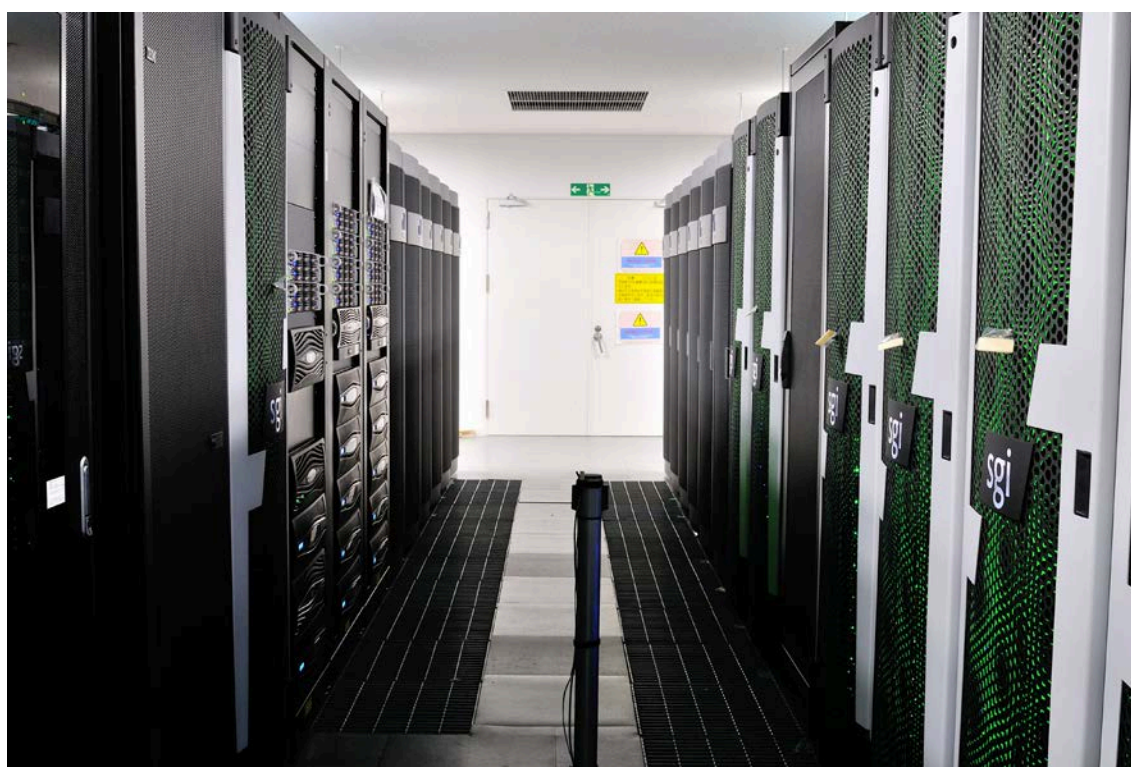


スーパーコンピュータシステム

平成 27 年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992 年 1 月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2012 年 1 月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとして SGI UV1000 (総 CPU コア数 3,072) を、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとして Sun Fire X4800 (総 CPU コア数 768) を採用していました。2016 年 1 月には、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバは SGI UV2000 (総 CPU コア数 1,024) および SGI C2112 (総 CPU コア数 3,000) へ、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバは DELL PowerEdge R930 (総 CPU コア数 640) へと移行されました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成 27 年度の 352 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、59 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、平成 27 年度は 7 件の採択課題 (バイオ情報学分野) 推進に利用されました。

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

送付先メールアドレス : spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

2016 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

キラル特性を有する多糖高次構造の創製	榊原 圭太		1
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		2
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一		3
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の	橋本 士雄磨		4
たんぱく質間相互作用を制御する天然物誘導体の合成と機能	Punzalan L. Louvy		5
	大神田 淳子		
溶液および界面の振動分光	長谷川 健		6
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆		7
タンパク質のX線結晶構造解析	山内 貴恵		8
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖		9
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	中村 正治		10
包括的ウイルスゲノム研究のためのデータリソースと多様性解析	三原 知子		11
法の開発			
免疫系分化タンパク質の系統発生	吉川 元貴		12
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也		13
整数計画法による文字列の集合上の確率分布に対する中央文字	林田 守広		14
列と中心文字列			
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	田村 武幸		15
と制御			
巨大DNAウィルスゲノムの解析	緒方 博之		16
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romain		18
NGSを用いた転写制御および細菌叢の研究	西山 拓輝		19
生体分子情報データベースの開発	五斗 進		20
海洋メタゲノム解析	隈部 彰彦		21
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾		22
プロテオーム・データベースの構築	吉沢 明康		23
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典		24
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		25
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		26
典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行		27
新規な光・電子物性を有する新規ヘテロ π 共役系典型元素化合	吾郷 友宏		28
物の創製			
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明	鈴木 裕子		29
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	郭 晶東		30
メタゲノム解析によって得られた新規海洋ウイルスゲノムの多様性	西村 陽介		31
の解明			

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素細線物質に関する理論計算	中江 隆博		32
------------------	-------	-------	----

生存圏研究所

生体高分子の分子シミュレーション	田中 文男		33
宇宙電磁環境を利用した地球衝突小惑星の軌道変更に関する研	山口 皓平		34

理学研究科

遷移金属錯体の分子シミュレーション	北川 宏		35
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		36

薬学研究科

ドラッグライクテンプレートの開発研究	大野 浩章		37
--------------------	-------	-------	----

工学研究科

半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発	東 正信		38
触媒有機化学に関する研究	辻 康之		39
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平		40
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹		41
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之		42
機能性パイ電子系物質の電子物性	関 修平		43
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	長田 裕也		44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至		45
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦		46
HOPG基板上における分子配列のモデリング	前田 尚生		47
分離プロセスの量子化学的研究	田門 肇		48
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫		49
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹		50

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		51
マグネシウム合金における第一原理計算	馬淵 守		52
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高		53

農学研究科

植物種子タンパク質の構造と機能	丸山 伸之		54
一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析	菊地 弘晃		55
変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子		56
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？	吉田 天士		57

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		58
-------------------------	-------	-------	----

低温物質科学研究センター

分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明		59
---------------------	-------	-------	----

ウイルス研究所

HIV-1 Vif の自然及び獲得免疫による多面的圧力からの逃避機序の解明	泉 泰輔		60
---------------------------------------	------	-------	----

スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也		61
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣		69
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣		71
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		89
平成27年度研究課題一覧			94

キラル特性を有する多糖高次構造の創製

Fabrication of polysaccharide-based hierarchical structures with chiral property

京都大学 化学研究所 高分子材料設計化学研究領域 榊原 圭太

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、異種側鎖がグラフト化されたボトルブラシであるヤヌス型ボトルブラシが形成する集合構造の探索を行った。

著者らは、多糖を主鎖に、異種側鎖の位置選択的導入と相分離により、側鎖シーケンスの完全制御と多糖キラル性の増幅を計画した。本系は、多糖主鎖の1次元連結性、および側鎖相分離を駆動力とした新規メソ構造の発現に期待できる。特に今年度は、この実証を念頭に、セルロースの一級水酸基に一種目の側鎖を、二級水酸基に二種目の側鎖をそれぞれ位置選択的かつ高密度に導入した、構造明確なセルロース系ヤヌス型ボトルブラシの合成法の確立を行った。また、セルロース系ヤヌス型ボトルブラシは新規化合物であるため、その溶液における特性を評価するため、サイズ排除クロマトグラフィー-多角度光散乱 (SEC-MALS) 測定による分子特性評価を試みた。導入する異種側鎖は、polystyrene (PSt) 鎖と poly(ethylene glycol) (PEG) 鎖を採用し、Williamson エーテル化と Huisgen 環化付加反応を用いた。SEC-MALLS 測定の結果、6 位に PSt 鎖、2,3 位に PEG 鎖が導入されたボトルブラシは、溶液中で非常に剛直なコンフォメーションを採った。剛直性を有する理由には、第一に側鎖の密度が高いことが考えられるが、ある種の溶媒においては側鎖の相分離効果が相乗される可能性が示唆された。本実験結果を説明すべく、モデル分子によるシミュレーションの検討を試みている。

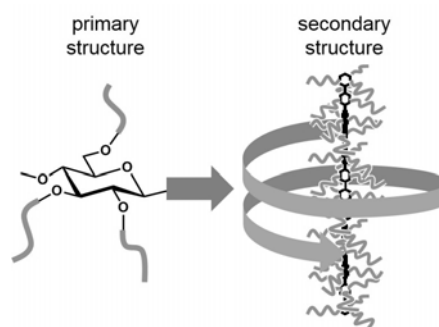


Figure 1. Schematic illustration of primary and secondary structures of Janus-Type Bottle Brush with cellulosic main chain.

発表論文(謝辞なし)

Y. Kinose, K. Sakakibara, Y. Tsujii, *Polym. Prep. Jpn.*, **64**, 1X05 (2015).

Y. Kinose, K. Sakakibara, K. Ohno, Y. Tsujii, *Fiber Prep. Jpn.*, **70**, 1F03 (2015).

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

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

京都大学化学研究所 高分子制御合成研究領域 登阪雅聡

研究成果概要

今年度の本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ポリジメチルシロキサン(PDMS)の結晶構造解析に取り組んだ。我々は、冷却結晶化した架橋PDMSの広角X線回折(WAXD)測定を行い、結晶化前に与えた延伸倍率に応じて異なるWAXDパターンが出現する事を見出した[1]。延伸倍率が大きい時と小さい時で異なるWAXDパターンが出現するのだが、それらの中間に対応する延伸倍率では回折スポットの位置が連続的に変化し、WAXDパターンが入れ替わるという、極めて特異な挙動が観察された。その際に構造変化がどのような機構で起こっているかは、極めて興味深い課題である。しかしPDMS結晶は未だ構造解析されていないため、具体的な分子の形に基づく議論が出来ない。そこで、独自のX線構造解析に着手した。

前年度までに、延伸下、 -100°C で冷却結晶化したPDMS試料のWAXDパターン(図1)を得ている。このWAXDパターンより決定した結晶の単位格子中に、分子を配置した場合のWAXDパターンをMaterials Studioによりシミュレーションした。しかしながら、この単位格子を用いる限り、実測のパターンを再現することは困難であった。そこで、透過型電子顕微鏡(TEM)中で未架橋のPDMSを冷却し、単結晶の電子線回折(ED)を得る事により、別途単位格子の決定を試みた。 $hk0$ 反射の配置から、PDMSには図2のEDパターンに対応する単位格子を持つ、三種類の結晶型が存在すると考えられた。図1中aで示した反射は図2のcell 1中aで示した反射と対応している。また、cell 1からcell 3まで、多くの反射において回折角がほぼ一致しており、WAXDの繊維図形では区別が出来ない。従って、図1のWAXDパターンに出現した反射には、図2に示した三種類の単位格子によるものが混在している可能性がある。かつ、図1中bで示した赤道($hk0$)反射は図2に観察されないため、これらとは別に、伸長により誘起された別の結晶型も存在すると考えられる。現在、上記のセル中でエネルギー的に安定であり、回折パターンの特徴を再現できる構造を、Materials Studioにより探索中である。これまでに、cell 1とcell 2について、実測のEDパターンをよく再現する構造を見つけることが出来た。

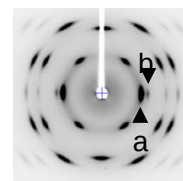


図1 延伸倍率6倍におけるPDMSのWAXDパターン。

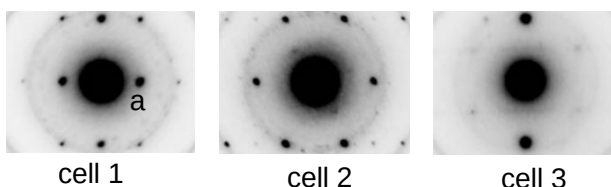


図2 PDMSのEDパターン。

発表論文 (研究終了後に投稿の予定)

含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価

Synthesis of Strained π -Conjugated Molecules and Evaluation of their Physical Properties

京都大学化学研究所材料機能化学研究系高分子制御合成研究領域 茅原栄一

背景と目的

ポリパラフェニレンのような π 共役系化合物の π ラジカルカチオンやカチオン種は、有機電子デバイスにおける導電性と密接に関係する化学種である。¹⁾ 我々は最近、末端構造の無いオリゴパラフェニレンのモデル化合物とみなせる、シクロパラフェニレン (CPP, Figure 1a) の酸化還元特性について検討を進めている。²⁾ 本研究では、最近合成に成功したサイズの異なる CPP ラジカルカチオン ([N]CPP^{•+}, Figure 1b)、ジカチオン ([N]CPP²⁺, Figure 1c) の理論的解析、特にそれらの電子状態 (スピンや電荷の分布) について検討を行った。³⁾

結果と考察

DFT 計算 [(U)B3LYP/6-31G*] により求めた、[N]CPP^{•+} および [N]CPP²⁺ (N = 5-12) の最安定構造を用いて Mulliken 密度解析を行った。一例として、[5]CPP の結果を Figure 2 に示

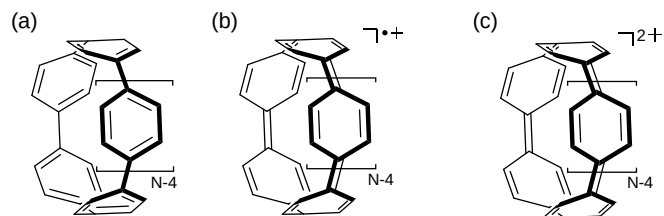


Figure 1. Structures of a) CPP, b) CPP radical cation, and c) CPP dication.

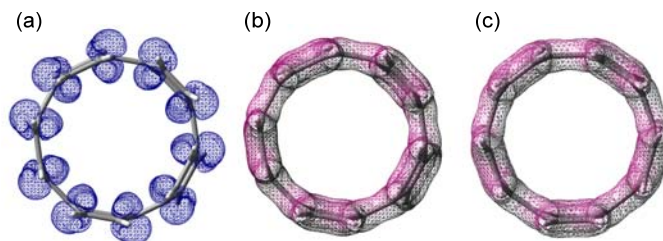


Figure 2. Calculated a) spin density of [5]CPP^{•+} and charges of b) [5]CPP^{•+}, c) [5]CPP²⁺.

した。その結果、いずれの環サイズの酸化種においても、スピン密度、電荷ともにパラフェニレンの分子全体に均等に非局在化していることが分かった。この結果は、ラジカルカチオンでは ESR で等価な水素に由来するシグナル分裂が観測され、ジカチオンの ¹H NMR ではシングレットのピークのみが観測された実験事実を支持するものであった。

参考文献 (1) (a) Grimsdale, A. C.; Chan, K. L.; Martin, R. E.; Jokisz, P. G.; Holmes, A. B. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 897. (b) Heinze, J.; Frontana-Urbe, B. A.; Ludwigs, S. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 4724. (2) (a) Iwamoto, T.; Watanabe, Y.; Suzuki, T.; Yamago, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 8354. (b) Kayahara, E.; Kouyama, T.; Kato, T.; Takaya, H.; Yasuda, N.; Yamago, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 13722-13726. (c) Toriumi, N.; Muranaka, A.; Kayahara, E.; Yamago, S.; Uchiyama, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 82-85.

発表論文: Kayahara, E.; Kouyama, T.; Kato, T.; Yamago, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 338.

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

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

研究成果概要

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

相互作用が予想される[n]CPP と[n+5]CPP (n = 5-8)との包接錯体について、DFT 計算(M06-2X/6-31G*)による構造最適化計算を行なったところ、いずれも、ホストCPPとゲストCPPの π 共役面とが十分に重ならず、ゲストが半分程度ホストの外に飛び出した構造、あるいはCPP 同士が斜めに重なっている構造が得られた。実際に、これらの錯形成の会合定数はさほど大きくない($\sim 10^2$ L mol⁻¹)ことが滴定実験によりわかっており、このように π 共役面が十分に相互作用できていないことが、その原因ではないかと考えている。今後、これらの錯体の結晶化を試み、単結晶 X 線回折によりその結晶構造も明らかにすることで、理論との両面から包接挙動について解析を進める予定である。

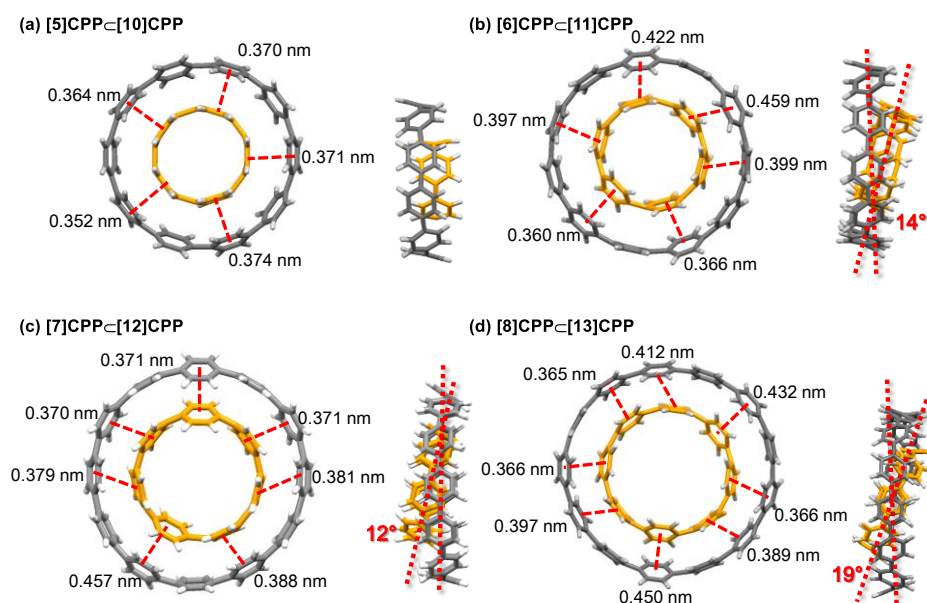


図 1. [n]CPP ⊂ [n+5]CPP の構造

たんぱく質間相互作用を制御する天然物誘導体の合成と機能
Fusicoccin-based Antitumor Agents that Control Protein-protein Interactions

京都大学化学研究所ケミカルバイオロジー領域 Louvy Lynn Punzalan, Junko Ohkanda

Fusicoccin, FC and cotylenin A, CN are two of the few reported stabilizer of protein-protein interactions. These two natural products bearing a diterpene glucoside moiety are initially studied in plants. CN was reported as a plant growth regulator while FC was discovered as the toxin that causes the wilting in trees. Both molecules are described to bind to 14-3-3 protein and enhances the interaction of 14-3-3 with its partner protein.^{1,2,3} The small molecule fit in to the hydrophobic pocket of 14-3-3 adjacent to the phosphorylated sequence motif of the partner protein creating a ternary complex (Figure 1).³

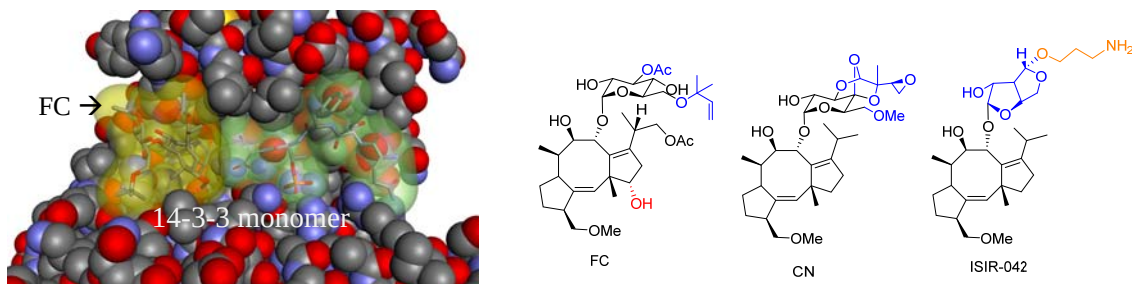


Figure 1. (a) The ternary complex formed by plant 14-3-3, QSYpTVCOOH (C-terminal of H⁺-ATPase) and FC.³ (b) Chemical structures of FC, CN and ISIR-042.

In humans, 14-3-3, the primary receptor of FC and CN, is involved in different regulatory process like signaling transduction, cell cycle and apoptosis. It was reported that about 200 partner proteins interact with human 14-3-3. By a non-biased approach our goal is to determine which and how many of the 14-3-3 partner proteins is the target of FC and its synthesized derivatives. As a support tool, the Discovery Studio was used to visualize reported 14-3-3 crystal structure and study the binding of the synthesized FC derivatives to 14-3-3. For the biochemical assays, we had performed pull down experiments in the presence of ISIR-02, an FC derivative that was reported to kill tumor cells under hypoxic conditions. Validation of the identified target protein is currently on-going.

References:

- [1] De Vries-van Leeuwen I, et al. *PNAS*. **2013**, 110 (22), 8894-8899
- [2] Ottman C, et al. *J. Mol. Biol.* **2009**, 386: 913-919
- [3] Wurtele M, et al. *Embo J.* **2003**, 22(5), 987-994

発表論文(謝辞なし)

Parvatkar, P. et al. N. Kato, M. Uesugi, S. Sato, J. Ohkanda, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 15624-15627.

溶液および界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Solution and Surface Chemistry

京都大学化学研究所・分子環境解析化学領域

長谷川 健

研究成果概要

ポリマー骨格にチエノチオフェン環を含む高分子有機半導体 (PBTTT) の薄膜は, チオフェン環のみで構成される poly(3-alkylthiophene) (P3AT) をしのぐ高い電荷移動度をもつ[1]. この違いの原因とされる ‘PBTTT の高い凝集性’ を分子配向と関連付けて議論するため, 赤外 pMAIRS 法[2]を用いた研究を行った. 本手法は, 有機半導体薄膜のデバイス特性に大きく影響する分子配向の定量的な評価法として確立しており[3], 官能基単位での配向解析と分子凝集構造解析をラボレベルで行うことができる. 今回, PBTTT 薄膜の分子配向を定量的に評価し, 同じ長さのアルキル側鎖をもった P3AT と比較することで, チエノチオフェン環の導入による性質向上の原因について議論した.

薄膜試料の配向を解析するうえで必要な, PBTTT の振動バンドの帰属を行うため, バルク固体の赤外 ATR スペクトルを測定した. チオフェン環由来のピークは P3AT とほぼ同じ位置に観測されることがわかり, PBTTT に固有の振動バンドも観測された. 量子化学計算による検討の結果, これらはチエノチオフェン環に関連した振動バンドと帰属できた. 比較的吸収強度の大きい 1173 cm^{-1} および 801 cm^{-1} のバンドは, それぞれチエノチオフェンの C-H 面内変角振動 ($\delta(\text{C-H})$), C-H 面外変角振動 ($\gamma(\text{C-H})$) に帰属できた. これらのバンドに着目して pMAIRS スペクトルを解析することで, チエノチオフェン環のみに着目した配向解析を行うことができる.

PBTTT 薄膜の赤外 pMAIRS スペクトルを測定した結果, IP スペクトルに明確に強い $\delta(\text{C-H})$ バンドが現れた. pMAIRS 法の表面選択律と遷移モーメントの向きから, ポリマー鎖が基板に対して高度に平行配向していることを示す. 一方, $\gamma(\text{C-H})$ バンドは IP と OP で同程度の強度で観測された. チオフェン環が膜面にほぼ平行に配置する P3AT に比べ, PBTTT は短軸が基板から立ち上がっていることを示す. 凝集性の高い有機半導体分子は, このような配向を取りやすい傾向があり, 成膜過程で膜面方向に結晶化が進んだと考えられる. この配向は膜面方向の電荷移動に有利なため, PBTTT の高い電荷移動度を説明できる.

C-H 伸縮振動バンドから, アルキル鎖は薄膜中で折れ曲がった *gauche* 構造を含んでおり, P3AT に比べてもさらにアルキル鎖が乱れていることがわかった. これは, 隣接するポリマー鎖のアルキル側鎖が互いに入れ子構造を形成し安定化するという通説を否定する結果である. PBTTT の高い凝集力にアルキル鎖の寄与はほとんどなく, チエノチオフェン基の平面性が大きく関わっていることがわかり, PBTTT が示す高い機能性の要因を整理することができた.

References: [1] McCulloch, I. et al., *Nat. Mat.* **2006**, 5, 328. [2] Hasegawa, T. *Anal. Chem.* **2007**, 79, 4385. [3] Shioya, N. et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 13472.

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

京都大学 化学研究所 複合ナノ解析化学 根本 隆

背景と目的

電子線エネルギー損失分光法(EELS)を走査型透過電子顕微鏡法と組み合わせることで、高い空間分解能で物質中の電子状態を局所分析することが可能であり、位置座標とスペクトルを対応づけたスペクトラムイメージングを行うことができる。EELS のスペクトルの低エネルギー損失領域には試料のプラズモン振動に対応するスペクトルが現れ、物質の電磁場に対する応答の空間分布を測定することが可能となるほか、様々な情報を得ることができる。しかし、これらの信号は複雑に重畳しており、その詳細な解釈にあたってはモデルの構築と計算機シミュレーションを組合せ、スペクトルの起源を明らかにする必要がある。詳細な解析に対応した計算負荷に対応するため、当スーパーコンピュータシステムの利用を試みている。

検討内容

本年は昨年に引き続き低エネルギー損失領域の解析を中心に検討を行った。試料を複数のダイポールで近似して表現する DDA 法を用い、試料近傍を通過する電子線のエネルギー損失を再現することで試料近傍を通過する電子線によるプラズモン励起確率の分布を求めた。

結果

絶縁体基板である酸化マグネシウム微粒子上に担持した様々な大きさ、形状の銀ナノ粒子を対象としたシミュレーションを行い、銀微粒子上に励起されるプラズモンの励起確率を求めた。電子顕微鏡像から構築したモデルを用いたシミュレーション結果は、実験で得られたスペクトルをよく再現しており、粒子の形状及び基板からの距離がスペクトルに大きな影響を与えていることが明らかとなった。

発表論文

なし

参考論文

投稿準備中

タンパク質の X 線結晶構造解析
X-ray Crystal Structure Analysis of Proteins

京都大学化学研究所 先端ビームナノ科学センター構造分子生物科学研究領域
山内 貴恵

【背景と目的】アスパラギナーゼはアスパラギンからアスパラギン酸への加水分解の触媒として作用する酵素で、抗腫瘍効果を発揮することから急性リンパ性白血病の治療薬として、また食品製造時に食品中のアスパラギンに由来する猛毒アクリルアミドの発生を抑える抑制剤として応用されている。本研究では、80℃以上の高温で生育可能な超好熱性古細菌 *Thermococcus litoralis* DSM 5473 由来アスパラギナーゼ相同体 (*TIASNase*) を対象にX線結晶構造解析を行った。*TIASNase* は L-Asn, D-Asn の両異性体に対して高い活性を示す点でこれまでに知られているアスパラギナーゼとは大きく異なる性質を持っており、本酵素の活性発現機構の解明はアスパラギナーゼを主成分とする酵素製剤の開発において有用な知見を与えるものと期待される。

【検討内容】大腸菌内で大量発現させ精製した *TIASNase* を結晶化し、高エネルギー加速器研究機構のビームラインにて X 線回折強度データを収集した。得られたデータセットをプログラム *HKL2000* で処理し、*MOLREP* を用いて分子置換法により位相を決定した。得られた初期構造モデルについて Rigid body refinement を行い、さらに *COOT* および *Refmac5* を用いて構造モデルの修正と精密化を行うことで *TIASNase* の粗構造を得た。他生物種由来のアスパラギナーゼとの構造比較は *Discovery Studio* の分子描画機能を利用して行った。

【結果】*TIASNase* は結晶中で同一のサブユニットからなる二量体を形成しており、各サブユニットは N 末端ドメインと C 末端ドメインがリンカーによって連結された構造をとっていた。N 末端ドメインの基本骨格はフェレドキシン様フォールディングであり、その一部には通常右巻きである β - α - β モチーフが左巻きにフォールディングしているという珍しい構造がみられた。C 末端ドメインは 5 本の α -ヘリックスと 4 本の β -ストランドで構成されており、主に C 末端ドメイン同士の相互作用で三日月型の二量体を形成していた。I 型大腸菌アスパラギナーゼや II 型アスパラギナーゼは dimer of dimers と呼ばれるタイプの、二つの二量体からなる四量体構造を形成しており、*TIASNase* の二量体構造はこれらの二量体部分の構造と類似していた。しかしながら酵素学的性質は大きく異なることから、活性発現機構の点では大きな差異があると考えられる。現在これらを比較検討するために詳細な解析を行っている。

【謝辞】本研究は、京都大学化学研究所 共同利用・共同研究拠点(課題番号:2015-13)の助成を受けたものです。

X 線管からのスペクトル解析

X-ray spectrum analysis from X-ray tube

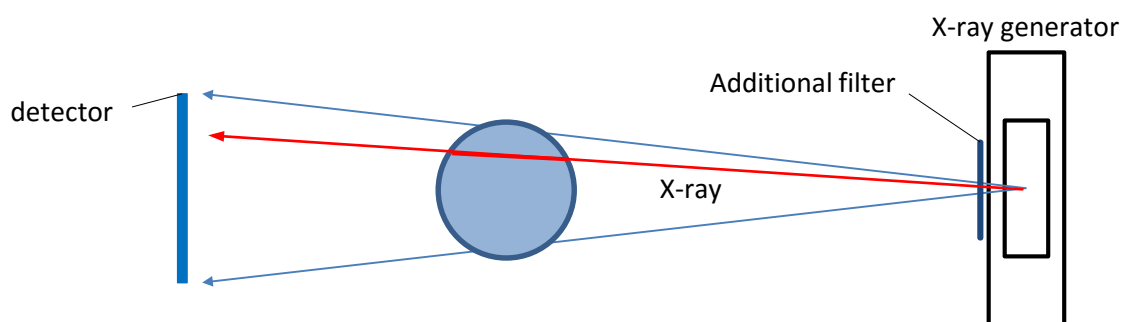
京都大学化学研究所 先端ビームナノ化学センター 構造分子生物科学 正岡聖

背景と目的

実際に被写体にコーンビーム状の X 線束を照射してディテクタで得られる X 線のスペクトルやディテクタ位置での分布(プロファイル)と計算によって得られるスペクトルや分布が一致していることを確かめ、実験が正しく行われていることを確かめる。

検討内容

実際の撮影では、単純な物理ファントムにコーンビーム状の X 線束を照射し、ディテクタの位置を移動しながら各位置でのスペクトルと光子数を計測した。そして、それと同様のジオメトリを数学ファントムで再現して、各ディテクタ位置でのスペクトルと光子数を計算し、両者を比較した。



結果

上記結果を比較することにより、実験値と計算値が一致することを確認した。

今後は従来とは異なる仕様の X 線管で同様の計算を行い、これが X 線スペクトルやプロファイルに与える影響、それによって画質がどの程度向上するかを検討していく予定である。

高効率有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成

Design and Synthesis of Metal Catalysts toward Efficient Organic Molecular Transformation

京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター典型元素機能化学領域 中村 正治

研究成果概要

我々は最近、鉄塩と N-ヘテロサイクリックカルベン(NHC)配位子を組み合わせることで、ハロゲン化アリールとアルキルグリニャール反応剤との間のクロスカップリング反応が効率良く進行することを見出した(図 1a)。本反応はこれまでに報告された他の遷移金属触媒では困難であったカップリング反応を可能とし、広範な有機化合物の骨格構築反応への応用が期待される。同反応は、フッ化鉄を触媒前駆体として用いた場合に高い選択性を示す一方、塩化鉄を用いた場合は低選択性にとどまる。本研究では放射光を用いた in situ XAFS 測定と量子化学計算を併用することで上記反応の有機鉄反応活性種の溶液構造の解析を行い、対アニオンが塩化物イオンの場合とフッ化物イオンの場合で異なる選択性が発現する理由を明らかにした。

我々が開発した有機溶液フロー反応・計測システムを用い、NHC 配位子とトリメチルシリルメチルマグネシウム臭化物を塩化鉄(III)に加え反応活性種の溶液を調製し、鉄の K-edge X 線吸収スペクトルを測定した。塩化鉄を触媒前駆体とした場合、図 1b に示すような XANES スペクトルが得られ、還元された鉄二価の $\text{Fe}(\text{CH}_2\text{TMS})_2(\text{SiPr})$ と考えられる中間体の生成が強く示唆された。X 線結晶構造データベースから入手した原子座標を用い、XAFS スペクトルに対するシミュレーションを行った結果、X 線結晶構造と溶液構造の間に良い一致が得られた。一方、フッ化鉄を前駆体として同様な XAFS 測定を行ったところ、全く異なる XANES および XAFS スペクトルが得られた。量子化学計算で求めた構造を用いたシミュレーションの結果、有機フルオロ鉄(II)アート中間体の生成が示唆された。鉄塩の対アニオンの違いにより、異なる反応活性種が生成していることが実験および理論的に示された。

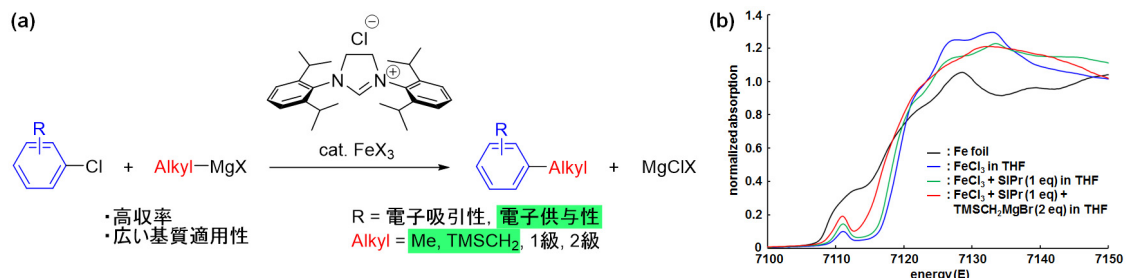


図 1. (a) 鉄-NHC 触媒アルキルカップリング反応 (b) 塩化鉄-NHC 触媒溶液の XANES スペクトル

発表論文(謝辞なし)

1. Agata, R.; Iwamoto, T.; Nakagawa, N.; Isozaki, K.; Hatakeyama, T.; Takaya, H.; Nakamura, M. *Synthesis* **2015**, 47, 1733–1740.

包括的ウイルスゲノム研究のためのデータリソースと 多様性解析法の開発

Development of data resource and methods of analyses of diversity for comprehensive study of viral genome.

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
三原知子

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ウイルス-宿主相互作用解析のためのデータベースの開発と自然環境における DNA ウイルスの系統多様性の定量的解析法の開発を行った。データベースの開発では、ウイルスとその宿主情報を掲載した Virus-Host DB を構築し、さらにそれらの情報を用いてウイルスと宿主間の相互作用についての解析も行った。系統多様性の定量的解析法の開発では、発見されてから間もないメガウイルスという巨大 DNA ウイルスの系統多様性を、細胞性生物との比較により、定量的に求める手法の開発を行った。

研究 1 ウイルス-宿主相互作用解析のためのデータベースの開発

ウイルスは宿主の転写・翻訳システムを利用して自らを複製する存在であるとともに感染した宿主にも影響を与える存在であるため、宿主の特定はウイルスを理解する上で重要である。特定のウイルスだけでなく、ウイルス全体を網羅するような情報はウイルスと宿主の相互作用をシステムティックな研究に必要であるが、そのような情報を精度よく網羅的に蓄積しているデータベースはこれまで存在していなかった。そこで我々は、RefSeq データベースに登録されているウイルスに関して、他のデータベースや論文等の文献からの宿主情報を提供し、他のウイルス関連のデータベースへのリンク情報も付加した Virus-Host Database を構築し GenomeNet 内で公開した (<http://www.genome.jp/virushostdb/>)。本データベースは、様々なソースからの宿主情報を Taxonomy ID という扱いやすい形式に変換して提供している点と、既存のウイルスの多くを網羅しているという点で、これまでにないデータベースである。

研究 2 自然環境における DNA ウイルスの系統多様性の定量的解析法の開発

2003 年に初めてメガウイルスファミリーのウイルスが発見されて以来、現在までに見つかっているメガウイルスは少ないが、メガウイルスが細胞性生物と同等の極めて高い系統多様性を有していることが予想された。そこで本研究では、メガウイルス配列が豊富に存在する海洋のメタゲノムデータからメガウイルスと細胞性生物に共有され、系統関係を良く反映している RNA ポリメラーゼ遺伝子配列を取得し、その配列の多様性を比較することにより、メガウイルスの系統多様性を定量的に解析した。

Richness と Phylogenetic diversity スコアという 2 つの系統多様性の指標を用いて、比較した結果、メガウイルスの系統多様性は、真正細菌と古細菌よりも上回ることが明らかとなった。この結果は、メガウイルスが多様なウイルスグループであり、まだ見つかっていないメガウイルスが多く存在していることを示唆している。

発表論文 (謝辞あり)

Tomoko Mihara, Yosuke Nishimura, Yugo Shimizu, Hiroki Nishiyama, Genki Yoshikawa, Hideya Uehara, Pascal Hingamp, Susumu Goto and Hiroyuki Ogata
“Linking virus genomes with host taxonomy”
Viruses (Accepted)

免疫系分化タンパク質の系統発生
Phylogeny of immune differentiation proteins

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 吉川元貴

研究成果概要

有顎脊椎動物の獲得免疫系では、リンパ系細胞において T 細胞と B 細胞が主要因子として働き、抗原受容体として T 細胞受容体(TCR)と B 細胞受容体(BCR)がそれぞれ機能する。これらは、免疫グロブリン(Ig)型の抗原受容体であり、V(D)J 遺伝子再構成により、多様な抗原受容体を作り出している。一方、無顎脊椎動物(円口類)の獲得免疫では、Ig 型抗原受容体ではなく可変性リンパ球レセプター(VLR)を抗原受容体として用いていて、VLRA と VLRB がそれぞれ異なるリンパ系細胞で発現している。VLR では、可変領域に複数のロイシンリッチリピート(LRR)が用いられ、多様な配列を持つ LRR モジュールが複数個連結されて、TCR や BCR に匹敵する多様性を作り出している。VLRA 陽性細胞と VLRB 陽性細胞は遺伝子発現が大きく異なり、VLRA 陽性細胞は T 細胞に近い特徴を持ち、VLRB 陽性細胞は B 細胞に近い特徴を持つことが知られているが、有顎脊椎動物のリンパ系細胞と無顎脊椎動物のリンパ系細胞の分化機構が共通しているかははっきりしない。

本研究では、有顎脊椎動物と無顎脊椎動物のリンパ系細胞の分化に関する知見を得るため、分化を調節するタンパク質である E タンパク質とその阻害因子として働く Id タンパク質の系統解析を行った。系統解析の結果は、有顎脊椎動物と無顎脊椎動物の分岐以前に E タンパク質と Id タンパク質の遺伝子重複が起き、その後遺伝子の消失が起こったことを示唆した。また、E タンパク質と Id タンパク質がリンパ球の分化に関わる機能を獲得したのは、有顎脊椎動物と無顎脊椎動物の分岐後であったことが推測された。引き続き、リンパ系細胞の分化に関わる他のタンパク質を用いた系統解析を進めていく予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年度は共になし。

参考文献

Guo P, Hirano M, Herrin BR, Li J, Yu C, Sadlonova A, Cooper MD. Dual nature of the adaptive immune system in lampreys. *Nature* 459.7248: 796-801. (2009)

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

京都大学化学研究所数理生物情報研究領域 阿久津 達也

研究成果概要

我々は多くの生物情報ネットワークが持つスケールフリー(次数分布のべき乗則)という性質についてこれまで継続して研究してきた。近年は最小支配集合(MDS)を用いたスケールフリーネットワークの制御問題の定式化とその解析を行ってきた。2014年に我々はMDSにおける必須頂点(critical node)という概念を提案し、その理論解析を行い、計算手法を開発し、タンパク質相互作用ネットワーク解析への応用などを行った。今年度はそのMDSにおける必須頂点という概念を二部グラフ構造を持つネットワーク、すなわち、二種類の異なるタイプの分子から構成されるネットワークに拡張し、その計算手法を開発した。さらに、この手法をncRNAとタンパク質から構成される二部ネットワークの解析に適用した。その結果、必須頂点は病気と関係する報告されているncRNAに対応することが多いなどに知見が得られた[1]。

一方、我々は遺伝子ネットワークの離散数理モデルであるブーリアンネットワークについても継続して研究してきた。今年度はこのブーリアンネットワークの確率的な拡張である確率ブーリアンネットワークの推定手法について研究を行った。確率ブーリアンネットワークの推定については従来からいくつかの手法が提案されていたが、数理的な保証のないヒューリスティックなものがほとんどであった。そこで本研究において、十分なサンプルが与えられた場合に厳密に同定可能な確率ブーリアンネットワークのクラス、および、同定不可能なクラスを明らかにすべく研究を行った。最初から一般の確率ブーリアンネットワークを扱うのは困難であるので、1個の頂点に2個のブール関数が割り当てられ、かつ、ブール関数としてはリテラルの論理和もしくは論理積からなるものを中心に検討した。その結果、「2個のブール関数が同じ次数を持ち、かつ、同じ変数に関する正負のリテラルが同時に出現しない場合には確率に関係なく厳密に同定可能である」などの理論的成果を得た[2]。

発表論文(謝辞なし)

- [1] H. Kagami, T. Akutsu, S. Maegawa, H. Hosokawa and J. C. Nacher, Determining associations between human diseases and non-coding RNAs with critical roles in network control, Scientific Reports, 5:14577, 2015.
- [2] X. Cheng, T. Mori, Y. Qiu, W-K. Ching and T. Akutsu, Exact identification of the structure of a probabilistic Boolean network from samples, IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, in press.

整数計画法による文字列の集合上の確率分布に対する中央文字列と中心文字列
Integer linear programming approach to median and center strings for a probability distribution
on a set of strings

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター数理生物情報 林田守広

研究成果概要

文字列の集合上の確率分布に対するレーベンシュタイン距離での中央文字列あるいは中心文字列を求める問題は NP 困難であり難しい. 本研究では整数計画問題による定式化を提案した. 有限個の文字からなるアルファベットを A とし, 文字列の集合 A^* 上の確率分布を $p(s)$ とする. 二つの文字列 s, t の間のレーベンシュタイン距離を $d(s, t)$ とするとき, 中央文字列 m はすべての文字列 s に対して $p(s)d(m, s)$ の和を最小とする A^* の元である. また中心文字列 c はすべての文字列 s における $p(s)d(c, s)$ の最大値を最小化する文字列であると定義される.

レーベンシュタイン距離は, 動的計画法を用いて与えられた文字列の長さの多項式時間で計算可能であるが, 整数計画問題における線形式として直接記述することは困難である. そこで, 各文字の間での挿入, 削除, 置換の有無を整数計画問題中の変数として表現した. 中央文字列を求める問題では, これらの変数を使って $p(s)d(m, s)$ の和を表現し, これを最小化する問題として定式化した. 中心文字列を求める問題では, $p(s)d(c, s)$ がある値 h 以下であるという制約を条件として加え, h を最小化する問題として定式化した. これらの整数計画問題は厳密に中央文字列および中心文字列を解とする一方, 文字列の探索空間は膨大である. そのため高い確率をもつ文字列どうしのレーベンシュタイン距離が小さい場合に, 厳密解法に制約条件を加えることで探索空間を縮小し近似解を求める定式化の方法も提案した.

DNA あるいは RNA の塩基配列は 4 種類の文字からなっていることより $|A|=4$ としていくつかの A^* 上の確率分布を用いて計算時間を複数回計測しその平均と分散を計算した. 中央文字列, 中心文字列を求める問題は NP 困難であるため, 正の確率をもつ文字列の数また文字列長の増加について, 提案する厳密解法では急激に計算時間が増加した. 一方, 近似解法では緩やかな増加に留まった.

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

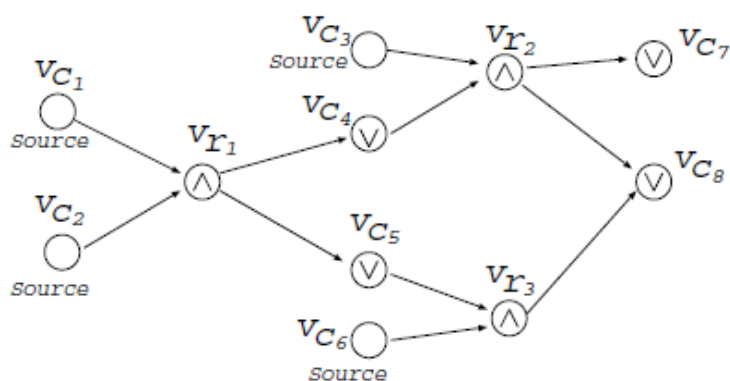
Hayashida, M, and Koyano, H, Integer linear programming approach to median and center strings for a probability distribution on a set of strings, *The seventh International Conference on Bioinformatics Models, Methods and Algorithms*, Feb. 2016.

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

京都大学化学研究所数理生物情報 田村 武幸

研究成果概要

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



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

本研究では、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、微生物の代謝ネットワークにおいて、ホストネットワークの内部の反応を削除したり外部の反応を追加したりして、現在生成されてしまっている毒性化合物(不必要化合物)を生成不能にしたり、現在生成できていない必要化合物を生成できるようにする問題に対する高速アルゴリズムを開発・実装した。平成 27 年 9 月に東京で開催された GIW/InCoB2015 において成果を口頭発表した。

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

京都大学化学研究所化学生命科学研究領域 緒方 博之

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、巨大 DNA ウイルスゲノムおよびウイルスゲノムの解析・関連ツール開発を行った。具体的には(1)メガウイルス科の多様性をメタゲノムデータに基づき定量的に行った(三原知子他、論文執筆中)、(2)京都大学農学研究科との共同研究により、大阪湾および *Tara Oceans* メタゲノムデータを利用して、1300 のウイルスゲノムを決定した(西村陽介他、論文投稿中)、(3)メガウイルス科の DNA 複製酵素遺伝子の解析を行った(ロマン・マチュー＝ブラン他、論文投稿中)、(4)農学研究科との共同でメガウイルス科の DNA ポリメラーゼ遺伝子を標的とするプライマーの作成を行った(Hingamp 他)、(5)広島大学との共同で *Ralstonia* フェージのゲノム解析を行った(三原知子他、論文投稿中)、(6)メタゲノムデータ MGENES の整備を行った(五斗進他、公開済)、(7)ウイルスーホストデータベースを開発した(三原知子他、論文受理)、(8)レトロウイルスやレトロトランスポゾンの頻度解析を *Tara Oceans* メタゲノム・メタトランスクリプトームデータを用いて解析した(Lescot 他、論文発表済)、(9)細胞性生物とウイルス遺伝子の多様性比較(隈部彰彦他)を行った。ウイルス関連以外の研究では、(10)脊椎動物における免疫系遺伝子の解析(吉川元貴他)、(11)植物の転写制御配列の解析(西山拓輝他)、(12)エパクレオンの腸内細菌に対する影響の評価(西山拓輝他)、(13)KEGG オーソロググループのプロファイル生成(五斗進他)を行った。

発表論文(謝辞あり)

1. Mihara T., Nishimura Y., Shimizu Y., Nishiyama H., Yoshikawa G., Uehara H., Hingamp P., Goto S, Ogata H. Linking virus genomes with host taxonomy. **Viruses** (2016). [Accepted]

発表論文(謝辞なし)

1. Guidi L., et al. Plankton networks driving carbon export in the oligotrophic ocean. **Nature**, doi:10.1038/nature16942., (2016).
2. Gallot-Lavallee L., et al. The 474-kilobase-pair complete genome sequence of CeV-01B, a virus infecting Haptolina (Chrysochromulina) ericina (Prymnesiophyceae). **Genome Announc.**, 3, e01413-15 (2015).
3. Lescot M., et al. Reverse transcriptase genes are highly abundant and transcriptionally active in marine plankton assemblages. **ISME J.**, doi:10.1038/ismej.2015.192. (2015).
4. Massana R., et al. Marine protist diversity in European coastal waters and sediments as

- revealed by high-throughput sequencing. **Environ. Microbiol.**, 17, 4035-4049 (2015).
5. Clerissi C., et al. Deep sequencing of amplified Prasinovirus and host green algal genes from an Indian Ocean transect reveals interacting trophic dependencies and new genotypes. **Environ. Microbiol. Rep.**, doi:10.1111/1758-2229.12345. (2015).
 6. Halima N.B., et al. Identification of a new oat beta-amylase by functional proteomics.
 7. **Biochim. Biophys. Acta**, (2015)
 8. Kopf A., et al. The ocean sampling day consortium. **GigaScience**, 4, 27 (2015).
 9. Takemura M., et al. Evolution of eukaryotic DNA polymerases via interaction between cells and large DNA viruses. **J. Mol. Evol.**, 81, 24-33 (2015).
 10. Pesant S., et al. Open science resources for the discovery and analysis of Tara Oceans data. **Sci. Data**, 2, 150023 (2015).
 11. Sunagawa S., et al. Structure and function of the global ocean microbiome. **Science**, 348, 1261359 (2015).
 12. de Vargas C., et al. Eukaryotic plankton diversity in the sunlit ocean. **Science**, 348, 1261605 (2015).
 13. Lima-Mendez G., et al. Determinants of community structure in the global plankton interactome. **Science**, 348, 1262073 (2015).
 14. Villar E., et al. Environmental characteristics of Agulhas rings affect interocean plankton transport. **Science**, 348, 1261447 (2015).
 15. Brum J.R., et al. Patterns and ecological drivers of ocean viral communities. **Science**, 348, 1261498 (2015).
 16. Johannessen T.V., et al. Characterisation of four novel viruses reveal huge diversity among viruses infecting Prymnesiales (Haptophyta). **Virology**, 476, 180-188 (2015).
 17. von Dassow P., et al. Life cycle modification in open oceans accounts for genome variability in a cosmopolitan phytoplankton. **ISME J.**, 9(6), 1365-1377 (2015).

海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究

Research in evolution and ecology of marine planktonic communities

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

研究成果概要

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

1/ to reconstruct phylogenies of DNA repair proteins encoded in the genome of Megavirales (eukaryotic viruses) and their cellular homologs. Output of this analysis was used to gain insight into the potential origin of these proteins. This work has been submitted for publication to a peer reviewed journal (Current Opinion in Microbiology) with the appropriate acknowledgement to the SuperComputer System.

2/ to align next generation sequencing data against the draft genome sequence of *Triparma laevis*, a small-sized unicellular marine phytoplankton. And to then call nucleotide variation along this genome sequence in order to get an insight into the ploidy level of this organism. This is a work done in collaboration with Dr. Akira Kuwata (Tohokku National Fisheries Research Institute, Japan).

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

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

平成27年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピューターシステム 利用報告書
NGSを用いた転写制御および細菌叢の研究

Study of transcriptional regulation and microbiomes by NGS technologies

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
西山拓輝

1. Analysis of intestinal bacteria:

This research was conducted in collaboration with Prof. Okazaki of Kinki University Medical School. Ulcerative colon (UC) is a form of inflammatory bowel disease. Case studies reported by Higashi-Osaka-Shiritsu-Higashi hospital (東大阪市立東病院), have shown patients recovering from UC by treatment with elemental diet (ED). ED is also known to be effective for Crohn's disease (CD), and a change of intestinal microbiota has been observed in CD patients when compared to other patients who have not received ED.

In our research we will be seeing whether or not Lipacreon, a treatment given to patients of pancreatitis for better food digestion, will have the same effect on intestinal microbiota as ED had. We will be examining three types of mouse: Lipacreon treated mouse, Elemental (elemental diet) treated mouse, and control mouse. Bile and various parts of intestine were taken from each mouse and its microbiota was examined by Next Generation Sequencer (NGS). We are currently analyzing the NGS data and are planning to continue the research.

2. Characterization of *Arabidopsis thaliana* ARR1 Binding Sites:

This research was conducted in collaboration with Prof. Aoyama of Kyoto University Institute of Chemical Research. Cytokinins promote the growth of *Arabidopsis thaliana* (At) by sending a signal through the His-Asp phosphorelay. This causes Arabidopsis response regulator 1 (ARR1) to activate a group of plant growth related genes.

5'-GAT(C/T)-3' (core motif) is essential for ARR1 to bind to DNA strands, and it has been discovered that the extended version of the motif, 5'-AAGAT(C/T)TT-3' (extended core motif), appears more frequently in the promoters of 23 genes that are known to be directly regulated by ARR1 when compared to randomly chosen promoters [4][5]. Chromatin immunoprecipitation sequencing (ChIP-Seq) data of non-treated (control), water treated (negative control), and benzyl adenine (BA, activator of ARR1) treated *Arabidopsis thaliana* (At) plants were used to identify the binding sites of ARR1.

By analyzing the relationship between the occurrence of the core motif and the ChIP-Seq scores, we have found that ARR1 binding regions of BA treated At with a score ≥ 30 tended to have a higher density of core motif than randomly chosen sequence regions. This study is planned to be continued in the next year.

生体分子情報データベースの開発

Development of Databases for Biomolecular Information

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター化学生命科学 五斗 進

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、生体分子情報データベースおよびバイオインフォマティクス技術の開発に取り組み、その成果をゲノムネット (<http://www.genome.jp/>) として広く公開している。平成 27 年度は、以下のデータベースおよびツールの開発と改良を行った。

- Virus-Host Database: RefSeq にゲノムが登録されているウイルスの宿主情報を RefSeq や UniProt から抽出するとともに、マニュアルでアノテーションしたデータベースを開発し、公開した (<http://www.genome.jp/virushostdb/>)。
- MGENES: Tara Oceans の 243 サンプルのアノテーションを公開し、機能分類情報のパイチャート表示を実装した (http://www.genome.jp/kegg/catalog/org_list3.html)。
- Ortholog Cluster (OC): KEGG GENES 4,060 生物種分のオーソログクラスターを計算し、更新した (<http://www.genome.jp/tools/oc/>)。
- RAxML / FastTree: 系統樹作成ツールをウェブ上の入力から利用できるようにし、公開した (<http://www.genome.jp/tools/raxml/>, <http://www.genome.jp/tools/fasttree/>)。
- KAAS: ゲノムの機能アノテーションツールにおいて、高速ホモロジー検索システムである GhostX と GhostZ を選択できるように改良した (<http://www.genome.jp/tools/kaas/>)。
- MAPLE: メタゲノム機能評価ツールにおいて、機能モジュールの評価方法を改良した版を公開した (<http://www.genome.jp/tools/maple/>)。
- E-zyme2: 平成 26 年度に公開した酵素遺伝子予測システムに関する論文を発表した (<http://www.genome.jp/tools/e-zyme/>) [1]。

発表論文(謝辞あり)

1. Moriya, Y., Yamada, T., Okuda, S., Nakagawa, Z., Kotera, M., Tokimatsu, T., Kanehisa, M. and Goto, S.; Identification of enzyme genes using chemical structure alignments of substrate-product pairs. *J. Chem. Inform. Modeling.* (in press) 2016.
DOI:10.1021/acs.jcim.5b00216

謝辞: 上記のデータベースとツールは以下の方々との共同研究で開発されています。緒方博之、Romain Blanc-Mathieu、三原知子、西村陽介、清水祐吾、吉川元貴、西山拓輝、Pascal Hingamp、金久實、中川善一(京大化研)、上原英也、大久保宏一(日本 SGI)、守屋勇樹、時松敏明(DBCLS)、山田拓司、小寺正明(東工大)、奥田修二郎(新潟大)、高見英人、荒井渉(JAMSTEC)、谷口丈晃(三菱総研)、竹本和弘(九工大)。

海洋メタゲノム解析
Marine metagenome analysis

京都大学 化学研究所 化学生命科学研究領域 隈部 彰彦

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ウイルスと原核生物遺伝子の多様性を比較した。本研究は、以下の 3 ステップで構成されている。

- ステップ1) データベースに登録しているウイルス遺伝子と原核生物遺伝子の多様性比較
- ステップ2) ウイルス遺伝子の多様性について、データベース中と環境サンプル中での比較
- ステップ3) 環境サンプルにおけるウイルス遺伝子と原核生物遺伝子の多様性比較

ステップ1では、データベース中に登録している全ウイルス遺伝子と全原核生物遺伝子をクラスタリングし、その結果からウイルス遺伝子と原核生物遺伝子の推定値を得た。クラスタリングとは、遺伝子を配列類似度によって分類し、グループ化することで、出来たグループをクラスターと呼ぶ。推定値とは、得られたクラスターの数や出来たクラスターの特徴から、サンプルの母集団の数を推定した値である。ステップ1では、ウイルス遺伝子のクラスターの数を実測値で 111,981、推定値で 403,476 であった。一方、原核生物遺伝子のクラスターの数、実測値で 2,951,860、推定値で 9,536,656 であった。ウイルス遺伝子のクラスターの数、原核生物遺伝子のクラスターの数の実測値で 3.79%、推定値で 4.23%であった。

ステップ1で、データベース中の遺伝子多様性を比較したが、データベースに登録されている遺伝子には偏りがある。なぜならデータベースに登録されている生物やウイルスは基本的に実験室で培養可能なものを対象としているからだ。そこでステップ2で、ウイルス遺伝子について、データベース中と環境サンプルで多様性を比較した。

ステップ3では、環境サンプル中で、ウイルス遺伝子と原核生物遺伝子の多様性を比較した。ある環境サンプルにおいて、ウイルス遺伝子と原核生物遺伝子を比較すると、ウイルス遺伝子のクラスターの数、実測値で 121,401、推定値で 486,500 であった。一方、原核生物遺伝子は実測値で 132,083、推定値で 586,438 であった。ウイルス遺伝子のクラスターの数の方は原核生物遺伝子のクラスターの数の実測値で 91.9%、推定値で 82.9%であった。依然、ウイルス遺伝子のクラスターの数の方が原核生物遺伝子よりも少なかったが、データベース中の差よりは小さいことがわかった。

発表論文:なし

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

京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター化学生命科学 清水 祐吾

研究成果概要

ポリケチドは多様な化学構造及び生物学的機能を持つ天然化合物群であり、また、その中には臨床的にも重要な薬物が多数含まれており、その薬理活性が多岐にわたることから新規薬物の探索候補としても注目されている化合物群である。ポリケチドはポリケチド合成酵素 (PKS) によって触媒されることで生合成される。PKS はそのタンパク質ドメイン構造とサブユニット構成によって 3 つのタイプ (I, II, III) に分類されている。タイプ I 及びタイプ II の PKS が 2 種以上のドメインを含むタンパクまたはタンパク複合体であるのに対し、タイプ III の PKS は基本的にケトシンターゼ (KS) ドメインのみによって構成されている。しかしながら、例外的にタイプ I とタイプ III の PKS ドメインを双方とも含むマルチドメインタンパク質が原生生物の細胞性粘菌 (*Dictyostelium discoideum*) から見つかり、タイプ I の PKS で触媒される反応により生成した化合物を基質としてタイプ III の PKS による反応を連続的に行うことが知られている。そこで本研究ではこのような複数ドメインを含むタイプ III の PKS の多様性を調べるため、配列類似度に基づくゲノムマイニング手法によってゲノムの決定された生物の遺伝子データベースである KEGG GENES に含まれるタイプ III の PKS 候補遺伝子を網羅的に抽出した。抽出された 1,044 の候補配列の内、バクテリア、植物、菌類から得られた 1,034 配列は全て単一ドメインであり、原生生物から得られた残りの 10 配列の内の 7 配列のみが複数ドメインであった。原生生物のゲノム配列のデータは量的にも系統的にも未だ限定されており、多様性を検討するには充分ではないと考えられることから、原生生物のトランスクリプトームデータを大量に含む Marine Microbial Eukaryote Transcriptome Sequencing Project のデータを用いて追加検討を行った。その結果、合計 307 の原生生物候補配列が得られ、これらは系統樹上において 5 つのクレードに分割された。このことは原生生物のタイプ III の PKS の多様性が以前考えられていたものよりも多様であることを示すものである。また、5 つのクレード中 4 つのクレードに含まれる配列は新奇なドメイン構成のマルチドメイン配列を数多く含んでいることがわかった。これらのことから複数ドメインにより構成されるタイプ III の PKS は現在のところ原生生物のみに確認され、また、その存在は原生生物において広く見られることがわかった。このような PKS は新奇機能を持っている可能性が高く、その機能解明が今後期待される場所である。

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

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

研究成果概要

本研究は、JST NBDC(科学技術振興機構・バイオサイエンスデータベースセンター)統合化推進プログラムのもとで進められる、プロテオーム統合データベース計画「jPOST」に於ける研究及び開発の一環として実施した。jPOST 計画は、

- 1) 実験研究によって得られ、論文発表と同時に公表が義務づけられた測定データ(いわゆる“生データ”)の deposit site である「jPOST Repository」
- 2) Repository にアップロードされた(再利用自由の)データを、独自に解析するための「再解析プロトコル」
- 3) 再解析プロトコルによって解析した結果を格納する(データ毎に作成される)Cube データベース、Cube データベースを統合した Globe データベース、それにユーザーのリクエストに応じてデータを表示する Slice データベース

の 3 部構成になっている。また外部サービス用のサーバをライフサイエンス統合データベースセンター(DBCLS)に設置し、データの処理を京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムを用いて行う予定である。

本研究では、これら全てについて基礎的研究、特にインターフェースの設計・構築、アノテーション情報の充実などを重点的に行う予定である。しかし本年度は、jPOST 計画初年度であり、また本年度予算が 6 月から執行されたこともあって、具体的な成果は 2 月時点ではまだ発表に至っていない。

しかし DBCLS 及び新潟大学との協力により、上記 1) jPOST Repository の開発を進めた結果、本 2016 年 4 月頃の一般公開が可能になる見通しである(論文はその後発表予定)。また現在、上記 2)の「再解析プロトコル」の検討を京都大学大学院薬学研究科と共同で進めており、この研究は次年度も継続予定である。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

本年度は共になし

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

有機 EL 素子の大面積化と低コスト化の観点から、塗布型有機 EL が注目を集めている。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、塗布型有機 EL 素子の発光材料として有用な熱活性型遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 材料、3ACR-TRZ の開発に成功した[1]。

TADF 材料は、有機 EL 素子中で生じる一重項および三重項励起状態を 100% の効率で光に変換できる発光材料として、近年、注目を集めている。TADF を発現させるためには、発光に関与する一重項および三重項励起状態のエネルギー差 (ΔE_{ST}) を小さくする必要があり、そのためには発光材料の HOMO と LUMO を空間的に分離させればよいことが知られている。本研究では、量子化学計算ソフト Gaussian 09 とその結果解析ソフト GaussView を用いて、 ΔE_{ST} の相対比較ならびに HOMO、LUMO の可視化に基づく材料探索を実施した。その結果、電子ドナーである 9,9-dimethylacridane (ACR) と電子アクセプターである triphenyl-1,3,5-triazine (TRZ) を組み合わせることで、小さな ΔE_{ST} を実現できることを見出した。

ドナーとアクセプターの結合部位
近くにある水素原子間の立体障害
により、ドナー-アクセプター間の
ねじれ角はほぼ直交している。こ
のことが、3ACR-TRZ における効
果的な HOMO-LUMO 分離につな
がったと考えられる (Figure 1)。

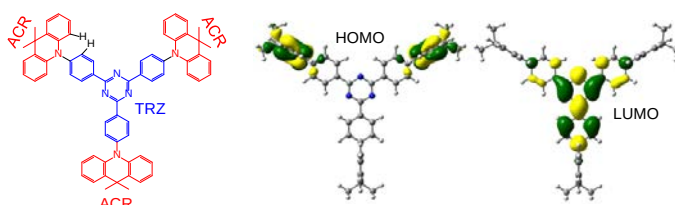


Figure 1. 3ACR-TRZ の分子構造ならびに HOMO、LUMO の分布。

3ACR-TRZ を発光材料として、塗布型有機 EL 素子 (素子構造 ITO (50 nm)/PEDOT:PSS (35 nm)/16 wt% 3ACR-TRZ:CBP (45 nm)/BmPyPhB (30 nm)/Liq (1 nm)/Al (80 nm)) を作製した。透明電極 (ITO) 付のガラス基板上に、ホール輸送層 (PEDOT:PSS) および発光層 (16 wt% 3ACR-TRZ:CBP) を塗布プロセスにより成膜した。電子輸送層 (BmPyPhB)、電子注入層 (Liq) および陰極 (Al) は真空蒸着により成膜した。上記の方法で作製した塗布型 EL 素子は最大で 18.6% の高い外部量子効率を示した。

発表論文 (謝辞あり)

[1] Wada, Y., Shizu, K., Kubo, S., Suzuki, K., Tanaka, H., Adachi, C. & Kaji, H. Highly efficient electroluminescence from a solution-processable thermally activated delayed fluorescence emitter. *Appl. Phys. Lett.* **107**, 183303 (2015)

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

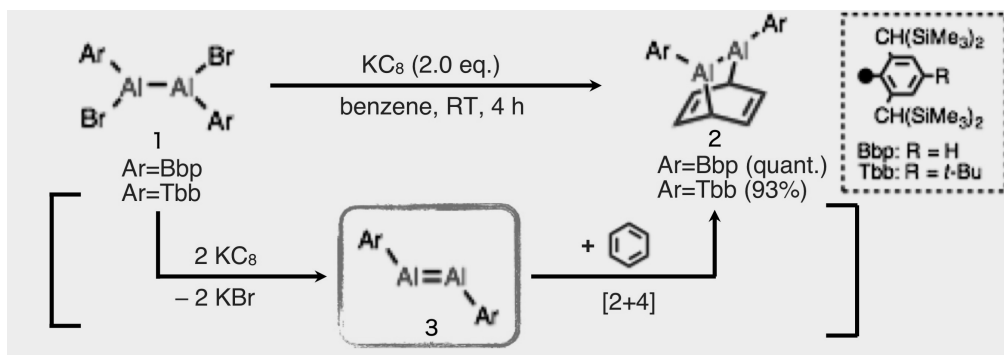
Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Elements Compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 時任 宣博

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期13 族元素であるアルミニウムの二重結合化合物(ジアルメン)の反応性を明らかにした。一般にアルミニウム同士の結合は弱く、単結合および二重結合化合物の合成例は少ない。特に極端に低いLUMOを有すると期待されるアルミニウム間二重結合化合物(ジアルメン)は安定な化合物としての合成例は皆無であり、その発生法や反応性には様々な研究分野において興味を持たれている。我々は、かさ高い置換基としてBbp 基または Tbb 基を有するジブロモジアルマン誘導体 **1** を合成することに成功し、これをベンゼン中で還元することにより、対応するジアルマバレン誘導体 **2** が得られることを報告している。すなわち、本反応に於いて中間体として対応するジアルメン **3** が生じ、溶媒として用いたベンゼンと **3** が[4+2]付加環化反応することで **2** を生じたものと考えられる。また、**2** の重ベンゼン中での NMR 挙動を詳細に検討した結果、**2** の C₆H₆ 部位は室温でも重ベンゼン C₆D₆ と交換していることが分かった。そこでジアルメン **3** とベンゼンとの反応によって **2** を生じる反応経路を理論計算により求めることとした。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは B3PW91/ 6-311+G(2d)<Al>/6-31G(d,p)<others>//B3PW91/6-31G(d)<Al>/3-21G(d)<others> を用いた。分子モデルは Bbp 置換基を持つリアル系について行うこととした。

上記量子化学計算の結果、ジアルメン **3** とベンゼンとの反応は 7.6 kcal/mol の反応活性化エネルギーで、12.6 kcal/mol 安定な付加体 **2** を与えることが分かった。すなわち、生成物 **2** からジアルメン **3** を与える障壁は 20.2 kcal/mol であり、室温でもゆっくり進行する可逆系であることが示唆された。これらの結果は実験結果と一致しており、正しい反応経路であると考えられる。



発表論文(謝辞あり):特になし

発表論文(謝辞なし):特になし

新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質

Theoretical Studies on the Properties of Novel Main Group Element Compounds

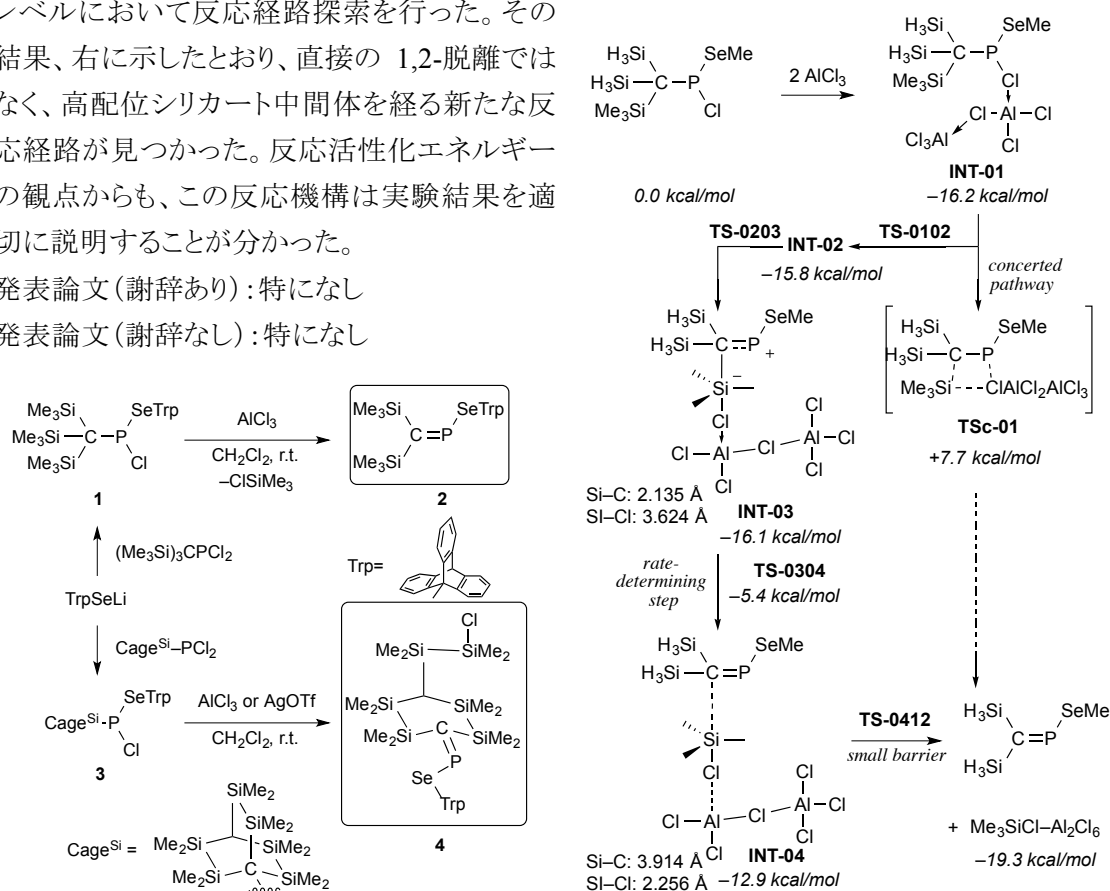
京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 笹森 貴裕

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、量子化学計算により、高周期 15 族元素であるリンの低配位化合物 $RSe-P=CR'_2$ の合成経路を検討した。一般に、リンを含む多重結合化合物は反応性が高く、安定な化合物として合成・単離することは困難である。立体保護による安定化を施した安定な化合物も数多く知られているが、合成法が限られており、簡便な合成法開発が重要である。我々は、リン上にかさ高いセレン置換基を有する系について、クロロホスフィン類 **1** および **3** をに対しルイス酸を触媒量添加することで 1,2-クロシラン脱離が進行し、対応するホスファアルケン **2** および **4** が生じることを見出した。前駆体 **3** に対し $AgOTf$ を加えた場合にも、クロシラン部位が残った **4** が得られた結果から、分子内移動であることが考えられる。そこで Gaussian 09 プログラムを用い、さらに PCM 溶媒モデル(塩化メチレン)を採用して、置換基の小さいモデル分子に対して、M06-2x/6-31G(2d,p) レベルにおいて反応経路探索を行った。その結果、右に示したとおり、直接の 1,2-脱離ではなく、高配位シリカート中間体を経る新たな反応経路が見つかった。反応活性化エネルギーの観点からも、この反応機構は実験結果を適切に説明することが分かった。

発表論文(謝辞あり): 特になし

発表論文(謝辞なし): 特になし



典型元素を含む新規結合様式の創出

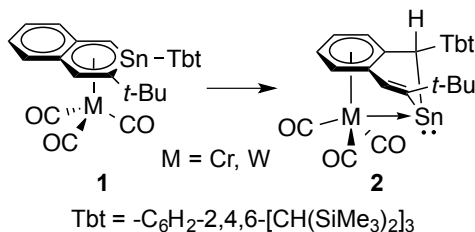
Synthesis of Compounds Having Novel Bonds of Main Group Elements

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、ナフタレンの 2 位の骨格炭素を一つ、炭素と同族のスズに置き換えた 2-スタンナナフタレンの 6 族金属 (Cr, W) 錯体 **1** およびその異性化生成物 **2** の性質に関して検証を行った。錯体 **1** は溶液中、スズ上の置換基の転位および金属トリカルボニル部位の SnC_5 環から C_6 環への移動を伴い、錯体 **2** に変化する。錯体 **2** のスズ原子は二価二配位のスタンニレンになっており、これまでに例のない特異な骨格変換反応であると同時に、金属-スズ原子間の距離は十分に相互作用可能なものであり、スズ原子の空の p 軌道に対する金属からの相互作用が示唆された。そこでいくつかの計算手法を用い、錯体 **2** における 6 族金属-スズ原子間の相互作用に関して検証を行うこととした。



まず手法として B3LYP を用い、Sn, Cr, W に基底関数 LANL2DZ および SDD を適用して、X 線結晶構造解析によって得られた構造を初期配置としてリアル分子 **2** の構造最適化 [6-31G(d) for C, H, O, Si] を行った。その結果、環骨格の構造パラメーターは比較的良い一致を示したものの、金属-スズ原子間の距離は実測値と大きなずれを示した (Table, nos. 1 and 2)。そこで同様の条件下、手法を M06-2X に変更したところ、そのずれは大きく改善した (nos. 3 and 4)。本系では特に M06-2X/LANL2DZ を用いた場合に最も良い結果を与えた。現在、得られた構造を用いて相互作用の詳細を検証するとともに、さらに構造・電子状態を適切に記述できる手法および基底関数を探索中である。

no.	method/basis set for Sn, Cr, W	Sn-Cr ($\text{\AA}$)	Sn-W ($\text{\AA}$)
1	B3LYP/LANL2DZ	3.23606	3.26875
2	B3LYP/SDD	3.26906	3.28497
3	M06-2X/LANL2DZ	3.15693	3.17467
4	M06-2X/SDD	3.18426	3.20348
	observed value	3.1151(7)	3.13591(15)

発表論文

なし

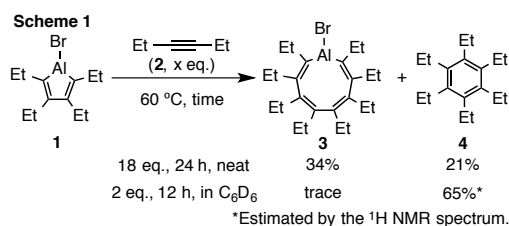
新規な光・電子物性を有する新規ヘテロ π 共役系典型元素化合物の創製

Development of novel hetero- π -conjugated molecules with unique optoelectronic properties

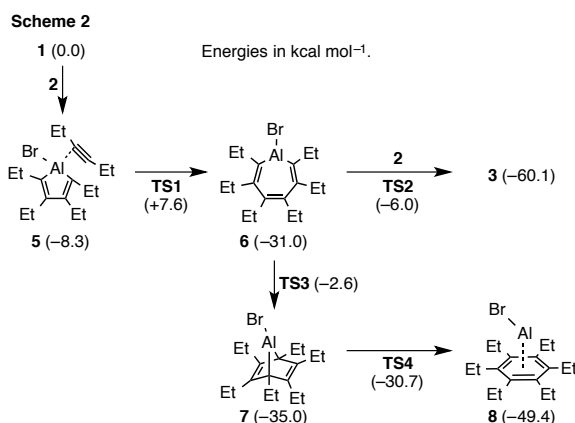
京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 吾郷 友宏

研究成果概要

本研究では京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、1-ブロモアルモール**1**^[1]と3-ヘキシシ(2)との反応に関する理論化学的検討を行なった。無溶媒条件下、**1**に対し18



当量の**2**を作用させたところ、9員環化合物**3**とヘキサエチルベンゼン(**4**)が生成した(**Scheme 1**)。一方、重ベンゼン中で**1**に2当量の**2**を作用させた際には**3**の収率が大きく低下し、**4**が主生成物として得られた。本反応の機構に関して、*Gaussian 09* (Rev. D.01)を用いて M06-2X/6-31G(d)レベルでの理論化学的検討を行ない、見出された反応経路を**Scheme 2**に示す。反応は、**1**のアルミニウム上に**2**が配位した中間体**5**から、Al-C結合へ**2**が挿入することで生じる**6**を鍵中間体として進行する。中間体**6**のノルボルナジエン型中間体**7**への異性化と、**7**からのBrAl:の還元的脱離によって、BrAl:と**4**の π 錯体である**8**が生成し、**8**の解離によって**4**が得られる。一方、**6**に対してもう一分子の**2**が挿入した場合には**3**が生じる。反応全体では**6**から**7**への異性化が最も活性化障壁が高く($\Delta G^\ddagger = 28.4 \text{ kcal mol}^{-1}$)、**6**への**2**の挿入の遷移状態は僅かにエネルギーが低いことから($\Delta G^\ddagger = 25.0 \text{ kcal mol}^{-1}$)、**1**に対し無溶媒条件で**2**を作用させた際に**3**が主生成物となった実験結果が説明できる。一方、**2**の当量・濃度を減らした際には、**6**と**2**との反応が**6**から**7**への異性化に比べて不利になるため、後者が主要な反応経路となり**4**が主に得られたものと考えられる。



発表論文(謝辞あり)

Agou, T.; Wasano, T.; Sasamori, T.; Guo, J.-D.; Nagase, S.; Tokitoh, N. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 9568-9571.

参考論文

[1] Agou, T.; Wasano, T.; Sasamori, T.; Tokitoh, N. *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 8148-8150.

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明

Theoretical Studies on the Properties of Novel Main Group Element Compounds

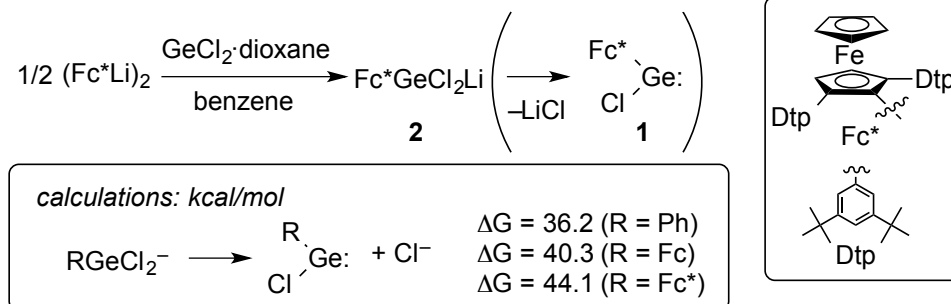
京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 鈴木 裕子

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期14族元素であるゲルマニウムの二価化学種(ゲルミレン)の性質を明らかにした。

一般にゲルマニウム二価化学種、ゲルミレンはs性の高い孤立電子対と被占有の4p軌道を有し、特に4p被占有軌道の高い求電子性に由来した高い反応性を示す。ゲルミレンを安定な化合物として合成・単離するためには、自己多量化を防ぐ立体保護基の導入が必要不可欠である。今回我々は、修飾可能なゲルミレンとしてクロロゲルミレンを目的化合物とし、また被占有4p軌道の安定化と立体保護を目的としてかさ高いフェロセニル基の導入を検討した。すなわち、かさ高いフェロセニルクロロゲルミレン(**1**)の合成・単離を目的として検討を行った。Fc*Li と GeCl₂·dioxane の反応により LiCl の脱離を伴い Fc*GeCl の発生を検討したが、Fc*GeCl₂Li(**2**) から LiCl の脱離が比較的遅いことが分かった。そこで、**2** から LiCl の脱離の遅さはフェロセニル基に由来する可能性を考え、Ph, Fc, Fc*の各置換基を有する RGeCl₂⁻における Ge-Cl 結合エネルギーを算出した。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは、M06-2x/6-311+G(2d)<Fe,Ge>/6-31+G(d,p)<others>//M06-2x/6-311+G(2d)<Fe,Ge>/6-31G(d,p)<others>を用いた。

上記量子化学計算の結果、R = Ph の系では 36.2 kcal/mol の結合解離エネルギーが必要であるのに対し、R = Fc の系では 40.3 kcal/mol、R = Fc*の系では 44.1 kcal/mol であることが分かった。すなわち、**2** からの LiCl 脱離が遅いのはフェロセニル基の効果と、Fc*基に存在するかさ高い 3,5-di-*t*-butylphenyl 基の立体効果の両方に由来することが分かった。



発表論文(謝辞あり): 特になし

発表論文(謝辞なし): 特になし

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Element Compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 郭 晶東

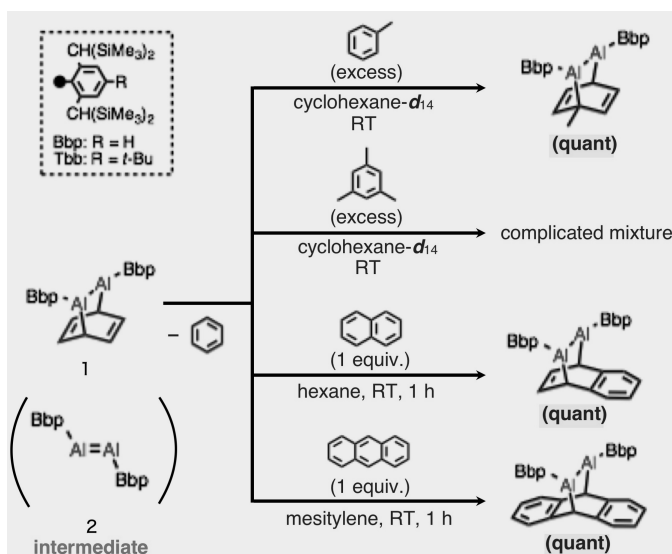
研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期13 族元素であるアルミニウムの二重結合化合物(ジアルメン)の反応性を明らかにした。一般にアルミニウム同士の結合は弱く、単結合および二重結合化合物の合成例は少ない。特に極端に低いLUMOを有すると期待されるアルミニウム間二重結合化合物(ジアルメン)は安定な化合物としての合成例は皆無であり、その発生法や反応性には様々な研究分野において興味を持たれている。我々は、かさ高い置換基としてBbp 基を有するジアルマバレン誘導体 **1** は、対応するジアルメン **2** のよい前駆体となることを報告している。実際、**1** に対しトルエン、ナフタレン、アントラセンなどのアレーン類を加え室温で放置したところ、ベンゼンが脱離し、ジアルメン **2** が各種アレーン類と[2+4]付加環化反応した生成物が定量的に得られることが分かった。しかし、アレーンとしてメシチレンを用いた場合には期待した[2+4]付加環化体は得られず、複雑な混合物が得られるのみであった。そこで、この反応において **1** からのジアルメン **2** の発生機構の妥当性を検証する目的で、本反応経路を理論計算により求めることとした。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは B3PW91/ 6-311+G(2d)<Al>/6-31G(d,p)<others>//B3PW91/6-31G(d)<Al>/3-21G(d)<others> を用いた。分子モデルはリアル系について行うこととした。

上記量子化学計算の結果、**1** からベンゼンの脱離によるジアルメン **2** の発生には 20.2 kcal/mol 程度の反応障壁があることが分かり、室温であればゆっくり進行する可能性が示唆された。また、発生した中間体のジアルメン **2** とナフタレンとの反応は障壁なく速やかに進行することも分かった。すなわち、**1** の熱反応により **2** が生じ、ジアルメンと各種アレーン類との[2+4]付加環化反応は速やかに進行する、という反応機構が支持された。

発表論文(謝辞あり): 特になし

発表論文(謝辞なし): 特になし



メタゲノム解析によって得られた新規海洋ウイルスゲノムの多様性の解明

Marine viral genomes from metagenomes revealed new genomic and genetic diversity

京都大学 化学研究所 化学生命科学 西村 陽介

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して構築したバイオインフォマティクスパイプラインにより、大阪湾ウイルスメタゲノムと大規模海洋サンプリング計画である *Tara Oceans* のウイルスメタゲノム配列から、1,600 の完全長ウイルスゲノム(EVG)を再構築した。EVG とリファレンスウイルスゲノムとの配列比較を効率的に行うサーバーViPTreeを開発し、網羅的な解析を行った結果、EVG のほとんどはリファレンスゲノムとの類似度が低く、新規のウイルスゲノムであることが分かった。これまでのメタゲノム解析から海洋中に普遍的かつ大量に存在し、海洋微生物や物質循環に重大な影響を与えていることが示唆されてきた未知のウイルス群(ウイルスダークマター)は、単離培養が困難なことからゲノム配列を解読できなかったが、今回の解析でこれらのウイルスゲノム配列が大量に得られたと考えられる。また、EVG の幾つかはこれまでにウイルスが発見されてこなかった宿主グループに感染することが遺伝子配列解析から予測された。さらに、他の幾つかの EVG は細胞成長を促進させる遺伝子を数多く持っており、宿主細胞に対して協調的な感染戦略をとっていることが示唆されるなど、従来のウイルス観を超えた遺伝子多様性が発見された。これらの研究結果に関して学会発表を行い、論文投稿中である。

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

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

ナノ炭素細線物質であるグラフェンナノリボン(GNR)は、分子幅・炭素骨格に依存した物性を有し、シリコンを凌駕する低消費電力・高性能の次世代半導体材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御する有機分子原料を用いる GNR 合成法として、我々は 2 ゾーンラジカル重合型気相成長法(2Z-RPCVD 法)を開発し、アームチェア型 GNR のバンドギャップの分子幅依存性を実験的に明らかにした。^[1]

2Z-RPCVD 法を用いて合成する新規 GNR の構造解析には、ラマン分光の実験結果と理論計算による解析が不可欠である。このため、既知の GNR のラマンスペクトルを理論計算により求め、構造評価の妥当性を評価した。アームチェア型 GNR である Poly(perianthracene)の周期構造分子モデルを Materials Studio Visualizer で構築し、計算パッケージとして CASTEP を使い、スーパーコンピュータラボラトリの計算機資源を活用し構造最適化、ラマンスペクトル計算を行った。理論的に得たラマンスペクトルは、実験結果をよく再現した(Figure 1)。

2Z-RPCVD 法により合成する新規 GNR 材料の実験的ラマンスペクトルの同定を、理論計算により求めるラマンスペクトルの比較により構造解析を行い、その電子状態と特性に関する解析を進めている。

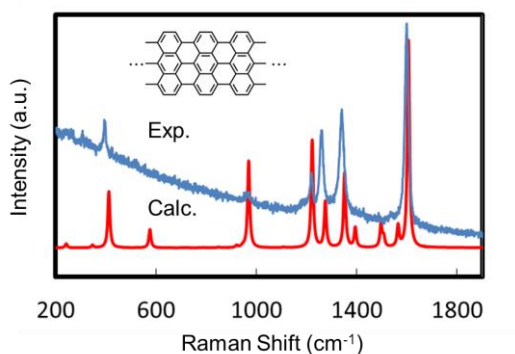


Figure 1. Experimental (blue line) and calculated Raman spectra (red line) of poly(perianthracene). Inset: molecular structure of poly(perianthracene).

参考文献 [1] H. Sakaguchi, Y. Kawagoe, Y. Hirano, T. Iruka, M. Yano, T. Nakae, *Adv. Mater.* 26(24), 4134-4138 (2014).

発表論文(謝辞あり) H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, submitted.

生体高分子の分子シミュレーション
Molecular simulation of biopolymers

京都大学生存圏研究所生物機能材料分野 田中文男

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、高等植物体中に存在する天然高分子であるセルロースを初めとする多糖、及びそれらの多糖の様々な誘導体の構造最適化、並びにそれらの構造から予測される特性を体系的に調べることを目的としている。

本年度は、セルロース系材料の熱分解安定性を改善するためには、どのような官能基を導入するのが良いかを調べるために、グルコースとセロビオース及びそれらの誘導体をモデルとして、非経験的計算法により、熱分解過程の素反応の解析と律速過程のエネルギーバリアーを算出し、何れの官能基を導入した場合に最も安定性が改善されるかを予測した。

検討するモデル分子としては、オリジナルのグルコース、セロビオース及びそれらの分子の水酸基を、アセチル基、ピバロイル基、ベンゾイル基で置換した誘導体を用いた。グルコース、及びセロビオースの還元末端のアノマー炭素に付く官能基については、 α 一位、 β 一位の両方について検討した。またグルコサン構造の生成についても、 α -グルコサン、 β -グルコサン(レボグルコサン)の両方の構造について検討した。

それぞれの分子の熱分解によるグルコサン生成反応の遷移状態探索、活性化エネルギー算出の結果、グルコース及びその誘導体で行った解析で得られた値からは、 β -アノマーからレボグルコサンが生成する場合のピバロイル誘導体、ベンゾイル誘導体が最も活性化エネルギーの値が高く、熱分解安定性が最も向上していることが分かった。 α -グルコサンを生成する反応や、アセチル誘導体からレボグルコサンを生成する反応は何れも活性化エネルギーの値はやや低く、特に、グルコースにアセチル基を導入した時には、オリジナルのグルコースの場合に比べ熱分解安定性はほとんど向上していないことが分かった。

セロビオースの場合については、現時点では、還元末端が β -アノマーのセロビオース、及びそのアセチル誘導体についての結果までしか確認できていないが、やはりアセチル誘導体では熱分解安定性は改善できないようであった。

以上のことからセルロース系分子にピバロイル基、あるいはベンゾイル基のような官能基を導入することにより、熱分解安定性を改善できる可能性に期待が持てた。

今後の予定としては、残りの解析を更に進めるとともに、これらの官能基の導入により、何故、熱分解安定性が向上するのか、その理由についても検討する予定である。

発表論文(謝辞あり)

田中文男; 2015 *Cellulose R & D*, p.24 (2015).

宇宙電磁環境を利用した地球衝突小惑星の軌道変更に関する研究
Orbital Deflection of Potentially Hazardous Asteroids Using Space Environment

京都大学 生存圏研究所 山川研究室

山口 皓平

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、小惑星近傍における帯電した宇宙機の軌道ダイナミクス解析を行った。これは、小惑星と宇宙機を人工的に帯電させ、両者の間に働くクーロン力を利用して小惑星を牽引、ひいては軌道変更する、クーロン力・アトラクタの検討の一環である。まず、小惑星の重心に原点を持ち、その公転運動と共に回転する回転座系における運動方程式を、宇宙機制御の観点から、より有利となる形式に変換した。これは、宇宙機と小惑星を無質量のロッドでつながった一つの衛星とみなし、小惑星と宇宙機間の距離、更に、元の回転座標系に対する姿勢を表す 2 つの角度を変数とするものである。また、得られた運動方程式を線形化し、行列の形式で記述することで、宇宙機のより詳細なダイナミクス解析を行った。検討にあたり、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムで提供されるアプリケーションの一つである **Mathematica** を利用することで、宇宙機の軌道制御則の提案も行った。小惑星の牽引力は、宇宙機と小惑星の距離に依存する。提案した制御則はこの距離を必要に応じて変化させるためのものであり、小惑星を効果的に軌道変更するために非常に重要な検討であるといえる。なお、この制御則の有用性は、非線形方程式に制御則を導入した結果を検証することによって確かめられている。**Mathematica** を用いることで数式のシンボリックな取り扱いが可能となり、複雑な数式変形などを効率的に進めることができた。更に、行列の取り扱いが容易となり、可制御性などの重要な要素の把握も効率的に進めることができた。また、以上の成果をとりまとめ、第 30 回 International Symposium on Space Technology and Sciences にて口頭発表を行った。更に、The ISTS Special issue of JSASS, Aerospace Technology Japan に論文として投稿し、現在査読中である(In Minor Revision)。

今後、これまでに得た成果をもとに、制御則のより詳細な検討を進める。特に、制御則の適用可能範囲は小惑星の軌道に依存することから、様々な小惑星近傍における宇宙機の運動を、行列で記述された線形方程式で表し、その性質を調査する。ひいては、より効果的な軌道変更ミッションの提案につなげることを目標とする。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

K. Yamaguchi and H. Yamakawa, Electric Solar Wind Sail Kinetic Energy Impactor for Asteroid Deflection Mission, The Journal of the Astronautical Sciences, First online, 2016, January, pp. 1-22, DOI: 10.1007/s40295-015-0081-x

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

Molecular Simulation on Functional Molecules and Transition-Metal complexes

京都大学大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学研究室

小松 徳太郎

研究成果概要

有機導電体をはじめとする機能性分子集合体は、電子輸送現象、プロトン伝導性、磁性、光電変換、分子認識などの多彩な物性とこれらの協働現象、高い設計性で注目されている。有機導電体(DIETSe)₂MX₄ (M = Fe, Ga; X = Cl, Br)は、電子供与性分子である DIETSe が分子平面をそろえてスタックした構造を含む擬一次元導電体である。

(DIETSe)₂MCl₄は、擬一次元的な伝導バンドに起因するスピン密度波(SDW)転移によって、10 K 付近で金属から半導体に変化する。また、M = Fe の場合、Fe³⁺のスピン反強磁性転移に伴って、2.5 K で再び電気抵抗の上昇が見られる。ハロゲンを Cl から Br に変更すると、SDW 転移は消失し、反強磁性転移温度は 7.2 K に上昇する。

このような相転移挙動における、物質—構造—物性相関、特に電気伝導を担う DIETSe 上の π 電子と Fe の局在した d 電子スピンの π -d 相互作用を完全に解明するには至っていない。(DIETSe)₂MX₄ の複雑な電気伝導挙動と磁性の起源ならびに π -d 相互作用を調べるため、第一原理バンド計算を行った。図 1 に示すように、M=Fe の場合はフェルミ準位(E_F)近傍に Fe の 3d バンドが存在し、局在スピンの DIETSe の π 軌道からなる伝導バンドに影響を与えていることが分かった。

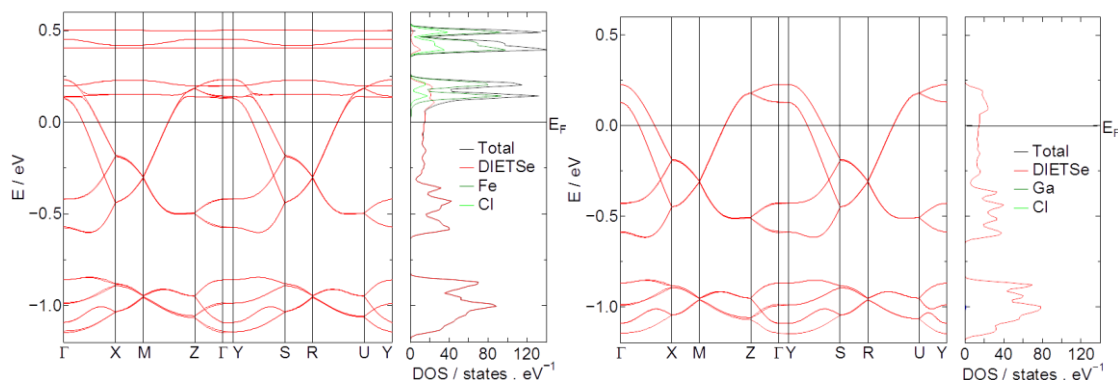


図 1: M=Fe(左)と M=Ga(右)の場合の(DIETSe)₂MCl₄ のバンド構造と状態密度。

発表論文(謝辞あり)

1. G. Kawaguchi *et al.*, Phys. Rev. B **93** (2016) 075124.
2. G. Kawaguchi *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **53** (2015) 10169 – 10172.

ドラッグライクテンプレートの開発研究
–スフィンゴシンキナーゼ阻害活性を有する Jaspine B 誘導体の構造活性相関研究–
Development of Drug-Like-Templates
–Structure-activity Relationship Study of Jaspine B-derived Sphingosine Kinase Inhibitors–

京都大学大学院薬学研究科 薬品有機製造学分野 大野 浩章

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、スフィンゴシンキナーゼ阻害活性を有する天然物誘導体 4-*epi*-Jaspine B の構造活性相関研究を実施した。

スフィンゴシンキナーゼ(SphK)は、スフィンゴシンからスフィンゴシン-1-リン酸へのリン酸化を触媒する酵素で、2 つのアイソフォーム(SphK1, SphK2)が存在する。SphK1 は、細胞の生存や増殖に関与し、腫瘍組織中での過剰発現が認められている。また、SphK2 をノックダウンすることで神経膠芽細胞腫の増殖が抑制されることが報告されており、SphK は抗癌剤開発における有望な分子標的として期待されている。一方で、SphK2 の過剰発現はアポトーシスを抑制するという報告もなされており、SphK の機能には未解明な部分が多い。そのため、それぞれのアイソフォームに選択的な阻害剤を創出することは SphK の機能を解明する上で重要である。

Jaspine B は、2002 年に沖縄産海綿 *Jaspis sp.* から単離されたスフィンゴシン類縁体であり、様々な腫瘍細胞株に対して増殖抑制活性を示す。これまでに我々は、Jaspine B 及びその全ての立体異性体が SphK1 及び SphK2 阻害活性を示し、中でも 4-*epi*-Jaspine B が最も強力な活性を示すことを明らかにしている。さらに、4-*epi*-Jaspine B の 2 位アルキル鎖長に関する構造活性相関研究を実施し、天然型と同じ炭素数 14 の誘導体が最も高い SphK 阻害活性を示すことを報告した。

今年度の本研究においては、アルキル基中にヘテロ原子・分岐炭化水素鎖・ベンゼン環等を導入した誘導体、およびヒドロキシ基またはアミノ基を修飾した誘導体を設計し、合成した。得られた誘導体について SphK 阻害活性の評価を行った結果、4-*epi*-Jaspine B と同等以上の SphK1 阻害活性を示す誘導体、SphK2 に対してより高い選択性を示す誘導体、および SphK2 に対してより高い選択性を示す誘導体を見出した。SphK1-スフィンゴシン複合体の X 線結晶構造を用いてドッキングシミュレーションを実施した結果、長鎖アルキル鎖が収まる疎水性ポケットの奥には空間的な広がりが存在することが示唆された。このため、さらに構造を最適化できる余地があるものと考えられる。

発表論文(謝辞あり):なし(投稿準備中)

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

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻
東 正信

研究成果概要

エネルギー資源枯渇の問題から、近年、水素をエネルギーキャリアとして用いる水素社会実現に向けた研究開発・実用化が進められている。光を用いて水を水素と酸素に分解する技術は、二酸化炭素を排出しないクリーンなプロセスであり、太陽光エネルギーの大部分を占める可視光照射下で働く光触媒の開発が行われている。複数のアニオンからなる混合アニオン化合物は、バンドギャップが小さいため、光触媒の候補として注目されているが、安定性に問題があった。

本研究では、酸素(O_2^-)と塩素(Cl^-)の二種のアニオンからなる層状の酸塩化物 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ が、可視光を吸収して、安定して水を酸化する能力があり、これを用いた定常的な可視光水分解を実証した。また、理論計算から(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)、価電子帯における O-2p 軌道の幅は広く、そのため Cl-3p 軌道は価電子帯の内部に位置することが明らかになった(Fig. 1a)。この結果は、異種アニオンのバンドが価電子帯の上部を占める一般の混合アニオン化合物のバンド構造(Fig. 1b)とは対照的であった。光吸収により正孔は価電子帯の上端に生じやすいと考え、 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ においては、正孔に対して安定な O-2p 軌道が価電子帯の上部を占めていることが、光触媒材料としての安定性を導いた理由であると考えられる。本研究で得られた知見は、安定性と高活性を両立する光触媒の設計指針を与えるものであり、将来の高効率太陽光水素製造の実現に向けたブレークスルーにつながることが期待される。

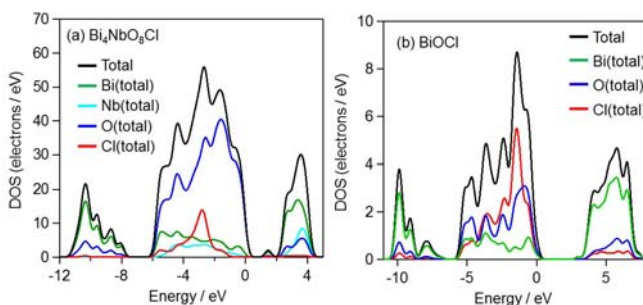


Fig. 1 各半導体化合物の状態密度(Density of state)

発表論文(謝辞あり)

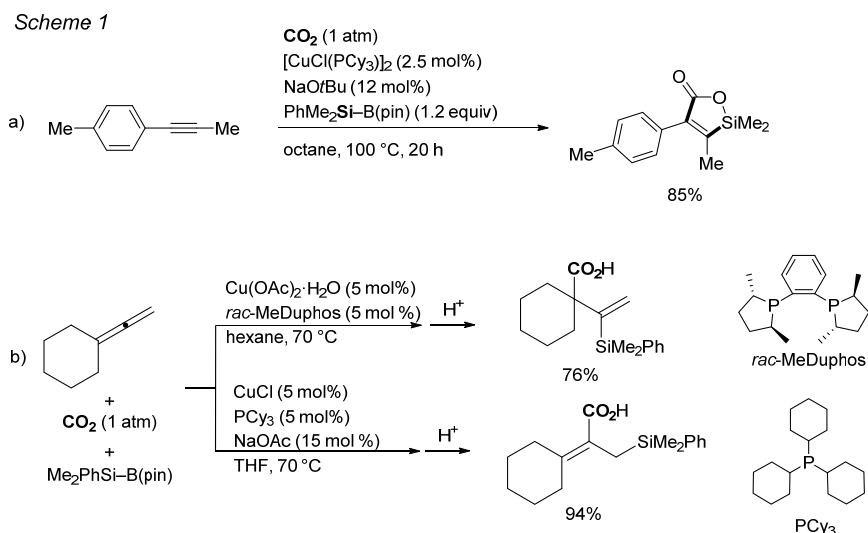
Hironori Fujito, Hironobu Kunioku, Daichi Kato, Hajime Suzuki, Masanobu Higashi, Hiroshi Kageyama, and Ryu Abe, “Layered Perovskite Oxychloride $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$: A Stable Visible Light Responsive Photocatalyst for Water Splitting”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 2082–2085.

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

京都大学工学研究科物質エネルギー化学専攻 辻 康之

研究成果概要

我々は、銅触媒とケイ素源としてシリルボランを用いることによりアルキンのシラカルボキシ化反応が進行することを見出し、ケイ素原子を含む環状エステルであるシララク톤を効率良く得ることに成功した（スキーム 1 a）。本反応は、トリシクロヘキシルホスフィン (PCy₃) を配位子とする銅触媒を用いて、1 気圧の雰囲気下オクタン中 100 °C で反応することにより進行する。様々な内部アルキンに適用可能であり、対応するシララク톤を良好な収率で得ることができた。このケイ素官能基の導入を伴うシラカルボキシ化反応をアレンに適用したところ、用いる配位子を使い分けることにより 1 つの基質から異なる 2 つの生成物がそれぞれ選択的に得られることが分かった（スキーム 1 b）¹⁾。この反応では、かさ高い 2 座配位子である *rac*-Me-DuPhos を用いて反応を行うと、ビニルシラン構造をもつカルボン酸が選択的に得られた。一方、銅の前駆体を塩化銅に変更し、酢酸ナトリウム存在下、PCy₃ を配位子として反応させたところ、アリルシラン構造をもつカルボン酸が選択的に生成した。



発表論文(謝辞なし)

1) Y. Tani, T. Fujihara, J. Terao, Y. Tsuji, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 17706 (2014).

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、酸素還元および酸素発生反応の反応エネルギー変化を検討し、実験的に得られているペロブスカイト型酸化物の B サイト金属依存性や結晶面依存性を理論的に支持する結果が得られた。

今後は、酸素の不定比性などが酸化物触媒の物性に与える影響について、より詳細に検討を進める予定である。

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

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻分子理論化学講座 佐藤 徹

研究成果概要

最近、有機 EL 素子の発光機構として熱活性型遅延蛍光 (TADF) が注目されている [1]。これは T_1 励起子の熱励起による逆系間交差によって生じた S_1 状態からの蛍光を利用するものである。佐藤らは対称性による禁制を利用して、 T_1 よりエネルギー的に高い位置にある高次三重項状態 $T_n (n > 1)$ を経由した逆系間交差による EL 素子の発光機構を提案している [2]。最近 Ma らは、PTZ-BZP を用いた蛍光 EL 素子における高効率な外部量子効率を報告している [3]。この高効率な発光は単純な蛍光過程では説明できず、また T_1 状態は蛍光状態からエネルギー的に低いところにあるため、 T_1 からの逆系間交差では説明できない。彼らは S_1 状態に接近した T_3 状態の関与する機構によりこれを説明している [3]。本研究では、PTZ-BZP において T_3 より下の三重項状態との振電相互作用が小さいため、このような機構での発光の可能であることを示した。B3LYP/6-31G(d,p) レベルで TD-DFT 法により PTZ-BZP の各励起状態の構造最適化を行った。これらの計算には Gaussian09 Rev. D.01 を用いた。振電相互作用定数ならびに振電相互作用密度解析 [4-6] は自作プログラムにより行った。得られた振動モードごとの振電相互作用定数は、 T_3 - T_2 間で最大で 1.3×10^{-4} a.u.、 T_3 - T_1 間で最大で 7.3×10^{-4} a.u. であった。これら小さな振電相互作用が得られる理由について、振電相互作用密度解析を行った結果、擬縮退した電子状態が振電相互作用の抑制に寄与していることが明らかとなった。[1] 総説として、C. Adachi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **53**, 060101 (2014). [2] T. Sato *et. al*, *J. Mater. Chem. C* **3**, 870 (2014). [3] L. Yao *et. al*, *Angew. Chem.* **126**, 2151 (2014). [4] T. Sato *et. al*, *J. Phys. Chem. A* **112**, 758 (2008). [5] T. Sato *et. al.*, *J. Phys.: Conf. Ser.* **428**, 012010 (2013). [6] M. Uejima *et. al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 14244 (2014).

発表論文 (謝辞あり)

(1) Takashi Hirose, Natsuki Ito, Hiromu Kubo, Tohru Sato, Kenji Matsuda, *J. Mater. Chem. C*, 印刷中. (2) Tohru Sato, *J. Comp. Chem. Jpn.* **14**, 189-192(2015). (3) Katsuyuki Shizu, Hiroki Noda, Hiroyuki Tanaka, Masatsugu Taneda, Motoyuki Uejima, Tohru Sato, Kazuyoshi Tanaka, Hironori Kaji, Chihaya Adachi, *J. Phys. Chem. C* **119**, 26283-26289(2015). (4) Furitsu Suzuki, Katsuyuki Shizu, Hisafumi Kawaguchi, Shinya Furukawa, Tohru Sato, Kazuyoshi Tanaka, Hironori Kaji, *J. Mater. Chem. C* **3**, 5549-5555(2015). (5) N. Haruta, T. Sato, K. Tanaka, *J. Org. Chem.* **80**, 141-147(2015). (6) N. Haruta, T. Sato, K. Tanaka, *Tetrahedron Lett.* **56**, 590-594(2015). (7) T. Sato, M. Uejima, K. Tanaka, H. Kaji, C. Adachi, *J. Mater. Chem. C* **3**, 870-878(2015).

発表論文 (謝辞なし)

(1) Katsuyuki Shizu, Hiroyuki Tanaka, Motoyuki Uejima, Tohru Sato, Kazuyoshi Tanaka, Hironori Kaji, Chihaya Adachi, *J. Phys. Chem. C* **119**, 1291 – 1297(2015). (2) Katsuyuki Shizu, Motoyuki Uejima, Hiroko Nomura, Tohru Sato, Kazuyoshi Tanaka, Hironori Kaji, Chihaya Adachi, *Phys. Rev. Appl.* **3**, 014001 1-7(2015). (3) Tomonari Wakabayashi, Yoriko Wada, Kyo Nakajima, Yusuke Morisawa, Susumu Kuma, Yuki Miyamoto, Noboru Sasao, Motohiko Yoshimura, Tohru Sato, Kentarou Kawaguchi, *J. Phys. Chem. A* **119**, 2644 – 2650 (2015).

化学反応と電子物性に関する理論的研究

Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻量子機能化学講座 笛野 博之

研究成果概要

主鎖の一部にカルボラン($B_{10}C_2H_{12}$)骨格を含む π 共役高分子は液相でも固相でも蛍光発光を示すことが知られている。このときのカルボランの働きとして、主鎖の π 共役性の変調と AIE (Aggregate Induced Emission) 発生に何らかの関わりがあると考えられる。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、挿入されたカルボランの性質を調べるためにこれを含む単純な π 共役高分子モデルを考え、電子状態の制御について検討した。

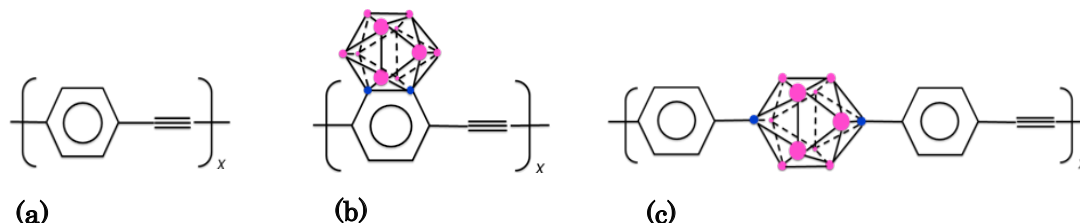


Fig. 1 Structures of the model polymers employed. (a) Poly(*p*-phenylene ethynylene) (PPE), (b) PPE condensed with *o*-carborane (benzocarborane PE), and (c) PPE inserted with *p*-carborane (*p*-carborane PPE).

Fig. 1 に示す3通りの無限長のモデル高分子を考え、Gaussian 09 および Crystal 09 ソフトを用いて結晶軌道解析を行った。(a)はカルボランを含まない原型高分子であるポリ(*p*-フェニレンエチニレン) (PPE)、(b)は *o*-カルボランがフェニレン骨格と融合した(ベンゾカルボラン)高分子(ベンゾカルボラン PE と略称)、および(c)は *p*-カルボランが主鎖内に挿入された高分子(*p*-カルボラン PPE と略称)である。計算方法は B3LYP 法により 6-31G**基底を用いて構造最適化を行ってバンド構造を求めた。

3種類の高分子について得られたバンド構造から、最高被占(HO)および最低空(LU)バンドはともに π 性であり、PPE とベンゾカルボラン PE の HO, LU バンド幅は 2.2~2.8 eV と概ね類似した値となっている。この意味で、ベンゾカルボラン PE における π 共役は PPE に比較して阻害されていない。一方 *p*-カルボラン PPE の HO, LU バンドは同じく π 性であるものの、そのバンド幅は 0.2, 0.4 eV と小さく、高分子全体にわたる π 共役は分断される傾向にあることを示した。

発表論文(謝辞あり)

M. Kobayashi, N. Hayakawa, T. Matsuo, B. Li, T. Fukunaga, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, and K. Tamao, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 758 (2016).

研究成果概要

芳香環をらせん状に縮環した分子群は、らせんを意味するラテン語 *helice* にちなみヘリセン (*helicene*)と呼ばれる。ヘリセンは、右巻き、左巻きの二種類の異性体が存在し、それぞれのらせんの向きに起因する光学特性(旋光性、円偏光二色性・円偏光発光)を示すため、新規光学材料として興味をもたれている。我々は最近、窒素原子を有するヘテロアセンを二段階の酸化的カップリング反応によって連結することで、分子内に 2 つのらせんを有するダブルヘテロヘリセンを合成する簡便な手法の開発に成功した¹⁾。フェノチアジン二分子が縮環したダブルヘリセン **1** の反転エネルギーを見積もるため、Gaussian 09を用いた DFT 計算をおこなった。その結果、らせん反転に必要な活性化エネルギーは 118.0 kJ mol⁻¹と算出された(Figure 1)。この値は実測値の 112.8 kJ mol⁻¹とよく一致した。

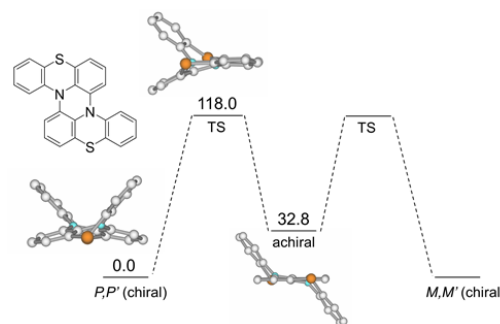


Figure 1. Potential energy diagram for the isomerization of **1'** calculated at B3LYP/6-31G* level (kJ mol⁻¹).

また、TD-DFT 法により光学分割した異性体の円二色性吸収(CD)スペクトルのシミュレーションをおこなった。計算結果は実測のスペクトル形状をよく再現し、これをもとにそれぞれの異性体のらせんの向きを決定することに成功した(Figure 2)。

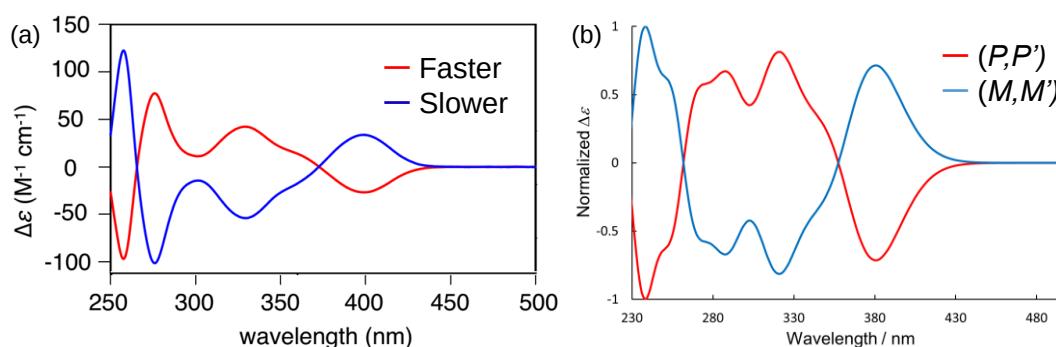


Figure 2. (a) CD spectra of the enantiomers of **1** in CH₂Cl₂ at 298 K. (b) Simulated CD spectra of **1**.

発表論文(謝辞あり)

1) D. Sakamaki, D. Kumano, E. Yashima, S. Seki, *Chem. Commun.*, **2015**, 51, 17237-17240

ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の機構解明

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

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 有機設計学講座 長田裕也

研究成果概要・今後の研究計画

我々はこれまでに、ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の主鎖らせん不斉制御について研究を行ってきた。ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の側鎖としてキラル置換基を導入することで、主鎖に一方向巻きらせん構造を誘起することができるほか、溶媒の違いに応じて主鎖の不斉らせん構造が完全に反転することなど、本骨格に特徴的な現象を見出している [1]。例えば、(R)-2-ブトキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)は、クロロホルム中において完全な右巻き構造をとるが、1,1,2-トリクロロエタン中では完全な左巻き構造をとる。この特徴を生かした不斉高分子配位子としての利用についても検討も行っており、溶媒系を変えることでキラル高分子配位子のらせんキラリティーを反転させ、両エナンチオマーを高いエナンチオ選択性で作り分けることにも成功している [2]。最近の研究では、(S)-3-オクチルオキシメチル基を側鎖に有する PQX が、*n*-オクタン中で完全な左巻き構造を、シクロオクタン中で完全な右巻き構造をとることを示した [3]。一方で、この溶媒依存性らせん反転に関するメカニズムは、未だ明らかになっていない。本研究では、キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の立体構造について予備的な検討を行った。

(R)-2-ブトキシメチル基、(S)-2-オクチルオキシメチル基、または(S)-3-オクチルオキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類について、分子動力学計算を行った。計算には Accelrys 社の Materials Studio を用いた。分子力場には、凝集系に対して高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場として知られる COMPASS II 力場を用いた。現在、計算結果と実験結果に基づき、溶媒依存性らせん反転の機構の解析を進めている。今後は、溶媒分子を含めた分子動力学シミュレーションによって、ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の主鎖らせん不斉の溶媒依存性についてより詳細な検討を行う予定である。

発表論文(謝辞なし)

- [1] (a) Yamada, T.; Nagata, Y.; Sugimoto, M. *Chem. Commun.* **2010**, 46, 4914-4916 (b) Nagata, Y.; Yamada, T.; Adachi, T.; Akai, Y.; Yamamoto, T.; Sugimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 10104-10113.
- [2] Yamamoto, T.; Yamada, T.; Nagata, Y.; Sugimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 7899-7901.
- [3] Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Sugimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 15901-15904.

遷移金属錯体の分子シミュレーション

Molecular Simulation on Transition-Metal Complexes

京都大学大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学研究室

北川 宏

研究成果概要

プロトン移動は燃料電池の電極反応、触媒による二酸化炭素還元反応、光合成など、水、酸素、二酸化炭素が関与する酸化還元反応において鍵となる役割を果たしている。プロトン伝導体は燃料電池やセンサーに広く利用されており、特に燃料電池の能力を大きく左右する枢要部材であるため、活発に研究されている。当研究室では、新たなプロトン伝導体として、遷移金属錯体が連続した格子や鎖状構造を形成した多孔性配位高分子(PCP)に着目し、合成と物性評価を進めてきた。PCP は規則的に配置された細孔を有し、細孔の形状・サイズを制御可能であるため、ガス分離・吸蔵、高選択性触媒などへの応用が期待されている。Zr とテレフタル酸からなる PCP である UiO-66 に SO_3H を導入することによって、湿度 40% で $10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ の高いプロトン伝導度を達成できた。しかしながら、湿度を 95% まで上げてプロトン伝導度は $5.62 \times 10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ にとどまった。この原因を調べるため、PCP 中でのプロトンの解離エネルギーを計算した。結晶構造解析から、合成した UiO-66 はテレフタル酸と Zr を架橋する酸素が欠損した構造であることが判明していたが、酸素欠損に隣接する架橋酸素が強い塩基性を示すことが計算から示唆された。すなわち、プロトン伝導度を更に向上させるためには、欠陥を減少させる必要があるという設計指針が得られた。

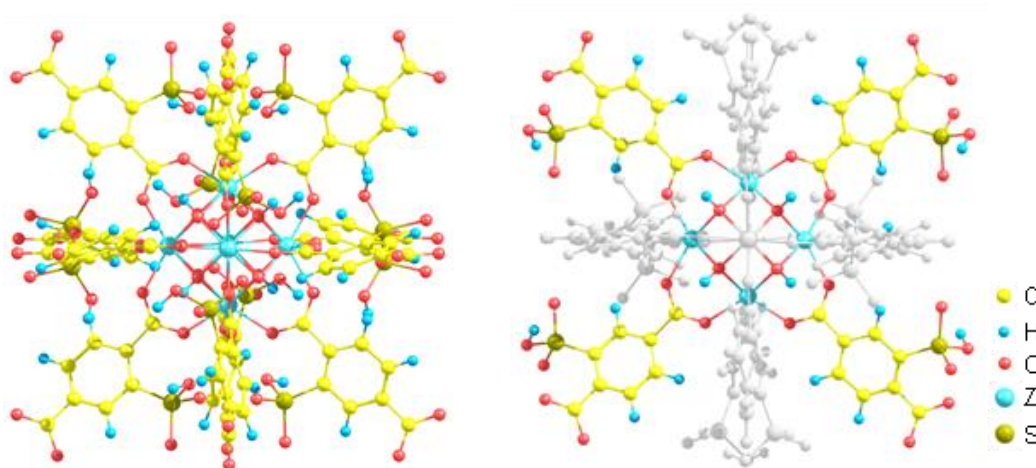


図 1: 欠陥を含まない UiO-66 のモデル(左)とテレフタル酸と酸素が欠損したモデル。

発表論文(謝辞あり)

1. J. M. Taylor *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **137** (2015) 11498-11506.
2. T. Komatsu *et al.*, Inorg. Chem. **55** (2015) 546-548.

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

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 廣瀬 崇至

単一の分子を電子素子として応用することを目指す分子エレクトロニクス分野は、より高度な動作原理をもつデバイスおよび究極の省エネルギーデバイスを実現する観点から近年大きな注目を集めている。ジアリールエテンは、着色体の熱安定性や高い光耐久性を有するフォトクロミック化合物であり、分子レベルでのスイッチング素子やメモリー材料としての応用が期待されている。本研究では、フォトクロミック分子 **2** の分子配列を高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 基板上において観測し、その光応答性を検討することを目的とした。

合成した化合物の開環体 **2o** は、濃度に依存して異なる分子配列を形成することが STM 観察より明らかとなった (Figure 1)。この濃度に依存した二次元結晶多系の分子配列は、Materials Studio を用いた分子モデル計算により良く再現することができ、モノマーおよびダイマーを基本単位とする分子配列 (α 配列および β 配列) として帰属できた。

光照射により生成する閉環体 **2c** は分子配列を形成せず、縮環体 **2a** はハニカム状の分子配列を形成することが明らかとなった。閉環体の状態から (1)可視光照射、(2)紫外光照射を順次行うことで、3 種の異性体を用いた 4 状態 3 ステップの多段階光誘起配列転移を観測することに成功した (Figure 2)。

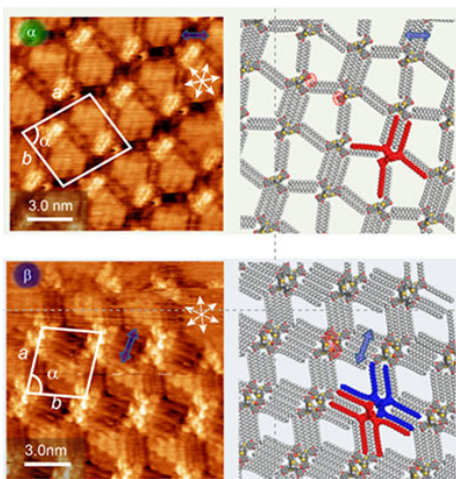


Figure 1. STM image and ordering model of **2o** at 1,2,4-trichlorobenzene (TCB)/HOPG interface.

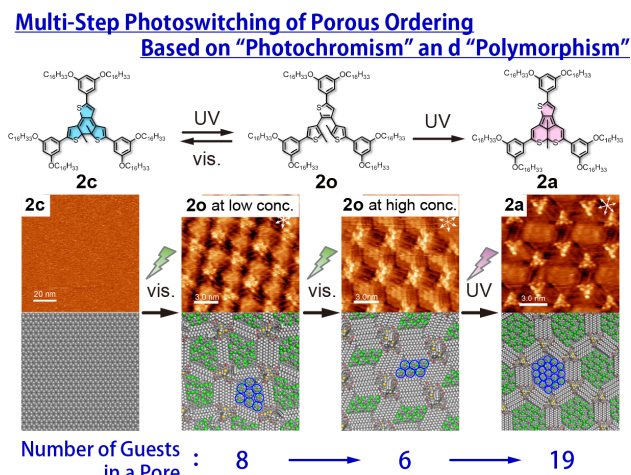


Figure 2. Multi-step ordering transformation induced by in-situ light irradiation at TCB/HOPG interface. Number of guest in a pore significantly different between different ordering patterns.

発表論文(謝辞なし)

1. S. Yokoyama, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 13569–13576.
2. D. Frath, S. Yokoyama, T. Hirose, K. Matsuda et al., *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 11350–11358.
3. S. Yokoyama, T. Hirose, K. Matsuda, *Langmuir* **2015**, *31*, 6404–6414.

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

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 西谷 暢彦

研究成果概要

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

モデル化合物としてアミド基およびウレア基を導入した化合物 **1a–3a**, **1u–3u** を設計・合成した (Figure 1)。それぞれのオクタン酸溶液を調製し、HOPG 基板上における配列形成を STM により観察した。得られた配列像及び配列の格子定数を参考にし、Materials Studio を用いた MM/MD 計算により分子配列モデルを作成した。計算では適度な大きさの HOPG 基板を計算に含め、構造最適化プロセスの中で HOPG 基板の炭素原子の座標を固定する制限を加えた。また、分子間水素結合の影響を考慮することを目的として、力場には DREIDING force field を採用した。

STM 観察の結果、化合物 **1u** および **3a** が特異的な分子配列を形成した (Figure 2)。STM 像において、芳香環部位は明線として観察されるが、**1u** の明線の幅 (約 1.2 nm) は **1a** (約 2.4 nm) と比較して約半分であることが観察された (Figure 2a, 2b)。この配列像をもとに MM/MD 計算により最適構造を探索した結果、**1a** の配列は分子全体が基板に吸着しているのに対し、**1u** の配列はウレア基とフェニル基が溶液中に立ちあがった配列構造を取ることが示唆された。また **3a** に関して、配列中で暗線として観察されるアルキル鎖領域に芳香環の輝点がまばらに存在することが観察された (Figure 2c)。これより **3a** 分子が配列中でアミド基を中心として反転していることが示唆された。さらにこの反転間隔のヒストグラムを作成したところ、配列中で 1 分子の反転が規則的に生じていることが明らかになった。^[1]

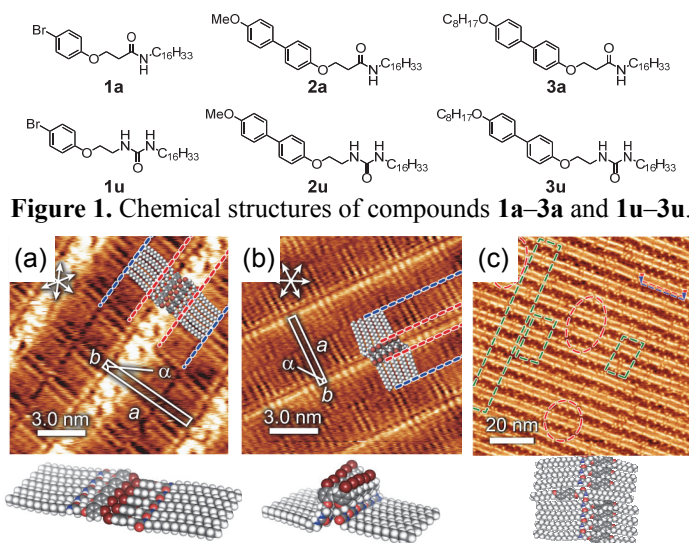


Figure 1. Chemical structures of compounds **1a–3a** and **1u–3u**.

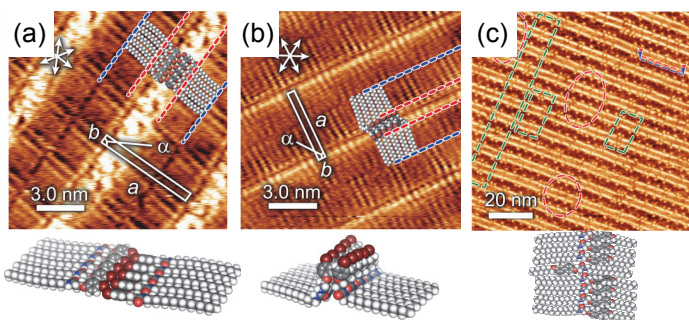


Figure 2. High-resolution STM images and molecular models of the ordering of (a) **1a**, (b) **1u**, and (c) **3a** at the octanoic acid/HOPG interface.

発表論文 (謝辞なし)

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

HOPG 基板上における分子配列のモデリング

Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 前田 尚生

固液界面において機能性分子を配列させる試みは、分子エレクトロニクス観点から近年非常に大きな注目を集めている。形成した配列は走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて単一分子レベルの分解能で観測することができる。本研究では、フォトクロミック分子であるジアリールエテンを用いてその配列パターンおよび光応答性の検討を行うことを目的とした。

本研究で用いたジアリールエテン誘導体は、HOPG 基板と高い親和性をもつ長鎖アルキル鎖と、水素結合ネットワークを形成するアミド基を分子の両端に有している。3-チエニル型ジアリールエテンの閉環体 **1** はオクタン酸/HOPG 界面上で安定な二次元分子配列を形成したのに対し、2-チエニル型ジアリールエテンの閉環体 **2** は配列を形成しなかった (Figure 1a,d)。この原因を考察するために、Materials Studio を用いた MM/MD 計算によるシミュレーションを行った。計算結果から、**2** は **1** に比べて HOPG 基板との接触が不十分であり、基板によって得られるファンデルワールス力が **1** よりも小さいことが明らかとなった (Figure 1b,e)。また、基板上で平面的な構造をとるための歪みエネルギーを求めたところ、**2** のほうが **1** よりも大きな値をとることがわかり、**2** は基板に吸着するために大きく歪む必要があることが示唆された (Figure 1c,f)。これらのことから、**2** は基板上で安定な二次元配列を形成できなかったのだと考えられる。本研究ではさらに、光異性化反応に由来する 2 つの異性体がほぼ等しい濃度で協同的に分子配列を形成することを利用して、異なる 3 種類の配列状態を光照射で可逆に変換する過程を STM で観測することにも成功した。

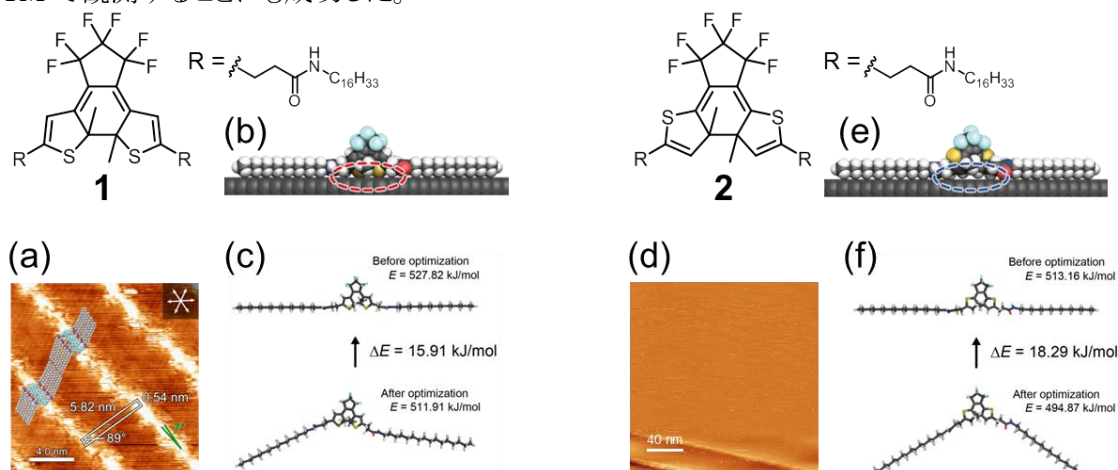


Figure 1. (a) STM image of **1**. (b) Optimized structures of **1** on HOPG substrate modeled by MM calculations. (c) Structures of **1** before and after optimization by MM calculations in gas phase. (d) STM image of **2**. (e) Optimized structures of **2** on HOPG substrate modeled by MM calculations. (f) Structures of **2** before and after optimization by MM calculations in gas phase.

Reference: Soichi Yokoyama, Takashi Hirose, Kenji Matsuda, *Chem. Commun.* **2014**, 50, 5964-5966.

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

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 田門 肇

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、吸着剤と吸着質の分子間相互作用や、乾燥過程における分子の動的挙動など、吸着工学や乾燥工学などにおける微視的な諸問題を取り上げ、分子軌道法や分子動力学法などの分子シミュレーションを用いて検討を行うことを目的としている。今年度は水-エタノール溶液中における活性炭スリット細孔へのプリン体の吸着過程について、分子動力学(MD)シミュレーションにより検討した。以下その概要を報告する。

プリン体はアルコール飲料等に多く含まれ、過剰に摂取すると健康を害することが知られている。消費者の健康志向の高まりから、近年、酒造会社はプリン体等を低減した製品を意欲的に開発している。低減方法の一つとして、吸着材による分離除去が挙げられる。本研究では、水-エタノール溶液中においてプリン体が活性炭スリット細孔に進入する場合の自由エネルギー変化 ΔF を分子動力学(MD)シミュレーションにより求めるとともに、その吸着過程について、実験では困難な分子レベルの解析を行った。

プリン体のモデルとしてプリン分子を、活性炭のスリット細孔(スリット幅 16Å)のモデルとして 2 枚のグラフェンシートを用いた。なお基本セルの大きさは 19Å×32Å×32Åであった。これらのモデルを用いて、温度 298 K、圧力 1 atm、アルコール度数約 10 %の水-エタノール溶液中におけるプリン分子の吸着に関する NVT アンサンブル MD シミュレーションを実施した。計算には BIOVIA 社の Materials Studio 8.0 を用い、分子力場には Dreiding, TIP3P を用いた。時間の刻み幅は 1 step を 1 fs とした。プリンがセルの一番端の yz 平面の中心(x, y, z)=(0, 0, 0)から、細孔壁の中央部(16, 0, 4.5)(単位:Å)まで移動する場合の ΔF を得るため、プリンの進入経路上の各点において、400 ps の熱平衡計算後、250 ps の計算結果からプリンに働く平均力を求め、それを経路に沿って積分することで ΔF を算出した。

上述の方法により、経路①: (0, 0, 0)→(10, 0, 0)→(10, 0, 4.5)→(16, 0, 4.5)、および経路②: (0, 0, 0)→(16, 0, 0)→(16, 0, 4.5)、の2つの進入経路に対する ΔF を求めた。その結果、細孔の中央部にプリンが吸着し得ること、その際の ΔF が約 -65 kJ mol^{-1} であることがわかった。次に、水中において経路②に沿ってプリンが細孔に進入する場合の ΔF と比較した。その結果、スリット細孔内において、水-エタノール溶液中の方が水中よりも ΔF の低下の度合いが大きいことがわかった。その原因を検討するため、プリンと水の平均水素結合数を求めたところ、水中の方がスリット細孔内における平均水素結合数が多いことがわかった。これは、水-エタノール溶液中では、プリンが水から受ける平均力が吸着に及ぼす影響が弱まり、細孔壁から受ける引力の影響が相対的に大きくなったことを示唆する結果である。

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

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

糖鎖高分子であるアガロースは、寒天の主要成分であり、食品や電気泳動用支持体に用いられている。そのアガロースを低分子化して得られるアガロオリゴ糖は、抗炎症作用、発がん予防作用などの固有の性質が報告されており、機能性食品への応用が期待されるユニークなオリゴ糖である。本研究では、食品工学、生化学などで有用な基礎的知見を得ることを目的として、分子動力学(MD)計算を用いたアガロオリゴ糖の水和状態に関する研究を行った。アガロースの凝固過程では、アガロース鎖が 2 重らせんを形成することが知られている。そこで、アガロオリゴ糖が同様の会合状態を形成するか否かについて検討した。

残基数 6 のアガロオリゴ糖に着目し、1 本の糖鎖が単独で水和している構造 1、ならびに 2 本の糖鎖が会合して水和する構造 2、の 2 種類の構造を取り上げた。これらの水和状態について、Amber 14 プログラムを用いて MD 計算を実施した。分子力場はアガロオリゴ糖には GAFF、水分子には TIP3P を適用した。オリゴ糖の質量濃度が 0.6, 3.0, 5.7, 8.3 wt% の各水溶液について、5, 25, 50, 75°C の各温度条件に対するシミュレーションを実行した。NPT アンサンブルによる熱平衡計算後、NVT アンサンブルで 1 ns の MD 計算を行った。構造 1 および 2 の水和の自由エネルギー A について、構造 1 の水和状態を基準としたエネルギー差 ΔA を求めた。

計算結果より、アガロオリゴ糖の会合状態は 2 重らせん構造を含め、様々に形状が経時変化することがわかった。 ΔA の糖濃度依存性を調べたところ、0.6 wt% の場合はいずれの温度においても ΔA はほとんど 0 であった。すなわち、この濃度では糖鎖が会合せずに水和している状態と、会合している状態とがほぼ同程度に起こりうると考えられる。一方、糖濃度が 3.0, 5.7, 8.3 wt% の場合、 ΔA は負となった。この結果は、糖鎖が単独で水和する構造 1 よりも、2 本の糖鎖が会合する構造 2 の方が自由エネルギー的に有利であることを示している。さらに、いずれの温度においても、糖濃度 3.0 wt% または 5.7 wt% において ΔA が極小値をとることがわかった。なお、糖濃度が 3.0, 5.7, 8.3 wt% の場合の ΔA の温度依存性については、高温になるにつれて ΔA が増加 ($\Delta A < 0$ で絶対値が減少) した。これは、温度上昇に伴い糖鎖や水の熱運動が激しくなることで、2 本の糖鎖が会合し続けるのが自由エネルギー的に不利になることを示している。

多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移

Adsorption-induced structural transition of porous coordination polymer

京都大学大学院工学研究科化学工学専攻界面制御工学分野 田中 秀樹

多孔性配位錯体(MOF)の中には、フレームワーク構造の柔軟性ゆえに、あるガス圧において構造の膨潤を伴うステップ状の吸着挙動を示すものが存在する。この挙動はゲート吸着と呼ばれ、僅かな圧力変化によって大きな吸着量変化が得られること、また、構造の膨張が吸熱過程であるために、正味の吸着熱を低減することができると予想されることから、MOFはガスの分離・貯蔵プロセスのための新規吸着材料として期待されている。中でもレイヤー積層構造を有するELM-11($[\text{Cu}(4,4'\text{-bipyridine})_2(\text{BF}_4)_2]_n$)は、 CO_2 ガスに対して特異的な2段階のゲート吸着を生じ、 CO_2 の分離・貯蔵プロセスへの応用が期待される。この多段ゲート吸着挙動のメカニズムを明らかにするならば、ゲート吸着挙動の利点をより活かした新規MOF開発のための指針が得られるはずである。我々は現在までに、 CO_2 吸着等温線測定およびin situ 粉末X回折(XRD)測定(195 K)により、ELM-11が CO_2 圧力に応じて4つの結晶相[Fig. 1a: ELM-11 monomer unit (MU)あたり **A**: 0CO_2 , **B**: 2CO_2 , **C**: 3CO_2 , および **D**: 6CO_2 を吸着]を生じることを明らかにし、結晶**A**, **B**についてはその構造をすでに決定している。本研究では、さらに結晶**C**, **D**の構造を決定し、各構造モデルを用いた分子シミュレーションおよび自由エネルギー解析を行うことで、多段ゲート吸着挙動の理解を試みた。

温度 195 K, 200 K, 205 K における ELM-11 の CO_2 吸着等温線をBELSORP-max(MicrotracBEL)によって測定した。また、SPring-8 BL02B2 ビームラインにおいて、ELM-11の CO_2 雰囲気下(195–205 K)におけるin situ XRD測定を行い、XRDパターンの粉末X線構造解析法(Rietveld解析)と分子シミュレーションを組み合わせた独自の手法により、結晶**C**および**D**の構造を決定した。ELM-11のフレームワークの相互作用ポテンシャルについては、原子部分電荷 $\{q_m\}$ (m :原子種)を用いたクーロンポテンシャルとUFF力場($\{\sigma_{\text{UFF},m}\}, \{\epsilon_{\text{UFF},m}\}$)に基づくLennard-Jones(LJ)ポテンシャルの和で表されると仮定し、 $\{q_m\}$ はDFT計算(GGA/PBE/DNP, DMol³)によって決定した。また、 CO_2 についてはChenらによるポテンシャルモデルを用いた。

X線構造解析によって、解析信頼度 R が4%以下の精密な結晶**C**, **D**の構造モデルを決定することに成功した。また、 CO_2 分子を除いた**D**のフレームワークがrigidであるような吸着材を想定した場合に生じるべき吸着熱(33.6 kJ/mol-CO_2)に対して、実際に生じる吸着熱は25%も小さな値となっており、ELM-11が CO_2 の分離・貯蔵プロセスにおいて極めて有効な特性を持つことが明らかとなった。

発表論文(謝辞なし)

- [1] H. Tanaka, S. Hiraide, A. Kondo and M. T. Miyahara, *J. Phys. Chem. C* **119**, 11533 (2015).
- [2] S. Hiraide, H. Tanaka and M. T. Miyahara, *Dalton Trans.*, **45**, 4193-4202 (2016).

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

熔融 LiCl-KCl-CsCl(融点 265°C)浴中での Al(III)の物理化学的性質に関して、Al(III)イオンの反応の可逆性、拡散係数さらには融体構造について、電気化学測定およびラマン分光測定を行うとともに、とくに CsCl-AlCl₃ 二元系に着目して第一原理分子動力学法 ADMP (Atom-centered Density Matrix Propagation) によるイオン拡散のダイナミクスを検討した。

GAUSSIAN09 を用いて 700 K での構成イオンの軌道を計算し、拡散係数としてそれぞれ $D_{\text{Cs}} = 1.216 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_{\text{Al}} = 1.530 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_{\text{Cl}} = 2.671 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ の値が求められた。この計算値と直接比較可能な実験データは見いだされていないが、NaCl-AlCl₃ 二元系熔融塩における相互拡散係数として $4.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ (413 K) という値が報告されている (B. Gilbert, D. L. Brotherton and G. Mamantov *J. Electrochem. Soc.* **121** 773 (1974).)。

AlCl-AlCl₃ (A: alkaline metals) の形の熔融塩において、1:1 の組成付近での Al(III)イオンのとる錯体構造は長らく議論的となっているが (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993).)、本計算の結果では、かねてから主張されている AlCl₄⁻ アニオン構造のみが存在するわけではなく、アニオン間での Cl⁻ イオンの交換によって、通時的・空間的平均で 9.6% のアニオン構造が頂点共有による Al₂Cl₇⁻ 構造であることがわかった。1:1 組成を境として、前者の構造から後者へと急激に変化し、当該組成では揺らいでいることが示唆される。

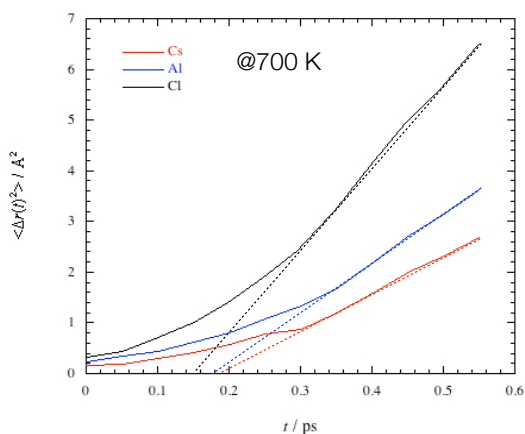


FIG. 1 Mean square displacements versus time for ADMP dynamics of constituent atoms in molten CsCl-AlCl₃ at 700 K.

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

Y. Sakanaka, T. Goto, K. Hachiya, *J. Electrochem. Soc.* **162** D186 (2015).

マグネシウム合金における第一原理計算

The first principles calculations of magnesium alloys

京都大学大学院エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻 馬淵 守

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、室温成形性の優れたマグネシウム(Mg)合金開発を目的に、微量添加元素が Mg 合金の室温成形性に及ぼす影響を第一原理計算(ソフトウェア:Materials Studio CASTEP)を用いて考察した。

Mg はその hcp 構造に起因する異方性が変形のすべり系を制限し、加工性が悪いという欠点がある。すなわち、底面すべりでの変形が起こりやすい一方、柱面すべりでの変形が起こりにくく、その不均一変形のため加工の際に破断に至ってしまう。そこで、第一原理計算を用いて底面すべりと柱面すべりの Generalized Stacking Fault Energy(GSFE:すべりの起こりやすさの指標)を算出し、微量添加元素がすべりの異方性に与える影響を評価した。具体的には、Mg-Zn 合金に微量元素として Ca, Sr, Ba を添加した Mg-Zn-Ca, Mg-Zn-Sr, Mg-Zn-Ba の 3 種類の合金モデルを作成し、それぞれのモデルの底面すべり、柱面すべりの GSFE を算出した。

その結果、底面・柱面すべりの GSFE は共に、Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順に小さくなり、添加元素の原子番号が大きいほど、GSFE が低下することがわかった。また、すべりの異方性評価のため、底面すべりの GSFE の最大値を、柱面すべりの GSFE の最大値で除したものを「異方性の指標(値が大きいほど異方性が緩和されたことを意味)」として算出した結果、すべりの異方性は、Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順に小さくなり、Mg-Zn-Ca が最も異方性が緩和されるという結果となった。この原因を調べるため、電子密度分布を算出した結果、Ca, Sr, Ba は柱面すべりにおけるすべり面の電子密度を同程度に大きく低下させる一方で、底面すべりにおいては、すべり面における電子密度の低下量が元素により大きく異なることが示唆された。すなわち、Ca は底面すべりにおける電子密度をあまり低下させないため、相対的に底面すべりが起こりにくくなり、異方性が緩和されるが、Ba は柱面すべりだけではなく底面すべりにおける電子密度を大きく低下させるため、底面すべりが非常にすべりやすくなり異方性の緩和量は小さくなることが示唆された。また、実際に、Mg-Zn-Ca, Mg-Zn-Sr, Mg-Zn-Ba 合金板材作製し、室温成形性を評価した結果、室温成形性は Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順となり、本計算の結果は実験を再現することを確認した。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

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

京都大学大学院エネルギー科学研究科エネルギー応用科学専攻
資源エネルギーシステム学分野 袴田昌高

研究成果概要

ナノポーラス金属は、ナノメートルオーダーにまで微細化された孔径・リガメント径の多孔質構造を有する金属であり、比表面積の大きさ・導電性・触媒特性など、バルクの金属にはない性質が現れる。ナノポーラス金の室温の電気抵抗率を空気中および水中で測定し、その差を評価した結果、バルク金(スパッタリング薄膜)に比べてナノポーラス金の差が大きくなった。本研究では京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて第一原理計算を利用し、金表面に水分子が吸着することによる電子状態の変化を計算した。

金 (111) 表面に水分子が吸着した原子モデルを作成し、第一原理計算に供した。この際、金 (111) の格子ひずみを $\pm 2.5 \sim 5.0\%$ 変化させることでナノポーラス金の表面を模擬することとした。

水分子の吸着エネルギーを計算した結果、格子ひずみがない場合に比べ、格子ひずみが正であると水分子はより安定して吸着する(吸着エネルギーが負で絶対値が大きい)ことがわかった。ナノポーラス金の表面には大きな曲率に由来して正負さまざまな格子ひずみが導入されることがわかっているが、正の格子ひずみにより水分子の吸着がより起こりやすくなることが示唆される。

さらに、水分子吸着直下の金原子のフェルミ準位における状態密度を算出した結果、吸着のない場合に比べて低下していることがわかった。このことから、水分子の吸着によりフェルミ準位の状態密度が下がり、結果としてナノポーラス金の電気抵抗率が上がった可能性が示唆された。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし

植物種子タンパク質の構造と機能
Structure and function of plant seed proteins

京都大学大学院農学研究科品質設計開発学分野 丸山 伸之

背景と目的

食物アレルギーの症状を示す人の数は増加しているにもかかわらず、アレルギー症状を引き起こす機構については不明な点が多い。植物由来の食品素材に対してアレルギー症状を示すことは多い。種子類に関するアレルゲンでは、種子貯蔵タンパク質が多くを占めている。種子貯蔵タンパク質に関連するアレルゲンの多くは、クーピンおよびプロラミンの2つのスーパーファミリーに属している。クーピン スーパーファミリーは germin という安定性の高いタンパク質のモチーフをもとに見出されたスーパーファミリーであり、多様な機能をもつタンパク質が属している。プロラミンスーパーファミリーには2S アルブミン、トリブシンインヒビター、脂質結合タンパク質などが含まれる。落花生において2S アルブミンは主要なアレルゲンであり、そのアレルゲン性には安定なタンパク質構造が寄与していると考えられている。

検討内容

本研究では、食物アレルギーに関連するプロラミンスーパーファミリーに属するタンパク質が多様な溶解性をもつことに着目し、プロラミンスーパーファミリーの溶解性に寄与する構造的要因を明らかにすることを目的として、ピーナッツ 2S アルブミンとコメプロラミンとの溶解性について分子モデルの構造に基づいて比較解析した。分子表面に露出しているN末端部の構造が大きく異なっていたため、ピーナッツ 2S アルブミンの N 末端部を削除した変異体の溶解性を解析したところ、水にもプロパノール溶液にも可溶性を示した。ソフトウェア Discovery Studio を用いて構造を考察することにより、ピーナッツ 2S アルブミンの N 末端部を除去したことにより親水性領域が減少するとともに分子内部の疎水性アミノ酸残基が部分的に露出したことが、アルコール濃度の高い領域での溶解性に寄与した可能性が考えられた。

発表論文(謝辞なし)

1) **Maruyama N**, Nakagawa T, Ito K, Cabanos C, Borres MP, Movérare R, Tanaka A, Sato S, Ebisawa M.

Measurement of specific IgE antibodies to Ses i 1 improves the diagnosis of sesame allergy. Clin Exp Allergy. (2016) 46(1):163-71.

一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析

Crystal structure analysis for microcrystalline powder by using
magnetically uniaxial orientation.

京都大学農学研究科森林科学専攻生物繊維学 菊地弘晃

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、タイトルに示したような新規のX線結晶構造解析手法の確立を試みた。

近年、放射光利用による回折データの高分解能化や、解析ソフトウェアの充実により、未知粉末結晶構造解析(*ab initio* 法)が盛んにおこなわれるようになってきた。そこでの大きな課題のひとつが、解析の初期段階でなされる格子定数の決定である。試料によっては、高分解の回折データに種々の指数付けソフトウェアを適用しても正しい格子定数が得られず、その後の段階に進めない場合も多い。単結晶回折像が3次元の逆格子情報をそのまま反映しているのに対し、粉末回折像では逆格子情報が1次元に縮退しているため、分解能の低下は避けがたい。何らかの方法で縮退を2次元にとどめることができれば、分解能の問題が大きく改善される。

そこで本研究では、微結晶試料を磁場(～1T)で一軸配向させ *in-situ* X 線回折測定を行い、得られた2次元回折像をもとに格子定数を決定する方法を提案した。この手法により、複数の化合物の格子定数が決定され、いずれも既知の値にほぼ一致した。本手法によって、従来の粉末法では格子定数の決定ができず構造を解くことのできなかった化合物の構造解析が可能になることが予想される。この成果については下に示した国内学会にて発表を行った。また、本研究を含めた包括的な内容について、下に示した国際学会にて報告した。

現在、本手法を用いて構造未知の化合物の構造解析を試みているほか、本研究から派生した複数の研究課題に取り組んでいる。これらについては来年度に成果報告を行う予定である。

国内学会発表

菊地弘晃, 木村史子, 木村恒久 平成 27 年度日本結晶学会年会, ポスター発表 PB-009,
平成 27 年 10 月 17-18 日, 大阪

国際学会発表

Fumiko Kimura, Tsuboi Chiaki, Shu Tsukui, Hiroaki Kikuchi, and Tsunehisa Kimura, The
international Conference on Magneto-Science 2015 (October 27-31, 2015, Matsumoto, Japan)

変調磁場による微結晶の三次元配向

Three dimensional alignments of microcrystals under modulated magnetic fields

京都大学農学研究科 森林科学専攻 生物繊維学分野

木村史子

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムのケンブリッジデータベースを用いて、①3次元配向できる結晶の探索を行い、②作製した3次元配向体による単結晶構造解析結果をケンブリッジデータベース中のデータと比較した。それにより、3次元配向体作製法の有用性を示すことが出来た。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

Chiaki Tsuboi, Kazuaki Aburaya, Fumiko Kimura, Masataka Maeyama and Tsunehisa Kimura, Single-crystal structure determination from microcrystalline powders ($\sim 5\ \mu\text{m}$) by an orientation attachment mountable on an in-house X-ray diffractometer, *CrystEngComm*, 2016, DOI: 10.1039/C5CE02307F.

ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？

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

京都大学 農学研究科 応用生物科学専攻 吉田 天士

研究成果概要

海洋で微生物ウイルスは宿主への感染を通じ物質循環に影響を及ぼす。しかし、ウイルス株は培養可能な一部の宿主に由来し、環境で真に卓越するウイルス-微生物系の知見は限定的である。我々はウイルスメタゲノムより 1000 を超える新規の完全長ウイルスゲノム (EVGs) の構築に成功した。本研究では、これらのウイルスの定量的解析法を確立し宿主の推定を行った。

大阪湾定点で 3 時間毎に取水した試料を分画後、核酸を抽出した。鉄共沈法と密度勾配超遠心法でウイルスを精製した。宿主画分 DNA の 16S rDNA を PCR 増幅した。これらを MiSeq で配列決定した。ゲノム頻度を算出するため、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ウイルスゲノムにリードをマッピングした。ゲノム頻度の定量性を検証するため、大阪湾由来 EVGs を qPCR で定量した。ウイルスと宿主の相対頻度に基づく階層クラスタリングを行い、宿主を推定した。

qPCR によるゲノム定量値とゲノム頻度は有意な相関を示した ($p < 0.001$)。EVGs はメタゲノムに高頻度に出現する配列であり、海洋に優占するウイルス由来であることが強く示唆された。本解析は、新規な OBV-N106 が最も高いゲノム頻度であること、新規古細菌ウイルスが高頻度であることを示すなど、従来の分離株に基づくウイルス生態像とは大きく異なる結果を示した。遺伝子構成から宿主が予測困難な EVGs のうち、6 EVGs はそれぞれ特定の系統の微生物と類似の出現パターンを示した。本成果により従来のウイルス生態学の課題が克服され、環境の網羅的なウイルス-宿主系の解析が可能となれば、海洋構造の理解へ大きな進展がもたらされると期待される。

発表論文(謝辞あり)

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して得られた成果を、論文として現在執筆中である。

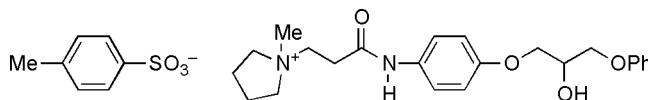
発表論文(謝辞なし)

有機微粉末結晶の *ab initio* 結晶構造解析
Ab initio crystallography of organic crystalline powder

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

すべての生物は、外来分子のキラリティーに対して敏感に反応することから、純鏡像体に対する需要が高まっている。既知の結晶性のラセミ体のうち、ラセミ混合物として存在するものは全体の 10% 未満であり、残り 90% 以上はラセミ化合物として存在する。前者については、優先晶出法を用いて光学分割が可能である一方、後者については、単純な再結晶による光学分割は原理的に不可能と考えられてきた。近年見出された優先富化現象は、ラセミ化合物の光学分割を可能とする新規光学分割法であることから、そのメカニズムを解明することは大変に重要である。結晶構造は、そのメカニズムの解明に向けて重要な知見を与えることが期待されるが、優先富化現象を示す PyrTMe-OPh のラセミ体を再結晶すると、得られるのは微粉末結晶である。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の計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて、PyrTMe-OPh の放射光粉末 X 線回折データから結晶構造の解析を行った。



PyrTMe-OPh

結晶中において PyrTMe-OPh は、分子間水素結合により二種類のヘテロキラルな二量体を形成し、これらが別の分子間水素結合によって *a* 軸に沿った一次元鎖構造を形成していた。さらに一次元鎖同士が π/π 相互作用により、二次元シート構造を構築していた。グラフセット法を用いて、この結晶構造をより詳細に解析したところ、二種類のヘテロキラルな二量体は、 $R_4^4(28)$ と $R_4^4(16)$ として記述される水素結合により形成されていた。また、一次元鎖は、これらの二つの水素結合が交互に繰り返すことによって形成されていることが分かった。この水素結合様式は、 β_1 形結晶である PyrIMe-OPh（スルホナートイオンのパラ位がヨウ素の類縁体）と似ていたが、新たな様式のものであった。すなわち、PyrTMe-OPh は、溶液中でのホモキラルな会合構造を反映した γ 形の結晶構造から上記の新規結晶構造への多形転移により、優先富化現象を発現していることが明らかとなった。

発表論文(謝辞なし)

Iwama, S.; Takahashi, H.; Tsue, H.; Tamura, R. *Cryst. Growth Des.* **2015**, *15*, 3052–3062.

分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析

Design and theoretical analysis of molecular conducting and magnetic materials

京都大学低温物質科学研究センター 分子性材料開拓・解析研究分野 中野 義明

研究成果概要

コロネン(cor)と $(M_6O_{19})^{2-}$ ($M = Mo, W$)から成る $(cor)_3M_6O_{19}$ ($M = Mo$ (**1**), W (**2**))の単結晶を作製し、その構造と物性を調べた[1]。錯体 **1** と **2** は同形であり、測定した範囲(100~298 K)では、構造相転移は観測されなかった。これらの塩は、その物性も酷似しており、以下に錯体 **2** の結果について述べる。結晶中には結晶学的に独立なコロネン分子が2分子(AとB)存在し、それらが AAB という様式で積層カラムを形成していた。理論的には $(cor)^{+}$ の ${}^2E_{2u}$ 状態は縮退しているため、ヤーン・テラー(JT)効果により 2A_u 、または ${}^2B_{3u}$ 状態となり対称性が D_{6h} から D_{2h} に低下すると予想される。UB3LYP/6-31+G(d,p)レベルで $(cor)^{+}$ の構造最適化を行いX線構造解析の結果と比較したところ、 $(cor)^{+}$ は 2A_u 状態の JT 変形をしていることが分かった。分子 A と B の変形の程度はほぼ同じであり、同程度の電荷を有すると考えられる。このことはラマン分光測定からも支持され、分子 A、B は+2/3 の電荷を有すると考えられる。錯体 **2** の導電性の評価を行ったところ、室温伝導度 3.0 S cm^{-1} 、活性化エネルギー29 meV の半導体的挙動を示した。密度汎関数法によるバンド計算の結果、錯体 **2** では、バンドギャップ 23 meV、分子 A、B の電荷はそれぞれ+0.70、+0.61 と見積もられ、実験結果を支持している。また、NMR 測定によりコロネンの運動を調べたところ、コロネンの回転速度は以前の報告よりも遅いことが分かった。本錯体における回転の抑制や静的 JT 歪みの観測は、強固な π - π 相互作用によると考えられる。

発表論文(謝辞あり)

- [1] “Conducting π -Columns of Highly Symmetric Coronene, the Smallest Fragment of Graphene”, Y. Yoshida, K. Isomura, H. Kishida, Y. Kumagai, M. Mizuno, M. Sakata, T. Koretsune, Y. Nakano, H. Yamochi, M. Maesato, G. Saito, *Chem. Eur. J.*, accepted

発表論文(謝辞なし)

- [2] D. V. Konarev, A. V. Kuzmin, S. I. Troyanov, Y. Nakano, S. S. Khasanov, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, *Dalton Trans.*, 44(20), 9672-9681 (2015)
[3] D. V. Konarev, S. I. Troyanov, K. A. Ustimenko, Y. Nakano, A. F. Shestakov, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, *Inorg. Chem.*, 54(10), 4597-4599 (2015)
[4] M. Servol, N. Moisan, E. Collet, H. Cailleau, W. Kaszub, L. Toupet, D. Boschetto, T. Ishikawa, A. Moreac, S. Koshihara, M. Maesato, M. Uruichi, X. F. Shao, Y. Nakano, H. Yamochi, G. Saito, M. Lorenc, *Phys. Rev. B*, 92(2), 024304/1-9 (2015)
[5] D. V. Konarev, A. V. Kuzmin, Y. Nakano, M. A. Faraonov, S. S. Khasanov, A. Otsuka, H. Yamochi, G. Saito, R. N. Lyubovskaya, *Inorg. Chem.*, 55(4), 1390-1402 (2016)

HIV-1 Vif の自然及び獲得免疫による多面的圧力からの逃避機序の解明

The escape mechanisms of HIV-1 Vif from innate and acquired immune suppression

京都大学 ウイルス研究所 附属レトロウイルス研究施設

泉 泰輔

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、抗 HIV-1 宿主因子 APOBEC3 蛋白質を標的とした新規抗 HIV-1 薬の開発を目指した。具体的には三次元蛋白質構造情報を元に *in silico* 解析手法を用いて APOBEC3 と HIV-1 Vif 結合モデルの構築を行った。

APOBEC3 蛋白質はヒトでは 22 番染色体に A から H まで 7 つ存在し、中でも APOBEC3F 及び APOBEC3G が抗 HIV-1 活性を示す事が知られている。HIV-1 はアクセサリ遺伝子の一つである Vif を介して APOBEC3 蛋白質の抗 HIV-1 活性から逃避している。Vif はその N 末端で APOBEC3F もしくは APOBEC3G と結合し、その C 末端で Cullin5, ElonginB,C といった宿主の E3 ユビキチンリガーゼ複合体と結合する。結果、Vif はユビキチンリガーゼと APOBEC3 蛋白質の橋渡しをするアダプター分子として働き、APOBEC3 蛋白質をユビキチン化させる。ユビキチン化 APOBEC3 蛋白質はその後プロテアームで分解され、抗 HIV-1 活性を示す事ができない。近年、Vif-Cullin5-ElonginB,C 複合体の構造及び APOBEC3F, APOBEC3G の Vif 結合部位の構造が X 線結晶構造解析により明らかになった。申請者はこれら結晶構造を用いて、実際に HIV-1 感染患者中で見出される HIV-1 Vif の構造変化を Discovery studio を用いて計算した。

HIV-1 感染患者中で見出されたら Vif 変異体は APOBEC3 結合部位に電化の異なるアミノ酸への変異が認められたが、構造的には大きな変化は認められなかった。しかし、蛋白質表面の電化は大きく変化していた。

次に、これら Vif 変異体と APOBEC3 蛋白質の結合モデルを Discovery Studio を用いて構築した。いくつか得られた結合パターンから、実際の実験データと照らし合わせて整合性の取れるパターンのモデルを現在解析中である。

本研究は論文化には間に合わなかった。

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

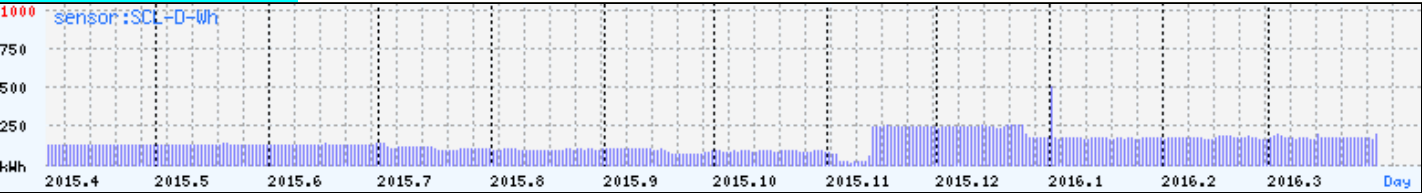
日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● システム稼働時間

システム名	稼働状況													年間運転時間(h)			システム運転状況
	Day	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dec	Jan	Feb	Mar	稼働	保守	運休	
大規模共有メモリサーバ (uva/uvb/uv1/uv2)	1													8743.5 (h)	40.5 (h)		システム稼働率：99.5 %
	5																
	10																
	15																
	20																
	25																
CPUクラスタサーバ (jp001-jp134)	30													2184 (h)			システム稼働率：100 % (システム停止なし)
	1																
	10																
	20																
GPUクラスタ (pk01-pk14)	30													2184 (h)			システム稼働率：100 % (システム停止なし)
	1																
	10																
	20																

	計	2184:00			2184:00	100.0 %
	月平均	182:00			182:00	100.0 %

サーバの消費電力量





システム稼働状況

スーパーコンピュータシステム

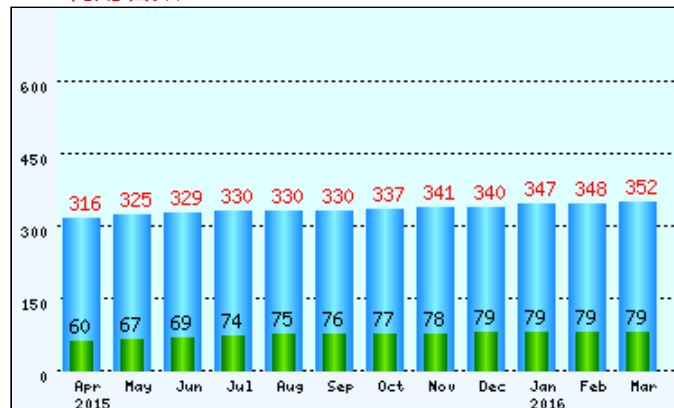
- ☒ システム稼働時間
- ☒ 部門別利用状況
- ☒ バッチジョブ処理状況
- ☒ 応用ソフトウェア利用状況

日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 利用者数の月別推移

項番	部 局 名	利用者 (人)	計算ノード 利用者数	アプリ 登録者数
1	化学研究所	169	(36)	(16)
2	エネルギー理工学研究所	3	(2)	(3)
3	生存圏研究所	2	(2)	(2)
4	防災研究所	1		
5	宇治地区事務局	103		
6	理学研究科・理学部	6	(5)	(5)
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	2	(2)	(2)
11	工学研究科・工学部	43	(16)	(11)
12	エネルギー科学研究科	7	(7)	(7)
13	農学研究科・農学部	8	(6)	(3)
14	総合人間学部			
15	人間・環境学研究科	1	(1)	(1)
16	数理解析研究所			
17	情報学研究科			
18	生命科学研究科			
19	学術情報メディアセンタ			
20	低温物質科学研究センター	2	(1)	(1)
21	物質－細胞統合システム拠点	2		
22	次世代開拓研究ユニット			
23	先端医工学研究ユニット	2		
24	iPS細胞研究所			
25	ウイルス研究所	1	(1)	(1)

(人) 利用者数 ■(Email利用者) ■(計算ノード利用者)



● 部局別のCPU使用時間

項番	部 局 名	共有メモリサーバ	CPUクラスタ	GPUクラスタ	ログインノード
1	化学研究所	39782日01時間07分	4676日23時間55分	00時間05分	1日03時間41分
2	エネルギー理工学研究所	4491日14時間27分			00時間04分
3	生存圏研究所	771日20時間03分			
4	防災研究所				
5	宇治地区事務局				
6	理学研究科・理学部				
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	1105日04時間17分	253日09時間27分		00時間20分
12	エネルギー科学研究科	14829日08時間34分			
13	農学研究科・農学部	207日09時間40分	1日03時間26分		00時間46分
14	総合人間学部				
15	人間・環境学研究科		1日18時間13分		

16	数理解析研究所				
17	情報学研究科				
18	生命科学研究科				
19	学術情報メディアセンタ				
20	低温物質科学研究センター	2648日14時間54分	1337日08時間51分		06時間28分
21	物質－細胞統合システム拠点				
22	次世代開拓研究ユニット				
23	先端医工学研究ユニット				
24	iPS細胞研究所				
25	ウイルス研究所				



システム稼働状況

スーパーコンピュータシステム

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

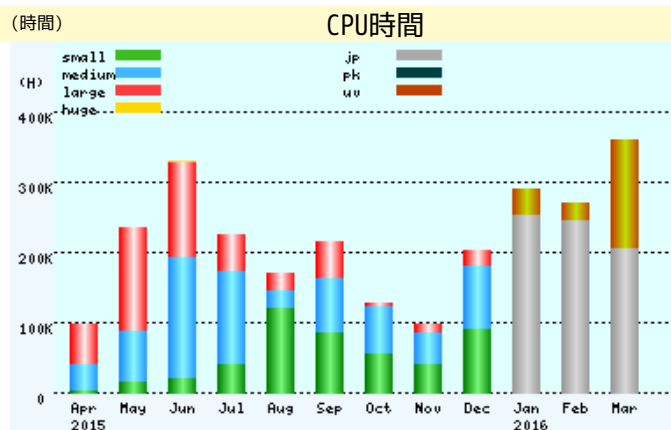
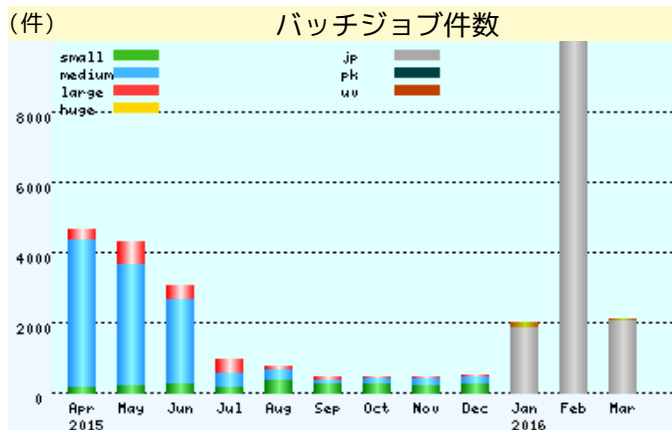
日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● バッチジョブ実行時間 (旧大規模共有メモリサーバ)

項番	項目	SMALLキュー	MEDIUMキュー	LARGEキュー	HUGEキュー
1	総ジョブ件数	2294	11400	2073	3
2	総CPU時間	19892日19時間13分	29963日12時間21分	21341日12時間06分	81日14時間21分
3	平均CPU時間	8日16時間01分	2日15時間04分	10日06時間57分	20日09時間35分
4	最大CPU時間	22時間15分	1日19時間54分	3日15時間36分	1日08時間38分
5	平均ジョブ実行時間	2日07時間36分	07時間03分	16時間44分	3日15時間25分
6	最大ジョブ実行時間	17時間55分	22時間44分	14時間38分	05時間49分
7	平均ジョブ待ち時間	04時間59分	03時間38分	03時間45分	00時間00分
8	最大ジョブ待ち時間	04時間44分	19時間19分	17時間03分	00時間00分

● バッチジョブ実行時間 (大規模共有メモリサーバ)

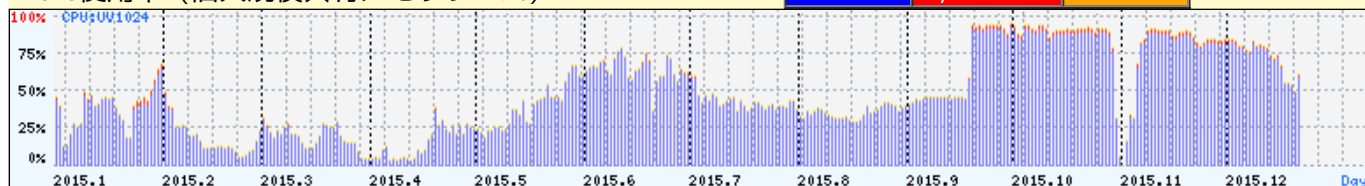
項番	項目	JP1, JP4, JP10, JP20 キュー	PK5 キュー	UVM1, UV16, UV128 キュー
1	総ジョブ件数	54320	0	261
2	総CPU時間	29456日15時間16分	0時間00分	8969日13時間43分
3	平均CPU時間	13時間00分	0時間00分	34日5時間38分
4	最大CPU時間	11日11時間02分	0時間00分	40日16時間18分
5	平均ジョブ実行時間	1時間30分	0時間00分	11時間25分
6	最大ジョブ実行時間	17時間20分	0時間00分	10時間28分
7	平均ジョブ待ち時間	0時間00分	0時間00分	1時間03分
8	最大ジョブ待ち時間	0時間07分	0時間00分	1時間34分



● 計算サーバのCPU使用率

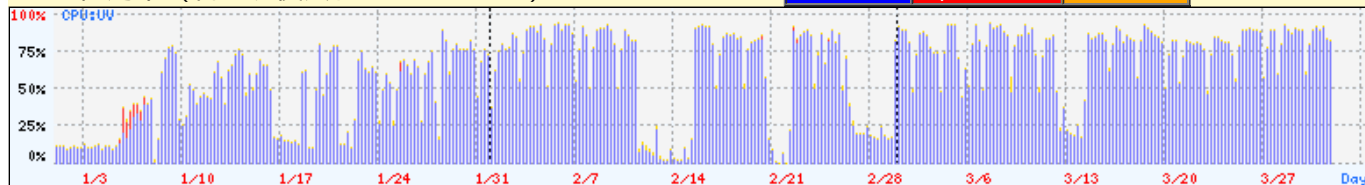
CPU使用率 (旧大規模共有メモリサーバ)

User CPU System CPU I/O wait



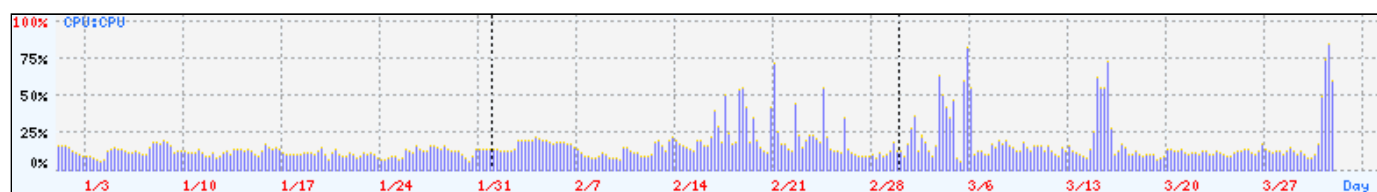
CPU使用率 (新大規模共有メモリサーバ)

User CPU System CPU I/O wait



CPU使用率 (CPUクラスタ)

User CPU System CPU I/O wait



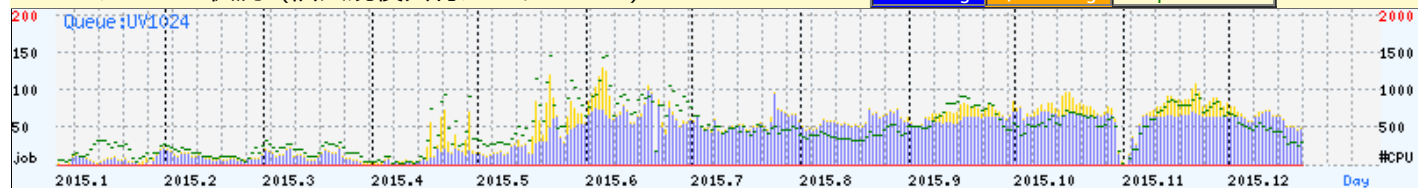
CPU使用率 (GPUクラス)

User CPU System CPU I/O wait



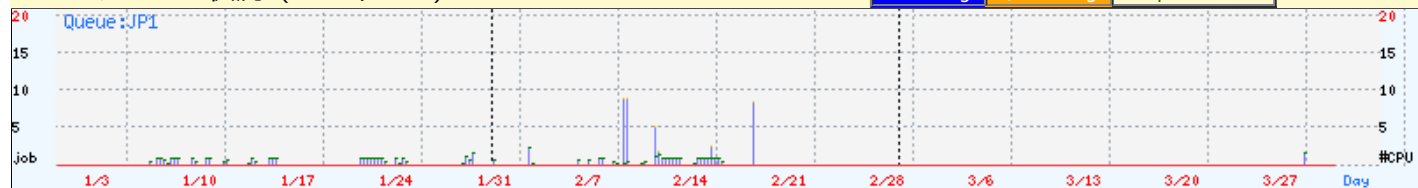
バッチジョブ状況 (旧大規模共有メモリサーバ)

Running Queueing Request CPU



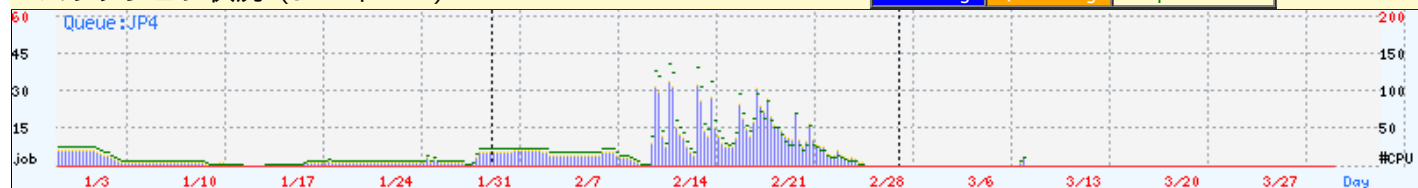
バッチジョブ状況 (JP1 キュー)

Running Queueing Request CPU



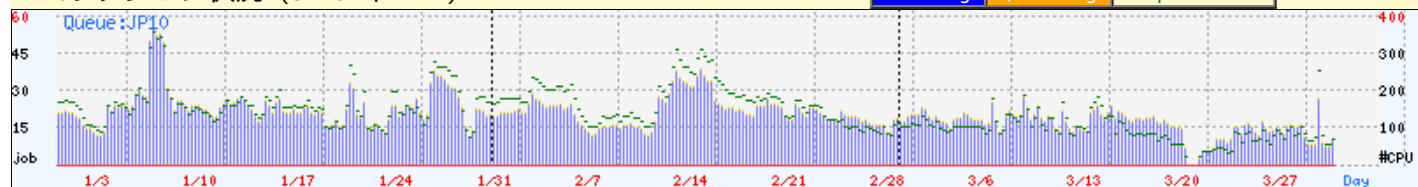
バッチジョブ状況 (JP4 キュー)

Running Queueing Request CPU



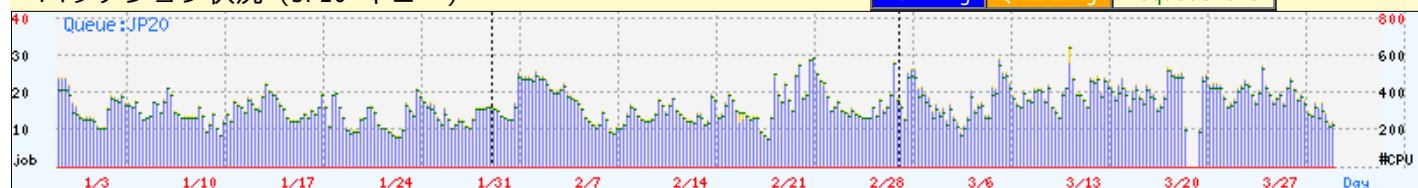
バッチジョブ状況 (JP10 キュー)

Running Queueing Request CPU



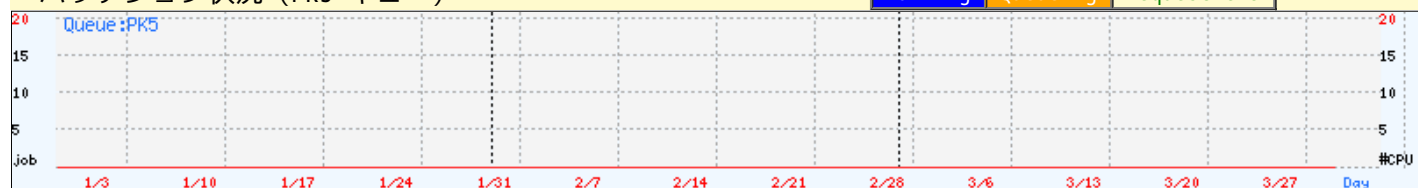
バッチジョブ状況 (JP20 キュー)

Running Queueing Request CPU



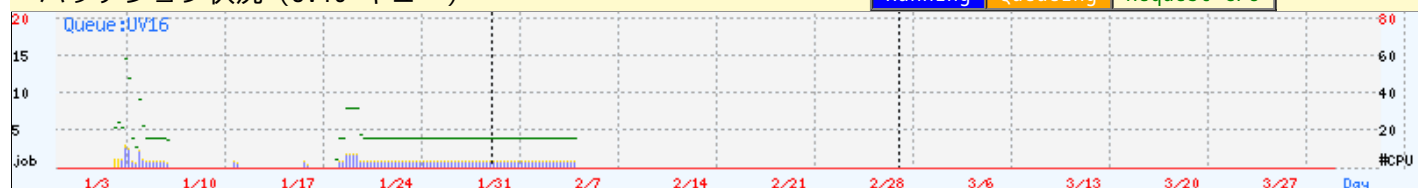
バッチジョブ状況 (PK5 キュー)

Running Queueing Request CPU



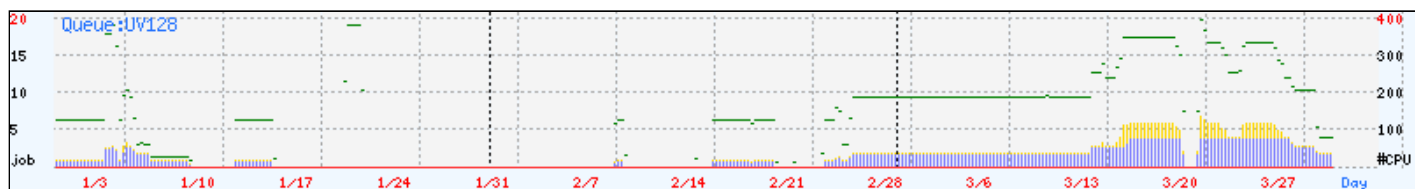
バッチジョブ状況 (UV16 キュー)

Running Queueing Request CPU

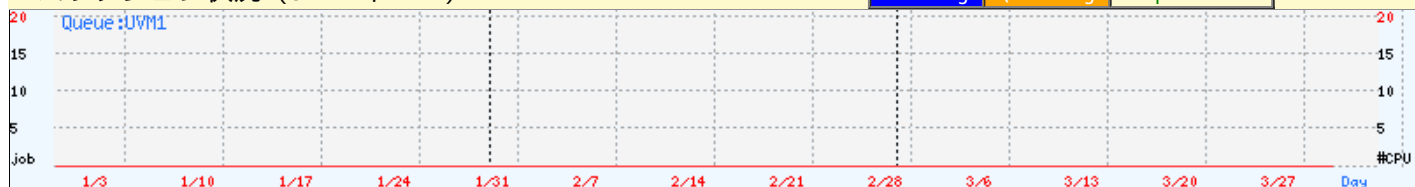


バッチジョブ状況 (UV128 キュー)

Running Queueing Request CPU

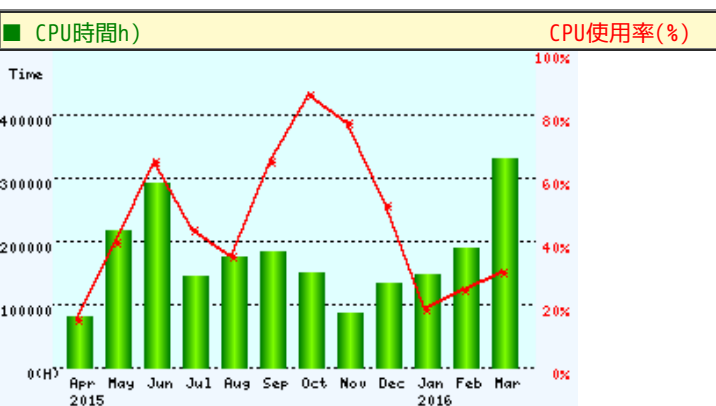


バッチジョブ状況 (UVM1 キュー)



● 月別のCPU使用時間とバッチジョブ件数(2015年度)

月	CPU使用率	CPU時間	バッチジョブ件数	CPU時間h)	CPU使用率(%)
4月	16.2 %	3416日14時間12分	4695		
5月	40.5 %	9142日19時間15分	4307		
6月	66.6 %	12262日10時間29分	3080		
7月	44.2 %	6035日16時間51分	979		
8月	36.6 %	7311日05時間00分	758		
9月	66.0 %	7647日03時間09分	456		
10月	87.1 %	6252日00時間50分	474		
11月	78.7 %	3611日10時間23分	487		
12月	52.7 %	5644日11時間45分	534		
1月	19.9 %	6139日18時間37分	2012		
2月	25.6 %	7975日02時間44分	50458		
3月	31.5 %	13783日05時間02分	2111		
年度計	-	89221日22時間23分	70351		
月平均	47.1 %	7435日03時間51分	5862		





システム稼働状況

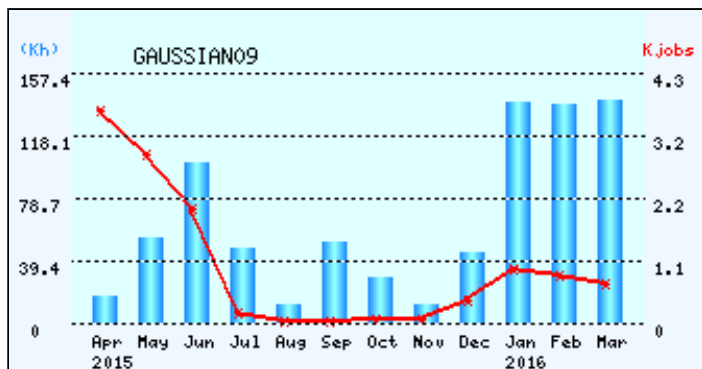
スーパーコンピュータシステム

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

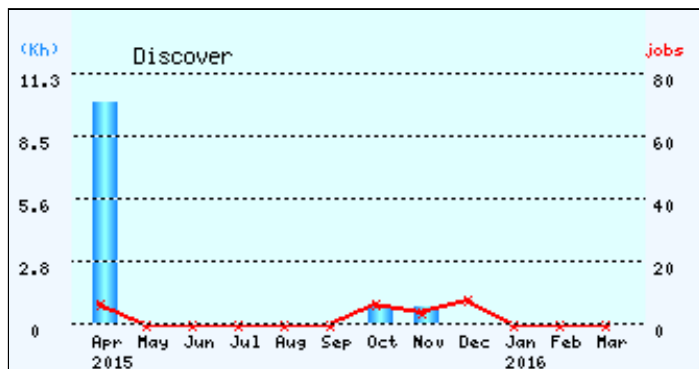
日本SGI株式会社 福本 淳司、大久保 宏一、上原 英也、西川 和嗣

● 応用ソフトウェア利用時間（ジョブ件数とCPU時間）

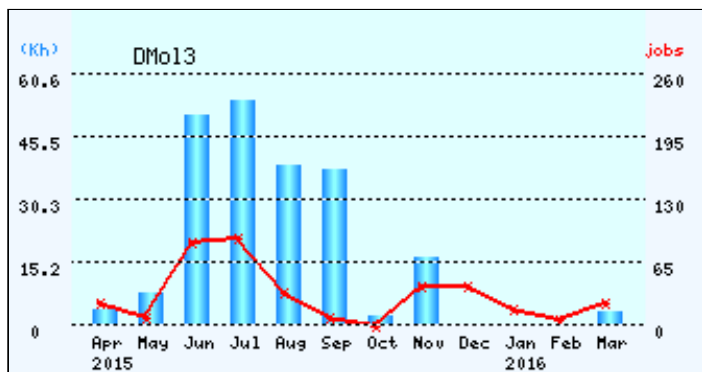
ジョブ件数とCPU時間



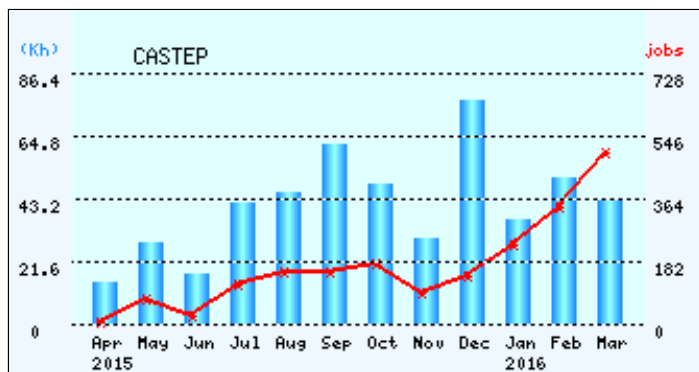
ジョブ件数とCPU時間



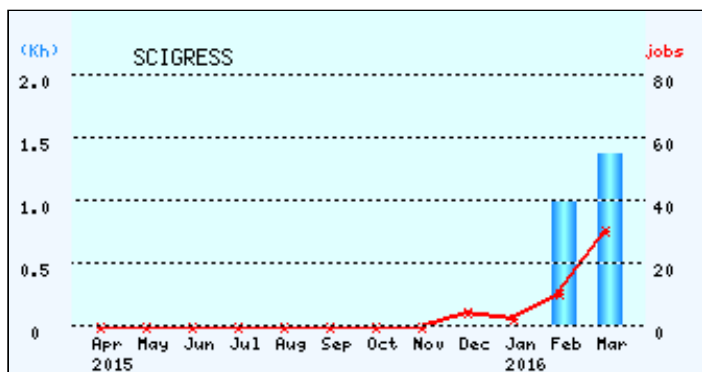
ジョブ件数とCPU時間



ジョブ件数とCPU時間



ジョブ件数とCPU時間



2015年度

京都大学

化学研究所

WWWサービスの利用状況

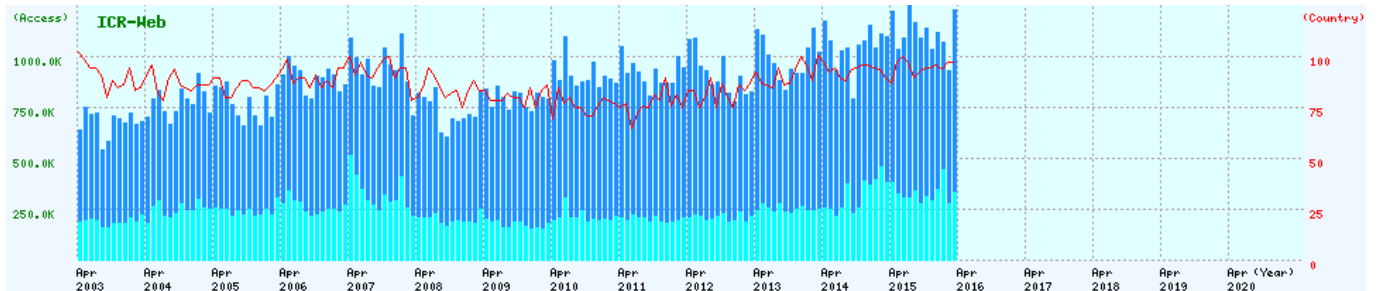
日本SGI(株) 西川 和嗣

月別の利用件数と利用国数

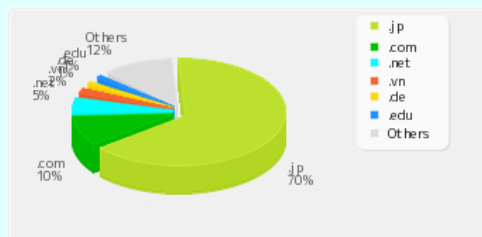
日本以外からの件数

日本からの件数

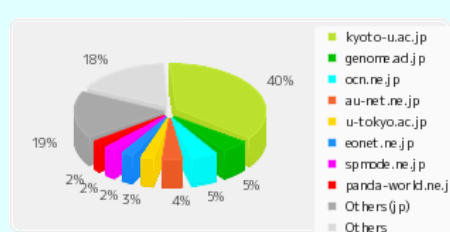
国数



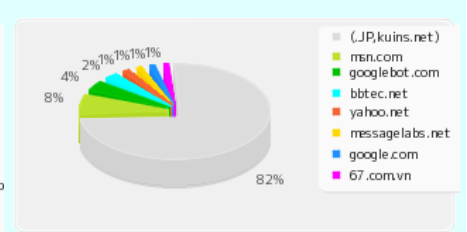
国別の利用件数(2015年度)



上位50機関の利用件数(2015年度)



上位50機関の利用件数(2015年度)



注) ・.kuins.net は JPドメインに含みます。
 ・上位50機関の利用件数グラフは、上位50機関の総利用件数を100%とした比率です。

2015年度 主な機関別の利用件数

ドメイン名	総件数	化学研究所情報	研究室情報	スパコン情報
67.com.vn	47176	45490	1025	661
access-internet.ne.jp	31404	9078	17651	4675
aist.go.jp	38498	18398	13786	6314
asahi-net.or.jp	61933	25082	28631	8220
au-net.ne.jp	382739	105585	224452	52702
baidu.com	28743	16318	2131	10294
bbtec.net	235341	97521	94216	43604
bit-drive.ne.jp	21703	11752	7980	1971
clients.your-server.de	36888	19816	1233	15839
dion.ne.jp	106694	31255	51080	24359
dti.ne.jp	31131	7473	6805	16853
e-mobile.ne.jp	34497	14320	14805	5372
eonet.ne.jp	226737	90525	101348	34864
fujifilm.co.jp	25531	3460	15994	6077
genome.ad.jp	503159	25896	2118	475145
googlebot.com	376243	262203	70909	43131
google.com	51083	12263	29022	9798
hokudai.ac.jp	57961	16916	31485	9560
home.ne.jp	71513	22216	38809	10488
infoweb.ne.jp	90707	35275	38208	17224
kanazawa-u.ac.jp	34952	16332	13900	4720
kddi.ne.jp	42444	18765	14663	9016
keio.ac.jp	29278	12401	12181	4696
kyoto-u.ac.jp	3790538	1149559	731261	1909718
kyushu-u.ac.jp	66475	16044	28098	22333
mesh.ad.jp	82738	26389	40999	15350
messagelabs.net	52149	13455	20529	18165
msn.com	731489	395698	198345	137446

nagoya-u.ac.jp	85446	20386	48918	16142
nttpc.ne.jp	63320	17361	29638	16321
ocn.ne.jp	500142	197586	214036	88520
osakafu-u.ac.jp	26670	9738	13945	2987
osaka-u.ac.jp	138038	40639	70553	26846
panasonic.com	24418	5371	15954	3093
panda-world.ne.jp	139512	40174	77938	21400
plala.or.jp	113710	41784	49943	21983
so-net.ne.jp	81095	28902	38847	13346
spmode.ne.jp	211806	60502	119882	31422
titech.ac.jp	51187	10835	23735	16617
tohoku.ac.jp	79342	24744	38662	15936
tus.ac.jp	27568	5040	13534	8994
ucom.ne.jp	98814	34496	42702	21616
u-tokyo.ac.jp	236448	66813	131332	38303
vectant.ne.jp	40320	11313	20942	8065
yahoo.net	104869	51458	34580	18831
yournet.ne.jp	37183	13073	19177	4933
zaq.ne.jp	58999	22686	30219	6094
zscaler9.net	32966	14750	15568	2648
Others or unknown	1388281	452727	447127	488427

2015年度 ゲノムネットサービス利用統計

西川 和嗣(日本SGI株式会社)

KEGG 生命システム情報統合データベース

KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) はシステム情報、ゲノム情報、ケミカル情報、疾患・医薬品情報に大別された 18 のデータベースから構成される「生命システム情報統合データベース」です。ゲノム情報とケミカル情報は生命の基本部品である DNA・RNA・タンパク質と低分子化合物・糖鎖・脂質等の分子構造情報、システム情報は基本部品から構成される生命システム、すなわち細胞・個体などの高次機能情報です。また、疾患・医薬品情報はシステムに対するゆらぎに関する高次機能情報です。

カテゴリ	データベース	内容
システム情報	KEGG PATHWAY	KEGG パスウェイマップ
	KEGG BRITE	BRITE 機能階層
	KEGG MODULE	機能単位 KEGG モジュール
ゲノム情報	KEGG ORTHOLOGY	KO オーソロググループ
	KEGG GENOME	全ゲノム配列既知の KEGG 生物種
	KEGG GENES / DGENES	各生物種の遺伝子カタログ
	KEGG SSDB	GENES の配列類似度とベストヒット情報
ケミカル情報	KEGG COMPOUND	代謝物質など低分子化合物
	KEGG GLYCAN	糖鎖
	KEGG REACTION	生体内化学反応
	KEGG RPAIR	反応ペア
	KEGG RCLASS	反応クラス
	KEGG ENZYME	酵素
疾患・医薬品情報	KEGG DISEASE	ヒト疾患
	KEGG DRUG	医薬品
	KEGG DGROUP	医薬品グループ
	KEGG ENVIRON	生薬、天然物など

ゲノムネットの計算ツール

ゲノムネットでは以下の 3 つのカテゴリー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 ETE3	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
OC Viewer	KEGG OC (KEGG Ortholog Cluster) へのインタフェース
KAAS	ゲノムまたは EST コンティグの自動アノテーションとパスウェイマッピング
MAPLE	ゲノム・メタゲノムに潜む代謝・生理機能ポテンシャル評価システム
EGassembler	大量の EST データからコンセンサスコンティグ自動生成
GENIES	カーネル法での多様なオミクスデータ統合による遺伝子ネットワーク予測
DINIES	医薬品一標的ネットワーク予測

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

DBGET/LinkDB: ゲノムネット統合データベース検索システム

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

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

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

KEGGデータベース (カテゴリー 1)

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

データベース	内容	備考
brite	機能階層・オントロジー	KEGG BRITE
pathway	パスウェイマップ	KEGG PATHWAY
module	KEGGモジュール	
orthology	オーソログ (KO) グループ	KEGG ORTHOLOGY
genome	KEGG生物種	KEGG GENOME
mgenome	メタゲノム	
genes	高精度ゲノム中の遺伝子カタログ	KEGG GENES
dgenes	ドラフトゲノム中の遺伝子カタログ	
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
rpair	反応ペアと化学構造変化	
rclass	反応クラス	
enzyme	酵素分類	
disease	病気	KEGG DISEASE (日本語)
drug	医薬品	KEGG DRUG (日本語)
edrug	医薬品グループ	

environ	生薬・天然物、環境物質、ほか	KEGG ENVIRON (日本語)
vgenome	ウイルスゲノム	RefSeq から自動作成
vgenes	ウイルスゲノム中の遺伝子	
expression	マイクロアレイ遺伝子発現プロファイル	著者による登録

その他のDBGETデータベース (カテゴリー2)

ゲノムネットがミラーリングしているデータベースは以下の通りです。

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

Web上の検索可能データベース (カテゴリー3)

ゲノムネットでキーワード検索のみできるデータベースは以下の通りです。

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

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

LinkDB検索のみ可能なデータベース (カテゴリー4)

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

PubMedデータベース (カテゴリー5)

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

表1 国別のWWW利用件数 (2015年度)

国名 (ドメイン名)	総件数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgens)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	8404	7266	(0)	(0)	(2)	(11)	(0)	(2)	(0)	1138	(13452)	0
Andorra (ad)	1548	1244	(103)	(0)	(1)	(0)	(0)	(2)	(0)	304	(0)	0
United Arab Emirates (ae)	14590	11893	(40)	(0)	(82)	(34)	(0)	(0)	(0)	2690	(627)	7
aerospace (aero)	377	167	(79)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	210	(0)	0
Antigua and Barbuda (ag)	72	54	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	14
Albania (al)	1764	1637	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(2)	121	(48)	6
Armenia (am)	16779	11806	(6)	(0)	(89)	(25)	(0)	(0)	(0)	4956	(39)	17
Netherlands Antilles (an)	428	176	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	222	(0)	30
Angola (ao)	250	227	(4)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(2)	23	(0)	0
Argentina (ar)	466352	269160	(174)	(0)	(3098)	(2085)	(10)	(32)	(44)	196723	(164881)	469
American Samoa (as)	146	125	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	21	(0)	0
Asia (asia)	89	13	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	76	(0)	0
Austria (at)	1291888	551119	(252)	(5)	(3555)	(3121)	(6)	(40)	(36)	740479	(709002)	290
Australia (au)	2716732	1440558	(2530)	(10)	(18086)	(9326)	(1)	(12)	(42025)	1274423	(1103526)	1751
Aruba (aw)	347	313	(0)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	33	(0)	1
Azerbaijan (az)	1261	1191	(0)	(0)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	56	(0)	14
Bosnia Hercegovina (ba)	5360	4406	(2)	(0)	(100)	(18)	(0)	(0)	(0)	950	(0)	4
Bangladesh (bd)	38093	22011	(36)	(0)	(435)	(163)	(0)	(0)	(0)	16063	(7061)	19
Belgium (be)	1204530	684419	(293)	(6)	(4567)	(31261)	(4)	(7)	(31)	519635	(412120)	476
Burkina Faso (bf)	22	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	0
Bulgaria (bg)	72087	55074	(22)	(0)	(484)	(254)	(6)	(9)	(0)	16939	(5212)	74
Bahrain (bh)	1833	1436	(2)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	397	(189)	0
Burundi (bi)	13	13	(0)	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
bitnet (bitnet)	1028	971	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	57	(5)	0
Business (biz)	248696	243831	(86)	(1)	(123)	(5561)	(4)	(6)	(3)	4612	(2270)	253
Bermuda (bm)	714	614	(3)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	100	(0)	0
Brunei Darussalam (bn)	1587	1297	(5)	(0)	(9)	(4)	(0)	(0)	(0)	267	(0)	23
Bolivia (bo)	4618	3978	(14)	(0)	(15)	(5)	(0)	(0)	(0)	635	(41)	5
Brazil (br)	3962493	2344764	(1197)	(75)	(22586)	(25116)	(14)	(110)	(90)	1615609	(1268198)	2120
Bahamas (bs)	6	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bhutan (bt)	2880	2746	(30)	(0)	(387)	(2)	(0)	(0)	(0)	127	(1)	7
Botswana (bw)	1124	1054	(5)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	66	(0)	4
Belarus (by)	23542	20114	(16)	(0)	(52)	(80)	(0)	(0)	(20)	3399	(119)	29
Belize (bz)	37	37	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Canada (ca)	5971660	3109421	(1145)	(2)	(79917)	(168093)	(3)	(41)	(5743)	2860803	(2535463)	1436
Catalan (cat)	7537	5411	(12)	(0)	(9)	(16)	(0)	(0)	(0)	2126	(1953)	0
Cocos Islands (cc)	539666	506098	(1080)	(0)	(3189)	(194)	(0)	(0)	(2)	33557	(9137)	11
Congo (cd)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Switzerland (ch)	3551347	1178044	(7182)	(20)	(16863)	(6204)	(0)	(217)	(68346)	2366007	(2217603)	7296
Cote D'ivoire (ci)	2584	2082	(1)	(0)	(6)	(3)	(0)	(0)	(0)	448	(0)	54
Cook Islands (ck)	11	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	1
Chile (cl)	2667820	209801	(70)	(8)	(3306)	(1286)	(0)	(15)	(2)	2457846	(2427741)	173
Cameroon (cm)	1950	1644	(3)	(0)	(8)	(2)	(0)	(0)	(0)	302	(0)	4
China (cn)	25576504	21250895	(729692)	(28)	(65487)	(36064)	(108)	(242)	(52859)	4320974	(1717558)	4635
Colombia (co)	1776058	363242	(106)	(2)	(4025)	(1686)	(1)	(12)	(15)	1412600	(1616427)	216
Commercial (com)	283467707	188906962	(8768730)	(4795)	(514775)	(443117)	(1741)	(6122)	(29407)	93420282	(11020732)	1140462
cooperative (coop)	80	73	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	3
Costa Rica (cr)	16061	8016	(3)	(0)	(26)	(47)	(0)	(1)	(0)	8026	(6182)	19
Cuba (cu)	11892	9279	(0)	(0)	(242)	(39)	(0)	(2)	(0)	2613	(3002)	0
Cape Verde (cv)	288	215	(0)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	73	(0)	0
Curacao (cw)	312	260	(2)	(0)	(36)	(0)	(0)	(0)	(0)	52	(0)	0
Christmas Island (cx)	54	44	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(0)	0
Cyprus (cy)	17545	12972	(3)	(0)	(28)	(77)	(0)	(0)	(0)	4572	(194)	1
Czechoslovakia (cz)	898479	418059	(345)	(7)	(4477)	(1505)	(9)	(30)	(34)	479466	(513289)	954
Germany (de)	47350122	39958624	(36504)	(315)	(52962)	(607511)	(242)	(381)	(17496)	7346807	(5135321)	44691
Denmark (dk)	6749052	436477	(108)	(3)	(2927)	(2743)	(0)	(13)	(28)	6312201	(4085235)	374
Dominica (dm)	36	32	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Dominican Republic (do)	5884	5091	(4)	(0)	(1)	(6)	(0)	(1)	(0)	791	(0)	2
Algeria (dz)	1097	975	(1)	(0)	(5)	(2)	(0)	(0)	(0)	115	(3)	7
Ecuador (ec)	9413	8176	(8)	(0)	(44)	(49)	(4)	(4)	(1)	1231	(116)	6
USA Educational (edu)	42980989	14257337	(1505)	(34)	(129615)	(1264175)	(13)	(227)	(2020027)	28712805	(51850416)	10847
Estonia (ee)	133787	71611	(20)	(0)	(373)	(194)	(0)	(0)	(2)	62160	(47295)	16
Egypt (eg)	17305	13885	(5)	(0)	(148)	(116)	(0)	(1)	(0)	3395	(5)	25
Eritrea (er)	83	83	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Spain (es)	2394370	1381542	(290)	(2)	(15617)	(20225)	(8)	(38)	(2184)	1011901	(773977)	927
Ethiopia (et)	40	40	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0

European Union (eu)	5424713	4692117	(27726)	(155)	(1883)	(7168)	(30)	(102)	(107)	715384	(47085)	17212
Finland (fi)	1890899	602247	(541)	(3)	(9926)	(1954)	(0)	(5)	(155295)	1287300	(1195388)	1352
Fiji (fj)	323	303	(0)	(0)	(3)	(8)	(0)	(0)	(0)	20	(0)	0
Micronesia (fm)	63	34	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	29	(0)	0
Faroe Islands (fo)	139	135	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
France (fr)	11140392	8181794	(1148)	(71)	(23234)	(596257)	(6)	(52)	(11414)	2957010	(3427769)	1588
gbl (gbl)	1729	1485	(39)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	(0)	220	(2)	24
Grenada (gd)	26	20	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	0
Georgia (ge)	46757	42853	(1)	(0)	(27)	(11386)	(0)	(0)	(0)	3881	(7)	23
Ghana (gh)	8644	4472	(17)	(0)	(21)	(6)	(0)	(0)	(0)	4131	(3280)	41
Gibraltar (gi)	4	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Greenland (gl)	929	226	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	703	(0)	0
USA Government (gov)	2187223	873484	(97)	(0)	(6510)	(18659)	(6)	(13)	(1322)	1313181	(1604830)	558
Equatorial Guinea (ga)	20	20	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Greece (gr)	778581	298943	(273)	(40)	(2505)	(2523)	(1)	(8)	(43)	479222	(493290)	416
South Georgia (gs)	22	7	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	8
Guatemala (gt)	19967	15653	(50)	(0)	(67)	(105)	(0)	(0)	(0)	4307	(1)	7
Guyana (gy)	857	814	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	41	(0)	2
Hong Kong (hk)	746306	356134	(255)	(0)	(3218)	(1606)	(3)	(16)	(36)	389977	(273698)	195
Honduras (hn)	1177	1093	(2)	(0)	(0)	(28)	(0)	(0)	(0)	84	(0)	0
Croatia (hr)	59408	43727	(36)	(0)	(151)	(164)	(0)	(0)	(0)	15613	(9496)	68
Hungary (hu)	2198488	1314612	(26321)	(22)	(5791)	(578588)	(4)	(1482)	(748)	864681	(59025)	19195
Indonesia (id)	122112	91180	(718)	(42)	(1198)	(575)	(0)	(1)	(0)	30716	(3341)	216
Ireland (ie)	447904	232358	(44)	(0)	(2482)	(1343)	(1)	(4)	(3)	215396	(110229)	150
Israel (il)	641846	381054	(127)	(2)	(10944)	(1593)	(0)	(13)	(18)	259345	(213738)	1447
Isle of Man (im)	8	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	0
India (in)	7987559	2052015	(288217)	(65)	(29857)	(40055)	(5)	(39)	(857)	5933356	(763957)	2188
Information domains (info)	44846	42708	(231)	(0)	(389)	(35)	(2)	(10)	(0)	2067	(210)	71
International (int)	197	178	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	19	(0)	0
British Indian Ocean Territory (io)	88913	75811	(1050)	(12)	(2363)	(568)	(97)	(123)	(484)	12683	(126)	419
Iran (ir)	178791	104488	(113)	(0)	(1022)	(689)	(4)	(6)	(1)	74164	(48132)	139
Iceland (is)	60187	44500	(8)	(0)	(265)	(335)	(0)	(2)	(0)	15666	(397)	21
Italy (it)	3228386	1559546	(1570)	(56)	(16792)	(15236)	(36)	(64)	(157)	1664981	(2912713)	3859
Bailiwick of Jersey (je)	30	14	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0
Jamaica (jm)	47	31	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0
Jordan (jo)	14760	13541	(28)	(0)	(66)	(33)	(0)	(1)	(0)	1181	(11)	38
Japan (jp)	115716518	55179069	(10362923)	(149861)	(360321)	(29816577)	(223)	(1460)	(207583)	60328540	(23230838)	208368
Kenya (ke)	18061	16465	(11)	(0)	(85)	(79)	(0)	(0)	(0)	1425	(188)	171
Kyrgyzstan (kg)	1880	1511	(16)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	362	(0)	7
Cambodia (kh)	2335	1636	(117)	(4)	(21)	(0)	(0)	(0)	(1)	696	(2)	3
Korea (kr)	8064434	3271885	(705)	(6)	(31980)	(11251)	(5)	(24)	(204)	4791804	(4058140)	745
Kuwait (kw)	3407	3246	(0)	(0)	(178)	(1)	(0)	(0)	(0)	161	(0)	0
Cayman Islands (ky)	328	301	(0)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	27	(1)	0
Kazakhstan (kz)	14213	11766	(6)	(0)	(150)	(36)	(0)	(10)	(0)	2418	(56)	29
Lao People's Democratic Republic (la)	2244	1870	(50)	(0)	(48)	(2)	(0)	(0)	(0)	374	(0)	0
Lebanon (lb)	9348	8097	(9)	(0)	(56)	(4)	(0)	(0)	(0)	1249	(2)	2
Liechtenstein (li)	6098	5338	(5)	(0)	(33)	(19)	(0)	(0)	(0)	759	(2)	1
Sri Lanka (lk)	3216	3010	(0)	(0)	(73)	(5)	(0)	(0)	(0)	205	(40)	1
Liberia (lr)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Lesotho (ls)	90	86	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Lithuania (lt)	90198	64747	(13)	(0)	(348)	(258)	(0)	(1)	(0)	25378	(8357)	73
Luxembourg (lu)	216212	109558	(98)	(1)	(286)	(279)	(0)	(8)	(10)	106641	(280834)	13
Latvia (lv)	6771	4940	(6)	(1)	(19)	(9)	(0)	(0)	(0)	1809	(5)	22
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	2975	2800	(0)	(0)	(49)	(8)	(0)	(0)	(0)	175	(3)	0
Morocco (ma)	5236	4469	(3)	(0)	(175)	(12)	(0)	(0)	(0)	751	(42)	16
Monaco (mc)	9786	7778	(16)	(0)	(364)	(35)	(0)	(0)	(0)	1993	(16)	15
Moldova (md)	19095	13988	(8)	(0)	(63)	(319)	(1)	(4)	(0)	5068	(1025)	39
Montenegro (me)	4435	2277	(43)	(0)	(3)	(7)	(0)	(0)	(0)	2148	(1272)	10
Madagascar (mg)	2057	1864	(3)	(0)	(51)	(16)	(0)	(0)	(0)	192	(0)	1
USA Military (mil)	55829	42960	(827)	(2)	(233)	(144)	(0)	(0)	(0)	12846	(3337)	23
Macedonia (mk)	3054	1996	(0)	(0)	(9)	(2)	(0)	(0)	(0)	1053	(7)	5
Myanmar (mm)	453	366	(11)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	87	(0)	0
Mongolia (mn)	1006	637	(2)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	369	(1)	0
Macau (mo)	5	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Montserrat (ms)	23	15	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Malta (mt)	196	178	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	0
Mauritius (mu)	142	137	(0)	(0)	(16)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	1
Maldives (mv)	164	148	(4)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0

Malawi (mw)	46	46	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mexico (mx)	11259470	5627867	(526)	(2)	(11698)	(9925)	(4)	(60)	(187)	5630032	(5355568)	1571
Malaysia (my)	224352	165984	(235)	(0)	(8463)	(644)	(2)	(12)	(2)	58217	(21023)	151
Mozambique (mz)	339	285	(1)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	27	(0)	27
Namibia (na)	1093	1057	(0)	(0)	(13)	(0)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	11
New Caledonia (nc)	2312	2184	(6)	(0)	(2)	(12)	(0)	(0)	(0)	128	(1)	0
Network (net)	208425288	116219490	(865053)	(11388)	(150421)	(1336427)	(463)	(1115)	(369547)	91761311	(27595019)	444487
Nigeria (ng)	12859	11753	(18)	(2)	(135)	(42)	(0)	(0)	(0)	992	(7)	114
Nicaragua (ni)	3296	2938	(4)	(0)	(6)	(5)	(0)	(0)	(0)	358	(3)	0
Netherlands (nl)	18003222	16532908	(7573)	(10)	(13031)	(12317)	(40)	(66)	(427)	1467871	(2835990)	2443
Norway (no)	507627	294874	(224)	(0)	(2377)	(1350)	(0)	(15)	(225)	212244	(150838)	509
Nepal (np)	5303	4266	(53)	(0)	(104)	(6)	(0)	(0)	(0)	1017	(5)	20
Niue (nu)	1049	713	(2)	(0)	(20)	(44)	(0)	(2)	(0)	322	(1)	14
New Zealand (nz)	1446813	186315	(513)	(1)	(1637)	(1221)	(0)	(4)	(6)	1260380	(1266388)	118
Oman (om)	6127	4671	(1)	(0)	(90)	(31)	(0)	(2)	(0)	1448	(1)	8
Organizations (org)	3970208	2282435	(3556)	(33)	(5824)	(2051)	(7)	(27)	(8038)	1646122	(1139184)	41651
Panama (pa)	313	258	(0)	(0)	(9)	(9)	(0)	(0)	(0)	55	(0)	0
Peru (pe)	59536	50023	(26)	(0)	(255)	(189)	(0)	(0)	(0)	9498	(142)	15
French Polynesia (pf)	5341	1110	(13)	(0)	(19)	(6)	(0)	(0)	(0)	4231	(1)	0
Papua New Guinea (pg)	158	152	(1)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	0
Philippines (ph)	93590	22079	(44)	(0)	(385)	(70)	(0)	(0)	(0)	71119	(71778)	392
Pakistan (pk)	227611	147087	(23)	(0)	(5712)	(1002)	(0)	(15)	(37383)	80358	(416598)	166
Poland (pl)	1416832	815923	(342)	(22)	(5462)	(4063)	(2)	(9)	(44)	600226	(327907)	683
professional (pro)	783	517	(2)	(0)	(1)	(16)	(0)	(0)	(0)	262	(2)	4
Palestinian territories (ps)	2240	1903	(0)	(0)	(42)	(2)	(0)	(0)	(0)	328	(1)	9
Portugal (pt)	20082352	1949909	(99)	(3)	(3014)	(2619)	(1)	(15)	(70)	18132093	(18144137)	350
Palau (pw)	1308	1281	(10)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	23	(0)	4
Paraguay (py)	5979	5266	(25)	(0)	(57)	(71)	(2)	(2)	(0)	620	(2)	93
Qatar (qa)	25	17	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Reunion (re)	480	367	(0)	(0)	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	109	(2)	4
Romania (ro)	106855	91068	(151)	(0)	(531)	(2586)	(58)	(69)	(5)	15588	(1783)	199
Republic of Serbia (rs)	62929	49384	(122)	(9)	(374)	(195)	(5)	(4)	(0)	13464	(62)	81
Russian Federation (ru)	4769896	4190280	(772)	(21)	(4587)	(8330)	(16)	(59)	(125)	572078	(325694)	7538
Rwanda (rw)	833	505	(13)	(0)	(18)	(8)	(0)	(0)	(0)	328	(0)	0
Saudi Arabia (sa)	6875	5746	(4)	(0)	(86)	(25)	(0)	(0)	(0)	1032	(4)	97
Solomon Islands (sb)	36	28	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Seychelles (sc)	158	87	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	46
Sudan (sd)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Sweden (se)	1321847	760152	(660)	(64)	(7701)	(3823)	(3)	(29)	(115)	560962	(1366934)	733
Singapore (sg)	691817	345372	(6372)	(0)	(3576)	(1854)	(0)	(1)	(50)	346187	(678045)	258
St. Helena (sh)	422	147	(26)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	267	(0)	8
Slovenia (si)	49397	37175	(0)	(0)	(140)	(190)	(0)	(1)	(0)	12203	(6583)	19
Slovakia (sk)	90474	58241	(39)	(0)	(545)	(232)	(7)	(7)	(0)	32093	(22842)	140
Sierra Leone (sl)	5	5	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
San Marino (sm)	182	156	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	1
Senegal (sn)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Suriname (sr)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Sao Tome and Principe (st)	2633	2190	(6)	(0)	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	442	(131)	1
USSR (su)	16102	10747	(0)	(0)	(64)	(67)	(0)	(0)	(0)	5354	(2854)	1
El Salvador (sv)	333	267	(2)	(0)	(0)	(6)	(0)	(0)	(0)	66	(0)	0
Sint Maarten (sx)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Syrian Arab Republic (sy)	14	7	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	0
Turks and Caicos Islands (tc)	437	404	(0)	(0)	(6)	(4)	(0)	(0)	(0)	33	(1)	0
French Southern Territories (tf)	18	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	18	(1)	0
Thailand (th)	5413423	284053	(2243)	(199)	(5246)	(1306)	(2)	(11)	(7)	5128692	(25026147)	678
Tajikistan (tj)	158	156	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Tokelau (tk)	699	494	(19)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	87	(0)	118
Timor-Leste (tl)	24	20	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
tld (tld)	334	315	(0)	(0)	(4)	(1)	(0)	(0)	(0)	18	(0)	1
Turkmenistan (tm)	95	91	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Tunisia (tn)	24	24	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Tonga (to)	196	120	(14)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	76	(0)	0
Turkey (tr)	502283	318660	(473)	(25)	(2976)	(1943)	(2)	(8)	(22)	183261	(82137)	362
travel (travel)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Trinidad and Tobago (tt)	1007	928	(0)	(0)	(28)	(1)	(0)	(0)	(0)	76	(1)	3
Tuvalu (tv)	9322	5177	(911)	(0)	(16)	(14)	(0)	(0)	(0)	4139	(76)	6
Taiwan (tw)	10394206	5838962	(3618)	(16)	(48394)	(18665)	(0)	(14)	(136)	4554233	(4548270)	1011

Tanzania (tz)	175	167	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Ukrainian SSR (ua)	298052	207942	(1362)	(6)	(711)	(10304)	(3)	(102)	(40)	86111	(6352)	3999
Uganda (ug)	4199	2485	(6)	(0)	(21)	(3)	(0)	(2)	(0)	1714	(0)	0
United Kingdom (uk)	11173212	2943715	(1614)	(25)	(31682)	(181368)	(10)	(73)	(150719)	8225446	(14953093)	4051
USA (us)	51719	44929	(20)	(0)	(452)	(257)	(2)	(9)	(0)	6613	(479)	177
Uruguay (uy)	205401	66037	(11)	(0)	(2062)	(414)	(0)	(1)	(4)	139341	(178713)	23
Uzbekistan (uz)	3226	2804	(6)	(0)	(36)	(4)	(0)	(1)	(0)	359	(0)	63
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	45	44	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
Venezuela (ve)	28137	5045	(1)	(0)	(34)	(11)	(0)	(1)	(12)	23082	(22412)	10
Virgin Islands (U.S.) (vi)	205	104	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	101	(0)	0
Viet Nam (vn)	71840232	44382922	(305094)	(15157)	(62485)	(57548)	(129)	(263)	(3406)	27452491	(31612533)	4819
Vanuatu (vu)	64	45	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	19	(0)	0
Samoa (ws)	403	321	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	82	(0)	0
Yemen (ye)	2320	1716	(90)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	603	(6)	1
Yugoslavia (yu)	15753	13122	(0)	(0)	(114)	(57)	(0)	(0)	(0)	2568	(415)	63
South Africa (za)	471632	336165	(101)	(6)	(3590)	(1396)	(2)	(7)	(13)	135276	(117868)	191
Zambia (zm)	360	255	(7)	(0)	(12)	(0)	(0)	(0)	(0)	95	(0)	10
Zimbabwe (zw)	3871	2707	(15)	(0)	(30)	(17)	(0)	(0)	(0)	1163	(0)	1
Others or unknown	353963577	127803024	(2517266)	(8452)	(658425)	(6177747)	(1838)	(7422)	(2001112)	226020122	(217431930)	140424
合 計	1323093065	689739056	(23984614)	(191097)	(2503813)	(41578920)	(5196)	(20443)	(5188377)	631218927	(480109297)	2134533

表2 主な機関別のWWW利用件数(2015年度 上位50ドメイン)

ドメイン名	総件数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgenes)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
yahoo.net	147800256	92499426	(142240)	(357)	(3697)	(2410)	(138)	(203)	(765)	54904792	(2073)	396038
msn.com	98821227	59968382	(5864992)	(2340)	(20988)	(2697)	(591)	(1445)	(192)	38744713	(6648)	108132
googlebot.com	94003250	59619927	(2048650)	(291)	(21629)	(1597)	(86)	(234)	(1228)	33698058	(36932)	685265
genome.ad.jp	31112304	30490466	(4620)	(800)	(57116)	(29725918)	(44)	(230)	(7512)	528005	(25271)	93765
baidu.com	26084757	19783182	(265677)	(29)	(17379)	(744)	(32)	(2372)	(490)	6212014	(4694)	89561
biologie.uni-frankfurt.de	25937614	25898379	(0)	(0)	(2049)	(53748)	(0)	(0)	(8)	39235	(34304)	0
amazonaws.com	25421632	23634193	(221133)	(157)	(348918)	(297015)	(65)	(231)	(666)	1782714	(186966)	4725
194.com.vn	23257922	39712	(1129)	(14)	(780)	(333)	(0)	(6)	(1)	23218171	(30237040)	39
com.cn	19802847	19291027	(8676)	(18)	(9683)	(10798)	(19)	(48)	(5)	511487	(261983)	333
bjtelecom.net	17489151	1008743	(1562)	(1)	(5929)	(122816)	(0)	(40)	(15)	16476227	(16340352)	4181
di.uminho.pt	17392507	54	(0)	(0)	(0)	(26)	(0)	(0)	(3)	17392440	(17400995)	13
lisa.surfsara.nl	15040373	15039452	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	921	(0)	0
cox.net	10382494	4598725	(2399)	(0)	(16551)	(25327)	(30)	(54)	(30)	5782525	(487530)	1244
ocn.ne.jp	9206626	2725492	(1550397)	(40646)	(10576)	(2737)	(7)	(87)	(108)	6478800	(2902053)	2334
exabot.com	8370318	8142896	(26)	(1)	(429)	(77)	(2)	(8)	(92)	226767	(98)	655
dgsca.unam.mx	8012071	3182148	(17)	(0)	(938)	(1189)	(0)	(8)	(99)	4829831	(4811556)	92
gdbnet.ad.jp	7545410	6585842	(297713)	(0)	(140)	(56)	(28)	(56)	(40)	959502	(20)	66
affrc.go.jp	7515552	115284	(1029)	(2)	(5116)	(484)	(0)	(15)	(4)	7399848	(7386549)	420
ngw01.hgc.jp	6894575	5533	(0)	(0)	(0)	(5469)	(0)	(0)	(97)	6889042	(6895548)	0
ahrefs.com	5871391	4630380	(38004)	(42)	(312)	(95)	(5)	(4)	(60)	1191768	(311)	49243
hinet.net	5631586	4509270	(18272)	(68)	(5179)	(5050)	(16)	(31)	(49)	1120297	(974258)	2019
spmode.ne.jp	5195969	314888	(1387846)	(6151)	(1315)	(239)	(4)	(1)	(0)	4880807	(853)	274
asianet.co.th	4982648	54127	(1710)	(181)	(1845)	(357)	(0)	(4)	(2)	4928209	(24908207)	312
comcast.net	4690087	2912054	(2732)	(51)	(17627)	(1017847)	(14)	(36)	(57331)	1775513	(1633688)	2520
rcil.gov.in	4532964	25401	(9)	(0)	(1097)	(252)	(0)	(1)	(19)	4507537	(22648)	26
au-net.ne.jp	4213866	429398	(1100767)	(8017)	(9995)	(776)	(5)	(11)	(13)	3781466	(18665)	3002
nsysu.edu.tw	4086875	4084887	(9)	(0)	(1577)	(2116)	(0)	(0)	(0)	1981	(2)	7
uci.edu	4074723	15173	(13)	(0)	(350)	(384)	(0)	(5)	(1)	4059545	(29318)	5
missouri.edu	3996459	64326	(21)	(0)	(728)	(545)	(0)	(3)	(13)	3932124	(2867040)	9
ym.edu.tw	3936384	81631	(60)	(0)	(425)	(189)	(0)	(0)	(51)	3854743	(3979370)	10
3.com.vn	3878721	3874974	(2242)	(71)	(262)	(4307)	(4)	(4)	(0)	3745	(6197)	2
189.com.vn	3870025	3869448	(650)	(0)	(211)	(2437)	(1)	(2)	(0)	564	(12)	13
clients.your-server.de	3666275	2304341	(29262)	(243)	(4408)	(5975)	(209)	(253)	(156)	1333857	(764)	28077
bu.edu	3637922	93749	(22)	(0)	(399)	(33291)	(0)	(2)	(46)	3544151	(1113845)	22
vpn-e.uni-kiel.de	3471893	3471875	(0)	(0)	(5)	(8)	(0)	(0)	(0)	18	(35)	0
p.mail.ru	3277164	3175515	(227)	(15)	(556)	(200)	(12)	(11)	(23)	99692	(128)	1957
haichar.univ-lyon1.fr	3263456	3236736	(0)	(0)	(2)	(27767)	(0)	(0)	(2)	26720	(12675)	0
185.com.vn	3135803	3135166	(895)	(4)	(127)	(2118)	(0)	(0)	(0)	634	(83)	3
ou.dk	2999650	49555	(0)	(0)	(233)	(417)	(0)	(5)	(0)	2950064	(1509478)	31
230.com.vn	2984960	2984073	(796)	(14)	(95)	(2382)	(0)	(0)	(0)	885	(2)	2
wowrack.com	2975568	1871856	(7203)	(37)	(81)	(66)	(12)	(9)	(17)	1099378	(75)	4334
google.com	2858476	2037338	(117674)	(1173)	(13449)	(4824)	(16)	(50)	(230)	690204	(6516)	130934
gla.ac.uk	2856354	106959	(6)	(0)	(355)	(1295)	(0)	(1)	(13)	2749377	(5213168)	18
180.com.vn	2698583	2697628	(923)	(0)	(74)	(2391)	(0)	(0)	(0)	945	(2652)	10
kyoto-u.ac.jp	2634508	622440	(26103)	(767)	(13986)	(1847)	(10)	(295)	(65)	2011262	(19960)	806
korea.ac.kr	2544895	355842	(16)	(0)	(8651)	(675)	(0)	(0)	(1)	2189021	(2113625)	32
osc.edu	2314287	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2314287	(2327849)	0
archive.org	2209145	1698046	(770)	(7)	(254)	(216)	(4)	(2)	(23)	471212	(658)	39887
rev.stofanet.dk	2208657	382	(1)	(0)	(18)	(68)	(0)	(0)	(0)	2208263	(1253316)	12
panda-world.ne.jp	2180872	184890	(619197)	(4668)	(1132)	(179)	(2)	(5)	(3)	1995794	(13407)	188

表3 国別のWWWアクセスノード数(2015年度)

国名(ドメイン名)	ノード数	WWW	(medicus)	(お薬手帳)	(/tools/)	(LinkDB)	(reaction)	(mgenes)	(rest(Genome))	KEGG	(rest(KEGG))	DBS
Ascension Island (ac)	27	26	(0)	(0)	(1)	(4)	(0)	(1)	(0)	14	(5)	0
Andorra (ad)	60	51	(1)	(0)	(1)	(0)	(0)	(1)	(0)	16	(0)	0
United Arab Emirates (ae)	1125	964	(28)	(0)	(37)	(13)	(0)	(0)	(0)	196	(3)	7
aerospace (aero)	22	11	(11)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	11	(0)	0
Afghanistan (af)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Antigua and Barbuda (ag)	23	21	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	1
Albania (al)	32	31	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(1)	12	(1)	2
Armenia (am)	594	507	(4)	(0)	(21)	(8)	(0)	(0)	(0)	123	(7)	6
Netherlands Antilles (an)	39	30	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	2
Angola (ao)	46	40	(2)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(1)	6	(0)	0
Argentina (ar)	7942	6644	(59)	(0)	(656)	(535)	(6)	(15)	(12)	2188	(139)	96
American Samoa (as)	18	14	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Asia (asia)	6	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Austria (at)	10683	9363	(108)	(2)	(943)	(664)	(3)	(10)	(14)	2830	(265)	62
Australia (au)	30203	26490	(1103)	(3)	(2619)	(1440)	(1)	(8)	(68)	8002	(967)	250
Aruba (aw)	61	53	(0)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	1
Azerbaijan (az)	107	99	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	3
Bosnia Hercegovina (ba)	381	351	(2)	(0)	(20)	(7)	(0)	(0)	(0)	46	(0)	2
Bangladesh (bd)	577	475	(13)	(0)	(87)	(36)	(0)	(0)	(0)	169	(5)	5
Belgium (be)	14009	12529	(145)	(1)	(958)	(828)	(2)	(4)	(13)	3453	(415)	81
Burkina Faso (bf)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Bulgaria (bg)	2025	1761	(10)	(0)	(62)	(50)	(2)	(2)	(0)	397	(31)	28
Bahrain (bh)	89	83	(2)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	10	(1)	0
Burundi (bi)	2	2	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
bitnet (bitnet)	18	18	(0)	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	11	(1)	0
Business (biz)	654	523	(28)	(0)	(37)	(68)	(2)	(2)	(2)	211	(5)	29
Bermuda (bm)	14	10	(2)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	0
Brunei Darussalam (bn)	158	137	(5)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	25	(0)	7
Bolivia (bo)	396	334	(9)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	73	(4)	3
Brazil (br)	42107	36382	(339)	(6)	(3323)	(2411)	(9)	(59)	(31)	11530	(1277)	604
Bahamas (bs)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Bhutan (bt)	63	44	(14)	(0)	(10)	(1)	(0)	(0)	(0)	22	(1)	1
Botswana (bw)	86	74	(3)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	3
Belarus (by)	1220	1036	(7)	(0)	(22)	(27)	(0)	(0)	(18)	258	(9)	10
Belize (bz)	5	5	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Canada (ca)	38856	35226	(821)	(1)	(4313)	(1801)	(2)	(28)	(45)	11294	(1135)	444
Catalan (cat)	114	101	(2)	(0)	(8)	(11)	(0)	(0)	(0)	36	(3)	6
Cocos Islands (cc)	156	102	(43)	(0)	(28)	(18)	(0)	(0)	(1)	87	(12)	1
Congo (cd)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Switzerland (ch)	17259	15039	(365)	(8)	(1402)	(906)	(0)	(17)	(106)	5197	(809)	210
Cote D'ivoire (ci)	256	230	(1)	(0)	(3)	(2)	(0)	(0)	(0)	70	(0)	24
Cook Islands (ck)	3	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Chile (cl)	4585	4091	(26)	(1)	(484)	(323)	(0)	(9)	(1)	1250	(134)	33
Cameroon (cm)	446	395	(3)	(0)	(4)	(2)	(0)	(0)	(0)	98	(0)	6
China (cn)	87534	68825	(7747)	(14)	(6443)	(2526)	(74)	(128)	(30)	32834	(1058)	1883
Colombia (co)	9347	8400	(45)	(1)	(733)	(478)	(1)	(8)	(7)	2010	(188)	86
Commercial (com)	264604	203185	(30940)	(1143)	(17743)	(8223)	(643)	(1453)	(1458)	99430	(7866)	15851
cooperative (coop)	10	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	1
Costa Rica (cr)	274	241	(3)	(0)	(6)	(15)	(0)	(1)	(0)	68	(2)	5
Cuba (cu)	133	124	(0)	(0)	(20)	(14)	(0)	(1)	(0)	36	(4)	0
Cape Verde (cv)	17	14	(0)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Curacao (cw)	49	47	(1)	(0)	(4)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Christmas Island (cx)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Cyprus (cy)	351	316	(3)	(0)	(10)	(8)	(0)	(0)	(0)	71	(5)	1
Czechoslovakia (cz)	8856	7838	(178)	(1)	(736)	(448)	(8)	(24)	(24)	2264	(346)	253
Germany (de)	89559	76590	(1561)	(59)	(8015)	(5896)	(46)	(123)	(183)	28000	(2987)	1255
Denmark (dk)	6304	5618	(52)	(1)	(506)	(522)	(0)	(6)	(10)	1924	(278)	63
Dominica (dm)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Dominican Republic (do)	518	442	(4)	(0)	(1)	(3)	(0)	(1)	(0)	89	(0)	3

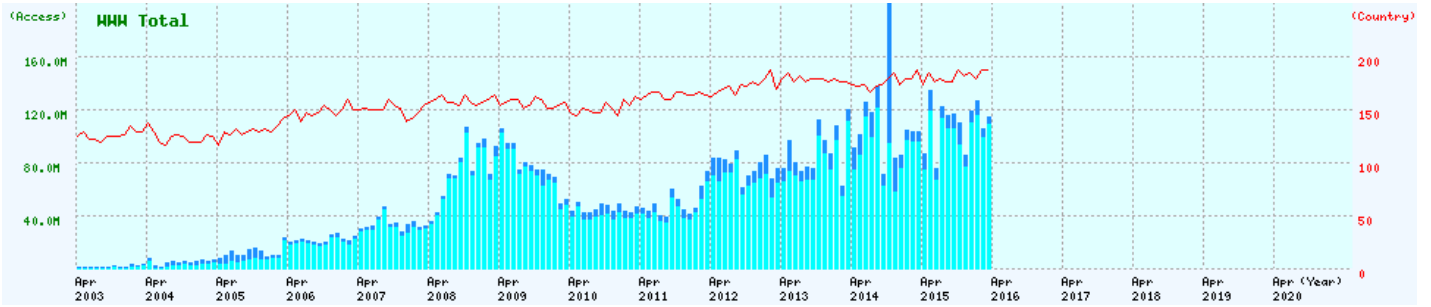
Algeria (dz)	39	32	(1)	(0)	(2)	(1)	(0)	(0)	(0)	11	(1)	2
Ecuador (ec)	410	350	(4)	(0)	(21)	(14)	(1)	(1)	(1)	84	(8)	6
USA Educational (edu)	172648	157833	(694)	(9)	(22752)	(11111)	(10)	(135)	(423)	47310	(6837)	1608
Estonia (ee)	1645	1476	(6)	(0)	(73)	(65)	(0)	(0)	(1)	358	(18)	9
Egypt (eg)	1051	940	(4)	(0)	(62)	(42)	(0)	(1)	(0)	190	(5)	4
Eritrea (er)	3	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Spain (es)	16496	14936	(102)	(1)	(2188)	(1510)	(6)	(20)	(39)	5023	(654)	160
Ethiopia (et)	6	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
European Union (eu)	4396	3774	(837)	(35)	(326)	(191)	(19)	(38)	(27)	2231	(205)	945
Finland (fi)	11029	10048	(67)	(1)	(554)	(536)	(0)	(4)	(19)	2107	(293)	77
Fiji (fj)	46	44	(0)	(0)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Falkland Islands (fk)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Micronesia (fm)	9	4	(5)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	0
Faroe Islands (fo)	7	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
France (fr)	28436	25642	(363)	(8)	(3475)	(2139)	(4)	(34)	(47)	8163	(1066)	241
gbl (gbl)	104	99	(28)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	68	(2)	15
Grenada (gd)	8	8	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Georgia (ge)	588	497	(1)	(0)	(6)	(16)	(0)	(0)	(0)	112	(4)	5
Ghana (gh)	282	254	(6)	(0)	(12)	(4)	(0)	(0)	(0)	49	(2)	2
Gibraltar (gi)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Greenland (gl)	22	18	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	2
USA Government (gov)	6706	5814	(49)	(0)	(950)	(575)	(4)	(9)	(32)	2343	(693)	100
Equatorial Guinea (gq)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Greece (gr)	8650	7533	(42)	(3)	(450)	(373)	(1)	(7)	(16)	2054	(374)	63
South Georgia (gs)	2	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	2
Guatemala (gt)	852	716	(22)	(0)	(17)	(31)	(0)	(0)	(0)	176	(1)	5
Guyana (gy)	96	94	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	12	(0)	2
Hong Kong (hk)	4974	4227	(189)	(0)	(496)	(263)	(2)	(8)	(13)	1822	(201)	36
Honduras (hn)	71	63	(2)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	1
Croatia (hr)	2382	2097	(20)	(0)	(49)	(53)	(0)	(0)	(0)	465	(27)	27
Haiti (ht)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Hungary (hu)	7297	6461	(168)	(6)	(401)	(336)	(3)	(87)	(60)	1527	(164)	176
Indonesia (id)	5060	4257	(289)	(4)	(186)	(125)	(0)	(1)	(0)	1300	(34)	81
Ireland (ie)	4159	3738	(31)	(0)	(376)	(327)	(1)	(3)	(2)	1218	(112)	32
Israel (il)	6496	5908	(40)	(1)	(703)	(372)	(0)	(7)	(8)	1429	(123)	131
Isle of Man (im)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
India (in)	28321	24524	(474)	(12)	(4026)	(1631)	(3)	(26)	(46)	7798	(598)	484
Information domains (info)	800	518	(162)	(0)	(32)	(12)	(2)	(5)	(0)	343	(32)	23
International (int)	13	9	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
British Indian Ocean Territory (io)	462	363	(74)	(3)	(65)	(60)	(31)	(39)	(31)	188	(17)	69
Iran (ir)	3510	3063	(9)	(0)	(258)	(191)	(1)	(2)	(1)	843	(92)	35
Iceland (is)	870	779	(5)	(0)	(43)	(72)	(0)	(2)	(0)	258	(10)	8
Italy (it)	35412	31291	(389)	(17)	(3178)	(1853)	(27)	(44)	(52)	8870	(1223)	257
Bailiwick of Jersey (je)	6	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Jamaica (jm)	7	6	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	0
Jordan (jo)	1276	1167	(13)	(0)	(33)	(12)	(0)	(1)	(0)	154	(8)	15
Japan (jp)	3534858	227871	(3362453)	(7216)	(32726)	(8996)	(99)	(539)	(268)	3406689	(2420)	2875
Kenya (ke)	253	234	(8)	(0)	(18)	(16)	(0)	(0)	(0)	50	(3)	8
Kyrgyzstan (kg)	190	160	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	33	(0)	4
Cambodia (kh)	227	163	(50)	(2)	(9)	(0)	(0)	(0)	(1)	73	(1)	1
Korea (kr)	17513	15943	(107)	(1)	(3457)	(1279)	(2)	(13)	(30)	5489	(562)	131
Kuwait (kw)	77	75	(0)	(0)	(15)	(1)	(0)	(0)	(0)	14	(0)	0
Cayman Islands (ky)	46	39	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(1)	0
Kazakhstan (kz)	1062	890	(6)	(0)	(26)	(14)	(0)	(3)	(0)	211	(7)	12
Lao People's Democratic Republic (la)	12	12	(6)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	0
Lebanon (lb)	289	264	(3)	(0)	(25)	(3)	(0)	(0)	(0)	68	(2)	2
Liechtenstein (li)	172	156	(4)	(0)	(10)	(3)	(0)	(0)	(0)	42	(2)	2
Sri Lanka (lk)	79	75	(0)	(0)	(21)	(3)	(0)	(0)	(0)	16	(2)	1
Liberia (lr)	1	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Lesotho (ls)	16	15	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0

Lithuania (lt)	2438	2158	(10)	(0)	(87)	(74)	(0)	(1)	(0)	421	(22)	27
Luxembourg (lu)	778	674	(23)	(1)	(70)	(55)	(0)	(2)	(3)	260	(47)	5
Latvia (lv)	446	375	(3)	(1)	(10)	(3)	(0)	(0)	(0)	83	(2)	8
Libyan Arab Jamahiriya (ly)	335	311	(0)	(0)	(22)	(6)	(0)	(0)	(0)	30	(3)	1
Morocco (ma)	360	317	(3)	(0)	(23)	(6)	(0)	(0)	(0)	55	(1)	9
Monaco (mc)	253	193	(14)	(0)	(17)	(7)	(0)	(0)	(0)	103	(1)	2
Moldova (md)	1026	866	(8)	(0)	(22)	(36)	(1)	(2)	(0)	223	(11)	20
Montenegro (me)	183	134	(15)	(0)	(1)	(2)	(0)	(0)	(0)	60	(4)	8
Madagascar (mg)	112	101	(3)	(0)	(19)	(5)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	1
USA Military (mil)	884	732	(113)	(1)	(37)	(40)	(0)	(0)	(0)	283	(10)	8
Macedonia (mk)	240	215	(0)	(0)	(5)	(1)	(0)	(0)	(0)	31	(3)	5
Myanmar (mm)	33	20	(10)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	16	(0)	0
Mongolia (mn)	74	66	(2)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	17	(1)	0
Macau (mo)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Montserrat (ms)	4	4	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Malta (mt)	14	13	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Mauritius (mu)	26	23	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Maldives (mv)	19	15	(4)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Malawi (mw)	7	7	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Mexico (mx)	35376	31443	(265)	(1)	(2410)	(2100)	(4)	(39)	(18)	8587	(493)	344
Malaysia (my)	3025	2729	(115)	(0)	(323)	(179)	(1)	(4)	(2)	715	(75)	42
Mozambique (mz)	25	19	(1)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	5	(0)	2
Namibia (na)	109	99	(0)	(0)	(5)	(0)	(0)	(0)	(0)	9	(0)	2
New Caledonia (nc)	63	58	(3)	(0)	(2)	(3)	(0)	(0)	(0)	8	(1)	0
Network (net)	718090	374932	(290400)	(651)	(22517)	(13049)	(159)	(409)	(362)	387242	(6440)	7157
Nigeria (ng)	455	417	(2)	(1)	(27)	(25)	(0)	(0)	(0)	79	(3)	8
Nicaragua (ni)	245	207	(3)	(0)	(3)	(4)	(0)	(0)	(0)	44	(1)	0
Netherlands (nl)	24287	21706	(228)	(4)	(1839)	(1727)	(28)	(36)	(71)	6371	(836)	285
Norway (no)	6259	5491	(56)	(0)	(481)	(354)	(0)	(5)	(18)	1740	(237)	59
Nepal (np)	337	296	(20)	(0)	(14)	(3)	(0)	(0)	(0)	58	(4)	4
Niue (nu)	46	37	(1)	(0)	(7)	(5)	(0)	(1)	(0)	12	(0)	2
New Zealand (nz)	4982	4255	(322)	(1)	(322)	(288)	(0)	(3)	(2)	1325	(87)	38
Oman (om)	47	43	(1)	(0)	(12)	(5)	(0)	(2)	(0)	16	(1)	4
Organizations (org)	8012	7150	(271)	(8)	(935)	(456)	(6)	(19)	(108)	2489	(529)	297
Panama (pa)	19	16	(0)	(0)	(3)	(2)	(0)	(0)	(0)	4	(0)	0
Peru (pe)	840	702	(17)	(0)	(61)	(37)	(0)	(0)	(0)	196	(3)	9
French Polynesia (pf)	49	28	(10)	(0)	(4)	(3)	(0)	(0)	(0)	30	(1)	0
Papua New Guinea (pg)	15	14	(1)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Philippines (ph)	1204	931	(37)	(0)	(67)	(28)	(0)	(0)	(0)	319	(18)	249
Pakistan (pk)	2505	2263	(11)	(0)	(500)	(192)	(0)	(7)	(9)	610	(61)	45
Poland (pl)	23519	20282	(129)	(4)	(1119)	(1083)	(1)	(6)	(14)	5643	(404)	189
professional (pro)	40	32	(2)	(0)	(1)	(2)	(0)	(0)	(0)	15	(2)	1
Palestinian territories (ps)	189	177	(0)	(0)	(13)	(1)	(0)	(0)	(0)	17	(1)	3
Portugal (pt)	9366	8364	(34)	(2)	(636)	(529)	(1)	(8)	(21)	2263	(340)	82
Palau (pw)	198	197	(10)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	13	(0)	2
Paraguay (py)	342	288	(16)	(0)	(16)	(12)	(1)	(1)	(0)	62	(2)	6
Qatar (qa)	5	3	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Reunion (re)	29	27	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(1)	1
Romania (ro)	6447	5801	(69)	(0)	(148)	(220)	(23)	(27)	(3)	937	(29)	84
Republic of Serbia (rs)	3718	3413	(16)	(3)	(99)	(47)	(3)	(3)	(0)	383	(18)	34
Russian Federation (ru)	26044	21498	(347)	(15)	(875)	(841)	(11)	(30)	(58)	6022	(658)	871
Rwanda (rw)	56	45	(5)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	14	(0)	0
Saudi Arabia (sa)	560	511	(4)	(0)	(26)	(9)	(0)	(0)	(0)	68	(3)	11
Solomon Islands (sb)	10	8	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Seychelles (sc)	70	40	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	23	(0)	23
Sudan (sd)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Sweden (se)	16051	14277	(130)	(4)	(1394)	(1020)	(2)	(15)	(25)	4607	(525)	134
Singapore (sg)	4858	4261	(412)	(0)	(543)	(334)	(0)	(1)	(32)	1616	(113)	71
St. Helena (sh)	21	6	(8)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	17	(0)	1
Slovenia (si)	696	646	(0)	(0)	(39)	(61)	(0)	(1)	(0)	152	(19)	7
Slovakia (sk)	3524	3206	(19)	(0)	(163)	(78)	(2)	(2)	(0)	511	(36)	29
Sierra Leone (sl)	1	1	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0

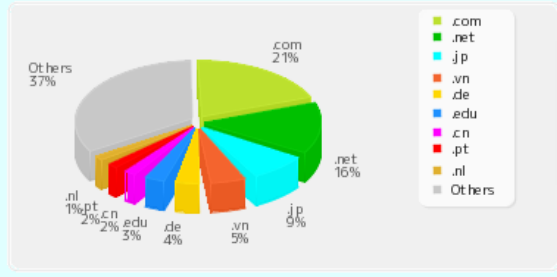
San Marino (sm)	14	13	(0)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	1
Senegal (sn)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Somalia (so)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Suriname (sr)	2	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Sao Tome and Principe (st)	52	46	(4)	(0)	(3)	(0)	(0)	(0)	(0)	20	(2)	1
USSR (su)	227	189	(0)	(0)	(14)	(20)	(0)	(0)	(0)	76	(4)	0
El Salvador (sv)	30	23	(2)	(0)	(0)	(1)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	0
Sint Maarten (sx)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Syrian Arab Republic (sy)	4	3	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Turks and Caicos Islands (tc)	64	53	(0)	(0)	(2)	(3)	(0)	(0)	(0)	12	(1)	0
French Southern Territories (tf)	2	0	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(1)	0
Thailand (th)	16659	13922	(1447)	(10)	(1618)	(349)	(2)	(6)	(4)	3772	(169)	196
Tajikistan (tj)	8	6	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	2	(0)	0
Tokelau (tk)	14	11	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	2
Timor-Leste (tl)	5	4	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
tld (tld)	34	32	(0)	(0)	(3)	(1)	(0)	(0)	(0)	6	(0)	1
Turkmenistan (tm)	9	8	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Tunisia (tn)	1	1	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	0
Tonga (to)	33	20	(12)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	14	(0)	0
Turkey (tr)	14858	13122	(124)	(3)	(713)	(495)	(2)	(7)	(9)	3056	(192)	131
Trinidad and Tobago (tt)	190	177	(0)	(0)	(5)	(1)	(0)	(0)	(0)	20	(1)	2
Tuvalu (tv)	416	152	(244)	(0)	(8)	(8)	(0)	(0)	(0)	279	(6)	3
Taiwan (tw)	20120	17629	(949)	(4)	(2069)	(1051)	(0)	(11)	(45)	6708	(696)	129
Tanzania (tz)	15	13	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	3	(0)	1
Ukrainian SSR (ua)	4954	4196	(76)	(2)	(136)	(159)	(2)	(13)	(3)	1364	(32)	228
Uganda (ug)	144	131	(5)	(0)	(14)	(2)	(0)	(1)	(0)	49	(0)	0
United Kingdom (uk)	48687	42667	(256)	(5)	(4905)	(2959)	(6)	(37)	(132)	14463	(1840)	572
USA (us)	2360	2156	(17)	(0)	(99)	(49)	(2)	(5)	(0)	362	(17)	68
Uruguay (uy)	1238	1092	(5)	(0)	(63)	(99)	(0)	(1)	(3)	311	(33)	9
Uzbekistan (uz)	154	134	(6)	(0)	(15)	(3)	(0)	(1)	(0)	29	(0)	2
Saint Vincent and the Grenadines (vc)	3	2	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	0	(0)	1
Venezuela (ve)	260	185	(1)	(0)	(7)	(3)	(0)	(1)	(3)	89	(8)	2
Virgin Islands (U.S.) (vi)	13	13	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Viet Nam (vn)	224514	92852	(119341)	(335)	(8927)	(3558)	(79)	(134)	(29)	146908	(1016)	1337
Vanuatu (vu)	2	2	(1)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	(0)	1	(0)	0
Samoa (ws)	49	44	(0)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	7	(0)	1
Yemen (ye)	137	122	(10)	(0)	(1)	(1)	(0)	(0)	(0)	23	(3)	1
Yugoslavia (yu)	141	134	(0)	(0)	(43)	(19)	(0)	(0)	(0)	63	(6)	8
South Africa (za)	4455	3995	(30)	(1)	(517)	(216)	(2)	(6)	(6)	972	(115)	48
Zambia (zm)	31	23	(6)	(0)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)	8	(0)	1
Zimbabwe (zw)	144	125	(7)	(0)	(11)	(5)	(0)	(0)	(0)	31	(0)	1
Others or unknown	968801	767683	(86227)	(849)	(79794)	(40026)	(742)	(2012)	(1005)	350242	(18594)	14984
合 計	6769302	2592590	(3912381)	(10466)	(260224)	(131497)	(2095)	(5789)	(5127)	4686435	(67549)	56909

月別の利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

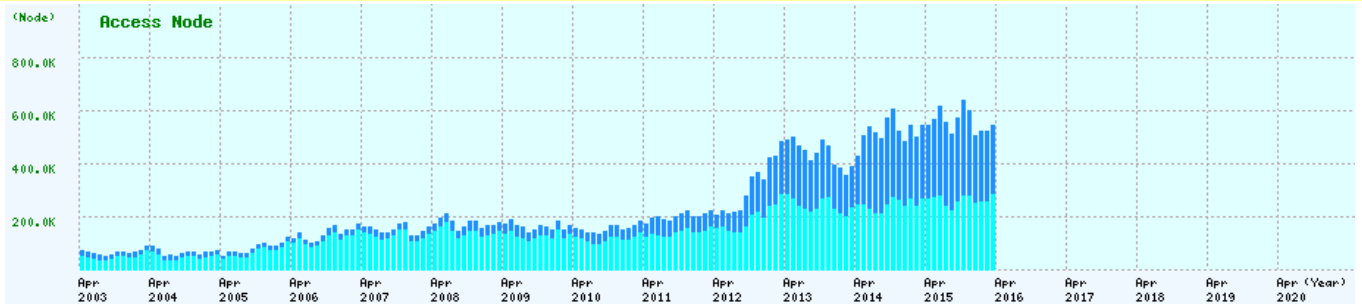


国別のWWW利用件数(2015年度)

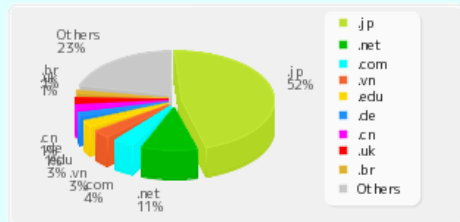


アクセスノード数の推移

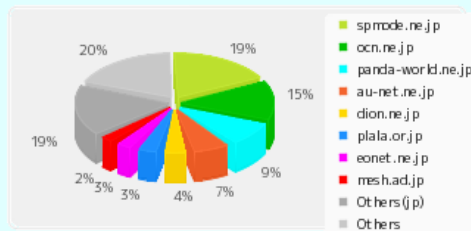
日本以外からのノード数 日本からのノード数



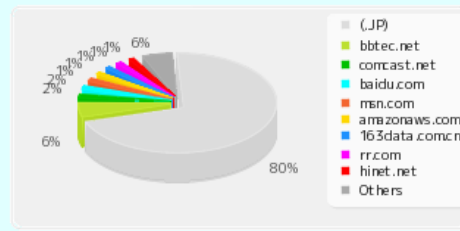
国別のアクセスノード数(2015年度)



上位50機関のアクセスノード数(2015年度)



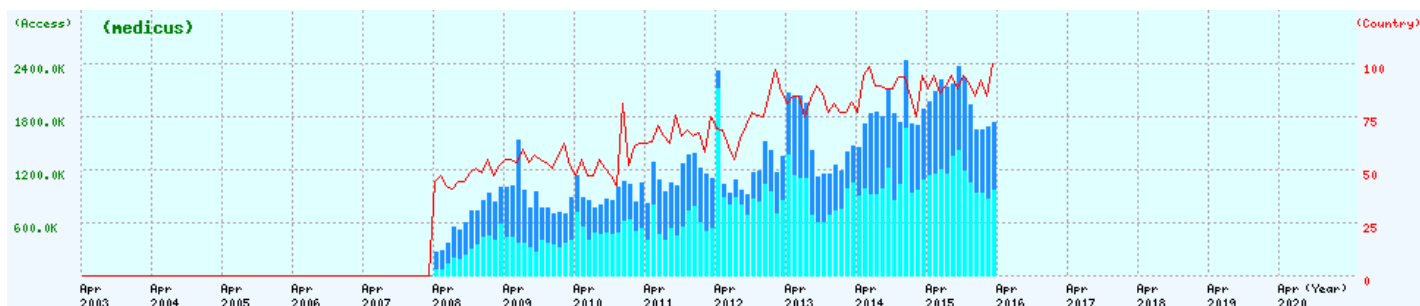
上位50機関のアクセスノード数(2015年度)



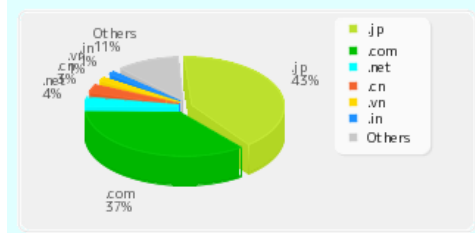
注)・上位50機関のアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別のMEDICUS利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

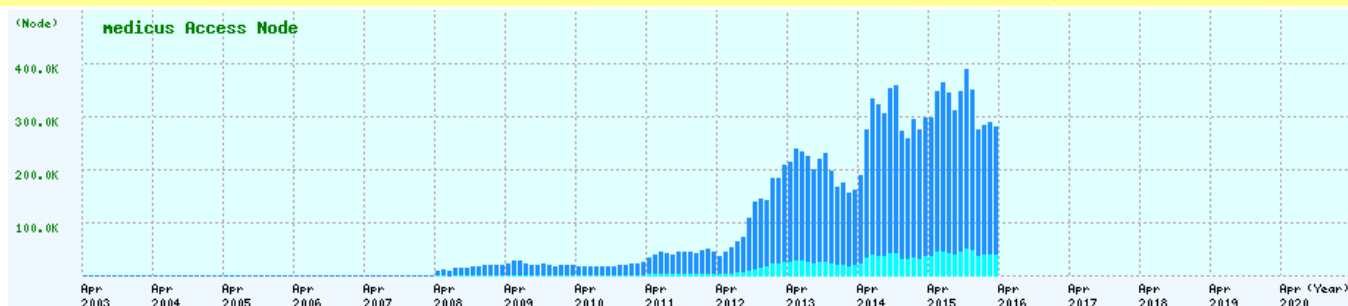


国別のMEDICUS利用件数(2015年度)

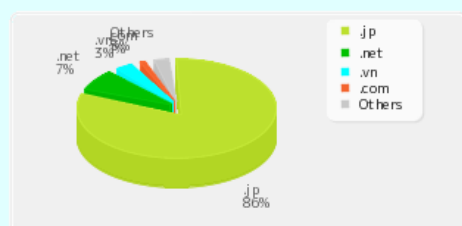


MEDICUSアクセスノード数の推移

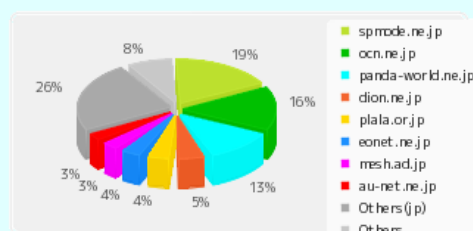
日本以外からのノード数 日本からのノード数



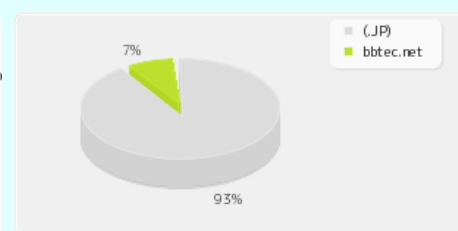
国別のMEDICUSアクセスノード数(2015年度)



上位50機関のMEDICUSアクセスノード数(2015年度)



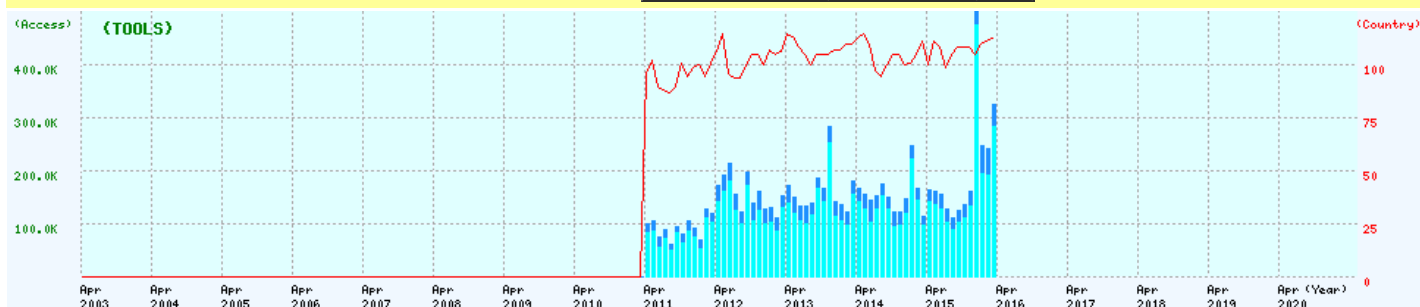
上位50機関のMEDICUSアクセスノード数(2015年度)



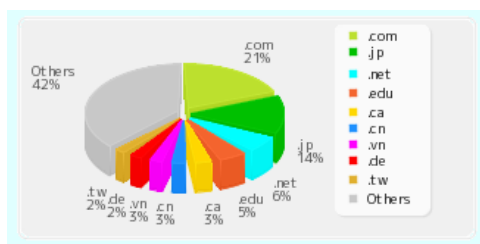
注)・上位50機関のMEDICUSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別のTOOLS利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

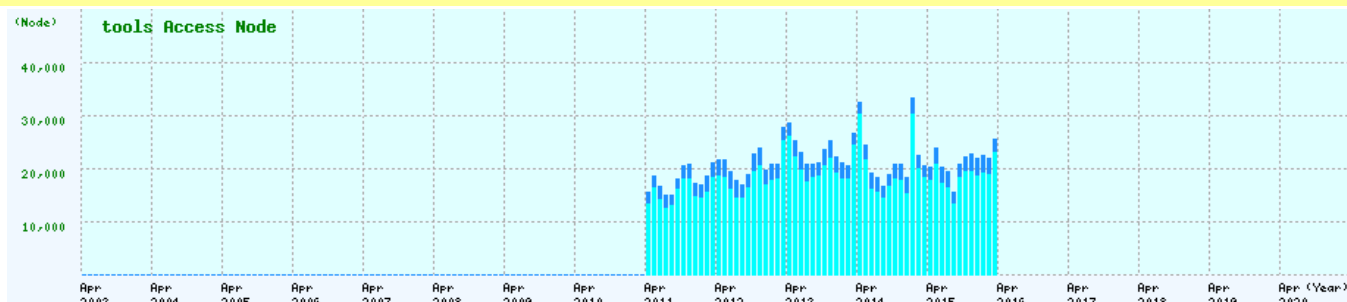


国別のTOOLS利用件数(2015年度)

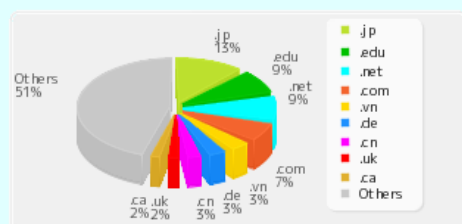


TOOLSアクセスノード数の推移

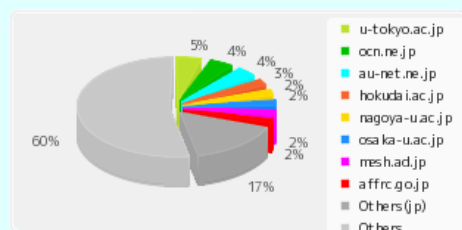
日本以外からのノード数 日本からのノード数



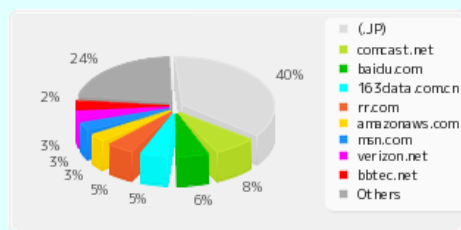
国別のTOOLSアクセスノード数(2015年度)



上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2015年度)



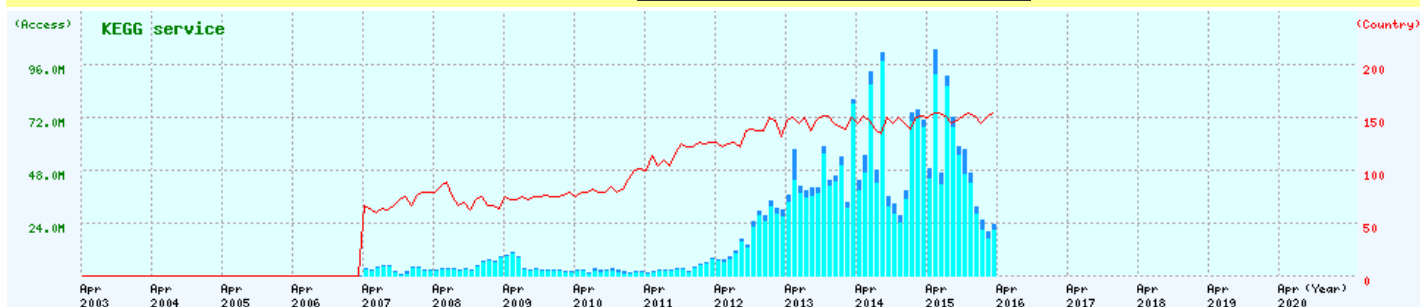
上位50機関のTOOLSアクセスノード数(2015年度)



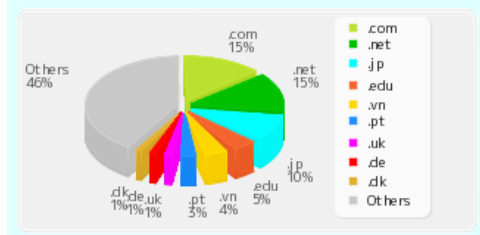
注)・上位50機関のTOOLSアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別の KEGG利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

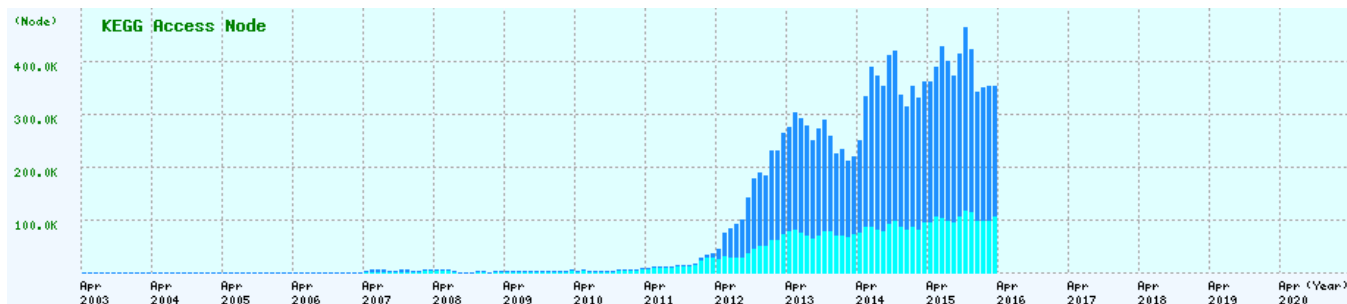


国別の KEGG利用件数(2015年度)

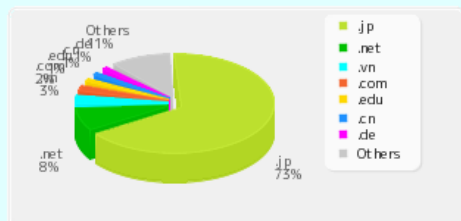


KEGGアクセスノード数の推移

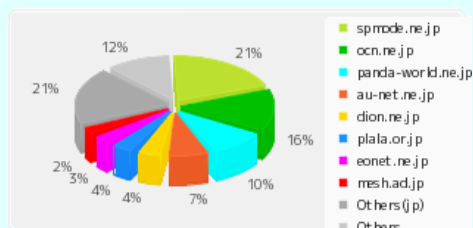
日本以外からのノード数 日本からのノード数



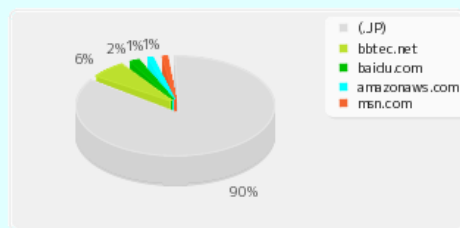
国別の KEGGアクセスノード数(2015年度)



上位50機関の KEGGアクセスノード数(2015年度)



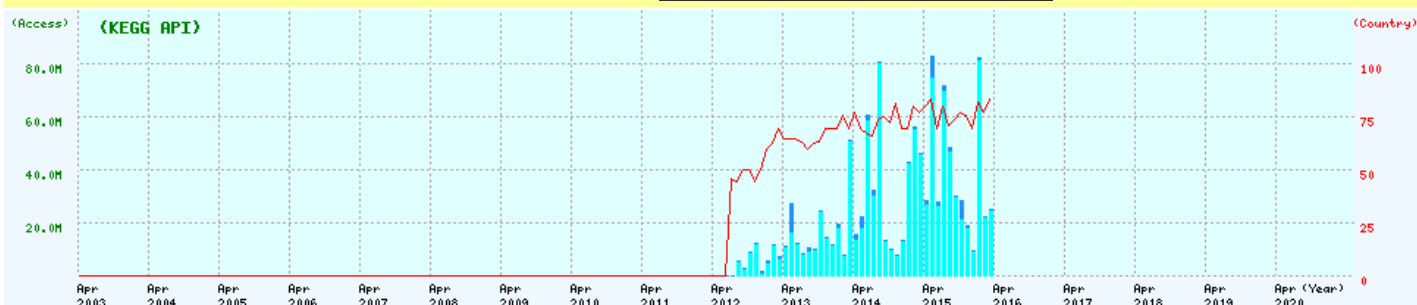
上位50機関の KEGGアクセスノード数(2015年度)



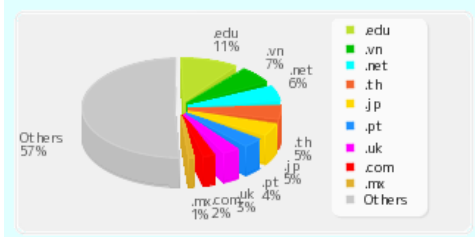
注)・上位50機関の KEGGアクセスノード数グラフは、上位50機関の総ノード数を100%とした比率です。

月別の KEGG API 利用件数

日本以外からの件数 日本からの件数 国数

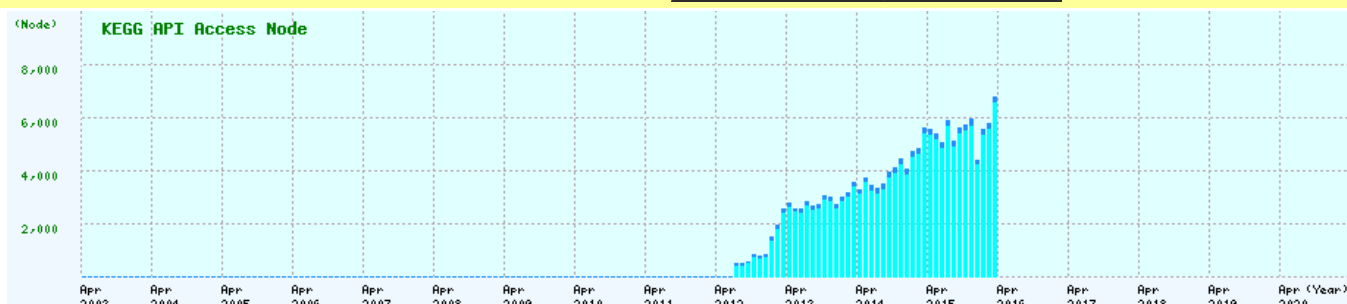


国別の KEGG API 利用件数(2015年度)

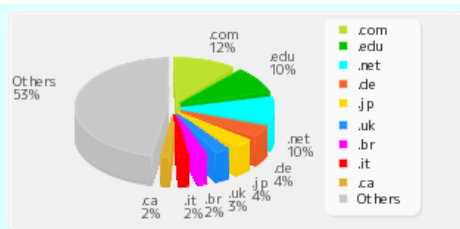


KEGG API アクセスノード数の推移

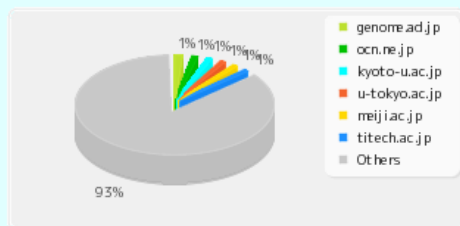
日本以外からのノード数 日本からのノード数



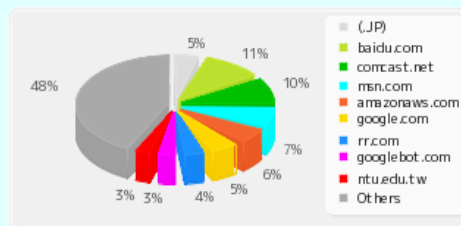
国別の KEGG API アクセスノード数(2015年度)



上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2015年度)



上位50機関の KEGG API アクセスノード数(2015年度)



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

講習会等開催履歴

1991 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
1992.01.04		スーパーコンピューター稼働開始		
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	<u>48名</u>	CTCラボ社 今村 浩三
1992.11.18	1日	UniChem1.1 講習会	<u>16名</u>	日本クレイ社 田村 祐介
1992.11.24	1日	BIOSYM 講習会	<u>8名</u>	菱化システム社 片岡 良一
1992.12.01	2日	FORTTRAN 講習会	<u>25名</u>	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	<u>約50名</u>	
1993.04.20	1日	データベース利用講習会	<u>32名</u>	化学研究所 荻原 淳
1993.05.18	3日	UNICOS 講習会	<u>18名</u>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.06.15	3日	C言語入門 講習会	<u>8名</u>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.07.13	1日	QUANTA/CHARMm 講習会	<u>14名</u>	CTCラボ社 今村 浩三
1993.07.28	1日	Insight2/Discover 講習会	<u>9名</u>	菱化システム社 片岡 良一
1993.10.19	1日	UniChem2.0 講習会	<u>4名</u>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.10.21	1日	FORTTRAN/C 最適化講習会	<u>8名</u>	日本クレイ社 飯坂 剛一
1993.11.24	1日	CHARMm22 講習会(応用編)	<u>11名</u>	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	<u>7名</u>	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	<u>56名</u>	
1994.05.27	1日	AVS 講習会	<u>4名</u>	旭化成情報システム社 山口 宏
1994.06.24	1日	FORTTRAN最適化 講習会	<u>7名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.14	2日	UNIX 講習会	<u>16名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.07.29	1日	UniChem2.0 講習会	<u>4名</u>	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	<u>10名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.09.27	1日	QUANTA4.0/CHARMm22.2 講習会	<u>15名</u>	CTCラボ社 今村 浩三
1994.10.21	1日	FORTTRAN90 講習会	<u>5名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1994.11.18	1日	UniChem2.3 講習会	<u>1名</u>	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	<u>10名</u>	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)	<u>30名</u>	
1995.04.19	0.5日	ゲノムネットデータベース利用説明会	<u>21名</u>	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)	<u>29名</u>	
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)	<u>78名</u>	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	<u>16名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.19	0.5日	UNIX入門	<u>15名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.05.25	1日	QUANTA/CHARMm	<u>5名</u>	CTCラボ社 高橋 伸一
1995.06.02	1日	UNIX応用	<u>7名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.07.28	1日	UniChem	<u>5名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.11	1日	C言語入門	<u>5名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.24	1日	FORTTRAN最適化	<u>5名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.08.25	1日	Fortran90	<u>4名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.09.01	1日	ドキュメントツール	<u>2名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.09.14	0.5日	ネットワーク入門	<u>4名</u>	日本クレイ社 佐藤 一茂
1995.10.20	0.5日	WWW講習会	<u>13名</u>	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)	<u>51名</u>	京都大学化学研究所 金久 實
1995.11.17	0.5日	CRAYツール	<u>3名</u>	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	<u>3名</u>	CTCラボ社 高橋 伸一
1996.02.14	1日	QUANTA/CHARMm	<u>18名</u>	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/Biodolvmr	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.01.13	1日	QUANTA/Homology	1名	CTCラボ社 盛 崇
1998.01.23	1日	InsightII/Homology	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	InsightII/Homology Modeling	7名	アクセルリス株式会社 Hongwei Huang
2003.09.26	1日	VMD基礎	3名	日本SGI社 山崎 正道

2004 年度の講習会等開催記録

開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2004.05.25~27	3日	MDL/ISIS化学情報データベース	13名	日本MDLインフォメーションシステムズ 岸本、羽島、橋野、有田
2004.07.14~16	3日	Materials Studio	9名	アクセルリス株式会社 アクセルリス アプリケーションサイエンティスト
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	ビヨンド・コンピューティング(株) 田島 澄恵
2008.08.26	1日	Mathematica	4名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2008.09.11	1日	IMSL	1名	日本ビジュアルニューメリックス(株) 技術部 須賀恵美子
2008.11.06	1日	Altix並列化プログラミング	1名	日本SGI(株) HPCサービス事業本部 五十木 秀一
2008.11.14	1日	Isentris概要	7名	シミックステクノロジーズジャパン(株) カスタマーケア部 吉岡 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・ビヨンド(株) 瀧本まゆみ
2012 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2012.06.15	1日	計算サーバ利用講習会	6名	日本SGI(株) 福本 淳司
2012.06.29	1日	並列化プログラミング講習会	4名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2012.07.05	1日	AVS/Express Viz講習会	1名	サイバネットシステム(株) 松岡 憲昭
2012.07.13	1日	SCIGRESS講習会	3名	富士通(株) TCソリ事業本部 大輔
2012.09.04	1日	Discovery Studio	7名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.09.05,06	2日	Materials Studio	5名	アクセルリス(株) アブジット チャテジー
2012.09.14	0.5日	Gaussian	16名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2012.09.20	0.5日	Mathematica	15名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2012.09.25	1日	DS Developer Client講習会	2名	アクセルリス(株) 大村 忠宏
2012.12.13	0.5日	Reaxys講習会	10名	ゼファー・ビヨンド(株) 瀧本まゆみ
2013 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2013.07.03	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	1名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2013.07.23	1日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2013.07.25	2日	Materials Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2013.07.30	0.5日	Mathematica 講習会	2名	日本電子計算(株) 大阪産業開発部 金光 安芸子
2013.09.18	0.5日	Gaussian 講習会	6名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2014.07.18	1日	Discovery Studio 講習会	3名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.23	2日	Materials Studio 講習会	13名	アクセルリス(株) 永田 徹哉
2014.08.27	0.5日	Discovery Studio 講習会	6名	アクセルリス(株) 大村 忠弘
2014.07.30	1日	最適化・並列化プログラミング講習会	2名	日本SGI(株) 五十木 秀一
2014.09.03	0.5日	Gaussian 講習会	5名	(株)ヒューリンクス 田島 澄恵
2014.10.16	0.5日	Mathematica 講習会	1名	日本電子計算(株) 産業事業部 伊藤 雅将
2014.11.06	0.5日	Reaxys講習会	1名	ゼファー・ビヨンド(株) 瀧本 まゆみ
2015 年度の講習会等開催記録				
開催日	期間	内 容	参加者	講 師 (敬称略)
2015.06.17	0.5日	Gaussian 講習会	92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

平成27年度研究課題一覧

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

化学研究所 物質創製化学研究 精密有機合成化学
化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子材料設計化学
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成
化学研究所 材料機能化学研究 高分子制御合成

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

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

化学研究所 材料機能化学研究 ナノスピントロニクス
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体機能設計化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体触媒化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体触媒化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体触媒化学
化学研究所 生体機能化学研究 生体分子情報
化学研究所 生体機能化学研究 生体分子情報
化学研究所 生体機能化学研究 生体分子情報
化学研究所 生体機能化学研究 生体分子情報
化学研究所 生体機能化学研究 生体分子情報
化学研究所 生体機能化学研究 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

化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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

化学研究所 生体機能化学研究 ケミカルバイオロジー

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

古田 巧
寺西 利治
佐藤 良太
坂本 雅典
猿山 雅亮
Trinh Thang Thuy
辻井 敬亘
大野 工司
榊原 圭太
山子 茂
上中 和代

西野 英雄
登阪 雅聡
中村 泰之
茅原 栄一
橋本 士雄磨

橋本 士雄磨
PATEL V. KUMAR
李 文娟
禹 蒙蒙
水落 憲和
森下 弘樹
正井 博和
小野 輝男
小野 輝男
山口 美保
楠田 敏之
カブジン キム

森山 貴広
二木 史朗
二木 史朗
田中 由美
中野 友佳子
今西 未来
武内 敏秀
平竹 潤
渡辺 文太
上村 美由紀
青山 卓史
青山 卓史
安田 敬子
柘植 知彦
加藤 真理子
寺本 日出美
上杉 志成
渡邊 はるひ

佐藤 慎一
大神田 淳子
Perron Amelie
渡邊 瑞貴
中島 光恵
Parvatkar T. Prakash

茅 迪

新規フラーレン誘導体の電子的性質
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質
フラーレンの構造変換に関する研究
機能性 π 共役系化合物の開発
新しい π 電子共役系の設計, 合成, および性質
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
水素結合ネットワークで形成されるキラル構造の DFT 計算
精密無機合成化学
無機ナノ粒子の精密合成と機能デバイスへの応用
ナノ粒子超構造の構築
可視光応答性水分解光触媒の開発
物質創製化学研究系 精密無機合成化学研究領域
高分子ブラシの構造と物性
リビングラジカル重合法による新規機能性高分子の合成
キラル特性を有する多糖高次構造の創製
精密合成反応の設計
研究に関する書類整理及び事務全般・国際シンポジウムの企画立案
新規リビングラジカル重合剤による高付加価値高分子材料
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察
高周期15族元素化合物を用いる新ラジカル化学の創製
含窒み π 共役化合物の合成とその物性評価
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の研究

超分子化学的アプローチによる環状 π 共役分子の創製
新規重合開始剤および関連反応開発に関する研究
新規リビングラジカル重合剤による高付加価値高分子材料
ダイヤモンド中のNV中心を用いた研究
ダイヤモンド発光中心を利用した光ナノ材料研究

ナノスピントロニクス
ナノスピントロニクスの研究
ナノスピントロニクス研究に関する事務補佐
極低温物性化学実験室の管理
電流誘起スピンダイナミクスを利用した省エネルギー次世代デバイスの開発
高周波スピントロニクスデバイスの研究
機能性人工蛋白質の創出
機能性ペプチドの創製
生体機能設計化学の研究支援
E-Mailの利用
亜鉛ファンゲータンパク質を用いた転写制御分子の創製
ペプチドの膜透過

gamma-Glutamyltranspeptidase 阻害剤の合成と応用
酵素阻害剤の設計と合成研究
生体触媒化学の研究支援
植物の細胞内の情報伝達
分子生物学
分子生物学
植物環境応答制御機構の分子基盤
植物形態形成に関わる細胞内情報伝達機構の解析
植物分子生物学の研究
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
たんばく質間相互作用の阻害ならびに検出を行うための 有機分子の設計と合成、生物実験による機能評価

ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
非メバロン酸経路を標的とする新規複素環含有抗菌剤の合成と評価
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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 生体機能化学研究 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
化学研究所 環境物質化学研究 分子材料化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子材料化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子材料化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子材料化学
化学研究所 環境物質化学研究 水圏環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 水圏環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学
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 先端ビームナノ科学センタ 粒子ビーム科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ レーザー物質科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 複合ナノ解析化学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 先端ビームナノ科学センタ 構造分子生物科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学

化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学

化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学

化学研究所 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学

高屋 潤一郎
Mbenza M. Naasson
浅野 理沙
八塚 研治
Punzalan L. Louvy
チュン ワトソン
Ito Megumi
Mendoza Aileen
Le Khanh Toan
Vu Thi Hue
Pe BeverlyAlog Kathleen
勝田 陽介
竹野谷 美穂子
古田 智行
竹本 靖
高嶋 一平
奥田 聡
梶 弘典
後藤 淳
福島 達也
志津 功將
宗林 由樹
梅谷 重夫
長谷川 健
長谷川 健
松林 伸幸
若井 千尋
下赤 卓史
中原 勝
栗原 達夫
栗原 達夫
金谷 利治
金谷 利治
石田 華子
西田 幸次
井上 倫太郎
小川 紘樹
渡辺 宏
渡辺 宏
増渕 雄一
松宮 由実
吉田 弘幸
岩下 芳久
阪部 周二
西島 慶
橋田 昌樹
中宮 義英
根本 隆
畑 安雄
伊藤 嘉昭
藤井 知実
山内 貴恵
正岡 聖
梅咲 則正
永井 一弘
中村 正治

中村 正治

高谷 光
岩本 貴寛
磯崎 勝弘

LAKSMIKANTA ADAK
MISHRA V. LAKSHMI.
鈴木 毅

松田 博

ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
たんぱく質間相互作用を制御する天然物誘導体の合成と機能
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
ケミカルバイオロジー
有機非晶質科学の研究
制御重合に関する研究
有機半導体材料の局所および凝集構造に関する固体NMR研究
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
水圏微量元素の研究
新規配位子の分子設計
溶液および界面の振動分光
界面の振動分光
生体高分子の水和
膜に吸着した水分子のダイナミクスのNMRIによる解析
凝縮系の振動分光
超臨界水の化学
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
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
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
からみ合い高分子の分子レオロジー
化学研究所連絡用
高分子ダイナミクスと構造の計算
高分子系の流動誘電緩和
有機分子集合体の電子構造の研究
加速器研究のための3D 電磁場計算
レーザー物質科学
レーザー物質科学
レーザー物質科学
レーザー物質科学研究領域
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
X線スペクトルの微細構造
タンパク質のX線結晶構造解析
タンパク質のX線結晶構造解析
X線管からのスペクトル解析
XAFS分光法によるガラス材料の構造解析
太陽電池パネルの破損原因分
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
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
メタル化ペプチドを用いる多金属元素集積型分子デバイスの創製
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
レアメタルを凌駕する鉄触媒による精密有機合成化学の開拓
リグニン精密分解のためのメタル化ペプチド触媒の開発
新規な鉄触媒有機反応の開拓とそれらを用いる機能性材料の開
発
人工漆材料の高効率合成のための研究

化学研究所 元素科学国際研究センター 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 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 光ナノ量子元素科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学
化学研究所 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学
化学研究所 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学
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 生命知能工学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 生命知能工学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 生命知能工学
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 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 物質創製化学研究 精密有機合成化学
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 環境物質化学研究 分子材料化学
化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学
化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学
化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学
化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学

化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学
化学研究所 物質創製化学研究 有機元素化学
化学研究所 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学

エネルギー理工学研究所 エネルギー機能変換研究部門
エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
生存圏研究所 生存圏開発創成系 生物機能材料分野
生存圏研究所 生存圏開発創成系 宇宙圏航行システム工
学分野
防災研究所 地震防災研究部門
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課
宇治地区事務部 総務課

小澤 文幸
小澤 文幸
池田 奈緒子
竹内 勝彦
脇岡 正幸
竹内 勝彦
金光 義彦
金光 義彦
永田 貴美子
太野垣 健
井原 章之
島川 祐一
島川 祐一
菅 大介
齊藤 高志
市川 能也
Hingamp M. Pascal
三原 知子

吉川 元貴
阿久津 達也
林田 守広

田村 武幸

馬見塚 拓
Nguyen C. Hao
山田 誠
大槻 薫
大槻 薫
藤橋 明子
上村 美由紀
濱岡 芽里
武平 時代
谷村 道子
井上 純子
緒方 博之
Blanc-Mathieu Romain
西山 拓輝
五斗 進
五斗 進
隈部 彰彦
清水 祐吾
川端 猛夫
吉沢 明康
梶 弘典
時任 宣博
笹森 貴裕
水畑 吉行
吾郷 友宏

鈴木 裕子
郭 晶東
西村 陽介

松田 一成
小島 崇寛
中江 隆博
田中 文男
山口 皓平

中島 正愛
疋田 寛
平井 良昌
大隅 庸弘
福岡 隆一
町 美稚子
木村 智子
南雲 円
隅井 妙

研究・教育
遷移金属／典型元素相乗系錯体の創製と機能に関する研究
元素科学研究にかかる事務処理
遷移金属錯体の構造探索
遷移金属触媒による π 共役系高分子の構造制御合成
Eメールの利用
光ナノ科学
光ナノ元素科学
光ナノ元素科学
ナノ構造光物性
ナノ構造光物性
無機機能性材料の合成と評価
機能性酸化物材料の研究
機能性遷移金属酸化物の研究
無機固体化学の研究
遷移金属酸化物薄膜の合成と物性
環境プランクトンゲノムクス
包括的ウイルスゲノム研究のためのデータリソースと多様性解析
法の開発
免疫系分化タンパク質の系統発生
生物情報ネットワークの解析と制御
整数計画法による文字列の集合上の確率分布に対する中央文字
列と中心文字列
ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化
と制御
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
機械学習とデータマイニングの研究
Email利用
化研国際シンポジウム要旨集の収集
質量分析業務
同窓会事務関連業務
広報関係業務
広報関係業務
広報関係業務
広報関係業務
巨大DNAウィルスゲノムの解析
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究
NGSを用いた転写制御および細菌叢の研究
生体分子情報データベースの開発
遺伝子機能アノテーションの効率化
海洋メタゲノム解析
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析
軸性不斉エノラートを用いる4置換炭素の不斉構築
プロテオーム・データベースの構築
有機デバイスの基礎科学と高機能化
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質
典型元素を含む新規結合様式の創出
新規な光・電子物性を有する新規ヘテロ π 共役系典型元素化合物
の創製
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
メタゲノム解析によって得られた新規海洋ウイルスゲノムの多様性
の解明
半導体ナノ構造のイメージング分光
グラフェンナノリボンの理論的研究
ナノ炭素細線物質に関する理論計算
生体高分子の分子シミュレーション
宇宙電磁環境を利用した地球衝突小惑星の軌道変更に関する研
究
地震時における構造物の破壊
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用
E-mail利用

宇治地区事務局 総務課	竹本 由紀	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	大平 直子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	太田 浩二	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	大村 慶子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	宮本 真理子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	酒井 博美	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	上地 恭子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	中西 洋子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	立花 則子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	上道 京子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	大山 慶子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	岩崎 保子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	亀井 優希	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	野田 麻紀	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	高橋 知世	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	原田 育恵	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	中村 阿耶子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	廣庭 朋世	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	福田 明子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	高谷 真知子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	東城 初和	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	澤田 尚美	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	糸田 理江	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	糸田 理江	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	池田 純子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	入江 正実	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	松岡 奈緒	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	西川 知里	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	岡田 哲也	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	大槻 薫	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	由井 佳子	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	延原 由紀	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	奥山 大基	E-mail利用
宇治地区事務局 総務課	百井 彬乃	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	浅井 正彦	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	田中 義郎	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	永田 幸司	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	大西 正子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	三木 好未	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	松本 真紀	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	松重 優子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	秦 洋平	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	津田 智子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	宮内 徹也	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	関本 篤司	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	藪内 裕樹	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	中野 留美子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	早崎 裕子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	森田 将也	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	守 泰孝	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	柿本 紗也子	E-mail利用
宇治地区事務局 経理課	糸井 昭代	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	森田 勇二	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	織田 秀夫	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	吉岡 陽子	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	中野 進治	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	上野山 直子	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	高田 早津紀	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	有井 秀幸	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	平田 美穂	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	谷川 禅	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	福島 典子	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	北川 伸代	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	中谷 浩美	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	織田 真澄	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	李 風英	E-mail利用
宇治地区事務局 研究協力課	佐々木 理絵	E-mail利用

宇治地区事務部 研究協力課	崎川 方恵	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	八木 裕美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	鵜飼 健司	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	村瀬 真美子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	今野 創祐	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	小池 典子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	田中 克卓	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	丸山 智子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	楠見 牧子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	大戸 瑞穂	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	龍 智佳子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	中野 直子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	河上 愛	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	今村 美鈴	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	井出 恵美子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	太田 妃登美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	水野 裕美	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	石田 弥太郎	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	喜多山 篤	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	田上 款	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	吉岡 佐知子	E-mail利用
宇治地区事務部 研究協力課	木下 亜紀子	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	岡本 重人	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	畑中 力	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	梶川 道雄	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	山田 博	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	島原 健治	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	西島 千賀	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	濱本 文平	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	辻 繁男	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	三木 康弘	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	入口 朋昌	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	徳田 祐一	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	田村 あゆみ	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	酒井 千賀子	E-mail利用
宇治地区事務部 施設環境課	山本 潮	E-mail利用
宇治地区事務部 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	平松 喜久治	E-mail利用
宇治地区事務部 おうばくプラザ	奥林 誠	E-mail利用
理学研究科 理学部 物理学第一専攻	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	松本 吉泰	金属酸化物表面における吸着構造
理学研究科 理学部 化学専攻	北川 宏	遷移金属錯体の分子シミュレーション
理学研究科 理学部 化学専攻	小松 徳太郎	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
理学研究科 理学部 化学専攻	山本 武志	自己組織化分子の理論と計算機シミュレーション
理学研究科 理学部 化学専攻	朝光 世煌	がん遺伝子に見られるグアニン四重鎖構造を検出する結合性環状ポリアミドリガンドの開発
薬学研究科 薬学部 医薬創成情報科学専攻	大野 浩章	ドラッグライクテンプレートの開発研究
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 マイクロエンジニアリング専攻	立花 明知	原子分子相互作用系に関する理論的研究
工学研究科 工学部 電子工学専攻	竹内 繁樹	光子を用いた量子情報科学に関する研究
工学研究科 工学部 材料化学専攻	木村 俊作	ポリペプチドのコンホメーションに関する研究
工学研究科 工学部 材料化学専攻	宇治 広隆	ヘリックスペプチドの電気的特性の解析
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	大江 浩一	含窒素複素環をニト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	両親媒性ポリマーを用いる光音響腫瘍イメージング
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	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	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	和田 健司	有機エネルギー資源の接触変換反応のための触媒設計と調整
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	東 正信	半導体光触媒を用いた高効率水分分解システムの開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	辻 康之	触媒有機化学に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	寺尾 潤	新規分子触媒の開発
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	藤原 哲晶	遷移金属錯体触媒を利用する二酸化炭素固定化反応の開拓
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	東 正信	物質エネルギー化学専攻の研究推進
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	宮崎 晃平	電極触媒の電子状態解析
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	小久見 善八	リチウムイオン電池に関する研究
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻	江口 浩一	炭化水素の低温燃焼触媒の研究

工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 物質エネルギー化学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 分子工学専攻
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻

工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻
工学研究科 工学部 合成・生物化学専攻
工学研究科 工学部 化学工学専攻
工学研究科 工学部 化学工学専攻
工学研究科 工学部 化学工学専攻
工学研究科 工学部 高分子化学専攻
工学研究科 工学部 光・電子理工学教育研究センタ
工学研究科 工学部 大学院工学教育推進センタ
エネルギー科学研究科 エネルギー社会・環境科学専攻

エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
農学研究科 農学部 農学専攻
農学研究科 農学部 森林科学専攻
農学研究科 農学部 森林科学専攻
農学研究科 農学部 応用生命科学専攻
農学研究科 農学部 応用生物科学専攻
農学研究科 農学部 応用生物科学専攻
農学研究科 農学部 地域環境科学専攻
農学研究科 農学部 地域環境科学専攻
人間 環境学研究科 相關環境学専攻
低温物質科学研究センター 分子性材料開拓・解析研究分野
低温物質科学研究センター 低温機能開発研究分野
物質－細胞統合システム拠点 今堀グループ
物質－細胞統合システム拠点 Sivaniahグループ
先端医工学研究ユニット 研究部門
先端医工学研究ユニット 研究部門
iPS細胞研究所 初期化機構研究部門
ウイルス研究所 附属ヒトレトロウイルス研究施設

陰山 洋
野尻 聡子
大西 弥生
小林 洋治
高津 浩
山本 隆文
タッセル セドリック
細川 三郎
伊藤 彰浩
佐藤 徹
笹野 博之
梅山 有和
東野 智洋
関 修平
長田 裕也

植村 卓史
廣瀬 崇至
横山 創一
西谷 暢彦
前田 尚生
田門 肇
鈴木 哲夫
田中 秀樹
伊藤 峻一郎
龍頭 啓充
大嶋 光昭
奥村 英之

蜂谷 寛
馬淵 守
楠田 啓
袴田 昌高
浜 孝之
陳 友晴
丸山 伸之
菊地 弘晃
木村 史子
植田 充美
吉田 天士
吉田 天士
赤松 美紀
小川 雄一
津江 広人
中野 義明
寺嶋 孝仁
今堀 博
ガリ ベヘナム
近藤 輝幸
木村 祐
柴田 知範
泉 泰輔

固体化学
固体化学
アニオン超空間を活かした無機化合物の創製と機能開拓
固体化学
相転移のピコ秒ダイナミクスの可視化
低温還元法を用いた鉄酸化物の合成
固体化学
金属酸化物ナノ粒子の合成とその応用
開殻分子の電子構造に関する理論的研究
振電相互作用に関する理論的研究
化学反応と電子物性に関する理論的研究
光合成モデル化合物の合成
有機分子を用いた新規な機能性材料の開発
機能性パイ電子系物質の電子物性
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
多孔性配位高分子の合成と性質
HOPG基板上における分子配列のモデリング
HOPG基板上における分子配列のモデリング
HOPG基板上における分子配列のモデリング
HOPG基板上における分子配列のモデリング
分離プロセスの量子化学的研究
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移
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
クラスターイオンビームと固体表面の相互作用
新規研究課題の調査探索手法および目標設定に関する研究
表面(特に触媒や光触媒)における反応場シミュレーション、電子バンド計算など
エネルギー機能材料の電子構造と光物性
マグネシウム合金における第一原理計算
材料破壊の電子論的研究
多孔質金属の表面特性
金属粒界・相境界の原子シミュレーション
ポーラス金属の機能解明
植物種子タンパク質の構造と機能
一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析
変調磁場による微結晶の三次元配向
コンビナトリアル・バイオ工学
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？
生理活性物質の構造活性相関
全反射減衰テラヘルツ時間領域分光法を用いた細胞計測
有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析
遷移金属酸化物薄膜の合成と物性
人工光合成系の開発
ガス・水分離膜
高次生体イメージング先端テクノハブプロジェクト研究
高感度Gd-MRI造影剤のPEG化および抗体修飾によるDDS構築
RNP相互作用により誘起される核酸ナノ構造変化
HIV-1 Vif の自然及び獲得免疫による多面的圧力からの逃避機序の解明

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>