

# 目 次

## 《研究報告》

### 《豊田理研フェロー》

1,2,4-トリアゾリウムジメチルリン酸イオン液体の調湿機構の解明 .....	伊 藤 敏 幸.....	5
5元ブロック共重合体を作る二次元12回対称準周期タイリングの構造的特徴 .....	松 下 裕 秀.....	17
第一原理計算に基づく理論状態図の構築と準安定物質創成に関する研究 .....	大 谷 博 司.....	25
柔軟な水素結合による水と水の多様性の発現機構： CH <sub>4</sub> -CO <sub>2</sub> ハイドレートの相挙動，2相および3相共存.....	田 中 秀 樹.....	33
超伝導の未解決問題に挑む .....	前 野 悦 輝.....	41

### 《特 別 寄 稿》

化学反応における対称性の破れの理論 (14) PSIIのOECにおけるS <sub>3</sub> -[S <sub>4</sub> ]-S <sub>0</sub> 遷移過程のXFEL実験結果と酸素-酸素 結合反応の動的機構 .....	山 口 兆・宮 川 晃 一・庄 司 光 男.....	49
	磯 部 寛・川 上 貴 資・中 嶋 隆 人	

### 《豊田理研スカラー》

純粋な反芳香族性を示す窒素架橋型環状 $\pi$ 共役オリゴピリドンの創出.....	米 田 友 貴.....	60
リボソーム翻訳後修飾ペプチドにみられるD-アミノ酸の形成機構の解明.....	角 田 毅.....	62
金ナノ粒子と分子の相互作用を利用した光アンテナ材料の開発.....	今 枝 佳 祐.....	64
非芳香族／反芳香族スイッチングに基づく新奇応答系の構築 .....	島 尻 拓 哉.....	66
ナノ磁石-セラミクス界面の束縛状態とトンネル伝導に基づく超広帯域 電気-磁気-光学効果の発現と制御 .....	青 木 英 恵.....	68
ワイヤグリッド偏光子付きマルチコア光ファイバを用いた超小型・高分解能 ロータリエンコーダ .....	岡 谷 泰 佑.....	70
耐熱性と軟磁性を両立する磁気トンネル接合を用いた脳磁場センシング素子 の開発 .....	中 野 貴 文.....	72
高分子電気化学トランジスタ素子の特性制御と神経模倣素子応用 .....	山 本 俊 介.....	74
足場材コラーゲン分子のペプチド修飾により基底膜成分を付与した高機能化 口腔粘膜インビトロモデルの開発 .....	鈴 木 絢 子.....	76

タンパク質の基質特異性発現メカニズムを解明する分子シミュレーション 手法の開発：新規基質の合理的デザイン実現にむけて.....	原 田 隆 平.....	78
完全な非侵襲的かつ高特異性，正確度の高いストレス検知を目指して： イメージングと薄膜高分子による非侵襲的な植物のストレス計測 .....	木下奈都子.....	80
理論化学による無水水素イオン伝導プロセス機構の解明および材料開発への 理論提案 .....	堀 優 太.....	82
量子化された細胞の性質を解明するための高機能マイクロカプセルの創出.....	磯 崎 瑛 宏.....	84
ねじれヘテロ2層遷移金属カルコゲナイド結晶における光機能性の研究 .....	鈴 木 剛.....	86
ナノサイズの水滴を反応場としたグリーン微粒子作製技術の開発 .....	福 井 有 香.....	88
2次元ディラックノーダルライン物質の構造と電子状態および輸送特性の 解明.....	高山あかり.....	90
ラマン分光法とリピドミクス解析による大動脈瘤破裂予測因子の探索.....	杉山夏緒里.....	92
食資源のサステナビリティを拓く高開口率足場シートを用いた3次元組織 構築技術の開発 .....	堀 武 志.....	94
ヒト細胞とブタ細胞外マトリックスから成る小腸モデルの開発.....	根 岸 淳.....	96
シリカナノ粒子の多様な自己集合体を利用した高機能有機—無機ハイブリッド 材料の創製.....	高橋倫太郎.....	98
巨大磁気抵抗効果を示す酸化物トポロジカル物質の開発.....	平井大悟郎.....	100
量子ナノマテリアルとマイクロバブルによる近赤外応答性プローブ標的がん 治療評価法の確立 .....	佐 藤 和 秀.....	102
暗黒物質検出器高感度化のためのハイブリッド光センサーの開発 .....	風 間 慎 吾.....	104
バイオインスパイアード多孔質アンカーを介したポリマー／金属間接合の 構造最適化.....	ゾウ シャオユン.....	106
Fe-Ti 共晶合金へのCo添加による新規軽量高強度材料の開発.....	徳 永 透 子.....	108
液体金属中における様々な二物体間の平均力ポテンシャルの研究 .....	天 野 健 一.....	110
放電プラズマを利用した極超音速気流制御と燃焼を利用した能動的空力制御 への応用 .....	渡 邊 保 真.....	112
制約充足プログラミングと組合せテストを併用した離散最適化問題の求解手法 とその応用.....	盧 暁 南.....	114

正極／固体電解質界面の構築による高電圧正極反応の制御 .....	田 港 聡 .....	116
組織工学的人工腱開発のための筋－腱および腱－骨段階構造モデルの作製 .....	晝 河 政 希 .....	118
スマートフォニック結晶レーザーの開発 .....	メーナカ デゾイサ .....	120
環状分子 Pillar[n]arene を用いた多孔質性ネットワークポリマーの合成と フッ素化合物への吸着特性評価 .....	大 谷 俊 介 .....	122
光るプラスチック太陽電池の開発 .....	玉 井 康 成 .....	124
腫瘍免疫環境を可視化する光音響応答性多糖ナノ粒子型免疫アジュバントの 開発 .....	三浦理紗子 .....	126
極端紫外レーザー光電子分光による気液界面における物質の電子構造と電気 二重層の形成の研究 .....	山 本 遥 一 .....	128
紫外線吸収による C=C 二重結合の超高速光異性化反応過程の解明 .....	唐島秀太郎 .....	130
二酸化炭素資源化を目指した均一系金属－硫黄触媒の創出 .....	谷 藤 一 樹 .....	132
高周期 14 族元素－炭素間三重化学種の創製と応用：含高周期 14 族元素 $\pi$ 結合 と共役特性の解明 .....	行本万里子 .....	134
金属－カルバメート骨格の結晶化を利用した低濃度 CO <sub>2</sub> 回収手法の開発 .....	門田健太郎 .....	136
原子濃度制御による高性能カルコゲナイド熱電薄膜の創製 .....	石 部 貴 史 .....	138
3 次元空間を飛び回る UAV 同士の無線通信のための確率幾何を用いた通信 性能解析と飛行高度の最適化 .....	平 井 健 士 .....	140
電子顕微鏡で特定の細胞小器官を観察するための電子染色プローブ開発 .....	森 田 健 太 .....	142
高度な製造のための多成分液体の熱流体物理の解明 .....	王 振 英 .....	144
電子移動型金属錯体の創出と磁気電気物性制御 .....	関 根 良 博 .....	146
<b>《スカラー共同研究》</b>		
酸化還元状態と共役したタンパク質の液－液相分離の解析と制御を可能にする 分子ツールの開発 .....	池 田 将・吉田 紀 生・菅 瀬 謙 治 .....	150
化学気相蒸着法による強相関電子系 2 次元物質の基盤的合成技術の確立と 創発機能デバイスの創出 .....	柳 瀬 隆・福 地 厚・高牟礼光太郎 .....	153
多次元脂質分布情報を活かす多変量解析法の研究 .....	大 塚 洋 一・小 山 聡 .....	156
植物空腹・指令シグナル分子の機能解明と高機能性成長調整剤の開発 .....	重 田 育 照・田 畑 亮 .....	159

光技術と微細加工技術の融合による生体分子反応ダイナミクス解析 .....	永井萌土・中曽根祐介.....	161
光照射による特定反応誘導可能な新規試験管内生命現象解析ツールの構築と その評価 .....	河添好孝・金森功吏.....	165
相変化材料を活用した高機能蓄熱装置の最適設計.....	宮田喜久子・竹澤晃弘.....	168
高ひずみ化合物の精密分子合成に基づくメカノクロミックポリマーの開発 .....	石垣侑祐・百合野大雅・小野利和.....	172
再生医療を加速する細胞培養ツールの開発 ～ナノ細胞膜の編集・分析から細胞機能の制御～ .....	湊元幹太・岡本行広・境 慎司.....	175
液晶を用いたスピン機能開拓 .....	内田幸明・戸川欣彦.....	179
《エッセイ》		
トヨタとパラメトロン電子計算機FACOM202.....	石橋善弘.....	183
著書リスト .....		193
論文リスト .....		194
講演リスト .....		199
受賞リスト .....		202

# CONTENTS

## 《Research Reports》

### 《Fellow》

Elucidation of the Moisture Absorption Mechanism of 1,2,4-Triazolium Dimethylphosphate Ionic Liquids .....	Toshiyuki ITOH.....	5
Structural Features of Quasiperiodic Tiling with Dodecagonal Symmetry from Four-component Pentablock Polymers .....	Yushu MATSUSHITA.....	17
Construction of Theoretical Phase Diagram Based on First-principles Calculation and Study on Metastable Substance Formation .....	Hiroshi OHTANI.....	25
On the Phase Behaviors of CH <sub>4</sub> -CO <sub>2</sub> Binary Clathrate Hydrates: Two-phase and Three-phase Coexistences .....	Hideki TANAKA.....	33
Resolving Outstanding Puzzle in Superconductivity .....	Yoshiteru MAENO.....	41

### 《Specially Appointed Fellow》

Theoretical Investigations of Time-resolved SFX XFEL and FTIR Experiments of the S <sub>3</sub> -[S <sub>4</sub> ]-S <sub>0</sub> Transition and the Mechanism of the O-O Bond Formation in the OEC of PSII Kizashi YAMAGUCHI, Koichi MIYAGAWA, Mitsuo SHOJI, Hiroshi ISOBE.....	49
Takashi KAWAKAMI and Takahito NAKAJIMA	

### 《Toyota Riken Scholar》

“Purely” Antiaromatic Nitrogen-bridged $\pi$ -conjugated Oligopyridone .....	Tomoki YONEDA.....	60
Formation Mechanism of D-Amino Acid in Ribosomally Synthesized and Post-translationally Modified Peptides.....	Takeshi TSUNODA.....	62
Development of Optical Nano-antennas Based on the Coupling between Gold Nanoparticles and Functional Molecules.....	Keisuke IMAEDA.....	64
Construction of a Novel Response System Based on the Non-aromatic/ Anti-aromatic Switching.....	Takuya SHIMAJIRI.....	66
Broad Band Electro-magnetic and Opto-magnetic Performance Tunneling Electron Bond State at Magnetic Metal-ceramics Interface.....	Hanae AOKI.....	68
Ultra-compact, High-resolution Rotary Encoders Using Multicore Optical Fibers with Wire Grid Polarizers .....	Taiyu OKATANI.....	70
Magnetoencephalography Sensor Based on Magnetic Tunnel Junctions with High Thermal Tolerance and Soft Magnetic Properties .....	Takafumi NAKANO.....	72
Performance Tuning of Organic Electrochemical Transistors and Application to Neuromorphic Devices.....	Shunsuke YAMAMOTO.....	74

Development of Highly Functionalized Oral Mucosa <i>In Vitro</i> Model with Basement Membrane Component by Peptide-coated Collagen Scaffold.....	Ayako SUZUKI.....	76
Development of a Molecular Simulation Method for Elucidating the Substrate Specificity of Protein Toward Rational Design of New Substrates .....	Ryuhei HARADA.....	78
Non-invasive, Real-time Plant Stress Measurement by Applying Ultra-thin Electrodes Using Flexible Thin Polymer Films and Combining Fluorescence Imaging .....	Natsuko KINOSHITA.....	80
Elucidation of Anhydrous Hydrogen Ion Conduction Process Mechanism by Theoretical Chemistry and Theoretical Proposal for Materials Design.....	Yuta HORI.....	82
Highly Functional Microcapsules for Elucidating Quantized-cell Properties .....	Akihiro ISOZAKI.....	84
Optical Properties of Twisted Hetero-structural Bilayer Transition Metal Dichalcogenides .....	Takeshi SUZUKI.....	86
Preparation of Green Polymer Particles Using Water Nanodroplets as a Reactor .....	Yuuka FUKUI.....	88
Study of Atomic Structure, Electronic Structure and Transport Properties of Two-dimensional Dirac Nodal Line Materials .....	Akari TAKAYAMA.....	90
Institute for Advanced Research of Biosystem Dynamics, Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University.....	Kaori SUGIYAMA.....	92
Development of a 3D Tissue Assembly Technology Employing a High Porosity Scaffold toward Food Supply Sustainability .....	Takeshi HORI.....	94
Development of a Small Intestine Model Consisting of Human Cells and Porcine Extracellular Matrix .....	Jun NEGISHI.....	96
Creating Organic–Inorganic Hybrid Materials of High Performance Using Various Self-assembly of Silica Nanoparticles.....	Rintaro TAKAHASHI.....	98
Material Investigation on Oxide Topological Materials with Extremely Large Magnetoresistance.....	Daigorou HIRAI.....	100
Quantum Nanomaterials and Nanobubbles for Evaluation of Near-infrared Photoimmunotherapy .....	Kazuhide SATO.....	102
Development of a Hybrid Photodetector for Direct Dark Matter Experiments .....	Shingo KAZAMA.....	104
Structural Optimization for Bonding between Polymers and Metals via Bioinspired Porous Anchors .....	Shaoyun ZHOU.....	106
Development of Novel Light High-strength Fe-Ti Eutectic Alloys by Co Addition.....	Toko TOKUNAGA.....	108

Study of Potentials of Mean Forces between Various Two Bodies in Liquid Metals .....	Ken-ichi AMANO.....	110
Plasma-assisted Hypersonic Flow Control and Application to Active Flow Control with Combustion .....	Yasumasa WATANABE.....	112
Discrete Optimization Solving Methods by Combining Constraint Satisfaction Programming and Combinatorial Testing and Their Applications .....	Xiao-Nan LU.....	114
Control of High Voltage Cathode Reaction of Lithium Secondary Batteries by Construction of Solid Electrolyte/Electrode Interface .....	Sou TAMINATO.....	116
Fabrication of Muscle-tendon and Tendon-bone Junction Models for Tissue-engineered Tendon Development .....	Masaki HIRUKAWA.....	118
Development of Smart Photonic Crystal Laser .....	Menaka DE ZOYSA.....	120
Synthesis of Porous Network Polymers Containing Pillar[n]arenes and Their Adsorption Properties toward Fluorinated Organic Compounds .....	Shunsuke OHTANI.....	122
Development of Highly Emissive Polymer Solar Cells.....	Yasunari TAMAI.....	124
Development of Adjuvant-conjugated and Photoacoustic Imaging-responsive Polysaccharide Nanogel Probe for Diagnosis of Tumor Immune Environment .....	Risako MIURA.....	126
Extreme Ultraviolet Laser Photoelectron Spectroscopy Study of the Electronic Structure of Materials at the Gas-liquid Interface and the Formation of the Electric Double Layer .....	Yo-ichi YAMAMOTO.....	128
The Elucidation of Ultrafast Photoisomerization Process of C=C Double Bond Induced by UV Absorption .....	Shutaro KARASHIMA.....	130
Development of Homogeneous Metal-sulfur Catalysts for Carbon Dioxide Utilization .....	Kazuki TANIFUJI.....	132
Creation and Application of Triply Bonded Species between a Heavy Group-14 Element and a Carbon: Elucidation of $\pi$ -Bonds Containing Heavier Group-14 Elements and their Properties.....	Mariko YUKIMOTO.....	134
Development of Capture of Diluted CO <sub>2</sub> via Crystallization of Metal-Carbamate Frameworks .....	Kentaro KADOTA.....	136
Development of High Performance Chalcogenide Thermoelectric Film by Tuning Atomic Concentration .....	Takafumi ISHIBE.....	138
Stochastic Geometry-based Performance Analysis and UAV Height Optimization in 3D Space for UAV-to-UAV Communications .....	Takeshi HIRAI.....	140
Staining Probe for an Observation of Cell Organelle by Using Electron Microscope .....	Kenta MORITA.....	142

Revealing Thermofluid Physics of Multicomponent Liquids for Advanced Fabrication .....	Zhenying WANG.....	144
Construction of Coordination Metal Complex Exhibiting Electron Transfer and Control of the Magnetic and Electric Property .....	Yoshihiro SEKINE.....	146
<b>《Toyota Riken Scholar Joint Research》</b>		
Development of Molecular Tools to Analyze and Control the Liquid-liquid Phase Separation of Proteins Conjugated with Redox States .....	Masato IKEDA, Norio YOSHIDA and Kenji SUGASE.....	150
Synthesis of Strongly Correlated Two-dimensional Materials by Chemical Vapor Deposition and Application to Emergent Functional Devices .....	Takashi YANASE, Atsushi FUKUCHI and Kotaro TAKAMURE.....	153
Multivariate Analysis to Take Advantage of Multidimensional Lipids' Distribution Information.....	Yoichi OTSUKA and Satoshi OYAMA.....	156
Functional Analysis of Plant Hunger/Command Signals and Development of High-performance Growth Regulators.....	Yasuteru SHIGETA and Ryo TABATA.....	159
Novel Analysis of Biomolecular Reactions by Optical Technologies and Microfabrication .....	Moeto NAGAI and Yusuke NAKASONE.....	161
Establishment and Evaluation of a Novel Tool to Study Life Sciences by Light Irradiation .....	Yoshitaka KAWASOE and Takashi KANAMORI.....	165
Design Optimization of Phase Change Material Based High-performance Heat Storage Device .....	Kikuko MIYATA and Akihiro TAKEZAWA.....	168
Development of Mechanochromic Polymers Based on Precise Molecular Synthesis of Highly Strained Compounds .....	Yusuke ISHIGAKI, Taiga YURINO and Toshikazu ONO.....	172
Development of Cell Culture Tools for Realization of Regenerative Medicine ~ Modification/Analysis of Nano-cell Membrane to the Control of Cell Function ~ .....	Kanta TSUMOTO, Yukihiro OKAMOTO and Shinji SAKAI.....	175
Exploration of Spin Functions Using Liquid Crystals .....	Yoshiaki UCHIDA and Yoshihiko TOGAWA.....	179
<b>Essay</b> .....		183
<b>List of Books</b> .....		193
<b>List of Papers</b> .....		194
<b>List of Presentations</b> .....		199
<b>List of Awards</b> .....		202