

令和元年8月26日現在

機関番号：22701

研究種目：基盤研究(B) (特設分野研究)

研究期間：2015～2018

課題番号：15KT0067

研究課題名(和文) 量子論的遷移状態および量子論的反応経路の確立とその応用

研究課題名(英文) Quantum transition state and quantum reaction path, and these application to chemical reactions

研究代表者

立川 仁典 (Tachikawa, Masanori)

横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科(八景キャンパス)・教授

研究者番号：00267410

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,900,000円

研究成果の概要(和文)：申請者らが構築してきた量子多成分系分子理論手法(量子多成分系分子軌道法、密度汎関数法、量子モンテカルロ法、第一原理経路積分法)を応用することで、核の量子揺らぎも含めた有効自由エネルギー超曲面における、「量子論的遷移状態および量子論的反応経路」を新たに構築・提唱した。特に初期経路依存が小さい探索手法としてストリング法、さらにはそれを発展させた手法を、量子多成分系分子理論と組み合わせた。具体的計算として、分子内水素転移反応や水素引き抜き反応等、水素原子核の量子効果が重要となるような反応系に対する多数の応用計算を実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来の量子化学計算においては、原子核を固定された点電荷として扱っていたが、この手法だけでは原子核自身の波動性を取り込むことはできなかった。そこで申請者らは、より実在系に近い理論計算実現のために、新しい手法を開発し、核の量子効果も含めた反応解析やその途中状態の解析を可能とした。

研究成果の概要(英文)：We have developed quantum transition state and quantum reaction path by using quantum multi-component molecular theories, such as multi-component molecular orbital, density functional theory, quantum Monte Carlo, and ab initio path integral methods. Especially, we have applied the string method and nudged elastic band method to our quantum multi-component molecular theories. We have calculated some intramolecular hydrogen transfer and hydrogen abstraction reactions by using our methods.

研究分野：量子化学

キーワード：量子論的遷移状態 量子論的反応経路 量子シミュレーション 量子多成分系分子理論 経路積分

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

これまで申請者らは、より実在系に近い理論計算実現のために、核の量子揺らぎや温度効果も含めた、量子シミュレーション手法を開発・実装してきた。一方、多くの実験研究者との密な議論に基づく共同研究を重ね、我々の手法を用いて幅広い量子化学計算を実現してきた。しかしながら、いずれも「静的な計算」のみで、例えば水素原子核の量子揺らぎを含めた反応経路や、量子揺らぎを含めた遷移状態構造は解明できていなかった。

2. 研究の目的

本研究課題では、申請者らが構築してきた量子シミュレーション手法を深化させることで、核の量子揺らぎも含めた有効自由エネルギー超曲面における、「量子論的遷移状態および量子論的反応経路」を新たに構築・提唱する。特に初期経路依存が小さい探索手法としてストリング法、さらにはそれを発展させた手法を開発し、網羅的に IRC や遷移状態を求めるのではなく、効率的なシミュレーションを実現する。

3. 研究の方法

(1) 量子論的遷移状態および量子論的反応経路の確立のため、NEB 法やストリング法を実装・高度化し、多成分系分子軌道法および多成分系密度汎関数法への導入、および既存プログラムへの実装を行った。

(2)(3) 具体的計算として、分子内水素転移反応や水素引き抜き反応等、水素原子核の量子効果が重要となるような反応系に対する多数の具体的計算を実施した。

4. 研究成果

(1) NEB 法では、 $[R_0, R_1, R_2, \dots, R_N]$ で表される $N+1$ 個のイメージを仮想的なバネでつなぎ、 R_1 から R_{N-1} までのイメージを最適化することで反応経路を得る。ここで、 R_i は各イメージの位置ベクトルであり、始点 R_0 と終点 R_N はそれぞれ反応物と生成物に対応するエネルギー極小値構造である。NEB 法ではあるイメージにかかる力は、 $F_i = F_i^S|_{\parallel} - \nabla V(R_i)|_{\perp}$ と計算される。ここで右辺第 1 項はイメージ間を繋ぐバネに働く力の、反応経路に沿った成分である。本研究では、Henkelman らの評価式に基づいて $F_i^S|_{\parallel}$ を評価した。以上の NEB 法を、多成分系分子軌道法および多成分系密度汎関数法への導入、および既存プログラムへの実装を行った。

(2) フッ素ラジカルによる水分子からの水素原子引き抜き反応 $F + (H_2O)_n \rightarrow FH + OH(H_2O)_{n-1}$ ($n = 1-3$) に対して水素原子核の量子効果が与える影響を解析した。これらの系は Schaefer らにより系統的に研究されており、(i) $n = 1$ の反応について、mPW1K 以外の DFT 法は反応に必要な活性化障壁を定性的にすら正しく評価できないこと、(ii) $n = 2$ の反応では、2 分子目の水が触媒的に働き、 $n = 1$ の反応に存在する活性化障壁を消し去ること、の 2 点が主な結果として報告されている。効率よくこれらの反応を解析するために、本研究ではまず、B3LYP, CAM-B3LYP, M06-2X, wB97XD, mPW1K の各種汎関数と cc-pVTZ 基底関数を用い、 $F + (H_2O)_n$

$FH + OH(H_2O)_{n-1}$ ($n = 1-3$) の反応の各停留点構造の再現性について検討した。次に DFT/cc-pVTZ 法により求めた最適化構造に対して CCSD(T)/cc-pVQZ 法を用いてエネルギーを評価した。 $n = 1$ の反応については、M06-2X, wB97XD, mPW1K は CCSD(T)/cc-pV5Z の構造を良く再現し、それぞれの構造で評価した CCSD(T)/cc-pVQZ エネルギーも CCSD(T)/cc-pV5Z のエネルギーを良く再現した。しかし、 $n = 2$ の反応に対しては、M06-2X および mPW1K は遷移状態構造の再現性が充分ではなく、CCSD(T)/cc-pVQZ による負の活性化エネルギーを定性的にすら再現出来ないことがわかった。一方で wB97XD 法により最適化した構造における CCSD(T)/cc-pVQZ エネルギーは、 $n = 1-3$ のすべての反応に対して、構造も CCSD(T)/cc-pVQZ により最適化して求めた活性化エネルギーを精度良く再現した。そこで、MC-CCSD(T)/cc-pVQZ/MC-wB97XD/cc-pVTZ 法により、水素原子核の量子効果を考慮し、 $n = 1-3$ の反応を解析した。水素原子核の量子効果を考慮することで反応の活性化障壁が下がり、水 1 分子との反応ですら、反応に必要な活性化障壁が負となる可能性が示唆された。零点エネルギーを補正しただけでは活性化障壁は消失しないため、水素原子核の量子性に由来する構造緩和の影響が重要であると考えられる。また、 H_2O と比べて水素原子核の量子性が小さい D_2O との反応では、活性化障壁の低下が小さく、障壁は小さくなるものの消失しないことも示唆された。

(3) SO_2 、 NO_2 は酸性雨の原因となる物質であり、一方で $HOSO\cdot$ は SO_2 と水素原子によって形成される比較的安定なラジカルである。Lesar らは、 $HOSO\cdot$ と NO_2 による水素移動反応を CBS-QB3 法及び G2MP2 法により解析し、*trans*-HONO や $HOSO_2$ などが生成する複数の反応経路を明らかにした。しかしながら彼らの報告では、プロトンリレー(PR)型経路や、水分子が関与した経路が十分に検討されていない。そこで本研究では、我々の開発した手法を用いて、 $HOSO\cdot$ と NO_2 による水素移動反応について詳細に検討した。

水 1 分子が関与する反応経路について、従来法および MC-QM 法により解析した結果を Fig.

1 に示した。非 PR 型経路よりも PR 型経路の方が全ての停留点構造の相対エネルギーが低く、安定であることがわかる。また、水素原子核の量子効果を取り込むことにより、各停留点構造が安定化することがわかった。特に TS では、非 PR 型経路で 4.3 kcal/mol、PR 経路で 8.5 kcal/mol 安定化しており、PR 経路は非 PR 経路に比べて原子核の量子効果による安定化を強く受けていることがわかった。しかしながら、非 PR 型経路では EnC-W1 から TS-W1 までのエネルギー差が従来法で 2.3 kcal/mol と小さく、MC_QM 法により水素原子核の量子効果を取り込むことで、エネルギー障壁がなくなる可能性が示唆された。Fig. 2 には、水 2 分子が関与する反応経路のうちの 1 つの反応経路に沿ったエネルギー変化を示した。同一の反応経路上でも、原子核の量子効果による安定化の度合いは一定ではなく、反応座標により異なることがわかった。また、この反応においても、原子核の量子効果により、従来法で存在したエネルギー障壁が無くなる可能性が示唆された。

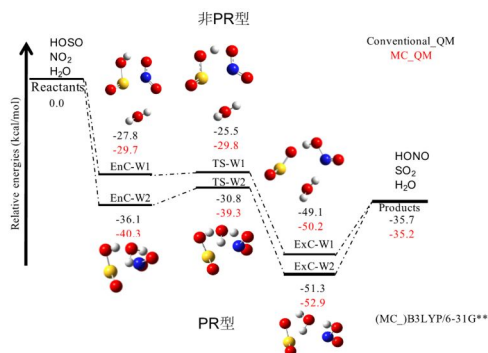


Fig. 1. Relative energy profile (kcal/mol) of the reaction between HOSO + NO₂ with one water molecule

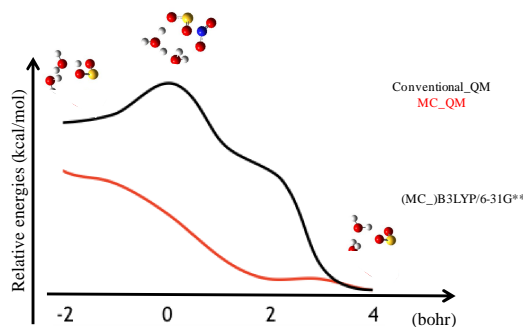


Fig. 2. Relative energy profile of the reaction between HOSO + NO₂ with two water molecules

5 . 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 4 4 件)

- [1] Rina Ishibashi, M. Tachikawa, and Taro Udagawa, "Theoretical Study on Hydrogen-Tritium Exchange Reactions between Several Organic and HTO Molecules: A Multicomponent QM Study", **Bull. Chem. Soc. Jpn.**, *92*, 592-599 (2019). DOI: 10.1246/bcsj.20180308
- [2] Yukio Kawashima, Keisuke Sawada, Takahito Nakajima, and M. Tachikawa, "A path integral molecular dynamics study on intermolecular hydrogen bond of acetic acid-arsenic acid anion and acetic acid-phosphoric acid anion clusters", **J. Comput. Chem.**, *40*, 172-180 (2019). DOI: 10.1002/jcc.25562
- [3] Hideya Sugimoto, M. Tachikawa, and Taro Udagawa, "Multicomponent QM study on the reaction of HOSO + NO₂ with H₂O: Nuclear quantum effect on structure and reaction energy profile", **Int. J. Quant. Chem.**, e25895 (2018). (Cover Image) DOI: 10.1002/qua.25895
- [4] Yutaro Sugiura, Kento Suzuki, Toshiyuki Takayanagi, Yukiumi Kita, and M. Tachikawa, "Reduction of OH vibrational frequencies in amino acids by positron attachment", **J. Comput. Chem.**, *39*, 2060-2066 (2018). DOI: 10.1002/jcc.25387
- [5] Y.-Y. Zhan, T. Kojima, T. Koide, M. Tachikawa, and S. Hiraoka, "A Balance Between van der Waals and Cation- Interactions That Stabilizes Hydrophobic Assemblies", **Chem. Eur. J.**, *24*, 9130-9135 (2018). DOI: 10.1002/chem.201801376
- [6] Y.-Y. Zhan, N. Tanaka, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Mashiko, U. Nagashima, M. Tachikawa, and S. Hiraoka, "Importance of Molecular Meshing for the Stabilization of Solvophobic Assemblies", **J. Org. Chem.**, *83*, 5132-5137 (2018). DOI: 10.1021/acs.joc.8b00495
- [7] Keita Sugiura, M. Tachikawa, and Taro Udagawa, "Nuclear quantum effect and H/D isotope effect on Cl · + (H₂O)_n -> HCl + OH · (H₂O)_{n-1} (n = 1-3) reactions", **RSC Advances**, *8*, 17191-17201 (2018). DOI: 10.1039/C8RA02679C
- [8] R. Harada, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Hiraoka, and Y. Shigeta, "Programed Dynamical Ordering in the Self-organization Processes of a Nanocube: A Molecular Dynamics Study", **Phys. Chem. Chem. Phys.**, *20*, 9115-9122 (2018). DOI: 10.1039/C8CP00284C
- [9] N. Tanaka, Y.-Y. Zhan, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Koide, T. Mashiko, U. Nagashima, M. Tachikawa, and S. Hiraoka, "Semi-quantitative Evaluation of Molecular Meshing by Surface Analysis with Varying Probe Radii", **Chem. Commun.**, *54*, 3335-3338 (2018). (selected as Back Cover) DOI: 10.1039/c8cc00695d
- [10] Y.-Y. Zhan, K. Ogata, T. Kojima, T. Koide, K. Ishii, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Uchiyama, and S. Hiraoka, "Hyperthermostable Cube-shaped Assembly in Water", **Communications Chemistry**, *1*, 14 (2018). DOI: 10.1038/s42004-018-0014-2 (Cover Image)
- [11] Hiroyuki Kato, Shinya Yoshimoto, Akira Ueda, Susumu Yamamoto, Yusuke Kanematsu, M. Tachikawa, Hatsumi Mori, Jun Yoshinobu, and Iwao Matsuda, "Strong Hydrogen-Bonds

- at the interface between Proton-Donating and Accepting Self-Assembled Monolayers on Au(111)", **Langmuir**, *34*, 2189-2197 (2018). DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b03451
- [12] Taro Udagawa and M. Tachikawa, "Reaction mechanism of hydrogen-tritium exchange reactions between several organic and HTO molecules: A role of the second HTO", **RSC Advances**, *8*, 3878-3888 (2018). DOI: 10.1039/C7RA13110K
- [13] Tsutomu Kawatsu and M. Tachikawa, "The quantum fluctuations of the fullerene cage modulate the internal magnetic environment", **Phys. Chem. Chem. Phys.**, *20*, 1673-1684 (2018). DOI: 10.1039/C7CP06401B
- [14] Kento Suzuki, Toshiyuki Takayanagi, Yukiumi Kita, M. Tachikawa, Takayuki Oyamada, "Quantum dynamics calculations for $e^+ + \text{LiH} \rightarrow \text{Li}^+ + [\text{H}; e^+]$ dissociative positron attachment using a pseudopotential model", **Comput. Theo. Chem.**, *1123*, 135-141 (2018). DOI: 10.1016/j.comptc.2017.11.023
- [15] S. Kai, V. Marti-Centelles, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, U. Nagashima, M. Tachikawa, P. J. Lusby, and S. Hiraoka, "Quantitative Analysis of Self-Assembly Process of a Pd_2L_4 Cage Consisting of Rigid Ditopic Ligands", **Chem. Eur. J.**, *24*, 663-671 (2018). DOI: 10.1002/chem.201704285
- [16] S. Kai, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, M. Tachikawa, and S. Hiraoka, "The Effect of Solvent and Coordination Environment of Metal Source on the Self-Assembly Pathway of a Pd(II)-mediated Coordination Capsule", **Inorg. Chem.**, *56*, 12652-12663 (2017). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b02152
- [17] N. Kungwan, C. Ngaojampa, Y. Ogata, T. Kawatsu, Y. Oba, Y. Kawashima, and M. Tachikawa, "Solvent Dependence of Double Proton Transfer in the Formic Acid Formamidine Complex: Path Integral Molecular Dynamics Investigation", **J. Phys. Chem. A**, *121*, 7324-7334 (2017). DOI: 10.1021/acs.jpca.7b07010
- [18] T. Takayanagi, K. Suzuki, T. Yoshida, Y. Kita, and M. Tachikawa, "Quantum dynamics study on the binding of a positron to vibrationally excited states of hydrogen cyanide molecule", **Chem. Phys. Lett.**, *675*, 118-123 (2017). DOI: 10.1016/j.cplett.2017.03.025
- [19] K. Yamamoto, Y. Kanematsu, U. Nagashima, A. Ueda, H. Mori, and M. Tachikawa, "Multicomponent DFT study of geometrical H/D isotope effect on hydrogen-bonded organic conductor, $-\text{H}_3(\text{Cat EDT-ST})_2$ ", **Chem. Phys. Lett.**, *675*, 168-172 (2017). (Select as Editor's choice) DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.073
- [20] Chanisorn Ngaojampa, Tsutomu Kawatsu, Yuki Oba, Nawee Kungwan, and M. Tachikawa, "Asymmetric hydrogen bonding in formic acid-nitric acid dimer observed by quantum molecular dynamics simulations", **Theor. Chem. Acc.**, *136*, 30 (11 pages) (2017). DOI: 10.1007/s00214-017-2057-3
- [21] T. Udagawa, K. Sugiura, K. Suzuki, and M. Tachikawa, "Unusual H/D isotope effect in isomerization and keto-enol tautomerism reactions of pyruvic acid: Nuclear quantum effect restricts some rotational isomerization reactions", **RSC Advances**, *7*, 9328-9337 (2017). DOI:10.1039/C6RA28271G
- [22] T. Mashiko, S. Hiraoka, U. Nagashima, and M. Tachikawa, "Theoretical study on substituent and solvent effects for nanocube formed with gear-shaped amphiphile molecules", **Phys. Chem. Chem. Phys.**, *19*, 1627-1631 (2017). DOI:10.1039/C6CP07754D
- [23] Y. Kita and M. Tachikawa, "Effects of vibrational anharmonicity and inter-mode couplings on the binding energy of a positron to molecules", **AIP Conf. Proc.**, in press (2017).
- [24] T. Udagawa and M. Tachikawa, "Nuclear quantum effect and H/D isotope effect on $\text{F} + (\text{H}_2\text{O})_n \rightarrow \text{FH} + (\text{H}_2\text{O})_{n-1}\text{OH}$ ($n = 1-3$) reactions", **J. Chem. Phys.**, *145*, 164310 (10 pages) (2016). DOI: 10.1063/1.4966162
- [25] K. Yamamoto, Y. Kanematsu, U. Nagashima, A. Ueda, H. Mori, and M. Tachikawa, "Theoretical study of H/D isotope effect on phase transition of hydrogen-bonded organic conductor $-\text{H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ ", **Phys. Chem. Chem. Phys.** (Communication), *18*, 29673-29680 (2016). DOI: 10.1039/C6CP05414E
- [26] Y. Hamada, Y. Kanematsu, and M. Tachikawa, "QM/MM Study on Sialyltransferase Reaction Mechanism", **Biochemistry**, *55*, 5764-5771 (2016). DOI: 10.1021/acs.biochem.6b00267
- [27] M. Narukawa-Nara, A. Nakamura, K. Kikuzato, Y. Kakei, A. Sato, Y. Mitani, Y. Yamasaki-Kokudo, T. Ishii, KI. Hayashi, T. Asami, T. Ogura, S. Yoshida, S. Fujioka, T. Kamakura, T. Kawatsu, M. Tachikawa, K. Soeno, and Y. Shimada, "Aminoxy-naphthylpropionic acid and its derivatives are inhibitors of auxin biosynthesis targeting Trp aminotransferase: Structure-activity relationships", **The Plant Journal**, *87*, 245-257 (2016). DOI:10.1111/tpj.13197
- [28] Y. Oba, T. Kawatsu, and M. Tachikawa, "A path integral molecular dynamics study of the hyperfine coupling constants of the muoniated and hydrogenated acetone radicals", **J. Chem. Phys.**, *145*, 064301 (15 pages) (2016). DOI: 10.1063/1.4960077

- [29] Y. Ogata, T. Kawatsu, and M. Tachikawa, "Can low-barrier hydrogen bond exist in systems with second row elements? An ab initio path integral molecular dynamics study for deprotonated hydrogen sulfide dimer", **Theor. Chem. Acc.**, *135*, 200 (11 pages) (2016). DOI:10.1007/s00214-016-1958-x
- [30] M. Nummela, H. Raebiger, D. Yoshida, and M. Tachikawa, "Positron Binding Properties of Glycine and Its Aqueous Complexes", **J. Phys. Chem. A**, *120*, 4037-4042 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpca.6b01780
- [31] Y. Kanematsu, Y. Takano, and M. Tachikawa, "Inverse Ubbelohde Effect in the Short Hydrogen Bond of Photosystem II: Relation between H/D Isotope Effect and Symmetry in Potential Energy Profile", **J. Comput. Chem.**, *37*, 2140-2145 (2016). (Cover Image) DOI: 10.1002/jcc.24438
- [32] Y. Takeda, Y. Kita, and M. Tachikawa, "Theoretical study of a positron-attachment to vibrational excited states for non-polar carbon disulfide molecule", **Eur. Phys. J. D**, *70*, 132 (5 pages) (2016). DOI:10.1140/epjd/e2016-70140-7
- [33] Y. Oba, T. Kawatsu, and M. Tachikawa, "Thermal Dependence on Structures of Muoniated and Hydrogenated Acetone Radicals", **AIP Conf. Proc.**, *1790*, 020022 (4pages) (2016). DOI: 10.1063/1.4968648
- [34] M. Hashimoto, T. Ishimoto, M. Tachikawa, and T. Udagawa, "Analysis of exponent values of Gaussian-type functions on quantum protons and deuterons in charged or polarized systems", **Int. J. Quant. Chem.**, *116*, 961-967 (2016). (Cover Image) DOI: 10.1002/qua.25117
- [35] Y. Kanematsu, H. Kamikubo, M. Kataoka, and M. Tachikawa, "Vibrational analysis on the revised potential energy curve of the low-barrier hydrogen bond in photoactive yellow protein", **Computational and Structural Biotechnology Journal**, *14*, 16-19 (2016). DOI: 10.1016/j.csbj.2015.10.003
- [36] M. Tachikawa, "Positron-attachment to small molecules: Vibrational enhancement of positron affinities with configuration interaction level of multi-component molecular orbital approach", **AIP Conf. Proc.**, *1702*, 090038 (4pages) (2015).
- [37] Y. Kanematsu, Y. Kamiya, K. Matsuo, K. Gekko, K. Kato, and M. Tachikawa, "Isotope effect on the circular dichroism spectrum of methyl α -D-glucopyranoside in aqueous solution", **Scientific Report**, *5*, 17900 (5pages) (2015).
- [38] Y. Ogata, Y. Kawashima, K. Takahashi, and M. Tachikawa, "Theoretical vibrational spectra of OH(H₂O)₂: Effect of quantum distribution and vibrational coupling", **Phys. Chem. Chem. Phys.**, *17*, 25505-25515 (2015).
- [39] T. Udagawa, K. Suzuki, and M. Tachikawa, "Multicomponent molecular orbital-climbing image-nudged elastic band method to analyze chemical reactions including nuclear quantum effect: Application to hydrogen transfer reaction", **ChemPhysChem**, *16*, 3156-3160 (2015).
- [40] S. Watanabe, Y. Ogata, T. Kawatsu, Y. Kawashima, and M. Tachikawa, "Effects of monohydration on an adenine-thymine base pair", **Theor. Chem. Acc.**, *134*, 84 (12 pages) (2015).
- [41] T. Udagawa and M. Tachikawa, "H/D isotope effect on charge-inverted hydrogen-bonded systems: Systematic classification of three different types in H₃XH...YH₃ (X = C, Si, or Ge, and Y = B, Al, or Ga) with multicomponent calculation", **J. Comput. Chem.**, *36*, 1647-1654 (2015).
- [42] Y. Kanematsu and M. Tachikawa, "Performance Test of Multicomponent Quantum Mechanical Calculation with Polarizable Continuum Model for Proton Chemical Shift", **J. Phys. Chem. A**, *119*, 4933-4938 (2015).
- [43] T. Udagawa and M. Tachikawa, "Why does deuterium substitution lead to the contraction of X...Pi distance? Origin of the reverse Ubbelohde effect in XH...Pi interaction", **Theor. Chem. Acc.**, *134*, 24 (5 pages) (2015).
- [44] K. Egashira, Y. Yamada, Y. Kita, and M. Tachikawa, "Ferromagnetic spin coupling in the chromium dimer cation: Measurements by photodissociation spectroscopy combined with coupled-cluster calculations", **J. Chem. Phys.**, *142*, 054309 (4 pages) (2015).

〔学会発表〕(計60件)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況（計0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

<http://www-user.yokohama-cu.ac.jp/~tachi/>

6．研究組織

(1)研究分担者

石元 孝佳（ISHIMOTO TAKAYOSHI）

横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科・准教授

研究者番号：50543435

宇田川 太郎（UDAGAWA TARO）

岐阜大学・工学部・助教

研究者番号：70509356

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。