

# 目 次

## 《研究報告》

### 《豊田理研フェロー》

- ナノカーボンからの電界放出と新機能探索：グラフェンエッジ電子軌道の観察、  
低速投射電子顕微鏡の試作、極細CNTの生成 ..... 斎藤 弥八... 5

- バナジン酸ビスマス薄膜における水の光電気化学的酸素発生反応の活性化と  
励起光強度依存性のメカニズム ..... 松本 吉泰... 13

- 量子スピン液体の研究 ..... 今田 正俊... 21

- CoDELMAを用いた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の開発 ..... 大門 寛... 31

- ゆらぎで探る溶液の混合状態 ..... 西川 恵子... 39

- 高い調湿機能を持つ第4級アンモニウム塩イオン液体のデザイン ..... 伊藤 敏幸... 49

- 多元ブロック共重合体による二次元新規周期・準周期構造の構築 ..... 松下 裕秀... 59

- 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... 67

- 柔軟な水素結合による水と氷の多様性の発現機構：  
低密度氷の負の熱膨張率の起源 ..... 田中 秀樹... 77

### 《豊田理研客員フェロー》

- 顕微レーザー光化学の研究展開 ..... 喜多村 昇... 87

- $\mu$ SRの生命機能解析への展開  
—タンパク質構成要素におけるプロトンダイナミクス解析 ..... 菅原 洋子... 97

## 《特 別 寄 稿》

- 化学反応における対称性の破れの理論（12）：光合成水分解反応中間体の  
結合クラスター (DLPNO Coupled-Cluster (CC) SD ( $T_0$ ) ) 計算  
..... 山口 兆・宮川 晃一・庄司 光男... 107  
機部 寛・川上 貴資・中嶋 隆人

### 《豊田理研スカラー》

- スピニラギによる3次元スピニ情報イメージング分光法の開発 ..... 鍛治 恒奈... 130

- ハロゲン化物イオン含有層状複水酸化物のアニオン電池用新規電極材料への応用  
..... ナタリー カロリナ・ロゼロナバロ... 132

水中ラジカル反応を利用する光機能性金属ナノ酸化物作製手法の開発 .....	張 麗 華...	134
精密超音波測定法による多チャンネル近藤効果の実証 .....	柳 澤 達 也...	136
マグノンダイオード材料の開発 .....	吉 田 紘 行...	138
クエン酸鉄多核錯体を前駆体とする炭化鉄クラスター合成法の開発 .....	脇 坂 聖 憲...	140
3d-e <sub>g</sub> 軌道に1つの電子を有する層状ニッケル酸化物における超伝導物質探索 .....	河 底 秀 幸...	142
多価不飽和脂肪酸代謝物の自在合成法の開発と応用 .....	齋藤 雄太朗...	144
マテリアルズインフォマティクスによるポリマー電気物性予測 .....	佐 藤 正 寛...	146
Ambiphilicパイ共役系化合物の迅速合成法の開発と機能開拓 .....	鷹 谷 純...	148
生体ナノ空間を活用した高分子精密合成法の開拓 .....	佐 藤 浩 平...	150
金属絶縁体転移を利用した熱スイッチング材料の創出 .....	氣 谷 卓...	152
インバータ一体型フレキシブル誘導加熱システムの創成 .....	青 山 真 大...	154
次世代シークエンサーを用いた船底塗料の防汚性評価法の確立 .....	広 瀬 侑...	156
冷却原子気体における連結ジョセフソン振動子の同期現象 .....	川 口 由 紀...	158
強くしなやかな人工腱をつくる—コラーゲンとエラスチンの機能的複合化技術創成 .....	前田 英次郎...	160
狭バンドギャップと安定性を兼ね備えた芳香族炭化水素の創出 .....	福 井 譲 人...	162
金属元素を含まない機能性近赤外発光素子の開発 .....	村 井 征 史...	164
単核モリブデン光触媒を用いた二酸化炭素の選択的光還元反応の開発と機構解明 .....	鄭 知 恩...	166
エネルギー一ハーベスティング向けの0 Vオン電圧を有する高効率p型GaNゲート AlGaN/GaN整流用ダイオード .....	ジャン ユウェイ...	168
ポリオキソメタレートを基盤とした新しい分子性導体の開発 .....	植 村 一 広...	170
強化学習を用いた動的な通信環境での符号化制御 .....	路 姫...	172
上皮細胞の立体構造に基づいた高速細胞毒性検出システム .....	上 野 遼 平...	174
イオン注入時の温度変化による量子通信光波長帯固体欠陥中心作製と発光特性評価 .....	田 嵐 俊 之...	176

応力で開拓する新規強磁性ユウロピウム化合物とその磁気異方性の解明 .....	高 津 浩...	178
光で制御する液—液相分離と生命機能 .....	中曾根 祐介...	180
ナノ構造磁性体中の輻射場とマグノン励起の空間的な相関に起因するマグノン流と 光学応答 .....	横 山 知 大...	182
ハイパースペクトルイメージングによる光メカニカル機能材料の不均一反応速度論の 解明 .....	五月女 光...	184
求電子的アミノ化を鍵とする非天然型 $\alpha$ -アミノ酸の立体網羅的不斉合成 .....	平 野 康 次...	186
光異性化材料のナノ光反応法の創出と光駆動トランジスタへの展開 .....	馬 越 貴 之...	188
アクチンのキラルな動態による細胞キラリティ形成機構の解明 .....	稻木 美紀子...	190
分子の配座ダイナミクスを基盤とする純有機液体りん光材料の開発 .....	谷 洋 介...	192
ハロゲン系元素を骨格に持つナトリウムイオン伝導固体電解質の探索 .....	大 野 真 之...	194
新規II-III-V-VI族化合物半導体による長寿命なブライト励起子の創製 .....	板 垣 奈 穂...	196
正確な相同性依存的修復の試験管内再構成による理解 .....	高 橋 達 郎...	198
植物におけるDNAメチル化変異の遺伝的基盤の探索 .....	佐々木江理子...	200
《特定課題研究》		
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 ...	205
著書リスト .....		211
論文リスト .....		212
講演リスト .....		222
受賞リスト .....		227

# CONTENTS

## 《Research Reports》

### 《Fellow》

Field Emission from Nanocarbon and its Novel Features Exploitation: Observation of Electronic Orbitals at Graphene Edges, Experimental Manufacture of Low-energy Projection Electron Microscope, and Formation of Ultra-slender CNTs .....	Yahachi SAITO.....	5
Mechanisms of Activation and Excitation Light Intensity Dependence of Photoelectrochemical Oxygen Evolution Reaction from Water at Bismuth Vanadate Thin Film .....	Yoshiyasu MATSUMOTO.....	13
Studies on Quantum Spin Liquids .....	Masatoshi IMADA.....	21
Development of Atomic-resolution Holography Microscope for Analysis of Composition and Stereoscopic Atomic Structure in Nano Region Using CoDELMA .....	Hiroshi DAIMON.....	31
Mixing Scheme of Solutions Probed via Fluctuations.....	Keiko NISHIKAWA.....	39
Design of Quaternary Ammonium Ionic Liquids with High Dehumidification Capability .....	Toshiyuki ITOH.....	49
Creation of New Periodic and Quasiperiodic Tiling Patterns from Multiblock Polymers .....	Yushu MATSUSHITA.....	59
Construction of Theoretical Phase Diagram Based on First-principles Calculation and Study on Metastable Substance Formation.....	Hiroshi OHTANI.....	67
Polymorphism of Ice Arising from Flexible Hydrogen Bonds: Characteristics of Vibrational Modes Attributing to Negative Thermal Expansivity .....	Hideki TANAKA.....	77

### 《Visiting Fellow》

A Study on Laser Microchemistry.....	Noboru KITAMURA.....	87
Muon Spin Spectroscopy for Research on Biological Functions — Analysis of Proton Dynamics of Protein Components.....	Yoko SUGAWARA.....	97

### 《Specially Appointed Fellow》

Coupled Cluster (CC) Single and Double (SD) Purterbative Triple ( $T_0$ ) Calculations by the Use of the Domain-based Local Pair Natural Orbital (DLPNO) for Reaction Intermediates of Water Oxidation in Oxygen Evolution Complex (OEC) of Photosystem II (PSII) .....	Kizashi YAMAGUCHI, Koichi MIYAGAWA, Mitsuo SHOJI.....	107
	Hiroshi ISOBE, Takashi KAWAKAMI and Takahito NAKAJIMA	

## 『Toyota Riken Scholar』

Development of Three Dimensional Spin Imaging by Spin Fluctuation Measurements .....	Reina KAJI.....	130
Halide-layered Double Hydroxides as New Electrode Materials for Anionic Storage Systems .....	Nataly Carolina ROSERO-NAVARRO.....	132
Development of Photofunctional Metal Nano Oxide Fabrication Method by Using Submerged Radical Reactions .....	Lihua ZHANG.....	134
Experimental Verification of Multichannel Kondo Effect Using High-precision Ultrasonic Measurements.....	Tatsuya YANAGISAWA.....	136
Materials Searching toward the Development of Magnon Diode.....	Hiroyuki K. YOSHIDA.....	138
Development of Synthetic Method of Iron Carbide Clusters Using Iron Citrate Multi-nuclear Complex as Precursors .....	Masanori WAKIZAKA.....	140
Exploration of New Superconductivity for Layered Nickel Oxides with an Electron in 3d-e <sub>g</sub> Orbital.....	Hideyuki KAWASOKO.....	142
Development and Application of Rapidly Diverse Synthesis toward Polyunsaturated Fatty Acid Metabolites.....	Yutaro SAITO.....	144
Predicting the Electrical Properties of Polymers Using Materials Informatics .....	Masahiro SATO.....	146
Ambiphilic $\pi$ -conjugated Materials: Efficient Synthesis and Unique Functions .....	Jun TAKAYA.....	148
Precision Polymer Synthesis within Biological Nanospace .....	Kohei SATO.....	150
Creation of Thermal Switching Materials by Utilizing Metal-insulator Transition .....	Suguru KITANI.....	152
Construction of Flexible Induction Heating System with Integrated Inverter .....	Masahiro AOYAMA.....	154
Evaluation of the Anti-fouling Capacity of Ship Paints Using the Next Generation Sequencer .....	Yuu HIROSE.....	156
Synchronization of Connected Josephson Oscillators in a Cold Atomic Gas .....	Yuki KAWAGUCHI.....	158
Fabrication of Functional Composite Biomaterial as Strong and Elastic Artificial Tendon .....	Eijiro MAEDA.....	160
Development of Stable Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Narrow Band Gap .....	Norihito FUKUI.....	162

Development of Metal-free Near-infrared Light-emitting Devices with Unique Functions.....	Masahito MURAI.....	164
Development of a Mononuclear Mo Complex as a Photocatalyst for Selective Photocatalytic CO <sub>2</sub> Reduction and Their Mechanistic Study.....	Jieun JUNG.....	166
Novel p-GaN Gated AlGaN/GaN Diodes with 0 V Turn-on Voltage to Achieve High-efficiency Rectifications for Energy Harvesting Applications .....	Yuwei ZHANG.....	168
Development of New Molecular Conductors Based on Polyoxometalate .....	Kazuhiko UEMURA.....	170
Reinforcement Learning Based Code Rate Control in Dynamic Communication Environment.....	Shan LU.....	172
Rapid Cytotoxicity Detection System Based on Disruption in Epithelial 3D Structure .....	Ryohei UENO.....	174
Fabrication of Defect Centers in Solid on Quantum Telecommunication by the Temperature Dependence of the Ion-plantation and the Optical Estimation of its Defect Centers .....	Toshiyuki TASHIMA.....	176
Strain Engineering for the Development of a Ferromagnetic Europium Compound and Elucidation of its Unusual Large Magnetic Anisotropy .....	Hiroshi TAKATSU.....	178
Opto-control of Liquid-Liquid Phase Separation and Biofunction .....	Yusuke NAKASONE.....	180
Magnon Current and Optical Response Due to a Spatial Correlation between the Radiative Field and Magnon Excitation in Magnetic Nanostructures .....	Tomohiro YOKOYAMA.....	182
Elucidation of Heterogeneous Reaction Kinetics in Photomechanical Materials Using Hyperspectral Imaging .....	Hikaru SOTOME.....	184
Stereodivergent Synthesis of Unnatural $\alpha$ -Amino Acids by Electrophilic Amination .....	Koji HIRANO.....	186
Nanoscale Photochromic Reaction and its Application for Optically Driven Transistor .....	Takayuki UMAKOSHI.....	188
Mechanisms of Cell Chirality Formation Induced by Chiral Actin Dynamics .....	Mikiko INAKI.....	190
Development of Purely Organic Phosphorescent Liquid Utilizing Molecular Conformational Dynamics .....	Yosuke TANI.....	192

Exploration of Halide-based Na-ion Conducting Solid Electrolytes ..... Saneyuki OHNO..... 194

Formation of Long-lifetime Bright Excitons by Novel II-III-V-VI Semiconductor  
Compounds ..... Naho ITAGAKI..... 196

Understanding of Precise Homology-directed Repair through *in Vitro* Reconstitution  
..... Tatsuro TAKAHASHI..... 198

The Genetic Basis of Non-CG Methylation in *Arabidopsis thaliana* ..... Eriko SASAKI..... 200

### **《Specially Promoted Research Program》**

Mechanical Effect on All Solid State Energy Conversion Devices ..... Fumitada IGUCHI..... 205

**List of Books** ..... 211

**List of Papers** ..... 212

**List of Presentations** ..... 222

**List of Awards** ..... 227