

目 次

2020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》

結晶性共役高分子ポリチオフェンにおける電荷キャリアの電場誘起ESR観測	黒 田 新 一 ... 21
気相イオンの核磁気共鳴分光法の研究	富 宅 喜代一 ... 29
ナノカーボン表面及びエッジの電界放出／電界イオン顕微鏡法による観察	齋 藤 弥 八 ... 41
バナジン酸ビスマス薄膜における光電気化学反応速度の正孔濃度依存性	松 本 吉 泰 ... 51
分光実験と計算科学の連携による強相関電子系の探究	今 田 正 俊 ... 59
ナノ領域の組成と立体原子配列を解析する原子分解能ホログラフィー顕微鏡Compact DELMAの開発	大 門 寛 ... 67
イオン液体の特異な相挙動と動的ゆらぎ（2）—柔粘性イオン結晶の回折強度の定式化と trimethylethylammonium bis(fluorosulfonyl)amideへの適用—	西 川 恵 子 ... 75
液式調湿空調機の調湿材となるイオン液体デザイン	伊 藤 敏 幸 ... 85
ブロック共重合体新分子設計によるメソスケールアルキメデスタイリングの踏破	松 下 裕 秀 ... 93

《豊田理研客員フェロー》

グラフェンの特異な磁気抵抗効果の理論	安 藤 恒 也 ... 101
W, Nb ドープした光触媒BaTaO ₂ Nの電子状態に関する理論的研究	山 下 晃 一 ... 115

《特 別 寄 稿》

F型アクチンの高分解能結晶構造とATP加水分解反応メカニズムの解明	前 田 雄一郎 ... 123
化学反応における対称性の破れの理論（11）： 開核分子種のアイソローバル及びアイソスピン類似に基づく酸化反応解析	山 口 兆・庄 司 光 男・磯 部 寛 ... 133 川 上 貴 資・宮 川 晃 一・中 嶋 隆 人

《豊田理研スカラー》

糖鎖セグメントの導入を鍵とする高付加価値バイオベースポリマーの設計	磯 野 拓 也 ... 154
---	-----------------

複数のアンビデント反応剤の同時精密制御による構造異性体の作り分け	百合野 大 雅 ...	156
一次代謝の違いを利用した経路特異的な阻害剤の探索	小笠原 泰 志 ...	158
光学活性フッ素化アミノ酸の迅速合成法の開発	清 水 洋 平 ...	160
分子構造スイッチングに基づく革新的応答系の開発	石 垣 侑 祐 ...	162
自在な化学ドーピングが可能な多孔性分子導体の開発	井 口 弘 章 ...	164
トポロジカル強相関電子の超高速光磁気ダイナミクス	川 上 洋 平 ...	166
DNA配列の特徴に基づくプラスミドの宿主域の予測と検証	新 谷 政 己 ...	168
マルチコア構造磁性ナノ粒子における磁化応答モデルの探索と解析手法の確立	大 多 哲 史 ...	170
高Q値有機結晶リング共振器のフーリエ分光によるQ値解析	阪 東 一 毅 ...	172
連続フロー合成に有効なコア-コロナ型高分子キラル触媒の開発	原 口 直 樹 ...	174
高分子材料の分子構造を反映した粗視化流動特性計算モデルの開発	畝 山 多加志 ...	176
電子供与性配位子を有する新規高機能鉄触媒の開発	伊 藤 淳 一 ...	178
基部陸上植物のペプチドホルモン-受容体ペアの機能解明	篠 原 秀 文 ...	180
新規植物ペプチドシグナリング解明に向けたゲノム科学および化学的研究手法の開発	田 畑 亮 ...	182
近赤外蛍光タンパク質を利用した光合成生物の明反応機能の拡張	近 藤 政 晴 ...	184
2周波液晶混合物の誘電特性の解明と現象論による解析	瀧 川 佳 紀 ...	186
受精卵画像からの妊娠成否確率の推定と深層学習による推定根拠の可視化	浮 田 宗 伯 ...	188
電位依存性Ca ²⁺ チャネルサブユニットが司るエピジェネティクス制御における新規分子複合体の探索	中 尾 章 人 ...	190
革新的ナノカーボン材料「単層グラフィジン」の精密合成とその半導体特性の解明	坂 本 良 太 ...	192
π 相互作用クロマトグラフィーによる微弱分子間相互作用の解明	久 保 拓 也 ...	194
水の窓域軟X線による液相の生体分子の反応ダイナミクスの観測	足 立 俊 輔 ...	196
微小センサーを用いた電流誘起電子相の検出技術の創製	成 田 秀 樹 ...	198
光遺伝子治療を志向した近赤外光に応答する人工DNA修復酵素の開発	山 元 淳 平 ...	200

異なる磁気揺らぎのフラストレーションが生み出す新奇量子相の探索	中 島 正 道 ...	202
血球細胞における小胞体形態かく乱に起因するNotchシグナル阻害因子の産生機構	山 川 智 子 ...	204
人工腸管デバイスによる腸内フローラ構成細菌の解明	加 地 範 匡 ...	206
らせんキラリティを持つ多核金属錯体の創製と円偏光発光材料への応用	小 野 利 和 ...	208
DNA損傷応答キナーゼATR活性化の分子機構	大 橋 英 治 ...	210
複数の生体機能に応答する分子プローブの創製	三 木 康 嗣 ...	212
《スカラー共同研究》		
ピコリットル液体の物理化学計測を用いたがん細胞の理解	池ノ内 順 一・大 塚 洋 一 ...	216
箱型分子ペルフルオロキュバンを用いた新しい電荷移動錯体の合成とその電子物性評価	秋 山 みどり・柳 瀬 隆 ...	218
多階層設計による複合ナノ粒子触媒の創出	中 寛 史・佐 藤 喬 章・高 井 千 加 ...	221
光照射下における励起状態解析に基づく機能性分子の物性評価	三 木 康 嗣・菅 瀬 謙 治 ...	225
《特定課題研究》		
先端磁気分光と理論計算の融合研究：「界面多極子相互作用」が拓く新しい学理	岡 林 潤 ...	229
キラルスピン物質科学の探索	戸 川 欣 彦 ...	233
全固体エネルギー変換デバイスにおける力学的作用	井 口 史 匡 ...	237
著書リスト		243
論文リスト		244
講演リスト		253
受賞リスト		257

CONTENTS

Annual Reports of 2020 Fiscal Year	3
---	---

《Research Reports》

《Fellow》

Field-induced ESR Spectroscopy of Charge Carriers in High-mobility Organic Transistors of a Semicrystalline Conjugated Polymer, poly(3-hexylthiophene) P3HTShin-ichi KURODA.....	21
Development of Gas-phase NMR Spectroscopy	Kiyokazu FUKU..... 29
Observation of Surface and Edges of Nano-Carbon by Field Emission/Field Ion MicroscopyYahachi SAITO.....	41
Hole Density Dependence of Photoelectrochemical Reaction Rate of Bismuth Vanadate Thin FilmYoshiyasu MATSUMOTO.....	51
Studies on Strongly Correlated Electron Systems by Collaborations of Spectroscopic Experiments and Computational Sciences	Masatoshi IMADA..... 59
Development of Atomic-resolution Holography Microscope Compact DELMA for Analysis of Composition and Stereoscopic Structure in Nano Region.....	Hiroshi DAIMON..... 67
Unique Phase Behavior and Dynamic Fluctuation of Ionic Liquids (2) — Formularization of Diffraction Intensity of Ionic Plastic Crystal and Application to trimethylethylammonium bis(fluorosulfonyl)amide —	Keiko NISHIKAWA..... 75
Ionic Liquids as Desiccants for an Air-conditioning System	Toshiyuki ITOH..... 85

Completion of the Archimedean Tiling Map by Multiblock Polymers	
.....	Yushu MATSUSHITA..... 93

《Visiting Fellow》

Theory of Anomalous Magnetoresistance in Graphene	Tsuneya ANDO..... 101
---	-----------------------

A Theoretical Study on the Electronic Structure of W, Nb-doped BaTaO ₂ N	
.....	Koichi YAMASHITA..... 115

《Special Contribution》

Crystal Structures of F-form Actin and Reaction Mechanisms of ATP Hydrolysis	
.....	Yuichiro MAEDA..... 123

Isolobal and Isospin Analogy between Organic and Inorganic Open-shell Molecules Application to Oxygenation Reactions by Active Oxygens and Oxyradicals	
.....	Kizashi YAMAGUCHI, Mitsuo SHOJI, Hiroshi ISOBE..... 133
Takashi KAWAKAMI, Koichi MIYAGAWA and Takahito NAKAJIMA	

《Toyota Riken Scholar》

Designing High-value-added Bio-based Polymers by Installing Glycan Segments	
.....	Takuya ISONO..... 154

Regiodivergent Synthesis via Precise Control of Two Ambident Reagents	
.....	Taiga YURINO..... 156

Search for Pathway Specific Inhibitors to Develop Narrow Spectrum Antibiotics	
.....	Yasushi OGASAWARA..... 158

Rapid Synthesis of Optically Active Fluorinated Amino Acids	Yohei SHIMIZU..... 160
---	------------------------

Development of Novel Response System Triggered by a Change in Molecular Structures	
.....	Yusuke ISHIGAKI..... 162

Control of Chemical Doping in Porous Molecular Conductors.....	Hiroaki IGUCHI.....	164
Ultrafast Optomagnetic Dynamics in Correlated Topological Systems	Yohei KAWAKAMI.....	166
Validation of Predicted Host Range of Plasmids Based on the Features of Their DNA Sequences	Masaki SHINTANI.....	168
Investigation of Magnetization Dynamics Model in Multicore Magnetic Nanoparticles and Its Evaluation Method.....	Satoshi OTA.....	170
Analysis of Q-factor of an Organic Crystalline Ring Resonator with High Q-factor Using Fourier Spectroscopy.....	Kazuki BANDO.....	172
Development of Core-corona Polymer-immobilized Chiral Catalyst for Continuous Flow Synthesis.....	Naoki HARAGUCHI.....	174
Development of a Coarse-grained Model for Rheological Simulations of Polymers which Incorporates Molecular Structures	Takashi UNEYAMA.....	176
Development of New Iron Catalysts with Highly Electron Donating Ligands	Jun-ichi ITO.....	178
Study on Functions of Peptide Hormone-receptor Pairs in Basal Land Plant	Hidefumi SHINOHARA.....	180
Development of Genomics and Chemical Approach for the Novel Plant Peptide Signaling	Ryo TABATA.....	182
Expansion of Light Reaction Function of Photosynthetic Organisms Using Near-Infrared Fluorescent Proteins.....	Masaharu KONDO.....	184

Elucidation of Dielectric Properties and Phenomenological Analysis of Dual Frequency Liquid Crystal Mixtures	Yoshinori TAKIKAWA.....	186
Pregnancy Probability Estimation and Evidence Visualization in Embryonic Cell Images	Norimichi UKITA.....	188
Elucidation of Novel VGCC β Subunit Complex-mediated Epigenetic Regulation	Akito NAKAO.....	190
Precise Synthesis of Innovative Nanocarbon “Single-layer Graphdiyne” and Elucidation of Its Semiconductor Property	Ryota SAKAMOTO.....	192
Study on the Weak Intermolecular Interactions by π -interaction Chromatography	Takuya KUBO.....	194
Reaction Dynamics of Biomolecules Using Soft X-ray Time-resolved Spectroscopy in the Liquid Phase	Shunsuke ADACHI.....	196
Development of Current-induced Electronic Phase Detection Technology Using a Micro Sensor	Hideki NARITA.....	198
Development of an Artificial DNA Repair Enzyme in Response to Near-infrared Toward Photosensitive Gene Therapy	Junpei YAMAMOTO.....	200
Exploration of Novel Quantum Phases Induced by Frustration of Magnetic Fluctuations	Masamichi NAKAJIMA.....	202
Mechanism of Notch Signal Inhibitor Production Caused by Endoplasmic Reticulum Morphological Disruption in Hemocyte	Tomoko YAMAKAWA.....	204
Investigation on Intestinal Bacteria by Artificially Reconstructed Intestine Devices	Noritada KAJI.....	206

Creation of Polynuclear Metal Complexes with Helical Chirality and Application to Circularly Polarized Luminescence Materials	Toshikazu ONO..... 208
--	------------------------

Molecular Mechanisms of Activation of ATR Kinase, a Master Regulator of DNA Damage Response	Eiji OHASHI..... 210
--	----------------------

Dual Stimuli-responsive Probes for Evaluation of Biofunctions.....	Koji MIKI..... 212
--	--------------------

《Toyota Riken Scholar Joint Research》

Elucidation of Molecular Mechanisms in Cancer Cells by Physicochemical Measurement of Picoliter Liquid.....	Junichi IKENOUCI and Yoichi OTSUKA..... 216
--	---

Synthesis and Electric Property of Novel Charge Transfer Complexes Using Box Shaped Perfluorocubane	Midori AKIYAMA and Takashi YANASE..... 218
--	--

Multi-scaled Design of Hybrid Nanoparticle Catalysts	Hiroshi NAKA, Takaaki SATO and Chika TAKAI-YAMASHITA..... 221
---	---

Evaluation of Excited-state Properties of Organic Molecules under Photoirradiation	Koji MIKI and Kenji SUGASE..... 225
---	-------------------------------------

《Specially Promoted Research Program》

Formulation of Novel “Interfacial Multipole Interaction” by Advanced Magnetic Spectroscopies and Theoretical Calculations	Jun OKABAYASHI..... 229
--	-------------------------

Exploring Chiral Spin Material Science	Yoshihiko TOGAWA..... 233
--	---------------------------

Mechanical Effect on All Solid State Energy Conversion Devices	Fumitada IGUCHI..... 237
---	--------------------------

List of Books	243
----------------------------	-----

List of Papers	244
List of Presentations	253
List of Awards	257