

# 計算科学研究センター RESEARCH CENTER FOR COMPUTATIONAL SCIENCE

## 職員 (Staff)



助手 片岡 正典  
(生理学研究所兼務)

高知大学理学部卒, 名古屋大学大学院人間情報学研究科博士課程修了, 学術博士。名古屋大学物質科学国際研究センター非常勤講師(研究機関研究員), 名古屋大学大学院人間情報学研究科博士研究員, 名古屋大学化学測定機器センター助手を経て, 平成15年8月より現職。  
専攻: 合成化学, 物質科学。

Assistant Professor (concurrent, NIPS):

KATAOKA, Masanori

1993 Graduated from Kochi University. 1999 Completed the doctoral course in Philosophy, Nagoya University. 1999 Postdoctoral Fellow, Nagoya University. 2000 Assistant Professor, Nagoya University. 2003 Research Associate, Research Center for Computational Science.  
Speciality: Synthetic Chemistry, Materials Science

## 研究内容

計算科学研究センターは2000年4月に分子科学研究所の附属施設であった電子計算機センターを基盤とし, 生理学研究所および基礎生物学研究所からの増員を得て岡崎国立共同研究機構の共通施設として設立された。2004年4月には岡崎国立共同研究機構の自然科学研究機構への移行に伴い, 同機構の共通施設に転換した。旧電子計算機センターの主要業務であった量子科学計算を中心としたプログラムライブラリーの開発と分子科学データベースの開発に加えて, 計算生物学にも対象を広げて計算処理環境を提供している。

現在, 200の研究グループと約700名の利用者がネットワークを介して利用しており, 計算科学における世界的な研究拠点の一つとなっている。

天然生体高分子の構造と機能を基盤とした機能性生体様物質の創生を目指す。

とくに核酸中の塩基対に注目し, 種々の機能性人工核酸塩基を設計・開発している。人工核酸塩基の1つであるユニバーサル核酸塩基は相対する核酸塩基に呼応し, 動的に構造を変化させてすべての核酸塩基と塩基対を形成する。オリゴヌクレオチドへの導入により, 塩基配列に拘わらず多重鎖の形成が可能なユニバーサル核酸としての利用が期待される。また, 三環性人工核酸塩基は極めて高い塩基対形成および認識能力を有し, 電子顕微鏡における核酸塩基標識子としての利用を検討している。

人工核酸塩基の設計と評価には計算科学研究センターに設置された大型計算機とプログラムライブラリーを利用している。

## Research works

In April, 2000, the Research Center for Computational Science (RCCS) was established as a common facility for the Okazaki National Research Institute based on the Computer Center of Institute for Molecular Science. Then the center was reorganized into a common facility for the National Institutes of Natural Science in April, 2004.

The purpose of reorganization is to expand its frontier to boundary area between molecular and bio sciences. Since then RCCS has continued to provide the computational resources not only for the researchers inside the institutes but also for molecular and bio scientists around the world, expanding its own resources to solve the hard problems which might be impossible in their own universities or other institutes. Now 200 research groups and over 700 users use RCCS.

Development of artificial bioorganic compounds based on the structure and function of natural biopolymers.

Research topics are design and synthesis of artificial nucleobases by computational and synthetic chemistry focused on a structure of base-pair in nucleic acids. The Universal nucleobase forms base-pair with all nucleobases by the dynamic transformation of the structure. The base is applied to universal oligonucleotide which forms stable multi-helices with single-stranded DNA. Triple-ring heterocycles for artificial nucleobases form a very strong base-pair with natural nucleobase. The bases are applied to nucleobase markers for electron microscope.

Super computers and their program libraries in the Research Center for Computational Science are used in this research.

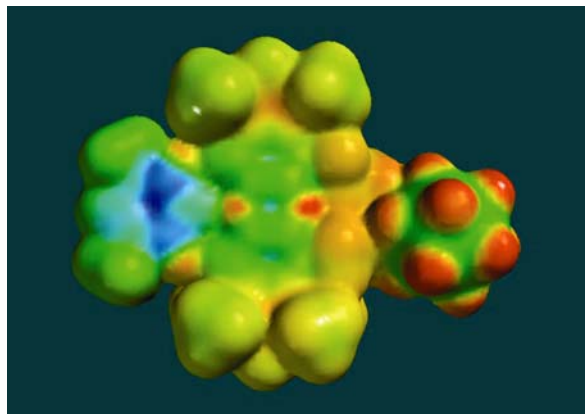


図. チミン-チミン標識子の塩基対モデル

Figure. The base pair structure of thymine with thymine-marker