

# スーパーコンピュータシステム

平成 26 年度

## 研究成果報告書



京都大学化学研究所

## はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992年1月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2012年1月に導入された現在のシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとしてSGI UV1000（総CPUコア数3072）を、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとしてSun Fire X4800（総CPUコア数768）を採用しています。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、新しい研究環境を必要とする京都大学内の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成26年度の333名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、61件の研究成果報告をまとめたものです。また、システム稼働状況、化学研究所WWWサーバ利用状況、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。

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

2015年3月

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

## 化学研究所

新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	笹森 貴裕	..... 1
典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	..... 3
特異な光・電子物性を有する新規ヘテロ $\pi$ 共役系典型元素化合物の創製	吾郷 友宏	..... 5
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	..... 7
キラル特性を有する多糖高次構造の創製	榊原 圭太	..... 9
精密合成反応の設計	山子 茂	..... 11
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	..... 12
含歪み $\pi$ 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	..... 15
歪みによって発現するポリジメチルシロキサン結晶多形	山添 良太	..... 16
たんぱく質間相互作用を制御する合成分子の創製	大神田 淳子	..... 18
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	..... 20
溶液および界面の振動分光学	下赤 卓史	..... 24
有機半導体の電子構造の研究	吉田 弘幸	..... 27
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	..... 29
タンパク質のX線結晶構造解析	山内 貴恵	..... 30
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖	..... 32
XAFS分光法によるガラス材料の構造解析	梅咲 則正	..... 33
高効率有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成	中村 正治	..... 35
遷移金属錯体の構造探索	竹内 勝彦	..... 38
巨大DNAウイルスゲノムの解析	緒方 博之	..... 41
生体分子情報データベースの開発	五斗 進	..... 44
ゲノム、メタゲノムの機能評価システムの開発とその応用	五斗 進	..... 48
薬物間相互作用が引き起こす薬物有害反応の機序推定	水谷 紗弥佳	..... 50
miRNA とそれをホストする遺伝子の機能関連解析	西村 陽介	..... 53
ウイルスによる宿主代謝系の制御原理に関する研究	三原 知子	..... 55
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾	..... 56
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	..... 58
幅優先探索順による木状化学構造の並列列挙	林田 守広	..... 60
ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化と解析	田村 武幸	..... 62
遷移金属触媒反応開発を支援する統計有機化学分野の開拓	山口 滋	..... 64

## エネルギー理工学研究所

原子力材料挙動のモデリング研究	森下 和功	..... 65
-----------------	-------	----------

## 生存圏研究所

温度制御アルゴリズムがMD計算に与える影響について 田中 文男 ..... 67

## 理学研究科

金属酸化物表面における吸着構造 松本 吉泰 ..... 69

遷移金属錯体の分子シミュレーション 北川 宏 ..... 71

機能性分子および遷移金属錯体の分子シミュレーション 小松 徳太郎 ..... 73

## 工学研究科

微細孔隙内流体の拡散挙動及びNMR緩和時間の解明 澤 侑乃輔 ..... 75

触媒有機化学に関する研究 辻 康之 ..... 77

パイ共役系の電子物性に関する理論的研究 佐藤 徹 ..... 80

化学反応と電子物性に関する理論的研究 笛野 博之 ..... 82

光合成モデル化合物の合成 梅山 有和 ..... 83

ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の機構解明 長田 裕也 ..... 86

多孔性配位高分子の合成と性質 植村 卓史 ..... 87

HOPG基板上における分子配列のモデリング 廣瀬 崇至 ..... 88

HOPG基板上における分子配列のモデリング 横山 創一 ..... 89

らせん状多環芳香族分子の超分子組織化と分光特性 伊藤 夏輝 ..... 91

HOPG基板上における分子配列のモデリング 西谷 暢彦 ..... 92

HOPG基板上における分子配列のモデリング 前田 尚生 ..... 94

分離プロセスの量子化学的研究 田門 肇 ..... 95

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討 鈴木 哲夫 ..... 96

多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移 田中 秀樹 ..... 97

クラスターイオンビームと固体表面の相互作用 龍頭 啓充 ..... 99

## エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性 蜂谷 寛 ..... 101

マグネシウム合金の力学特性 馬渕 守 ..... 103

多孔質金属の表面特性 袴田 昌高 ..... 105

## 農学研究科

植物種子タンパク質の構造と機能 丸山 伸之 ..... 107

変調磁場を用いて作製した擬単結晶の構造解析 木村 史子 ..... 109

## 人間・環境学研究科

有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析 津江 広人 ..... 111

リチウムイオン電池の正極界面の電子状態解析 折笠 有基 ..... 113

多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明	森 拓弥	•••• 114
<u>物質-細胞統合システム拠点</u>		
高次元マクロ構造を持つ配位高分子/酸化物複合体の合成手法の 確立	古川 修平	•••• 115
<u>iPS細胞研究所</u>		
RNP相互作用により駆動するRNAナノマシンの設計	齊藤 博英	•••• 116
<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	•••• 118
京都大学化学研究所 WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	•••• 125
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	•••• 127
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	•••• 148
平成26年度研究課題一覧		•••• 152

京都大学化学研究所  
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

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