

プロジェクト名： データ中心ケミストリ

プロジェクトディレクター： 佐藤 寛子 准教授（国立情報学研究所）

[1] 研究プロジェクト

(1) 目的・目標

世界最大の化学情報編纂機関である米国ケミカルアブストラクトサービス（CAS）によれば、現在までに存在が確認されている化学物質は約9,000万種類であり、年間数十万～百万種のオーダーで増え続けている。しかし、近年の理論化学の進歩により、理論的には存在しうるもの、いまだに人類が手にしていない化学物質種の数はこれを遥かに凌駕することが明らかとされつつある。

データ中心ケミストリプロジェクトでは、この革新をもたらすことが期待される未知の化学物質：「埋蔵分子」とこれらを供給する化学反応経路を量子力学の理論に基づき自動的に探索・発掘し、データケミストリの視点から、科学の諸問題の解決に向けた研究基盤を整備することを目的とする（図1）。

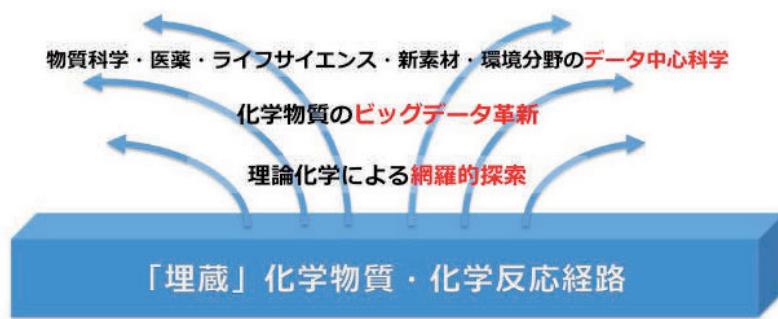


図1 「埋蔵」されている未知の分子や反応を発掘する

具体的には、量子力学に基づく分子ポテンシャル曲面の広領域自動探索により得られるグローバル化学反応経路マップを蓄積・データベース化し、専門的な研究利用から教育機関、一般まで、多様な形で幅広く共有できるウェブシステムを開発する（図2）。反応マップ探索からデータベース化の手続きは自動化し、自己発展型の異分野研究資源を創出することを目指す。グローバル化学反応経路マップには、複数の平衡構造と呼ばれる反応物や生成物に相当する安定な分子構造が、化学反応が起こる際に越えなければならない最もエネルギーの高い地点に相当する遷移状態を経て連結したネットワーク状の構造をもち、分子のポテンシャルエネルギーや電子状態に関する物理化学的パラメータとともに格納されている。有限個の原子の組み合わせから数え上げられる分子構造の種類はほぼ無限個に近いことを鑑みれば、グローバル化学反応経路マップには、理論的に予測される未知の化学物質や反応経路が含まれている可能性は極めて高いと言える。これらの新規物質や化学反応経路を「発掘」し、さらに、化学物質が反応経路によってネットワーク状に複雑に連結されたデータから有用な知識を導きだすためのインフォマティクスや情報科学技術による種々の基盤技術を開発し、科学の諸問題の解決のためのデータケミストリの新展開を目指す。また、生命科学データベースとの統合による、ケミカルライフサイエンスの協調的発展の新しい方法論を提供することも視野に入れてプロジェクトを推進する。

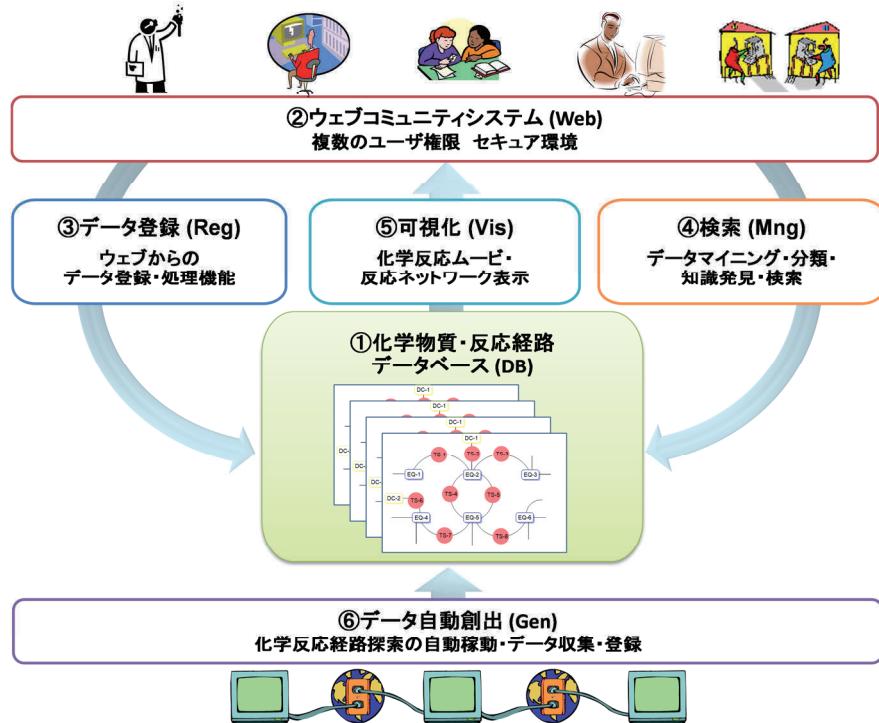


図2 データ中心ケミストリープロジェクトの概要

リサーチコモンズ事業の継続期間として予定されている平成28年3月までに、研究者向けの基盤技術を開発・公開するとともに、本プロジェクトが提供する研究資源の有効性を示すエビデンスとして埋蔵分子・反応の発見の応用研究を並行して進め、事業終了後の次のステップに繋げる計画である。

(2) 必要性・重要性（緊急性）

化学物質の情報は、世界最大の化学情報編纂機関であるケミカルアブストラクツサービス（CAS : Chemical Abstracts Service）によって網羅的に管理されている。今までに知られている化学物質は約9,000万種類であり、年間数十万～百万種のオーダーで増え続けている。化学物質の文献や分子構造・分光学・物性データや、供給方法は、化学物質を取扱う幅広い産業や学術分野にとって必要不可欠な情報である。

化学物質の可能性と化学反応性は、量子力学の理論を化学に応用した量子化学によって理論的に解釈し予測することが原理的に可能である。化学物質とその供給方法は、ポテンシャル曲面上の極小点（反応物・生成物）と鞍点（遷移状態）を結ぶ化学反応経路を探索することによって得られる。この探索を自動的に行なうことは化学研究における重要なトピックスの1つであり、世界中の理論化学の研究者がチャレンジし続けている。こうした世界的な競争のなか、2004年に大野公一（東北大学名誉教授・量子化学探索研究所長、本事業の共同研究者）・前田理（当時東北大学、現北海道大学）らは、化学ポテンシャル曲面に見られる特徴的な形状に着目し、これを数学的に検出し自動探索する超球面探索法を考案し、本アルゴリズムを実装したGRRM（Global Reaction Route Mapping）を発表した。GRRMで自動探索できる分子の大きさには制限がない。従来、自動探索の限界は最大4原子までと考えられていたが、GRRMはこの常識を軽く破り、現在でもこれを超える方法は発表されていない。GRRM法は現在までに種々の化学物質に適用され、4原子を超えた探索の世界には、実は従来知られていた化学物質種や反応経路を遥かに凌駕する数の可能性が広がっていることが明らかとなってきた。有限個の原子の組み合わせから数え上げられる分子構造の種類がほぼ無限の広がりを持つことを鑑みれば、GRRMの自動探索

から得られるグローバル化学反応経路マップには、理論的に予測される未知の化学物質や反応経路が「埋蔵」されている可能性が極めて高いといえる。

一方、分子構造の数え上げ問題は、化学の基本テーマの1つであり、原子間のトポロジカルな関係に基づく方法（ドイツのMOLGEN法が代表的である）が、分子構造解析や創薬を想定したケミカルスペースの探索等の分野において従来から広く使われている。トポロジカル法は分子構造をケミカルグラフとみなすことで数学的な高速処理を可能とする非常に有効な手法であるが、数え上げの爆発に容易に到達する点や、立体構造の考慮が難しい点、基本的に原子価を満たすもののみが得られる点などが短所としてあげられる。これに対して、量子力学に基づくポテンシャル曲面の自動探索では、量子力学的に存在可能な分子を合理的に数え上げることが可能である。そこには、分子の「つくり方」や「つくり易さ」を含めた化学反応経路や電子状態理論に基づく物理化学パラメータも内包され、存在する可能性を量子力学理論に則ったエネルギーにより評価することができる。

データ中心ケミストリープロジェクトでは、これらの革新をもたらすことが期待される「埋蔵」分子とこれらを供給する化学反応経路を「発掘」し、さらに、化学物質が反応経路によってネットワーク状に複雑に連結されたデータから有用な知識を導きだすためのインフォマティクスや情報科学技術による種々の基盤技術を開発し、研究資源として提供することで、科学の諸問題の解決のためのデータケミストリの新展開を目指す。CASにより編纂されている化学物質データは文献を情報ソースとしたものであり、対象とされているのは天然物質からの抽出や人工合成によって存在が確認された既知物質である。これに対して、本プロジェクトにより提供されるグローバル反応マップには、既知物質に加えて、理論的には存在しうるが、まだ実験的に存在が確認されていない新規物質も多く含まれ、機能性物質の創成に結びつく大きなポテンシャルを秘めている。その応用範囲は、医薬品、マテリアル、農薬、食品、新エネルギー資源を含む、新規機能性物質とその供給方法について研究する幅広い分野に渡ると想定される。実際に、本化学物質データのデータベース化への化学系の賛同と期待は大きく、製薬企業などからも高い関心が寄せられている。また、ライフサイエンスデータと連携することで、代謝機構などの生体内化学反応の理論的解明に大きく寄与することが期待される。

本プロジェクトの成果物として期待されるものは、量子力学理論に立脚した化学物質のビッグデータとその解析基盤技術である。この広大な化学物質の可能性は、GRRMによって初めて切り拓かれたものであり、グローバル化学反応マップデータソースはまだ世界のどこにも存在していない。化学物質ビッグデータを利用したデータケミストリによる科学の諸問題解決への取組みも未踏の領域である。最先端の手法であるGRRMとともに、日本の科学・技術により、日本が主導となり、世界に先駆けて緊急に本研究基盤を整備することが重要である。

(3) 期待される成果等（学問的効果、社会的効果、改善効果等）

データ中心ケミストリープロジェクトが提供するグローバル化学反応マップデータは、理論的に予測される未知の化学物質や化学反応経路、化学反応機構が「埋蔵」されていることが強く期待されるものであり、いわば、未踏の量子力学的ケミカルスペースの世界を切り拓くものである。このマップデータそのものが新規であり、高い学問的価値をもつデータソースであると言える。これらの「埋蔵分子」は、機能性物質の創成に結びつく大きなポテンシャルをもち、革新をもたらすことも期待される。その応用範囲は、医薬品、マテリアル、農薬、食品、新エネルギー資源を含む、新規機能性物質とその供給方法について研究する幅広い分野に渡り、役立つ化学物質を通じた社会・産業への波及効果が期待される。

本プロジェクトでは、インフォマティクスや情報科学技術によりグローバル化学反応マップから新しい分子や反応を紡ぎ出す解析基盤技術も提供する。量子力学に立脚したグローバル化学反応マップには、一般的な原子価を満たす化学構造だけではなく、超原子価分子や分極したもの、ラジカルなどの多様な

分子が含まれ、また、遷移状態構造は、安定構造とは異なる電子状態や結合長をもつ特殊な化学構造である。本プロジェクトの解析基盤技術は、原子価を満たす一般的な安定構造のみを対象としてきた従来の（ケミカル）インフォマティクスの技術を超えた、新たなデータ処理技術を提供することが期待される。また、インフォマティクスや情報科学分野にとって、新しいドメインへの応用研究として、発展が期待される。本解析技術を実際に利用した応用研究も並行して推進するが、ここから、新しいサイエンスが生まれる期待も高く、同時に、本プロジェクトが提供するデータソースの有効性を示すエビデンスとなると期待される。

さらに、本プロジェクトの先に期待されるものとして、量子化学データに基づく化学反応の俯瞰と新しい分類と知識の創出、それを利用した化学反応の予測と設計が行われることが期待される。ここから得られる新しい理論的な化学反応の地図は、これまでの化学の教科書を書き直す可能性すら持っていると言える。

(4) 独創性・新規性等

データ中心ケミストリープロジェクトが目指すグローバル化学反応マップデータベースと解析基盤技術は、従来法ではなしえなかつた5原子以上の量子化学的ポテンシャル曲面上に広がる化学物質と化学反応経路の未踏の世界を切り拓く点で独創的であり、本プロジェクトにより得られる成果は、提供されるデータソース・基盤技術によって将来得られると期待される成果と合わせて、斬新かつ新規であり、新たなサイエンスが生まれる可能性を秘めている。

従来の文献に基づくデータベースは科学研究にとって不可欠なデータソースであるが、実験によって観測された既知反応が手作業での入力により編集されるため、新規性は低く、データの精度も高くない。また量子化学の理論に基づく化学反応経路データベースの研究は国内外でわずかにみられるが、いずれもごく小規模であり、また、これらのデータソースを統計解析やデータマイニングなどの数理・情報的な手法により科学研究に活用する発想も見られない。一般に、量子化学の理論にもとづく化学反応経路探索は試行錯誤により実施され、反応物から生成物への单一の経路を探索するだけでも数ヶ月～数年かかり、時には見つからないこともある。本データベースに蓄積された類似反応を直接またはデータマイニングを通じて利用することで、数時間～数日で確実に反応経路を見つけることが可能となると期待される。さらに、従来にない画期的な特徴として、本データベースでは別の化学反応が起こる可能性も網羅されているので、副生成物を最小にする最適化など、化学合成研究や工業化学における化学合成プロセス設計を合理的かつ効率的に行うことが可能となる。

本プロジェクトの推進には、化学と情報学の実質的な協働作業によるデータケミストリの展開が必要である。また、生命科学データベースとの統合による、ケミカルライフサイエンスの協調的発展の新しい方法論を提供することも視野に入れている。化学と情報学、生命科学が融合するリサーチコモンズプロジェクトとして、情報・システム研究機構が推進する意義の高いプロジェクトであると言える。

(5) これまでの取り組み内容の概要及び実績

データ中心ケミストリープロジェクトは平成24年度末（平成24年12月～平成25年3月）の「機構長裁量経費によるデータ中心科学リサーチコモンズ基盤整備に向けた先導的研究・事業」に採択され、平成25年度の試験的メンバーを経て、平成26年度より新規に参画することとなった、新しいプロジェクトである。

平成25年度までに、本プロジェクトに関する研究として、以下の準備研究を行った。

まず、(I)データベース設計、(II)インタラクティビティ向上のための処理系の整備、(III)ウェブコミュニケーション環境の開発を目的としたユーザのプライマリ利用シーンの抽出とインターフェースの構

築、(IV)データ登録・管理システムの設計と、化学反応経路探索を実施する GRRM (Global Reaction Route Map) プログラムの最新版との適合化を行った。さらに、探索された化学反応経路データを可視化するソフトウェアとこれと連動する検索アルゴリズムの開発と実装に着手した。GRRM 開発者らの並列分散処理型の GRRM との連携方法について議論も継続して実施している。システムの要是、大規模データの効率的な検索・可視化と、データ発掘（化学反応経路探索）の効率化にあるが、前者については、上記(I), (II), (III)により、必要な要素技術の抽出と今後の開発に向けた準備を行うことができた。また、後者については、上記(IV)により、密接に連携して進めることを確認し、今後の開発の見通しを得ている。

なお、本プロジェクトと関連した研究課題に対して、以下の研究費の支援を得ている。

- ・国立情報学研究所公募型共同研究費（平成 21～25 年度）
- ・住友財団基礎科学研究助成（平成 23 年 11 月～24 年 10 月）
- ・平成 24 年度情報システム研究機構長裁量経費・データ中心科学リサーチコモンズ基盤整備に向けた先導的研究・事業（平成 24 年度）
- ・科学研究費補助金挑戦的萌芽研究（平成 25～27 年度）

(6) 国内外における関連分野の学術研究の動向

ケモインフォマティクス、データケミストリの分野では、統計処理を行うための十分な量のデータを得ることが求められることから、実験データやパラメータを用いた経験的手法によるデータ、上述のトポロジカル法によってグラフ的に組み立てた分子構造データを用いることが現在でも主流である。

一方、実験データと理論データは相補的に利用することで、実現性と合理性を兼ね備えたデザインや予測が可能になることが期待されるが、計算機の高速化と量子化学計算手法の発展により、量子化学に基づくより精度の高いデータを用いることが現実に可能となってきたことから、高精度な理論・シミュレーションデータに基づくデータマイニングを分子設計や合成設計に利用する分野にも関心がもたれ始めている。欧州では、COST (European Cooperation in Science and Technology) の共同プロジェクト等で、7～8 年ほど前から種々の量子化学計算ソフトウェアを統合したデータフローを開発し量子化学計算データを蓄積・活用しようとする動きが見られる。量子化学の理論に基づく化学反応経路データベースについては、国内外でわずかに報告がみられる（ミネソタ大学・D.G. Truhlar らのライブラリ、山口大学・堀憲次らの TSDB、台湾国立中正大学・W.P. Hu らのデータベース等）。ただしこれらはいずれもごく小規模なものであり、近年では報告が見られない。また、これらのデータソースを統計解析やデータマイニングなどの数理・情報的な手法により科学研究に活用する報告も見当たらない。

一方で、最近では、マテリアルズサイエンスなどの他分野からのインフォマティクスへの参入の動きが見られるようになってきている。具体的な動きとして、例えば、国内では物質・材料機構を中心に平成 27 年度からマテリアルズインフォマティクスの大型プロジェクトが開始され、その他にも、マテリアルズインフォマティクス関連の研究グランツが開始される動きがある。これに伴い、マテリアルズサイエンスや量子化学を専門とする研究者がインフォマティクスに参画する動きが顕在化しつつある。量子化学データに着目したものとして、第一原理高精度シミュレーションデータに基づくマテリアルズインフォマティクスの研究を実施している京都大学の田中功教授らのグループの研究が注目に値する。欧州の例として、スイスではマテリアルズインフォマティクスの大型国家プロジェクト MARVEL (<http://theosssrv1.epfl.ch/Site/Marvel>) が 2014 年 7 月から開始されている。MARVEL はスイス連邦工科大学ローザンヌ (Prof. Nicola Marzari) を中核とし、スイス国内の有数の実験と理論の両方の研究グループから構成され、理論計算の手法やソフトウェア開発も含めた大規模なプロジェクトとして進行中である。

分子・反応の探索方法としては、上述の通り、5 原子以上の分子系についてポテンシャル曲面上を自動探索することを実現した手法は現段階では世界で GRRM のみである。GRRM を模倣した手法の研究が（国際）学会発表で数年前にされていたが、いまだに成功していない。しかしながら、分子動力学による手法など、GRRM とは異なるアプローチによる探索手法の開発が国内外の種々の研究グループによって進められており、より高速で有用な手法が近い将来報告される可能性はおおいにあると言つてよいだろう。

現段階では、本プロジェクトと直接競合する研究は国内外で報告されていないが、マテリアルズインフォマティクスや新規分子・反応探索法などの国内外の近年の大きな動きを見ながら早急に推進していく必要があると考えている。

[2] 研究計画

(1) 全体計画

現在までに存在が確認されている化学物質は約 9,000 万種であり、年間数十万～百万種オーダーで増え続けている。しかし、理論的には存在しうるが、いまだ人類が手にしていない化学物質種の数はこれを遥かに凌駕することが明らかになっている。データ中心ケミストリープロジェクトでは、この革新をもたらす「埋蔵分子」を理論的に探索・発掘し、これらを供給する化学反応経路を、分子のポテンシャルエネルギーや電子状態に関する物理化学的パラメータとともにデータベース化し、研究・教育機関・一般から利用できるウェブシステムを構築する。プロジェクトの実施フローを図 3 に示す。本プロジェクトでは、化学物質が化学反応経路によってネットワーク状に複雑に連結されたグローバル化学反応マップデータを蓄積し、そこから有用な知識を導き出す基盤技術を開発する。データベース構築を進めるとともに、データの可視化と解析のためのソフトウェアの開発、化学への応用研究、ならびにデータ構築の高速・自動化も同様に重要な柱として推進する。応用研究には、まだ実験的には発見されていないが、理論的には存在することが予測される「埋蔵分子」や「埋蔵反応」の発掘、グローバル反応マップデータのデータマイニングによる理論的な化学反応の分類と体系化などをターゲットとして研究を推進する。生命科学データベースとの統合化による、ケミカルライフサイエンスの協調的発展の新しい方法論を提供する。情報学、統計科学、生命情報学、物理化学から開発チームを形成し研究を効果的に推進する。

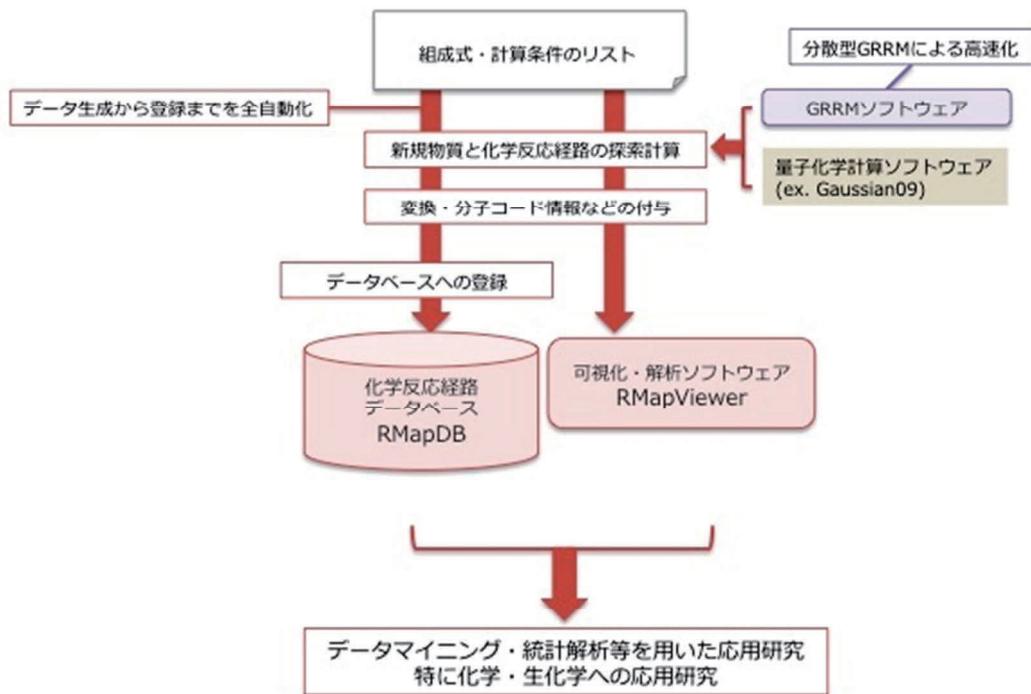


図3 プロジェクトの実施フロー

(2) 各年度の計画

平成 26 年度

年度の初頭に昨年度までに開発した研究者向けの可視化ソフトウェアを、まずはユーザからのフィードバックを得ることを目的として、一般に無償公開する。本ソフトウェアの開発言語としては Smalltalk を用いているが、平成 26 年度は、これをより汎用的な開発言語へ移植する。これと並行して、可視化システムへの新規機能の実装と、検索アルゴリズムの開発と実装を行う。

平成 27 年度

グローバル反応マップデータの蓄積を継続して進めるとともに、本プロジェクトの「埋蔵分子」と「埋蔵反応経路」発掘への実効性のエビデンスとして、昨年度に得られた種々の応用研究の成果をもとに、対象をより拡大して実施する。応用研究において、グローバル反応マップの可視化と解析のためのソフトウェア RMapView (2014 年 7 月に公開) を活用・フィードバックし、可視化と経路探索についての機能を強化し、バージョンアップ版を隨時公開する。Smalltalk 言語版を先行プログラムとして開発し、順次 SCALA 言語へと移植を行う。平成 28 年度 3 月までに SCALA 版をオープンソース化する。さらに、分子構造による検索や描画入力などの機能についての開発も進める。グローバル反応マップ探索計算の分散化による計算の高速化についての検討を進め、さらに、入力ファイルの生成からグローバル反応マップ探索計算、データ蓄積までのプロセスを自動化し、化学物質データ探索-登録-管理を自動的に行うことのできる、自己発展型のデータベースの開発を開始する。一方で、化学物質データ探索により得られる化学反応経路ネットワークデータを、データマイニングや統計解析、モデリング手法により分類・解析し、新規物質の発見や物性予測などに繋がる新規データケミストリ手法の開発を開始する。

[3] 研究推進・実施体制

・研究代表者

[国立情報学研究所] 佐藤寛子

・共同研究者

| | |
|---------------------------|----------------|
| [国立情報学研究所] | 宇野毅明 |
| [国立遺伝学研究所] | 有田正規 |
| [統計数理研究所] | 吉田 亮、中野純司 |
| [東北大学、量子化学探索研究所、国立情報学研究所] | 大野公一 |
| [京都大学] | 中小路久美代 |
| [東京大学] | 岩田 覚 |
| [京都産業大学] | 青木 淳 |
| [スイス連邦工科大学] | ハンス・ペーター ルーティー |

[4] 研究の進捗状況

グローバル反応マップから人（研究者）が埋蔵分子や反応を発掘することを目的として、グローバル反応マップの可視化・解析ソフトウェア RMapView の開発を進めてきており、平成 26 年 7 月に無償公開を開始し、継続的にバージョンアップを実施している（公開サイト：<http://sourceforge.net/projects/rmapviewer/>）。RMapView の最新バージョンでは、ネットワーク構造のグローバル反応マップの全体・部分領域を表示し、分子構造に相当するネットワークの各ノードを、平衡構造・遷移状態・解離チャネルの種類毎に色分けして表示したり、簡易版の分子構造モデルにより表示したりすることができる。マップ表示の方法には、縦軸をポテンシャルエネルギー値としたエネルギープロファイル図の形式による表示などの、種々のオプションを搭載している（図 4）。ノードの上にカーソルを持っていくと、該当する分子の詳細情報とオプションが表示される。ここから分子構造モデルを選択すると、分子の 3 次元構造モデルが別ウインドウで表示される。さらに、化学反応経路を検索する機能も実装されている（図 5）。2 つのノードをそれぞれ反応物、生成物として選択すると、この 2 点を結ぶ可能な経路を検索し、遷移状態エネルギー等の優先順位に従ってソートすることができる。また、得られる反応経路に沿ったムービーを表示することもできる（図 6）。

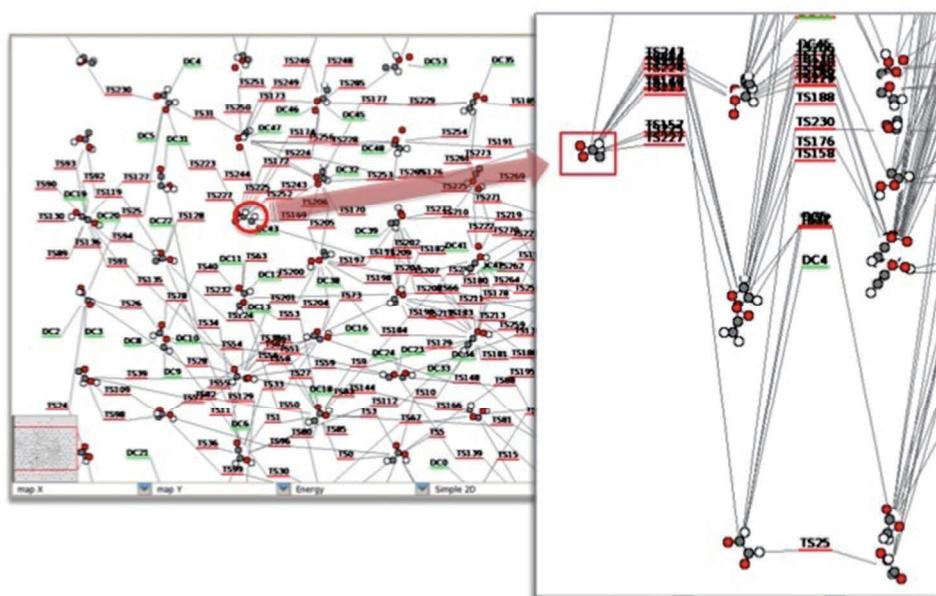


図4 RMapView によるグローバル化学反応マップ表示($C_2H_2O_2$ の反応マップ)

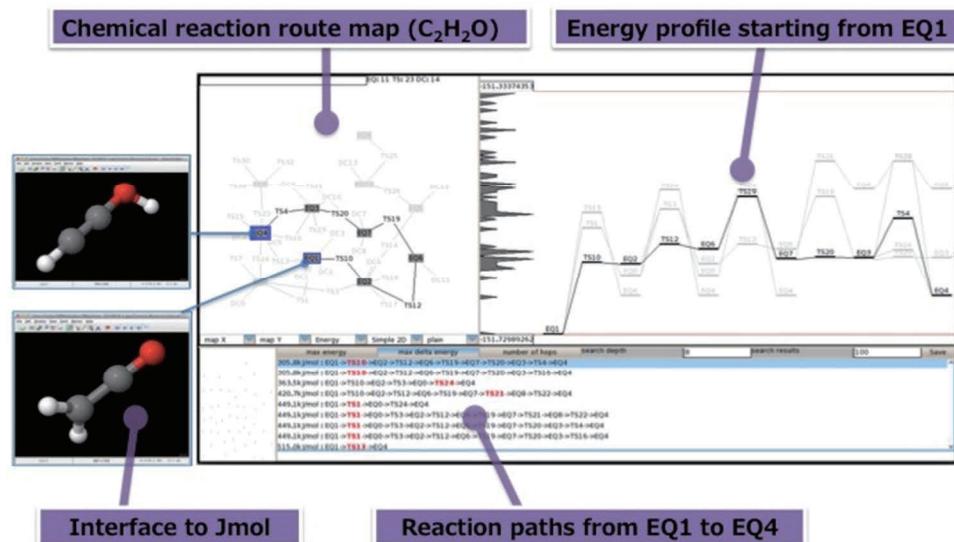


図5 RMapView を用いたグローバル化学反応マップの解析:最適な反応経路の検索

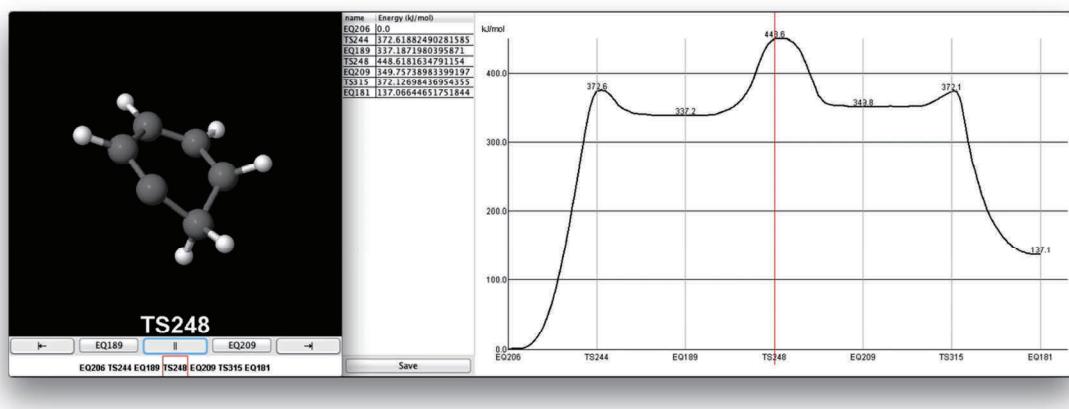


図6 RMapView による化学反応経路に沿ったムービー表示
(ベンゼンからフルベンへの最小エネルギー経路 (Minimum Energy Path: MEP))

RMapView は、開発を高速に進めるために、Smalltalk 言語により先行コードを開発・実装している。無償公開しているものも Smalltalk 版である。一方、RMapView はオープンソース化する予定であるが、このために、より汎用的な言語への移植も行っている。移植先として、汎用性と Smalltalk との相性等から SCALA 言語を選定した。

本プロジェクトと関連して、情報・システム研究機構 H26 機構長特別テーマの研究予算の支援を得て、RMapView の操作性の向上を目指し、グローバル反応マップをタブレット上でグーグルマップなどの地図情報をインターネットで閲覧するように操作することのできる機能のモチーフを開発するとともに、分子構造を手描画入力するアプリケーションのためのデータ収集とデザインを行った。また、RMapView のツール活用の促進を目的として、グローバル反応マップから検索される最適な反応経路のムービーを複数作成した。これらのムービーの一部は、RMapView のウェブサイトから近く公開する予定である。

GRRM によるグローバル化学反応マップの計算とデータ蓄積は、組成式の辞書に従った系統的な探索と、応用を志向した探索の 2 つのレーンで実施している。系統的な探索では、メルクインデックスの索引を利用している。計算は基本的に RHF/6-31+Gd レベルで行っており、一部の分子については、

B3LYP/STO3G, B3LYP-aug-cc-pVDZ, RHF/6-31G, RHF/6-31+Gdp を用いている。これまでに、53 種の組成式について探索計算を実施し、うち 4 種については現在も計算が進行中である。得られた平衡構造、遷移状態構造、解離チャネルの個数は、それぞれ 2,106 個, 7,251 個, 1,237 個である。

応用研究として、RMapView の経路検索機能を用いて糖の立体配座探索を行い、 4C_1 椅子型配座の最安定構造と 1C_4 椅子型配座の最安定構造とを結ぶ複数の最小エネルギー経路を得ることに成功した。一方、グローバル反応マップの解析をきっかけに、「埋蔵分子」と呼んでよいと思われる、超原子価分子の候補構造や、新しい炭素クラスターファミリーの存在が理論的に予測されてきている。プリズム炭素 C_{2n} と名付けた、発見した炭素クラスターファミリーの構造の一部を図 7 に示す。

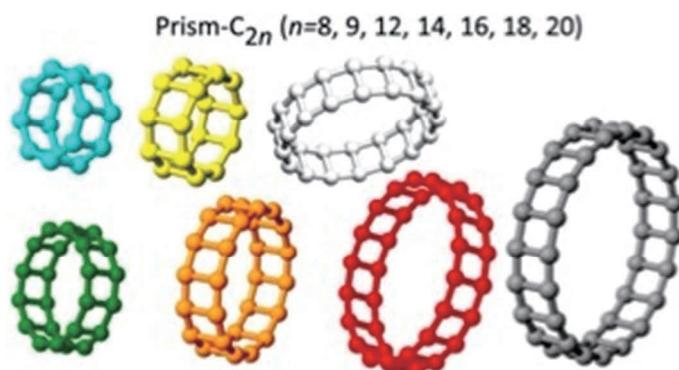


図7 発見された「埋蔵分子」の一部(プリズム炭素 C_{2n})

[5] 研究成果物

- ① 知見・成果物・知的財産権等
- ② 成果発表等

<論文発表>

[学術論文]

1. Ohno, K.; Satoh, H.; Iwamoto, T. A Prism Carbon Molecule C20, Chemistry Letters, 44 (5), 712-714 (2015). (DOI: 10.1246/cl.150120) (ウェブ公開日: 2015 年 3 月 6 日)

[データベース]

[著書等]

[解説・総説]

[その他]

・ソフトウェア (無償公開)

1. Satoh, H.; Oda, T. RMapView, <http://sourceforge.net/projects/rmapviewer/>, 7 月, 2014.

<会議発表等>

[招待講演]

・国内会議

1. 佐藤寛子, 小田朋宏, GRRM による埋蔵分子発掘プロジェクトと化学反応経路マップの可視化, GRRM チュートリアル 2014, 東京, 6 月 24 日, 2014.
2. 佐藤寛子, 未知の埋蔵分子発掘プロジェクト, 講演会「GRRM で拓く化学のニューフロンティア」, 東

京, 11月 30 日, 2014.

[一般講演]

・国内会議

1. 大野公一, 佐藤寛子, 岩本武明, “GRRM 法による超原子価化合物候補の自動探索”, 第 95 回日本化学会春季年会, 千葉, 3 月, 2015.

[ポスター]

・国内会議

1. 大野公一, 佐藤寛子, 岩本武明, “GRRM 法による未知化学の探索: H4C4”, 第 12 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム–諸熊奎治先生傘寿記念–, 京都, 1 月, 2015.

・国際会議

1. Satoh, H.; Oda, T.; Nakakoji, K.; Uno, T.; Tanaka, H.; Iwata, S.; Luethi, H.P.; Ohno, K. Chemoinformatics Meets Quantum Chemistry: A Strategy for Computational Molecular/Reaction Analysis Based on The Global Reaction Route Maps. 2014 Fall Meeting of the Swiss Chemical Society, Zurich, September, 2014.

<受 賞>

③ その他の成果発表

1. 佐藤寛子, 「埋蔵分子」発掘プロジェクトの展開について, JST さきがけ研究 21「情報と知」懇話会, 東京, 10 月, 2014.