

溝口研究室



[顕微鏡と計算機と人工知能による物質理解]

生産技術研究所 物質・環境系部門

Department of Materials and Environmental Science

ナノ物質設計工学

工学系研究科 マテリアル工学専攻

<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

Er atom in Optical glass fiber

エネルギー材料の解析

太陽電池材料

液体の原子分解能計測

Au in Liquid

粒界の局所熱膨張解析

HAADF STEM

一粒子・多粒子計算

SrTiO₃ edge

ガラスの分相解析

液体の3次元ダイナミクス解析

エキシトン効果

K. Liao *et al.*, *Nano Lett.* **21** (2021) 10416-10422; 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. Ootsuki *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

スペクトルからのデータ駆動型構造予測

Prediction of Excited State

スペクトルからのデータ駆動型物性予測

Excitation energy

構造決定を伴わない粒界物性予測

Bulk surface structure

人工知能により界面構造決定を3,600倍加速

more "intelligent"

電子状態からのデータ駆動型物性予測

Bonding properties of Atom/BP

電子状態からのデータ駆動型物性予測

ML predicted binding energy (eV)

E. Suzuki *et al.*, *Appl. Phys. Express* **14** (2021) 085503; K. Kikumasa *et al.*, *Adv. Intell. Syst.*, **4** (2022) 2100103-1-10; S. Kiyohara and T. Mizoguchi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89** (2020) 103001; S. Kiyohara *et al.*, *npj Comp. Mater.* **6** (2020) 68; R. Otani *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) 123601; 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. Kawanishi 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) 211910; T. Yamamoto *et al.*, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 094117; T. Mizoguchi *et al.*, *Adv. Func. Mater.* **21** (2011) 2258.