疾患との関連性について研究を実施した。

具体的には、IBDMDB と呼ばれる公開データベースから入手した炎症性腸疾患患者の腸内メタゲノムやメタトランスクリプトームなどのデータセットを対象にスーパーコンピュータを用いてバイオインフォマティクス解析を実施した。その結果、腸内メタゲノムの DNA 断片から 3,133 の細菌ドラフトゲノムを構築することに成功した。さらに、DNA 断片の塩基配列を重ね合わせたコンティグ中のプロファージ領域を VirSorter により推定し、それらを CD-HIT を用いてクラスタリングすることで、5,703 の溶原性ファージ操作的分類群が得られた。これらのゲノム情報を基に群集構造の類似度を評価した結果、炎症性腸疾患患者とその他の患者群の間で腸内細菌と腸内溶原性ファージの各々の群集構造が異なることが分かった。今後、これらの群集構造の違いが、どの様な機序で病態に寄与するかについて、より詳細な解析を実施していく。

発表論文(謝辞あり)

[1] Sakurai T, Nishiyama H, Nagai T, Goto S, Ogata H, Kudo M. Deficiency of Gankyrin in the small intestine is associated with augmented colitis accompanied by altered bacterial composition of intestinal microbiota. *BMC Gastroenterol.* 2020;20(1):12. Published 2020 Jan 15. doi:10.1186/s12876-019-1156-0

発表論文(謝辞なし)

浦ノ内湾におけるブルーム形成植物プランクトンとメガウイルス科の群集季節変動の解析
Linking seasonal community changes of bloom forming eukaryotic phytoplankton and
Megaviridae in Uranouchi Inlet, Japan

京都大学化学研究所 化学生命科学研究領域 Florian Prodinge

研究成果概要

“Megaviridae” are a proposed family of NCLDV (nucleocytoplasmic large DNA viruses), many of these giant viruses infect single-cellular eukaryotic algae. Megaviridae were found to be both abundant and diverse in the ocean through metagenomic analysis. Hence, it was hypothesized that they contribute substantially to the dynamics of algae populations through infection and lysis.

We recently developed an analysis workflow for Megaviridae diversity in seawater samples and combined this with previously established eukaryotic diversity analysis protocols. In addition, we were able to obtain cell count data of bloom forming species and metadata (e.g. salinity, dissolved nutrients, chlorophyll concentrations and temperature) of our sampling location.

We applied metabarcoding methods on seawater samples of Uranouchi Inlet , Kochi, Japan. The inlet is home to several blooming algal species and harmful algae blooms, like the red tide, can occur spontaneously. We were able to monitor the change in algae populations through metabarcoding and cell count data, as well as in Megaviridae populations. We further observed an effect of algae blooms on the Megaviridae communities and will further investigate the conditions of bloom formation and termination.

発表論文

An optimized metabarcoding method for Mimiviridae, Prodinge et al. (in preparation)

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

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

研究成果概要

本年度私は、メタオミクスデータを用いた海洋微生物の種間相互作用の解析を軸にして、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/ 地球規模のメタオミクスデータを用いた海洋ウイルスと炭素循環の関心の解析。地球規模の炭素循環を形成する経路のひとつに、生物炭素ポンプがある。この経路では、大気中の二酸化炭素が光合成によって有機炭素に変換された後に、その有機炭素が深海に沈降する粒子に変換されることにより、炭素が大気中から深海へと輸送される。地球規模の気候変動にも関連するこの現象には、海洋ウイルスが重大な役割を果たしていることがいくつかの実験や理論から予想されているが、未だその全体像は不明である。そこで私たちは、スーパーコンピュータシステムを駆使して、タラ海洋プロジェクトにより得られた地球規模のメタオミクスデータ（メタゲノム、メタトランスクリプトーム、メタバーコードならびに環境メタデータ）の包括的な解析を行った。その結果、海洋ウイルスと炭素循環の新たな関係が明らかになった。

2/ 人工衛星画像を用いた海洋微生物の種組成の予測手法の開発。海洋微生物の種間ならびに環境との相互作用を地球規模で解析するには、理想的には空間的・時間的に十分な広がりを持ったメタオミクスデータを用いることが望ましい。しかしながら、実際のサンプリングには人手、時間、予算の制約があるために、地球規模のサンプリングを定期的に行うことは難しく、利用できるサンプル数は限られている。一方で、地球観測衛星（日本では「しきさい」「しずく」など）は地球全体の海洋の状態を常時観測しており、そのデータを用いた海洋微生物の種組成の予測が可能になれば、海洋微生物生態系の研究が飛躍的に進むことが期待される。私たちは、スーパーコンピュータシステムを駆使して、深層学習技術を用いた新技術の開発を進めている。

発表論文（謝辞あり）

発表論文（謝辞なし）

本年度は共になし。

巨大ウイルスの分離と比較ゲノム解析
Isolation of giant viruses and comparative genomics

京都大学理学研究科 生物科学専攻 理論分子生物学 吉田亘騎

研究成果概要

世界各地で巨大ウイルスの分離例が報告されてきたが、近年それらの局所的多様性が明らかになった。そこで、その多様性の意味を調べるために河川や池から巨大ウイルスの分離を行い、スーパーコンピュータシステムを用いて比較ゲノム解析を行った。

京都府から分離された14株と新潟県から分離された8株のウイルスのゲノムシーケンシングとアセンブリを行った。配列相同性から近縁種を特定し、ゲノムサイズ比較によりほぼ完全なゲノムであることを確認した。結果として、京都府から6種類のマルセイユウイルスと1種類のメドューサウイルス、新潟県から8種類のマルセイユウイルスのほぼ完全なゲノム配列が得られた。

マルセイユウイルス科のゲノム配列から遺伝子領域を予測し、分子系統樹解析を行った結果、分離されたマルセイユウイルスは2つの系統に分類された。また、オーソログを予測し、保有パターンから各ウイルスのクラスタリングを行うと、分子系統樹のトポロジーとオーソログ保有パターンクラスタリングのトポロジーは系統内に違いがみられた。つまり、遺伝子配列の進化のみではなく遺伝子組成の進化が示唆された。

局所に存在するウイルスがゲノムの組換えを行っているという仮説を立て、検証を行った。マルセイユウイルスゲノムの相同領域を取り出し、ゲノム組換え検出ツールによる検出を行った結果、2つの系統内で組換えが検出された。同一地点で分離されたウイルスについても組換えが検出されたため、局所的多様性の意味の一つとして、組換えによる進化の促進が示唆された。このことから、巨大ウイルスは組換えによって多様性を獲得し、環境に対する適応力を高めていることが考えられた。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

パルマ藻・珪藻の比較ゲノム解析

Comparative genome analysis of Parmales and Diatoms

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 伴 広輝

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、パルマ藻と珪藻の比較ゲノム解析を行った。結果として、ケイ素や窒素といった元素の取り込みや代謝に関わる遺伝子の数がパルマ藻と珪藻の間で差があることが明らかになった。さらに珪藻が多数持つことが報告されていた遺伝子グループの多様化が珪藻とパルマ藻の分岐の後に生じたことが確認されたほか、新たにパルマ藻で多様化している遺伝子群を明らかにした。これらの成果は珪藻の繁栄の鍵や、パルマ藻の生態系での役割を明らかにする鍵となると考えられる。

本研究において、複数のパルマ藻のゲノムのアセンブリやタンパク質のアノテーション、分子系統解析などを本システムのソフトウェアを用いて行った。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)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

メタゲノムを利用した NCLDV の新規補助代謝遺伝子の探索

Metagenome analysis to discover novel auxiliary metabolic genes in NCLDV

京都大学化学研究所 化学生命科学研究領域 宮崎 うらら

研究成果概要

本研究では、核細胞質性大型 DNA ウイルス (NCLDV) と宿主の相互作用に関する新たな知見を得るために、NCLDV の補助代謝遺伝子 (AMG) を探索した。環境ゲノムデータとして、*Tara Oceans* のメタゲノムデータを元に Tom Delmont 氏 (Genoscope) が復元した冗長性のないウイルス再構築ゲノム (MAG) を用いた。まず、GeneMark を用いて NCLDV の MAG にコードされた遺伝子を予測し、RPS-BLAST/CDD でそれらの機能ドメインをアノテーションした。リファレンスとして、ゲノムネットの Virus-Host DB からダウンロードした培養ウイルスゲノムから検出される個々の機能ドメインの頻度を調べ比較した。その結果、MAG がコードする 18 万を超える遺伝子のうち、4,815 個の遺伝子にウイルスの遺伝子としてはこれまでに報告されていない機能ドメインが存在していることがわかった。これらの新規ウイルス AMG 候補には、翻訳や光合成、細胞骨格に関わる遺伝子の相同配列が含まれた。本研究では、これら遺伝子の細胞内での役割やウイルス感染過程における機能を考察した。さらに、新規ウイルス遺伝子の代謝経路と既知ウイルス遺伝子の代謝経路を比較するとともに、ウイルス遺伝子の発見された代謝系の傾向を調べることで、ウイルス感染が宿主代謝系に総合的に与える影響についても示唆を得た。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

なし

令和 元年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

バイオインフォマティクス実習
Bioinformatics Training

京都大学理学研究科 生物科学専攻 生物物理学系 理論分子生物学分科 緒方研究室
チョウ ルイシヤン

研究成果概要

In this year, I finished exercise of transcriptome analysis on Mimivirus and also did analysis on Medusavirus transcriptome by using the Supercomputer system in Kyoto university. I mainly did research on basic process which includes quality control, reads alignment and counting, clustering viral genes by K-means and motif finding. In the future, I will keep doing the analysis of Medusavirus transcriptome.

令和 元年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

赤潮期間中囲まれた湾でメタバーコーディングを使って
二つのメガウイルス科群集の比較

Comparing two Megaviridae communities using meta-barcode
during a red tide period in an enclosed bay

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 xiajun

研究成果概要

This study is using the supercomputer of Institute for Chemical Research, Kyoto University, to do an analysis for comparing two Megaviridae communities during a red tide period in an enclosed bay, west Japan.

“Megaviridae” is a proposed family of giant viruses infecting unicellular eukaryotes. They are very abundant and ubiquitous in the sea water and affect marine microbial community by their lytic infection cycle. However, only a few Megaviridae members have been explored in the marine environments, and their ecological roles in marine ecosystems remains unknown.

For studying the differences of Megaviridae community in two different kind of water, surface sea water samples (0.22-3 μm) were collected from an enclosed bay (Uranouchi Inlet, Kochi) during a red tide period. A set of degenerated primers (called “MEGAPRIMER”), which target family B DNA polymerase genes of Megaviridae, was used to assess the composition of Megaviridae community. Bioinformatic analysis was applied after sequencing. As a result, hundreds of operational taxonomic units (OTUs) were identified in each sample. When we compared the Megaviridae structures between within and without red-tide waters, there was a clear difference between these two samples in a community variation analysis. The difference was also visible in dominant OTU proportions between the two types of samples. Phylogenetic analysis based on a maximum-likelihood method showed that almost all of the OTUs belong to unknown Megaviridae branches. Future study will mainly focus on the host-virus interactions and the relationship between viral community and environmental factors, that may reveal ecological functions of Megaviridae in a coastal ecosystem.

発表論文(謝辞あり)

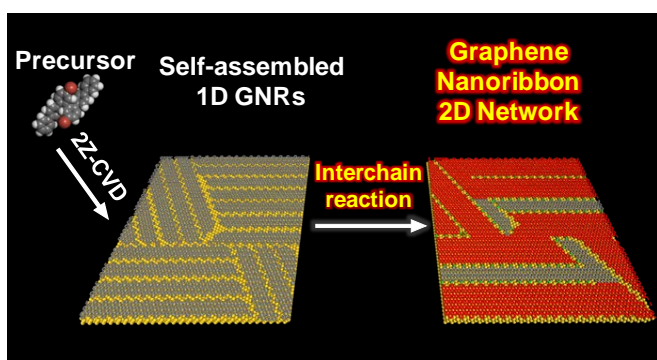
発表論文(謝辞なし)

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

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

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

また、我々は新規に開発した Z 型前駆体分子を用いることでアセン型 GNR の表面合成に成功している。[1] 今回我々は 2Z-CVD 法で合成した高密度自己組織化アセン型 GNR の分子間反応により、規則的空孔を有する 2D ネットワーク、グラフェンナノリボンネットワークの合成を行い、走査トンネル顕微鏡を用いてその構造の直接観察に成功した。この材料は従来のグラフェンに対して、電気伝導度を保ちつつ、規則的空孔による効果的なフォノンの散乱により、熱伝導性を低く抑えられることが理論的に予想された。膜に垂直方向の電気伝導度が 188 Sm^{-1} と高いにもかかわらず、熱電導度は $0.11 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ と低く、この材料が熱電材料として有用であることを明らかにした。[2]



Ref.

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

[2] Bottom-Up On-Surface Synthesis of Two-Dimensional Graphene Nanoribbon Networks and Their Thermoelectric Properties, *Chem. Asian J.*, **2019**, 14,4400-4407.

SSEに伴う海面地殻変動の推定
An estimation of seafloor crustal deformation with SSE

京都大学理学研究科地球惑星科学専攻 地球物理学分野 井上智裕

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、海面気圧、海上風ベクトルを駆動力とした全球の地球物理学モデル(Inazu et al., 2012)を計算し、海底圧力計に含まれる海洋起源の非潮汐成分を計算した。本研究では、海底圧力計に含まれる地殻変動(SSE)成分と海洋起源成分を分離することで、地殻変動成分を精度よく推定することを目的としている。地球物理学モデルの計算結果から得られる非潮汐成分を除去することで、海底圧力計に含まれる海洋起源の成分は低減できた。しかし、依然として水圧記録に含まれる地殻変動成分ではない成分の変動が大きいため、地殻変動を精度よく求めることは難しい。そこで、今後は今年度用いたモデルとは別のモデル(Bleck & Boudra, 1981; Ferry et al., 2010)も、計算することでさらなる地殻変動の精度向上を試みる。

参考文献

- Bleck, R., & Boudra, D. B. (1981). Initial Testing of a Numerical Ocean Circulation Model Using a Hybrid (Quasi-Isopycnic) Vertical Coordinate. *Journal of Physical Oceanography*.
Journal of Oceanography.
[https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1981\)011<0755:itoano>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1981)011<0755:itoano>2.0.co;2)
- Ferry, N., Parent, L., Garric, G., Barnier, B., Jourdain, N. C., & Team, M. O. (2010). *Mercator Global Eddy Permitting Ocean Reanalysis: sensitivity experiments*.
- Inazu, D., Hino, R., & Fujimoto, H. (2012). A global barotropic ocean model driven by synoptic atmospheric disturbances for detecting seafloor vertical displacements from in situ ocean bottom pressure measurements. *Marine Geophysical Research*, 33(2), 127–148.
<https://doi.org/10.1007/s11001-012-9151-7>

環状ピロール-イミダゾールポリアミドの合成と評価
Synthesis and evaluation of cyclic pyrrole-imidazole polyamides

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 生物化学分科 廣瀬 優希

研究成果概要

ピロール-イミダゾールポリアミド (PIP)は二本鎖 DNA に塩基配列特異的に結合する小分子であり、その高い結合能と配列選択性を活かして遺伝子発現制御や蛍光プローブ、抗がん剤としての応用を目指した研究が進められている。本研究では、PIP 中の置換基の位置やキラリティがその標的 DNA への結合様式に与える影響を検討した。

Discovery Studio を用いて構築した DNA-PIP 複合体のエネルギー最小化構造から、PIP は置換基と DNA 副溝との間の立体障害を避けることのできる結合様式を好んで結合することが示唆された。この研究により、PIP 中の構造を使い分けることで従来よりも高い標的配列への選択性を有する PIP の設計が可能になると考えられる。なお、今回の研究においては研究室保有の local server を使用したが、今後は必要に応じてスーパーコンピュータシステムの計算サーバーを使用し DNA 結合リガンドと DNA との結合に関する検討を行う。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

Hirose, Y., Asamitsu, S., Bando, T., Sugiyama, H. Control of Forward/Reverse Orientation Preference of Cyclic Pyrrole-Imidazole Polyamides. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 13165-13170.

量子化学計算と固体 NMR を用いた新規無機物質の構造解析

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

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子構造化学研究室 野田 泰斗

研究成果概要

構成原子数が精密に揃った貨幣金属クラスターは、原子と金属ナノ粒子の中間に位置し、新規物質群として注目を集めている。これらのクラスターは有機配位子により保護され、バルクでは実現し得ない特異な構造をとっていることが同一元素や同一配位子で合成された花柄金属クラスターで明らかにされてきた。近年、合金化や配位子交換により新機能付加を目的とした研究が行われているが、単結晶ができないなど構造解析が難しく、原子交換による原子配置の変化を知ることが強く求められている。固体高分解能 NMR は結晶・アモルファスを問わず原子レベルで物質の局所構造の情報を引き出すことができる一方で、新規無機物質に対しては信号の帰属が困難である。そこで本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを用いた DFT 計算により NMR 信号の帰属を目指した。

対象物質は最も基本的な銀クラスターである $\text{Ag}_{25}(\text{SPhMe}_2)_{18}$ (Ph = phenyl 基、Me = methyl 基)である。正二十面体を構成する Ag_{13} コアを 6 個の SR-Ag-SR-Ag-SR 配位子の両端が各頂点に結合することで有機分子が保護している。クラスターを構成する原子数は 385 個と非常に多く分子軌道を用いた計算は困難であると予想されることから、並進対称性を活用し低計算コストで固体の NMR 化学シフトを精度よく DFT 計算できる Gauge Including Projected Augmented Wave (GIPAW) 法を用いた。

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

ヘテロ環化合物の再構築反応開発

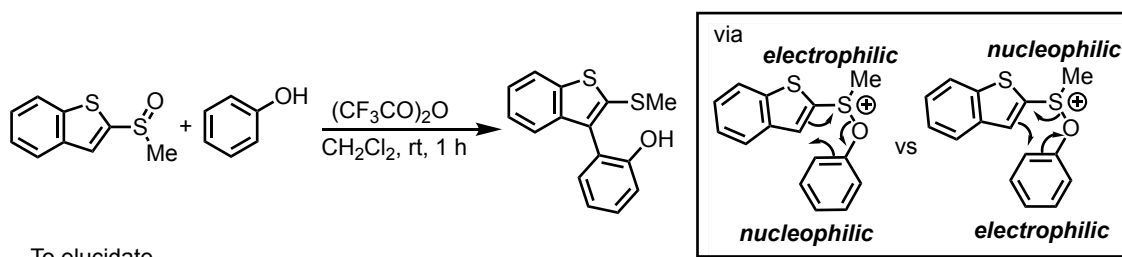
Reconstruction of heterocycles

京都大学大学院理学研究科化学専攻 有機化学研究室 野木 馨介

研究成果概要

interrupted Pummerer 反応と[3,3]シグマトロピー転位からなるカスケード反応を用いた、アリールスルホキシドのオルト位選択的官能基化が近年大きな注目を集めている。これらの反応の鍵であるカチオン性スルホニウムの[3,3]シグマトロピー転位は、芳香族性の喪失を伴って進行するにも関わらず、室温以下の非常に温和な条件で進行することが知られている。しかしながら、転位の電子的性質に関する理解はまだまだ十分とは言えない。

今回我々は、アリールスルホキシドとフェノールの脱水素カップリングによるビアリール合成反応をモデルとし、実験・理論計算の両面から機構解析を行った。特に鍵となる[3,3]シグマトロピー転位について、置換基効果の検討や DFT 計算による遷移状態周辺の構造・電子状態変化の解析を行い、シグマトロピー転位の性質の解明を試みた。その結果、[3,3]シグマトロピー転位の段階においては、スルホキシド側の芳香環が求核的に、フェノール側の芳香環が求電子的に働き、炭素-炭素結合が構築されることを明らかにした。今後は実験・理論計算両方のデータをさらに充実させ、論文を投稿する予定である。



To elucidate

•Appropriate description of the curly arrows •Role of the positive charge on the sulfur atom

Analysis based on

•Substituent effect •Bond order •Charge localization •IBO analysis

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価

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

京都大学 工学研究科 機械理工学専攻適応材料力学研究室 内藤悠太

研究成果概要

本研究では、先進材料である炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic; CFRP)の成形性に大きな影響を与えるマトリクス樹脂の、硬化に伴う粘性変化のメカニズムをモノマーの分子構造から明らかとすることを目的に、代表的なCFRPのマトリクス樹脂であるエポキシ樹脂の架橋反応における構造変化と硬化過程の粘度変化の関係を評価した。

手法としては、岡部らが提案した反応障壁と生成熱を確率論的に考慮した架橋反応解析¹⁾により硬化途中のエポキシ樹脂の構造を取得し、それぞれの構造に対してLees-Edwardsの境界条件による粘度評価²⁾を実施することで、硬化度別の粘度を取得した。

本評価により、全原子分子動力学法を活用した場合においても、熱硬化性樹脂に広く用いられる巨視的な粘度式であるCastro-Macosko式³⁾に基づく温度・硬化度依存性を示すこと、モノマー構造によって発現する粘度が変化する挙動が解析できることが明らかとなった。全原子分子動力学法により得られる粘度は、現実からほど遠いひずみ速度による評価となるものの、モノマー構造差を横並びに評価する上で有用であることが示唆された。また、得られた分子構造分布から、平均分子量や分子の枝分かれ構造を直接評価することも可能であり、これらの評価により各組成の粘度変化率が重量平均分子量の変化率に支配されること、重量平均分子量の粘度上昇に対する寄与率が、分子鎖長によって変化することなど、モノマー構造が生み出す粘度の変化過程を、全原子モデリングで明らかとすることができた。今後、CFRPの成形性に影響の大きいゴム状態弾性率についても同様の検討を実施する予定である。

引用文献

- 1) T. Okabe, T. Takehara, K. Inose, N. Hirano, M. Nishikawa, T. Uehara, *Polymer*. 54 (2013) 4660–4668.
- 2) A.W. Lees, S.F. Edwards, *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 5 (1972) 1921–1928.
- 3) J. M. Castro and C. W. Macosko, *AIChE Journal*. 28 (1982) 250-260.

発表論文 なし

2020年3月に投稿予定である。

近赤外円偏光発光材料の創出

Development of Near-Infrared Circularly Polarized Luminescence Materials

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

円偏光発光分子は、3D ディスプレイやセキュリティーインク、量子コンピューター、生体イメージングなど多岐にわたる分野への応用が期待される光学材料である。一般的に円偏光発光分子の性能はモル吸光係数、量子収率に加え、非対称性因子 g 値によって評価される。 1×10^{-2} 以上の g 値を持つ有機分子は少なく、これらはいずれも可視領域で発光する分子であった。本研究では、オリゴフェニレンエチニレンを光学活性な 2,2'-二置換-1,1'-ビナフチル骨格で連結させることで、近赤外領域で強い円偏光発光を発する材料 (g 値: 最大 2.1×10^{-2}) を創出した (Figure 1)。近赤外領域に観測された円偏光は、各種分光学的評価および分子軌道計算による励起状態最適化評価により、光励起後にオリゴフェニレンエチニレン部位に生じる励起子が分子内のもう一方のオリゴフェニレンエチニレン部位と相互作用し生じるエキシマーからの発光であることを明らかにした。

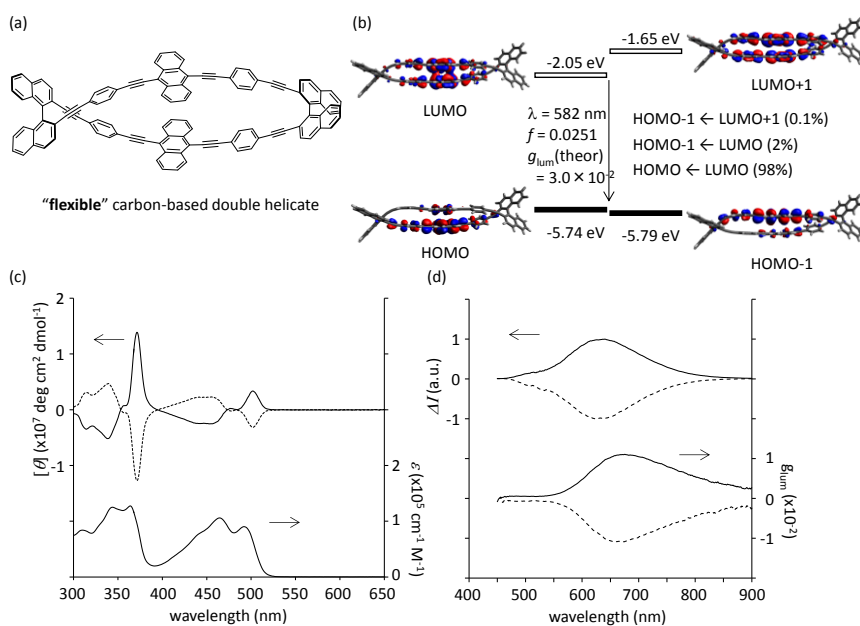


Figure 1. (a) Chiral carbon helicate. (b) A plot of frontier orbitals and the optical transition with oscillator strength and dissymmetry factors for the optimized structure of the excited (S_1) states. (c) UV/Vis absorption and CD spectra. (d) Circularly polarized luminescence spectra. (S,S)-isomer: solid line; (R,R)-isomer: dashed line. In CHCl_3 (1.0×10^{-5} M (absorbance), 1.0×10^{-5} M (photoluminescence)).

発表論文(謝辞あり)

K. Miki, T. Noda, M. Gon, K. Tanaka, Y. Chujo, Y. Mizuhata, N. Tokitoh, K. Ohe, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 9211–9216.

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

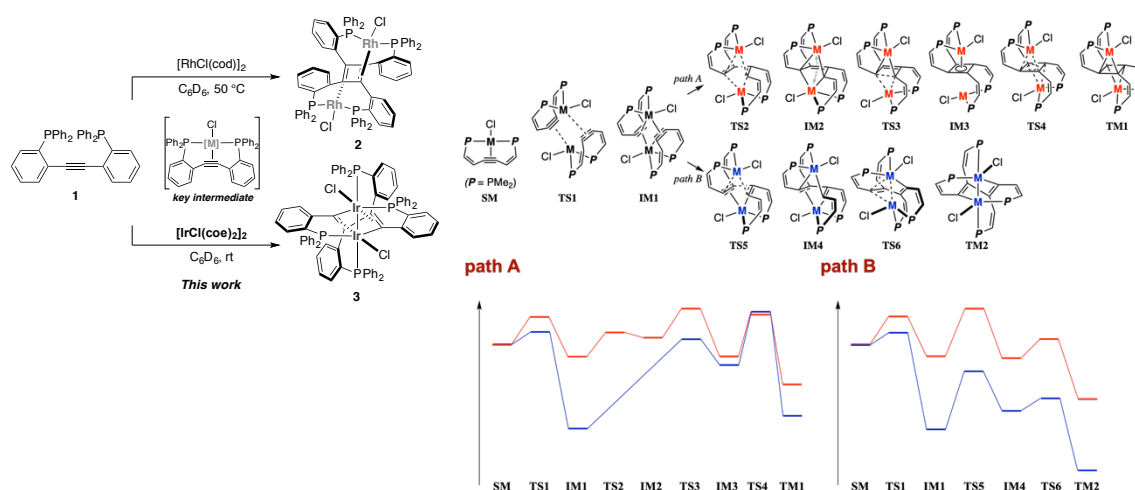
京都大学大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻

岡本 和紘

研究成果概要

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

多核錯体は複数の金属中心の協働的作用によって、単核錯体にはない反応性が期待できる。一方、その合成手法の多くは既存の骨格を基に合成するテンプレート合成に限られており、新たな合成手法の開発が求められている。我々は骨格内にアルキンを含むビスホスフィン配位子 **1** の後周期遷移金属との錯形成反応とその構造変化について研究しており、ロジウムあるいはイリジウムとの錯形成反応において、特異な骨格を有する二核錯体 **2, 3** が生成することを見出している。このように配位子内に反応点としてアルキンを導入することで、単純な配位子骨格から、骨格の変形を利用して一段階で複雑な二核構造の構築に成功している。本研究では、用いる金属種に応じて錯形成挙動が異なる理由を調査した。DFT 計算の結果から、ロジウム、イリジウムいずれの場合もアルキンが配位した単核錯体の二量化を経て生成しており、二つの金属種の違いは、二量体からの反応性の違いに起因することを見出している。本研究成果は、*Bull. Chem. Soc. Jpn.* 誌に掲載された。



発表論文(謝辞あり)

Sasakura, K.; Okamoto, K.; Sakaki, S.; Ohe, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, in press (doi:10.1246/bcsj.20200036).

層状アンチモン化合物の構造シミュレーション

Structure simulation of layered antimonides

京都大学 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 陰山研究室 新井 一功

研究成果概要

これまで当研究室にて、 Zr_2CuSb_3 型構造を有する新規層状アンチモン化合物2種の合成に成功した。これらの化合物の構造解析を行うと、既報の物質を含む4種の化合物のうち、1種のみ金属とアンチモンが秩序配列した構造を有しており、その他は無秩序に配列していることが判明した。しかし、この秩序・無秩序の違いの原因がわからず、また無秩序構造を実験的に精密に決定することは困難である。そこで、各化合物の秩序モデルと無秩序モデルをそれぞれ組み立て、第一原理計算から相の安定性や結合状態について議論することを目的に、スーパーコンピュータを利用した。

4種の化合物の秩序・無秩序モデルの得られた全電子エネルギーを比較すると、すべての化合物において秩序・無秩序モデル間での顕著なエネルギー差は確認されなかった。また、構造緩和後の結晶構造も大きな差はなく、第一原理計算から秩序・無秩序相の安定性の議論をすることは不可能であった。

今後はすでに合成に成功している他の新規層状アンチモン化合物に関して第一原理計算を行い、磁気モーメントや電気伝導性、バンド構造を計算する。得られた計算結果から物性予測や実験データとの比較を行い、機能性新物質の創製を目指す。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

該当なし

可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発
Development of Efficient Water Splitting System by Using Visible Light Responsive
Photocatalyst

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 鈴木 肇

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP プログラムを利用し、水分解用可視光応答型光触媒である層状酸ハロゲン化物光触媒のバンド構造を明らかにした。我々は 10 種類の新規化合物を含む Sillén-Aurivillius 型二層系層状ペロブスカイト $A_4A'M_2O_{11}Cl$ ($A, A' = Bi, Pb, Ba, Sr; M = Ta, Nb, Ti$) を合成し、その物性評価、光触媒活性評価と共に、バンド構造計算を行った。 $Sr_2Bi_3Ta_2O_{11}Cl$ と $Ba_2Bi_3Ta_2O_{11}Cl$ の DOS、PDOS を比較すると、アルカリ土類金属の置換 ($Sr \rightarrow Ba$) はバンド端付近のバンド構造には大きく影響しないことが示された。 $Sr_2Bi_3Ta_2O_{11}Cl$ の Sr と Ta の半分を Bi と Ti に置換した $SrBi_4TiTaO_{11}Cl$ の PDOS から、 $SrBi_4TiTaO_{11}Cl$ の伝導帯下端には Ti が大きく寄与することが明らかとなり、これにより伝導帯下端位置が正側にシフトしたことが示唆された。光電子収量分光 (PYS) 測定から、 $Sr_2Bi_3Ta_2O_{11}Cl$ に Pb を導入した $SrPbBi_3Ta_2O_{11}Cl$ では、価電子帯上端が大きく引き上げられることが示された。この原因を明らかにするため、 $Sr_2Bi_3Ta_2O_{11}Cl$ と $SrPbBi_3Ta_2O_{11}Cl$ のバンド構造を比較したところ、 $SrPbBi_3Ta_2O_{11}Cl$ では、価電子帯よりも深い位置に $O-2p$ 軌道と $Pb-6s$ 軌道の強い混成が確認された。さらに、価電子帯上端付近にも $Pb-6s$ 軌道が寄与していることが明らかとなった。このようなバンド構造の特徴は、近年 Walsh らによって報告された Revised Lone Pair モデル^[1]によって説明でき、このような $O-2p$ 軌道と $Pb-6s$ 軌道との強い混成によって $SrPbBi_3Ta_2O_{11}Cl$ では価電子帯上端が引き上げられることが明らかとなった。

参考文献

[1] Walsh, A.; Payne, D. J.; Egdell, R. G.; Watson, G. W.: "Stereochemistry of Post-Transition Metal Oxides: Revision of the Classical Lone Pair Model" *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 4455.

発表論文(謝辞あり)

該当なし。

発表論文(謝辞なし)

Nakada, A.; Higashi, M.; Kimura, T.; Suzuki, H.; Kato, D.; Okajima, H.; Yamamoto, T.; Saeki, A.; Kageyama, H.; Abe, R.: "Band Engineering of Double-Layered Sillén-Aurivillius Perovskite Oxychlorides for Visible-Light-Driven Water Splitting" *Chem. Mater.* **2019**, *31*, 3419.

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および窒素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。

令和元年度 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

有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価

Functional organic electronic device formation and characterization of interfacial conductivity

京都大学大学院 工学研究科 分子工学専攻 関研究室 筒井 祐介

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、計算化学統合パッケージ **Materials Studio** を用いて、有機電子機能性材料の物性評価を理論的に行う予定である。

具体的には、有機構成単位（例えば、芳香族アミンと芳香族アルデヒドなど）を拡張構造に共有結合した多孔性共有結合有機骨格（COF）は、最近特に注目されており、そのガス吸着特性、導電性、磁氣的性質などが期待されており、それら物理性質を理解するためには分子の結晶構造を知ることが重要である。COF は結晶性が高く、粉末 X 線回折測定において、顕著な結晶性ピークを観測することができるが、大変複雑であり、また単結晶 X 線構造解析での解析は難しい。そこで、**Materials Studio** に含まれる、**DMol3**, **Forcite**, **Reflex Plus** などを用いて、粉末回折の実験データから得られた回折パターンと理論計算で得られるシミュレーションを比較し、結晶構造の推測を行う予定である。これらの結果が、高機能性材料の模索に役立つことを期待する。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

13 族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明

Investigation of optical properties of organometallic complexes containing group 13 elements

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 伊藤 峻一郎

研究成果概要

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

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

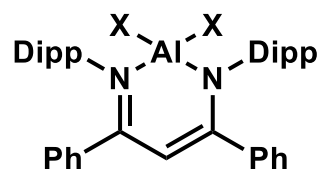


Fig. 1 Chemical structure of LAICl.
(Dipp = 2,6-diisopropylphenyl).

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

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

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

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

発表論文(謝辞あり)

Ito, S.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Inorganics*, **2019**, *7*, 100.

発表論文(謝辞なし)

特になし。

HOPG 基板上における分子配列のモデリング

Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

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

本研究では、走査型トンネル顕微鏡(STM)を用いて、ジアリールエテン(DAE)-ペプチド結合体のオクタン酸/グラファイト界面での2次元自己組織化について調査した。DAE-ペプチド結合体の開環体は、反平行βシート構造を持つ安定した2次元分子集合体を形成した。表面被覆率の濃度依存性を定量的に解析した結果、同様の長さのアルキル基を持つ分子よりもオリゴペプチドを持つ分子の方が安定な配列を形成することが明らかになった(Figure 1)。

Materials Studio を用いた分子力学計算により、ペプチド鎖がアラニンのメチル基を液相に向けた反平行βシート構造が予測され、観測されたSTM像と良い一致を示した。

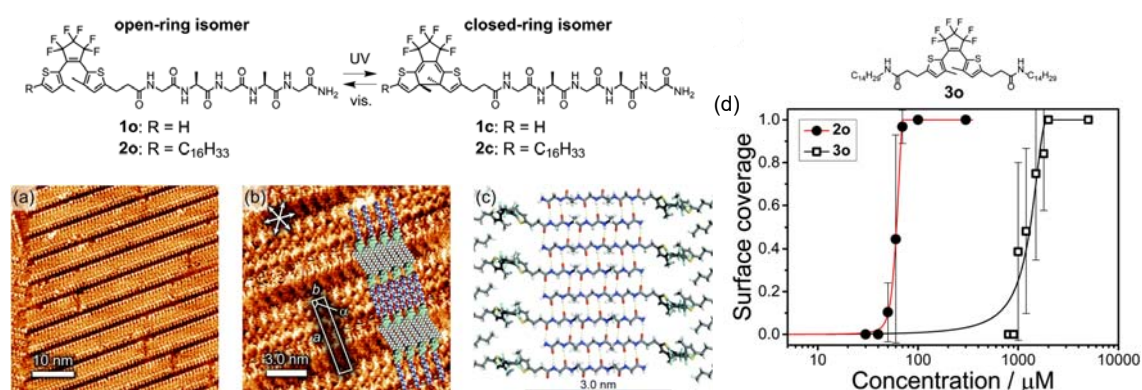


Figure 1. (a) STM images of **2o** at the octanoic acid/HOPG interface ($c_t = 200 \mu\text{M}$, $I_{\text{set}} = 10 \text{ pA}$, $V_{\text{bias}} = -800 \text{ mV}$). (b) High-resolution STM image of the molecular ordering of **2o** at the octanoic acid/graphite interface ($c_t = 200 \mu\text{M}$, $I_{\text{set}} = 40 \text{ pA}$, $V_{\text{bias}} = -800 \text{ mV}$) and the molecular model of **2o** simulated by MM/MD calculations. (c) Enlarged image of the molecular model showing the formation of an antiparallel β -sheet conformation composed of the GAGAG oligopeptide sequence. Yellow dotted line denotes the six-fold hydrogen bond network. (d) Concentration dependence of the surface coverages of **2o** and **3o** at the octanoic acid/graphite interface. The red and black solid lines denote the best-fit curves simulated by the nucleation–elongation model.

発表論文(謝辞なし)

1. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 5099–5102.

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、乾燥工学、食品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、MD 計算を用いてアガロオリゴ糖の水和状態を調べた。比較のため、トレハロースについても同様の計算を実施した。

MD 計算には Amber14 を用いた。糖残基数 2 のアガロオリゴ糖とトレハロースについて、糖 6 個、濃度 0.6, 1.8 wt% の場合を取り上げた。糖の初期配置は、濃度 0.6, 1.8 wt% の各場合について、原点からの距離がそれぞれ 20, 14 Å のデカルト座標軸上の点において糖が単独で水和した状態とした。基本セルに配置した水分子の個数は、濃度 0.6, 1.8 wt% に対してそれぞれ 17100 個、5700 個だった。それらの基本セルを用いて、圧力 1 atm、温度 25, 75°C の NPT アンサンブル MD 計算を行った。6 個の糖の会合状態について、任意の 2 つの糖の重心間距離などを調べ、糖の動的挙動について検討した。

MD 計算の結果から、アガロオリゴ糖とトレハロースの動的挙動を検討した。一例として、糖濃度 1.8wt%、75°C の場合の結果を記す。各糖に対し、ある 1 つの糖に着目し、その糖と他の糖との重心間距離の経時変化を調べた。重心間距離の最短値が約 3.6 Å であること、重心間距離が 7 Å 以下では糖が会合しているとみなすと、トレハロースの方が会合するのべ時間が長いこと、がわかった。同様の検討を、6 個の糖の重心間距離全ての組み合わせ 15 通りに対して行った。その結果、200 ns の期間中に全ての糖が会合して 1 個のクラスタを形成するのべ時間は、アガロオリゴ糖は 34.7 ns、トレハロースは 85.1 ns だった。トレハロースの方がのべ時間が長い原因として、トレハロースの方が OH 基が多いため、糖間水素結合数が多く、会合状態から解離しづらいことが考えられる。同様の検討を濃度や温度が異なる場合についても行った。濃度 0.6 wt%、温度 75°C の場合、全ての糖が 1 個のクラスタを形成するのべ時間は、アガロオリゴ糖は 0.0 ns、トレハロースは 6.2 ns となり、6 個の糖全てが会合することはほとんどなかった。

ポリエチレングリコールで修飾したピリジン配位子の開発
Development of Pyridine Ligands Bearing a Poly(ethylene glycol) Chain

京都大学 大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻 藤原 哲晶

研究成果概要

均一系遷移金属触媒反応において配位子は重要な役割を担う。配位子を変化させることで、収率の向上、反応の化学選択性、ならびに生成物の立体制御を可能にすることから、高活性かつ高選択的な反応を目指した配位子の開発は盛んに行われている。ポリエチレングリコール (PEG) はエチレンオキシドの重合によって得られるポリマーである。PEG は高い化学的安定性、水に可溶、安価および容易に入手可能などの利点をもつ。長く柔軟な構造のために配位子の修飾部位として用いた場合は基質の接近を妨げることなく効果的なかさ高さが得られると考えられる。

今回、PEG 鎖を導入したピリジン配位子の設計・合成ならびに触媒反応への応用について検討した。ピリジン環の4位に長さの異なる PEG 鎖を導入した一連のピリジン配位子 **1a-c** は、対応する4-ヒドロキシピリジンからの高効率合成を達成した。パラジウムを触媒としたアルコールの酸化反応において、繰り返し単位数 45 の長い PEG 鎖をもつピリジン配位子 (**1c**) を用いた場合に収率が向上することが分かった(表 1)。

ここで、長い PEG 鎖をもつ **1c** は丸まった特異な構造をもつことが DFT 計算により明らかになった(図 1a)。また、繰り返し単位数 17 の PEG 鎖をもつ配位子 **1b** を有するパラジウム錯体 $\text{Pd}(\text{OAc})_2(\mathbf{1b})_2$ の DFT 計算による最適化構造は、PEG 鎖は錯体分子の遠隔位を被う構造となった(図 1b)。この PEG 鎖の柔軟な構造により生じたかさ高さがパラジウム触媒同士の接近を妨げ、凝集による失活を抑制したのではないかと考えている。

Table 1. Effect of Pyridines on Pd-catalyzed Oxidation of 1-Phenylethanol.^[a]

Entry	Ligand	Yield [%] ^[b]
1	1^{OMe}	54
2	1a	65
3	1b	76
4	1c	79

[a] Reaction conditions: 1-phenylethanol (4.0 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.30 mol%), pyridine ligand (0.60 mol%) in toluene (0.60 mL) at 100 °C for 15 h under O_2 (1 atm). [b] Determined by GC analysis.

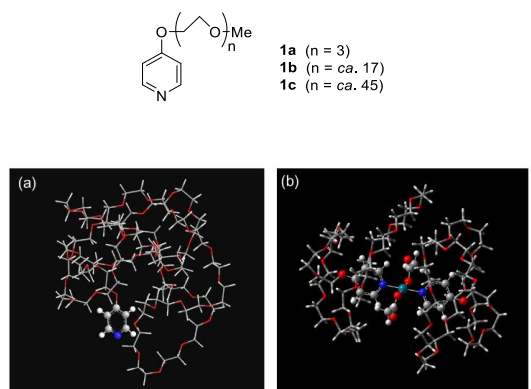


Figure 1. Optimized structures of PEG-functionalized pyridines. (a) **1c** ($n = 45$). The pyridine ring moiety is shown as a ball and stick model. (b) $\text{Pd}(\text{OAc})_2(\mathbf{1b})_2$ ($n = 17$). The $\text{Pd}(\text{OAc})_2(\text{py})_2$ core is shown as a ball and stick model.

計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測

Investigation of thermal and transport properties of organic and inorganic compounds

京都大学大学院工学研究科 機械理工学専攻 熱理工学分野 松本充弘

研究成果概要

本研究は、量子論的效果を考慮した分子モデルに基づき、さまざまな物質の凝縮相の性質(相変化挙動や輸送現象を含む)を分子シミュレーションにより評価することを目的とする。これまでの予備検討に基づき、密度汎関数(density functional)法と強結合(tight binding)近似に基づくオープンソースパッケージであるDFTB+を利用することとし、最新版をさまざまなツール類と共に独自に本スパコンシステムにインストールしたうえで、計算をはじめている。

今年度は、半導体材料を主な計算対象として、次の2つについて計算を進めており、いずれも、国内学会で発表するまでに至っているが、引き続き種々の解析を行う予定である。

(1) 水素化アモルファスシリコンの生成と構造解析: 太陽電池の主要材料の1つである水素化アモルファスシリコン(a-Si:H)は、

生成条件によるわずかな構造の違いが大きな電子物性の違いをもたらすことが知られている。熔融、スパッタリング、CVDなど生成法の違いがマイクロ構造や電子物性に与える影響を調べている(Fig. 1)。

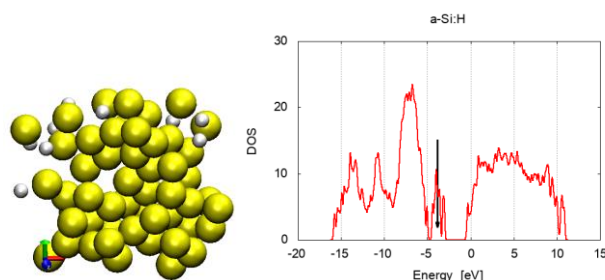


Fig.1: Example of a-Si:H fabricated by melting. Snapshot and DOS.

(2) 半導体ナノファイバーの物性: カーボンナノチューブの電子物性については数多くの報告があるが、それ以外の半導体ナノ材料については未解明の材料が多い。SiC系ナノチューブを例として chirality が電子物性等に与える影響を調べている(Fig. 2)。

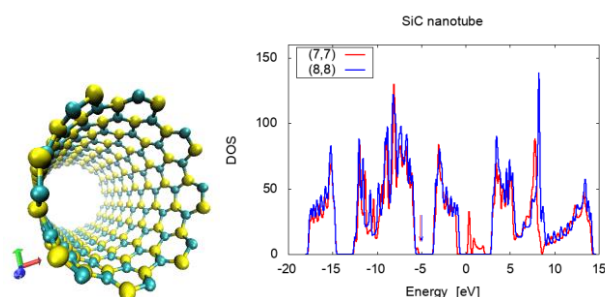


Fig.2: Example of SiC nanotube. Snapshot and DOS. Arrows indicate the Fermi level.

発表論文(謝辞なし)

- [1] 李海麗, 松本充弘, “DFTB study of hydrogenated amorphous silicon,” 分子シミュレーション討論会(2019年12月, 名古屋), 122P.
- [2] 羅啓崙, 松本充弘, “Density functional calculations: Electronic structures of silicon carbide,” 分子シミュレーション討論会(2019年12月, 名古屋), 124P.

琵琶湖水中におけるウイルスメタゲノム解析

Metagenomics of viruses in Lake Biwa

京都大学大学院 工学研究科 都市環境工学専攻 沈 尚

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、琵琶湖水中のウイルスのメタゲノム解析を実施した。2018年9月～2019年4月にかけて琵琶湖北湖今津沖中央(全水深90 m)において、表水層(0.5 m)と深水層(60 m)から採水した。採水したサンプルのウイルス画分(～0.2 μm)を鉄共沈法および超遠心密度勾配法で濃縮・精製した。その後、DNA抽出を行い、ショットガンシーケンス(Miseq, 2×300bp)を実施した。スーパーコンピュータシステム上にて、得られたリードのクオリティーチェック(FastQC)を行い、アセンブリ(SPAdes)を得た。

12のサンプル(表水層6ヶ月、深水層6ヶ月)から302の完全長ウイルスゲノムと10,185のウイルスゲノムの断片を得ることができた。これらについて、同種の冗長性を排除するため、塩基配列相同性95%でクラスタリングを行った結果、172の完全長ウイルスゲノムおよび3,626のウイルスゲノムの断片にクラスタリングすることができた。完全長ゲノムについて、GC含有率は29.9～69.7%、長さは～124.9 kbpであった。

またこれらの完全長ウイルスゲノムに対してピローム配列のマッピングを行い、出現頻度(FPKM)を算出した。その結果、成層期(2018年9月～2019年1月、4月)では、表水層と深水層でウイルス群集が異なることが明らかとなった。また、循環期(2019年2～3月)では、鉛直混合によるウイルス群集の均一化が示唆された。出現頻度の解析では、表水層だけでなく、年間を通して細菌の活性が低い深水層においても、個々のウイルスゲノムで季節変動が確認された。これらの結果も宿主の分布パターンが反映されたものだと考えられる。

今後は、DNA抽出まで完了している残りのサンプル(2019年5月～12月)についてもピローム解析を実施し、1年を通じたウイルス多様性および季節変動を明らかにする予定である。さらに重要度の高い細菌―ウイルス感染系の抽出やそれらの炭素循環への影響を明らかにする計画である。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

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

Nbドープ酸化チタンエネルギー機能薄膜 [1]、および光機能発現への応用の期待される究極のワイドギャップ半導体とされるダイヤモンド [2] に関する実験及びデータ解析を行った。

さらに、熔融 CsCl-AlCl₃ 二元系での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の計算も行った。(8×CsAlCl₄)を配置したユニットセルに対して GAUSSIAN09 を用い、汎関数 HSE06 (HSEh1PBE)、基底関数 Modified def2-SVP, time step 0.2 fs で時間発展を計算し、温度を 700 K に設定した。現在までに 2.2 ps にわたるダイナミクスの計算を進めている。

FIG. 1 にイオン配置および構成イオンの平均二乗変位の平方根の例を示す。Cl⁻ イオンは、AlCl₄⁻ ユニットとして動くものと、拡散の大小が二分される Cs⁺ イオンに追随するもの、さらにユニットを越えて大きく拡散するものに分かれることがわかる。

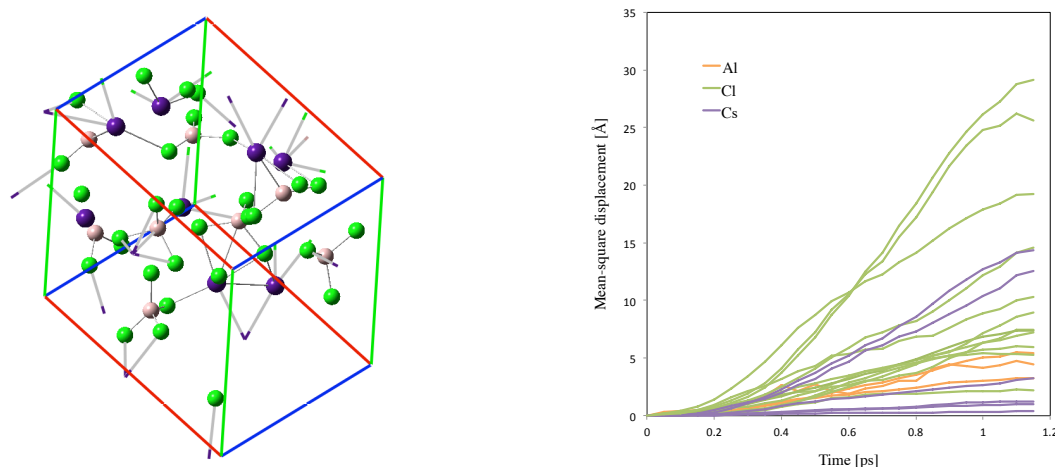


FIG. 1 Examples of ionic configurations after 1.15 ps (left) and mean-square displacement of ions for 1.2 ps (right) following another 1.0 ps of equilibration calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

[1] T. Kimura, K. Hachiya, T. Sagawa, *MRS Advances*, **4**, 2665 (2019).

[2] O. Sato, K. Yoshida, H. Zen, K. Hachiya, T. Goto, T. Sagawa, H. Ohgaki, *Physics Letters A*, **384**, 126223 (2020).

生体系物質の原子・電子解析

Atomic and electronic analyses on biological matters

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

インテグリンは細胞内外を結ぶ膜貫通タンパク質であり、基板の形状や粗さ、剛性等の機械的性質を細胞内シグナリングとして接着細胞の核内へと伝達する機能をもつ。一連のシグナル伝達機構の初期段階として、インテグリンは Genu ドメインと呼ばれる“膝”を柔軟に変形させることで、不活性な屈曲構造を活性な直立構造へと変化させる。しかし、インテグリンの膝は人体の蝶番構造の膝と構造が大きく異なっており、非常に柔軟なループ状構造をとっている。このように柔軟な膝であるにも関わらず、どのようにして基板から受け取ったシグナルを細胞内部の核にまで正確に伝達できるのかは大きな疑問である。また、Genu ドメインには二価金属イオン(Genu イオン)が配位することが知られているが¹⁾、その生理学的機能は明らかにされていない。本研究では、シグナル伝達における Genu ドメインの機能を解明するため、非平衡分子動力学(SMD: Steered MD)計算による *in silico* でのインテグリンの仮想的な引張試験を実施した。

ヒトインテグリン $\alpha\beta3$ (ITGAVB3) のアミノ酸配列と Protein Data Bank (PDB) に登録されている断片的な結晶構造を鋳型として、ホモロジーモデリングによる ITGAVB3 の full-length モデルを作成した。作成したモデルを一定温度(300 K)・一定圧力(1 bar)に平衡化したのち、SMD (NAMD2.13/GPU)による引張試験を行った。引張試験は、ITGAVB3 の細胞内 tail ドメインを固定し、細胞外 head ドメインに一定速度(2 nm/ns)で外力を印加することで実行された。比較のため Genu イオンを取り除いたモデルに対しても同様の計算を実行した。得られた計算結果より、ITGAVB3 に働く力と伸びの関係や Genu の構造変化に対する解析を行った。さらにシグナル伝達の擬似シミュレーションとして、PRS (Perturbation Response Scanning)を ITGAVB3 に適用し、シグナルがタンパク質構造上をどのように伝播するかを解析した。

Genu イオンの除去により、ITGAVB3 の外力に対する強度の低下が確認された。各ドメイン間のリンカーの伸びを調べたところ、Genu イオンを除去することによって ITGAVB3 の下流への応力伝達が遮断されることが明らかとなった。さらに Genu ドメインの構造変化を分析したところ、Genu ドメインと下流の Calf-1 ドメインの間には、金属イオンを介した応力の伝達経路が形成されており、ループに沿って働く力が分散されることで安定的に下流へ力を伝達していることが示された。その裏付けとして PRS による擬似的なシグナル伝達シミュレーションでは、イオンを除去すると Genu 近傍で摂動が上流へと逆伝播することが示された。

参考論文: 1) C. Xie et al., PNAS **101** (2004) 15422-15427.

発表論文: なし

材料界面・表面の原子～電子論的研究

Interface and surface in materials: atomic and electronic theory

京都大学大学院エネルギー科学研究科 楠田 啓

研究成果概要

金は、高い耐食性により優れた生体適合性を示すため、重要な生体金属材料の一つである。アミノ酸やペプチドの中には金表面に選択的に吸着するものも多く存在し、側鎖に電荷を有する荷電アミノ酸は特に金表面との親和性が高い。本研究では、そのような荷電性アミノ酸を含むペプチドの中でも特に重要性の高い RGD (アルギニン-グリシン-アスパラギン酸)トリペプチドに着目し、密度汎関数法による第一原理計算を用いて金表面への吸着挙動の解明を試みた。RGD 配列は細胞接着の足場となる細胞外マトリクスに含まれるアミノ酸配列であり、細胞は RGD 配列を認識することで基板へと接着することが知られている。従って RGD 配列と金属表面の相互作用を調べることは、細胞と金属表面の親和性を調べるうえで重要である。

RGD 配列と金表面の相互作用を解析するモデルとして、4 層の金(111)面上に 15Å の真空層を設け、真空層中に RGD を配置したモデルを作成した。RGD は金表面上の 4 つの吸着サイト(atop, fcc, hcp, bridge)に D 側鎖が接近する配位で初期配置された。比較のため、D 単体と同様に金表面上に配置したモデルも作成した。各モデルに対して構造最適化(使用ソフトウェア: Materials Studio)を行い、その後吸着エネルギー、電子密度分布、電子状態密度、静電ポテンシャルをそれぞれ計算した。計算条件は、基底関数に DNP を、交換相関汎関数として GGA-PW91 を用いた。電子のフェルミ分布は 0.005 Ha で smearing し、k 点サンプリングには 2×2×1 の Monkhorst-Pack k-point mesh を用いた。

RGD の最終的な吸着配位は、D 側鎖の二つのカルボキシル酸素が atop サイト上に配置される場合に再安定化し、吸着エネルギーも最小となった。吸着エネルギーの値は D 単体で計算した場合よりも低く、RGD トリペプチドを形成したことで金表面との親和性が向上したことが示された。電子状態密度の解析の結果、atop サイト上にて金原子とカルボキシル酸素の間に同エネルギー準位での共有結合性ピークが観測された。電子密度分布の解析においても同様に、擬共有結合的な電子密度の重なりが確認された。また、静電ポテンシャル分布の解析を行ったところ、RGD の D 側鎖が負に強く分極し、逆に R 側鎖が正に強く分極していることがわかった。このように、アミノ酸配列間を媒介する電荷分布・分極状態の変化が生じたことにより RGD の金表面は、D 単体よりも高い親和性を有するものと考えられる。

発表論文: S. Deguchi, M. Hakamada, M. Mabuchi, "Adsorption of RGD tripeptide on Au (111) surface", Materials Transactions. **60** (2019) 1711-1715.

金属材料の表面特性

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

ナノポーラス金はナノメートルオーダーのポアとリガメントを有する多孔質な金であり、近年新たなバイオマテリアルとして注目されている。ナノポーラス金表面には多数の格子ひずみが分布しており特異な表面電子状態を形成している。ナノポーラス金表面は大腸菌に対して強い抗菌性を示し^{1,2)}、また HeLa 細胞に対してはアポトーシス(自発死)を誘導することが示されている。この機序は、金ナノ粒子等に見られる細胞核への直接的作用ではなく、インテグリンと呼ばれる膜貫通タンパクを介して細胞シグナル伝達に影響し、間接的に核へと作用すると考えられているが、その詳細は明らかにされていない。

ナノポーラス金とインテグリンの相互作用を原子・電子レベルで解析するために、密度汎関数法による第一原理計算と分子動力学(MD)を連携させたシミュレーション計算を実施した。初めに、インテグリンのリガンドタンパクであるフィブロネクチンの RGD アミノ酸配列をナノポーラス金表面モデル^{1,2)}上に配置し、第一原理計算による構造緩和(Materials Studio)を実行した。次に、ナノポーラス金により構造変化した RGD をフィブロネクチン-インテグリン複合体へと置換して分子動力学計算(NAMD)を実行した。比較のため、同様の計算を平滑金(バルク金)モデルに対して実行した。電子状態およびタンパク質の構造変化を解析するために、電子状態密度解析や主成分分析(PCA)、自由エネルギー計算を行った。

第一原理計算による構造最適化の結果、平滑金上では RGD の大きな構造変化は見られなかったが、ナノポーラス金上では構造が大きく湾曲した。金原子と RGD 側鎖酸素原子間の電子状態密度を調べた結果、ナノポーラス金上では共有結合性のピークが同一エネルギー準位に生じたが、平滑金上では確認されなかった。MD 計算で得られたインテグリンのトラジェクトリーを PCA 平面(主部分空間)上に射影し、カーネル密度推定法による自由エネルギー地形の解析を行った。平滑金上では二つのエネルギー安定状態が存在し、これはインテグリンの closed 構造(不活性状態)と open 構造(活性状態)に対応していた。一方、ナノポーラス金上では closed 構造の自由エネルギーが低下し、closed 構造がより安定化している。以上のことから、ナノポーラス金上では細胞外から細胞内部へのインテグリンシグナル伝達を正常に行えず、結果として細胞の生存維持が妨げられたことが示唆される。

参考文献：1) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **8** (2018) 3870.

2) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **9** (2019) 1091.

発表論文：S. Deguchi, M. Hakamada, J. Shingu, S. Sakakibara, H. Sugiyama, M. Mabuchi, "Inactivation of HeLa cells on nanoporous gold", *Materialia* **7** (2019) 100370.

金属表面の物性解析

Analysis on properties of metallic surfaces

京都大学大学院エネルギー科学研究科 陳友晴

研究成果概要

ナノポーラス金は、表面に微小な格子ひずみを有する多孔質材料であり、圧縮ひずみに基づく分極効果によって様々な生体タンパク質の機能・活性に影響を及ぼすことが明らかにされている¹⁾。先行研究では、大腸菌に対して優れた抗菌性を示し²⁾、一方で接着した HeLa 細胞に対しては細胞のアポトーシス(自発死)を誘導することが示された³⁾。最近では間葉系幹細胞の接着率を低下させ、分化や増殖に影響を及ぼすことも明らかにされている。細胞に対するナノポーラス金の影響は、基板に吸着した細胞外マトリクスを介して伝わるものの、ナノポーラス金が細胞外マトリクスの構造やダイナミクスに及ぼす影響は十分に理解されていない。本研究では分子動力学(MD)計算を実行し、原子オーダーでの細胞外マトリクスの吸着ダイナミクスの解明を試みた。

Type-1 ヒトコラーゲン分子のアミノ酸配列をもとに、細胞接着モチーフである GFOGER(グリシン-フェニルアラニン-ヒドロキシプロリン-グリシン-グルタミン酸-アルギニン)配列を含む 60 残基×3 鎖を取り出したコラーゲン分子断片(CMS)モデルを作成した。ナノポーラス金表面は平滑金(111)面に対して 5%の圧縮格子ひずみを加えた 6 原子層厚モデルとして定義された¹⁻³⁾。また、ナノポーラス金の分極効果を MD 計算に取り入れるため、仮想電子を付加した誘起双極子金表面モデルを使用した。作成した CMS を平滑金、ナノポーラス金モデル上に配置した後、水分子(TIP3P モデル)とカウンターイオンを付加して、MD 計算(NAMD2.13)を 50 ns 間実行した。得られたトラジェクトリーに対して吸着率や吸着エネルギー、基準振動モード等の解析を行った。

ナノポーラス金上では、吸着に関与する残基が増える一方で、吸着率や吸着エネルギーが平滑金よりも低くなった。この結果は、ナノポーラス金上にて多くの残基が吸着と脱着を頻繁に繰り返していることを示している。基準振動解析では、ナノポーラス金上での主要なダイナミクスが、ねじれや局所的な横波振動を伴う協調性の低い運動であることがわかった。局所的なねじれや振動は、金表面への吸着の安定性を低下させ、GFOGER 等の細胞接着に関わる配列を時間的に大きく変形させた。また、ナノポーラス金表面特有の格子ひずみによりアミノ酸の吸着サイトが変形した結果、多くの残基が吸着を阻害されふらつく様子が観察された。ナノポーラス金表面では、従来知られていた格子ひずみによる分極効果よりも、格子配置の幾何学的配置の乱れが CMS の吸着ダイナミクスに支配的な影響を及ぼすことが示された。結果として CMS の局所的なねじれや振動が誘導され、細胞との安定的な結合が阻害されたと考えられる。

参考文献 ,発表論文 : 1) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **8** (2018) 3870.

2) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **9** (2019) 1091.

3) S. Deguchi et al., *Materialia* **7** (2019) 100370.

磁場配向を利用した固体 NMR 解析手法の開発

Applications of magnetic orientation techniques to solid-state NMR spectroscopy

京都大学大学院 農学研究科 森林科学専攻 久住 亮介

研究成果概要

固体 NMR を使用すれば、化学シフト(CS)テンソルを通じて原子核周りの局所構造の情報が得られる。ただし、従来法による CS テンソルの決定には mm 次元の巨大な単結晶が要求される。我々はこれまでに、変調回転磁場による微結晶の三次元配向化法を固体 NMR へと適用し、 μm サイズの微結晶粉末から CS テンソルを決定する手法を提案してきた。しかしながら、擬単結晶法では試料を配向固定用の UV 硬化モノマーなどに均一に分散させる必要があるため、セルロースなどへの応用が困難であった。そこで本研究では、固体 NMR の強磁場を活用して微結晶懸濁体の三次元磁場配向を達成しつつ、そのままの状態での固体 NMR 解析が可能な磁場配向プローブを作製した。作製したプローブにより磁場配向微結晶懸濁体 (Magnetically Oriented Microcrystal Suspension (MOMS)) の in situ 固体 NMR 測定を行い、CS テンソルの評価が可能なスペクトルの取得を試みた。

三次元磁場配向を達成するため、試料管を静磁場と直交した軸周りで変調回転させるプローブを作製した。超電導磁石 (7.05 T) にプローブを挿入し、パワーアンプと OPENCORE NMR 分光計を接続した。試料には L-アラニン微結晶 (<20 μm) の懸濁液 (20 wt%) を使用し、間欠型の変調回転 (15 rpm で 180° 回転させ、静磁場 B_0 方向で 1 s 停止) を施しながら固体 ^{13}C CP 測定を行なった。測定のタイミングを変化させ、 B_0 と磁化容易軸 (χ_1) 方向のなす角が異なる一連のスペクトルを収集した。また、単結晶データから Mathematica を用いて理論スペクトルを計算し、実測の結果と比較した。

Fig. 1 に、得られた ^{13}C CP スペクトルを示す。rf パルスの照射のタイミングを変化させるにつれて各共鳴ピークの発現位置が連続的に変化しており、その変化のパターンはシミュレーションの結果 (点線) と良く一致した。この結果は、通常は mm サイズの単結晶でのみ得られる CS テンソルの情報を保持したスペクトルが、磁場配向プローブにより液状媒体中にある数十 μm サイズの微結晶からでも観測可能となったことを示している。今後、セルロースやタンパク質などより複雑な化合物についても検討する予定である。

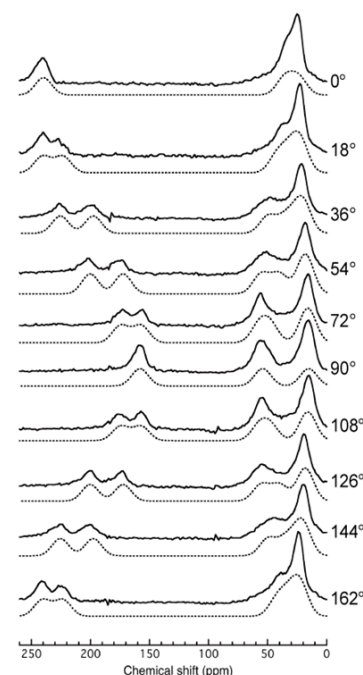


Fig. 1 ^{13}C CP spectra of L-alanine microcrystals in a suspension under the modulated rotating magnetic field. The spectra simulated from the single-crystal data are also shown as dashed lines.

発表論文 (謝辞なし)

R. Kusumi, H. Kadoma, M. Wada, K. Takeda, and T. Kimura, *J. Magn. Reson.* **309**, 106618 (2019).

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

京都大学 農学研究科 応用生物科学専攻

吉田 天士

研究成果概要

水素 (H₂) 生成一酸化炭素 (CO) 資化菌は、環境で有毒な CO を除去し H₂ に変換することから生態学的重要性が指摘される。しかし、記載された H₂ 生成 CO 資化菌は陸上温泉を中心に 20 種と限られ、その多様性・分布といった生態に関する知見が乏しい。そこで我々は、一般的な菌叢解析において参照可能な H₂ 生成 CO 資化菌のデータベースを構築した。まず、公開データベースに登録されている約 14 万の原核生物ゲノムより、H₂ 生成 CO 資化菌が有するマーカー遺伝子群の保有株を同定し、全原核生物の 16S rRNA 系統における潜在的な H₂ 生成 CO 資化菌の分布を明らかにし、本菌が属する分類群を 4 門 26 属 43 種まで拡充した。さらに、本データベースを用いることで、100 の堆積物試料を用いた 16S rRNA アンプリコン解析から、環境における潜在的な H₂ 生成 CO 資化菌の分布を解明した。その結果、54 地点で潜在的な H₂ 生成 CO 資化菌が 13 種見いだされ、幅広い泉源に分布することを示した。

有毒アオコ原因ラン藻ミクロキスティスは環境中で多様なウイルスとの相互作用が示唆されるが、本種感染ウイルス分離例は当研究室保有の Ma-LMM01 に限られていた。そこで、京都府広沢池にてウイルスメタゲノム解析を行い、24 時間に渡って本種とウイルスの包括的転写解析を行った。その結果、大きく 3 つのグループから成る 15 の新規の本種感染ウイルスゲノムを明らかにした。さらに環境中では Ma-LMM01 のような非常に限られた宿主株にのみ感染可能な狭域宿主ウイルスと、様々な宿主株に感染可能な広域宿主ウイルスが共存することを見出した。包括的転写解析より、ミクロキスティスは特に広域宿主ウイルスによる感染に応じてウイルス耐性遺伝子を発現させることが示唆された。本成果をまとめた論文は米国微生物学会が発刊する *Appl. Environ. Microbiol.* の表紙を飾った。

発表論文(謝辞あり)

Diversity and distribution of thermophilic hydrogenogenic carboxydrotrophs revealed by microbial community analysis in sediments from multiple hydrothermal environments in Japan. (2019) *Arch. Microbiol.* **201**, 969–982.

他 2 報

発表論文(謝辞なし)

Co-occurrence of broad and narrow host-range viruses infecting the toxic bloom-forming cyanobacterium *Microcystis aeruginosa*. (2019) *Appl. Environ. Microbiol.* **85**, e01170-19.

他 2 報

令和 元年度 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

効率的な有用物質生産に向けた真核微細藻類のゲノム解析

Genomic analyses of the eukaryotic microalgae for the efficient production of valuable substances

京都大学 大学院 農学研究科 応用生物学専攻

澤山 茂樹

研究成果概要

真核微細藻類はその優れた光合成能や有用物質生産能から、近年機能性食品、化粧品へ添加する有用物質の生産やバイオ燃料生産に用いられている。一方、真核微生物の複雑なゲノム構造から、遺伝子情報等の分子生物学的知見は依然として不足している。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、複数種の微細藻類を対象とした有用物質生産関連遺伝子の探索、および有用微細藻類の全ゲノム解析を行なった。後者に関する研究成果は現在投稿に向けた準備を行っている。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

量子化学計算によるリグニンモデル化合物の間接電解反応機構の解析

Mechanistic analysis of indirect electrolysis of lignin model compounds by quantum chemical calculation

京都大学大学院 農学研究科 森林科学専攻 生物材料化学分野 平野 義貴

研究成果概要

リグニンは木材主要三成分の一つであり、難分解性の芳香族高分子である。効率的なリグニン分解反応の開発は、紙パルプ製造工程の効率化やバイオマス由来芳香族化成品の製造などの観点で重要である。当研究室では温和で環境負荷が低いと期待される反応系として、間接電解反応によるリグニン分解を検討してきた。間接電解反応とは、電極-基質間の電子の授受を仲介する触媒(レドックスメディエーター)を用いた電解反応である。直接電解反応は不均一系である一方、間接電解反応は均一系であるため、高分子であるリグニンを効率的に電解できると期待される。本研究では、酸化還元反応による効率的なリグニン分解反応の探索を目的とし、量子化学計算によってリグニンの間接電解反応機構について考察する。具体的には、間接電解反応を(1)メディエーターの電極反応と(2)リグニンモデル化合物-メディエーター間の反応、(3)リグニンモデル化合物のラジカル中間体の後続反応の3つに分け、これらの反応ギブズエネルギーや活性化ギブズエネルギーを計算し、電解実験と矛盾しない反応機構や効率的な反応条件を探る。

まず10種類の芳香族化合物について、それらの1電子酸化還元反応の反応ギブズエネルギーをGAMESS-USで計算した。その結果、これらの計算値は各種芳香族化合物の酸化還元電位の実験値と線形関係にあった。このことから、芳香族化合物の電子移動反応の反応ギブズエネルギーについて、量子化学計算で定量的に評価できることが確認できた。

更に、リグニンモデル化合物-メディエーター間の反応の反応ギブズエネルギーを計算した。メディエーターの候補としていくつかの複素環式芳香族化合物を、リグニンモデル化合物として β -O-4型2量体などを選んだ。メディエーターの中性状態およびカチオンラジカルについて、これらのギブズエネルギーを計算した。また同様の計算を、リグニンモデル化合物の中性状態、および反応中間体と考えられる状態(カチオンラジカルなど)に対しても行った。その結果、反応ギブズエネルギーが負の値になる反応条件、反応経路を発見した。今後、各種反応についての活性化ギブズエネルギーの計算と、電解実験による計算結果の検証を行う。

発表論文 該当なし

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

京都大学大学院人間・環境学研究科

廣戸 聡

研究成果概要

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

特に、ねじれたポルフィリンの構造最適化および吸収スペクトルのシミュレーションを行うことで、ねじれたポルフィリンの溶媒に依存したスペクトル変化が構造変化に基づくことを解明した。具体的にはねじれたポルフィリンの Twist 型および Stair 型の二つの構造について、B3LYP を含む様々な汎関数を用いて構造最適化した後、振動子計算を行うことで二つの構造のエネルギー差を求めた。この値と実測値を比較するとともに、最適化構造から求めた吸収スペクトルが実測の傾向と一致するかを評価した。

また、螺旋構造をもつ分子の分子軌道計算も行った。具体的には非対称に置換基を導入した螺旋分子の構造最適化を行い、HOMO および LUMO の軌道係数の分布とエネルギーを評価した。その結果、図 1 に示す通り、LUMO に軌道係数の偏りがあることを明らかにし、分子内電荷移動相互作用の存在を明らかにした。さらに、電気化学測定から見積もった HOMO および LUMO の実測値との比較により、螺旋分子の分極構造を解明した。この結果は Chemistry Letters 誌に報告した。

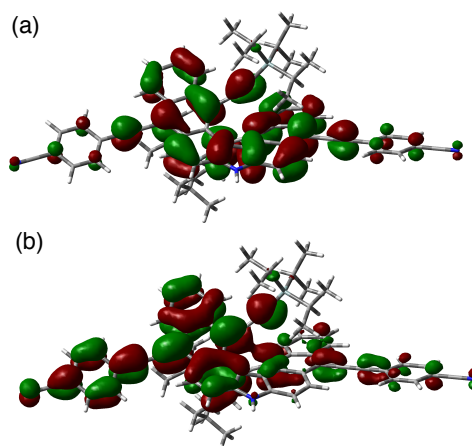


図 1. 螺旋分子の分子軌道

発表論文(謝辞あり)

“Regioselective desilylation of a π -extended aza[5]helicene”

A. Ushiyama, H. Shinokubo, *S. Hiroto

Chem. Lett. **2019**, *48*, 1069.

ガラス長残光蛍光体における残光メカニズムの解明

Investigation of persistent luminescence mechanism in glass persistent phosphors

京都大学大学院人間・環境学研究科

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多くは、1993年によって開発された $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}\text{-Dy}^{3+}$ である。この長残光蛍光体をブレイクスルーに、様々な長残光蛍光体がトライアンドエラーにより、研究開発がされてきた。しかしながら、そのほとんどは酸化物結晶に発光中心イオン (Eu^{2+} 、 Ce^{3+} など) と電子トラップ中心イオン (Dy^{3+} 、 Nd^{3+} など) を添加した材料である。

本研究において、我々は作製した $\text{CaO-Ga}_2\text{O}_3\text{-GeO}_2$ (CGG) ノンドープガラスにおいて、長残光を発見した。300nm 付近の紫外線により CGG ガラスの吸収端を励起すると、オレンジ色の長残光を示した。京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ガラス構造と似た GaO_4 四面体と GeO_4 四面体を有するカルシウム・ガリウム・ゲルマニウム酸化物結晶のバンド構造計算を行った。この計算結果と $\text{CaO-Ga}_2\text{O}_3$ ガラスと CaO-GeO_2 ガラスの吸収端エネルギーの比較から、CGG ガラスの吸収

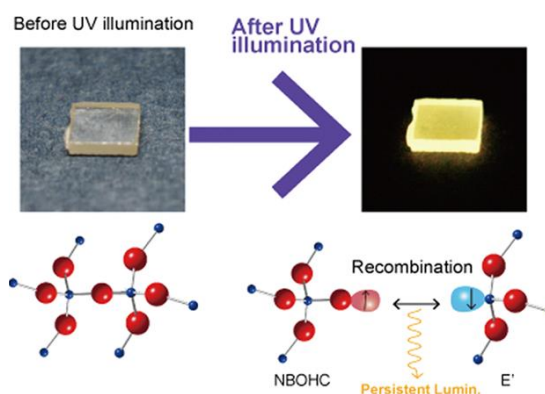


図 1. 残光の様子と残光メカニズム

端は主に $\text{O } 2p$ から $\text{Ge } 4s$ への遷移であると帰属した。このバンド間吸収により、NBOHC (nonbridging oxygen hole center) と $\text{E}'(\text{Ge})$ (unpaired electron at Ge ion bonding three oxygen) の欠陥ができることを EPR (Electron paramagnetic resonance) 測定により明らかにし、これらが長残光に働くキャリアトラップであることを示した。

発表論文(謝辞あり)

[1] J. Ueda, A. Hashimoto, S. Tanabe, J. Phys. Chem. C, 123 (2019) 29946-29953.

発表論文(謝辞なし)

有機分子性結晶の気体吸着特性の解析

Analysis of the gas sorption behavior of organic molecular crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座

津江 広人

研究成果概要

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

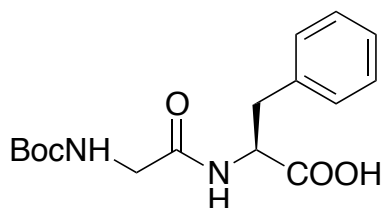


図1 **1** の分子構造

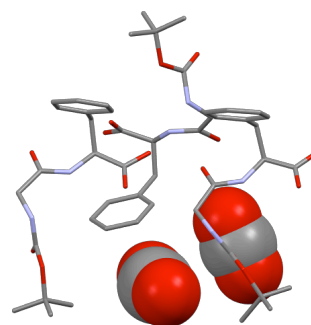


図2 **1** の CO₂ 吸着状態

本研究では、**1** の結晶が示す気体吸着特性を解明することを目的として、**1** が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い、結晶を構成する**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。ここでは、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

単結晶X線構造解析の結果、**1** の結晶中に二酸化炭素が吸着された状態を原子レベルで可視化することに成功した(図2)。2分子の二酸化炭素の周辺には、計8分子の**1** が近接しており、これらの分子間相互作用によって、**1** の結晶中に二酸化炭素が吸着されていることが示唆された。そこで、計算化学アプリケーション Materials Studio の DMol³を用いて、二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の構造最適化を行った後、Gaussian 09を用いて二次の摂動法による *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い、**1**と二酸化炭素との間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果、分散力が、これらの間に働く分子間相互作用の主たるものであり、**1** による高選択的な二酸化炭素の吸着挙動は、同相互作用によって発現していることが明らかとなった。

金属錯体ソフトマテリアルの創成
Fabrication of Coordination Soft Materials

京都大学高等研究院物質—細胞統合システム拠点

古川 修平

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、ロジウム二核パドルウィール錯体、ルテニウム二核パドルウィール錯体を基本骨格に有する金属錯体多面体 (metal-organic polyhedra) の合成を行った。この MOP をポラスモノマーとして用い、イミダゾールやピリジン系連結配位子を用いて配位重合を行うことで金属錯体ソフトマテリアルの合成を行った。

具体的には、新規に合成したロジウムやルテニウムを有する MOP の結晶構造との比較を行うために、X 線結晶構造データベース検索を行った (Cambridge Structural Database を用いた)。ここでは、パドルウィール構造が理想とする形からどの程度歪んでいるのかを定量的に解析、またパドルウィール構造の axial 位に配位している分子の金属—配位子間結合を解析することにより、どの程度連結配位子が強く結合しているのかを見積もった。これにより、合成した金属錯体ソフトマテリアルの構造情報と、シミュレーションによって推定したポリマー構造との相関に関する研究を行った。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

“Understanding the role of linker flexibility in soft porous coordination polymers”

Yamil J Colón, Shuhei Furukawa

Mol. Syst. Des. Eng. **2020**, *5*, 284-293. DOI: 10.1039/C9ME00117D

水素貯蔵を示す水素化物含有金属-有機構造体の合成

Synthesis of hydride-based metal-organic frameworks with hydrogen storage

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、水素化物イオンを含有する結晶性有機-金属構造体 (Metal-organic frameworks, MOF と呼ぶ) の局所構造の同定を行った。対象とした MOF はボロハイドライドイオン (BH_4^-) をカウンターアニオンとして含む構造体である。 BH_4^- の化学環境が MOF の安定性・水素放出活性を左右するため、 BH_4^- を含む局所構造の同定に DFT 計算を用いた。下記に構造同定の詳細を示す。

BH_4^- 中の水素原子の化学環境 (近傍の金属イオンや有機配位子との距離・角度) は MOF の大気安定性や水素放出反応特性を左右するため、重要な構造情報である。対象の MOF の結晶構造は単結晶 X 線回折測定から同定した一方で、X 線散乱因子の小さい水素原子の場合、一般的に詳細な位置決定は難しい。そこで Material Studio CASTEP パッケージを用いた DFT 計算を用いて、 BH_4^- 含有 MOF の局所配位構造 (金属イオン、 BH_4^- 、有機配位子) を切り出し、構造最適化を実施した。構造最適化の結果、MOF 中の BH_4^- は近傍の有機配位子の水素原子 (C-H) と二水素結合を形成していることが確認された。これより対象の MOF が高い大気安定性を示す要因として、二水素結合による BH_4^- の電子状態の変化が示唆された。また、昇温脱離法 (TPD) から確認された高い水素放出反応性には、二つの BH_4^- が隣接している配位構造が寄与していることが示唆された。以上のように、 BH_4^- の局所構造を DFT 計算から同定することは、 BH_4^- 含有 MOF の安定性・水素放出特性の理解につながった。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

“Borohydride-containing coordination polymers: synthesis, air stability and dehydrogenation”

Kentaro Kadota, Nghia Tuan Duong, Yusuke Nishiyama, Easan Sivaniah, Susumu Kitagawa, and Satoshi Horike

Chem. Sci., 2019, 10, 6193.

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

京都大学高等研究院 藤田大士

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、タンパク質の包接が可能な内部空間をもった巨大有機ナノケージ分子の設計を行った。ケージ型分子は適当な大きさの空洞をもち、その内部に他の分子を包接することで「ホスト-ゲスト化合物」と呼ばれる複合体を形成することが知られている。ホスト分子内部に取り込まれたゲスト分子は外界から孤立した特殊な環境下に置かれることで、溶液中での単分散状態や固体中での凝集状態とは全く異なる性質を示す。生体分子であるタンパク質もまた、pH・塩濃度・温度などの環境因子に対して鋭敏な影響を受け、その多くは失活という形で顕われる。そこで我々は、有機ナノケージ分子内部にタンパク質を包接した「カプセル化タンパク質」の化学合成を目指し、孤立空間におけるタンパク質分子の安定化や性質解明に取り組んでいる。今回、巨大有機ナノケージ分子の合成を行う上で、BIOVIA 社製 Materials Studio, 同じく BIOVIA 社製 Discovery Studio、富士通社製 SCIGRESS を用途に応じて組み合わせながら分子設計を試みた。その結果、多面体構造の性質を利用した自己集合反応により、大きな空洞をもつ有機ナノケージ分子の観測に成功している。このように、採用している分子デザインの妥当性が得られている段階ではあるが、合成収率の改善、有機ナノケージ分子の水溶性の確保、包接対象タンパク質に応じた空洞サイズの制御など、カプセル化タンパク質の合成を目指す上で達成すべき課題は多い。今後は合成条件の検討を進め、自己集合反応の結果を分子設計にフィードバックさせながら分子骨格のモデリングと修正を随時行う予定である。

多能性細孔物質の深化
Development of multifunctional porous materials

京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 北川グループ 大竹研一

研究成果概要

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

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

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

ゲート型吸着を示す PCP について、Material Studio の DMol³ パッケージを用いた密度汎関数法(LDA, VWN)による構造最適化、続いて Adsorption Locator パッケージを用いた Simulated-Annealing 法によるガス吸着サイトのモンテカルロ探索を行った。得られたガス吸着状態の構造を基に、一点計算(GGA, PBE)によりエネルギーを求め、PCP の格子変形エネルギーと吸着エネルギーの関係を明らかにすることで、ゲート型吸着の起源について解明した。こうした知見は、PCP への選択的吸脱着を利用した将来のガス分離技術開発のための有用な知見となる。

発表論文(謝辞なし)

Pengyan Wu, Yang Li, Jia-Jia Zheng, Nobuhiko Hosono, Jian Wang,* Ken-ichi Otake, Yanhong Liu, Lingling Xia, Min Jiang, Shigeyoshi Sakaki, Susumu Kitagawa
"Carbon Dioxide Capture and Efficient Fixation in a Dynamic Porous Coordination Polymer"
Nat. Commun. **2019**, *10*, 4362.

Cheng Gu, Nobuhiko Hosono, Jia-Jia Zheng, Yohei Sato, Shinpei Kusaka, Shigeyoshi Sakaki, Susumu Kitagawa*
"Design and Control of Gas Diffusion Process in a Nanoporous Soft Crystal"
Science **2019**, *363*, 387–391.

Ming-Shui Yao, Jia-Jia Zheng, Ai-Qian Wu, Gang Xu, Sanjog S Nagarkar, Gen Zhang, Masahiko Tsujimoto, Shigeyoshi Sakaki, Satoshi Horike, Ken-ichi Otake, Susumu Kitagawa
"Dual-Ligand Porous Coordination Polymer Chemiresistor with Modulated Conductivity and Porosity"
Angew. Chem. Int. Ed., **59**, 172–176, 2020

Yifan Gu, Jia-Jia Zhen, Ken-ichi Otake, Shigeyoshi Sakaki, Susumu Kitagawa,
in preparation

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

京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門 佐藤 徹

【研究成果概要】

高効率な有機エレクトロルミネッセンス (OLED) を達成するためには、電流励起によって 75% の割合で生じる三重項を蛍光に利用することが必要である。我々は三重項励起子を効率よく利用する機構として、最低三重項よりも上の高次三重項励起子を一重項励起子に変換する高次三重項經由傾向 (FvHT) 機構を提案している [1,2]。FvHT 機構では、擬縮退した電子状態により高次三重項から低次三重項への輻射遷移および無輻射遷移が抑制されている。凝集誘起発光 (AIEE) は溶液状態よりも凝集状態において強い発光を示す現象である。1,2-bis(pyridylphenyl)ethene (CNPPE) は AIEE 分子であり、固体中において溶液中よりも小さい無輻射遷移の速度定数を有する [3]。CNBE は結晶中において C_i 対称性を有する二量体を含んでいる。そのため、擬縮退した電子状態に起因する内部転換の抑制が期待される。我々は振電相互作用密度 (VCD) 解析 [4] により振電相互作用定数 (VCC) の起源を調べることで、擬縮退が AIEE の発現に及ぼす役割について明らかにした [5]。

溶液中の CNPPE は単量体によってモデル化し、PCM 法を用いて計算した。固体中の CNPPE はエネルギーの最も安定な二量体 (C_i 対称) によってモデル化し、二量体を QM、周辺の分子を MM によって取り扱う ONIOM 法によって計算した。DFT 計算は、Gaussian09 Revision E01 を用い、計算レベルは M06-2X/6-31G(d,p) とした。VCC および VCD 計算は当研究室で開発したプログラムを用いた。

固体中においてエネルギーの最も安定な二量体は cofacial な配向で並んでいるため、擬縮退している $S_1(A_g)$ は対称禁制遷移、 $S_2(A_u)$ は対称許容遷移となる。Kasha 則に基づく発光は最低励起状態から生じるが、結晶中においてエキシマが生成することで S_2 から S_1 への内部転換が抑制され、 S_2 からの発光が可能となることが予想された。また、二量体モデルではエキシマ生成により波動関数が全体に非局在することで、溶液中の単量体モデルよりも小さな VCC を有することがわかった。したがって、二量体モデルでは単量体モデルよりも S_0 への内部転換は抑制されており、高い発光効率を示すことが予測された。

[1] T. Sato *et al.*, *Sci. Rep.* **7**, 4820 (2017). [2] Y.-J. Pu *et al.*, *J. Mater. Chem. C* **7**, 2549 (2019). [3] S. Nishio *et al.*, *Asian J. Org. Chem.* **3**, 686 (2014). [4] T. Sato *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **112**, 758 (2008). [5] W. Ota *et al.*, arXiv: 1912.10677 (2019).

【発表論文】

(謝辞あり)

(1) Y.-J. Pu, R. Satake, Y. Koyama, T. Otomo, R. Hayashi, N. Haruta, H. Katagiri, D. Otsuki, D.G. Kim, T. Sato, *J. Mater. Chem. C* **7**, 2459 (2019).

(2) Y. Kojima, W. Ota, K. Teramura, S. Hosokawa, T. Tanaka, T. Sato, *Chem. Phys. Lett.* **715**, 239243 (2019).

(3) N. Haruta, P. F. Marques de Oliveira, T. Sato, K. Tanaka, M. Baron, *J. Phys. Chem. C* **123**, 21581-21587 (2019).

固液界面を反応場とする化学反応
Chemical reactions at the interface between solid and liquid

京都大学 産官学連携本部 湊 丈俊

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、固体と液体の界面(固液界面)で起きる化学反応の反応機構や物性などを第一原理計算及び分子動力学計算によって研究した。

2019年のノーベル化学賞の研究対象であるリチウムイオン電池 [1] は、現在広く用いられている蓄電池であるが、蓄電池に求められる性能が高まっていることから、リチウムイオン電池の性能を超える原理的に新しい蓄電池の開発が期待されている。我々は、高エネルギー密度が期待できる新しい蓄電池として「フッ化物イオンシャトル二次電池」 [2] の開発を進めている。これまで有機溶媒から調製した電解液(有機電解液)を用いて、電極のフッ化脱フッ化反応を観測することに成功している [2-4]。この電解液には、アニオンアクセプターと呼ばれる添加物が含まれており、フッ化脱フッ化反応において、重要な役割を果たしていると考えられる。本年度は、アニオンアクセプターとして機能する triphenyl boroxine [5] や Lithium bis(oxalato)borate [6] とフッ化物イオンとの相互作用を計算科学的に検証し、電解液中での分子構造を推定した。

また、固液界面の構造は、物理、化学、生物学的な現象で重要な役割を果たす。本研究では、原子レベルで観察できる周波数変調原子間力顕微鏡 [1 など] を用いて、水和構造における固体表面の効果 [7]、界面での粘性マッピング [8]、イオン液体と固体表面の相互作用 [9] などを解析した。

文献

- [1] Taketoshi Minato and Takeshi Abe, Surface and Interface Sciences of Li-ion Batteries, *Progress in Surface Science*, **92**, 240–280 (2017).
- [2] 湊丈俊, 小西宏明, Asuman Celik Kucuk, 安部武志, 小久見善八, 有機電解液を用いたフッ化物イオンシャトル二次電池の開発, *セラミックス*, **54**, 637-641 (2019).
- [3] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Electrochemical Performance of a Bismuth Fluoride Electrode in a Reserve-type Fluoride Shuttle Battery, *Journal of The Electrochemical Society*, **164**, A3702-A3708 (2017). (謝辞あり)
- [4] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Improvement of cycling performance in bismuth fluoride electrodes by controlling electrolyte composition in fluoride shuttle batteries, *Journal of Applied Electrochemistry*, **48**, 1205-1211 (2018).
- [5] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, Zempachi Ogumi, Electrochemical

- performance of a lead fluoride electrode mixed with carbon in an electrolyte containing triphenylboroxine as an anion acceptor for fluoride shuttle batteries, *Materials Chemistry and Physics*, **226**, 1-5 (2019). (謝辞あり)
- [6] Asuman Celik Kucuk, Taketoshi Minato, Toshiro Yamanaka, Takeshi Abe, Effects of LiBOB on salt solubility and BiF₃ electrode electrochemical properties in fluoride shuttle batteries, *Journal of Materials Chemistry A*, **7**, 13787-13789 (2019). (謝辞あり)
- [7] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-Scale 3D Local Hydration Structures Influenced by Water-Restricting Dimensions, *Langmuir*, **34**, 9114–9121 (2018). (謝辞あり)
- [8] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-level viscosity distribution in the hydration layer, *Physical Review Letters*, **122**, 116001 (2019). (謝辞あり)
- [9] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-Scale Three-Dimensional Local Solvation Structures of Ionic Liquids, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **11**, 1343-1348 (2020). (謝辞あり)

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

京都大学 産官学連携本部 山中俊朗

研究成果概要

我々は金属フッ化物の脱フッ化とフッ化を用いる高容量の革新的 2 次電池である、フッ化物シャトル電池の開発を進めている。 BiF_3 はこの電池の活物質として最もよく研究されている材料である。実験では、 BiF_3 電極の電位を下げていくときの脱フッ化の開始電位が、斜方晶 BiF_3 の場合より立方晶 BiF_3 の場合のほうが約 0.3V 程度低いという結果を得た。そこで本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、斜方晶の BiF_3 と立方晶の BiF_3 のエネルギーを計算した。斜方晶の Final energy は -10591.09712227 eV、立方晶の Final energy は -10587.10028745 eV であった。どちらも単位格子に 12 個のフッ素を含んでいる。これより F ひとつの引き抜きに対して斜晶のほうが 0.3V 程度安定であり、脱フッ化の電位は 0.3V 程度低いと推測される。これは実験結果から期待される結果とは逆であり、立方晶の低い脱フッ化電位の原因は他にあることがわかった。さらに他の物理量を計算し、比較検討する予定である。

生体分子情報データベースの開発とその応用

Development of Databases for Biomolecular Information and its Application

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、生体分子情報データベースおよびバイオインフォマティクス技術の開発に取り組み、その成果をゲノムネット (<http://www.genome.jp/>) から広く公開している。2019年度は2018年度に引き続き、ゲノムネットサービスとして公開してきたデータベースと解析ツールに対し、改良を加えるとともに、ネットワークや表現型の観点から遺伝子機能推定などの応用に結びつけることを目指し、以下の成果を得た。

1. 2018年度に基盤整備を行った、微生物の代謝機能類似性と培養培地類似性の相関を調べるためのシステムについて、培養培地データベースの拡張を行った。具体的には、理化学研究所の Japan Collection of Microorganisms と製品評価技術基盤機構の NITE Biological Resource Center が提供する 500 以上の菌株の培地情報を Resource Description Framework でデータベース化した。さらに、生物種のリストから培地を比較するためのインタフェースを構築し、KEGG のパスウェイモジュールなど代謝機能類似性と比較できるようにした(ライフサイエンス統合データベースセンターの川島秀一特任准教授、守屋勇樹特任助教らとの共同研究)。
2. KEGG で定義されたオーソログごとにプロファイル隠れマルコフモデルを定義し、データベース化した。このデータベースを用いた遺伝子機能を推定する仕組みとして、配列から KEGG のオーソログを推定するシステム KofamKOALA を開発した(京都大学化学研究所の荒巻拓哉氏、緒方博之教授らとの共同研究)。

発表論文(謝辞あり)

1. Sakurai, T., Nishiyama, H., Nagai, T., Goto, S., Ogata, H. and Kudo, M.; Deficiency of Gankyrin in the small intestine is associated with augmented colitis accompanied by altered bacterial composition of intestinal microbiota. *BMC Gastroenterology*, **20**:12 (2020).
2. Aramaki, T., Blanc-Mathieu, R., Endo, H., Ohkubo, K., Kanehisa, M., Goto, S. and Ogata, H.; KofamKOALA: KEGG Ortholog assignment based on profile HMM and adaptive score threshold. *Bioinformatics*, in press (2019).

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

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

研究成果概要

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

優占する系統群の多くが未培養である海洋微生物の研究においては、培養を行わずにゲノム多様性や代謝戦略を解明できるメタゲノミクスに期待が集まっている。公開された海洋メタゲノムデータを網羅的に利用して、1,644 メタゲノム(配列量約 25 Tbp)から約 4 万個の高品質な原核生物ゲノムを再構築した。これらのゲノムは海洋微生物生態系を理解する上で重要なリファレンスとなると期待される。また、これらのメタゲノム由来のデータに含まれる機能未知遺伝子の中から、光受容体等の有用な微生物遺伝子資源の探索を行い、遺伝子異種発現系などの実験的手法を組み合わせて、機能を同定する解析を行っている[論文 3]。

また、湖沼のウイルスに関して、以前作成した ViPTree 等のウイルスゲノム解析ソフトウェアを利用してメタゲノム解析を行い、ウイルスの多様性や季節的変動を明らかにした[論文 1, 2]。

発表論文(謝辞あり)

1. Yusuke Okazaki, Yosuke Nishimura, Takashi Yoshida, Hiroyuki Ogata, Shin-ichi Nakano. 2019. 'Genome-resolved viral and cellular metagenomes revealed potential key virus-host interactions in a deep freshwater lake.' *Environmental Microbiology* 21(12):4740-4754.

発表論文(謝辞なし)

2. Daichi Morimoto, Kento Tominaga, Yosuke Nishimura, Naohiro Yoshida, Shigeko Kimura, Yoshihiko Sako, and Takashi Yoshida. 2019. 'Co-Occurrence of Broad and Narrow Host-Range Viruses Infecting the Toxic Bloom-Forming Cyanobacterium *Microcystis Aeruginosa*.' *Applied and Environmental Microbiology* 85(18):e01170-19
3. Atsushi Shibukawa, Keiichi Kojima, Yu Nakajima, Yosuke Nishimura, Susumu Yoshizawa, and Yuki Sudo. 2019. 'Photochemical Characterization of a New Heliorhodopsin from the Gram-Negative Eubacterium *Bellilinea Caldifistulae* (BcHeR) and Comparison with Heliorhodopsin-48C12.' *Biochemistry* 58(26):2961-2952.

グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用

Development and application of the graph-based phylogenetic method

東京大学大学院理学系研究科生物科学専攻岩崎研究室 松井求

研究成果概要

タンパク質スーパーファミリーは、その長い進化史の中で配列と機能の多様性を獲得してきた。従って、その進化過程をまるごと解明することができれば、タンパク質の諸機能と進化を結ぶ統合的知見が得られるに違いない。しかしながら既存手法は、進化距離の大きな問題に対しては、多重配列アライメント (MSA) から抽出可能な情報量が著しく減少してしまうという問題を抱えており、いずれも適用困難であった。我々はこれまでに Graph Splitting (GS) 法という新たな系統解析手法を考案し、進化シミュレーションに基づいて GS 法がこの問題を解決することを示してきた。GS 法は MSA の代わりに All-to-All ペアワイズアライメントを行い、配列類似性グラフ (SSG) を構築し、その SSG を再帰的に分割することで MSA に由来する問題を回避しつつ系統樹を推定する方法である。GS 法をスーパーファミリーの網羅的解析に適用した結果、190 のスーパーファミリーについて信頼性の高い系統樹を得ることができた。特に T-fold, DNA/RNA ポリメラーゼ, トキシン膜輸送ドメインの各スーパーファミリーは系統樹の全体にわたって内部枝が強く支持されており、それぞれ代謝系, 転写・複製, 膜輸送系の初期進化を照らす新たな知見が示唆された。例えば DNA/RNA ポリメラーゼの系統解析結果からは RNA ワールドの時代から RNA-dependent RNA ポリメラーゼ → RNA-dependent DNA ポリメラーゼ → DNA-dependent DNA ポリメラーゼ → DNA-dependent RNA ポリメラーゼの順番で進化してきたことが示唆された。さらに GS 法を「初期進化」のような“古い”問題だけでなく、「病原菌・ウイルス・癌の短い時間スケールにおける高速な進化」といった“モダンな”問題に広く適用することも試みている。これまでにインフルエンザウイルスやバキュロウイルスなど多様なウイルスについて先行研究を大幅に超える規模と精度を持つ系統樹が得られており、それぞれのウイルスの感染の歴史の解明につなげて行きたいと考えている。

発表論文(謝辞あり)

Motomu Matsui, and Wataru Iwasaki, **Graph Splitting: A Graph-Based Approach for Superfamily-scale Phylogenetic Tree Reconstruction**, *Systematic Biology*, 2020, **69**(2):265–279.

発表論文(謝辞なし)

なし

令和元年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析

Metagenomic analysis of human intestinal microbiota

東京工業大学 生命理工学院 山田研究室 上田 敦史

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、次世代シーケンサーによるディープシーケンシングのデータの遺伝子予測、機能アサインメントを行ったデータに関して、バックアップ作業を実施した。

MAGs による、腸内細菌叢比較ゲノム解析
Gut microbial competitive genome analysis by MAGs

東京工業大学 生命理工学院 生命理工学系 山田研究室 中村 祐哉

研究成果概要

次世代シーケンサーの普及から、環境中の微生物群集のゲノムを解析する技術であるメタゲノム解析が発達している。メタゲノム解析では、従来は環境中の細菌の各系統の存在量や遺伝子存在量を計算し解析を行うが、近年では、大きく技術が発達し、メタゲノムデータから、その環境中に含まれる細菌の個別ゲノムを再構築することが可能になってきた (MAGs; Metagenome Assembled Genomes)。この MAGs は特に、ヒト腸内細菌群集の解析において特に注目されており、2019 年には複数の研究グループによって、公開されているヒト腸内細菌メタゲノムデータセットから大規模に MAGs を構築する研究が行われた。そこで本研究では、京都大学科学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、現時点で報告されているすべての腸内細菌 MAGs を統合したデータベースを開発し、腸内細菌 MAGs 間のゲノム比較解析することを目指した。

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

京都大学触媒電池元素戦略研究拠点 古川 森也

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、排ガス浄化 (NO_x 還元) に有効な Pd 系合金触媒の作用機構について DFT 計算を利用した詳細な機構解明を行った。PdIn 規則合金は $\text{NO} + \text{CO}$ 反応において低温域で高い N_2 選択性を示す一方、 NO の転化率が低いという問題があった。これに対し我々は、In の一部を Cu で置換した $\text{Pd}(\text{In}_{0.33}\text{Cu}_{0.67})$ 擬二元系合金を用いることで N_2 選択性を低下させることなく、 NO 転化率を大幅に向上させることに成功している。本研究においては DFT 計算の結果、以下のことが明らかとなった。PdIn(120)面上の In ステップサイトで N_2O 分解がほぼバリアレスに進行することが判明し、PdIn は N_2O を N_2 と O に速やかに分解できることが示された(図 1a)。一方で律速段階である NO 分解の活性化エネルギーは増加し、活性が低下する一方、In を Cu で一部置換することにより、この活性化エネルギーが Pd の場合と同程度までに低減できることが分かった(図 1b)[1]。

またこれ以外にも同反応に有効な Cu_5Pd 合金触媒[2]やその他、種々の反応に有効な合金材料(NiCu:アルケンのヒドロホウ素化[3], アルコールのアンモ脱水素[4], NiSi₂:芳香族水素化[5], Ru-Ni:グリセロールからのアミノ酸合成 [6])の反応機構に関する DFT 計算を行い、論文を発表した。

発表論文(謝辞あり)

- [1] J. Jeon et al., *Chem. Sci.*, **2019**, 10, 4148-4162.
- [2] F. Xing et al., *Chem. Sci.*, **2019**, 10, 8292-8298.
- [3] S. Furukawa et al., *ACS catal.*, **2019**, 9, 5096-5103.
- [4] Y. Wang et al., *ACS Catal.*, **2019**, 9, 6681-6691.
- [5] W Simanullang et al., *Chem. Commun.*, **2019**, 55, 13999-14002.

発表論文(謝辞なし)

- [6] Y. Wang et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 2289-2293.

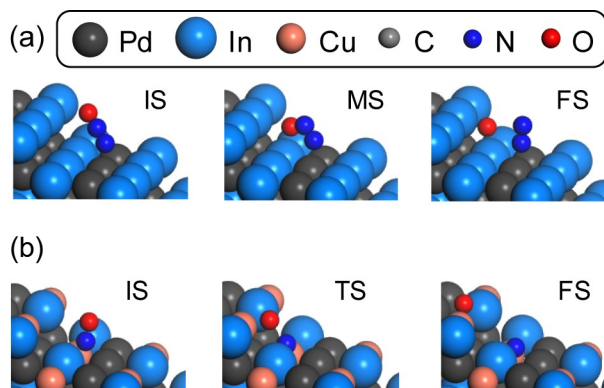


図 1. (a) PdIn(120)面上での N_2O 分解過程。(b) $\text{Pd}(\text{In}_{0.33}\text{Cu}_{0.67})$ (120)面上での NO 分解過程。

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
カロテノイド生合成パスウェイの再構築

Pathway reconstruction of carotenoid biosynthesis using Carotenoid DB Chemical Fingerprints

藪崎純子

研究成果概要

我々は独自に開発したカロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いて約 573 のカロテノイド第一次生産者生物種における 615 のカロテノイドのパスウェイの再構築を行なった。各生物種で再構築したそれぞれのパスウェイを全て繋げたところ、全体として生物はカロテノイドにおいて門のレベルで棲み分けを行なっていることがわかった。パスの浅い部分では下等なバクテリアや古細菌が、パスが進むにつれて高等な生物のカロテノイドが作られる事が分かってきた。バクテリアのフィルミクテス門は最も浅い部分に生息する。彼らは Farnesyl-PP から Prephytoene を経て Staphyloxanthin をはじめとする C30 のカロテノイドの木構造のパスウェイを作っている。次に紅色非硫黄細菌は Neurosporene から 19 の誘導体を作りながら主となるカロテノイド Spheroidenone を作っている。更に紅色硫黄細菌、非硫黄細菌や真菌類は Lycopene から 43 にもなる最も大きなカロテノイドの木構造のパスウェイを作って、Rhodopin、Rhodovibrin、Spirilloxanthin、R.g-Keto 類やその他の誘導体を作っている(図 1 参照)。

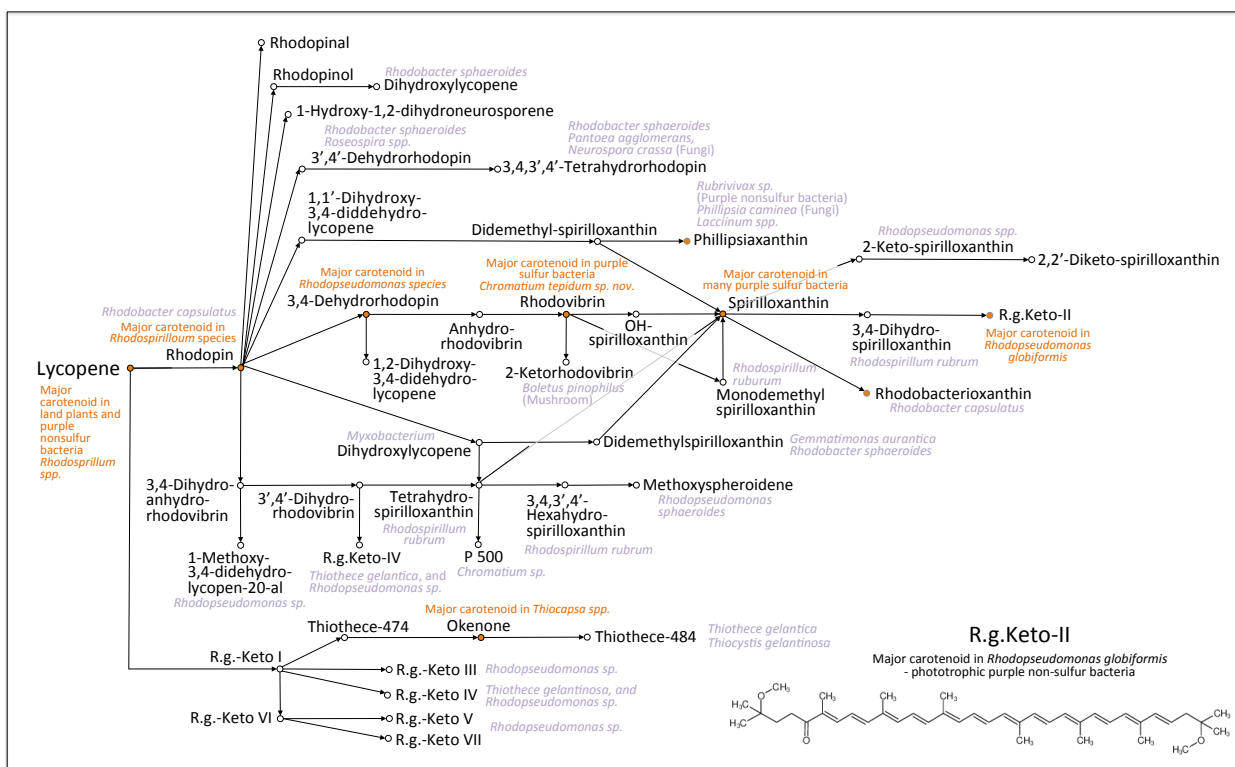


図 1 紅色細菌のパスウェイ再構築図

ユーリ古細菌門と放線菌はリコペンから C50 の Bacterioruberin へ至るパスウェイを作っている。また放線菌はリコペンから C50 の Sarcinaxanthin や Decaprenoxanthin へのパスを作っている。リコペンから片方にε環を持つδ-カロテン、片方にε環を持ち、片方にはβ環を持つα-カロテンを経て、緑藻類、果物、野菜の主要カロテノイドのルテインを作っている。またルテインからプラシノ藻類はメジャーカロテノイドの Prasinoxanthin、Micromonal、Uriolide、Siphonaxanthin を作っている。陸上植物は良く知られたアポカロテノイドのアブシジン酸やストリゴラクトンのような植物ホルモンやβ-シクロシトラールのようなシグナル伝達物質以外にも、Lycopene、β-Carotene、β-Cryptoxanthin、Zeaxanthin、Antheraxanthin、Violaxanthin、Neoxanthin から 100 以上の多くのアポカロテノイドを作って、シグナル物質やその他の高次の機能を活用していると考えられた。

再構築したパスウェイをパスウェイ解析した結果、頂点の数と全次数はべき乗則に従うことがわかった。また全次数と、そのカロテノイドを作る生物種の数とに相関が見られた(図2 参照)。結果、全次数の高いハブとなるカロテノイドを多くの生物種が溜め込んでいるということがわかってきた。ハブとなるカロテノイドは、右表にあるように Lycopene、β-Cryptoxanthin、β-Carotene、Zeaxanthin、γ-Carotene、Violaxanthin だった。これらは古くて重要なカロテノイドということになる。

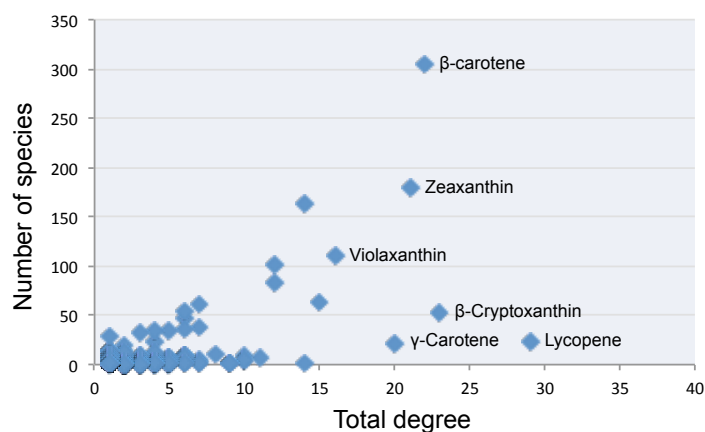


図2 カロテノイドの全次数と生物種数

表 ハブカロテノイドと次数

	Total-degree	In-degree	Out-degree
Lycopene	29	2	27
β-Cryptoxanthin	23	2	21
β-Carotene	22	1	21
Zeaxanthin	21	1	20
γ-Carotene	20	2	18
Violaxanthin	16	1	15

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化学科 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相関していることが明らかとなっている。これまでに、密度汎関数計算に基づいた AFLOW データベースに登録されている 337 種類の2成分合金について、最も安定な面の表面エネルギーを京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP プログラムを用いて決定した。令和元年度は、各種遷移金属表面上のステップについて、N-O 結合開裂および N₂、O₂ 生成活性化エネルギーや反応熱を計算しており、将来的にインフォマティクスに役立つ相関関係を見出したい。

発表論文(謝辞あり)

1. “Linear Correlations between Adsorption Energies and HOMO Levels for the Adsorption of Small Molecules on TiO₂ Surfaces”

T. Kamachi, T. Tatsumi, T. Toyao, Y. Hinuma, Z. Maeno, S. Takakusagi, S. Furukawa, I. Takigawa, K. Shimizu, *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 20988-20997, (2019).

発表論文(謝辞なし)

1. “Auto-Generation of Corrugated Nonpolar Stoichiometric Slab Models”

Y. Hinuma, T. Kamachi, N. Hamamoto, *Materials Transactions*, **61**, 78-87, (2020).

2. “Machine Learning for Catalysis Informatics: Recent Applications and Prospects”

T. Toyao, Z. Maeno, S. Takakusagi, T. Kamachi, I. Takigawa, K. Shimizu, *ACS Catalysis* **10**, 2260-2297, (2020).

Y. Hinuma, T. Toyao, T. Kamachi, Z. Maeno, S. Takakusagi, S. Furukawa, I. Takigawa, K. Shimizu, *The Journal of Physical Chemistry C*, **122**, 29435-29444, (2018).

湖沼に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析
Metagenomics of prokaryotes and viruses in freshwater systems

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、湖沼に生息する細菌およびウイルスのメタゲノム解析を行っている。全国の大水深淡水湖の湖心で鉛直的に採水して得た細菌・ウイルスサンプルより DNA を抽出、断片化し、ショートリードシーケンサーでシーケンスした。得られた生リードは、クオリティコントロール(fastp, Trimmomatic, Cutadapt を使用)を行った後、metaSPAdes を用いてアセンブルした。細菌サンプルから得られたコンティグは MetaBAT を用いてビンニングし、checkM でクオリティチェックを行った後、PhyloPhlAn 及び GTDB-tk を用いた系統解析を行い、ドラフトゲノムを得た。ウイルスサンプルから得られたコンティグは VirSorter によってフィルタリングを行い、さらに環状(=完全長)にアセンブルされたものを ccfind を用いて決定した。細菌及びウイルスゲノムにコードされている遺伝子を prodigal で予測し、得られたアミノ酸配列は NCBI nr、UniRef および eggNOG データベースに対するホモロジー検索、さらに pVOG および pfam データベースに対する hmm による高感度な検索によって機能アノテーションした。先行的に研究を実施している琵琶湖からはこれまでに 57 の細菌のドラフトゲノム、4158 個のウイルスゲノム断片(そのうち 183 本は完全長ゲノム)が得られ、淡水環境に普遍的に生息する細菌系統の高品質(completeness>80%, contamination<10%)なゲノムが多数得られた。ウイルスゲノムについては保有遺伝子等に基づく宿主予測を行い、主要な細菌系統に感染するとみられるウイルスを新たに多数特定した。さらに時系列で採集したサンプルのリードをマッピングしカバレッジを計算することで、各細菌・各ウイルスの現存量の変動を推定した。その結果、比較的安定な環境と思われていた深水層でもウイルスは活発にホストの溶菌に寄与していること、表水層では Actinobacteria に感染するウイルスが多様性・現存量ともに高く、生態系内で量的に重要な機能を担っている可能性が示された。これらの研究成果は今年度論文として発表した。その他の湖のサンプルについても、順次同様の解析を進めているところである。

発表論文(謝辞あり)

Okazaki Y, Nishimura Y, Ogata H, Yoshida T, Nakano S. (2019) Genome-resolved viral and cellular metagenomes revealed potential key virus-host interactions in a deep freshwater lake. *Environmental Microbiology*, 21: 4740-4754.

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

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

In 2019, as a continuation of our research performed in 2018, we have investigated the amplification of attosecond pulses in argon and in helium. The research is based on the single-electron numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation (TDSE) for atomic processes in intense laser fields. The simulations that we performed in argon confirmed the amplification in the 25 - 50 eV photon energy region observed in the experiments. The simulations performed with helium as amplifying medium have provided interesting insight in the physical processes involved in the observed amplification around 100 eV far from the ionization threshold of helium. In particular, from our simulations it can be understood how having He^+ ions in excited states results in a decisive effect for parametric processes at high photon energies to be efficient in high-harmonic generation with helium. The results from our numerical simulations are therefore an important step for the understanding and realization of full coherent plasma X-ray lasers seeded by parametric amplified high-harmonics. An article reporting both theoretical and experimental results has been submitted to Phys. Rev. A, and an oral presentation on the results will soon be given at 2020 OSA High-brightness Congress.

発表論文 (謝辞あり)

1. C. Serrat, J. Seres, E. Seres and S. Namba, "Extreme-ultraviolet coherent pulse amplification in argon", Phys. Rev. A 99, 063425 (2019).
2. C. Serrat, J. Seres, E. Seres, T-H. Dinh, N. Hasegawa, M. Nishikino and S. Namba, "Parametric attosecond pulse amplification from high order harmonic generation in He^+ far from the ionization threshold.", Phys. Rev. A Rapid Communication (under review).

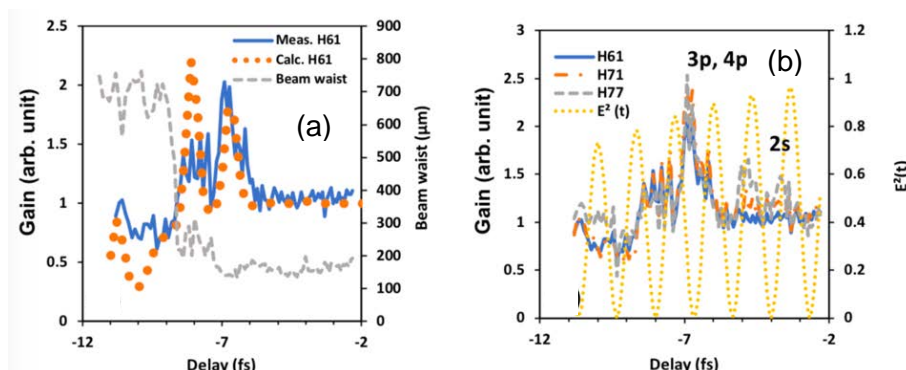


Figure: (a) Comparison of the measured and the calculated parametric gain together with the harmonic beam waist. (b) Measured gain dynamics at three harmonic lines: H61, H71 and H77.

スギゲノムの解読と解析

Genome sequencing and analysis of Japanese Cedar

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

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スギゲノムの解読と解析に取り組んだ。

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

また、スギ花粉を出さないいわゆる無花粉スギ(雄性不稔スギ)はスギ花粉症への抜本的対策として期待されているが、自然変異体を利用しているため原因遺伝子は不明であり、各地の気候に適し商業的に優れた特性を持つ様々な雄性不稔スギを大量生産することはできない。これらの課題を解決するための基礎研究として我々はスギゲノム配列を解読している。スギゲノム(約 11Gb)はヒトゲノム(約 3 Gb)の 3.8 倍の大きさを持ち、予備解析の結果、ヒトゲノムより遙かに解読が難しいゲノム構造(極めて頻度の高い反復配列)を持っていることが分かっており、ゲノム解読には予測不能な極めて大きな計算量を必要とする。

このため、スギゲノム概要配列の構築のためスーパーコンピュータを用いてゲノムアセンブリプログラムを動かした。wtdbg2 アセンブラを動かすにあたっては、データの前処理方法やソフトウェアに与える最適パラメータが事前に予想できないため、数十パターンにわたる様々な条件で並列に計算を行った。Flye や Ra といったゲノムアセンブラの利用においては数 TB のメモリで 1-2 か月の間連続して計算を行う必要があった。

また、Oxford Nanopore 社のシーケンサーで得られた信号データから、ゲノムアセンブラの入力となる塩基配列を得るにあたり、GPU ノードを利用し計算の高速化を図った。

スギのゲノムアセンブリは今後も継続し、コンティグ長や精度の向上を目指す予定である。

発表論文(謝辞あり)

該当無し

発表論文(謝辞なし)

該当無し

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

東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門 平野 敏行

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、タンパク質の電子状態計算を行い、計算化学的手法によりタンパク質の物性・反応性を理解することを目的としている。使用するプログラムは自らが開発している量子化学計算プログラム ProteinDF である。ProteinDF は計算領域を分割することなく、金属を含むタンパク質のカノニカル分子軌道計算を達成できる点が特長である。ProteinDF はオブジェクト指向言語 C++で記述され、MPI/OpenMP によるハイブリッド並列計算を行うことができる。

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

本年度は、計算環境の準備・構築に加え、相互作用解析ツールの開発およびテスト計算を行った。EDA 法に基づく相互作用エネルギー解析ツールを ProteinDF および QCLObot に実装した。grid-free 法を用いることにより、密度汎関数法における交換相関エネルギー成分を算出できることが特長である。アミノ酸残基や主鎖・側鎖ごとの相互作用エネルギーを算出し、得られた相互作用エネルギーをヒートマップにより可視化するようにした。低分子および小規模タンパク質の電子状態計算を行い、デバッグ・テスト計算を行った。今後、様々なタンパク質の相互作用エネルギー解析計算を行い、有用性を確かめていきたい。

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

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

東京大学大学院新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻 岩崎研究室
浜口 悠貴

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、真核生物 81 生物種のミトコンドリア ARS の推定とアセンブリの評価を試みた。解析の結果、以下の点が示された。

- ① 繊毛虫で推定されるミトコンドリア ARS のレパートリー数が、同じ SAR スーパーグループに属するクロメラ類や珪藻類などと比較して減少していた。
- ② 繊毛虫のゲノムアセンブリを BUSCO で評価したところ、最大で 51%程、軒並み 20%以下の Completeness であった。ゲノムの Completeness が低いために、繊毛虫で推定できるミトコンドリア ARS のレパートリー数が減少している可能性が考えられる。
- ③ 海綿動物や刺胞動物、昆虫の ARS のレパートリーの中に真核(細胞質、ミトコンドリア)由来でない細菌由来の ARS が推定された。各生物種の共生細菌の ARS 遺伝子が水平伝播したか、共生細菌のゲノムがコンタミしていた可能性も考えられる。

発表論文(謝辞あり) なし

発表論文(謝辞なし) なし

機能性高分子材料の創生
Creation of functional polymeric materials

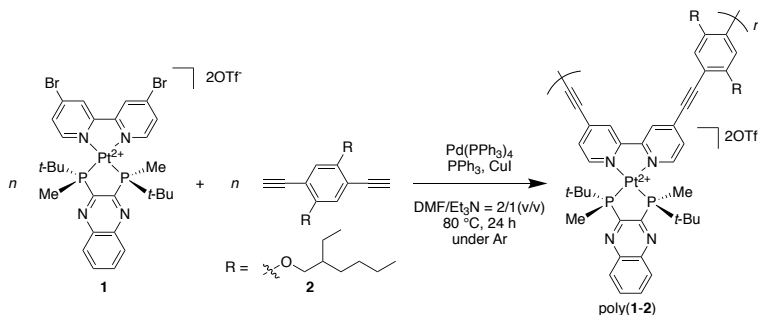
関西大学 化学生命工学部 化学・物質工学科 ^{さんだ}三田文雄

研究成果概要

Scheme 1 に示す、ジブロモビピリジンと(*R,R*)-QuinoxP*が配位した 2 価の白金錯体モノマー**1** と、1,4-ジエチニルベンゼン誘導体モノマー**2** との菌頭-萩原カップリング重合で得られるポリマー[poly(**1-2**)]は主鎖の規則正しいねじれに起因する円偏光二色性を示す。本研究では、poly(**1-2**)の高次構造解析の一環として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、**1** の立体配座を Gaussian 16 プログラムを用いて最適化し、単結晶 X 線構造解析により得られた構造と比較した。

1 の DFT 計算 (対アニオンは省略) により得られた安定構造および単結晶 X 線解析により得られた構造を Figure 1 に示す。いずれにおいても、**1** の白金中心と、2 つの窒素原子および 2 つのリン原子からなる面は、平面四角形構造から約 10°ねじれていることが確認された。これは、かさ高い *t*-ブチル基とメチル基で置換された不斉ホスフィン原子に起因すると考えられ、このねじれが poly(**1-2**)の主鎖のねじれを誘起していることが示唆された。

Scheme 1. The Sonogashira–Hagihara Coupling Polymerization of **1** with **2**.



発表論文 (謝辞あり)

M. Marumoto, T. Sotani, Y. Miyagi, T. Yajima, N. Sano, F. Sanda, *Macromolecules* in press (<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.0c00096>).

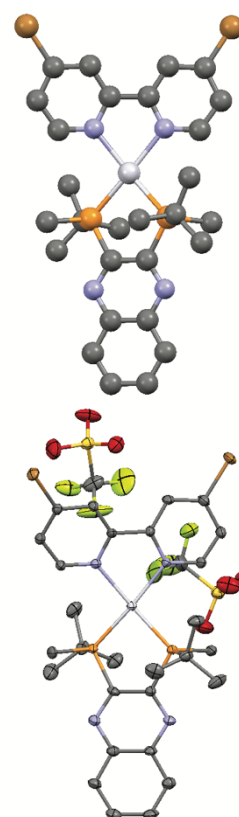


Figure 1. Top: Possible conformer of monomer **1**, whose geometry was fully optimized by the DFT method [B3LYP/6-31G* (C, H, N, P, Br)-LANL2DZ (Pt)], in which counter anions were omitted, and hydrogen atoms were hidden for clarity. Bottom: ORTEP view of **1** with 50% probability ellipsoids.

計算化学を活用した天然物の合成研究
Natural products synthesis utilizing computational chemistry

富山県立大学 工学部生物工学科 生物有機化学講座 占部 大介

研究成果概要

本研究では、計算化学を活用した遷移状態探索、分光学的データの予測、網羅的な配座解析を全合成に組み合わせ、複雑天然物の効率的合成、希少天然物の構造決定、構造及び配座活性相関に基づく機能性分子の設計を行うことを目標としている。今年度は、一般性の高い遷移状態探索法の確立に焦点を置き、研究を実施した。

配座が柔軟な分子の化学反応における遷移状態探索は困難であるが、それを可能にする鍵は、配座異性体の存在を考慮した網羅的な遷移状態の発生と高精度エネルギー計算である。我々は共同研究者らによって行われたプロシアニジン B6 全合成をモチーフとし、ルイス酸存在化でのカテキン誘導体の 2 量化反応における高い位置および立体選択性発現機構の解析を行った。2 量化反応によって生成する C-C 結合の距離を固定したモデルを設計し、分子力場計算による配座探索と、半経験的軌道法計算および計算を組み合わせた段階的な構造最適化と遷移状態計算を実施した。その結果、364 個の遷移状態を配座異性体として発生させることに成功した。得られた遷移状態の高精度エネルギー計算から、最も安定な遷移状態が実験結果を再現することが分かった。最安定遷移状態はユニークな配座を有していたが、その詳細な構造解析から、CH- π 、lone pair- π 、 π - π などの弱い非共有結合性相互作用が遷移状態を安定化することが分かった。

本研究を行う過程で確立した網羅的な遷移状態探索法は高い一般性を有していると考えており、今後、複雑天然物の合成過程における選択性発現の解析や予測に利用する予定である。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

1. Fukaya, K.; Saito, A.; Nakajima, N.; Urabe, D. "A Computational Study on the Stereo- and Regioselective Formation of the C4 α -C6' Bond of Tethered Catechin Moieties by an Exhaustive Search of the Transition States," *J. Org. Chem.*, **2019**, *84*, 2840-2849. DOI:10.1021/acs.joc.8b03263.
2. Sibero, M. T.; Zhou, T.; Fukaya, K.; Urabe, D.; Radjasa O. K.; Sabdono, A; Triant, A; Igarashi, Y. "Two new aromatic polyketides from a sponge-derived *Fusarium*," *Beilstein J. Org. Chem.*, **2019**, *15*, 2941-2947.

液々界面での電子移動反応の研究

Theory of electron transfer at Liquid-liquid interface

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 計算分子科学研究室 平野 智倫

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、分子動力学シミュレーションおよび量子化学計算を行うことで、液々界面における電子移動反応の反応機構を明らかにすることを目標とした。

液々界面における電子移動反応は電極反応や光合成タンパク質中での反応のモデルとして特に重要視されている。しかし液々界面を選択的に観測することのできる実験手法は極めて乏しく、本研究では自由エネルギー計算および量子化学計算の観点から液々界面電子移動の微視的な描像を得ることを目標とした。

本研究では Marcus 理論に基づいたエネルギー差座標 X を用いることで溶媒和構造を表す反応座標とした。また、疎水性溶質の界面からの距離 z および溶質間距離 r を用いて溶質配置座標とすることで、3次元反応座標 (z, r, X) 上の自由エネルギー面を計算することで、フェロセン/フェリシアン化物イオン間での電子移動の反応経路を特定した。

さらにこれらの結果と電気化学実験の測定結果との対応を考察するため、界面に電場が存在する場合の反応経路および活性化障壁の大きさを計算した。これらの結果により、中性の疎水性分子を用いる場合、電荷分離反応の反応速度は電場に依存せず、電荷結合反応の反応速度のみが電場に依存することが明らかになった。このようなふるまいは実験的には既に観測されていたが、微視的な描像としては帰属されていなかった。本研究により、界面電子移動の反応経路および反応の電場依存性が原子・分子レベルの分解能で初めて明らかとなった。

現在はさらに反応種間の電子的カップリングの量子化学計算を進めており、溶媒和構造やカップリングが界面電子移動に与える影響を、より詳細に明らかにしていく予定である。

発表論文(謝辞あり)

"Electron Transfer Mechanism at Oil/Water Interface Revealed by Multidimensional Free Energy Calculations"

Tomonori Hirano and Akihiro Morita, submitted for publication (2020).

生態学的ビッグデータを用いた生物多様性の創出・維持機構の研究

A study on the mechanisms of origin and maintenance of biodiversity using ecological big data

琉球大学 理学部 海洋自然科学科生物系

久保田 康裕

研究成果概要

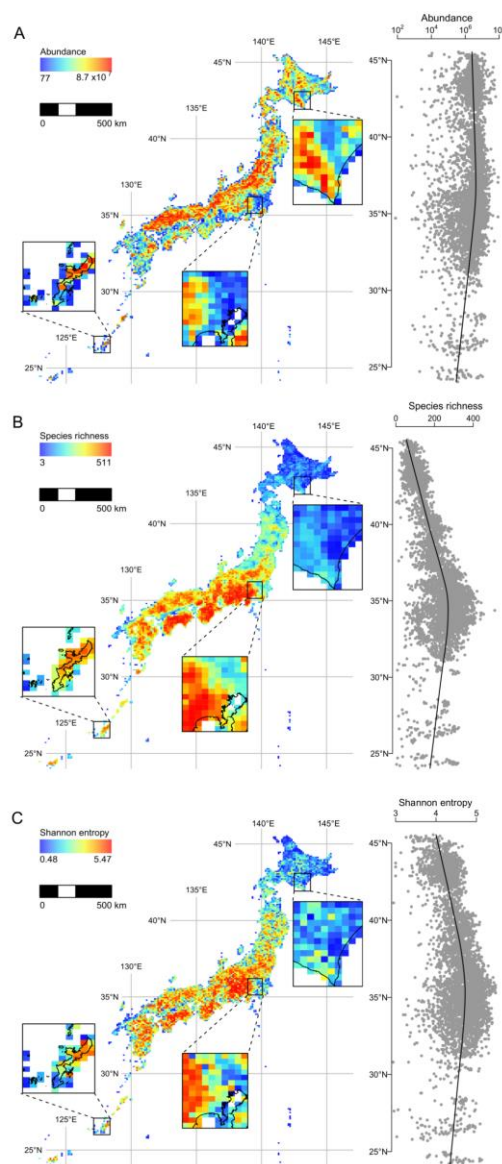
本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、大規模に蓄積された木本種の分布データを統合して、東アジア島嶼部の自然林における木本各種の個体数を網羅的・広域的に推定した。得られた推定値に基づき、木本種の個体数や多様度指数などの特性を 10km 平方の解像度で評価し、地図化することができた(右図: 上から、木本の総個体数、種数、シャノンの多様度指数の推定値を表す)。また、地理的なスケールで木本各種の個体数を網羅的に評価できたことにより、進化的背景の異なる生物地理区ごとに、木本種の多様化の過程を推測することが可能となった。さらに、推定された各種の個体数と分布面積に基づき、国内レッドリスト(絶滅のおそれのある野生生物の種のリスト)におけるランク付けの妥当性を評価した。

発表論文(謝辞あり)

K. Fukaya, B. Kusumoto, T. Shiono, J. Fujinuma and Y. Kubota (2020) Integrating multiple sources of ecological data to unveil macroscale species abundance. *Nature Communications*. (accepted)

発表論文(謝辞なし)

なし



高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響

Influence of intermolecular interaction between polymers and low mass compounds on vibrational spectra

大阪大学理学研究科高分子科学専攻

武智 恭世

研究成果概要

目的: 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、水素の二原子分子 H_2 が、様々な高分子の近傍に接近したときにどのような配置になる傾向がみられるか、そしてそれが、水素分子の赤外吸収スペクトルにどのように反映されるかについて検討した。

計算: 量子化学計算プログラム(Gaussian 16)を用いて、密度汎関数法を用いた第一原理計算を行った。基底関数は 6-31G (d,p)である。高分子の特定の部分に対応する低分子を選び、その低分子と水素分子の間の相互作用による水素分子の赤外吸収スペクトルの変化を求めた。

結果: 水素分子の基準振動は、水素原子間結合の伸縮振動のみである。孤立した水素分子では、水素分子は対称心を持つために、この振動は赤外不活性と予測され、計算においても一致した結果が得られる。しかし、様々な有機分子近傍における水素分子の安定配置を求めて、その位置における水素分子の構造とその振動について調べると以下のような変化が現れることが明らかになった。(1)水素分子は、有機分子の特定の官能基に、ある一定の配向で安定化する傾向がある。(2)水素分子の伸縮振動は低波数側へのシフトする。(3)水素分子の伸縮振動が赤外活性となる。(4)接近する官能基の違いに依存して、振動数シフトと赤外強度の大きさは変化する。

振動数と赤外強度の変化は、相手分子の種類によって異なり、今回の計算では単純な飽和炭化水素化合物において最も小さく、極性の大きなカルボニル基やアミド基付近に配置された時に大きくなる傾向がある。しかし無極性分子でも芳香環がある場合には、飽和炭化水素よりも、変化量は明らかに増大した。また振動数シフトと赤外吸収強度は相互に関係しており、一般にシフト量が大きくなるにつれて赤外吸収強度が大きくなる傾向が見られた。

水素分子は、いずれの場合においても、一つの水素原子が官能基に対して接近している。このために水素分子の電子分布が非対称になっている。これが水素分子の振動が赤外活性となる原因であると考えられる。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

ゼロ金利制約のあるDSGEモデルのパラメータ推定

Estimation on DSGE models with the zero lower bounds on nominal interest rates

神戸大学社会システムイノベーションセンター

砂川 武貴

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、非線形マクロ経済モデルのベイズ推定を、Juliaの自作プログラム（MPI.jlを利用）を用いて行った。2020年1～2月の試行の結果、現在のプログラムでは、他大学の同様のスパコンで実行したときほど実行速度が出ないことがわかった。来年度以降も使用を継続し、上記の問題を解決した上で研究に用いることを検討している。

発表論文（謝辞あり）

発表論文（謝辞なし）



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	運休	
大規模共有メモリサーバ (uv1/uv2/sdf1/sdf2)	1													8724.0 (h)	60.0 (h)		システム稼働率：99.3 %
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
	30																
	1																
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
30																	
CPUクラスタ (jp001-jp134/ap001-ap124)	1													8782.5 (h)	1.5 (h)		システム稼働率：100.0 %
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
	30																
	1																
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
30																	
GPUクラスタ (pk01-pk14/apg01-apg18)	1													8784 (h)			システム稼働率：100 % (システム停止なし)
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
	30																
	1																
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
30																	

● 計算サーバの月別システム稼働時間

システム名	年月	稼働時間(b)	保守時間(c)	故障時間(d)	運転時間(e=b+c+d)	稼働率(b/e)
大規模共有メモリサーバ (uv1/uv2/sdf1/sdf2)	4月	720:00			720:00	100 %
	5月	744:00			744:00	100 %
	6月	720:00			720:00	100 %
	7月	640:00	52:00	52:00	744:00	86 %
	8月	744:00			744:00	100 %
	9月	715:00		5:00	720:00	99 %
	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	696:00			696:00	100 %
	3月	741:00	3:00		744:00	99 %
	計		8672:00	55:00	57:00	8784:00
月平均		722:40	4:35	4:45	732:00	98.7 %
CPUクラスタ	4月	720:00			720:00	100 %
	5月	744:00			744:00	100 %

(jp001-jp134/ap001-ap124)	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	696:00			696:00	100 %	
	3月	742:30		1:30	744:00	99 %	
	計	8782:30		1:30	8784:00	100.0 %	
	月平均	731:52		0:07	731:59	100.0 %	
	GPUクラスタ (pk01-pk14/apg01-apg18)	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		696:00			696:00	100 %	
3月		744:00			744:00	100 %	
計		8784:00			8784:00	100.0 %	
月平均		732:00			732:00	100.0 %	



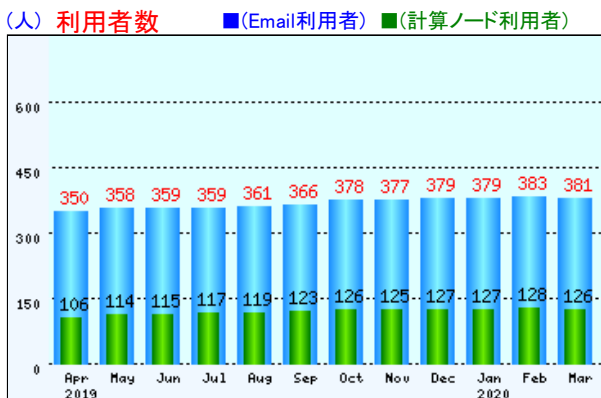
システム稼働状況
スーパーコンピュータシステム

- 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	148	(43)	(148)
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	1		(1)
5	宇治地区事務局	96		(96)
6	理学研究科・理学部	12	(7)	(12)
7	医学研究科・医学部	9		(9)
8	附属病院			
9	再生医科学研究所			
10	薬学研究科・薬学部	5	(2)	(5)
11	工学研究科・工学部	48	(20)	(48)
12	エネルギー科学研究科	5	(5)	(5)
13	農学研究科・農学部	7	(5)	(7)
14	総合人間学部			
15	人間・環境学研究科	4	(3)	(4)
16	経済研究所			
17	数理解析研究所			
18	情報学研究科			
19	生命科学研究科			
20	学術情報メディアセンター			
21	生態学研究センター			
22	高等研究院	7	(5)	(7)
23	次世代開拓研究ユニット			
24	先端医工学研究ユニット			
25	触媒・電池元素戦略ユニット			
26	iPS細胞研究所			
27	ウイルス研究所			
28	福井謙一記念研究センター	1	(1)	(1)
29	産官学連携本部	3	(3)	(3)
30	学際融合教育研究推進センター			
31	その他	33	(31)	(33)



● 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	ログインノード
1	化学研究所	10654日14時間40分	51428日13時間33分	6594日16時間53分	6日21時間04分
2	エネルギー理工学研究所				
3	生存圏研究所				
4	防災研究所	781日11時間50分			05時間59分
5	宇治地区事務局				
6	理学研究科・理学部	00時間12分	10300日05時間53分	2906日14時間21分	03時間50分
7	医学研究科・医学部				
8	附属病院				
9	再生医科学研究所				
10	薬学研究科・薬学部				
11	工学研究科・工学部	5533日15時間28分	175314日15時間57分	19008日04時間18分	7日16時間54分
12	エネルギー科学研究科	499日02時間36分	8628日14時間46分	5786日08時間56分	05時間56分
13	農学研究科・農学部	83日22時間15分	6708日21時間01分	379日18時間47分	13日04時間52分
14	総合人間学部				
15	人間・環境学研究科		564日15時間44分	13日08時間07分	00時間06分
16	経済研究所				
17	数理解析研究所				

18	情報学研究科				
19	生命科学研究科				
20	学術情報メディアセンター				
21	生態学研究センター				
22	高等研究院				
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				
30	学際融合教育研究推進センター				
31	その他	9494日15時間55分	169573日07時間08分	12177日02時間12分	210日02時間39分

- 2019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

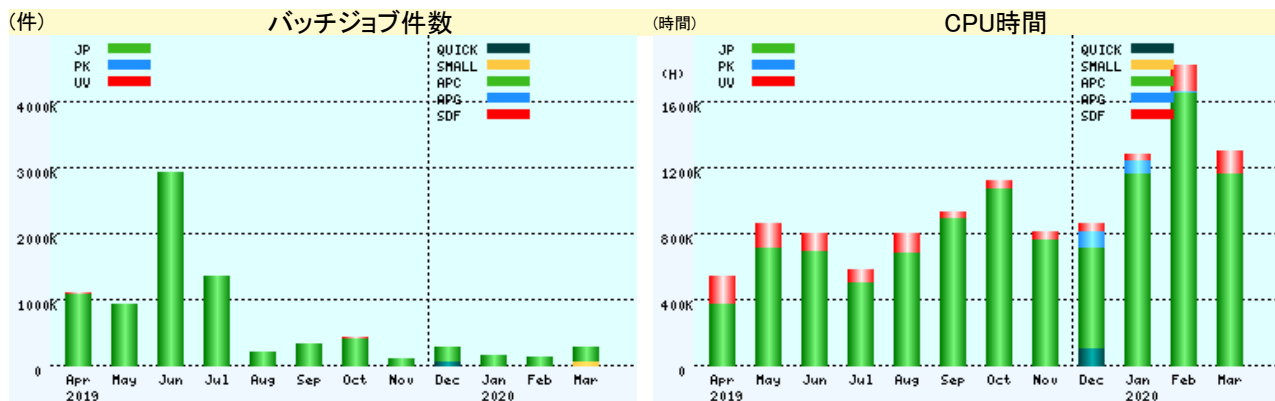
日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● バッチジョブ実行時間 (SGI UV2000 & SGI C2112)

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	7448306	644	3001
2	総CPU時間	238257日14時間43分	734日10時間10分	31502日13時間11分
3	平均CPU時間	0時間46分	1日3時間19分	10日11時間51分
4	最大CPU時間	16日6時間41分	1日23時間03分	35日9時間35分
5	平均ジョブ実行時間	0時間10分	6時間22分	19時間39分
6	最大ジョブ実行時間	21時間46分	9時間30分	18時間03分
7	平均ジョブ待ち時間	0時間02分	0時間31分	9時間40分
8	最大ジョブ待ち時間	5時間37分	0時間48分	4時間23分

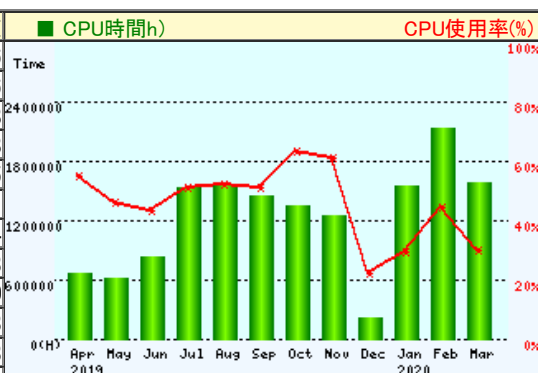
● バッチジョブ実行時間 (HPE Superdome Flex & HPE Apollo 2000)

項番	項目	QUICKキュー	SMALLキュー	APCキュー	APGキュー	SDFキュー
1	総ジョブ件数	58183	94330	714508	9410	1739
2	総CPU時間	4288日10時間42分	483日12時間30分	191303日18時間08分	7967日00時間24分	15821日17時間33分
3	平均CPU時間	00時間02分	00時間06分	06時間15分	21日15時間42分	8日16時間35分
4	最大CPU時間	00時間01分	02時間21分	27日07時間19分	3日23時間26分	32日15時間51分
5	平均ジョブ実行時間	00時間03分	00時間01分	00時間47分	1日06時間12分	08時間53分
6	最大ジョブ実行時間	00時間01分	00時間12分	18時間22分	07時間13分	20時間41分
7	平均ジョブ待ち時間	07時間14分	00時間00分	00時間49分	06時間14分	00時間20分
8	最大ジョブ待ち時間	07時間20分	00時間23分	08時間56分	02時間40分	01時間37分



● 月別のCPU使用時間とバッチジョブ件数(2019年度)

月	CPU使用率	CPU時間	バッチジョブ件数
4月	56.5 %	28072日10時間28分	1100076
5月	47.7 %	25892日05時間48分	929976
6月	44.2 %	34742日18時間10分	2947338
7月	52.5 %	64436日15時間59分	1367718
8月	53.7 %	65600日19時間08分	224215
9月	52.0 %	61019日20時間08分	336361
10月	64.1 %	56788日03時間51分	425134
11月	62.6 %	52518日13時間23分	121133
12月	23.3 %	9265日19時間21分	288050
1月	30.7 %	64954日18時間35分	163493
2月	45.9 %	89404日09時間46分	141843
3月	31.8 %	66553日09時間11分	284809
年度計	-	619249日19時間54分	8330146
月平均	47.1 %	51604日03時間39分	694178





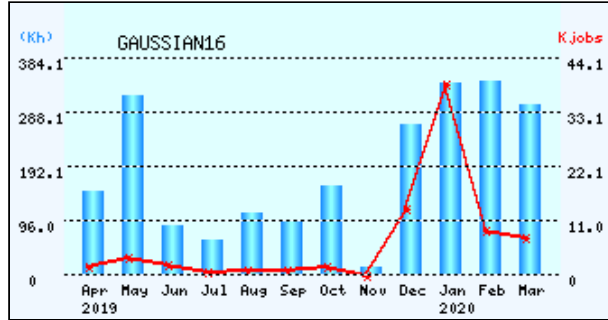
システム稼働状況
スーパーコンピュータシステム

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

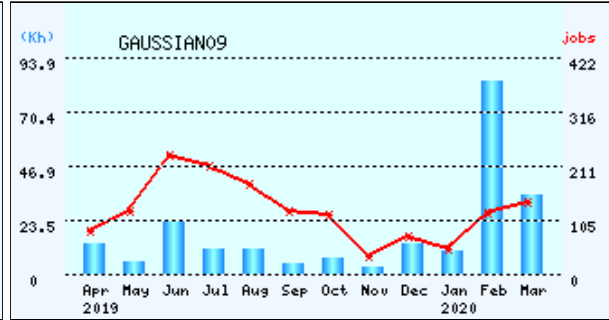
日本ヒューレット・パッカード株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 応用ソフトウェア利用時間 (ジョブ件数とCPU時間)

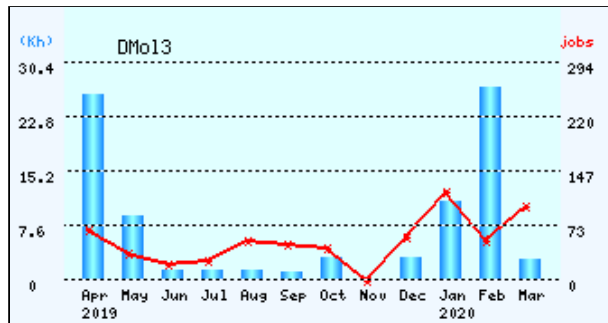
ジョブ件数とCPU時間



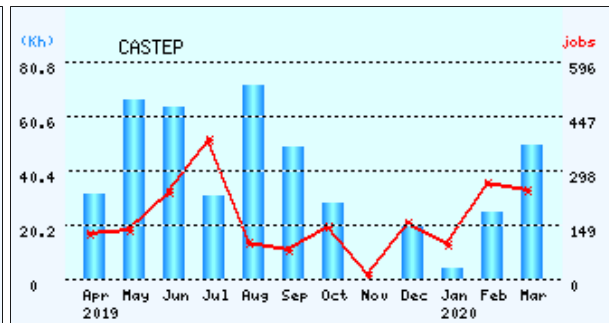
ジョブ件数とCPU時間



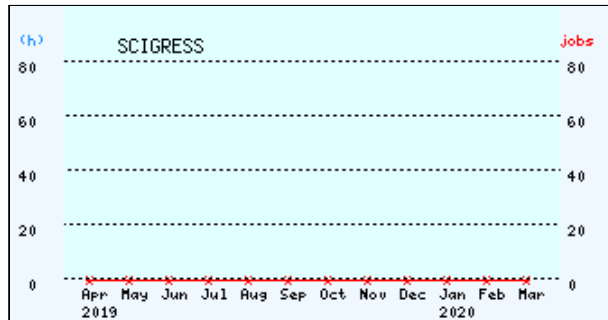
ジョブ件数とCPU時間



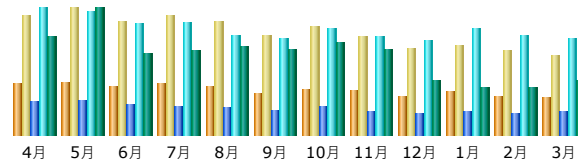
ジョブ件数とCPU時間



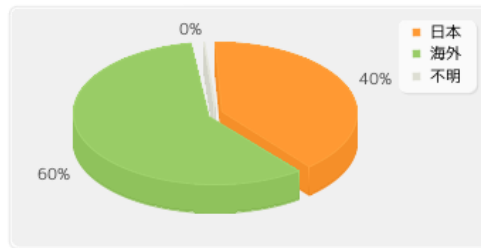
ジョブ件数とCPU時間



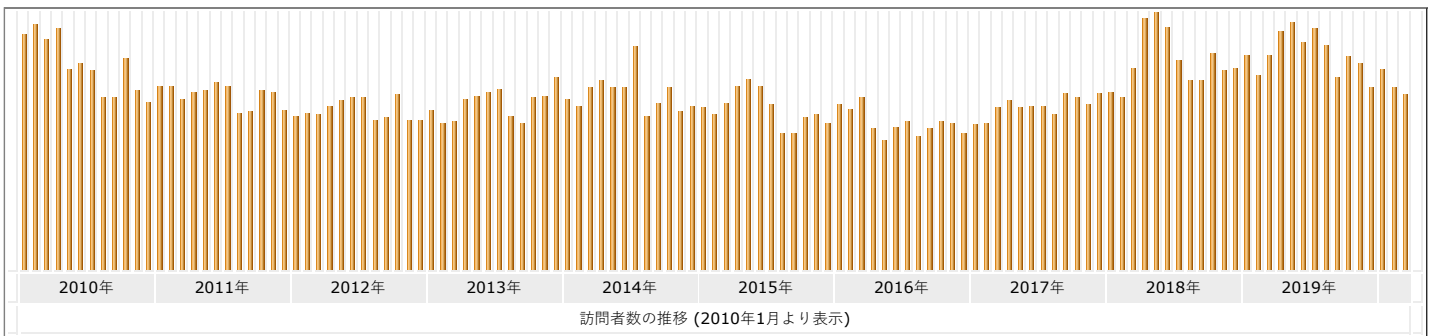
更新日時：2020年4月1日 00時30分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	9,001	20,876	147,829	573,932	80.26 GB
5月	9,322	22,122	156,947	559,524	103.86 GB
6月	8,523	19,893	138,182	500,372	66.64 GB
7月	9,060	20,694	128,275	504,014	68.20 GB
8月	8,467	19,827	123,740	446,706	72.06 GB
9月	7,197	17,293	110,828	434,998	70.04 GB
10月	8,004	18,857	131,630	480,245	75.09 GB
11月	7,743	17,186	107,112	444,807	69.76 GB
12月	6,833	15,163	101,484	426,575	44.15 GB
1月	7,539	15,617	107,911	480,652	38.76 GB
2月	6,818	14,719	100,704	449,393	38.87 GB
3月	6,584	13,794	108,390	436,606	44.52 GB
合計	95,091	216,041	1,463,032	5,737,824	772.22 GB



国内外の利用比率 (2019年度)



訪問者数の推移 (2010年1月より表示)



2019年度 ゲノムネットサービス利用統計

西川 和嗣(日本ヒューレット・パッカード株式会社)

KEGG 生命システム情報統合データベース

KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) はゲノムや分子レベルの情報から細胞、個体、エコシステムといった生命システムの機能や有用性を理解するためのリソースです。生命システムのコンピュータ表現として、遺伝子やタンパク質(ゲノム情報)と化合物など(ケミカル情報)の分子部品の情報を、分子間の相互作用・反応・関係ネットワーク(システム情報)の知識で統合した生命システム情報統合データベースです。さらに生体システムのゆらぎとして疾患・医薬品情報(ヘルス情報)も統合されています。

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・テーブル
	KEGG MODULE	KEGG モジュール
ゲノム情報	KEGG ORTHOLOGY	機能オーソログ
	KEGG GENOME	全ゲノム配列既知の KEGG 生物種
	KEGG GENES	遺伝子・タンパク質
	KEGG SSDB	GENES の配列類情報
ケミカル情報	KEGG COMPOUND	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
ヘルス情報	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

ゲノムネットデータベースリソース

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

ゲノムネットの計算ツール

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

配列解析

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

ゲノム情報解析

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

KAAS	ゲノムまたはESTコンティグの自動アノテーションとパスウェイマッピング
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
KofamKOALA	遺伝子機能予測とKEGGマッピング

ケミカル情報解析

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

DBGET/LinkDB: ゲノムネット統合データベース検索システム

DBGET は世界中に存在する分子生物学データベースを対象とした統合データベースシステムです。ゲノムネットや KEGG のバックボーンシステムとして利用されています。DBGET でサポートする分子生物学データは、各データベースのエントリー(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	核酸塩基配列	NCBI
	refpep	タンパク質アミノ酸配列	
uniprot	swissprot	タンパク質アミノ酸配列	ExPASy / EBI
	trembl		
refgene	rg001	海洋微生物メタゲノムのリファレンス遺伝子セット(OM-RGC)	EMBL
	rg002	ヒト腸内細菌メタゲノムのリファレンス遺伝子セット(IGC)	BGI/EMBL
	rg003	海洋微生物メタゲノムのリファレンス遺伝子セット(MATOU)	Tara Oceans
egenes		ESTコンティグとしての遺伝子カタログ	京都大学
egenome		ESTコンティグのデータセット	京都大学
pdb		タンパク質立体構造	RCSB
pdbstr		PDBアミノ酸配列	京都大学
epd		真核生物プロモーター	ISREC
motifdic	prosite	タンパク質配列モチーフ	ExPASy
	pfam		Sanger
	ncbi-cdd		NCBI
pmd		変異タンパク質	国立遺伝学研究所
aaindex		アミノ酸指標	京都大学
carbbank		糖鎖構造 (更新なし)	帝京大学/ジョージア大学
prosdoc		PROSITE文献	ExPASy

Web上の検索可能データベース (カテゴリー3)

ゲノムネットでキーワード検索のみできるデータベースは以下の通りです。

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

3dmet	天然化合物の立体構造	3DMET
drugbank	医薬品とターゲット	DrugBank
ligandbox	医薬品の立体構造	LigandBox
sider	医薬品の副作用	SIDER

LinkDB検索のみ可能なデータベース (カテゴリ-4)

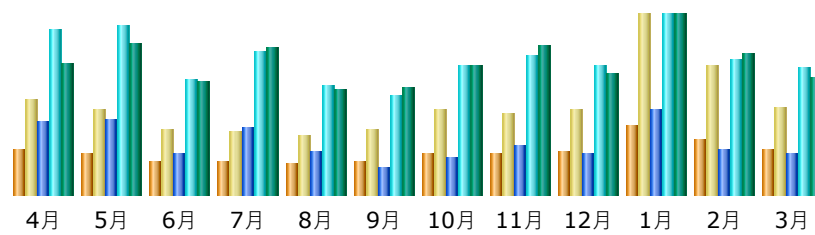
LinkDBで検索可能なデータベースは以下のとおりです。
https://www.genome.jp/linkdb/link_only.html

PubMedデータベース (カテゴリ-5)

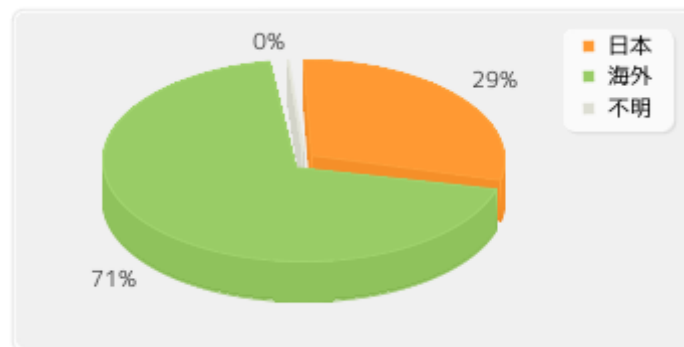
データベース	内容	元サイト
pubmed	医学・生化学文献データベース	NCBI

月別のWWWサービス利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 23時14分



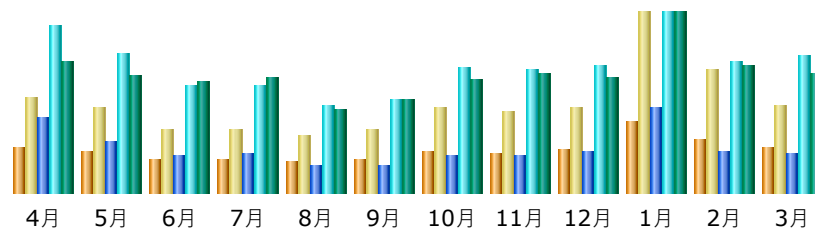
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,209,483	6,685,675	38,726,659	88,766,902	2104.73 GB
5月	2,979,313	6,040,170	40,073,608	90,749,112	2419.44 GB
6月	2,338,265	4,579,563	22,181,021	61,721,954	1807.16 GB
7月	2,290,268	4,524,652	36,373,088	76,364,563	2360.04 GB
8月	2,182,091	4,177,686	23,097,632	58,039,600	1687.65 GB
9月	2,309,114	4,619,498	14,769,189	52,893,969	1718.24 GB
10月	2,897,094	6,029,239	19,728,121	69,077,158	2072.97 GB
11月	2,849,100	5,769,476	26,592,478	74,953,813	2375.18 GB
12月	3,112,483	6,106,716	22,190,898	69,363,816	1939.30 GB
1月	4,930,950	12,793,332	45,510,020	96,378,907	2873.29 GB
2月	3,867,479	9,125,911	23,961,005	72,819,343	2235.95 GB
3月	3,207,845	6,245,661	21,540,888	67,848,600	1852.38 GB
合計	36,173,485	76,697,579	334,744,607	878,977,737	25446.31 GB



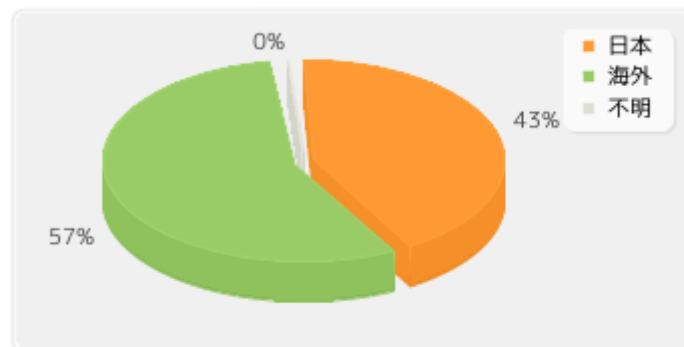
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のKEGG利用状況（2019年度）

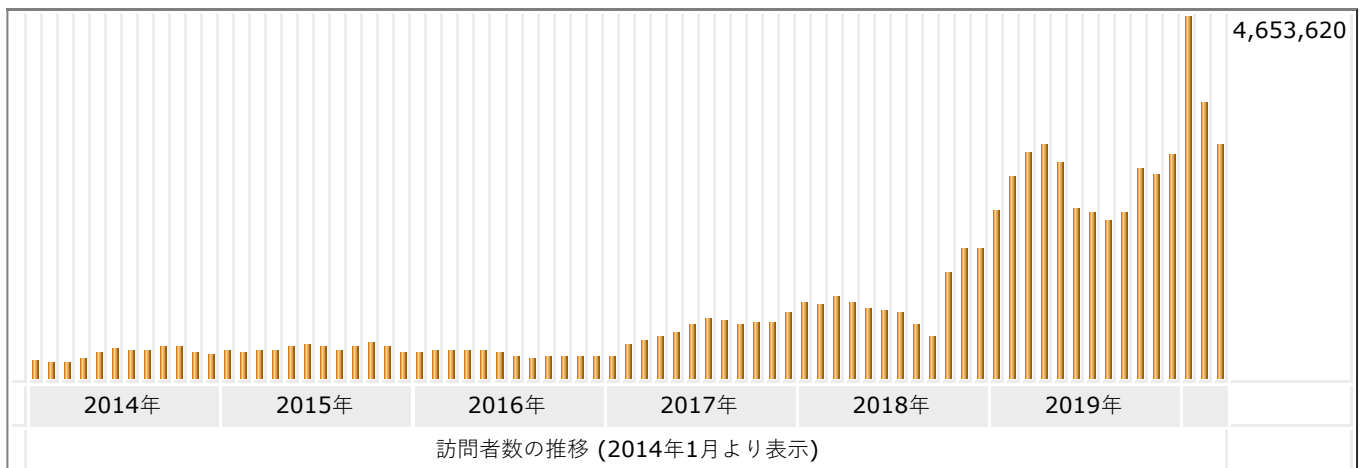
更新日時：2020年4月1日 16時28分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,005,631	6,245,848	29,571,833	66,043,610	1175.05 GB
5月	2,779,747	5,596,714	20,147,535	55,201,767	1045.73 GB
6月	2,176,696	4,220,804	14,474,365	42,044,069	992.27 GB
7月	2,128,239	4,156,805	15,132,813	42,357,206	1031.68 GB
8月	2,020,269	3,797,675	10,317,843	34,346,396	736.17 GB
9月	2,145,373	4,139,872	10,548,004	36,864,695	825.82 GB
10月	2,706,022	5,616,221	14,671,228	49,355,419	1014.80 GB
11月	2,636,161	5,318,607	14,555,352	48,289,289	1062.63 GB
12月	2,888,373	5,625,695	15,838,805	50,594,355	1018.14 GB
1月	4,653,620	11,949,019	33,902,896	71,179,968	1602.42 GB
2月	3,557,877	8,124,907	16,485,221	52,181,758	1135.23 GB
3月	3,003,895	5,819,017	15,794,342	54,036,135	1050.78 GB
合計	33,701,903	70,611,184	211,440,237	602,494,667	12690.72 GB



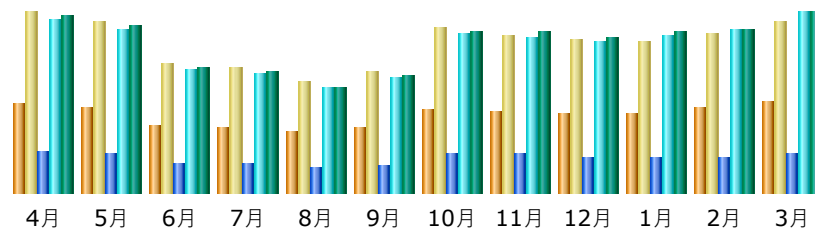
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



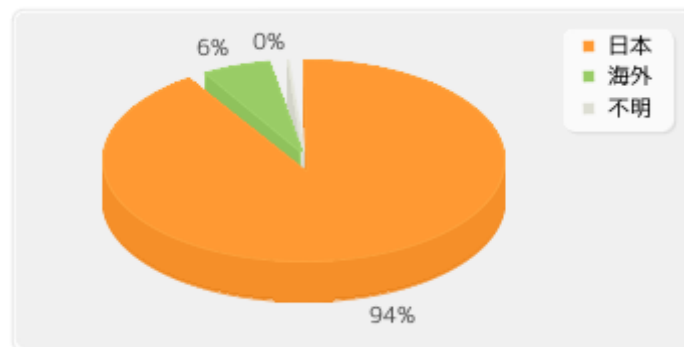
訪問者数の推移（2014年1月より表示）

月別のMEDICUS利用状況（2019年度）

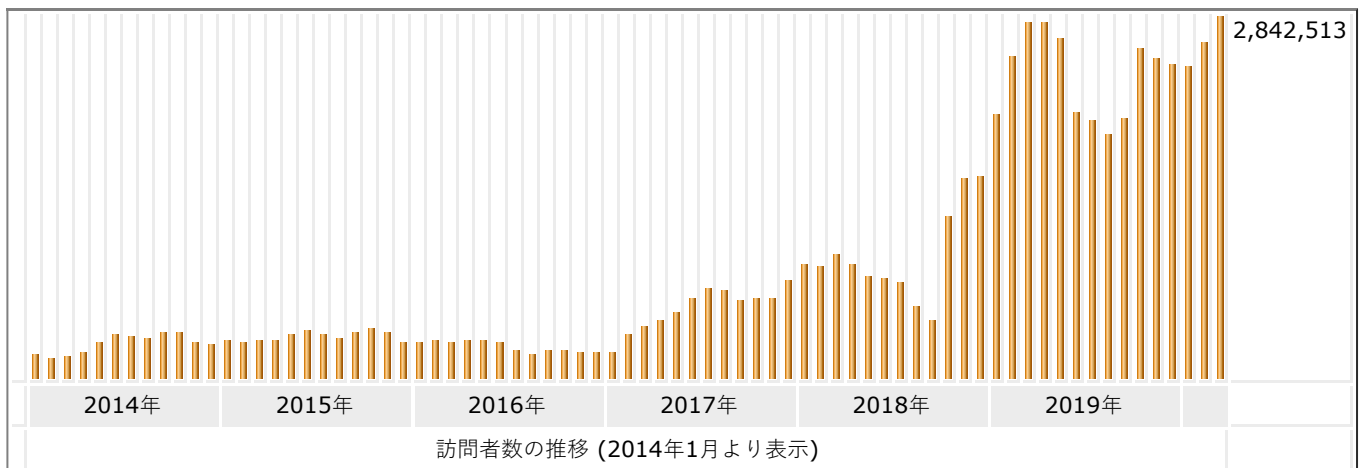
更新日時：2020年4月1日 18時56分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	2,795,328	5,650,251	9,306,076	38,548,005	457.52 GB
5月	2,671,089	5,340,873	8,624,070	36,343,324	431.83 GB
6月	2,088,766	4,027,767	6,627,807	27,310,223	324.86 GB
7月	2,033,858	3,936,848	6,437,789	26,698,063	315.58 GB
8月	1,917,857	3,514,259	5,730,962	23,631,444	273.87 GB
9月	2,046,001	3,792,448	6,213,180	25,726,036	301.18 GB
10月	2,597,560	5,160,300	8,480,449	35,530,755	419.85 GB
11月	2,526,561	4,942,860	8,621,941	34,671,212	415.29 GB
12月	2,478,820	4,772,970	7,656,415	33,851,384	400.79 GB
1月	2,463,222	4,764,327	7,657,209	35,239,808	417.44 GB
2月	2,644,638	5,004,927	7,883,685	36,519,327	424.96 GB
3月	2,842,513	5,388,719	8,654,018	40,153,068	466.78 GB
合計	29,106,213	56,296,549	91,893,601	394,222,649	4649.96 GB



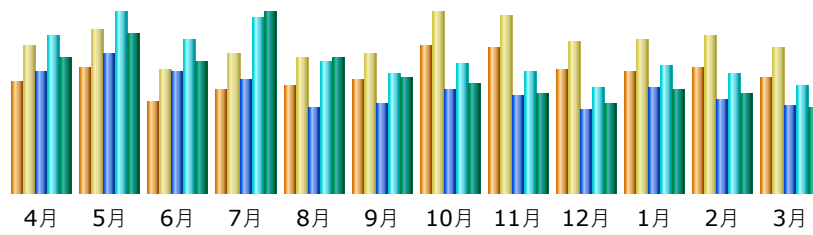
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



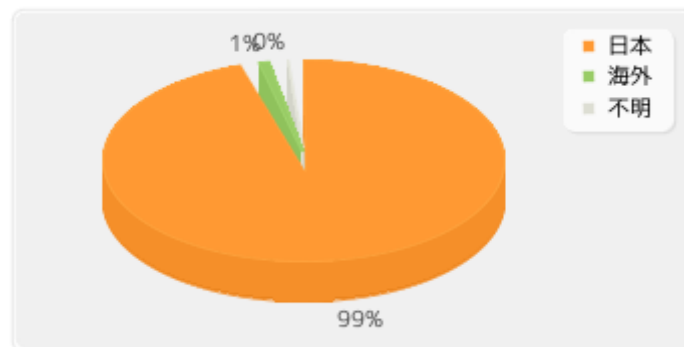
訪問者数の推移（2014年1月より表示）

月別のお薬手帳利用状況（2019年度）

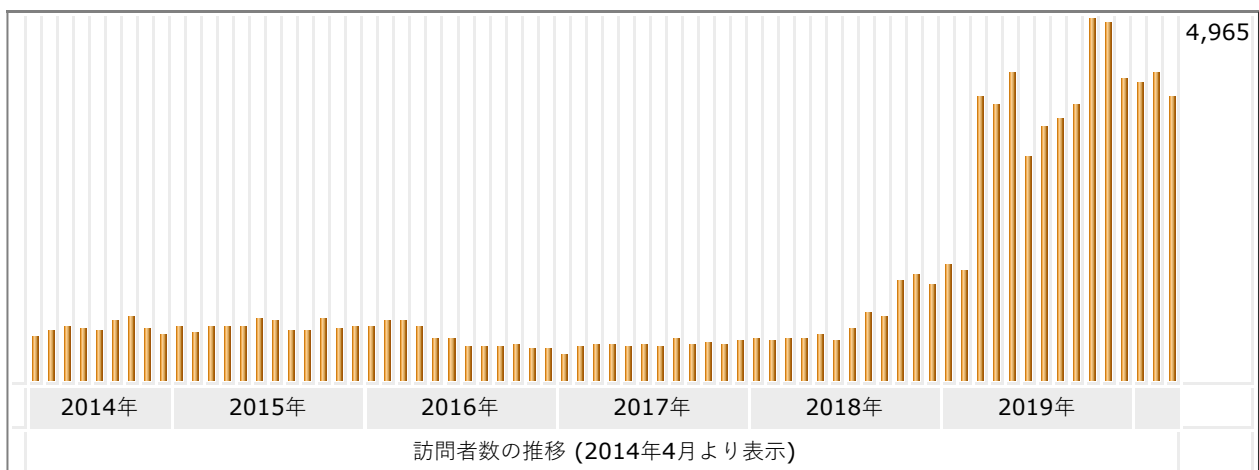
更新日時：2020年4月1日 19時13分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,782	4,973	52,989	69,204	348.91 MB
5月	4,226	5,543	61,150	79,287	411.86 MB
6月	3,068	4,169	53,680	66,959	336.81 MB
7月	3,485	4,717	49,767	77,234	466.32 MB
8月	3,598	4,584	37,442	57,827	351.98 MB
9月	3,795	4,727	39,077	52,211	295.42 MB
10月	4,965	6,096	44,946	57,137	282.43 MB
11月	4,917	6,002	43,023	53,082	257.39 MB
12月	4,150	5,104	36,506	46,238	231.39 MB
1月	4,091	5,173	46,383	55,900	265.38 MB
2月	4,242	5,290	41,392	52,069	256.65 MB
3月	3,899	4,940	38,037	47,027	222.72 MB
合計	48,218	61,318	544,392	714,175	3.64 GB



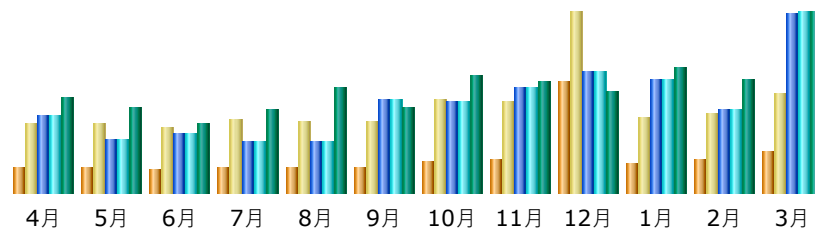
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



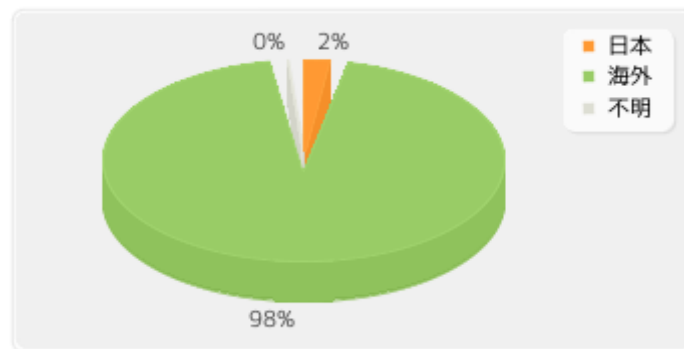
訪問者数の推移（2014年4月より表示）

月別のKEGG API利用状況（2019年度）

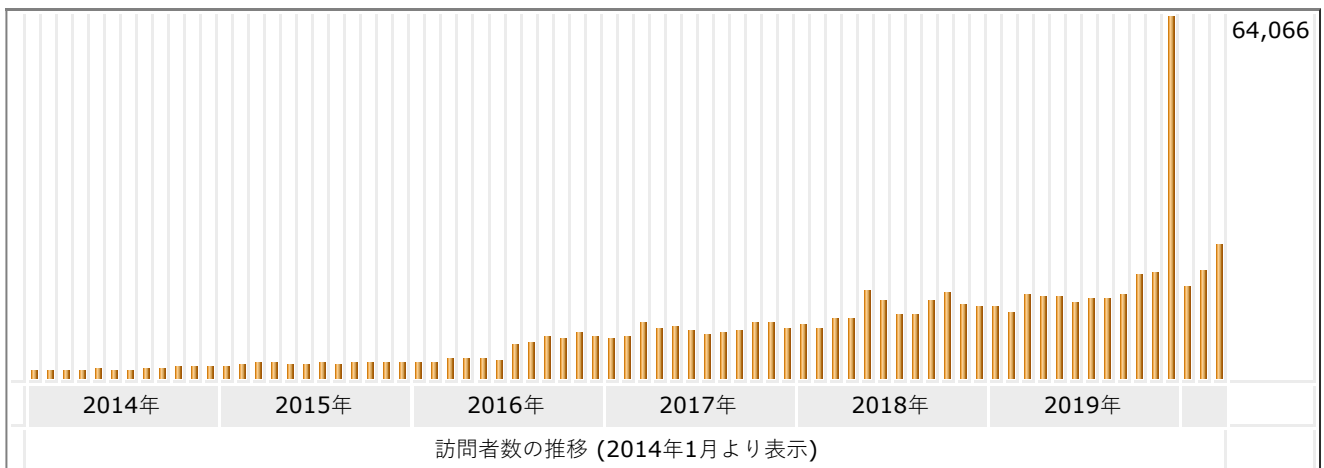
更新日時：2020年4月24日 04時23分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	14,569	40,089	42,493,452	42,494,204	447.89 GB
5月	14,456	39,985	29,366,408	29,367,089	399.31 GB
6月	13,283	37,131	31,913,310	31,914,038	326.03 GB
7月	14,155	41,702	28,125,904	28,126,727	388.45 GB
8月	14,213	40,273	27,422,218	27,423,034	493.30 GB
9月	14,643	40,864	50,285,567	50,286,328	406.83 GB
10月	18,328	53,112	49,150,156	49,150,786	558.21 GB
11月	18,625	51,806	57,104,657	57,105,361	530.18 GB
12月	64,066	103,355	66,232,042	66,232,661	474.61 GB
1月	16,356	42,972	61,747,594	61,748,336	591.77 GB
2月	19,001	45,303	45,844,919	45,845,288	534.62 GB
3月	23,585	56,655	98,260,358	98,261,080	852.67 GB
合計	245,280	593,247	587,946,585	587,954,932	6003.86 GB



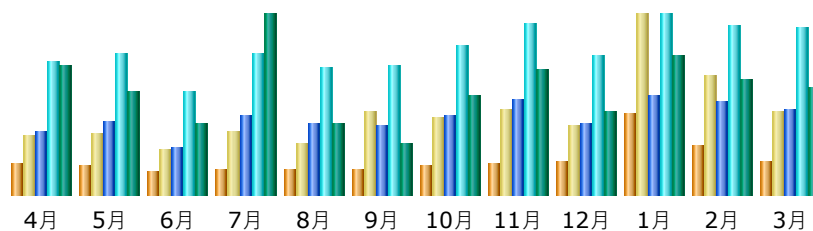
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



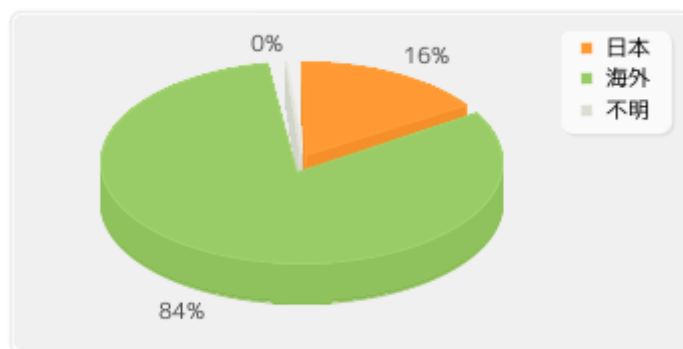
訪問者数の推移（2014年1月より表示）

月別のKEGGを除くサービス利用状況（2019年度）

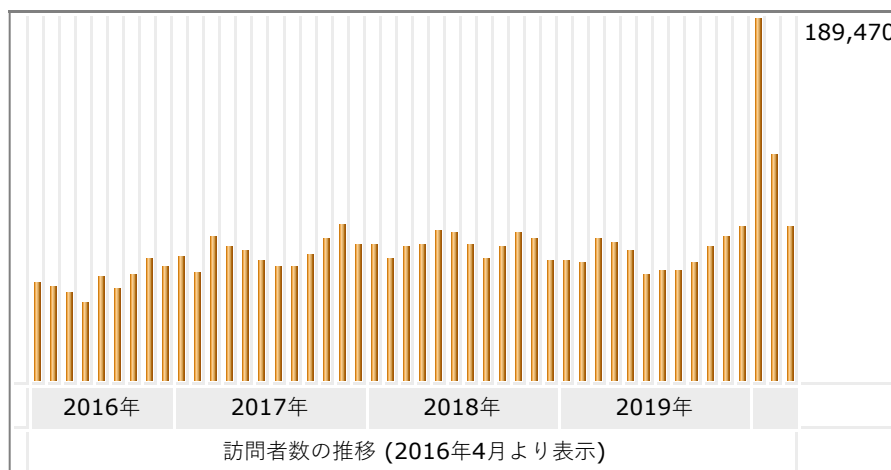
更新日時：2020年4月1日 13時45分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	72,090	138,506	1,055,578	2,212,368	107.54 GB
5月	68,391	144,949	1,208,545	2,340,826	85.37 GB
6月	55,690	106,389	789,144	1,708,367	59.76 GB
7月	57,146	149,399	1,301,647	2,320,580	149.98 GB
8月	57,159	122,389	1,161,056	2,089,824	59.70 GB
9月	61,398	197,012	1,134,731	2,131,715	42.97 GB
10月	70,343	179,819	1,300,161	2,465,976	82.09 GB
11月	75,019	199,383	1,566,624	2,835,008	104.16 GB
12月	80,031	163,482	1,188,946	2,303,252	68.97 GB
1月	189,470	425,481	1,638,156	2,980,830	114.99 GB
2月	118,061	283,550	1,546,270	2,796,473	95.04 GB
3月	80,259	196,364	1,406,677	2,765,330	89.46 GB
合計	985,057	2,306,723	15,297,535	28,950,549	1060.01 GB



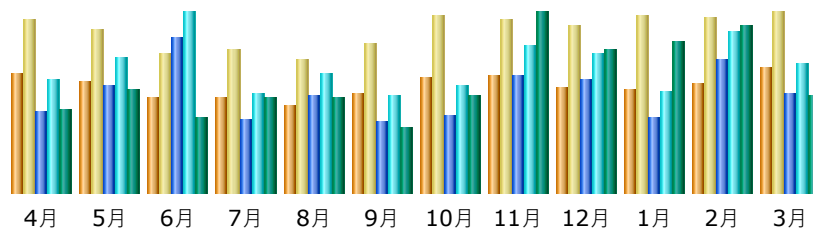
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



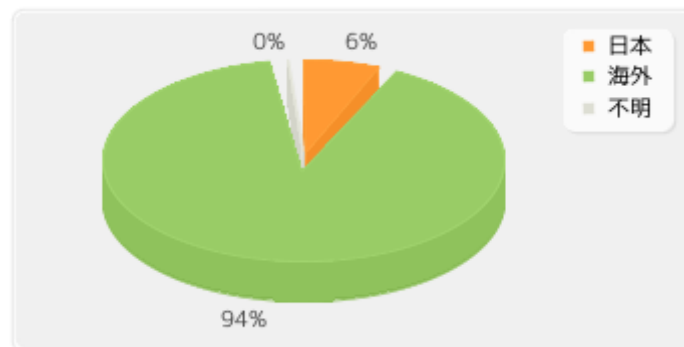
訪問者数の推移（2016年4月より表示）

月別のLinkDB利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 16時59分



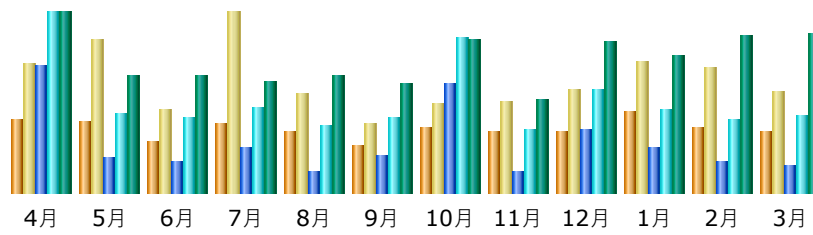
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	15,270	22,236	89,374	122,935	33.51 GB
5月	14,285	20,948	116,195	147,336	41.23 GB
6月	12,274	17,926	169,959	196,932	30.06 GB
7月	12,240	18,402	80,229	108,244	38.60 GB
8月	11,265	16,970	105,466	130,361	38.54 GB
9月	12,755	19,051	77,955	105,752	26.14 GB
10月	14,742	22,666	83,900	116,648	39.16 GB
11月	14,889	22,174	128,472	161,018	72.53 GB
12月	13,470	21,270	123,802	152,349	57.93 GB
1月	13,111	22,685	83,097	111,315	60.80 GB
2月	13,939	22,353	145,105	175,079	67.55 GB
3月	15,912	23,048	108,864	141,515	39.08 GB
合計	164,152	249,729	1,312,418	1,669,484	545.12 GB



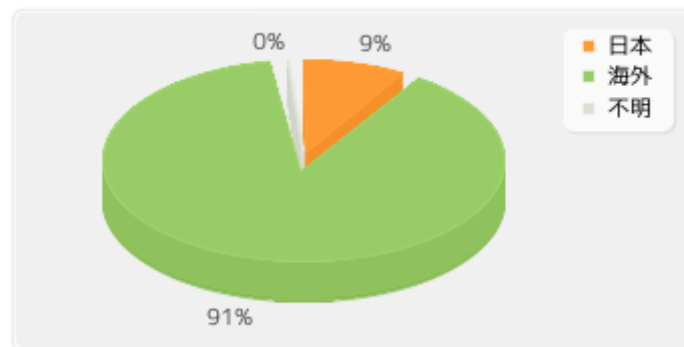
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のMGENES利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時05分



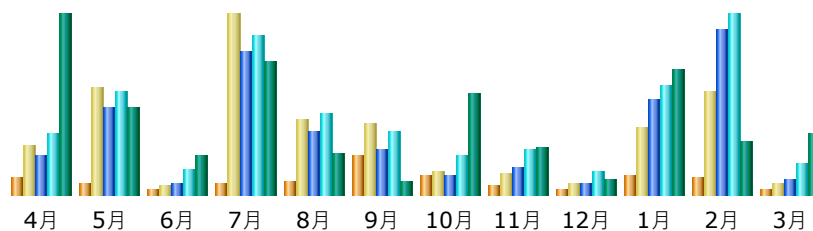
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,650	2,895	23,174	32,660	898.26 MB
5月	1,597	3,449	6,259	14,226	581.95 MB
6月	1,167	1,855	5,803	13,732	587.24 MB
7月	1,578	4,067	8,217	15,338	549.85 MB
8月	1,365	2,218	3,907	12,198	588.49 MB
9月	1,079	1,547	6,596	13,512	541.20 MB
10月	1,451	2,010	19,714	28,055	762.55 MB
11月	1,374	2,038	3,746	11,370	467.34 MB
12月	1,388	2,340	11,482	18,793	755.85 MB
1月	1,836	2,968	8,091	15,185	684.73 MB
2月	1,489	2,811	5,453	13,272	779.11 MB
3月	1,376	2,283	4,718	13,940	795.02 MB
合計	17,350	30,481	107,160	202,281	7.80 GB



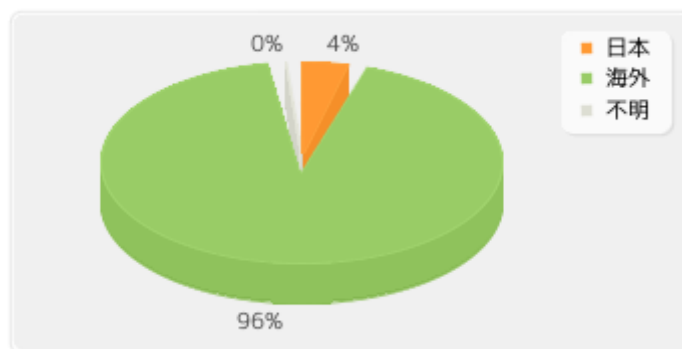
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のOC利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時09分



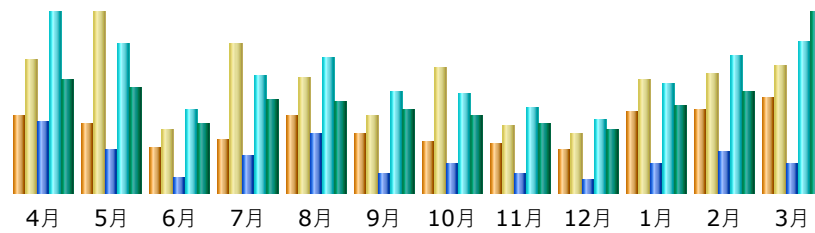
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,015	3,170	4,658	7,135	60.64 GB
5月	739	6,728	10,417	12,150	29.10 GB
6月	331	524	1,208	2,868	13.32 GB
7月	741	11,414	16,902	18,908	44.53 GB
8月	850	4,703	7,403	9,699	13.78 GB
9月	2,436	4,530	5,385	7,525	4.46 GB
10月	1,142	1,452	2,357	4,638	34.11 GB
11月	570	1,298	3,247	5,273	15.70 GB
12月	374	685	1,242	2,754	5.21 GB
1月	1,178	4,217	11,248	12,984	42.37 GB
2月	1,094	6,513	19,599	21,332	18.13 GB
3月	355	734	1,832	3,726	20.60 GB
合計	10,825	45,968	85,498	108,992	301.94 GB



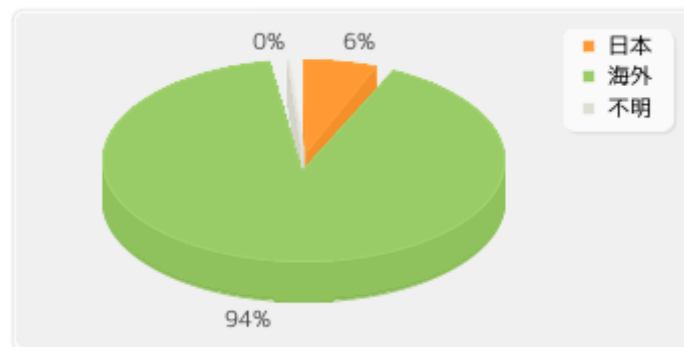
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のVirus-Host DB利用状況（2019年度）

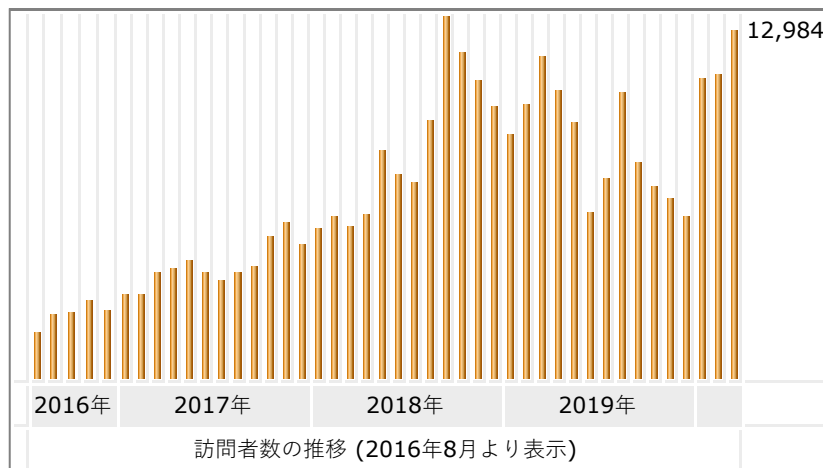
更新日時：2020年4月1日 19時22分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	10,333	17,700	78,306	200,365	3.74 GB
5月	9,227	23,891	46,996	165,429	3.48 GB
6月	5,962	8,249	16,513	91,946	2.30 GB
7月	7,163	19,902	40,289	130,071	3.08 GB
8月	10,311	15,308	66,103	150,160	3.01 GB
9月	7,748	10,289	21,404	111,901	2.79 GB
10月	6,898	16,633	31,179	110,706	2.59 GB
11月	6,440	8,912	22,048	94,768	2.29 GB
12月	5,811	7,942	15,401	80,347	2.07 GB
1月	10,754	14,900	31,916	120,906	2.88 GB
2月	10,902	15,764	44,540	152,227	3.40 GB
3月	12,534	16,796	33,356	168,192	6.00 GB
合計	104,083	176,286	448,051	1,577,018	37.64 GB



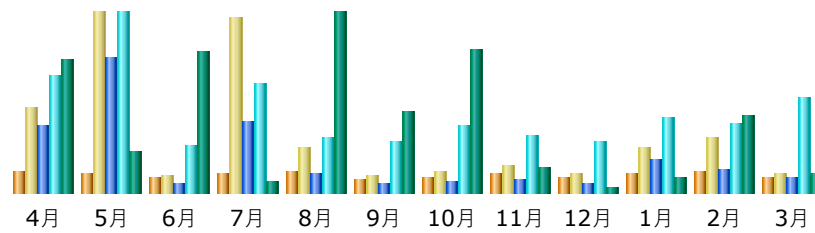
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



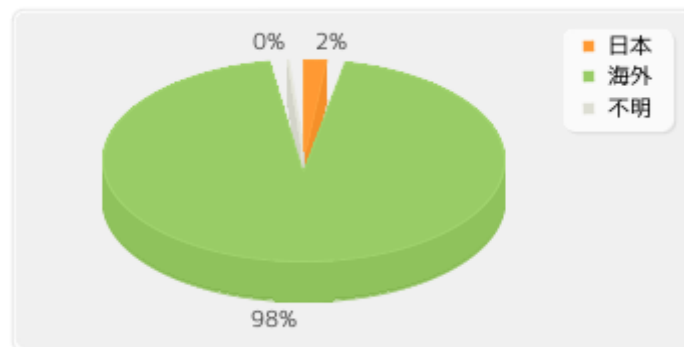
訪問者数の推移（2016年8月より表示）

月別のTaxonomy利用状況（2019年度）

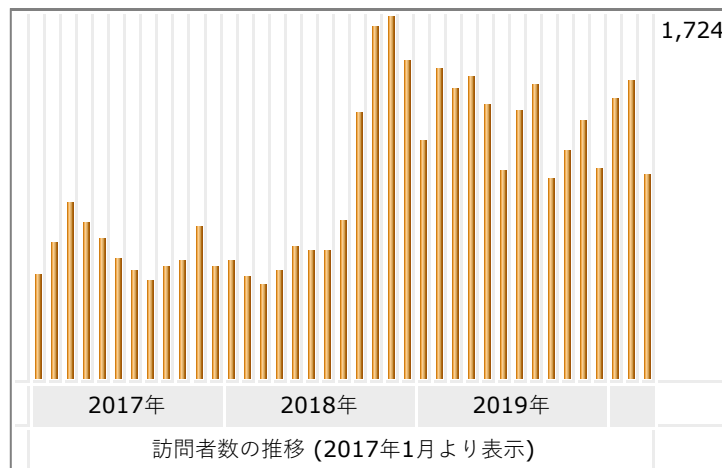
更新日時：2020年4月1日 19時20分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,440	5,830	14,460	25,190	3.74 GB
5月	1,303	12,312	28,819	38,659	1.15 GB
6月	993	1,204	1,829	10,064	3.96 GB
7月	1,279	11,984	15,298	23,477	322.38 MB
8月	1,403	3,135	3,938	11,760	5.09 GB
9月	952	1,184	1,818	11,126	2.28 GB
10月	1,089	1,376	2,307	14,197	4.02 GB
11月	1,234	1,832	2,733	12,217	714.79 MB
12月	999	1,248	1,910	11,159	153.93 MB
1月	1,340	3,078	7,154	16,147	412.11 MB
2月	1,427	3,725	5,040	14,760	2.16 GB
3月	969	1,256	3,342	20,499	540.95 MB
合計	14,428	48,164	88,648	209,255	24.50 GB



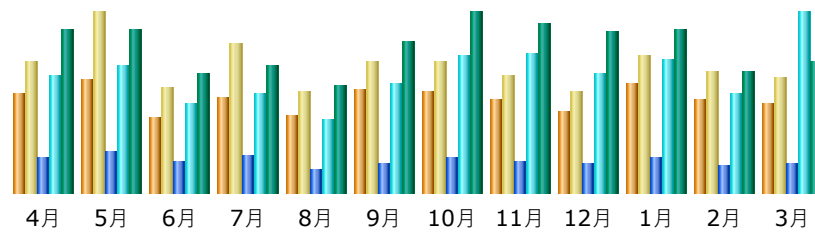
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）



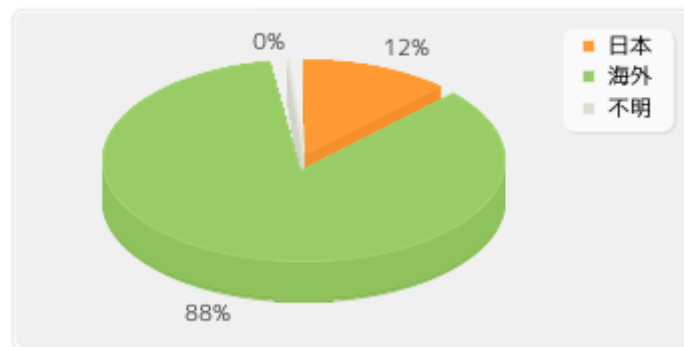
訪問者数の推移（2017年1月より表示）

月別のReaction Ontology利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時15分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,630	2,157	6,943	23,185	335.54 MB
5月	1,858	2,951	8,188	24,890	333.48 MB
6月	1,238	1,708	6,049	17,569	244.35 MB
7月	1,561	2,430	7,327	19,640	262.16 MB
8月	1,273	1,671	4,706	14,495	219.16 MB
9月	1,686	2,149	5,758	21,267	312.29 MB
10月	1,646	2,137	7,003	26,833	370.25 MB
11月	1,514	1,929	5,925	27,408	345.90 MB
12月	1,333	1,647	5,672	23,493	332.98 MB
1月	1,779	2,233	6,850	25,985	334.65 MB
2月	1,514	1,988	5,341	19,416	250.16 MB
3月	1,470	1,881	5,531	35,420	268.71 MB
合計	18,502	24,881	75,293	279,601	3.53 GB

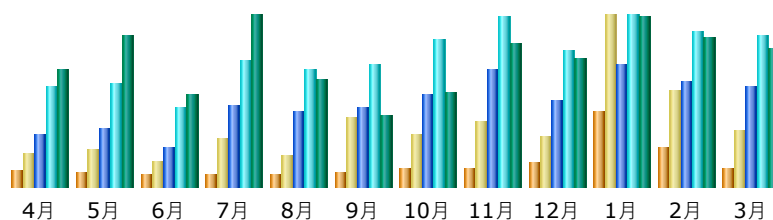


国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

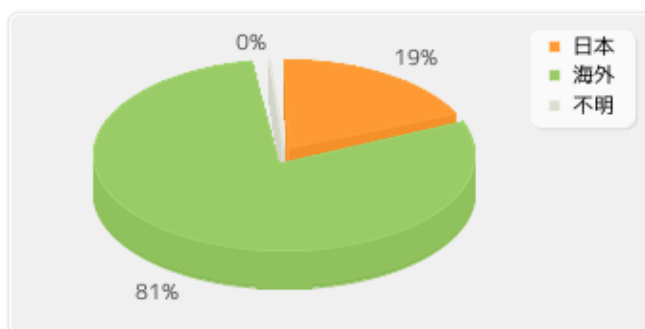
月別のSequence Analysis利用状況（2019年度）

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

更新日時：2020年4月1日 19時19分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	31,921	65,360	510,098	990,217	31.78 GB
5月	29,227	71,377	573,798	1,025,663	41.15 GB
6月	24,290	48,903	384,858	778,131	24.90 GB
7月	25,182	92,638	808,540	1,251,553	46.29 GB
8月	23,905	59,940	752,941	1,158,317	29.23 GB
9月	27,855	133,566	790,228	1,226,799	19.27 GB
10月	33,751	102,071	915,239	1,464,856	25.49 GB
11月	33,543	126,700	1,160,289	1,690,371	38.72 GB
12月	44,572	97,276	853,292	1,346,474	34.75 GB
1月	146,131	332,568	1,221,616	1,699,199	46.24 GB
2月	75,175	186,089	1,049,078	1,544,688	40.27 GB
3月	34,028	107,874	998,022	1,499,450	37.30 GB
合計	529,580	1,424,362	10,017,999	15,675,718	415.38 GB



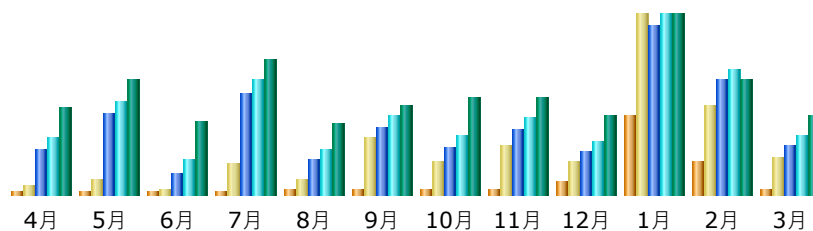
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のサービス訪問者数比較（2019年度）

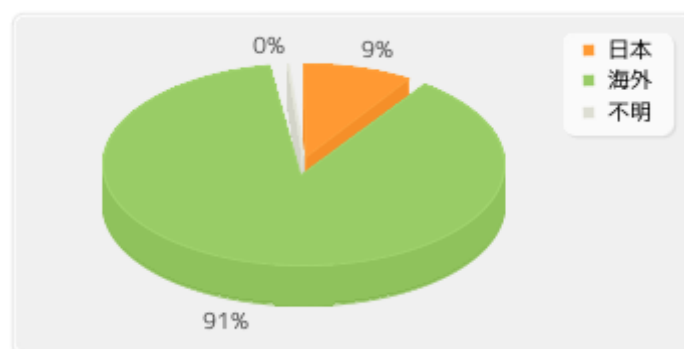
月	BLAST	FASTA	MOTIF	MAFFT	CLUSTALW	PRRN	TREE
4月	5,525	1,162	3,603	851	23,453	516	737
5月	5,133	1,113	3,817	706	21,492	396	594
6月	4,724	972	2,921	695	17,697	357	718
7月	5,698	1,040	3,228	662	17,578	361	2,486
8月	6,440	836	2,849	567	15,592	323	2,531
9月	7,484	916	3,207	628	18,070	382	3,216
10月	8,140	1,099	3,530	944	23,028	519	4,488
11月	8,471	1,030	3,626	870	22,563	495	4,389
12月	22,370	1,073	3,207	709	19,780	405	4,045
1月	125,320	1,048	3,172	693	18,922	404	3,734
2月	52,845	1,010	3,140	666	20,062	430	3,629
3月	8,682	1,201	3,575	805	22,264	456	4,279
合計	260,832	12,500	39,875	8,796	240,501	5,044	34,846

月別のBLAST利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時19分



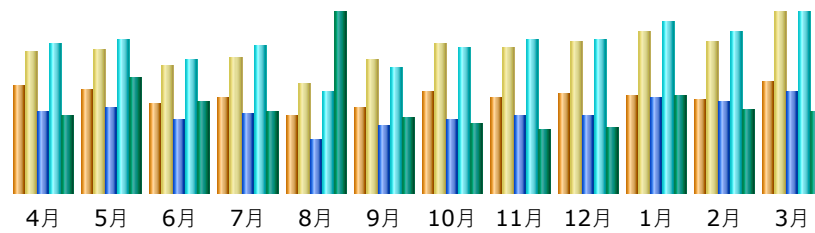
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	5,525	14,446	113,404	144,436	5.59 GB
5月	5,133	23,283	205,785	235,562	7.49 GB
6月	4,724	8,297	52,616	86,903	4.75 GB
7月	5,698	50,249	257,631	290,494	8.81 GB
8月	6,440	23,109	87,746	111,845	4.63 GB
9月	7,484	92,147	171,119	198,883	5.83 GB
10月	8,140	52,167	120,958	150,263	6.23 GB
11月	8,471	77,121	162,570	193,920	6.29 GB
12月	22,370	53,182	106,173	133,859	5.06 GB
1月	125,320	288,913	427,211	454,996	11.67 GB
2月	52,845	142,538	290,305	315,749	7.47 GB
3月	8,682	60,885	121,351	148,471	5.14 GB
合計	260,832	886,337	2,116,869	2,465,381	78.97 GB



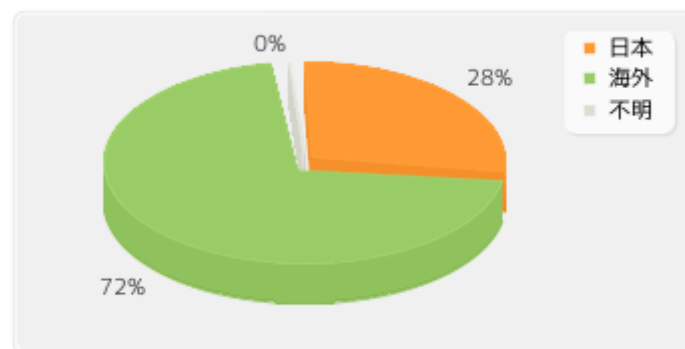
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のFASTA利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時48分



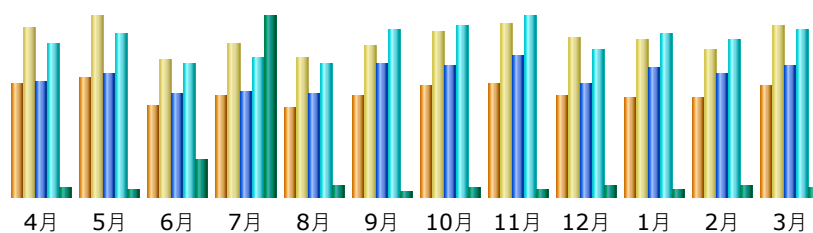
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,162	1,532	3,373	6,285	140.01 MB
5月	1,113	1,551	3,530	6,454	212.31 MB
6月	972	1,379	3,063	5,608	168.15 MB
7月	1,040	1,473	3,311	6,179	149.23 MB
8月	836	1,195	2,231	4,245	330.86 MB
9月	916	1,440	2,823	5,256	136.14 MB
10月	1,099	1,631	3,025	6,132	127.09 MB
11月	1,030	1,577	3,249	6,404	114.41 MB
12月	1,073	1,644	3,257	6,406	120.39 MB
1月	1,048	1,750	3,976	7,195	178.44 MB
2月	1,010	1,638	3,841	6,765	153.62 MB
3月	1,201	1,960	4,282	7,562	150.22 MB
合計	12,500	18,770	39,961	74,491	1.93 GB



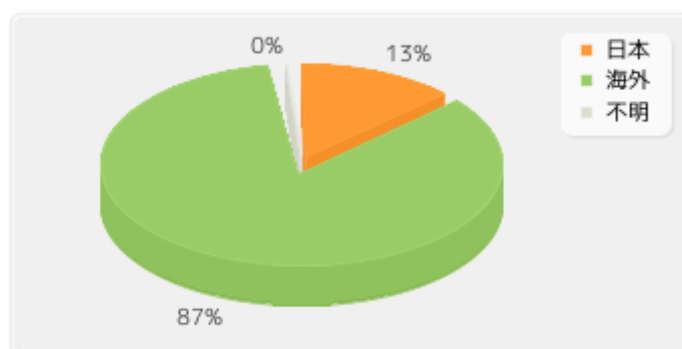
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のMOTIF利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時07分



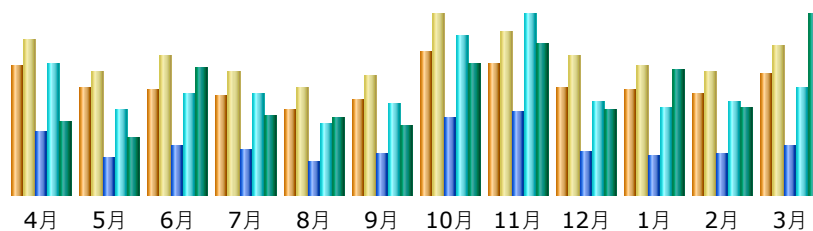
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,603	5,413	21,429	28,617	1.07 GB
5月	3,817	5,756	23,047	30,381	884.71 MB
6月	2,921	4,410	19,282	24,822	4.64 GB
7月	3,228	4,872	19,771	25,989	22.17 GB
8月	2,849	4,465	19,150	24,751	1.27 GB
9月	3,207	4,824	24,872	31,405	739.00 MB
10月	3,530	5,268	24,482	32,035	1.19 GB
11月	3,626	5,531	26,344	33,728	936.42 MB
12月	3,207	5,094	21,216	27,539	1.35 GB
1月	3,172	5,037	24,252	30,556	868.28 MB
2月	3,140	4,713	23,080	29,272	1.47 GB
3月	3,575	5,481	24,437	31,424	1.02 GB
合計	39,875	60,864	271,362	350,519	37.54 GB



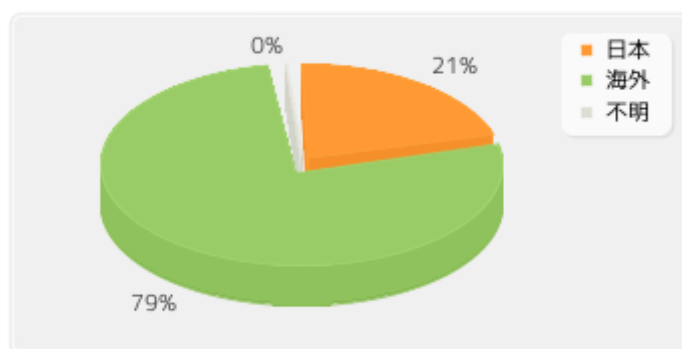
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のMAFFT利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 17時01分



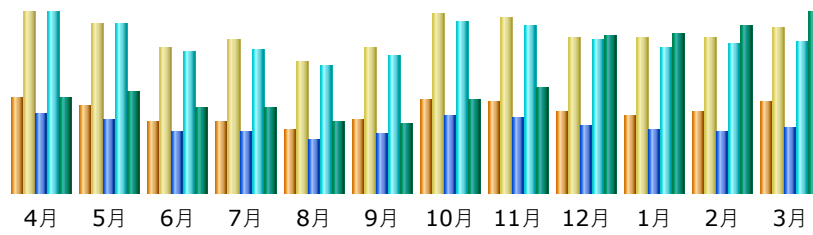
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	851	1,028	4,797	10,033	49.73 MB
5月	706	813	2,847	6,433	38.16 MB
6月	695	921	3,660	7,729	85.37 MB
7月	662	822	3,470	7,642	52.93 MB
8月	567	708	2,503	5,432	51.71 MB
9月	628	796	3,162	6,918	46.68 MB
10月	944	1,195	5,877	12,171	88.28 MB
11月	870	1,084	6,283	13,717	102.25 MB
12月	709	923	3,257	7,039	57.29 MB
1月	693	862	2,952	6,564	84.96 MB
2月	666	817	3,124	7,055	58.24 MB
3月	805	988	3,759	8,159	121.72 MB
合計	8,796	10,957	45,691	98,892	837.31 MB



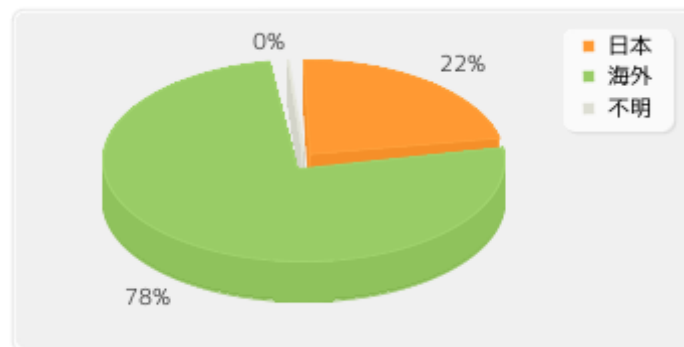
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のCLUSTALW利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時35分



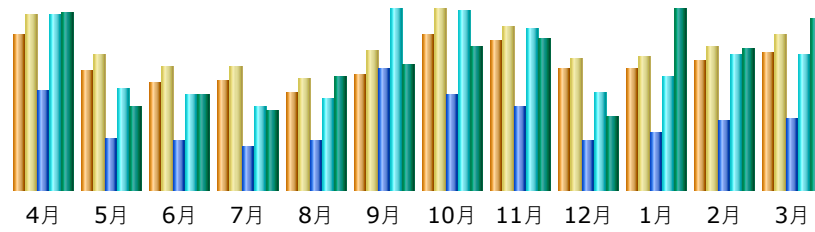
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	23,453	44,386	320,511	735,947	7.49 GB
5月	21,492	41,809	299,315	692,399	8.01 GB
6月	17,697	35,878	251,444	580,277	6.78 GB
7月	17,578	37,487	252,165	586,878	6.73 GB
8月	15,592	32,106	215,967	515,367	5.66 GB
9月	18,070	35,963	239,628	558,792	5.42 GB
10月	23,028	43,908	311,096	702,576	7.36 GB
11月	22,563	43,215	302,779	685,438	8.33 GB
12月	19,780	38,151	275,509	623,300	12.46 GB
1月	18,922	38,217	254,983	592,266	12.60 GB
2月	20,062	38,306	252,358	605,256	13.30 GB
3月	22,264	40,592	266,538	616,702	14.32 GB
合計	240,501	470,018	3,242,293	7,495,198	108.46 GB



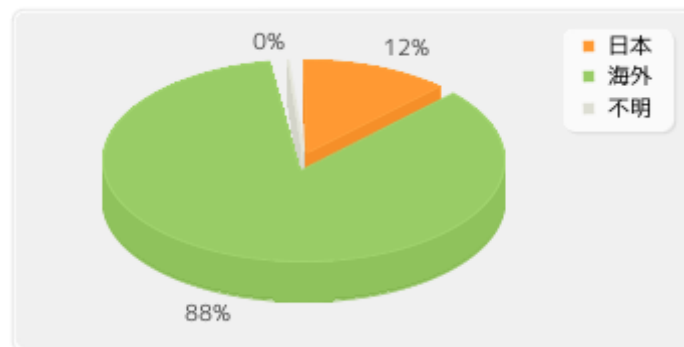
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のPRRN利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時14分



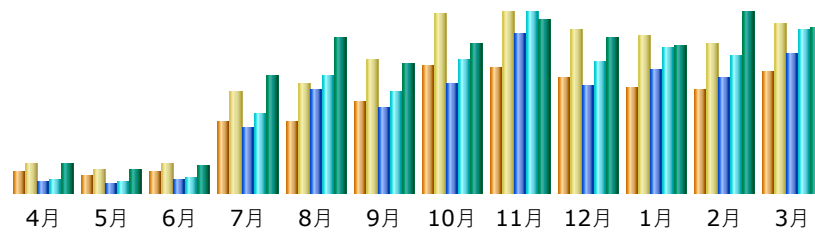
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	516	582	2,036	3,604	19.22 MB
5月	396	454	1,061	2,069	8.90 MB
6月	357	409	1,012	1,947	10.20 MB
7月	361	408	898	1,711	8.66 MB
8月	323	369	1,004	1,884	12.24 MB
9月	382	464	2,494	3,696	13.58 MB
10月	519	601	1,966	3,689	15.42 MB
11月	495	541	1,718	3,326	16.42 MB
12月	405	438	1,012	1,999	7.90 MB
1月	404	445	1,173	2,314	19.50 MB
2月	430	478	1,405	2,767	15.22 MB
3月	456	519	1,473	2,779	18.50 MB
合計	5,044	5,708	17,252	31,785	165.75 MB



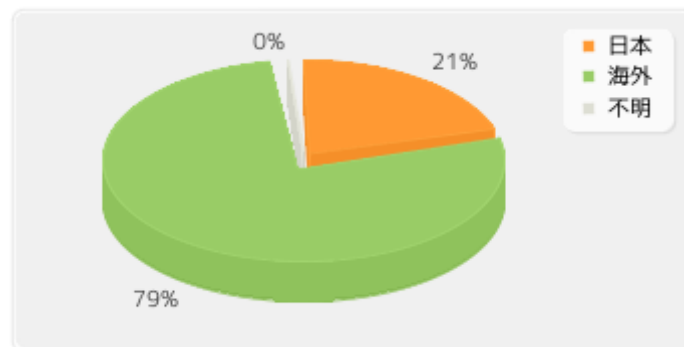
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のTREE利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時39分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	737	997	43,284	52,680	245.54 MB
5月	594	842	35,749	42,342	193.52 MB
6月	718	1,058	53,937	64,426	228.24 MB
7月	2,486	3,596	276,087	330,786	967.53 MB
8月	2,531	3,823	432,509	497,037	1.25 GB
9月	3,216	4,666	355,117	423,767	1.05 GB
10月	4,488	6,316	461,703	563,805	1.20 GB
11月	4,389	6,360	670,193	759,632	1.40 GB
12月	4,045	5,767	453,880	550,464	1.25 GB
1月	3,734	5,578	518,617	608,609	1.19 GB
2月	3,629	5,254	485,775	582,072	1.45 GB
3月	4,279	6,005	587,797	689,560	1.33 GB
合計	34,846	50,262	4,374,648	5,165,180	11.72 GB

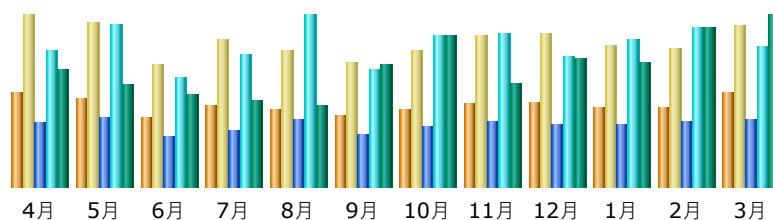


国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

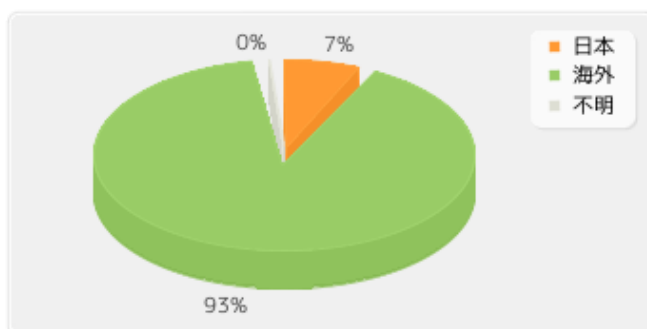
月別のGenome Analysis利用状況（2019年度）

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

更新日時：2020年4月1日 13時55分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	5,960	10,891	71,780	153,961	10.10 GB
5月	5,625	10,509	79,267	184,818	8.77 GB
6月	4,414	7,825	56,365	124,474	7.92 GB
7月	5,160	9,385	63,873	149,594	7.43 GB
8月	4,913	8,684	76,590	193,556	6.97 GB
9月	4,548	7,895	59,979	133,293	10.56 GB
10月	4,938	8,641	67,519	170,662	13.03 GB
11月	5,290	9,606	74,233	173,786	8.84 GB
12月	5,401	9,789	70,636	147,797	10.97 GB
1月	5,017	8,995	70,200	166,043	10.71 GB
2月	5,003	8,783	74,424	180,422	13.73 GB
3月	5,944	10,263	76,392	157,045	14.71 GB
合計	62,213	111,266	841,258	1,935,451	123.76 GB



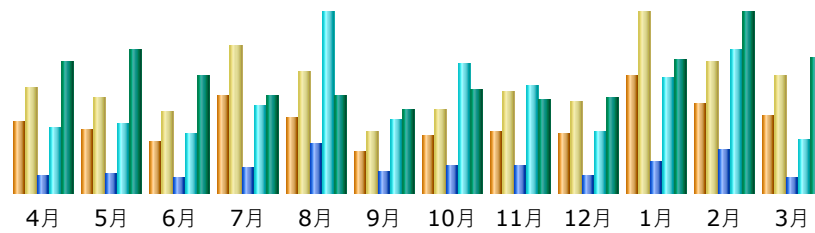
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のサービス訪問者数比較（2019年度）

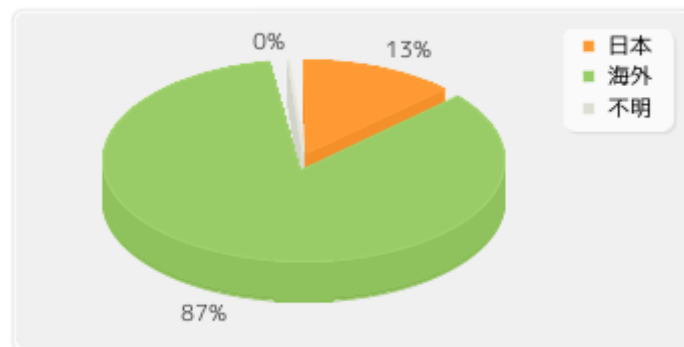
月	ViPTree	KAAS	KofamKOALA	EGassembler	GENIES	DINIES
4月	378	3,735	1,328	761	182	282
5月	331	3,916	973	628	152	334
6月	272	3,036	745	608	144	144
7月	512	3,541	781	601	153	294
8月	398	3,486	696	560	138	145
9月	213	3,212	744	588	144	143
10月	300	3,431	787	679	163	184
11月	325	3,568	926	764	167	157
12月	310	3,539	994	864	148	184
1月	618	3,041	817	819	147	194
2月	473	2,976	992	792	136	182
3月	410	3,774	1,101	943	163	216
合計	4,540	41,255	10,884	8,607	1,837	2,459

月別のVipTree利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 19時24分



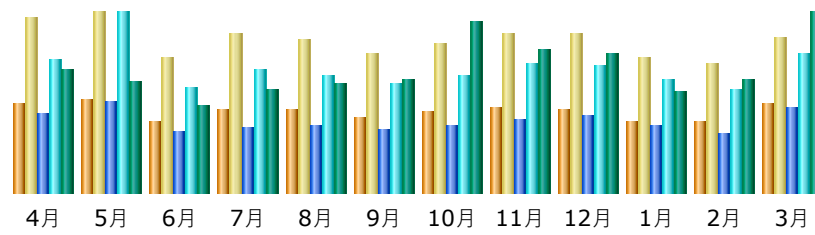
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	378	553	9,834	35,486	825.45 MB
5月	331	505	10,938	37,892	910.10 MB
6月	272	427	8,431	32,040	742.58 MB
7月	512	782	14,066	47,824	616.87 MB
8月	398	644	26,846	98,458	616.26 MB
9月	213	323	11,521	39,571	530.44 MB
10月	300	445	14,739	70,915	654.55 MB
11月	325	532	14,946	58,947	593.37 MB
12月	310	485	9,361	33,568	602.31 MB
1月	618	954	16,749	63,348	846.36 MB
2月	473	699	23,152	77,823	1.12 GB
3月	410	625	8,195	29,141	861.95 MB
合計	4,540	6,974	168,778	625,013	8.73 GB



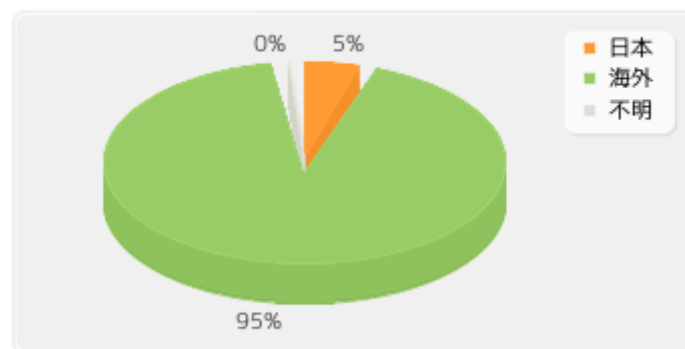
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のKAAS利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時57分



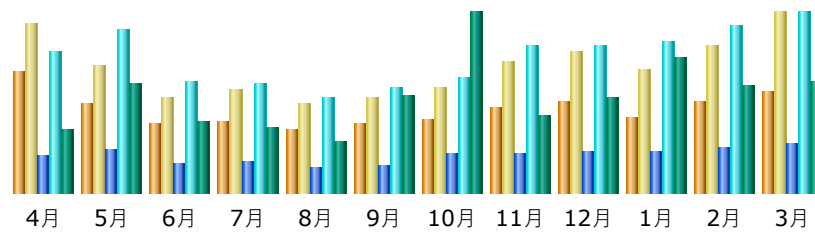
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	3,735	7,388	48,855	83,845	5.20 GB
5月	3,916	7,634	56,507	112,665	4.72 GB
6月	3,036	5,695	37,735	65,774	3.71 GB
7月	3,541	6,705	40,776	77,359	4.34 GB
8月	3,486	6,475	41,383	73,455	4.64 GB
9月	3,212	5,892	39,421	68,806	4.84 GB
10月	3,431	6,328	41,756	72,622	7.25 GB
11月	3,568	6,769	45,844	80,248	6.09 GB
12月	3,539	6,762	48,153	79,969	5.94 GB
1月	3,041	5,698	41,931	70,144	4.27 GB
2月	2,976	5,442	36,970	64,449	4.83 GB
3月	3,774	6,566	53,170	87,225	7.65 GB
合計	41,255	77,354	532,501	936,561	63.49 GB



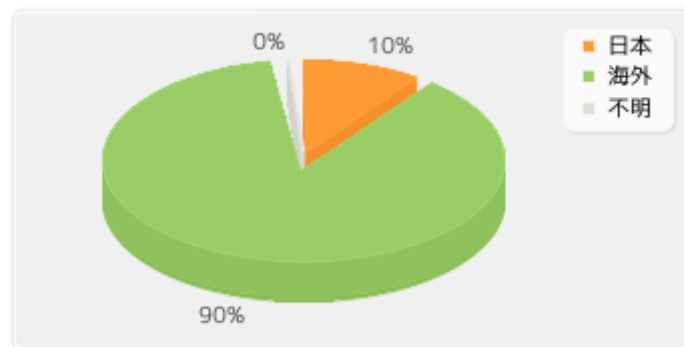
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のKofamKOALA利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 16時55分



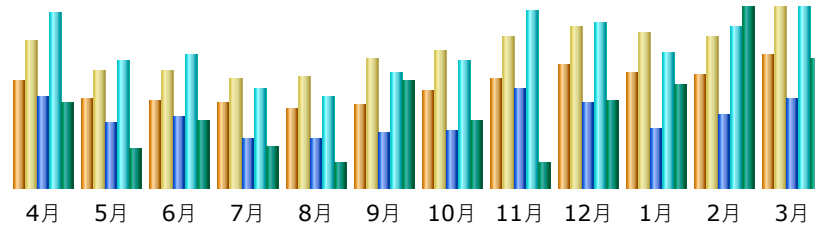
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,328	1,844	5,194	19,437	967.74 MB
5月	973	1,375	5,787	22,483	1.64 GB
6月	745	1,040	4,007	15,254	1.07 GB
7月	781	1,116	4,195	15,139	986.69 MB
8月	696	979	3,450	13,003	782.31 MB
9月	744	1,033	3,675	14,350	1.44 GB
10月	787	1,143	5,233	15,761	2.68 GB
11月	926	1,421	5,341	20,212	1.16 GB
12月	994	1,533	5,621	20,247	1.43 GB
1月	817	1,335	5,735	20,669	2.01 GB
2月	992	1,612	6,210	22,996	1.60 GB
3月	1,101	1,963	6,747	24,775	1.66 GB
合計	10,884	16,394	61,195	224,326	17.37 GB



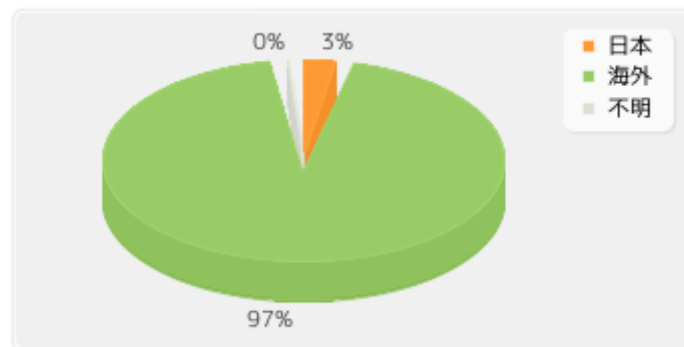
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のEGassembler利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時37分



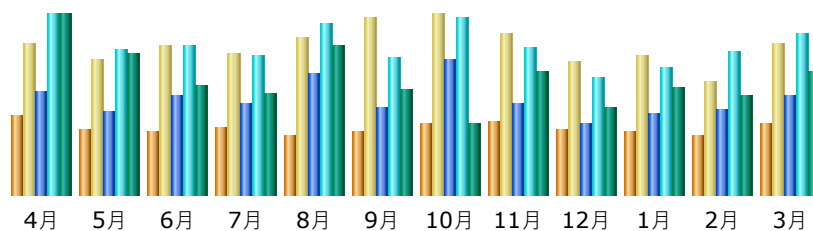
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	761	1,038	5,884	11,356	2.81 GB
5月	628	824	4,162	8,289	1.30 GB
6月	608	831	4,574	8,614	2.24 GB
7月	601	775	3,151	6,397	1.37 GB
8月	560	786	3,198	5,963	860.46 MB
9月	588	911	3,507	7,437	3.57 GB
10月	679	974	3,750	8,185	2.26 GB
11月	764	1,068	6,471	11,543	880.39 MB
12月	864	1,141	5,463	10,739	2.90 GB
1月	819	1,091	3,769	8,745	3.46 GB
2月	792	1,067	4,730	10,463	6.01 GB
3月	943	1,272	5,807	11,684	4.30 GB
合計	8,607	11,778	54,466	109,415	31.91 GB



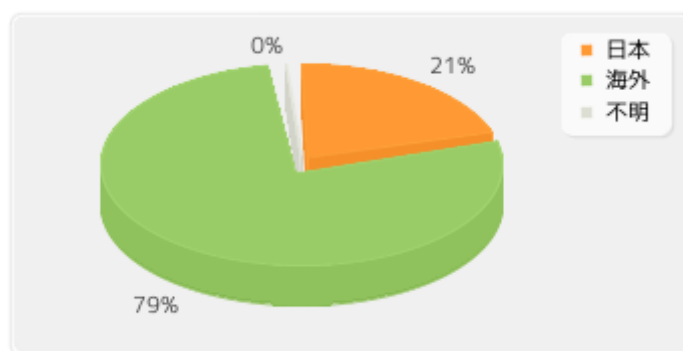
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のGENIES利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時56分



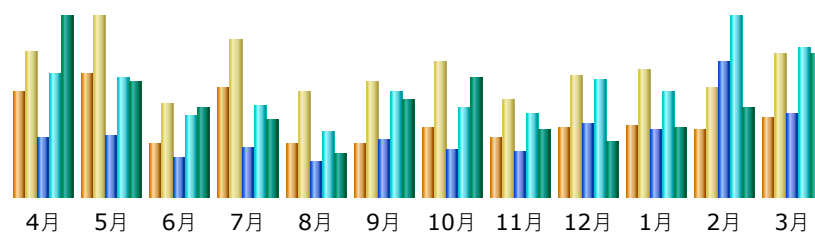
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	182	350	799	1,401	80.29 MB
5月	152	314	642	1,124	63.02 MB
6月	144	343	775	1,164	49.00 MB
7月	153	324	704	1,089	44.92 MB
8月	138	362	935	1,324	66.44 MB
9月	144	408	683	1,064	46.46 MB
10月	163	416	1,051	1,379	31.29 MB
11月	167	374	702	1,151	54.91 MB
12月	148	309	556	906	38.92 MB
1月	147	320	630	990	47.58 MB
2月	136	261	662	1,120	44.10 MB
3月	163	350	773	1,248	55.02 MB
合計	1,837	4,131	8,912	13,960	621.94 MB



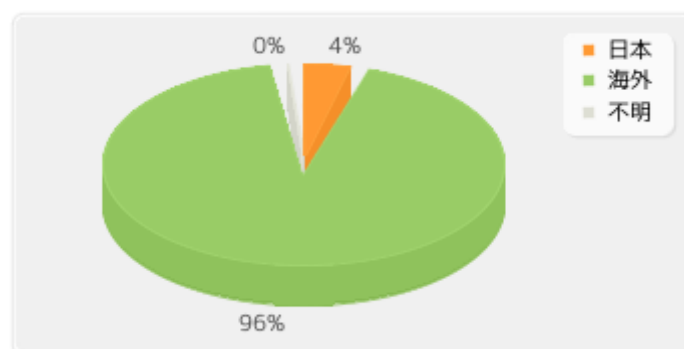
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のDINIES利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時36分



月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	282	395	1,140	2,362	263.59 MB
5月	334	487	1,162	2,296	168.26 MB
6月	144	250	773	1,558	129.22 MB
7月	294	424	940	1,745	112.94 MB
8月	145	284	683	1,258	62.68 MB
9月	143	313	1,121	2,014	142.34 MB
10月	184	367	895	1,705	173.35 MB
11月	157	264	854	1,610	99.26 MB
12月	184	329	1,394	2,280	80.96 MB
1月	194	346	1,280	2,041	99.72 MB
2月	182	294	2,612	3,483	131.44 MB
3月	216	386	1,595	2,867	210.52 MB
合計	2,459	4,139	14,449	25,219	1.64 GB

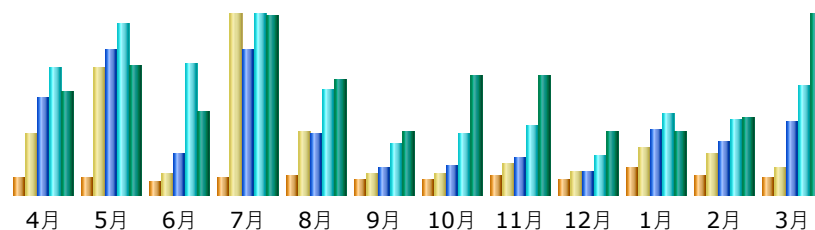


国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

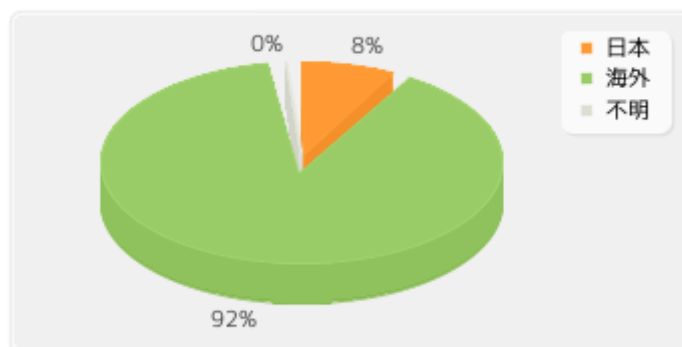
月別のChemical Analysis利用状況（2019年度）

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

更新日時：2020年4月1日 13時26分



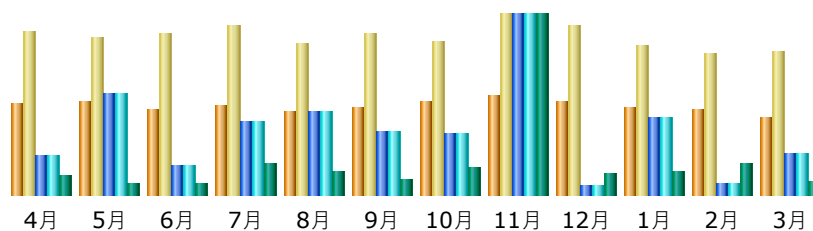
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	2,171	7,387	29,174	38,514	545.47 MB
5月	2,130	15,670	43,553	51,729	683.21 MB
6月	1,547	2,478	12,235	39,185	439.64 MB
7月	2,136	22,155	43,971	54,252	955.44 MB
8月	2,322	7,832	18,354	31,927	609.34 MB
9月	1,889	2,658	7,861	15,541	333.75 MB
10月	1,957	2,641	8,487	18,313	627.72 MB
11月	2,349	3,748	11,016	20,527	634.87 MB
12月	1,853	2,716	6,705	12,008	332.42 MB
1月	3,269	5,679	19,494	24,345	337.50 MB
2月	2,318	5,159	16,041	22,862	407.08 MB
3月	2,022	3,354	21,843	33,110	955.58 MB
合計	25,963	81,477	238,734	362,313	6.70 GB



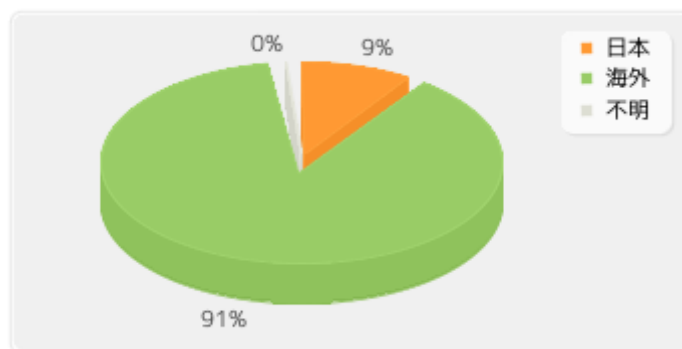
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のGenomeNet API利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 09時40分



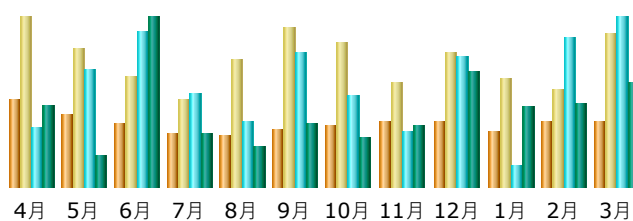
月	訪問者	訪問数	ページ	件数	バイト
4月	1,098	1,956	60,377	60,378	3.56 GB
5月	1,116	1,876	153,395	153,397	2.04 GB
6月	1,019	1,928	44,533	44,538	2.11 GB
7月	1,069	2,026	110,736	110,737	5.66 GB
8月	984	1,802	126,800	126,801	4.03 GB
9月	1,031	1,935	95,662	95,663	2.68 GB
10月	1,118	1,827	91,788	91,790	4.73 GB
11月	1,187	2,151	274,354	274,354	32.39 GB
12月	1,120	2,014	15,155	15,156	3.68 GB
1月	1,028	1,785	118,394	118,397	4.27 GB
2月	1,012	1,695	15,701	15,701	5.52 GB
3月	919	1,708	62,805	62,807	2.49 GB
合計	12,701	22,703	1,169,700	1,169,719	73.15 GB



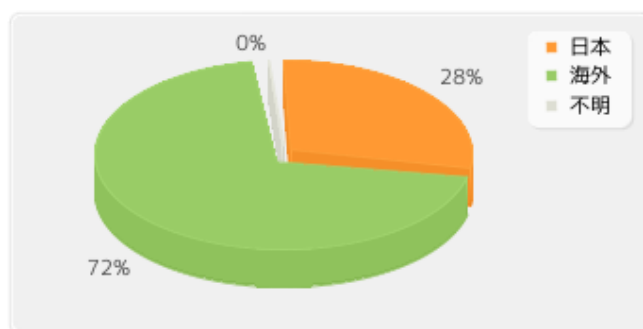
国内外のアクセスページ数比率（2019年度）

月別のFTPサービス利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時51分



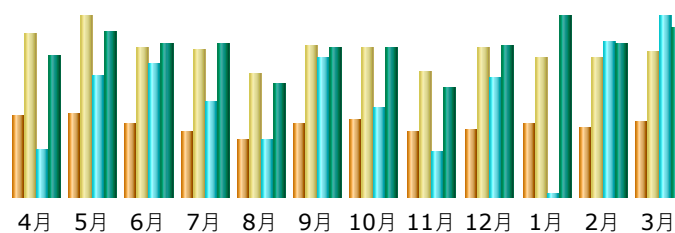
月	訪問者	訪問数	件数	バイト	/db/community/ (件数 バイト)	/db/mgenes/ (件数 バイト)	/db/rclass/ (件数 バイト)	/db/refgene/ (件数 バイト)	/db/virusostdb/ (件数 バイト)	/kegg/ (件数 バイト)	/tools/ (件数 バイト)
4月	507	990	13,874	274.60 GB	2,056 3.41 GB	25 7.51 MB	22 92.48 MB	18 52.10 KB	331 905.59 MB	648 4.02 GB	266 72.87 MB
5月	420	807	27,371	102.60 GB	2,073 6.09 GB	8 1.93 MB	10 1.98 MB	6 17.37 KB	239 758.92 MB	608 4.70 GB	160 734.37 KB
6月	367	643	36,007	571.37 GB	2,675 3.57 GB	17 4.09 MB	24 100.28 MB	6 17.37 KB	331 785.57 MB	574 4.31 GB	266 106.84 MB
7月	315	506	21,512	182.63 GB	1,503 4.85 GB	7 15.30 KB	7 25.41 KB	9 26.05 KB	237 513.16 MB	870 4.37 GB	135 706.65 KB
8月	305	746	14,998	139.60 GB	2,272 1.47 GB	33 5.77 MB	14 48.44 MB	9 26.05 KB	340 758.07 MB	410 3.22 GB	119 26.98 MB
9月	337	927	31,019	214.01 GB	2,064 3.75 GB	14 4.77 MB	7 41.41 KB	8 23.16 KB	196 409.00 MB	552 4.24 GB	118 1.27 MB
10月	360	836	21,188	168.77 GB	2,033 2.87 GB	6 3.52 MB	9 51.83 MB	4 11.58 KB	222 644.47 MB	520 4.25 GB	127 53.36 MB
11月	383	614	13,011	204.41 GB	1,937 342.31 MB	9 3.52 MB	9 12.23 MB	9 26.05 KB	211 569.13 MB	373 3.15 GB	155 752.97 KB
12月	380	784	30,299	388.78 GB	3,692 8.94 GB	19 6.67 MB	13 51.99 MB	8 23.16 KB	201 435.39 MB	518 4.30 GB	227 54.77 MB
1月	326	632	5,167	272.49 GB	2,226 827.22 MB	4 1.13 MB	5 1.93 MB	1 2.89 KB	259 496.42 MB	577 5.21 GB	135 1.22 MB
2月	380	561	34,486	282.03 GB	843 243.59 MB	12 169.21 KB	6 50.18 MB	8 23.16 KB	577 1.29 GB	507 4.30 GB	131 916.88 KB
3月	382	894	39,236	355.11 GB	1,162 1.99 GB	20 3.77 MB	11 49.13 MB	6 17.37 KB	474 1.10 GB	613 4.76 GB	188 53.95 MB
合計	4,462	8,940	288,168	3156.39 GB	24,536 38.31 GB	174 42.85 MB	137 460.55 MB	92 266.30 KB	3,618 8.52 GB	6,770 50.84 GB	2,027 374.29 MB



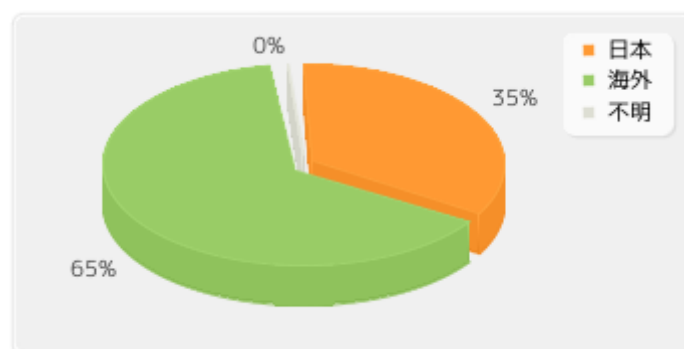
国内外のアクセス件数比率（2019年度）

月別のMEDICUS FTP利用状況（2019年度）

更新日時：2020年4月1日 13時53分



月	訪問者	訪問数	件数	バイト
4月	104	208	9,490	4.05 GB
5月	105	230	23,830	4.78 GB
6月	93	191	26,290	4.40 GB
7月	84	187	18,841	4.43 GB
8月	72	158	11,263	3.26 GB
9月	93	194	27,508	4.33 GB
10月	98	190	17,696	4.31 GB
11月	84	159	8,965	3.18 GB
12月	85	190	23,569	4.38 GB
1月	93	177	615	5.21 GB
2月	88	177	30,719	4.41 GB
3月	96	185	35,683	4.88 GB
合計	1,095	2,246	234,469	51.62 GB



国内外のアクセス件数比率（2019年度）

講習会等開催履歴

1991 年度の講習会等開催記録

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

1992 年度の講習会等開催記録

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

1993 年度の講習会等開催記録

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

1994 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1994.04.19	1日	スーパーコンピューター利用説明会	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ー利用説明会(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ー利用説明会(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ー利用説明会	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	FORTTRAN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ー利用説明会	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ー利用説明会	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	FORTTRAN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ー利用説明会	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ー利用説明会	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ー利用説明会	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	InsightIII/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ティスト
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ティスト
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ティスト

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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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ティスト
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	ピヨンド・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 由子
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 忠宏
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 忠宏
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 忠宏
2014.07.30	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	2名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2014.09.03	0.5日	Gaussian 講習会	5名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014.10.16	0.5日	Mathematica 講習会	1名	日本電子計算(株) 産業事業部 伊藤 雅将
2014.11.06	0.5日	Reaxys講習会	1名	ゼファー・ピヨンド(株) 瀧本 まゆみ
2015 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2015.06.17	0.5日	Gaussian 講習会	9名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2015.07.14	2日	Materials Studio 講習会	10名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2015.07.16	1日	Discovery Studio 講習会	9名	BIOVIA 高岡 雄司
2015.08.07	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔
2016 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2016.05.13	0.5日	第1回ゲノムネット講習会京大化研スパコン利用法	27名	日本SGI(株)上原英也、京大化研 緒方博之・五斗進
2016.07.05	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2016.07.06	2日	Materials Studio 講習会	16名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2016.07.20	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 高橋 麻里奈
2016.09.02	0.5日	SCIGRESS 講習会	2名	富士通(株) 松本 大輔
2016.09.15	0.5日	Mathematica 講習会	1名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2016.11.18	0.5日	Reaxys講習会	3名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2016.11.25	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2017 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2017.07.11	1日	Discovery Studio 講習会	2名	BIOVIA 高岡 雄司
2017.07.12	2日	Materials Studio 講習会	6名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2017.07.20	0.5日	Reaxys講習会	2名	エルゼビア社認定講師 瀧本 まゆみ
2017.09.07	0.5日	Gaussian 講習会	15名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2017.09.15	0.5日	バイオユーザのための化研スパコンシステム利用法	23名	日本ヒューレット・パカード(株) 上原 英也
2018 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2018.07.17	1日	Discovery Studio 講習会	3名	BIOVIA 高岡 雄司
2018.07.18	2日	Materials Studio 講習会	13名	BIOVIA Abhijit Chatterjee
2018.07.20	0.5日	Mathematica 講習会	1名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2018.09.11	0.5日	Gaussian 講習会	19名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2018.09.13	0.5日	SCIGRESS 講習会	1名	富士通(株) 高橋 篤也
2018.10.25	0.5日	バイオユーザのための化研スパコンシステム利用法	26名	日本ヒューレット・パカード(株) 上原 英也

2018.11.16	0.5日	Materials Science Suite 講習会	11名	シュレーディンガー(株) 永田 徹哉
2019 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)
2019.07.09	2日	Materials Studio 講習会	7名	ダッソー・システムズ (株) Abhijit Chatterjee
2019.07.11	1日	Discovery Studio 講習会	4名	ダッソー・システムズ (株) 高岡 雄司
2019.07.12	0.5日	Gaussian 講習会	8名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2019.07.24	0.5日	Mathematica 講習会	3名	(株)ヒューリンクス 勝 明次郎
2019.07.25	0.5日	SCIGRESS 講習会	1名	(株)富士通九州システムズ 杉原 裕介

令和元年度研究課題一覧

化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	時任 宣博	新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	水畑 吉行	新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	行本 万里子	互変異性化可能な重いケトン類の合成と性質
化学研究所	物質創製化学研究	有機元素化学	高橋 まさえ	完璧な π 共役二次元シートを持つフラットシリセンの設計
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	新規フラレーン誘導体の電子的性質
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	特異な構造をもつ有機分子の電子的性質
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	村田 靖次郎	フラレーンの構造変換に関する研究
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	廣瀬 崇至	新規構造を有する π 共役系化合物の構造有機化学
化学研究所	物質創製化学研究	構造有機化学	橋川 祥史	三次元 π 共役系の合成と性質に関する研究
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学	安達 愛結美	内包フラレーンの有機合成
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学	川端 猛夫	軸性不斉エノラートをを用いる4置換炭素の不斉構築
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学	山中 正浩	4-ピロリジン-ピリジン型分子触媒による化学選択的アシル化反応の理論的解析
化学研究所	物質創製化学研究	精密有機合成化学	上田 善弘	軸性不斉DMAP型触媒の開発と絶対配置の推定
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	化学研究所連絡用
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	精密無機合成化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	寺西 利治	不斉化学
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	坂本 雅典	ナノ粒子超構造の構築
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	佐藤 良太	無機ナノ粒子の精密合成と機能デバイスへの応用
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	猿山 雅亮	可視光応答性水分解光触媒の開発
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	Trinh Thuy	物質創製化学研究系 精密無機合成化学研究領域
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	高畑 遼	単一構造カドミウムカルコゲノドクラスター群の精密合成と光物性評価
化学研究所	物質創製化学研究	精密無機合成化学	劉 明翰	
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	辻井 敬亘	高分子ブラシの構造と物性
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	大野 工司	リビングラジカル重合法による新規機能性高分子の合成
化学研究所	材料機能化学研究	高分子材料設計化学	榊原 圭太	リビングラジカル重合法を用いたヤスヌ型ポトルブラシの創製
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	山子 茂	精密合成反応の設計
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	高見 佐織	
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	登阪 雅聡	透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	茅原 栄一	含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	李文娟	新規重合開始剤および関連反応開発に関する研究
化学研究所	材料機能化学研究	高分子制御合成	藤田 健弘	新規ラジカル重合の開発
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトンクス材料	水落 憲和	ダイヤモンド中のNV中心を用いた研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトンクス材料	森下 弘樹	ダイヤモンド発光中心を利用した光ナノ材料研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトンクス材料	藤原 正規	ダイヤモンドを用いた量子情報およびバイオイメージング研究
化学研究所	材料機能化学研究	無機フォトンクス材料	林 寛	E-mail利用
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	小野 輝男	ナノスピントロニクス
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	小野 輝男	ナノスピントロニクスの研究
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	山口 美保	ナノスピントロニクス研究に関する事務補佐
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	森山 貴広	高周波スピントロニクスデバイスの研究
化学研究所	材料機能化学研究	ナノスピントロニクス	塩田 陽一	ナノスピントロニクス
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	二木 史朗	機能性人工蛋白質の創出
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	二木 史朗	機能性ペプチドの創製
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	田中 由美	生体機能設計化学の研究支援
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	今西 未来	亜鉛ファンゲータンパク質を用いた転写制御分子の創製
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	河野 健一	ペプチドの膜透過
化学研究所	生体機能化学研究	生体機能設計化学	河野 健一	ペプチドの膜透過
化学研究所	生体機能化学研究	生体触媒化学	山口 信次郎	植物ホルモンの分子機構の研究
化学研究所	生体機能化学研究	生体触媒化学	渡辺 文太	酵素阻害剤の設計と合成研究
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	青山 卓史	植物の細胞内の情報伝達
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	青山 卓史	分子生物学
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	安田 敬子	分子生物学
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	柘植 知彦	植物環境応答制御機構の分子基盤
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	加藤 真理子	植物形態形成に関わる細胞内情報伝達機構の解析
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	寺本 日出美	植物分子生物学の研究
化学研究所	生体機能化学研究	生体分子情報	藤原 崇志	植物におけるTRY/CPC相同転写因子遺伝子の探索
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	上杉 志成	ケミカルバイオロジー: 小分子化合物を起爆剤とした生物学の研究
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	佐藤 慎一	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	Perron Amelie	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	竹本 靖	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	安保 真裕	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	中島 光恵	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	ブンザラン ルービー	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	Mendoza Aileen	ケミカルバイオロジー
化学研究所	生体機能化学研究	ケミカルバイオロジー	茅 迪	ケミカルバイオロジー
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	梶 弘典	有機非晶質科学の研究
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	梶 弘典	有機デバイスの基礎科学と高機能化
化学研究所	環境物質化学研究	分子材料化学	志津 功将	理論化学、計算化学に基づいた新規有機デバイス材料の開発
化学研究所	環境物質化学研究	水圏環境解析化学	宗林 由樹	水圏微量元素の研究
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	長谷川 健	界面の振動分光
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	長谷川 健	界面の振動分光
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	下赤 卓史	凝縮系の振動分光
化学研究所	環境物質化学研究	分子環境解析化学	中原 勝	超臨界水の化学

化学研究所 環境物質化学研究 分子微生物科学
化学研究所 環境物質化学研究 分子微生物科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 高分子物質科学
化学研究所 複合基盤化学研究 分子レオロジー
化学研究所 複合基盤化学研究 分子レオロジー
化学研究所 複合基盤化学研究 分子集合解析
化学研究所 複合基盤化学研究 分子集合解析
化学研究所 複合基盤化学研究 分子集合解析
化学研究所 先端ビームナノ科学センター レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センター レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センター レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センター 複合ナノ解析化学
化学研究所 先端ビームナノ科学センター 原子分子構造
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学

化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 有機分子変換化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子物性科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子物性科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子物性科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子物性科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 先端無機固体化学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 数理生物情報
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 数理生物情報
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
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 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学

化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学

栗原 達夫
栗原 達夫
竹中 幹人
竹中 幹人
石田 華子
西田 幸次
井上 倫太郎
小川 紘樹
金谷 利治
金谷 利治
渡辺 宏
松宮 由実
若宮 淳志
中村 智也
矢沢 健児
阪部 周二
橋田 昌樹
正岡 聖
根本 隆
藤井 知実
中村 正治

中村 正治
池田 奈緒子
高谷 光
岩本 貴寛
磯崎 勝弘
松田 博
縣 亮介
ピンチュエラ フランチェスカ
小澤 文幸
脇岡 正幸
脇岡 正幸
金光 義彦
金光 義彦
廣理 英基
永田 貴美子
島川 祐一
島川 祐一
島川 祐一
市川 能也
菅 大介
齊藤 高志
緒方 博之
方 悦
孙 玮佑
阿久津 達也
田村 武幸
森 智弥
馬見塚 拓
Nguyen Hao
八代 幸造
八代 幸造
谷村 道子
藤橋 明子
上村 美由紀
中村 かおり
濱岡 芽里
中野 友佳子
緒方 博之
緒方 博之
緒方 博之
Blanc-Mathieu Romain
遠藤 寿
吉川 元貴
西山 拓輝
Prodinger Florian

金子 博人
吉田 亘騎
ガルシア キンバリ
伴 広輝
宮崎 うらら
橋本 謙太郎
チョウ ルイジャン
夏 駿

低温菌の低温適応機構の解析
極限環境微生物の生理機能解析
量子ビームによる高分子構造解析
高分子物質科学のホームページ
Eメールの利用
高分子電解質溶液の構造
散乱法による高分子ダイナミクス
量子ビームを用いた高分子構造解析
アモルファス高分子のダイナミクス
高分子物質科学領域のホームページ
からみ合い高分子の分子レオロジー
高分子系の流動誘電緩和
機能性 π 共役系化合物の開発
E-mail利用
高性能フィルム型太陽電池の開発
レーザー物質科学
レーザー物質科学
X線管からのスペクトル解析
EELSスペクトルの計算機シミュレーション
タンパク質のX線結晶構造解析
新たな機能および反応性を有する有機金属化合物による次世代合成化学
の開拓
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成
元素科学研究にかかる事務処理
新奇なペプチド触媒を用いる木質バイオマスの循環資源化
合成化学を基盤とした新規金属触媒の開発
分子性金属活性種の解析手法の開発と超分子反応場の構築・反応制御
人工漆材料の高効率合成のための研究
精密鉄触媒クロスカップリング反応の開発とその合成応用
木質バイオマスの高度利用を志向した金属ナノ粒子触媒の開発
研究・教育
機能性高分子合成を指向した遷移金属錯体触媒の開発
遷移金属触媒による π 共役系高分子の構造制御合成
光ナノ科学
光ナノ元素科学
光ナノ元素科学
光ナノ元素科学
無機機能性材料の合成と評価
機能性酸化物材料の研究
酸化物エレクトロニクスに関する研究
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
KofamKOALAの開発
バイオインフォマティクスによるゲノム解析
バイオインフォマティクスによるゲノム解析
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
次世代シーケンシングデータの解析
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
事務
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
E-mail利用
広報関係業務
化学生命科学研究領域の研究報告
秘書業務
微生物生態学の研究
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究
海洋の真核プランクトンと巨大ウイルスの生物地理に関する研究
ウイルスの多様化と生物進化の関係の解明
腸内微生物群集が炎症性腸疾患に及ぼす影響の解明
浦ノ内湾におけるブルーム形成植物プランクトンとメガウイルス科の群集季
節変動の解析
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究
巨大ウイルスの分離と比較ゲノム解析
バイオインフォマティクス技術の習得
パルマ藻・珪藻の比較ゲノム解析
メタゲノムを利用したNCLDVの新規補助代謝遺伝子の探索
バイオインフォマティクスによるゲノム解析
バイオインフォマティクス実習
赤潮期間中囲まれた湾でメタバコーディングを使って二つのメガウイルス
科群集の比較

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	中野 直子	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	井出 恵美子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	木下 亜紀子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	工藤 亜矢	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	柴田 由香里	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	越久 由美子	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	伊勢脇 純子	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	小澤 亜耶	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	岡本 紗英	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	福井 智加子	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	大西 愛	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	大橋 浩美	E-mail利用
宇治地区事務部	研究協力課	嶋津 里香	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	山本 和人	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	西川 知延	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	小林 宏隆	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	南雲 円	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	北脇 朋樹	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	濱本 文平	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	松井 智子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	松澤 ありさ	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	眞木 麻香	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	金澤 真美子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	後藤 晶子	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	光嶋 葵	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	米木 豊	E-mail利用
宇治地区事務部	施設環境課	長田 知己	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	水口 裕尊	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	渡邊 一也	E-mail利用
理学研究科	理学部 化学専攻	朴 昭映	蛍光性核酸の開発と応用
理学研究科	理学部 化学専攻	廣瀬 優希	環状ピロロール-イミダゾールポリアミドの合成と評価
理学研究科	理学部 生物科学専攻	宇高 寛子	ホソヘリカメムシにおける光周期に反応する遺伝子の特定
理学研究科	理学部 化学専攻	中野 義明	分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析
理学研究科	理学部 化学専攻	野田 泰斗	量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析
理学研究科	理学部 化学専攻	木下 誠志	金属マジックサイズクラスター群の固体高分解能NMR
理学研究科	理学部 化学専攻	Dao Hoang-Anh	高分解能X線解析と量子化学計算の融合によるGFP電子構造の解明
理学研究科	理学部 化学専攻	野木 馨介	ヘテロ環化合物の再構築反応開発
理学研究科	理学部 化学専攻	藤橋 雅宏	E-mail利用
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	奥野 恭史	創薬のための合成反応予測
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	石田 祥一	E-mail利用
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	別所 祐紀	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	山下 智也	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	足達 馨	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	新妻 諭	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	鳥田 隆司	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	斎藤 憲子	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 人間健康科学系専攻	長 展生	化合物の合成反応、経路を予測する人工システム構築の開発
医学研究科	医学部 医学・医科学専攻	古川 喜規	細胞の生存と死を決定する制御システムの数理モデル化
薬学研究科	薬学部 薬科学専攻	瀧川 紘	高反応性化学種を活用する有機合成化学
薬学研究科	薬学部 薬科学専攻	竹本 佳司	E-mail利用
薬学研究科	薬学部 医薬創成情報科学専攻	大野 浩章	生物活性化合物の創製を指向した有機化学研究
薬学研究科	薬学部 医薬創成情報科学専攻	掛谷 秀昭	ケモインフォマティクスおよびバイオインフォマティクスを活用したケミカルバイオロジー研究
工学研究科	工学部 機械理工学専攻	西川 雅章	エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価
工学研究科	工学部 機械理工学専攻	内藤 悠太	エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価
工学研究科	工学部 航空宇宙工学専攻	占部 継一郎	プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析
工学研究科	工学部 電子工学専攻	重松 英	IV族半導体へのスピン注入物性測定
工学研究科	工学部 電子工学専攻	竹内 繁樹	光子を用いた量子情報科学に関する研究
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	大江 浩一	含窒素複素環をコ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	三木 康嗣	近赤外円偏光発光材料の創出
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	岡本 和紘	遷移金属触媒を用いた新規変換反応の開発
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	岡本 和紘	有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	陰山 洋	固体化学
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	野尻 聡子	固体化学
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	小林 洋治	固体化学
工学研究科	工学部 物質エネルギー化学専攻	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	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	渡邊 雄貴	水素化合物含有液体の探索
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	新井 一功	層状アンチモン化合物の構造シミュレーション
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	E-mail利用
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	坂本 良太	機能性分子低次元系の創製
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	鈴木 肇	可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	富田 修	光触媒を用いた可視光水分解系の構築
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	藤原 哲晶	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	E-mail利用
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	電極材料の電子状態解析
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	開殻分子の電子構造に関する理論的研究
工学研究科 工学部 分子工学専攻	細川 三郎	金属酸化物ナノ粒子の合成とその応用
工学研究科 工学部 分子工学専攻	今堀 博	人工光合成系の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	梅山 有和	光合成モデル化合物の合成
工学研究科 工学部 分子工学専攻	東野 智洋	有機分子を用いた新規な機能性材料の開発
工学研究科 工学部 分子工学専攻	筒井 祐介	有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価
工学研究科 工学部 高分子化学専攻	伊藤 峻一郎	13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	長田 裕也	溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)のダイナミクス解析

工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻	松田 建児	HOPG基板上における分子配列のモデリング
工学研究科 工学部 化学工学専攻	鈴木 哲夫	吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討
工学研究科 工学部 化学工学専攻	山本 量一	ソフトマターの研究
工学研究科 工学部 附属工学基礎教育研究センター	大嶋 光昭	E-mail利用
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	ポリエチレングリコールで修飾したピリジン配位子の開発
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	松本 充弘	計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測
工学研究科 工学部 機械理工学専攻	上野 哲也	計算化学を活用した無機物・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	上野 哲也	計算化学を活用した無機物・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 材料化学専攻	宇治 広隆	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 都市環境工学専攻	沈 尚	琵琶湖水中におけるウイルスメタゲノム解析
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	生体系物質の原子・電子解析
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・表面の原子～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	金属材料の表面特性
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻	左藤 友晴	金属表面の物性解析
農学研究科 農学部 森林科学専攻	久住 亮介	磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻	植田 充美	コンビナトリアル・バイオ工学
農学研究科 農学部 応用生物科学専攻	吉田 天士	一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究
農学研究科 農学部 応用生物科学専攻	吉田 天士	一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究
農学研究科 農学部 応用生物科学専攻	澤山 茂樹	効率的な有用物質生産に向けた真核微細藻類のゲノム解析
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
農学研究科 農学部 森林科学専攻	平野 義貴	量子化学計算によるリグニンモデル化合物の間接電解反応機構の解析
人間 環境学研究科 相関環境学専攻	廣戸 聡	三次元π共役分子の合成の機能性の創出
人間 環境学研究科 相関環境学専攻	上田 純平	ガラス長残光蛍光体における残光メカニズムの解明
人間 環境学研究科 相関環境学専攻	高橋 弘樹	優先富化現象を示す有機化合物の検索
人間 環境学研究科 相関環境学専攻	津江 広人	有機分子性結晶の気体吸着特性の解析
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 古川グループ	古川 修平	金属錯体ソフトマテリアルの創成
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	水素貯蔵を示す水素化合物含有金属-有機構造体の合成
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 藤田グループ	藤田 大士	自己集合を利用したタンパク質のカプセル化
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 深澤グループ	深澤 愛子	新奇電子受容性π共役系の創製と機能開拓
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 Sivaniahグループ	ウチイ	混合マトリクス膜中のガス輸送特性に関する計算機シミュレーション
高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 北川グループ	大竹 研一	多能性細孔物質の深化
福井謙一記念研究センター 理論研究部門	佐藤 徹	振電相互作用に関する理論的研究
産官学連携本部	湊 丈俊	固液界面を反応場とする化学反応
産官学連携本部	山中 俊朗	電池材料のラマンスペクトルの計算
産官学連携本部	CelikKucuk Asuman	蓄電池の電解液中のイオン間相互作用の計算科学的検討

(京都大学以外所属)		
情報・システム研究機構 データサイエンス共同利用基盤施設	五斗 進	生体分子情報データベースの開発とその応用
東京大学 大気海洋研究所 地球表層圏変動研究センター	西村 陽介	遺伝子情報を用いた海洋生態学研究
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	グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用
東京工業大学 生命理工学院 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 山田研究室	中村 祐哉	MAGsによる、腸内細菌叢比較ゲノム解析
東京工業大学 生命理工学院 山田研究室	城間 博紹	Whole Short gun sequence dataを用いたゲノムの再構築
茨城大学 工学部 生体分子機能工学科	吾郷 友宏	フッ素の元素特性を活か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
久留米工業高等専門学校	黒飛 敬	E-mail利用
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	ゲノム解析
産業技術総合研究所 生物プロセス研究部門	岡崎 友輔	湖沼に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析
株式会社KRI ナノ構造制御研究部	中江 隆博	炭素材料の物性研究
広島大学大学院 工学研究科 機械物理工学専攻	Carles Serrat	高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅

東京大学 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻
東京大学 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻
株式会社ゲノムアナリティクスジャパン
東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門
東京大学大学院 理学系研究科 生物科学専攻
関西大学 化学生命工学部 化学・物質工学科
富山県立大学 工学部 生物工学科
大阪府立大学大学院 工学研究科 物質・化学系専攻
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻
琉球大学 理学部 海洋自然科学科生物系 久保田研究室
東京大学 総合文化研究科 広域システム科学系

大阪大学 理学研究科 高分子科学専攻
農業・食品産業技術総合研究機構 食品研究部門
農業・食品産業技術総合研究機構 食品研究部門
東レ株式会社 滋賀事業場 先端材料研究所
国立研究開発法人森林研究・整備機構 森林総合研究所 総務部
株式会社リコー イノベーション本部 材料技術開発センター
株式会社リコー イノベーション本部 材料技術開発センター
神戸大学 社会システムイノベーションセンター

(無所属)

笠原 雅弘
藤野 健
八谷 剛史
平野 敏行
浜口 悠貴
三田 文雄
占部 大介
峯 真也
平野 智倫
久保田 康裕
吉田 丈人

武智 恭世
氏原 ともみ
林 宣之
吉元 健治
上野 真義
高島 健悟
後藤 大輔
砂川 武貴

藪崎 純子

スギゲノムの解読と解析
スギゲノムの解読と解析

タンパク質の電子状態計算
アミノシルtRNA合成酵素の系統解析で示すミトコンドリアのモザイク起源
機能性高分子材料の創生
計算化学を活用した天然物の合成研究
第一原理計算の支援に基づく有機金属構造体(MOF)触媒 / 吸着剤の開発
液々界面での電子移動反応の研究
生態学的ビッグデータを用いた生物多様性の創出・維持機構の研究
環境水中における共進化を通じた細菌とウイルスの遺伝的多様性の創出と
維持機構の解明
高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響
食品成分の分子間相互作用の解析
電子構造解析による食品成分分子の理論的研究
高分子溶液の相分離に関する大規模計算
スギの全ゲノム配列の解読
有機化合物に対する量子化学計算
有機化合物に対する量子化学計算
ゼロ金利制約のあるDSGEモデルのパラメータ推定

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生合成
パスウェイの再構築

京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

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