

目 次

＜ 豊田理研フェロー ＞	頁
Application of the dispersion energy correction to the third order single excitation perturbation theory based on the locally projected molecular orbitals: weak electron-donor-acceptor complexes and water clusters..... Suehiro Iwata.....	1
化学反応における対称性の破れの理論 (4) — 光合成システムⅡの結晶構造と CaMn_4O_5 クラスターの理論計算 — 山口 兆・庄司 光男・斉藤 徹・磯部 寛・山中 秀介	9
ポテンシャル表面上の化学反応経路探索の効率化	大野 公一 21
カーボンマイクロコイルのコスモ・ミメティックな成長メカニズム	元 島 栖 二 29
ナノおよびフェムト秒レーザーによる多光子 $\text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Yb}^{2+}$ 反応	中 島 信 昭 39
Estimation of site charge distribution in organic conductors, α - and θ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$, under hydrostatic pressure (BEDT-TTF: bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene) Kyuya Yakushi, R. Wojciechowski, Kaoru Yamamoto, Toshihiro Hiejima, Atsushi Kawamoto.....	49
＜ 研 究 嘱 託 ＞	
中枢性運動麻痺者の運動再学習のための FES リハビリシステムの開発 渡 邊 高 志・三 浦 尚 人・新 田 和 樹	57
大気圧プラズマ流と生体の干渉機構	佐 藤 岳 彦 61
日常生活支援ロボットのオンサイト行動発達のための認識行動学習技術と対人行動環境への展開 岡 田 慧	67
関節軟骨の熱伝導率特性に基づくポータブル診断プローブの開発 杉 田 直 彦・木 崎 通・光 石 衛	71
軸対称噴流熱拡散場での瞬間速度・瞬間温度計測のための複合プローブ開発に 関する研究.....	長 田 孝 二・酒 井 康 彦 75
配置問題に対する実用的アルゴリズムの設計と解析	今 堀 慎 治 79
ステンレス鋼へのショットピーニングに伴う特異相変態挙動 佐 藤 尚・難 波 亜 衣・西 浦 孝 幸・渡 辺 義 見	83
統計多様体の共形射影構造と一般化指数型分布族の幾何学.....	松 添 博 87
＜ 豊田理研スカラー ＞	
ユーザ嗜好の時間変化を考慮した高精度な情報推薦システムの研究	小 山 聡 91

キラリティーを持つ液晶性高分子エラストマーを用いたソフトアクチュエータの応答特性	羅 亮 皓	93
第一原理に基づいた結晶材料の熱伝導デザインツールの開発	塩見 淳一郎	95
リアルタイムエンジン制御アルゴリズムへの素反応数値解析の応用	山 崎 由 大	97
単一光子検出に向けたコラナ量子ドットによるナノ細線電流チャネルの形成と評価 大森 雅登・Pavel Vitushinskiy・柿 裕 之		99
時間分解赤外分光法を用いた可視光型光触媒の光励起キャリアダイナミクス	山 方 啓	101
緩和測定による高粘性電解液の輸送物性発現機構の解析法の開発	山 口 毅	103
分子線によるグラファイト表面における散乱機構の解明	山 口 浩 樹	105
ナノメッシュを利用した金属ナノドットの創製と構造評価	柚 原 淳 司	107
細菌の負の走光性をもたらす光受容タンパク質のメカニズムの研究	井 上 圭 一	109
フッ素の特性を利用した電子欠乏性 π 空間の創出と分子フラスコ材料への展開	柴 田 哲 男	111
脳波を利用した協見運転に先立つ眼球運動の予測システムの構築を目指して	船 瀬 新 王	113
ジルコニウム系金属バイオマテリアルの創製と骨融合性評価	赤 堀 俊 和	115
シアノバクテリアにおけるアルカリフォスファターゼ PhoD の Tat pathway 依存的分泌機構 景 山 伯 春		117
カチオン性ポルフィリン金属錯体を用いた革新的触媒反応の開発	倉 橋 拓 也	119
スピン非制限 TDDFT 法に基づく量子動力学法による開殻分子系の光学スペクトルに ついての理論研究	岸 亮 平	121
損傷 DNA による転写阻害機構の解析および多重免疫染色法による新規転写阻害剤の 検出系の開発	倉 岡 功	123
人工多能性幹細胞の分化制御を可能とする三次元培養場の創成	境 慎 司	125
シェアリング技術を用いた低コスト LSI チップ製造技術の確立	兼 本 大 輔	127
極端な変形下でも数値的に安定な柔軟体実時間シミュレーション技術の開発 菊 植 亮		129

< 特定課題研究 >

マイクロスケールの燃焼学：小さな炎がもたらす超燃焼システムへのブレークスルー

..... 中 村 祐 二 131

論文リスト 135

講演リスト 142

CONTENTS

< Fellow >

- Application of the dispersion energy correction to the third order single excitation perturbation theory based on the locally projected molecular orbitals: weak electron-donor-acceptor complexes and water clusters Suehiro Iwata.... 1
- Breaking of orbital, spin and charge symmetries in chemical reactions (4)
— Theoretical studies of oxygen evolving complex (OEC) of photosynthesis II (PSII) —
..... Kizashi Yamaguchi, Mitsuo Shoji, Tohru Saito, Hiroshi Isobe, Shysuke Yamanaka..... 9
- Efficient exploration of chemical reaction routes on potential surfaces Koichi Ohno.... 21
- Cosmomimetic growth mechanism of carbon microcoils from vapor phase Seiji Motojima.... 29
- Multiphoton reactions of $\text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Yb}^{2+}$ induced by femto- and nanosecond laser irradiation
..... Nobuaki Nakashima.... 39
- Estimation of site charge distribution in organic conductors, α - and θ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$, under hydrostatic pressure (BEDT-TTF: bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene)
Kyuya Yakushi, R. Wojciechowski, Kaoru Yamamoto, Toshihiro Hiejima,
..... Atsushi Kawamoto.... 49

< Designated Researcher >

- Development of FES rehabilitation system for motor relearning of paralyzed patients
..... Takashi Watanabe, Naoto Miura, Kazuki Nitta.... 57
- Biological interference mechanism of an atmospheric plasma flow Takehiko Sato.... 61
- Recognition-action-learning system for onsite behavior development for daily assistance robot in human environment Kei Okada.... 67
- Portable diagnostic probe based on characteristics of thermal conductivity of joint cartilage Naohiko Sugita, Tohru Kizaki, Mamoru Mitsuishi.... 71
- On the development of a composite probe for simultaneous measurement of instantaneous velocity and temperature for measurements of heat transfer in an axisymmetric thermal jet Kouji Nagata, Yasuhiko Sakai.... 75
- Practical algorithms for cutting and packing problems Shinji Imahori.... 79
- Anomalous phase transformation behavior induced
— by Shot-peening method for stainless steel
..... Hisashi Sato, Ai Namba, Takayuki Nishiura, Yoshimi Watanabe.... 83
- Conformal-projective structures on statistical manifolds and geometry of generalized exponential families Hiroshi Matsuzoe.... 87

< **Scholarship** >

Study on accurate information recommendation by considering the temporal evolution of user preferences	Satoshi Oyama.....91
Electric response of chiral liquid-crystal elastomer as a soft actuator	Yang Ho Na.....93
Development of heat conduction design tools for crystal materials based on first principles	Junichiro Shiomi.....95
Application of calculations with elementary reactions to a real time engine control algorithm	Yudai Yamasaki.....97
Growth and properties of nanowire current channels made of columnar quantum dots for single-photon detection	Masato Ohmori, Pavel Vitushinskiy, Hiroyuki Sakaki.....99
Dynamics of photogenerated charge carriers in visible light driven photocatalysts studied by time-resolved IR absorption spectroscopy	Akira Yamakata.... 101
Analysis of transport mechanisms of viscous liquid electrolytes by means of relaxation measurement	Tsuyoshi Yamaguchi.... 103
Investigation on scattering mechanism from graphite surface by molecular beam	Hiroki Yamaguchi.... 105
Formation of metal nanodots in (4x4) vanadium oxide nanomesh on Pd(111)	Junji Yuhara.... 107
Study on the mechanism of photo-receptor proteins for negative phototaxis of bacteria	Keiichi Inoue.... 109
Creation of electron deficient π space for molecule flask based on fluorine chemistry	Norio Shibata.... 111
Fundamental Research on prediction system on eye movements by the EEG signals to develop inattentive-driving alert system	Arao Funase.... 113
Evaluation of bone-contactability and development of Zr system metallic biomaterials	Toshikazu Akahori.... 115
Molecular analysis for the secretory mechanism of cyanobacterial alkaline phosphatase, PhoD, by the tat pathway.....	Hakuto Kageyama.... 117
Studies on cationic metalloporphyrin complexes for organic synthesis	Takuya Kurahashi.... 119
Theoretical study on the optical spectra of open-shell molecules by the quantum dynamics method based on the spin-unrestricted TDDFT method	Ryohei Kishi.... 121
A new method for detecting genetic toxicity using the RNA synthesis response to DNA damage.	Isao Kuraoka.... 123

Fabrication of three-dimensional culture space for controlling differentiation of human iPS cells	Shinji Sakai	125
An implementation of low-cost LSIs by sharing techniques	Daisuke Kanemoto	127
Numerically stable realtime simulation of extremely deformable soft objects	Ryo Kikuuwe	129
< Specially Promoted Project >		
Micro-scale Combustion Science A Potential Pioneer of “Innovative” Combustion		
Concept and Technology	Yuji Nakamura	131
List of Papers		135
List of Presentations		142