

令和 6 年 6 月 10 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04806

研究課題名（和文）量子化学計算とシミュレーションを用いた柔軟な分子のビルドアップ機構の理論的解明

研究課題名（英文）Theoretical elucidation of flexible molecular build-up mechanisms using quantum chemical calculations and simulations

研究代表者

岸本 直樹 (Kishimoto, Naoki)

東北大学・理学研究科・准教授

研究者番号：60302080

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：量子化学計算と分子動力学計算を組み合わせ、有機分子の化学反応における自己触媒効果を入れた分子反応シミュレーション法と、可逆反応過程を入れた多段階分子反応シミュレーション法の2つを開発して、柔軟な分子のビルドアップ機構の解明を図った。また、溶液中で金属イオン原子と柔軟なペプチド分子の自己組織化によって巨大環状金属錯体が生成する過程で中心金属イオンが六座配位を形成するのに果たす役割や、反応初期のペプチド分子のコンフォメーション変化、カウンターアニオンを含んだ構造変形などについて、反応経路自動探索法を用いた量子化学計算によって検討し、巨大金属錯体のビルドアップ機構を研究した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、軽くて強い炭素繊維強化プラスチックが航空機の機体などに用いられ、省エネルギーが図られているが、本研究では炭素繊維を固定する母材となる樹脂の生成過程のエネルギー関係を量子化学計算で明らかにし、得られたエネルギーを独自の分子反応シミュレーションに組み込むことで巨大な架橋ネットワーク構造を作成することが出来た。これによって樹脂の力学特性を実験と遜色ない精度でシミュレートすることが可能となり、開発コストの削減が可能になると考えられる。さらに、自己組織化過程によって生成する巨大金属錯体の反応過程についても量子化学計算で重要な知見を得ることが出来た。

研究成果の概要（英文）：By combining quantum chemical calculations and molecular dynamics calculations, we developed two methods: a molecular reaction simulation method that includes autocatalytic effects in the chemical reaction of organic molecules, and a multi-step molecular reaction simulation method that incorporates a reversible reaction process, and elucidated the flexible molecular build-up mechanism. In addition, the role of the central metal ion in the formation of hexaxate coordination in the process of forming giant cyclic metal complexes by self-assembly of metal ion atoms and flexible peptide molecules in solution, conformational changes of peptide molecules at the beginning of the reaction, and structural deformation including counteranions were examined by quantum chemical calculations using the automatic reaction path search method. The build-up mechanism of giant metal complexes was studied.

研究分野：物理化学

キーワード：量子化学計算 反応経路探索 分子反応シミュレーション 分子動力学計算 超分子錯体 架橋ネットワーク構造 熱硬化性樹脂

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

分子モデリングとシミュレーションは、材料の構造と特性の関係を分子レベルで調査する費用対効果の高いアプローチである。近年、コンピュータサイエンスの進歩によってこの分野は急速に発展しており、特定の材料特性を以前よりも低コストで調査できるようになった。低コストで高性能な材料を開発し、分子レベルでの構造と特性の関係を基礎的に理解する研究を実施することは有機材料の応用可能性を拡大するのに役立つと考えられる。例えば、さまざまな研究グループがモンテカルロ法と MD シミュレーションを使用して熱硬化性ポリマーモデルを作成する計算手順を報告しているが、物理的特性を予測する MD シミュレーション用の正確なポリマーモデルを提供できる手順が少ないために物理的特性の予測は依然として容易ではない。

2. 研究の目的

本研究では、ビルディングブロックである柔軟な分子からメソスケール分子集合体、さらにはマクロスケール組織体へ繋がる、人工的にプログラムした構造体の遷移(分子のビルドアップ機構)を理論計算から解明することを目的としている。熱硬化性樹脂は様々な工業分野、特に航空宇宙産業などで使用されているが、分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、例えば熱硬化性樹脂のガラス転移温度を正確に予測するには、まず正確な構造情報を組み込んだポリマーモデルを作成する必要がある。

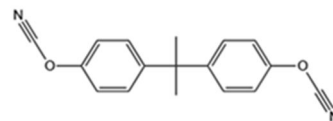
3. 研究の方法

本研究の連携研究者が作り出した巨大な分子構造体の核(コア)となる分子複合体の形成(=穏やかな反応)メカニズムを、量子化学計算と反応経路自動探索アルゴリズム GRRM の人工力誘起反応(AFIR)法を組み合わせる。次に加速 MD 計算による分子反応シミュレーション(ナノ・メソスケール)、粗視化 MD による超分子ナノ構造体の構造と変形(ナノ・メソスケール)機構の解明へとスケールを上げながら、最適な計算方法を駆使してマルチスケールで柔軟な分子のビルドアップ機構を明らかにする。我々は、エポキシ分子の熱硬化反応に於いて量子化学計算と古典分子動力学を組み合わせたハイブリッド反応シミュレーション法を開発し、分子触媒の効果を入れた架橋ネットワーク形成過程のシミュレーションを行い、物理的特性の検討を行った。この研究では、活性化エネルギーと生成熱をモデル化プロセスに組み込む手法を応用して、第 3 体である自己触媒分子を含んだ活性化エネルギーを量子化学計算法で決定して樹脂生成過程をシミュレートした。

4. 研究成果

量子化学計算と分子動力学計算を組み合わせ、有機分子の化学反応における自己触媒効果を入れた分子反応シミュレーション法(cat-GRRM/MC/MD法)と、可逆反応過程を入れた多段階分子反応シミュレーション法(multistep-GRRM/MC/MD法)の2つを開発して、柔軟な分子のビルドアップ機構の解明を図った。

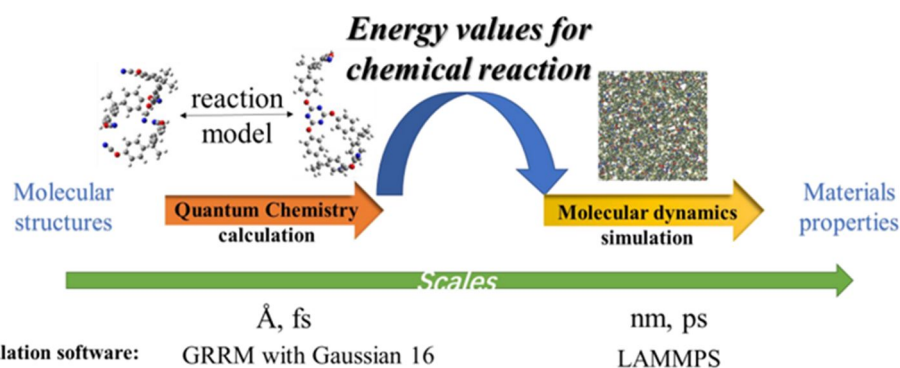
例えば本研究では、ビスフェノール A ジシアン酸エステル(BPACN)モノマー分子(右図)から樹脂が生成する過程を量子化学と古典分子動力学のハイブリッド計算法でシミュレートし、生成したシアン酸エステル樹脂の熱物理的および力学的特性を評価した。その際に、以下の2通りの反応を扱った。



(1) 量子化学反応経路探索法 GRRM アルゴリズムによって BPACN 3 分子からトリアジン環(六員環)生成に至る 1 段階の反応経路と、可逆反応を含む 2 段階の反応経路の 2 つを見つけることが出来た。この 2 つの反応機構について、活性化エネルギーと生成熱を用いて、反応確率と系の温度を考慮した分子動力学反応シミュレーション(MC/MD)法で架橋プロセスのシミュレーションを行った。2 段階反応経路では、不安定な中間体(四員環)から反応物へ分解する逆反応過程も反応シミュレーションに組み入れて樹脂モデルを生成した(multistep-GRRM/MC/MD法、Polymer、292、126606(2024)にて発表)。

(2) 量子化学反応経路探索法 GRRM アルゴリズムによって有機金属触媒が六員環生成を促進する反応経路を見つけることが出来た。有機金属分子と BPACN 分子の相互作用による安定化のために六員環を生成する活性化エネルギーを超えることが容易になり、少量の触媒分子の添加で樹脂生成反応のサイクルを回すことが出来る(cat-GRRM/MC/MD法、日本化学会第 104 春季年会にて発表(2024年3月19日))。

反応生成物である架橋ネットワーク構造を持つポリマー(樹脂)は、既報の実験による力学特性(ガラス転移温度やヤング率)と良い一致を示したことから、開発した手法が優れていることを証明した。



また、溶液中で金属イオン原子と柔軟なペプチド分子の自己組織化によって巨大環状金属錯体が生成する過程で中心金属イオンが六座配位を形成するのに果たす役割や、反応初期のペプチド分子のコンフォメーション変化、カウンターアニオンを含んだ構造変形などについて、反応経路自動探索法を用いた量子化学計算によって検討し、巨大金属錯体のビルドアップ機構を研究した。さらに、金属イオン原子とペプチド分子から自己組織化によって生成した巨大分子系の円二色性スペクトルについて、励起状態の量子化学計算から吸収スペクトルと円二色性の解析を行ったところ、光学活性を持つ配位子と金属との構造上の関係と励起に関する分子軌道の両方の効果について検討することが出来た。

その他にも、二水素錯体への水素分子吸着と同位体分離の量子化学計算ならびに、有機分子を対象にしたメタルフリー表面増強ラマン散乱効果の量子化学的解析の研究を行い、学会や論文で成果発表を行った。

引き続き予定として、巨大高分子の劣化・解離の化学反応動力学計算を行うことで、樹脂の生成から分解までの反応シミュレーション法を確立する。また、「金属と樹脂の界面の接着・破壊機構の解明」について、自動車部品メーカーと共同で研究している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Xi Yingxiao, Fukuzawa Hironobu, Fukunaga Shoji, Kikugawa Gota, Zhao Yinbo, Kawagoe Yoshiaki, Okabe Tomonaga, Kishimoto Naoki	4. 巻 552
2. 論文標題 Development of cat-GRRM/MC/MD method for the simulation of cross-linked network structure formation with molecular autocatalysis	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Molecular Catalysis	6. 最初と最後の頁 113680 ~ 113680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mcat.2023.113680	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Bai Yukun, Kikugawa Gota, Xi Yingxiao, Kishimoto Naoki	4. 巻 292
2. 論文標題 Development of a multistep-GRRM/MC/MD simulation method for the formation of crosslinked network structures via multistep reversible reaction pathways	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Polymer	6. 最初と最後の頁 126606 ~ 126606
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.polymer.2023.126606	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Zhang Dapeng, Kishimoto Naoki, Miyake Ryosuke	4. 巻 127
2. 論文標題 Quantum Chemical Calculations of Flexible Tripeptide-Ni(II) Ion-Mediated Supramolecular Fragments and Comparative Analysis of Tripeptide Complexes with Various Metal(II) Ions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9733 ~ 9742
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c05277	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tang Xuke, Kishimoto Naoki, Kitahama Yasutaka, You Ting-Ting, Adachi Motoyasu, Shigeta Yasuteru, Tanaka Shigenori, Xiao Ting-Hui, Goda Keisuke	4. 巻 14
2. 論文標題 Deciphering the Potential of Multidimensional Carbon Materials for Surface-Enhanced Raman Spectroscopy through Density Functional Theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 10208 ~ 10218
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.3c02962	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 岸本直樹, 和泉廣樹, 坂本純平, 岡部朋永	4. 巻 48
2. 論文標題 量子化学計算と分子反応シミュレーションを組み合わせたマルチスケールモデリングによる熱硬化性フェノール樹脂の評価と解析	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本複合材料学会誌	6. 最初と最後の頁 217-222
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 He, Jianhai; Abdel-Galeil, Mohamed; Nemoto, Mana; Kishimoto, Naoki; Morita, Shin-ichi	4. 巻 16
2. 論文標題 Bio-Raman non-negative matrix factorization: its practical methodology	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 26502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acb6ce	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 白玉焜, 岸本直樹, Xi Yingxiao, 福永翔士, 福澤宏宣, 菊川豪太	4. 巻 -
2. 論文標題 Development of Multistep-GRRM/MC/MD method for crosslinked network structure formation process via multi-step reversible reaction pathway	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 第14回日本複合材料会議JCMM-14、Proceedings (前刷原稿)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhao Yinbo, Kikugawa Gota, Kawagoe Yoshiaki, Shirasu Keiichi, Kishimoto Naoki, Xi Yingxiao, Okabe Tomonaga	4. 巻 126
2. 論文標題 Uncovering the Mechanism of Size Effect on the Thermomechanical Properties of Highly Cross-Linked Epoxy Resins	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2593 ~ 2607
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10827	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計33件(うち招待講演 3件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Naoki Kishimoto
2. 発表標題 Quantum chemical study on the temperature dependence of separation of molecular hydrogen and deuterium using dihydrogen complexes
3. 学会等名 13th International Conference on Chemistry and Chemical Process (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 白玉焜、岸本直樹、Xi Yingxiao、菊川豪太
2. 発表標題 量子・古典ハイブリッド反応シミュレーション法による熱硬化性樹脂の生成と特性の評価
3. 学会等名 第15回日本複合材料会議
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 白玉焜、岸本直樹、菊川豪太
2. 発表標題 Integration of Quantum Chemical Calculation and Molecular Dynamics Simulation: A Novel Approach for the Organometallic-Catalyzed Thermosetting Polymers
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 岸本直樹
2. 発表標題 GRRMとMDを用いた高分子材料の生成と特性の理論的研究
3. 学会等名 IQCE講演会(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岸本直樹、Xi Yingxiao、Bai Yukun、菊川豪太
2. 発表標題 分子触媒効果を入れたCat-GRRM/MC/MD計算法による架橋ネットワーク高分子の生成と力学特性の研究
3. 学会等名 第37回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Dapeng Zhang, Naoki Kishimoto, Ryosuke Miyake
2. 発表標題 Quantum Chemical Investigation of Metal(II) Ion Coordination Configurations with Flexible Tripeptides
3. 学会等名 錯体化学会第73回討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yukun Bai, Naoki Kishimoto, Yingxiao Xi, Gota Kikugawa
2. 発表標題 Integrating Quantum Chemistry and Molecular Dynamics Simulation for Thermosetting Polymers: Thermophysical Properties and Curing Behavior
3. 学会等名 The 2nd Japan-China-Korea Joint Symposium on Composite Materials (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Xi Yingxiao, Fukuzawa Hironobu, Kikugawa Gota, Kishimoto Naoki
2. 発表標題 Development of a cat-GRRM/MC/MD method to study crosslinking processes and physical properties: Role of molecular catalysts
3. 学会等名 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Keyun Wang, Naoki Kishimoto, Atsuya Muranaka, Ryosuke Miyake
2. 発表標題 Quantum chemical analysis of circular dichroism spectra for cyclic metal complexes consist of chiral tripeptides
3. 学会等名 ホストゲスト超分子化学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zhang Dapeng, Naoki Kishimoto, Ryosuke Miyake
2. 発表標題 Quantum chemical insight for the initial stage of Ni(II)-mediated self-assembly of a flexible tripeptide forming giant cyclic complexes
3. 学会等名 ホストゲスト超分子化学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Xi Yingxiao, 福澤 宏宣, 福永 翔土, 菊川 豪太, 岸本 直樹
2. 発表標題 Advances in the Cat-GRRM/MC/MD method: A study on molecular catalysis effects in simulations of formation reaction of epoxy resin Cat-GRRM/MC/MD法の進展：エポキシ樹脂の生成反応シミュレーションにおける分子触媒効果の研究
3. 学会等名 分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Naoki Kishimoto
2. 発表標題 Study on Cyclization Reaction Path of a Cyanate Resin by Quantum Chemical ab initio MO Calculations
3. 学会等名 US-JAPAN/EU-JAPAN Joint Conference on Composite Materials 2020 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岸本 直樹, 白 玉焜, 福澤 宏宣, Xi Yingxiao
2. 発表標題 量子化学計算と反応シミュレーションによるシアネート分子の環化反応経路と樹脂モデルの研究
3. 学会等名 分子科学討論会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中頌子、王珂云、岸本直樹、三宅亮介
2. 発表標題 アミノ酸側鎖による環状金属イオン配列のキラリティ制御
3. 学会等名 錯体化学会第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yingxiao Xi, Hironobu Fukuzawa, Gota Kikugawa, and Naoki Kishimoto
2. 発表標題 Analysis of crosslinking reaction process of network polymers by molecular dynamics simulation and quantum chemical calculation
3. 学会等名 19th ICFD (International Conference on Flow Dynamics) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岸本直樹, Xi Yingxiao, 福澤宏宣, 菊川豪太
2. 発表標題 量子化学計算と分子動力学計算を使ったエポキシ樹脂の架橋ネットワーク構造生成過程における反応シミュレーションの開発
3. 学会等名 第36回 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名	Yingxiao Xi, Hironobu Fukuzawa, Yinbo Zhao, Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, and Naoki Kishimoto
2. 発表標題	Analysis of Crosslinking Reaction Process of Network Polymers using Quantum Chemical Calculations and Its Application to Reaction Simulation
3. 学会等名	US-JAPAN/EU-JAPAN Joint Conference on Composite Materials 2020 (国際学会)
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	Yingxiao Xi, Hironobu Fukuzawa, Gota Kikugawa, and Naoki Kishimoto
2. 発表標題	Development of a Reaction Simulation Method for the Generation Process of Crosslinked
3. 学会等名	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2022」
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	Yukun Bai, Naoki Kishimoto, Hironobu Fukuzawa, and Yingxiao Xi
2. 発表標題	Study of cyclization reaction pathway of cyanate resin with catalysts by quantum chemical calculation
3. 学会等名	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2022」
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	Yingxiao Xi, Hironobu Fukuzawa, Shoji Fukunaga, Gota Kikugawa, Naoki Kishimoto
2. 発表標題	Development of cat-GRRM/MC/MD method realizing the process of crosslinked network structure formation using molecular catalysts
3. 学会等名	第103回日本化学会春季年会(2023)
4. 発表年	2023年

1. 発表者名 白 玉焜、岸本 直樹、Xi Yingxiao、福永 翔士、福澤 宏宣、菊川 豪太
2. 発表標題 Development of Multistep-GRRM/MC/MD method for crosslinked network structure formation process via multi-step reversible reaction pathway
3. 学会等名 第14回日本複合材料会議JCMM-14
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山内 多聞, 内田 海路, 野呂 真一郎, 岸本 直樹, 坂本 良太, 高石 慎也
2. 発表標題 マンガン二水素錯体を用いた常温水素同位体(H ₂ /D ₂)クロマトグラフィー分離
3. 学会等名 錯体化学会第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 内田 海路, 岸本 直樹, 野呂 真一郎, 坂本 良太, 高石 慎也
2. 発表標題 二水素錯体を用いた水素同位体(H ₂ /D ₂)の常温分離法の開発
3. 学会等名 錯体化学会第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Dapeng Zhang, Naoki Kishimoto, Ryosuke Miyake
2. 発表標題 Quantum chemical analysis of the coordination stability between flexible tripeptides and nickel ions using the GRRM program
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2022」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Xue Hao、岸本直樹、高石慎也
2. 発表標題 Mnの水素分子錯体吸脱着の温度依存性に関する量子化学計算
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2022」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Dapeng Zhang、Naoki Kishimoto、Ryosuke Miyake
2. 発表標題 Quantum chemical analysis of coordination stability of flexible tripeptides and nickel ions self-assembling to form macrocyclic supramolecules
3. 学会等名 第103回日本化学会春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中 頌子、王 珂云、岸本 直樹、三宅 亮介
2. 発表標題 ペプチド錯体の環状金属イオン配列におけるキラリティ制御
3. 学会等名 第103回日本化学会春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 張 大鵬、岸本 直樹、三宅 亮介
2. 発表標題 量子化学計算による巨大環状金属錯体の初期生成機構に関する研究
3. 学会等名 第19回ホスト-ゲスト超分子化学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岸本直樹
2. 発表標題 分子の構造と反応の量子化学研究
3. 学会等名 IQCE 量子化学探索講演会 2021 「量子化学で探る化学の最先端」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Dapeng Zhang, Wulan Intan Sari, Naoki Kishimoto
2. 発表標題 Analysis of Raman spectra by quantum chemical calculations of modelized starch
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2021」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中佐紀, 岸本直樹, 張大鵬, 森本将行, 淺川雅
2. 発表標題 キラル識別空間の分子設計に向けたテトラポッド型分子の自己組織化メカニズムの解明
3. 学会等名 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yingxiao Xi, Hironobu Fukuzawa, Naoki Kishimoto
2. 発表標題 Quantum Chemical Study of the influence of the Catalytic Impurity Molecules on the Epoxy-Amine Curing Reaction
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2021」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Naoki Kishimoto, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Tomonaga Okabe
2. 発表標題 Relation between the internal molecular structure and thermomechanical properties of multi-component epoxy resin
3. 学会等名 2nd Asian Conference on Thermal Sciences (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 重水素含有ガスの製造方法、及びガス分離装置	発明者 高石 慎也、岸本直樹、内田海路、野呂真一郎	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、PCT/JP2022/010068	出願年 2022年	国内・外国の別 外国

〔取得〕 計0件

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	三宅 亮介 (Miyake Ryosuke) (30509542)	お茶の水女子大学・基幹研究院・講師 (12611)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------