

分子間相互作用の協奏による中距離的構造形成と分
光学的検出可能性の理論解析

メタデータ	言語: ja 出版者: 公開日: 2024-03-19 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 鳥居, 肇 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10297/0002000349

令和 5 年 5 月 8 日現在

機関番号：13801

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19K05384

研究課題名(和文) 分子間相互作用の協奏による中距離的構造形成と分光学的検出可能性の理論解析

研究課題名(英文) Theoretical analysis on the intermediate length-scale structural formation induced by concerted intermolecular interactions and the possibility of its spectroscopic detection

研究代表者

鳥居 肇 (Torii, Hajime)

静岡大学・工学部・教授

研究者番号：80242098

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：ハロゲン結合系を対象に電子密度解析を行うことにより、分子周囲の静電環境を的確に表現できる分子間相互作用ポテンシャル関数系を、電子分布異方性の効果と分極効果を分離した形で導出した。この手法を用いて、水素結合との協同効果によるハロゲン結合強度増大メカニズムを解明したほか、ハロゲン結合を供与しないフッ化水素に見られる電子分布異方性が特徴的な水素結合配置を生ずることを示した。さらに、ハロゲン結合形成に伴う赤外強度の変化がハロゲン結合の部分的共有結合性などと相関することを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ハロゲン結合は、含ハロゲン化合物がタンパク質分子への薬剤活性を発揮するケースにおいて鍵となる分子間相互作用である。これを的確に表現できる分子間相互作用ポテンシャル関数系を、典型的なモデル化合物系を対象に導出したことにより、分子間相互作用による分子配置の様相を、理論化学・計算化学的手法によつて的確かつ高速に評価することができる道筋が得られたと言える。このことは、ハロゲン結合を利用した分子設計において重要な役割を果たすと考えられる。

研究成果の概要(英文)：By conducting electron density analysis on halogen-bonding systems, a series of intermolecular interaction potential functions that properly represents the electrostatic environment around the molecule has been derived in a form where the effects of electron distribution anisotropy and polarization is mutually separated. By using this method, the mechanism of the enhancement of halogen-bond interaction intensity arising from the cooperative effect with hydrogen bonding has been clarified. It has also been demonstrated that the anisotropy of the electron distribution around the fluorine atom in hydrogen fluoride gives rise to characteristic hydrogen-bond configuration even though this molecule does not donate any halogen bond. Furthermore, it has also been shown that the change in the IR intensity induced by halogen-bond formation is correlated to the partially covalent character of the halogen bond.

研究分野：理論化学

キーワード：構造形成 ハロゲン結合 水素結合 電子密度 振動分光

1. 研究開始当初の背景

多数の異種分子が複雑に相互作用する混雑系における構造形成を捉えるにあたって、理論研究の立場から考えられる重要な課題の1つに、「そうした構造形成の様相を予測し得る能力の向上」がある。生体分子系などの凝縮相系においては、多数の異種分子間に働く水素結合・ハロゲン結合などの協奏によって、さまざまな中距離的構造が形成されており、そうした構造形成の様相を理論的に予測するには、これら分子間相互作用を的確に表現し得る精緻なポテンシャル関数系を開発することが必要である。特に、ハロゲン結合は、含ハロゲン化合物がタンパク質分子への薬剤活性を発揮するケースにおいて鍵となる分子間相互作用であるが、本研究課題の申請当時において、水素結合と比較して研究の積み重ねが十分ではなく、精緻なポテンシャル関数系の整備が遅れていた。問題点は大きく分けて2つ存在し、その1つは、ハロゲン結合の起源である「ハロゲン原子内における電子分布の異方性」を、大きな生体分子系への応用を念頭に置きながら、的確かつ簡便に表現するための方法である。もう1つは、この「電子分布の異方性」と同じく、「ハロゲン原子の分極率」も $F < Cl < Br < I$ の順で変化するため、電子分布の異方性と分極率の効果を正確に分離するための方法である。従来からの分子動力学 (MD) 計算用力場の多くは、ハロゲン原子を単に平均的な負電荷を持つものとして扱っており、ハロゲン結合系への適用に不向きである。その点について改良が施された力場が幾つか提案されていたが、分子間相互作用エネルギーを各要素に分割する際の曖昧さに由来する不具合があり、明確な結論には至っていなかった。

もう1つの重要課題として、「構造形成と分光シグナルの対応関係の確立」がある。多数の異種分子が混在する系を対象とした構造解析には、官能基ごとの検出が可能な手法が望ましく、振動分光法はその意味で有力な手法の1つである。しかし、例えば単に「水素結合が強いほど低振動数シフトする」というような経験則では、せいぜい半定量的な知見しか期待できず、より精緻な構造-スペクトル相関の理論が望まれる。

本研究課題の申請時点までにおいて、研究代表者は「構造形成と分光シグナルの対応関係」について、理論解析を進めていたところであった。例えば、生体分子内の静電環境プローブとしてしばしば用いられるニトリル基の CN 伸縮振動モードについて、dipolar 溶媒和では低振動数シフトが見られるのに対して水分子などの水素結合形成では高振動数シフトが見られる原因は、以前に言われていた「静電相互作用以外の何らかの相互作用」ではなく、「水素結合により形成される静電環境の空間的不均一性」が原因であることを明らかにした。その背後にあるものは、分子振動に伴う「単に原子核に追従するのではない」電子の振舞いである。そこで、(上述したように) ハロゲン結合の起源は「ハロゲン原子内における電子分布の異方性」であることを考え合わせると、分子間相互作用に関わる電子密度と、その分子振動に伴う変化の様相を捉えることが、上記2課題を解決するために不可欠であるという考えに至った。

2. 研究の目的

上記の背景をもとに、本研究では、特に以下の項目について重点的に取り組むこととした。

(A) タンパク質分子への薬剤活性を有すると目される含ハロゲン化合物の基本骨格となるモデル化合物を対象に、電子密度解析を行い、分子周囲の静電環境を的確に表現できるポテンシャル関数系を導出する。ハロゲン結合を形成した状態における分極効果を分離し、多様な状況での静電環境を的確に表現するために、ハロゲン結合の相手分子を模した外部電荷を分布させた状態での解析も実施する。

(B) 振動スペクトルにおいて分子間相互作用の効果が顕著に現れる事例を対象に、分子振動に伴う電子密度の変化を解析し、構造-スペクトル相関のメカニズムを明らかにする。特に、電子密度の変化が分子間に亘る事例については、分子間相互作用の特徴との関係性についての解析も実施する。

3. 研究の方法

各対象系について、電子密度の計算を行う。ここでは、分子やその会合体を取り囲む空間 (典型的には 3000 \AA^3 程度) について、 0.02 \AA 間隔で電子密度を数値計算する。上記 (A) の項目においては、ハロゲン化物イオンの等方的な電子密度を差し引くことにより、「ハロゲン原子内における電子分布の異方性」を抽出するほか、分子近傍に置く電荷の有無による電子密度の変化を抽出して、その様相を解析する。得られた電子密度 (差電子密度) によって生成する分子周囲の静電環境に対応する原子上部分電荷等をフィティングにより求めることにより、分子周囲の静電環境を的確に表現できるポテンシャル関数系を導出する。一方、上記 (B) の項目においては、分子振動に伴う電子密度の変化を、数値微分として計算する。会合体における相手分子を点電荷の集合で置換することにより得られる静電相互作用成分との比較から、分子間電荷移動に由来する成分を導出する。

4. 研究成果

(1) ハロゲン結合を特徴づける電子分布の異方性を表現するための追加的
点電荷 (extra-point charge) の配置法、
および分極効果を構成する2要素 (ハ
ロゲン原子の双極子分極と分子内原
子間電荷移動) の表現法の電子密度解
析に基づく検討

含ハロゲン化合物の基本骨格とな
るモデル化合物として、ブロモベンゼ
ン (C_6H_5Br) を選択し、最初の解析対
象とした。臭化物イオン (Br^-) の電子
密度を差し引いた差電子密度を図1
(a) に示す。Br 原子 (図右側) 周辺
の空間領域において、差電子密度 (し
たがってブロモベンゼンの電子密度自
体も) が軸対称的な異方性をもつこ
とがわかる。差電子密度は C-Br 結
合延長上 Br 原子から 0.9 \AA の位置
に極小点をもつ。この結果は、その
位置に正電荷 [extra-point (EP) charge]
を置くことにより、電子密度異方性
を近似的に表現できることを示唆す
る。以前の研究では Br 原子から
 2.22 \AA などといった遠距離に EP
を配置するモデルが提案されていた
が、本研究の結果はそれを支持しな
い。図1 (b) に、Br 原子と Br^-
イオンの差電子密度を示す。両者
を比較すると、ここに現れている軸
対称的な異方性は、 $s^2p_x^2p_y^2p_z$ 電子
配置をとる Br 原子に固有のもので
あることがわかる。そして、Br 原
子から 0.9 \AA の位置に EP を配置し
て分子周囲に生成される静電ポテン
シャルのフィッティングを行ったところ
、良好な結果が得られたことから、
この EP 配置が有効であることが分
かった。

C-Br 結合延長上 Br 原子から 3 \AA
の位置に $-0.1 e$ の電荷を配置した
場合のブロモベンゼンの電子密度変
化を図2に示す。図1とは異なり、
Br 原子周辺の空間領域において、
Br 原子の双極子分極に由来すると考
えられる形状をとる。これに加えて
、ベンゼン環の分極も生じている。
負電荷の角度位置を面内・面外でシ
フトさせたところ、前者はそれに追
従するが後者は殆ど変化せず、後
者の生成メカニズムが空間経路的
(through-space) ではなく結合経路
的 (through-bond) であることを示
唆する。そして、図2の電子密度変
化から生成する分子周囲の静電ポ
テンシャルの変化は、Br 原子上に
誘起双極子、および幾つかの原子上
に誘起電荷を配置することにより
表現できることが分かった。

これらの結果を総合すると、EP (Br
原子については 0.9 \AA 離れた位置)
上の正電荷による電子分布異方性の
表現と、ハロゲン原子上の誘起双極
子および幾つかの原子上の誘起電荷
による分極効果の表現が、ハロゲン
結合系における分子間相互作用を的
確に表すための実用的な手法である
ことが明らかとなった。この結論は
、他の幾つかの分子 (2-ブロモピ
リミジン、5-ブロモピリミジン、1-
ブロモ-1*H*-ピロール、ブロモシク
ロヘキサン) を対象に行った解析で
も裏付けられた。

(2) 水素結合との協同効果により強度
増大するハロゲン結合系を対象とし
た、電子密度に基づく解析による強
度増大メカニズムの解明

水素結合との協同効果による強度
増大が起こると目されているハロゲ
ン結合系の例として、2-ヨードフェ
ノール ($\varphi = 0^\circ$) を対象に選び、解
析をおこなった。OH 基の有無によ
る差電子密度を計算したものを図3
に示す。ヨウ素原子 (図右側) の周
りにも或る程度の大きさの電子密
度変

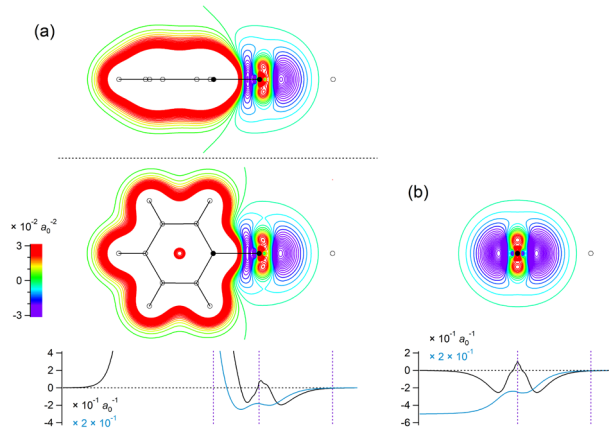


図1 : (a) ブロモベンゼンの電子密度から臭化物イオ
ンの電子密度を差し引いた差電子密度。C-Br 結
合を z 軸にとり、 xz および yz 平面に積分して
投影した2次元プロットと、 z 軸方向の1次元
プロット (黒線)、および yz 側 (右側) からさら
に積分したプロット (薄青線) を示す。1次元
プロットの縦点線は C および Br 原子の位置
および Br 原子から 3 \AA の位置を示す。(b) 臭
素原子の電子密度から臭化物イオンの電子密
度を差し引いた差電子密度について、同様の
プロットをしたもの。

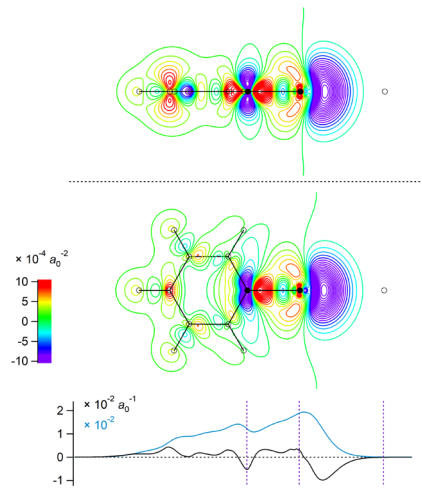


図2 : ブロモベンゼンの C-Br 結合延長上 Br 原
子から 3 \AA の位置に $-0.1 e$ の電荷を配置し
た場合の電子密度変化。プロット方法は図1
と同じ。

化が誘起されているが、そこに元々存在する電子分布の異方性(図1と同様)と比較すると、逆符号になっていることが分かる。つまり、OH基の存在により、ヨウ素原子周りの電子分布異方性は全く増強されていない。一方、C-I結合延長線上の静電ポテンシャルを計算すると、OH基の存在により増大しており、したがって結合強度は増大していることが分かる。上記(1)の研究によって確立した手法にしたがって、分子周囲の静電ポテンシャルに整合する原子およびEP上の部分電荷を求めて、静電ポテンシャルの由来に基づく分解を行うと、C-I結合延長線上の静電ポテンシャルの増大は、OH基の部分電荷に直接的に由来することが分かった。

この結果は、ハロゲン結合の強度増大につながる静電ポテンシャル増大が起こるような分子を設計する指針として、電子分布異方性の増大を狙うのではなく、部分電荷由来の静電ポテンシャルによる底上げを狙うのが有効であることを示唆している。同じ結論は、水素結合との協同効果によるハロゲン結合の強度増大が起こると目されている別の一例を対象とした解析でも得られ、一般性があるものと考えられる。

(3) フッ化水素の水素結合鎖の構造的特徴を生み出すメカニズムの解明

フッ素原子は他のハロゲン原子と異なり、特殊な場合を除いてハロゲン結合を供与しないことが知られており、その意味でハロゲン原子の中で特異な存在である。しかし、ハロゲン結合の起源である「ハロゲン原子内における電子分布の異方性」が、フッ素原子において全く無いというわけでは無く、むしろ、フッ化水素分子どうしの水素結合鎖が相当に曲がったH-F...H角を以って形成されることから、相当程度の電子分布異方性が存在することが認識される。そして、その点に留意して構築されたフッ化水素の分子間相互作用ポテンシャル関数が既に提案されていた。ところが、そこで使用されている電子分布異方性の表現法は、ハロゲン結合系と異なっていた。つまり、既存のフッ化水素の分子間相互作用ポテンシャル関数では、フッ素原子上に正電荷を置き、H-F結合上に負電荷を置いているが、ハロゲン結合系対象のEPモデルでは、上記(1)および(2)のとおり、C-X結合の延長上に正電荷を置いている。そこで、EPモデルの電荷配置法がフッ化水素にどの程度適用可能であるかを解析することにより、フッ素と他のハロゲンの間に何らかの不連続性が存在するかの吟味することとした。

フッ化水素の電子密度からフッ化物イオンの電子密度を差し引いた差電子密度を図4に示す。ハロゲン結合系(図1)と類似した様相となっており、潜在的なハロゲン結合供与能が存在することを示している。実際にはハロゲン結合を供与しない理由は、大きな電気陰性度による負電荷にあるのであり、何らの不連続性によるものではないことが分かる。また、この結果は、分子周囲に生じている静電ポテンシャルの異方性を、EPモデルにより表現できることも示している。実際に、フッ化水素の分子間配置を妥当な範囲で多数(22513配置)発生させて計算した分子間相互作用エネルギーをもとに、EPモデルに基づいて分子間相互作用ポテンシャル関数(NP, P, PDモデルという3種のモデル)を構築し、MD計算をおこなうと、図5に示すように、相当に曲がったH-F...H角をもつ水素結合鎖を再現することができる。したがって、EPモデルは、ハロゲン結合系のみならず、水素結合に関与するフッ素原子についても有効であることが明らかとなった。

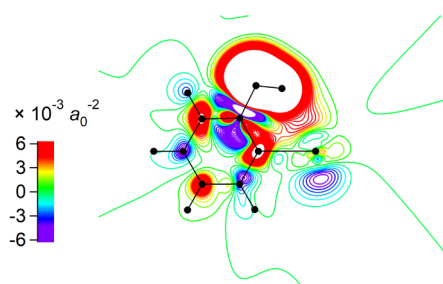


図3: 2-ヨードフェノール($\varphi=0^\circ$)の電子密度からヨードベンゼンの電子密度を差し引いた差電子密度の2次元(yz)プロット。

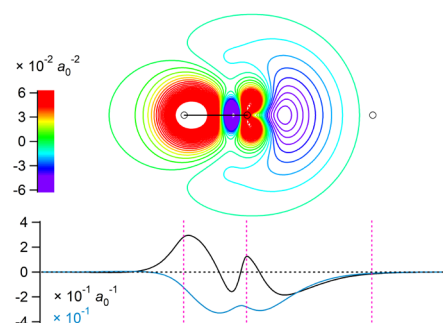


図4: フッ化水素の電子密度からフッ化物イオンの電子密度を差し引いた差電子密度。プロット方法は図1と同じ。

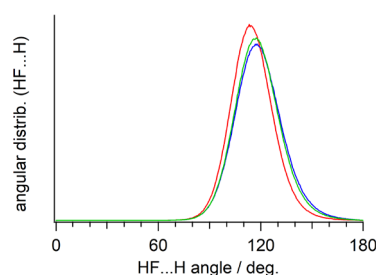


図5: 液体フッ化水素のHF...H角の分布。本研究で構築した3種の分子間相互作用ポテンシャル関数による計算結果を赤(NPモデル)、青(Pモデル)、緑(PDモデル)で示している。

(4) ハロゲン結合形成が THz および赤外スペクトルの特徴に及ぼす影響の解析

本研究では、典型例の1つとしてペンタフルオロヨードベンゼンと4-メチルピリジンの会合体 ($C_6F_5I \cdots NC_5H_4CH_3$) を選択し、解析対象とした。C-I 伸縮振動に伴う電子密度の変化を表す電子密度微分の、会合体形成に伴う変化を図6に示す。電子密度の変化が分子間に亘っており、特に1次元プロットの **running integral** (薄青線) が I...N ハロゲン結合の中点付近で、 $1.66 \times 10^{-4} a_0^{-3} m_e^{-1/2}$ ($= 1.34 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1} \text{ amu}^{-1/2}$) という大きな正の値を取っていることが分かる。これは、C-I 伸縮振動に伴って分子間電荷束 (分子間電荷移動の変動) が起こっていることを示す。この $1.34 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1} \text{ amu}^{-1/2}$ という値に対応する双極子微分の変化は、両分子の環中心の間の距離 (7.75 \text{ \AA}) を電荷の移動距離とすると $\sim 0.50 \text{ D \AA}^{-1} \text{ amu}^{-1/2}$ であり、ハロゲン結合形成に伴う赤外強度の変化 ($1.3 \rightarrow 17.7 \text{ km mol}^{-1}$) を説明する。

ハロゲン結合受容分子をさまざまに変えて、同様の解析をおこなうと、図7(a,b)に示すように、C-I 伸縮振動に伴う分子間電荷束の大きさと赤外強度変化および振動数シフトの大きさの間に良い相関が存在することが分かる。さらに、図7(c,d)に示すように、I...N ハロゲン結合の部分的共有結合性を表す指標である **delocalization index** ととも良い相関がある。したがって、C-I 伸縮振動のプロパティは、ハロゲン結合の部分的共有結合性の良いプローブであることが分かる。

今後は、このような研究の取り組みを継続し、電子密度やその変化の解析に基づいて、凝縮相系における分子間相互作用の特徴を明らかにする方法論を深化させることが必要であろうと考えられる。

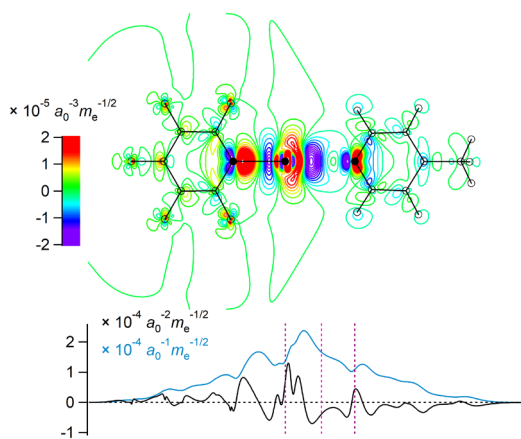


図6: $C_6F_5I \cdots NC_5H_4CH_3$ 会合体の C-I 伸縮振動に関わる電子密度微分の会合体形成に伴う変化。プロット方法は図1と同じ。

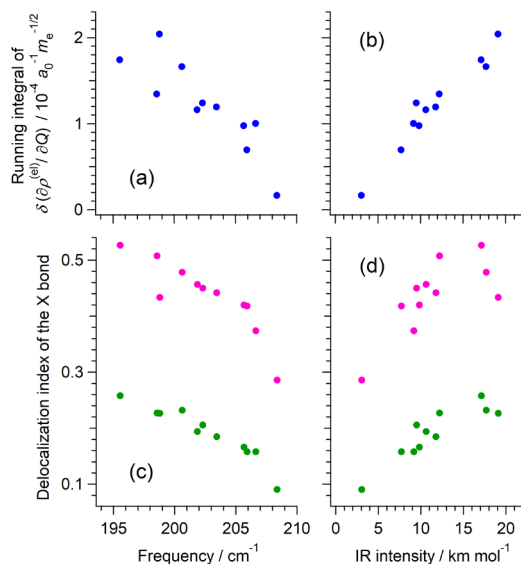


図7: C_6F_5I と幾つかのハロゲン結合受容分子から成る会合体の C-I 伸縮振動の振動数および赤外強度に対して、ハロゲン結合中点付近での電子密度微分 **running integral** (図6の薄青線) の値および **delocalization index** の値をプロットしたもの。後者は2つの手法による計算値を桃色および緑色マーカーで示す。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Torii Hajime, Kimura Akari, Sakai Takanori	4. 巻 24
2. 論文標題 Nature of hydrogen-bond-enhanced halogen bonding viewed through electron density changes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 17951 ~ 17955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP02845J	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 Saito Kento, Torii Hajime	4. 巻 125
2. 論文標題 Hidden Halogen-Bonding Ability of Fluorine Manifesting in the Hydrogen-Bond Configurations of Hydrogen Fluoride	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 11742 ~ 11750
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c07211	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 Yuki Nojima, Yuki Shioya, Hajime Torii, Shoichi Yamaguchi	4. 巻 56
2. 論文標題 Hydrogen order at the surface of ice Ih revealed by vibrational spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 4563 ~ 4566
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC00865F	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 C. R. Baiz, B. Blasiak, J. Bredenbeck, M. Cho, H. Torii, L. Wang, L. J. Webb, M. T. Zanni, et al.	4. 巻 120
2. 論文標題 Vibrational Spectroscopic Map, Vibrational Spectroscopy, and Intermolecular Interaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Reviews	6. 最初と最後の頁 7152 ~ 7218
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemrev.9b00813	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 該当する

1. 著者名 Kento Saito, Ryoma Izumi, Hajime Torii	4. 巻 153
2. 論文標題 Dissecting the electric quadrupolar and polarization effects operating in halogen bonding through electron density analysis with a focus on bromine	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 174302/1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0021615	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 Hajime Torii	4. 巻 21
2. 論文標題 Correlation of the partial charge-transfer and covalent nature of halogen bonding with the THz and IR spectral changes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 17118-17125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP02747E	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 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 Kento Saito, Hajime Torii
2. 発表標題 Hydrogen-bond configurations of hydrogen fluoride in relation to the hidden halogen-bonding ability
3. 学会等名 37th International Conference on Solution Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hajime Torii
2. 発表標題 Elucidating Electrostatic Characteristics of Halogen Bonding through Analyses of Electron Densities
3. 学会等名 5th International Symposium on Halogen Bonding (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 酒井孝徳, 鳥居 肇
2. 発表標題 ハロゲン結合系の静電的異方性と分極に関わるハロゲン原子依存性の電子密度に基づく解析
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 齋藤健人, 鳥居 肇
2. 発表標題 フッ化水素の静電的異方性と水素結合に関わる静電分極の電子密度解析に基づくモデリング
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 齋藤健人, 鳥居 肇
2. 発表標題 フッ化水素の静電的異方性と水素結合に関わる静電分極を表す相互作用パラメーターの電子密度解析に基づく導出
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鳥居 肇
2. 発表標題 ハロゲン結合形成の振動分光学的検出可能性についての理論的解析
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤健人, 鳥居 肇
2. 発表標題 ハロゲン結合に関わる静電相互作用と分極の電子密度解析に基づくモデリング
3. 学会等名 第46回生体分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hajime Torii
2. 発表標題 Dynamical behavior of intermolecular charge flux related to the THz spectra of hydrogen-bonded liquids
3. 学会等名 19th International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤健人, 鳥居 肇
2. 発表標題 ハロゲン結合における電気四重極子効果と分極効果の差電子密度に基づく解析
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤健人, 鳥居 肇
2. 発表標題 ハロゲン結合に関わる静電的異方性と分極効果を表す相互作用パラメーターの電子密度解析に基づく導出
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究室webページ 日本語版
<http://reve2.eng.shizuoka.ac.jp/jp.html>

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------