

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 3 月 2 日現在

機関番号：17701

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13730

研究課題名(和文) 分子イオン移動度の分布に基づく分子の定量的コンホメーション多様性分析法の開発

研究課題名(英文) Development of Quantitative Method to Analyze Conformational Diversity of Organic Ions Basing on their Mobility Distribution

研究代表者

上田 岳彦 (UEDA, Takehiko)

鹿児島大学・理工学域工学系・准教授

研究者番号：80293893

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：食品や医薬品、または体内や環境中の微量成分を迅速かつ的確に分析する方法の確立は、食や環境のリスクの評価や病気の診断、あるいはそれらの予防に大きく貢献するための重要な課題です。本研究は、近年急激に進歩しているイオン移動度分析法による定性的な微量分子の識別法を改良し、分子の柔らかさや形の多様性がどのように分析結果に反映されるかを理論的に導き出して実際の分析結果と比べることにより、今までは識別や定量が困難だった生体分子の異性体(構造がほぼ同じだが生理活性が異なるもの)の識別を可能にしました。非常に似通った分子でも、互いに紛れることなく、確実に一つの生理活性物質にまで識別できる新手法を開発しました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

空気中を漂うウイルスや食品に含まれる残留農薬など、私たちの身の回りには様々なリスク要因があり、その存在や含有量を素早く的確に分析して明らかにする技術は大変重要です。検出したい分子だけを識別するために、その分子の重さや大きさ、あるいは性質を利用して分子を識別することに加えて、本研究では新しいデータ解析技術を導入することで、分子の形の微妙な差異を利用して、よく似た物質の中からリスクのあるものだけを検出することに成功しました。さらにこの方法は、生体内で見られるありのままの分子の動きについての情報を引き出すことができ、薬剤の作用の仕方や病原体の感染の仕方などを調べるために役立てられます。

研究成果の概要(英文)：By rationally accounting the conformational diversity of organic ions of interest, we have proved that distinguishing chemical isomers of identical mass with same sets of functional groups is successfully achieved through the ion-mobility analysis even the amount of the target ions is very low and almost trace. A systematic conformer generation algorithm was employed for elucidation of conformational divergence during flying through the drift tube of the analyzer, and semi-empirical quantum energy determination followed by the calculation of collision cross sections of the conformers were performed for each cases in the analysis of pesticides after degradation in natural environments. There are a lot of possible isomers of identical m/e ratio but with different mobility distributions based on their conformational diversity. Our theoretical prediction successfully distinguished those isomers in most cases.

研究分野：計算物理化学

キーワード：イオンモビリティ コンホメーション 衝突断面積 農薬 代謝産物 環境変化体 CCS PTPWs

1. 研究開始当初の背景

研究代表者はこれまで、マスペクトロメトリ法におけるイオンモビリティ実験の結果を検証するために、推定された分子イオンの最適構造からその衝突断面積(CCS)を推定する古典的なアルゴリズム(MobCal-TM法)を適用して解析を行ってきました。しかし、生体分子の実験においては、その分子の構造特性に応じて、CCS そのものに分布があることが観測されてきました。近年、分子動学的解析から、分子のコンホメーション揺らぎとイオンモビリティの分布に定性的な相関があることが報告されていますが、ガス分子との相互作用を全く反映しない近似的な球体モデル(Projection Approximation, PA法)を採用した今までの研究方法には原理的な限界がありました。つまり、十分な物理化学的根拠を持って、実験で得られた CCS の分布から、どのコンホメーションがどの CCS 値に対応するかを直接結び付ける推定法は知られていません。しかし、もしそれが実現すれば、分子の多様なコンホメーションやそのコンホメーションの安定性などの定量的な情報を実験 CCS 分布データから直接引き出せるという発想に至りました。

近年、フラグメントパターンでも識別できない異性体を、CCS の違いから識別することができるイオンモビリティ法が実用的となりました。本推定法を確立することで、分子イオンの直接的な同定に貢献するばかりでなく、重要な生体分子の動的挙動に関する知見を提供でき、医学分野や環境科学分野において、新しい分析手段として大きな波及効果を持つものと考えられます。

2. 研究の目的

本研究は、マスペクトロメトリ法において、イオンモビリティの分布を分子のコンホメーション分布と直接結び付ける新規なアルゴリズムを確立することを目的とします。

本研究が提案する推定法は、生体由来分子などのコンホメーション多様性と柔軟性を反映させて、ガス分子との衝突相互作用を直接反映させたイオンモビリティ実験をシミュレートするものであり、実験で得られたイオンモビリティ分布から直接的に生体高分子の特異なコンホメーションを推定することができ、さらに、一定の最適構造を持たない生体分子の動的な特性を明らかにすることができます。それが確立すれば、識別が困難な異性体を新しい視点から識別できるようになり、医学的分析や環境科学的分析の分野に速やかに応用できます。

既に研究分担者がイオンモビリティ実験を行う機器および環境を整備しており、本推定法の結果を実験的に検証する体制は完備していました。予備的な数値計算結果から、実験装置のディメンジョンや物理化学的

性がどの程度実験結果に影響するかもあらかじめ見積もってありました。解決すべき課題として次の3つを設定しました。(1) 分子動学的に生成した大規模コンホメーションアンサンブルを用いたガス分子の散乱軌跡に基づく CCS 分布の推定計算法を確立すること、(2) 特に窒素分子の衝突過程を適切にモデル化する力場パラメータを最適化すること、および、(3) 実験で得られたイオンモビリティ分布の形状から、分子イオンの識別とそのコンホメーションの決定が可能な直接的なアルゴリズムの確立、の3課題を計画しました。

3. 研究の方法

「新しいモデルを用いた衝突散乱シミュレーションプログラムの開発」

CCS の推定計算は従来、合理的な仮説のもとで最適化した単一の立体構造を用いて、ガスとの衝突によっても最適構造が維持される前提でガス分子の散乱による運動量変化から計算するものでした。実際、300 K で平衡化した分子動力学計算により得られたアンサンブル(MD)と、それをさらに分子軌道法計算により個々にエネルギー最適化したアンサンブル(Opt)について、従来の CCS 推定計算(MobCal-TM 法)を行って得られた結果の分布を検証すると、明らかに、高温での分子揺らぎを取り入れた MD (分子動力学) アンサンブルの結果は実験 CCS 分布をよりよく再現しており、実験装置内の環境を再現したモデルが本質的に必要であることを示すことができました。

実際には、低圧のガスの中を電場で加速されながら飛行する分子イオンは決して熱的平衡とは言えず、電場から得たエネルギーがガスの散乱により消費されるという動的過程をモデル化することが重要です。旧 MobCal-TM 法は固定した分子イオンにより散乱されるガス分子の軌跡をシミュレートするアルゴリズムですが、本研究では、ガスの衝突散乱過程で分子イオンのコンホメーション揺らぎが発生するというモデルを採用しました。このようなモデルを計算する方法は、既に確立した力場セット(AMBER または CHARMM)を用いて分子イオンの構造変化を数値計算的に追跡することで達成できます。衝突のたびに分子動力学シミュレーションを行うには大きな計算コストを要しますが、上記の予備の実験例のように、アンサンブルを予め用意するための余計な仮説を導入する必要がないため、より現実的なモデルと言えます。

フレキシビリティが制限された比較的低分子量の分子イオン (M.W.<400 Da) を選択して、計算で得られた CCS 分布が実験的に得られた CCS 分布の実測値を予測できるかどうかによってモデルの信頼性を評価しました。研究分担者は現有の Waters 社製

Synapt G2 を用いて、主に農薬の環境中での分解産物(PTPWs)の低分子モデルの実測 CCS 分布の決定を担当しました。

「CCS 分布実測値を用いた力場パラメータの修正」

使用する力場ポテンシャルとして Leonard-Jones/四重極相互作用複合力場を採用しました。旧来の MobCal 法の計算結果は初期の分子構造に強く依存します。一方、新モデルでは、分子内力場と外部電場により分子の構造が変化することから、CCS 分布の計算結果はその力場パラメータに強く影響されると考えられます。

大部分の構成原子がガス分子と相互作用できるような、比較的分子量の大きくない生体高分子オリゴマー (ポリアラニン、M.W.< 2 kDa) をモデルとして、実験 CCS 分布をうまく再現できるように、主にガス分子との VdW/四重極相互作用パラメータを修正しました。パラメータの探索手順は最急降下法と遺伝的アルゴリズムを併用しました。研究分担者は、基準となる実験 CCS 分布を精度よく決定するため、現有の Waters 社製 Synapt G2 を用いて、電界強度やガス圧を調節して装置の時間分解能を高めた上で、主にオリゴペプチドまたは多重縮合環炭化水素などのモデル分子の精度の高い実測 CCS 分布の決定を担当しました。

得られた新力場パラメータを用いて、予測した CCS 分布の形状が実験 CCS 分布と一致するかどうかを検証することで、分子イオンの指紋を推定する方法として本推定法が有効かどうかを検証しました。

4. 研究成果

「新しいモデルを用いた衝突散乱シミュレーションプログラムの開発」

まず、従来の MobCal コードを解析して半経験的分子軌道法計算プログラム Mopac と非経験的分子軌道プログラム Gaussian との入出力連携が可能となるファイル形式変換サブルーチンを構成しました。次に、あらかじめ構成した分子モデルを Balloon、Confab または RDkit ルーチンによりディスタンスジオメトリ法アルゴリズムを適用し、分子動力学法 (MMFF94 力場) により局所的に構造最適化した擬安定コンフォーマー (数百~数千コンフォーマー) を生成するサブルーチンを実装しました。

気体分子との衝突シミュレーションには MobCal に本来実装されているルンゲクッタ法分子動力学コードを改変し、特に窒素分子との近距離相互作用に四重極相互作用モデルを、また静電相互作用・双極子相互作用を精度よく再現する 4 電荷中心モデルによる Leonard-Jones ポテンシャルを採用しました。

分子の部分電荷の決定には Mopac に実装

されているのと同じ Mulliken 電荷分布計算および ESP 電荷分布計算アルゴリズムを採用しました。

生成されたすべての擬安定コンフォーマーに対して MOPAC2016 実装の PM7 ハミルトニアンにより局所構造最適化、振動モード計算、部分電荷決定計算を行い、振動モード計算の結果を用いて各コンフォーマーのエントロピーおよび Gibbs 自由エネルギーを決定するルーチンを実装しました。得られた ESP 電荷を持った擬安定コンフォーマーのそれぞれについて、上記の改変 MobCal 分子動力学衝突解析により、運動量移行断面積のアンサンブル平均を計算し、そのコンフォーマーの衝突断面積に換算しました。

各コンフォーマーの Gibbs 自由エネルギーのボルツマン因子の値からそのコンフォーマーの存在確率を算出し、衝突断面積の確率分布関数を推定しました。このような推定計算はこの研究が初めてです。衝突断面積はイオンモビリティ測定系の装置定数を用いて直ちにイオンの飛行時間の確率分布に換算することができ、実験で得られたイオン到達時間分布と直接比較することができました。事実、農薬変化体やモデル化合物 (polyAla ペプチド、縮合多環炭化水素など) において様々なイオン到達時間分布が観測され、同様の確率分布が推定計算されました。確率分布から計算した平均到達時間と実験到達時間のピークは完全に相関し ($R^2=0.99$)、平均時間の再現に成功したのみならず、その付加情報としての到達時間分布の形状も推定できることがわかりました。

以上の計算プロセスは 1 つの分子モデルを与えるだけで必要な全過程を完全に自動で行えるようにプログラムしました。アプリケーションソフトウェア「MobCal Assist」という名称にてシンポジウム発表により公表しました。

「CCS 分布実測値を用いた力場パラメータの修正」

イオンモビリティのシミュレーション過程において最も結果に影響を及ぼすのが分子間相互作用パラメータと想定される換算温度です。換算温度は現象を記述する上で本来そのエネルギー分布から逆算される統計量であり、本研究では逆にパラメーターの一つとしてとらえることにより、気体分子の衝突過程とその結果得られる分子イオンのコンフォメーション分布を強く反映するパラメーターとして実験結果と適合するように逆算するべきものと考えました。

分子間相互作用パラメータの多くは He 中でのイオンモビリティ実験により決定されたものであり、窒素ガス中での実験結果が計算により直接再現できない原因はこのパラメーターの流用によるものであると当初考えていましたが、様々なパラメーターセットを試した結果、むしろ分子間相互作用パラメ

ータよりも換算温度、およびその結果得られるコンフォーマーの分布がイオンモビリティ実験の結果を左右する大きな要因であることがわかりました。実験結果を再現する換算温度は実験環境で想定される温度(室温程度以下)よりもかなり高温(400~600 K)を仮定した方が推定精度が良く、これはガス分子の衝突過程が、見かけ上の高温環境で得られるような広がったコンフォーマー分布を実際にもたらしめていることを示唆しています。

この結果を受けて、換算温度可変でシミュレーションを実行できるように計算アルゴリズムを改変するとともに、イオンの到達時間分布から換算温度を逆算するアルゴリズムも実装しました。上記「新しいモデルを用いた衝突散乱シミュレーションプログラムの開発」では手動で換算温度を設定した結果でしたが、実験試料に添付した内部標準分子イオンの分布に適合する換算温度を逆算することで、各測定条件でのガスとの衝突過程を換算温度で代表し、そのパラメーターを用いて分子イオンの識別能力を向上させるアルゴリズムを開発しました。詳細は知的財産関連の理由により別途公表する予定です。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計2件)

1. 上田 岳彦, 高梨 啓和, 衝突断面積の計算化学—イオンモビリティ推定法の歴史と展望—, *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, 65(6), 288-296, 2017. (査読あり)

2. 高梨 啓和, 上田 岳彦, 精密質量分析計を用いた未知物質の分子式推定, *水環境学会誌*, 39(10), 360-364, 2016. (査読あり)

[学会発表] (計38件)

1. 高梨 啓和, 橋本 扶美, 中島 常憲, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, LC/MS/MS を用いた環境変化体の無標準測定技術の開発, 第27回環境化学討論会, 2018年, 2B-05

2. 高梨 啓和, 浜 知宏, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 松下 拓, 亀屋 隆志, 高分解能LC/MSと多変量解析を用いた trans-1,3-ジクロロプロペン塩素処理物中の変異原性物質の探索, 第52回日本水環境学会年会, 2018年, 2B-08

3. 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 未知環境変化体の構造推定のための衝突断面積解析技術の開発, 2018年, 2B-09

4. 宮本 信一, 石川 英律, 岡村 哲郎, 山本

潤, 田畑 彰久, 安田 侑右, 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 上田 岳彦, 門川 淳一, 高梨 啓和, イミダクロプリド環境変化体の生態リスク, 第52回日本水環境学会年会, 2018年, P-071

5. Takehiko Ueda, Hirokazu Takanashi, Prediction of Collision Cross Sections of Environmentally Degraded Pesticides for Ion Mobility Spectrometry, 7th Asia-Oceania Mass Spectrometry Conference, 2017年

6. 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, ネオニコチノイド系農薬ジノテフランの未知環境変化体の構造推定, 第20回日本水環境学会シンポジウム, 2017年

7. 高梨 啓和, 浜 知宏, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 松下 拓, 近藤 貴志, 亀屋 隆志, 農薬およびその環境変化体の変異原性物質生成能における定量的構造活性相関解析, 環境科学会 2017 年会, 2017年, 2C-1330

8. 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 農薬環境変化体の構造推定のための衝突断面積解析技術の開発, 環境科学会 2017 年会, 2017年, 2C-1530

9. Takehiko Ueda, Hirokazu Takanashi, Temperatures in Terms of Non-equilibrium Thermodynamics Applied to the Theoretical Framework of Ion Mobility Analysis, Taiwan-Japan Bilateral Workshop 2017, 2017年

10. Fumi Hashimoto, Hirokazu Takanashi, Tsunenori Nakajima, Akira Ohki, Takehiko Ueda, Jun-ichi Kadokawa, Nobukazu Miyamoto, Hidenori Ishikawa, A Method for Monitoring Pesticide Transformation Products in Water environments (PTPWs) without their Authentic Standards, WET2017: Water Environment Technology Conference, 2017年, 3A-16

11. Sayoko Oba, Fumi Hashimoto, Hirokazu Takanashi, Tsunenori Nakajima, Akira Ohki, Takehiko Ueda, Jun-ichi Kadokawa, Hidenori Ishikawa, Nobukazu Miyamoto, Synthesis, Environmental Monitoring and Risk Evaluation of Etofenprox-Ester, WET2017: Water Environment Technology Conference, 2017年, 3A-18

12. 高梨 啓和, 浜 知宏, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 松下 拓, 亀屋 隆志, 高分解能LC/MSと多変量解析を用いた trans-1,3-ジクロロプロペン塩素処理物中の変異原性物質の探索, 第26回環境化学討論会, 2017年

13. 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 高梨 啓和, 中

島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 未知環境変化体の構造推定のための衝突断面積解析技術の開発, 第 26 回環境化学討論会, 2017 年

14. 高梨 啓和, 上田 岳彦, ネオニコチノイド系農薬の環境変化体の探索とその生態影響の調査 イオン移動度質量分析法によるアプローチ, 第 6 回イオン移動度研究会, 2017 年

15. Takehiko Ueda, Hirokazu Takanashi, Jun-ichi Kadokawa, Prediction of ESI Vaporization Kinetics of Pesticide Transformation Products in Water Environments, 日本化学会 第 97 春季年会, 2017 年

16. 高梨 啓和, 大葉 佐世子, 橋本 扶美, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 農薬変化体の構造を推定するための衝突断面積測定方法の検討, 第 51 回日本水環境学会年会 (2016 年度), 2017 年

17. 橋本 扶美, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 標準物質を入手できない農薬環境変化体 (PTPWs) の環境モニタリング, 第 51 回日本水環境学会年会 (2016 年度), 2017 年

18. Takehiko Ueda, Hirokazu Takanashi, Stochastic Modeling of Accelerated Ion Trajectories for Prediction of the Ion Mobility, Joint Symposium of JTBW2016 and KNJS2016, 2016 年

19. 上田 岳彦, 高梨 啓和, 衝突断面積 (CCS) 解析法の基礎, MS フォーラム 2016, 2016 年

20. 高梨 啓和, 橋本 扶美, 大葉 佐世子, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, イオン移動度分析と分子動力学計算に基づいた未知変化体の構造推定, 第 19 回日本水環境学会シンポジウム, 2016 年

21. 橋本 扶美, 北ノ園 龍介, 有島 由紀子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, ネオニコチノイド系農薬ジノテフランおよびその環境変化体の河川水中濃度, 第 19 回日本水環境学会シンポジウム, 2016 年

22. 高梨 啓和, 橋本 扶美, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 衝突断面積に基づいた未知物質の構造推定, 環境科学会 2016 年会, 2016 年

23. 橋本 扶美, 北ノ園 龍介, 有島 由紀子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, ネオニコ

チノイド系農薬とその環境変化体 (PTPWs) の河川水中濃度測定, 環境科学会 2016 年会, 2016 年

24. Fumi HASHIMOTO, Ryusuke KITANOSONO, Yukiko ARISHIMA, Hirokazu TAKANASHI, Tsunenori NAKAJIMA, Akira OHKI, Takehiko UEDA, Jun-ichi KADOKAWA, Hidenori ISHIKAWA, Nobukazu MIYAMOTO, Occurrence of Dinotefuran and Its Transformation Products in River Waters, WET2016, Water and Environment Technology Conference, 2016 年

25. 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 高分解能 LC-MS、LC-IMS-MS および多変量解析を用いた未知環境汚染物質の探索, 第 64 回質量分析総合討論会, 2016 年

26. 高梨 啓和, 阿比留 和也, 浜 知広, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 近藤 貴志, 松下 拓, 亀屋 隆志, 高分解能 LC-MS および多変量解析を用いた土壌燻蒸剤 DD 塩素処理物中の未知変異原性物質の同定, 第 64 回質量分析総合討論会, 2016 年

27. 高梨 啓和, 橋本 扶美, 北ノ園 龍介, 有島 由紀子, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 高分解能 LC/MS と LC/MS/MS を用いた実環境試料からの未知農薬変化体の検出, 第 64 回質量分析総合討論会, 2016 年

28. 上土井 太治, 下吹越 理子, 山元 和哉, 上田 岳彦, 高梨 啓和, 門川 淳一, 宮本 信一, 石川 英律, イミダクロプリドのジオール型環境変化体の合成, 日本化学会 第 96 春季年会, 2016 年

29. 橋本 扶美, 北ノ園 龍介, 有島 由紀子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, イミダクロプリドおよびジノテフランとその環境変化体 (PTPWs) の河川水中濃度測定, 第 50 回日本水環境学会年会 (2015 年度), 2016 年

30. 有島 由紀子, 玉島 由美子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, イオン移動度質量分析による農薬の未知環境変化体 (PTPWs) の構造推定, 第 50 回日本水環境学会年会 (2015 年度), 2016 年

31. 高梨 啓和, 玉島 由美子, 有島 由紀子, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 衝突断面積解析による未知環境汚染物質の構造推定, 第 50 回日本水環境学会年会 (2015 年度), 2016 年

32. 安田 侑右, 岡村 哲郎, 石川 英律, 山本

潤, 宮本 信一, 田畑 彰久, 上田 岳彦, 門川 淳一, 高梨 啓和, 合成した農薬変化体 (PTPWs) の水生生物に対する急性毒性, 第 50 回日本水環境学会年会 (2015 年度), 2016 年

33. 浜 知広, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 松下 拓, 亀屋 隆志, 多変量解析を用いた trans-1, 3-ジクロロプロペン塩素処理物中の変異原性物質の探索, 第 50 回日本水環境学会年会 (2015 年度), 2016 年

34. 浜 知広, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 松下 拓, 亀屋 隆志, 重回帰分析などを用いた trans-1, 3-ジクロロプロペン塩素処理物中の変異原性物質の探索, 平成 27 年度日本水環境学会九州沖縄支部研究発表会, 2016 年

35. 有島 由紀子, 玉島 由美子, 高梨 啓和, 中島常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, イオン移動度質量測定による農薬の未知環境変化体 (PTPWs) の構造推定, 平成 27 年度日本水環境学会九州沖縄支部研究発表会, 2016 年

36. 高梨 啓和, 玉島 由美子, 有島 由紀子, 中島常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, 衝突断面積測定による未知環境汚染物質の構造推定, 平成 27 年度日本水環境学会九州沖縄支部研究発表会, 2016 年

37. 橋本 扶美, 北ノ園 龍介, 有島 由紀子, 高梨 啓和, 中島 常憲, 大木 章, 上田 岳彦, 門川 淳一, 石川 英律, 宮本 信一, イミダクロプリドおよびジノテフランとその環境変化体 (PTPWs) の河川水からの検出, 平成 27 年度日本水環境学会九州沖縄支部研究発表会, 2016 年

38. 上田 岳彦, 高梨 啓和, 衝突断面積 (CCS) 解析法の基礎, MS フォーラム 2015, 2015 年

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

上田 岳彦 (UEDA Takehiko)

鹿児島大学・理工学域工学系・准教授

研究者番号 : 80293893

(2) 研究分担者

高梨 啓和 (TAKANASHI Hirokazu)

鹿児島大学・理工学域工学系・准教授

研究者番号 : 40274740