

目 次

2017年度豊田理化学研究所の活動	頁	1
《研究報告》		
《豊田理研フェロー》		
新奇強相関電子系物質の開発	上 田 寛	23
銅イオンドーブ $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ ガラスの水素による還元反応	野 上 正 行	31
無機有機複合超格子熱電変換材料の化学創製	河 本 邦 仁・田 若 鳴	41
鉄混合原子価錯体における連結異性の発現と制御のメスバウアー分光研究	小 島 憲 道	51
フェムト秒発光分光計の高度化と白金ナノ構造体の発光現象	末 元 徹	59
蛋白質の構造揺らぎと Anfinsen の熱力学仮説	平 田 文 男	67
希土類合金近似結晶からの正12角形準結晶構造モデルの構築	石 政 勉	73
電場誘起 ESR による高移動度有機トランジスタ中のキャリア観測	黒 田 新 一	81
気相イオンの核磁気共鳴分光法の研究	富宅喜代一	89
《豊田理研客員フェロー》		
次世代燃料電池用の高活性・高耐久性を併せ持つ凹型正八面体 $\text{Pt}_3\text{Ni}/\text{C}$ 電極触媒	岩 澤 康 裕	101
量子スピン液体の現状とダイヤモンドスピン格子 $(\text{ET})\text{Ag}_4(\text{CN})_5$	齋 藤 軍 治・吉 田 幸 大・平 松 孝 章・大 塚 晃 弘	111
	前 里 光 彦・清 水 康 弘・土 射 津 昌 久・中 村 優 斗	
	伊 藤 裕・岸 田 英 夫	
液晶微小球レーザ	竹 添 秀 男	119
《特 別 寄 稿》		
化学反応における対称性の破れの理論 (8)		
光合成システム II の酸素発生 CaMn_4O_5 クラスターによる水分解反応のカルシウム		
支援非ラジカル機構	山 口 兆・庄 司 光 男 磯 部 寛	129
	山 田 悟・宮 川 晃 一	
《豊田理研スカラー》		
機械学習を組み合わせた有機半導体薄膜におけるドーピング効果のハイスループット探索	丸 山 伸 伍	144

siRNA創薬の細胞内テリハリーイメージングを指向したRNA結合性蛍光プローブの開発	佐藤雄介	146
木質バイオマス有効利用へ向けた植物細胞壁改変技術の開発	檜本悟史	148
MEMS2軸力センサを用いた微小液滴の滑りにおける接触面の力分布の計測	NGUYEN THANH VINH	150
三原色集積窒化物LED実現に向けた選択成長技術および発光色制御技術の高度化	関口寛人	152
環状共役 π 分子の配置制御および、環状共役 π 分子同士の熱融合による単層カーボンナノチューブの合成	東城友都	154
バイオマーカー検出、及びその検出向上のための参照LSI混載型光学検出バイオセンサに関する研究	丸山智史	156
多層運動評価の最適化に基づく複数の移動体の自律的・協調的な行動則設計	椿野大輔	158
価数揺動を利用した新規熱電材料物質の探索	井村敬一郎	160
グラフェン液体セルの自在デザインと応用	北浦良	162
水溶性空間を指向した分子設計に基づく不凍活性物質の開発	住井裕司	164
2軸濃度勾配を利用したラスマルテンサイトの組織サイズ決定因子の解明	知場三周	166
分子イメージング技術を用いた衝撃波発生条件における超音速マイクロ内部流れの現象解明	半田太郎	168
ロバストな細胞膜マーカー解析探針としての人工細胞脂質膜ナノビーズ	湊元幹太	170
自己組織化の逆問題の解法	鳥飼正志	172
難脱硫成分を分離可能なオイル耐性ろ過フィルターの探索	藤井義久	174
発光団集積型かご型シルセスキオキサンの合成と応用	権正行	176
酸素分圧制御によるCe置換M型フェライト磁石の可能性の探索	和氣剛	178
量子分子動力学法による水素・重水素・トリチウム分子凝集系の未知物性の解明	金賢得	180
W型フェライトの単結晶を用いた磁気異方性の学理構築	道岡千城	182
リポドナノテクノロジーによる膜タンパク質分離デバイスの創成	岡本行広	184

シリコン量子井戸構造への高効率スピン注入と室温スピントランジスタへの応用	山田 道 洋	186
有機リン酸を原料に用いたリン酸鉄リチウムの合成 表面修飾およびナノ粒子化に向けて	岡田 健 司	188
電子受容性ポルフィリノイドの新規合成・修飾法の開発と材料応用	小 出 太 郎	190
糖鎖高分子を用いた人工抗体の開発	三 浦 佳 子	192
新規な薬剤結合増強法を目指したエストロゲン関連受容体とハロゲン化フェノールの結合解析	松 島 綾 美	194
《スカラー共同研究》		
超臨界流体堆積法を用いたMEMS圧力センサの作製	百 瀬 健・高橋 英俊	198
オリゴ（パラフェニレンエチニレン）を基盤とした高い配向 配列秩序と異方的電荷輸送特性を有する革新的有機材料の創製	荒 川 優 樹・石 井 佑 弥・櫻 井 庸 明	200
《特定課題研究》		
多元秩序制御による熱・体積機能の開拓	東 正 樹	207
非線形エネルギー輸送による新しい物性理論の探求	土 井 祐 介	211
感染症数理モデルの解析に基づく新規ワクチンの定期接種導入に関する判断の客観化	西 浦 博	217
制御工学研究者と応用数学研究者の連携による革新的な制御理論構築	蛭 原 義 雄	223
《豊田理研懇話会》		
垂直磁気記録とビッグデータ時代	岩 崎 俊 一	230
獲得免疫の驚くべき幸運	本 庶 佑	231
数学—材料科学連携による挑戦	小 谷 元 子	232
論文リスト		235
講演リスト		243
受賞リスト		254

CONTENTS

Annual Reports of 2017 Fiscal Year	1
------------------------------------	---

《Research Reports》

《Fellow》

Struggle for correlated electron materials development	Yutaka UEDA	23
Reduction Mechanisms of Cu^{2+} -Doped $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ Glasses during Heating in H_2 Gas	Masayuki NOGAMI	31
Chemical Synthesis of Inorganic/Organic Hybrid-Superlattice Thermoelectrics	Kunihito KOUMOTO and Ruoming TIAN	41
Study of the Linkage Isomerization and its Influence on the Charge Transfer Phase Transition for Iron Mixed-Valence Complexes by Means of Mossbauer Spectroscopy	Norimichi KOJIMA	51
Improvement of femtosecond luminescence spectrometer and observation of luminescence in platinum nanostructures	Tohru SUEMOTO	59
Structural fluctuation of protein, and Anfinsen's thermodynamic hypothesis	Fumio HIRATA	67
Structure modeling of dodecagonal quasicrystal from rare-earth metal based approximants	Tsutomu ISHIMASA	73
Electron spin resonance spectroscopy of charge carriers in high-mobility organic transistors	Shin-ichi KURODA	81
Development of Gas-phase NMR Spectroscopy	Kiyokazu FUKU	89

《Visiting Fellow》

Octahedral PtNi_x/C with Continuous, Compressive and Concave Pt skin layers as a Highly Active and Durable Cathode Electrocatalyst for Next-Generation Polymer Electrolyte Fuel Cell	Yasuhiro IWASAWA	101
Present Status of Quantum Spin Liquid System and $(\text{ET})\text{Ag}_4(\text{CN})_5$ with a Diamond Spin-Lattice	Gunzi SAITO, Yukihiro YOSHIDA Takaaki HIRAMATSU, Akihiro OTSUKA, Mitsuhiko MAESATO Yasuhiro SHIMIZU, Masahisa TSUCHIYU, Yuto NAKAMURA Hiroshi ITO and Hideo KISHIDA	111
Liquid Crystal Spherical Microlasers	Hideo TAKEZOE	119

《Special Contribution》

- A calcium-assisted non-radical (CNR) mechanism for the oxygen-oxygen bond formation coupled with the intramolecular one electron transfer (OET) in the oxygen evolving complex (OEC) of photosynthesis II (PSII), the nature of the chemical bonds in the transition structure
Kizashi YAMAGUCHI, Mitsuo SHOJI, Hiroshi ISOBE 129
Satoru YAMADA and Koichi MIYAGAWA

《Scholarship》

- High-throughput screening of doping effect of organic semiconductor thin films using machine learning Shingo MARUYAMA 144
- Design of RNA-binding fluorescent probes for the analysis of delivery process of siRNAs Yusuke SATO 146
- Development of plant cell wall modification techniques for woody biomass Satoshi NARAMOTO 148
- Measurement of force distribution on the contact area of sliding droplets using a MEMS-based 2 axis force sensor NGUYEN Thanh Vinh 150
- Improvement of selective area growth and emission color control for realization of three-primary color integrated LED Hiroto SEKIGUCHI 152
- Position Control of Carbon Nanorings with Conjugated P_t Orbitals and Synthesis of Single-walled Carbon Nanotubes Pyrolyzed from the Carbon Nanorings Tomohiro TOJO 154
- Study on Optical Detection Bio-sensor for Biomarker Detection and Improving Detection Satoshi MARUYAMA 156
- Design of Autonomous and Cooperative Control Laws for Multiple Vehicles via Optimization of Multi-Layer Performance Criteria Daisuke TSUBAKINO 158
- Search for new thermoelectric materials with valence fluctuation Kenichiro IMURA 160
- Fabrication and application of graphene liquid cells Ryo KITaura 162
- Development of Anti-Freezing Compounds Based on the Design of Hydrophilicity of Three Dimensional Structure Yuji SUMII 164
- Clarification of determinant on size of lath martensite by using biaxial compositional gradation Tadachika CHIBA 166
- Study on the phenomena in a supersonic microduct flow using a molecular imaging technique Taro HANDA 168

Nano-Beads Coated with Artificial Lipid Membranes toward Robust Probes for Cell Membrane Interaction	Kanta TSUMOTO	170
Free-Energy Functional Method for Inverse Problem of Self Assembly	Masashi TORIKAI	172
Research for Oil Resistant Filter Membrane Suitable for Eliminating the Hardly Desulfurizing Agent	Yoshihisa FUJII	174
Synthesis and Application of Luminophores-Integrated Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane	Masayuki GON	176
Study on Ce Substituted M-type Ferrite by Controlling Oxygen Pressure	Takeshi WAKI	178
Intermolecular and Intramolecular Structure and Dynamics in Hydrogen, Deuterium and Tritium Liquids	KIM Hyeon-Deuk	180
Magnetic Anisotropy of W-type Ferrite Studied by Using Single Crystals	Chishiro MICHIOKA	182
Development of the membrane proteins separation device by lipid nanotechnology	Yukihiro OKAMOTO	184
Highly efficient spin injection into Si quantum-well structure for room temperature spin transistor	Michihiro YAMADA	186
Synthesis of organo-modified LiFePO ₄ nanoparticles from organo-phosphonic acid	Kenji OKADA	188
Development of Novel Synthesis and Modification Methods of Electron Accepting Porphyrinoid and the Application for Materials	Taro KOIDE	190
Development of Artificial Antibody by Glycopolymers	Yoshiko MIURA	192
Evaluation of Halogen Bonds between an Estrogen-Related Receptor and Halogen-Containing Phenol Derivatives	Ayami MATSUSHIMA	194
《Joint Research Projects》		
MEMS pressure sensor using Supercritical Fluid Deposition of Copper	Takeshi MOMOSE and Hidetoshi TAKAHASHI	198
Synthesis and characterization of novel oligo(<i>p</i> -phenylene ethynylene) analogues exhibiting highly aligned and ordered structures and anisotropic charge transport properties	Yuki ARAKAWA, Yuya ISHII and Tsuneaki SAKURAI	200
Special Promote Projects		205

Social Gathering of Toyota Physical and Chemical Research Institute	227
List of Papers	235
List of Presentations	243
List of Awards	254