

# 溝口研究室

## [顕微鏡と計算機と人工知能で物質を理解する]

生産技術研究所 物質・環境系部門

Institute of Industrial Science, Dept. Mater. Envi. Science

大学院工学系研究科  
マテリアル工学専攻

ナノ物質設計工学  
Nano-Materials Design Lab.

<http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp/>

### 1 マテリアルデザイン ～Paving the way for Materials Design～

どのような構造？どのような機能？  
どのように機能発現？

機能 ←→ 構造

構造機能相関の解明



溝口研究室の研究目的：

“物質の構造機能相関を解明し物質設計を実現する”

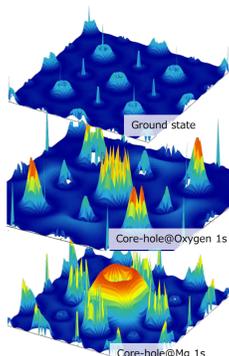
物質開発には膨大な時間と労力が費やされてきました。しかし社会がダイナミックかつスピーディーに変化し続けており、これまで以上に正確で迅速な物質開発が求められています。原子・電子構造と機能発現との相関性を理解して物質設計を実現することが出来れば物質開発を飛躍的に加速させることができます。

物質設計を実現するためには、機能発現を担っている局所領域の原子を直視してその電子状態を計算し、さらに得られた結果から機能発現のメカニズムや法則を解明する必要があります。

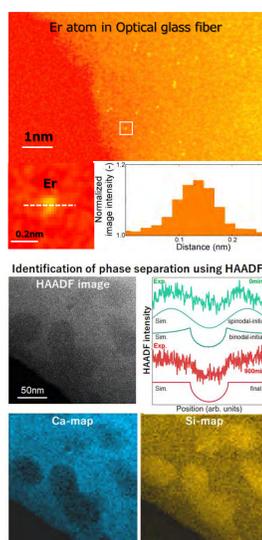
溝口研究室ではそのような原子と電子の構造を透過型電子顕微鏡 (TEM/STEM)、電子・X線吸収分光 (ELNES/XANES)、第一原理計算、さらに人工知能技術 (機械学習) を用いて精密に解析しております。

我々の研究を通して原子と電子の役割を知ることによって『物質設計』を実現し、太陽電池材料や光学材料、電池材料、イオン液体等の先進材料をより高性能化することを目指しております。

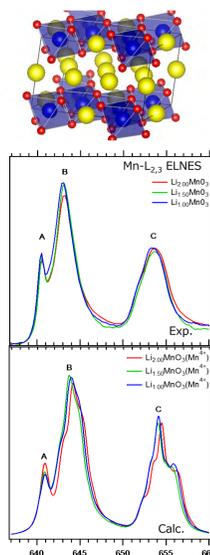
### 2 原子をみて、結合をはかる



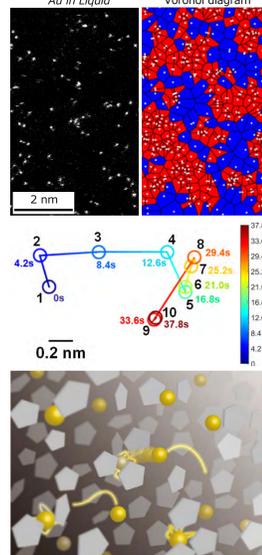
ガラスの原子分解能解析



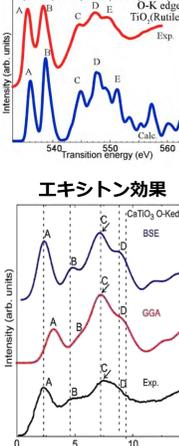
Liイオン電池の反応解析



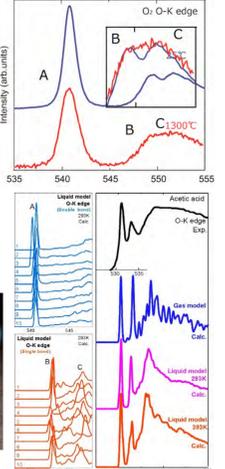
液体の原子分解能計測



一粒子・多粒子計算



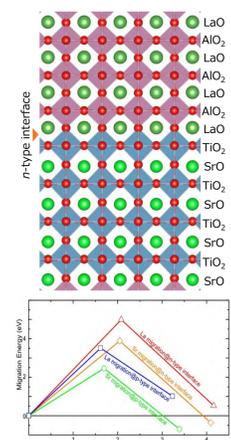
気体・液体ELNES



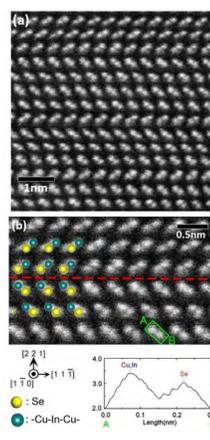
K. Nakazawa et al., submitted, T. Miyata et al., Science Adv. 3 (2017) e1701546, Ultram. 178 (2017) 81, Microscopy 3 (2014) 377, H. Katsukura et al., Sci. Rep., 7 (2017), 16434. K. Tomita et al., Ultram. 178 (2017) 105-111, J.Phys. Chem. C 120 (2016) 9036, Y. Matsui et al., Chem. Phys. Lett., (2016) 649 (2016) 92, Sci. Rep., 3 (2013) 3503, K. Kubobuchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 053906, T. Mizoguchi et al., ACS Nano, 7 (2013) 5058, S. Sootsuki et al., Appl. Phys. Lett., 99 (2011) 233109.

### 3 人工知能技術とシミュレーションで原子と電子の役割を理解する

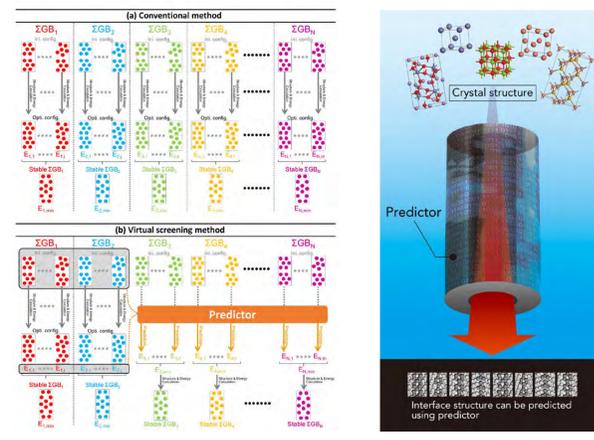
界面拡散メカニズムの解明



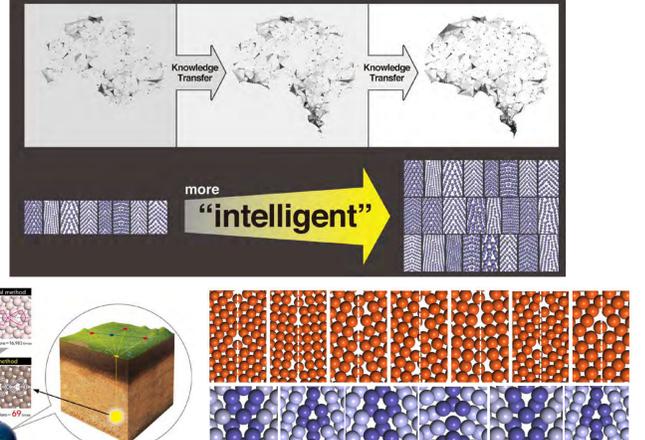
太陽電池材料の界面原子構造



人工知能によるデータ駆動型界面構造決定と構造機能相関



人工知能が学習することで界面構造を3,600倍速く決めることが可能に



界面や欠陥のような格子欠陥は材料機能に決定的な役割を果たします。溝口研究室では、原子分解能STEM-EELSと高精度シミュレーションにより、格子欠陥の原子と電子の構造を定量的に明らかにしています。

情報科学手法を物質研究に利用する、マテリアルズインフォマティクスは世界的に研究されています。溝口研究室では、転移学習やベイズ最適化、仮想スクリーニングなどの機械学習の手法を利用して人工知能 (予測モデル) を作成し、それを界面のような格子欠陥の研究に利用しています。

H. Oda et al., J. Phys. Soc. Jpn Letter 86 (2017) 123601, S. Kikuchi et al., Physica B 532 (2018) 9, S. Kiyohara et al., Physica B 532 (2018) 24, Sci. Adv. 2 (2017) e1600746, Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 045502, S. Kawanishi and T. Mizoguchi, J. Appl. Phys., 119 (2016) 175101, 1-4, T. Yamamoto et al., Appl. Phys. Lett., 105 (2014) 201604, H. Yamaguchi et al., J. Ceram. Soc. Jpn, 122 (2014) 469, H. Yamaguchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 153904, T. Yamamoto et al., Appl. Phys. Lett., 102 (2013) 211910, T. Yamamoto et al., Phys. Rev. B, 86 (2012) 094117, T. Mizoguchi, et al., Adv. Func. Mater., 21 (2011) 2258.