

# 目 次

	頁
2018年度豊田理化学研究所の活動 .....	3
《研究報告》	
《豊田理研フェロー》	
金属錯体における動的スピン平衡および連鎖する磁気物性の研究 .....	小 島 憲 道 ..... 25
貴金属におけるフェムト秒赤外発光の観測 .....	末 元 徹 ..... 33
中性子の非干渉性散乱実験から得られるタンパク質の平均自乗変位の温度依存性に 関する統計力学理論 .....	平 田 文 男 ..... 41
Tsai 型 1/1 近似結晶の構造と相変態：Cu-Ga-Sc 合金の場合 .....	石 政 勉 ..... 45
高移動度高分子トランジスタにおける電荷キャリアの電場誘起ESR観測 .....	黒 田 新 一 ..... 53
気相イオンの核磁気共鳴分光法の研究 .....	富 宅 喜 代 一 ..... 61
グラフェンの電界放出顕微鏡法によるエッジ状態の研究 .....	齋 藤 弥 八 ..... 69
バナジン酸ビスマス薄膜電極における正孔密度の印加電圧依存性 .....	松 本 吉 泰 ..... 77
《豊田理研客員フェロー》	
Ti 基合金のシェフラー型状態図 .....	石 田 清 仁 ..... 87
ナノグラフェンの電子・磁気構造：端の幾何学と化学の協奏 .....	榎 敏 明 ..... 95
アエロジェル中での固体ヘリウムの結晶成長と質量輸送 .....	奥 田 雄 一 ..... 105
《特任フェロー》	
金属中の合金元素近傍の局所格子歪と合金物性 .....	森 永 正 彦 ..... 115
《特 別 寄 稿》	
化学反応における対称性の破れの理論 (9)：	
光合成水分解 $\text{CaMn}_4\text{O}_5$ クラスターのXFEL光を用いたSFX法による $\text{S}_i$ ( $i=0-4$ ) 状態 における中間体の新規構造と理論計算	
.....	山 口 兆・庄 司 光 男・磯 部 寛 ..... 131
.....	川 上 貴 資・宮 川 晃 一・中 嶋 隆 人
高分子内包カーボンナノチューブの超高速電荷移動と緩和ダイナミクス .....	中 村 新 男 ..... 153

## 《豊田理研スカラー》

環状ポリエチレングリコールを利用した新奇医薬材料開発 .....	山本拓矢 .....	164
ナフタレンを溶媒に用いた置換基のない長鎖ポリアセンの合成と再結晶及び そのトランジスタ特性評価 .....	柳瀬 隆 .....	166
脂肪滴形成・融合・分解の制御機構解明を目指した新規蛍光プローブの開発 .....	鎌田 瑠 泉 .....	168
常磁性ランタノイドプローブを用いたタンパク質の動的構造解析法の確立 .....	齋 尾 智 英 .....	170
顕微テラヘルツ波発生法の開発による電荷秩序ドメインの空間ダイナミクス解明 .....	伊 藤 弘 毅 .....	172
新規機能性ソフトマテリアル創成のための異形分子共集積化技術の開発 .....	伊 藤 喜 光 .....	174
高品質窒化物半導体成長に向けたシリコン基板の表面炭化反応を用いた炭化ケイ素 薄膜形成 .....	出 浦 桃 子 .....	176
望みのタンパク質に対する共有結合リガンドを迅速に創製する基盤技術の構築 .....	後 藤 佑 樹 .....	178
mRNA 機能の生細胞内空間特異的操作法 .....	吉 村 英 哲 .....	180
GFP 色素を用いた糖鎖受容体の複数色蛍光プローブの開発 .....	金 森 功 吏 .....	182
高圧安定四重ペロブスカイトの薄膜化による磁気異方性制御とスピントロニクス応用 への展開 .....	重 松 圭 .....	184
光励起型金属ナノ粒子触媒の創製に資する大腸菌線毛の基板材料開発 .....	田 代 陽 介 .....	186
神経電極の超高分解能マーキング手法の開発 .....	鯉 田 孝 和 .....	188
炭素繊維強化熱可塑性樹脂の高性能化とリサイクルを実現する界面制御技術の開発 .....	山 本 徹 也 .....	190
誘導結合型プラズマによる SiC 材料の高選択性かつ低ダメージエッチング技術の 開発へ向けた装置構造の検討 .....	鈴 木 陽 香 .....	192
重複性遺伝子がありなす複雑系生命現象「植物体内時計」の解明 .....	中 道 範 人 .....	194
水移動型水和一脱水反応の開発 .....	中 寛 史 .....	196
蛋白質の細胞内濃度を精密に制御する汎用的手法の開発 .....	吉 井 達 之 .....	198
ナノメカニクス諸現象を解明する原子応力計算法の開発 .....	椎 原 良 典 .....	200
脳移行性を有する機能性 PET プローブの開発研究 .....	古 山 浩 子 .....	202

量子光学デバイスに向けた窒化物半導体における原子層レベルの界面制御.....	正直花奈子 .....	204
二次元層状材料の有機色素増感と水素発生光触媒系への応用 .....	梅 山 有 和 .....	206
世界最高感度 Rheo-NMR 装置の開発.....	菅 瀬 謙 治 .....	208
環状有機硫黄化合物を機能性 $\pi$ 共役化合物へ変換する分子リビルド法の開発.....	野 木 馨 介 .....	210
水素—重水素交換質量分析法 (HDX-MS) を用いた蛋白質凝集体解析法の開発 .....	関 山 直 孝 .....	212
蛍光性核酸類縁体 $^{\text{th}}$ dG-tC FRET システムを用いたヌクレオソーム研究.....	朴 昭 映 .....	214
構造制御による高熱電性能ホイスラー合金薄膜の創製とIoT技術への応用 .....	山 田 晋 也 .....	216
室温超伝導実現に向けた16族元素水素化合物の圧力誘起超伝導の探索.....	榮 永 茉 利 .....	218
「ワディントン地形」に基づいた革新型細胞調製手法の構築 .....	金 美 海 .....	220
生体成分分布を精細に捉える極致イメージング質量分析法の開発.....	大 塚 洋 一 .....	222
細胞キラリティが左右非対称な内臓捻転を駆動する力学的機構の解明.....	稲木美紀子 .....	224
構造制御されたナノ多孔体の創製と高機能デバイスに向けた材料開発.....	白 木 智 丈 .....	226
高分子の分子鎖熱運動特性を利用した機能性膜表面の構築.....	織田ゆかり .....	228
アミノ酸を配位子とした金錯体による種々の担体上への金ナノ粒子固定化法の開発 .....	村 山 美 乃 .....	230
液体の統計力学理論を基盤としたマルチスケール理論による酸解離定数の定量的 予測手法の開発 .....	吉 田 紀 生 .....	232
サーマルイメージング技法を応用した高CO <sub>2</sub> 時代適応型植物探索法の提案 .....	門 田 慧 奈 .....	234
<b>《スカラー共同研究》</b>		
分子間相互作用を利用したフィルター型分離リアクターの開発 .....	藤 井 義 久・松 島 綾 美・三 浦 佳 子 .....	238
<b>《特定課題研究》</b>		
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 .....	243
<b>《豊田理研懇話会》</b>		
いち有機合成化学者の半世紀 「元素科学」から「元素戦略」,「一家に1枚周期表」へ .....	玉 尾 皓 平 .....	250

不可能図形と立体錯視 ～数理モデルに基づく錯覚創作原理～ .....	杉原厚吉 .....	251
------------------------------------	------------	-----

「あなたのことをあなたの脳にきく」は可能か ―fMRIによる脳ベースの職業適性検査― .....	小川誠二 .....	252
---	------------	-----

論文リスト .....		255
-------------	--	-----

講演リスト .....		264
-------------	--	-----

受賞リスト .....		273
-------------	--	-----

# CONTENTS

<b>Annual Reports of 2018 Fiscal Year</b> .....	3
---	---

## 《Research Reports》

### 《Fellow》

Study on the Dynamical Spin Equilibrium and its Induced Successive Magnetic Phase Transition for Assembled Metal Complexes .....	Norimichi KOJIMA .....	25
Observation of Femtosecond Infrared Luminescence in Noble Metals.....	Tohru SUEMOTO .....	33
Temperature Dependence of the Mean Square Displacement (MSD) of Protein Obtained from the Incoherent Neutron Scattering .....	Fumio HIRATA .....	41
Structural Properties and Phase Transformation of Tsai-Type 1/1 Approximants: the Case of Cu-Ga-Sc Alloy.....	Tsutomu ISHIMASA .....	45
Electron Spin Resonance Spectroscopy of Charge Carriers in High-Mobility Organic Transistors of Semicrystalline Conjugated Polymers .....	Shin-ichi KURODA .....	53
Development of Gas-phase NMR Spectroscopy .....	Kiyokazu FUKU .....	61
Study on Edge States of Graphene by Field Emission Microscopy .....	Yahachi SAITO .....	69
Applied Bias Voltage Dependence of Hole Density in a Thin Film Electrode of Bismuth Vanadate .....	Yoshiyasu MATSUMOTO .....	77

### 《Visiting Fellow》

Schaeffler-Type Phase Diagram of Ti-Based Alloys.....	Kiyohito ISHIDA .....	87
Electronic and Magnetic Structures of Graphene Nanostructures: Interplay between Edge Geometry and Chemistry .....	Toshiaki ENOKI .....	95
Crystal Growth of Solid $^4\text{He}$ in the Aerogel and Onset of Mass Flow through Solid .....	Yuichi OKUDA .....	105

### 《Specially Appointed Fellow》

Local Lattice Strain around Alloying Elements in Metals and Its Influence on Alloy Properties .....	Masahiko MORINAGA .....	115
--	-------------------------	-----

## 《Special Contribution》

Theoretical Studies of the $S_i$ ( $i = 0-4$ ) States of the Kok Cycle for Water Oxidation in the Oxygen Evolution Complex (OEC) of Photosynthesis II (PSII) Revealed by the New Serial Femotosecond Crystallography (SFX) with X-ray Free Electron Laser (XFEL).....	Kizashi YAMAGUCHI, Mitsuo SHOJI, Hiroshi ISOBE ..... 131
Takashi KAWAKAMI, Koichi MIYAGAWA and Takahito NAKAJIMA	

Ultrafast Charge Transfer and Relaxation Dynamics in Polymer-Encapsulating Single-Walled Carbon Nanotubes.....	Arao NAKAMURA ..... 153
--	-------------------------

## 《Toyota Riken Scholar》

Development of Novel Pharmaceutical Materials Based on Cyclic Poly(Ethylene Glycol) .....	Takuya YAMAMOTO ..... 164
---	---------------------------

Synthesis and Recrystallization of Long Polyacene Molecules without a Substituent Using Naphthalene as a Solvent and Their Characterization as a Transistor .....	Takashi YANASE ..... 166
---	--------------------------

Development of Novel Fluorescent Probe for Analyzing Cell Differentiation and Lipid Droplet Formation .....	Rui KAMADA ..... 168
---	----------------------

Paramagnetic Lanthanide Probe Methods to Investigate Protein Structure and Dynamics .....	Tomohide SAIO ..... 170
---	-------------------------

Charge-Ordering Domain Structures and their Spatial Dynamics Investigated by the Terahertz-Wave Emission Microscope .....	Hirotake ITOH ..... 172
---	-------------------------

Coassembly of Shape-Different Molecules for Novel Functional Soft Materials .....	Yoshimitsu ITOH ..... 174
---	---------------------------

Formation of SiC Thin Film using Surface Carbonization of Si Substrates for Growth of High-Quality Nitride Semiconductors.....	Momoko DEURA ..... 176
--	------------------------

Platform Technology for Facile Development of Peptide-Based Covalent Modifiers of Proteins .....	Yuki GOTO ..... 178
--	---------------------

Development of Visualization and Regulation Methods for mRNAs in Living Cells .....	Hideaki YOSHIMURA ..... 180
---	-----------------------------

Development of Multicolor Fluorescent Probes for Carbohydrate Receptors with GFP Chromophore Derivatives.....	Takashi KANAMORI ..... 182
---	----------------------------

Manipulation of Magnetic Anisotropy in High-Pressure-Phase Quadruple Perovskite Thin Film Toward for Spintronic Application .....	Kei SHIGEMATSU .....	184
Material Development of <i>Escherichia coli</i> Curli Fibers for Producing Photoexcited Metal Nanoparticle Catalysis .....	Yosuke TASHIRO .....	186
Development of a High Precision Marking Method for Electrophysiological Recordings .....	Kowa KOIDA .....	188
Development of Surface Control Technique for Enhancement and Recycle of CFRTP .....	Tetsuya YAMAMOTO .....	190
Investigation of Equipment Structure for Development of High Selectivity and Low Damage Etching Technology of SiC Material by Inductively Coupled Plasma .....	Haruka SUZUKI .....	192
Study on Plant Circadian Clock Composed by Functional Redundant Genes .....	Norihito NAKAMICHI .....	194
Transfer Hydration and Dehydration of Organic Compounds .....	Hiroshi NAKA .....	196
Development of Chemical Tool to Control Protein Concentration in Living Cell .....	Tatsuyuki YOSHII .....	198
Development of Atomic Stress Calculation for Understanding Nano-Mechanical Phenomena .....	Yoshinori SHIIHARA .....	200
Development of Functional Probes for PET with Brain Penetration.....	Hiroko KOYAMA .....	202
Monolayer-Scale Interface Controls of Nitride Semiconductors Toward Quantum Optics Devices .....	Kanako SHOJIKI .....	204
Organic Dye Sensitization of Two-Dimensional Layered Materials and their Applications to Hydrogen Evolution Photocatalytic Systems .....	Tomokazu UMEYAMA .....	206
Development of the World's Highest-Sensitivity Rheo-NMR.....	Kenji SUGASE .....	208
Development of "Molecular Rebuilding" for Conversion of Cyclic Organosulfur Compounds into Functional $\pi$ -Conjugated Molecules.....	Keisuke NOGI .....	210
Elucidation of Protein Aggregation Using Hydrogen-Deuterium Exchange Mass (HDX-MS) .....	Naotaka SEKIYAMA .....	212

Investigation of Nucleosome Structure Using the Highly Emissive Nucleobase thdG-tC FRET Pair.....	Soyoung PARK ..... 214
Development of High-Performance Heusler-Type Thermoelectric Thin Films for IoT Applications.....	Shinya YAMADA ..... 216
Search for Pressure-induced Superconductivity of Hydride in Chalcogens towards Room-Temperature Superconductor.....	Mari EINAGA ..... 218
Development of Bioprocessing Strategies Based on Waddington's Epigenetic Landscape.....	Mee-Hae KIM ..... 220
Development of Ideal Imaging Mass Spectrometry for Precise Capturing of Biogenic Substance Distribution.....	Yoichi OTSUKA ..... 222
Dynamic Mechanisms of Left-Right Asymmetric Organ Rotation Induced by Cell Chirality.....	Mikiko INAKI ..... 224
Nanoporous Material Fabrication for Advanced Applications.....	Tomohiro SHIRAKI ..... 226
Construction of Functional Surfaces Utilizing Thermal Molecular Motions of Polymer Chains.....	Yukari ODA ..... 228
Preparation of Au Nanoparticles Supported on Various Materials Using Au Complexes Coordinated with Amino Acid.....	Haruno MURAYAMA ..... 230
Development of the Computational Scheme of $pK_a$ Values by Multiscale Hybrid Theory Based on the Statistical Theory of Molecular Liquids and Quantum Chemical Theory.....	Norio YOSHIDA ..... 232
Searching for High CO <sub>2</sub> Favorite Plants Using Leaf Thermal Imaging Techniques .....	Keina MONDA ..... 234
 <b>《Toyota Riken Scholar Joint Research》</b>	
Development of Filter-type Separation Reactors Using Biomolecular Interactions .....	Yoshihisa FUJII, Ayami MATSUSHIMA and Yoshiko MIURA ..... 238
 <b>《Specially Promoted Research Program》</b>	
Building Innovative Control Theory through Cooperation among Researchers from Control and Applied Mathematics Fields.....	Yoshio EBIHARA ..... 243
<b>Toyota Riken Forum</b> .....	247



**List of Papers** ..... 255

**List of Presentations** ..... 264

**List of Awards** ..... 273