

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



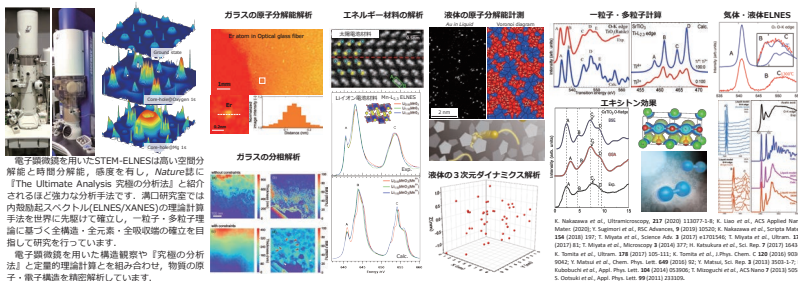
“物質の構造機能相関を解明し物質設計を実現する”

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、劇的かつ急激に変化し続けている社会においては、これまで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ことが期待されます。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。

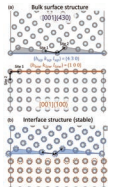
原子・電子構造の解析を通し役割を解明することで物質設計を実現し、太陽電池材料や光学材料、電池材料、イオン液体、ガラス等、先進材料の高性能化を目指しています。

② 原子をみて、結合をはかる

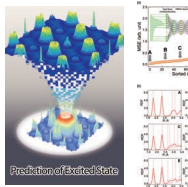


③ 人工知能技術とシミュレーションで原子と電子の役割を理解する

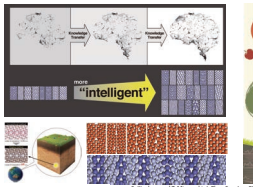
構造決定を伴わない粒子物性予測



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個に決められることが確かな



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、電子状態を反映した多様な形状を示す内部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（MI）の観点から、機械学習やAIを駆動化し、仮説スクリーニングなどの機械学習の手法を界面・格子欠陥や内部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。

