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

Department of Materials and Environmental 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

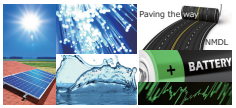
http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp

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



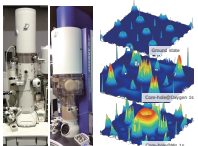
“物質の構造機能相関を解明し物質設計を実現する”

これまでの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IoTデバイスの普及や人工知能技術の確立など，劇的かつ急速に変化し続ける社会においては，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・電子構造と機能との相関，**構造機能相関**を理解した物質設計が実現すれば，物質開発が飛躍的に加速できると期待されます．構造機能相関の解明には，機能発現を担う局所領域の電子状態を明らかにし，機能発現のメカニズムを知る必要があります．溝口研究室では機能発現を担う原子・電子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）を用いて多角的に分析・予測しています．

原子・電子構造の解析を通し役割を解明することで**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，ガラス等，先進材料の高性能化を目指しています．

2 原子をみて,結合をはかる



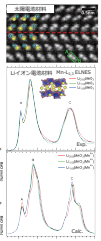
電子顕微鏡を用いたSTEM-ELNESは高い空間分解能と時間分解能，感度を有し，*Nature*誌に『The Ultimate Analysis 究極の分析法』と紹介されるほど強力な分析手法です．溝口研究室では内殻励起スペクトル(ELNES/XANES)の理論計算手法を世界に先駆けて確立し，一粒子・多粒子理論に基づく全構造・全元素・全吸収端の確立を目指して研究を行っています．

電子顕微鏡を用いた構造観察や『究極の分析法』と定量的理論計算とを組み合わせ，物質の原子・電子構造を精密解析しています．

ガラスの原子分解能解析

ガラスの分相解析

エネルギー材料の解析



液体の原子分解能計測

液体の３次元ダイナミクス解析

一粒子・多粒子計算

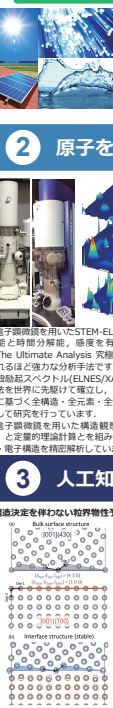
エキシトン効果

気体・液体ELNES

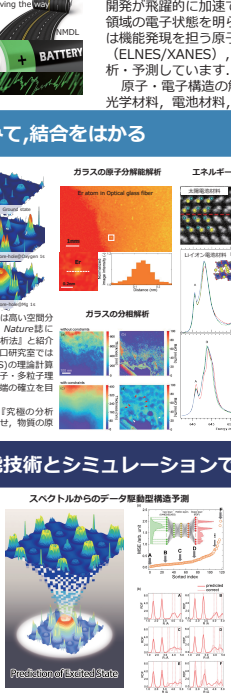
K. Nakazawa *et al.*, Ultramicroscopy, **217** (2020) 113077-1-8; K. Liao *et al.*, ACS Applied Nano Mater. (2020); Y. Sugimori *et al.*, RSC Advances, **9** (2019) 10520; K. Nakazawa *et al.*, Scripta Mater. **154** (2018) 197; T. Miyata *et al.*, Science Adv. **3** (2017) e1701546; T. Miyata *et al.*, Ultram. **178** (2017) 81; T. Miyata *et al.*, Microscopy **3** (2014) 377; H. Katsukura *et al.*, Sci. Rep. **7** (2017) 16434; K. Tomita *et al.*, Ultram. **178** (2017) 105-111; K. Tomita *et al.*, J.Phys. Chem. C **120** (2016) 9036-9042; Y. Matsui *et al.*, Chem. Phys. Lett. **649** (2016) 92; Y. Matsui, Sci. Rep. **3** (2013) 3503-1-7; K. Kubobuchi *et al.*, Appl. Phys. Lett. **104** (2014) 053906; T. Mizoguchi *et al.*, ACS Nano **7** (2013) 5058; S. Ostsuki *et al.*, Appl. Phys. Lett. **99** (2011) 231105.

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

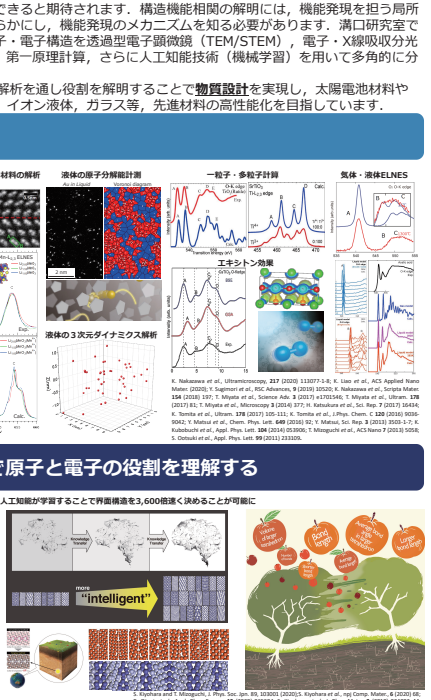
構造決定を伴わない粒界物性予測



スペクトルからのデータ駆動型構造予測



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



溝口研究室では，材料の機能に大きな影響を与える界面・格子欠陥といった原子構造や，電子状態を反映して多彩な形状を示す内殻励起スペクトルなどについて高精度のシミュレーションを行うことで，原子と電子の構造を定量的に調べています．また，情報科学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の視点から，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界面・格子欠陥や内殻励起スペクトルに適用して，構造機能相関の理解や予測に取り組んでいます．

S. Kiyohara and T. Mizoguchi, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 103001 (2020);S. Kiyohara *et al.*, npj Comp. Mater., **6** (2020) 68; R. Chard *et al.*, Appl. Phys. Express **13** (2020) 065504; S. Kiyohara *et al.*, J. Phys. Mater. **2** (2019) 024003; M. Tsubaki *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. **9** (2018) 5733; S. Kiyohara *et al.*, Sci. Rep. **8** (2018) 13548; S. Kiyohara *et al.*, J. Chem. Phys. **148** (2018) 241741; H. Oda *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **86** (2017) 123001; S. Kikuchi *et al.*, Physica B **532** (2018) 9; S. Kiyohara *et al.*, Physica B **532** (2018) 24; S. Kiyohara *et al.*, Sci. Adv. **2** (2017) e1600746; S. Kiyohara *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55** (2016) 045502-1-4; S. Kawashima and T. Mizoguchi, J. Appl. Phys. **119** (2016) 175101; 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) 213103; T. Yamamoto *et al.*, Phys. Rev. B **86** (2012) 094117; T. Mizoguchi *et al.*, Adv. Func. Mater. **21** (2011) 2258.