

**2015**

- 1 D. Xu, Y. Bin, K. Tashiro, "Detailed analysis of temperature dependences of spherulite morphology and crystallite orientation of poly(vinylidene fluoride) via a combinatorial method", *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.*, **2015**, *53*, 253-261.
- 2 K. Tokumitsu, T. Matuura, S. Kawasaki, K. Tashiro, "A Study on Crystallization Behavior for Poly(Lactic Acid) in Addition of Cardo Materials", *J. Soc. Mat. Sci., Jpn.*, **2015**, *64*, 1-6.
- 3 K. Tashiro, H. Kitai, S. M. Saharin, A. Shimazu, T. Itou, "Quantitative Crystal Structure Analysis of Poly(vinyl Alcohol)-Iodine Complexes on the Basis of 2D X-ray Diffraction, Raman Spectra, and Computer Simulation Techniques", *Macromolecules*, **2015**, *48*, 2138-2148.
- 4 P. Jariyasakoolroj, K. Tashiro, W. Hai, H. Yamamoto, W. Chinsirikul, N. Kerddonfag, S. Chirachanchai, "Isotropically small crystalline lamellae induced by high biaxial-stretching rate as a key microstructure for super-tough polylactide film", *Polymer*, **2015**, *68*, 234-245.
- 5 P. Nimmanpipug, T. Laosombat, V. Sanghiran Lee, S. Vannarat, S. Chirachanchai, J. Yana, K. Tashiro, "Proton transfer mechanism of 1,3,5-tri(2-benzimidazolyl) benzene with a unique triple-stranded hydrogen bond network as studied by DFT-MD simulations", *Chem. Eng. Sci.*, **2015**, *137*, 404-411.
- 6 J. Yana, S. Chirachanchai, C. Jarumaneeroj, V. S. Lee, K. Kodchakorn, K. Tashiro, P. Nimmanpipug, "DFT Study of Proton Transfer in Methyl Urocanate and Butyl Urocanate", *Macromolecular Symposia*, **2015**, *354*, 99-103.
- 7 S. Kummara, K. Tashiro, T. Monma, K. Horita, "Isotope Effect on the Melt-Isothermal Crystallization of Polyoxymethylene D/H Random Copolymers and D/H Blend Samples", *Macromolecules*, **2015**, *48*, 8070-8081.
- 8 S. Kummara, K. Tashiro "Phenomenological study of the isotope effect on the equilibrium melting point of polymer crystal", *Polymer*, **2015**, *80*, 138-145.
- 9 S. M. Saharin, T. Takahama, S. Nonogaki, K. Saito, K. Tashiro, "Effect of OH Segmental Length on the Iodine Complex Formation of Ethylene-Vinyl Alcohol Random Copolymers", *Macromolecules*, **2015**, *48*, 8867-8876.

**2016**

- 10 P. Tanphibal, K. Tashiro, S. Chirachanchai, Molecular assembly of highly symmetric molecules under a hydrogen bond framework controlled by alkyl building blocks: a simple approach to fine-tune nanoscale structures", *Soft Matter*, **2016**, *12*, 486-491.
- 11 S. M. Saharin, T. Takahama, S. Nonogaki, K. Saito, K. Tashiro, "The effect of counter cation species on the formation of various crystal forms and their phase transition behavior of poly(vinyl alcohol)-iodine complex", *Polymer*, **2016**, *89*, 81-93.
- 12 J. Hu, K. Tashiro, "Relation between higher-order structure and crystalline phase transition of oriented isotactic polybutene-1 investigated by temperature-dependent time-resolved simultaneous WAXD/SAXS measurements",

*Polymer*, **2016**, *90*, 165-177.

- 13 H. Wang, K. Tashiro, “Reinvestigation of Crystal Structure and Intermolecular Interactions of Biodegradable Poly(3-Hydroxybutyrate)  $\alpha$ -Form and the Prediction of Its Mechanical Property”, *Macromolecules*, **2016**, *49*, 581-594.
- 14 K. Tashiro, J. Hu, H. Wang, M. Hanesaka, S. Alberto, “Refinement of the Crystal Structures of Forms I and II of Isotactic Polybutene-1 and a Proposal of Phase Transition Mechanism between Them”, *Macromolecules*, **2016**, *49*, 1392-1404.
- 15 T. Yoshioka, K. Tashiro, N. Ohta, “Molecular Orientation Enhancement of Silk by the Hot-Stretching-Induced Transition from  $\alpha$ -Helix-HFIP Complex to  $\beta$ -Sheet”, *Biomacromolecules*, **2016**, *17*, 1437-1448.
- 16 S. Kummara, K. Tashiro, “Isotope effect on the structural evolution process in the isothermal crystallization phenomenon of polyoxymethylene”, *Polymer*, **2016**, *90*, 76-88.
- 17 P. Tanphibal, K. Tashiro, S. Chirachanchai, “Constructiong  $\pi$ -Electron-Conjugated Diarylbutadiyne-Based Polydiacetylene under Molecular Framework Controlled by Hydrogen Bond and Side-Chain Substituent Position”, *Macromol. Rapid Commun.*, **2016**, *37*, 685-690.
- 18 J. Hu, K. Tashiro, “Time-Resolved Imaging of the Phase Transition in the Melt-Grown Spherulites of Isotactic Polybutene-1 as Detected by the Two-Dimensional Polarized IR Imaging Technique”, *J. Phys. Chem., B*, **2016**, *120*, 4689-4698.
- 19 T. Takahama, S. M. Saharin, K. Tashiro, “Details of the intermolecular interactions in poly(vinyl alcohol)-iodine complexes as studied by quantum chemical calculations”, *Polymer*, **2016**, *99*, 566-579.

## **2017**

- 20 H. Yamamoto, K. Tashiro, K. Ishino, M. Takahashi, R. Endo, M. Asada, Y. Li, K. Katsube, T. Ishii, , “Crystal structures and phase transition behavior of Poly(nonamethylene terephthalamide) and its model compounds”, *Polymer*, **2017**, *116*, 378-394.
- 21 T. Yoshioka, K. Tashiro, N. Ohta, “Observation of Water-Stimulated Supercontraction of Uniaxially-Oriented Poly(vinyl Alcohol) and the Related Hierarchical Structure Change Revealed by the Time-Resolved WAXD/SAXS Measurements”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 2803-2813.
- 22 H. Wang, J. Zhang, K. Tashiro, Phase Transition Mechanism of Poly(L-Lactic Acid) among the  $\alpha$ ,  $\delta$ , and  $\beta$  Forms On the Basis of the Reinvestigated Crystal Structure of the  $\beta$  Form, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 3285-3300.
- 23 M. Ishinabe, Y. Yamashita, K. Tsutsumiuchi, K. Tashiro, K. Imaeda, M. Kawamura, “Effect of Crystal Status Transformation on the Thermal Shrinkage Characteristics and Extensional Characteristics of Acetaldehyde Solvent-Induced Crystallization PET Film”, *Trans. Mat. Res. Soc. Japan*, **2017**, *42*, 97-101.
- 24 K. Tashiro, N. Kouno, H. Wang, H. Tsuji, “Crystal Structure of Poly(lactic acid) Stereocomplex: Random Packing Model of PDLA and PLLA Chains As Studied by X-ray Diffraction Analysis”, *Macromolecules*, **2017**,

50, 8048–8065.

- 25 K. Tashiro, H. Wang, N. Kouno, J. Koshobu, K. Watanabe, “Confirmation of the X-ray-Analyzed Heterogeneous Distribution of the PDLA and PLLA Chain Stems in the Crystal Lattice of Poly(lactic acid) Stereocomplex on the Basis of the Vibrational Circular Dichroism IR Spectral Measurement”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 8066–8071.
- 26 W. Mengfan, K. Tashiro, Y. Ozaki, “Reinvestigation of the  $\beta$ -to- $\alpha$  Crystal Phase Transition of Poly(butylene adipate) by the Time-Resolved X-ray Scattering and FTIR Spectral Measurements in the Temperature Jump Process”, *Macromolecules*, **2017**, *50*, 3883-3889.
- 27 X. Zhang, L. Santonja-Blasco, K. B. Wagener, E. Boz, M. Tasaki, K. Tashiro, R. G. Alamo, “Infrared Spectroscopy and X-ray Diffraction Characterization of Dimorphic Crystalline Structures of Polyethylenes with Halogens Placed at Equal Distance along the Backbone”, *J. Phys. Chem. B*, **2017**, *121*, 10166-10179.
- 28 T. Yoshioka, T. Kameda, K. Tashiro, N. Ohta, A. K. Schaper, “Transformation of Coiled  $\alpha$ -Helices into Cross- $\beta$ -Sheets Superstructure”, *Biomacromolecules*, **2017**, *18*, 3892-3903.

## 2018

- 29 M. A. Barique, E. Tsuchida, A. Ohira, K. Tashiro, “Effect of Elevated Temperatures on the States of Water and Their Correlation with the Proton Conductivity of Nafion”, *ACS Omega*, **2018**, *3*, 349-360.
- 30 K. Tashiro, K. Kusaka, T. Hosoya, T. Ohhara, M. Hanesaka, Y. Yoshizawa, H. Yamamoto, N. Niimura, I. Tanaka, K. Kurihara, R. Kuroki, T. Tamada, “Structure Analysis and Derivation of Deformed Electron Density Distribution of Polydiacetylene Giant Single Crystal by the Combination of X-ray and Neutron Diffraction Data”, *Macromolecules*, **2018**, *51*, 3911–3922.
- 31 M. Tosaka, K. Tashiro, “Crystal Polymorphism and Structure Models of Poly(dimethylsiloxane),” *Polymer*, **2018**, *153*, 507–520.
- 32 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Sugimoto, “Study of Phase Transition and Ultimate Mechanical Properties of Orthorhombic Polyoxymethylene Based on the Refined Crystal Structure,” *Polymer*, **2018**, *153*, 474–484.

## 2019

- 33 K. Tashiro, “Quantitative Evaluation of Deformed Electron Density Distribution of Polydiacetylene Crystal on the Basis of the Organized Combination of X-ray and Neutron Diffraction Data,” *MLF Annual Report 2017. Vol. 2: Materials and Life Science Experimental Facility, Research and Development Highlights*, **2019**, 26–28.
- 34 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Funaki, J. Hu, “Synchrotron Microbeam X-ray Scattering Study of the Crystallite Orientation in the Spherulites of Isotactic Poly(butene-1) Crystallized Isothermally at Different Temperatures”, *Polym. J.*, **2019**, *51*, 143–153.
- 35 K. Tashiro, T. Yoshioka, H. Yamamoto, H. Wang, E. M. Woo, K. Funaki, H. Murase, “Relationship Between Twisting Phenomenon and Structural Discontinuity of Stacked Lamellae in the Spherulite of Poly(ethylene adipate) as Studied by the Synchrotron X-ray Microbeam Technique,” *Polym. J.*, **2019**, *51*,

131–141.

- 36 K. Tashiro, H. Yamamoto, K. Sugimoto, T. Takahama, M. Tanaka, M. Hasegawa, “Experimental Determination of the Geometrical Relation between Monomer and Polymer Species of 2,5-Distyrylpyrazine Single Crystal in the Topotactic Photoinduced Polymerization Reaction,” *Macromolecules*, **2019**, 2189–2202.
- 37 K. Tashiro, M. Gakhutishvili, “Crystal Structure of Cellulose-Iodine Complex,” *Polymer*, **2019**, *171*, 140–148.
- 38 S. Phongtamrug, K. Tashiro, “X-ray Crystal Structure Analysis of Poly(3-hydroxybutyrate)  $\beta$ -Form and the Proposition of a Mechanism of the Stress-Induced  $\alpha$ -to- $\beta$  Phase Transition,” *Macromolecules*, **2019**, *52*, 2995–3009.
- 39 T. Yoshioka, T. Tsubota, K. Tashiro, A. Jouraku, T. Kameda, “A Study of the Extraordinarily Strong and Tough Silk produced by Bagworms”, *Nat. Commun.*, **2019**, *10*, 1469–1479.

#### 学会発表

##### 国内

##### 2016

- 1 田代孝二, 山元博子, 王海, 太田昇, 「透過赤外・放射光広角小角 X 線散乱同時時間分解測定に基づくイソタクティックポリプロピレンのメルト等温結晶化過程における構造発展追跡」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, *65*, 1Pc029.
- 2 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「シルク繊維の引張り過程における構造変化と力学挙動の関係」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, *65*, 1Pc039.
- 3 吉岡弥生, 田代孝二, 「ナノファイバー状芳香族ポリアミドの形成過程における構造変化」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, *65*, 1Pf076.
- 4 田代孝二, S. M. Saharin, 高濱智彦, 「ポリビニルアルコール・ヨウ素錯体の新しい結晶型の検出と構造転移機構」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, *65*, 1Ph032.
- 5 田代孝二, S. Kumbara, 「一連の D/H ランダム共重合体を用いたポリオキシメチレンのメルト等温結晶化速度のスケーリング」, 高分子学会予稿集 (神戸), **2016**, *65*, 1Pg037.
- 6 田代孝二, H. Jian, 「イソタクティックポリブテン-1 の II 型—I 型結晶相転移機構解明」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 1C05.
- 7 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「応力ひずみ特性の異なる二種類のシルクの延伸時構造変化の比較から考えるシルクの構造と物性の関係性」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 2C16.
- 8 河原豊, 藤井秀彰, 吉岡太陽, 田代孝二, 渡邊千咲, 玉田靖, 「樹状構造を発現した液状絹エアロゲルの水溶性」, 繊維学会年次大会 (東京), **2016**, 2C016.
- 9 高濱智彦, 田代孝二, 「PVA-ヨウ素錯体の構造と形成機構に関する量子化学的検討」, 高分子計算機科学研究会 (東京), **2016** (招待講演).

- 10 田原大輔, 田代孝二, 「力学変形過程におけるエラストマーの高次構造変化: モンテカルロシミュレーション法に基づく 2 次元広角小角 X 線散乱図形実測データの再現」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H15.
- 11 田代孝二, 山元博子, 田原大輔, W. Hai, 吉岡太陽, 「高分子の溶融等温結晶化における構造発展過程と中間相の役割」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H12.
- 12 田代孝二, 「高分子・ヨウ素錯体の結晶構造と相互作用」, 高分子討論会予稿集 (神奈川), **2016**, 65, 1H11.
- 13 田代孝二, 高濱智彦, 「種々の高分子・ヨウ素錯体の結晶構造解析と分子間相互作用」, 日本結晶学会 (茨城), **2016**, p. 33.
- 14 山元博子, 田代孝二, 浅田光則, 勝部勝義, 「ポリノナメチレンテレフタルアミドとそのモデル化合物の結晶相転移挙動」, 東海支部若手繊維研究会 (岐阜), **2016**, P. 7.
- 15 山元博子, 田代孝二, 浅田光則, 勝部勝義, 「ポリノナメチレンテレフタルアミドとそのモデル化合物の結晶相転移挙動」, 東海支部若手繊維研究会 (岐阜), **2016**, P. 7.

## 2018

- 16 田代孝二, 山元博子, 杉本邦久, 長谷川正木, 「ジスチリルピラジンモノマー及びポリマー単結晶の X 線構造解析の成功と光固相重合反応機構の確立」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pe033 (5/23-25).
- 17 田代孝二, 山元博子, 杉本邦久, 「放射光 X 線構造解析および密度汎関数法による熱力学関数計算に基づくポリオキシメチレン直方晶-三方晶結晶相転移機構の検討」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pd036 (5/23-25).
- 18 田代孝二, W. Mengfan, 「配向非晶ポリ酢酸ビニル試料における結晶様ヨウ素錯体の生成」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pf034 (5/23-25).
- 19 田代孝二, 山元博子, 青山光輝, 関口博史, 岩本裕之, 「放射光広角・小角 X 線散乱および透過赤外スペクトルの同時時間分解測定に基づくポリフッ化ビニリデン階層構造の高電場印加下での挙動」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pc037 (5/23-25).
- 20 高濱智彦, 田代孝二, 「ポリビニルアルコール=ヨウ素錯体における水素結合と赤外スペクトル—量子化学計算に基づく検討—」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pf032 (5/23-25).
- 21 田原大輔, 田代孝二, 「実測広角・小角 X 線散乱データのコンピューターシミュレーション技法に基づく高分子 3 次元高次構造解析の展開」, 高分子学会年次大会 (名古屋), **2018**, 67, 1Pe027 (5/23-25).
- 22 田代孝二, 「ポリ乳酸の結晶相転移に関する構造科学的考察」, 高分子学会討論会 (札幌), 67(2), ROMBUNNO. 2Y04 (9/12-14).
- 23 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「ポリビニルアルコールおよび関連高分子のヨウ素錯体についての構造科学的考察」, 高分子学会討論会 (札幌), **2018**, 67(2), ROMBUNNO. 2Q07 (9/12-14).

- 24 田代孝二, 高濱智彦, W. MengFan, 「高分子—ヨウ素錯体の構造形成機構と分子間相互作用に関する量子化学的考察」, 高分子学会討論会 (札幌), **2018**, 67(2), ROMBUNNO. 2K16 (9/12-14).
- 25 吉岡太陽, 亀田恒徳, 田代孝二, 「放射光 X 線解析から分かってきたシルクの高タフネス性発現における階層的構造の役割」, 高分子学会討論会 (札幌), **2018**, 67(2), ROMBUNNO. 2I10 (9/12-14).
- 26 田代孝二, 山元博子, 日下勝弘, 「X 線および中性子回折データの組み合わせによる合成高分子の結合電子密度分布の実験的評価と密度汎関数法による検討」, 日本中性子化学会第 18 回年会 (茨城), **2018**, P2-15 (12/4-5).
- 27 MengFan Wang, 田代孝二, 「非晶性ポリ酢酸ビニルが形成する結晶性ヨウ素錯体の構造化学的検討」, 第 32 回東海支部若手繊維研究会 (名古屋), **2018**, P-1 (12/8).

## 2019

- 28 田代孝二, 山元博子, 吉岡太陽, 船城健一, E. M. Woo, 「高分子球晶の不連続構造とラメラねじれとの関わり」, 第 32 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (福岡), **2019**, 1C002 (1/9-11).
- 29 田代孝二, 「高分子の結晶相転移と階層構造変化」, 名古屋シンクロトロンシンポジウム (名古屋), **2019**, (招待講演).

## 国際会議

- 1 K. Tashiro, “Novel Concepts in the Study of Phase Transition and Crystallization Phenomenon of Polymers Viewed from the Wide Hierarchical Points”, MACRO2017, Trivandrum (India) **2017** (Invited Lecture).
- 2 K. Tashiro, “A new aspect of crystal phase transition and its relation with the hierarchical structure change of crystalline polymers”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (Bangkok), (基調講演).
- 3 K. Tashiro, “Hierarchical Structure of Polymer Spherulites Detected by Synchrotron X-ray Microbeam and 2D FTIR Spectral Techniques,” The International Conference on Advanced and Applied Petroleum, Petrochemicals, and Polymers 2018 (Bangkok, Thailand), **2018** (12/18–20), (基調講演).
- 4 K. Tashiro, “Development of Simultaneous Measurement System of FTIR, WAXD and SAXS Data for the Study of Hierarchical Structure Change of Polymers Subjected to the Various External Fields,” 2018 Synchrotron Radiation in Polymer Science (2018 SRPS: SRPS VII) (Gyeongju, Korea), **2018** (9/4–7), (招待講演).

## 総説

- 1 田代孝二, 「ポリ乳酸ステレオコンプレックスの結晶構造確定における赤外円偏光二色性スペクトルの役割」, JASCO Report, **2018**, 60, 1–8.
- 2 田代孝二, 吉岡太陽, 「絹の結晶構造・高次構造と物性」(展望「構造タンパク質: 近くて遠い構造材料」), 高分子, **2018**, 67, 131–133.
- 3 田代孝二, 「熱可塑性樹脂の弾性率と強度の更なる向上に必要な因子」, 成形加工, **2019**, 印刷中.

## 図書

- 1 田代孝二, 「日本の高分子科学技術史第2巻 (高分子学会編)」, 研究史2 「高分子科学の発展を支えた分析器の進歩 (概観)」, **2016**, s8-s11.
- 2 K. Tashiro, “Microscopically Viewed Relationship Between Structure and Mechanical Property of Crystalline Polymers: An Important Guiding Principle for the Development of Super Fibers”, in “High-Performance and Specialty Fibers” (The Society of Fiber Science and Technology, Japan), **2016**, Chapter 6, pp. 95-108.
- 3 K. Tashiro, “Progress in Structure Analysis Techniques of Fibers”, in “High-Performance and Specialty Fibers” (The Society of Fiber Science and Technology, Japan), **2016**, Chapter 2, p. 21-47.