

溝口研究室

人工知能で物質を設計する

物質・環境系部門



物質設計工学

工学系研究科 マテリアル工学専攻

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

Our Mission: 物質を設計する ~Designed Materialの実現~

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”

物質開発は長らく、試行錯誤の繰り返しであり続けてきました。しかし今、その構図を根本から変える時代が来ています。

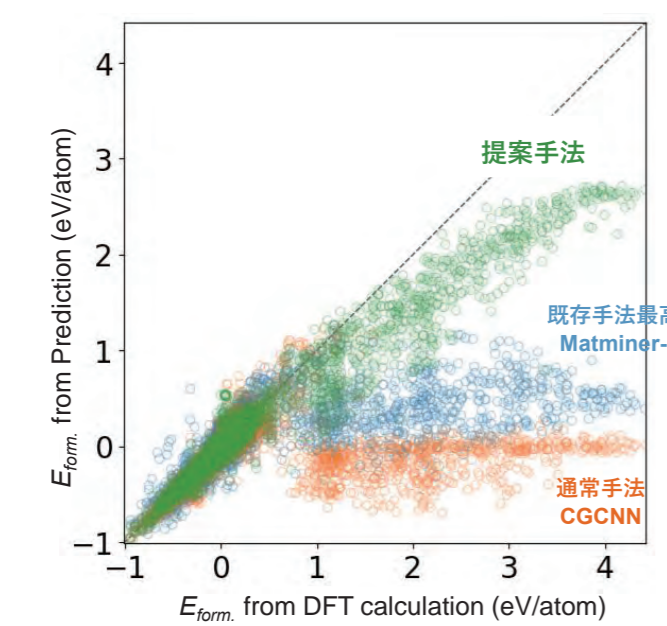
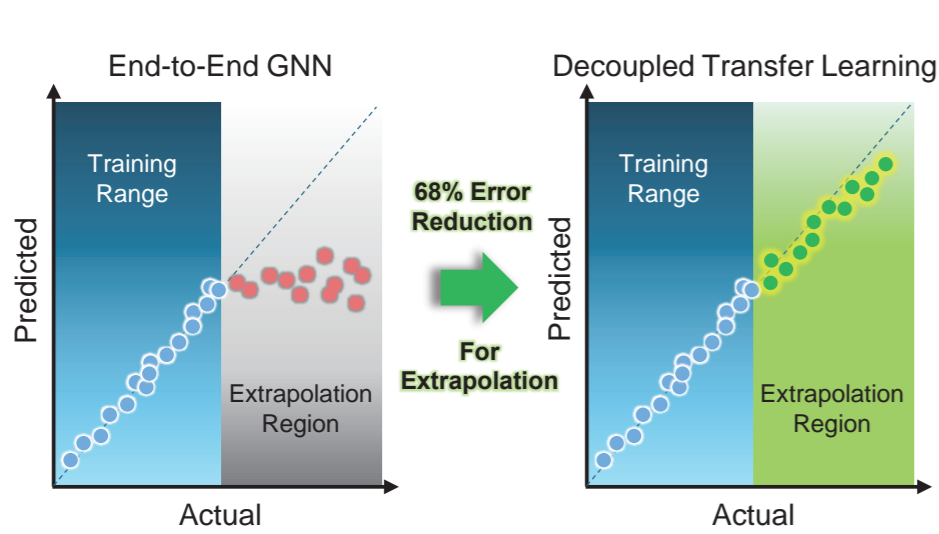
我々が目指すのは、「Designed Materials の実現」、つまり目的の機能を実現するために原子配列を意図的に設計し、自然界には存在しない構造をも作り出す、物質開発の新たなパラダイムです。

その実現の根底にあるものは、原子・電子構造と機能を結ぶ「構造機能相関」の深い理解です。物質のどこでどのような機能を生み出すのか。そのメカニズムを化学結合レベルで解明し、そしてその理解を物質開発に実装できれば、物質は「発見するもの」から「設計するもの」へと変わります。

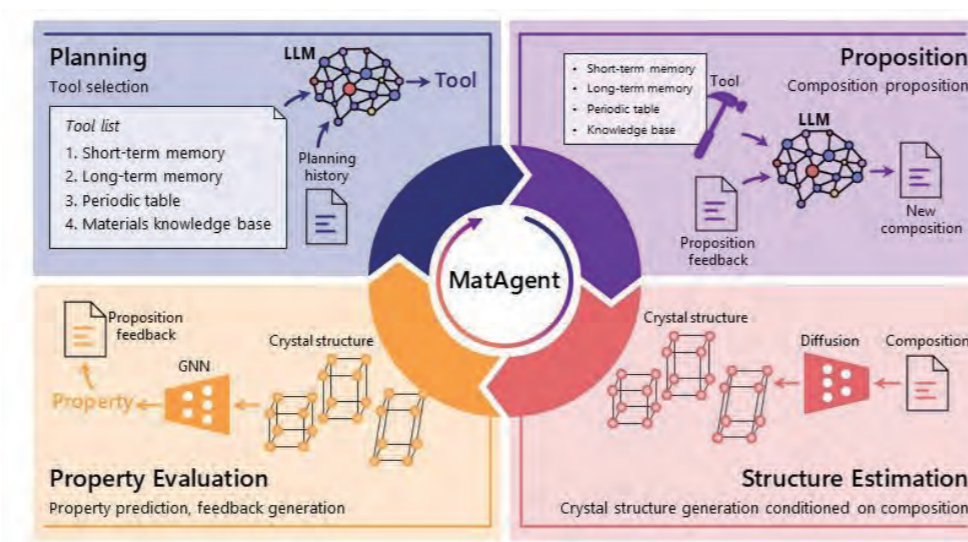
溝口研究室は、人工知能技術・コンピューターシミュレーション・計測技術を融合させ、構造機能相関の解明から物質設計の実装まで、一気通貫で物質を設計することを目指しています。

AI for Material ~マテリアルズインフォマティクス~

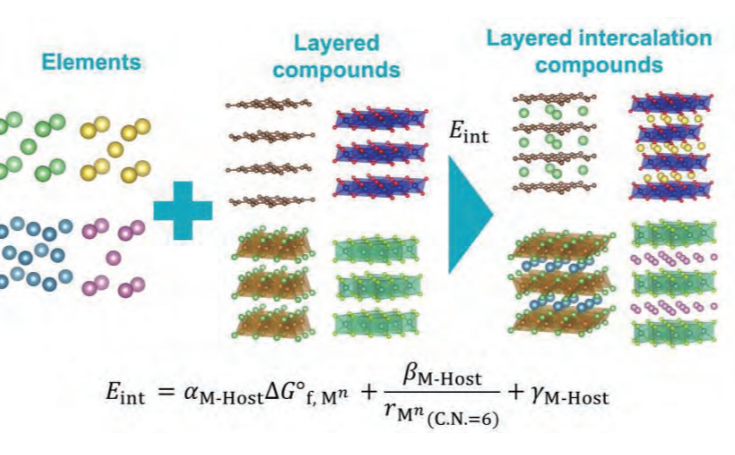
“外挿”の実現



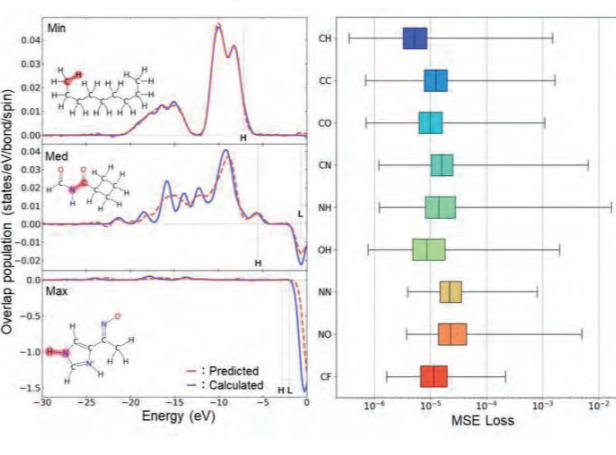
AI-Agentの開発



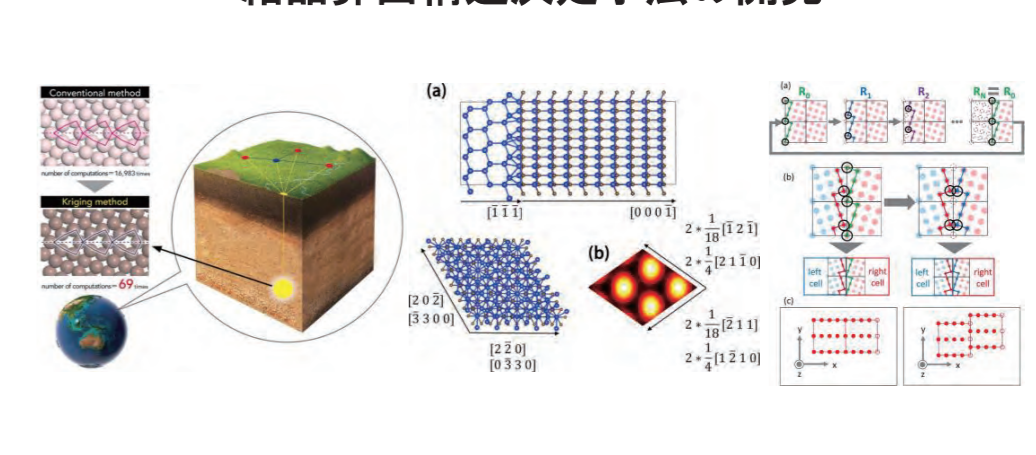
データ駆動型物理抽出



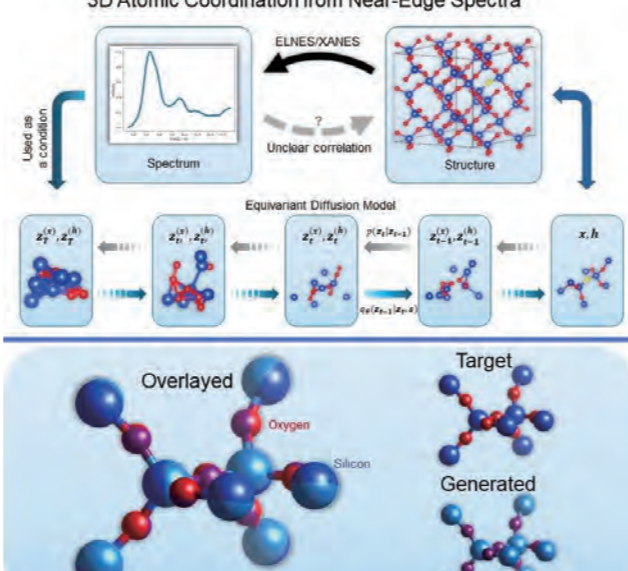
データ駆動型化学結合解析



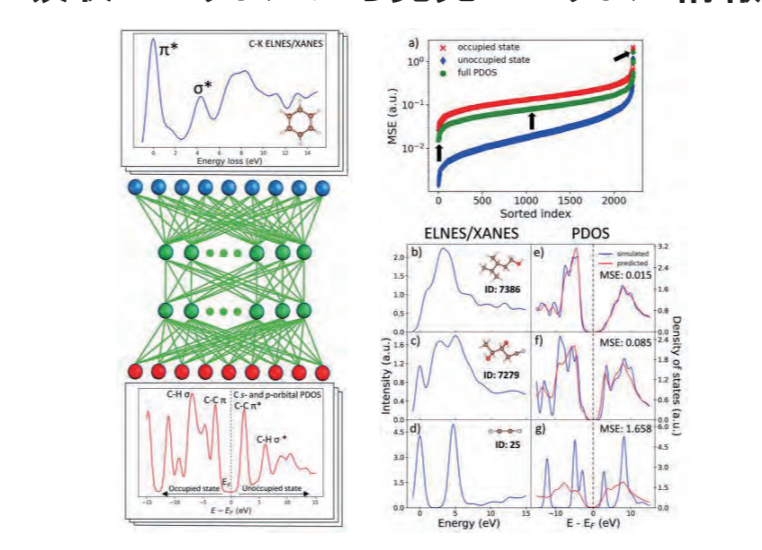
結晶界面構造決定手法の開発



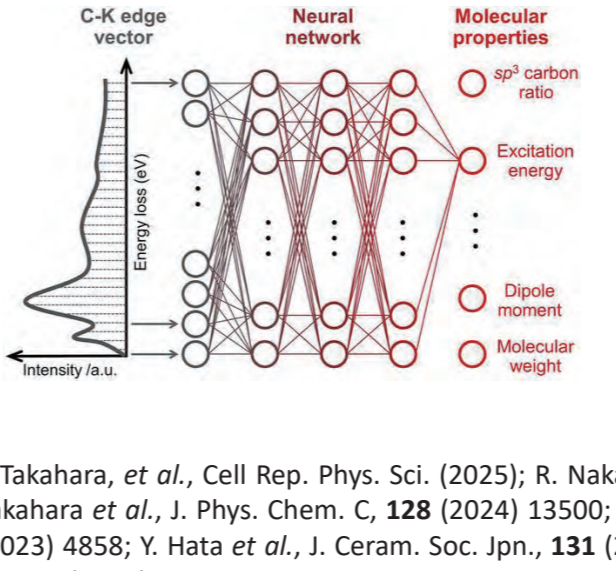
スペクトルから三次元座標生成



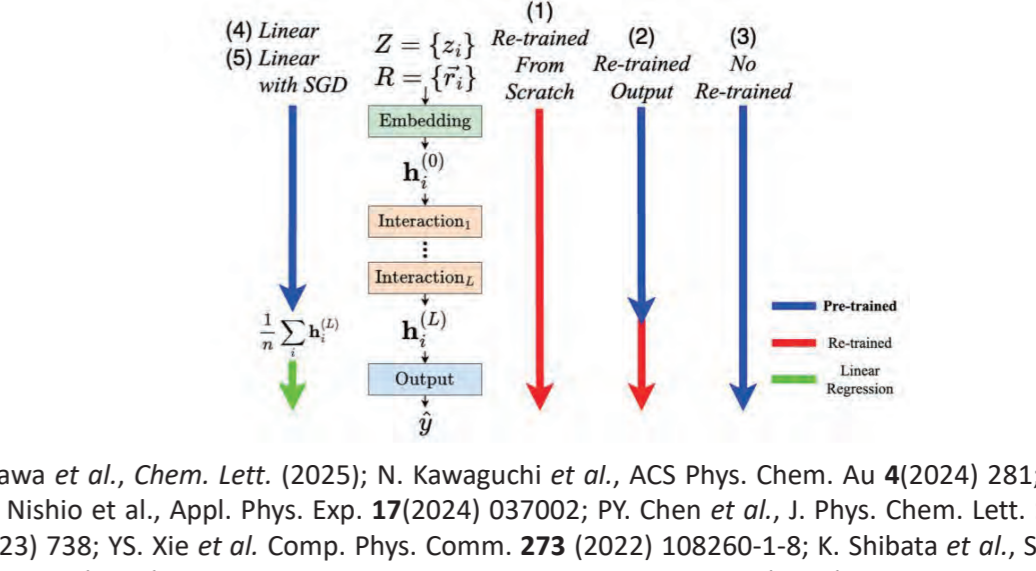
吸収スペクトルから発光スペクトル情報



スペクトル-機能相関



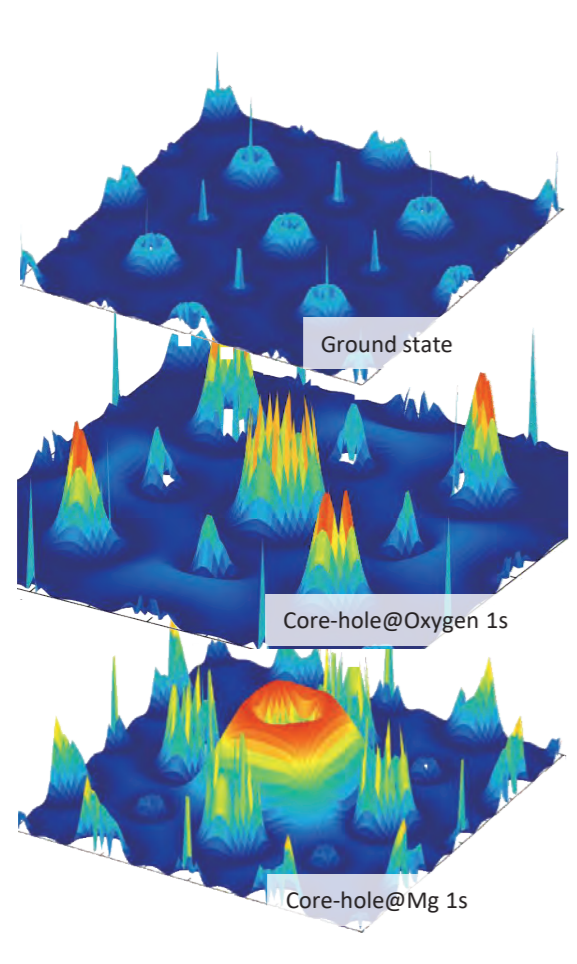
マテリアルズインフォマティクスの加速



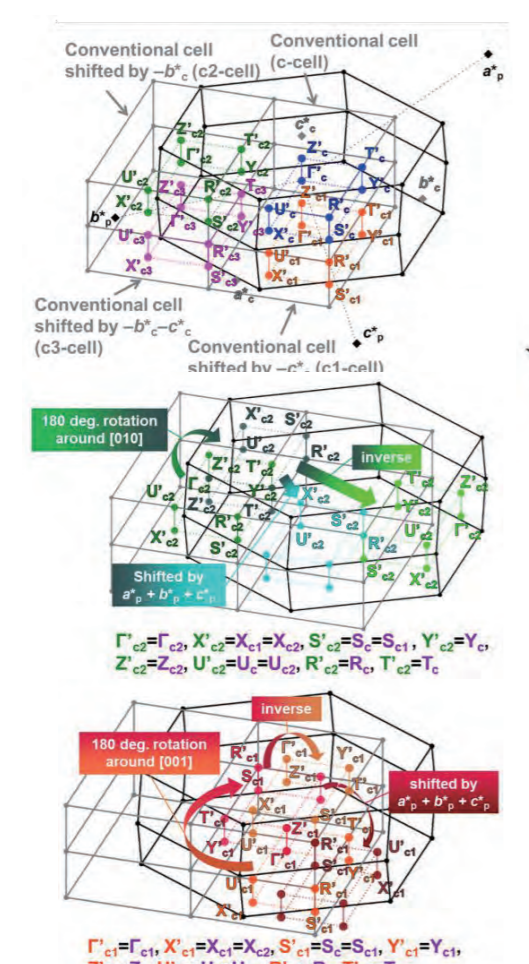
溝口研究室では、生成AI・大規模言語モデル(LLM)・AIエージェントを中核とした人工知能技術と、コンピューターシミュレーション・原子レベル計測を融合させた研究を展開しています。目的の機能から原子配列を「逆設計」のアプローチにより、従来の試行錯誤的な材料探索を根本から刷新します。AIが自律的に仮説を生成・検証するエージェント的サイクルのもと、人間とAIが協働して構造機能相関を解明し、「発見する材料科学」から「設計する材料科学」への転換を推進しています。

原子と電子の役割を知る ~シミュレーションと計測~

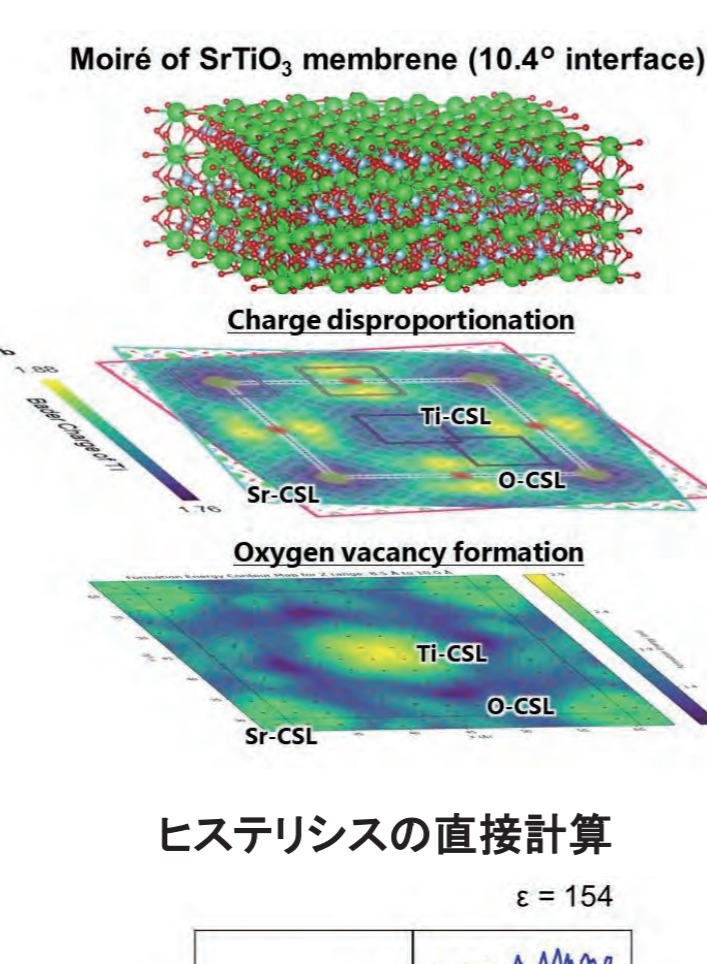
内殻空孔効果の理解



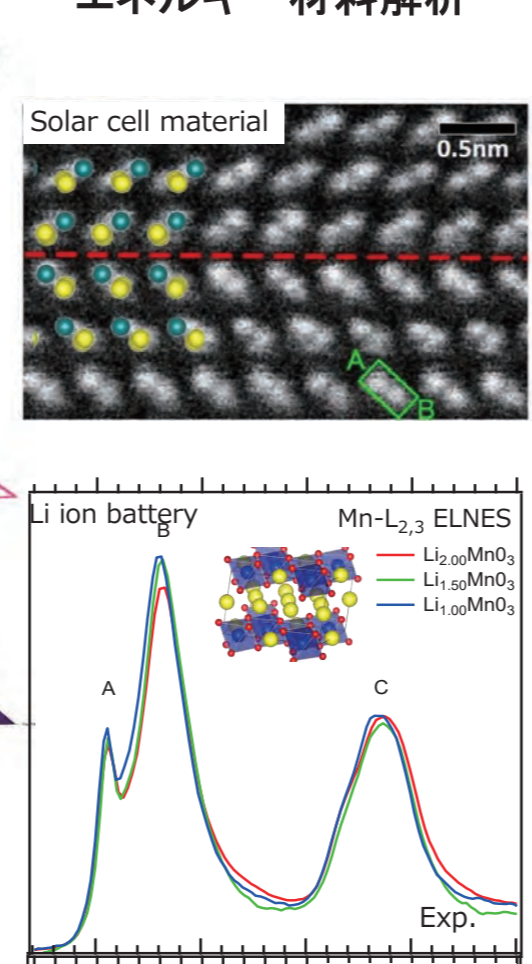
バンド構造解析手法の開発



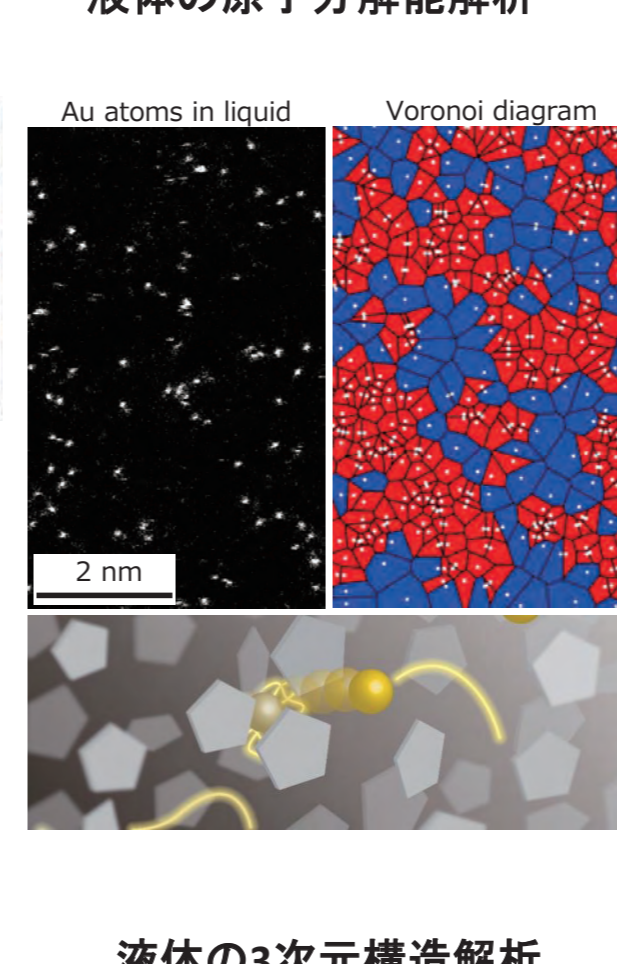
酸化モアレ界面



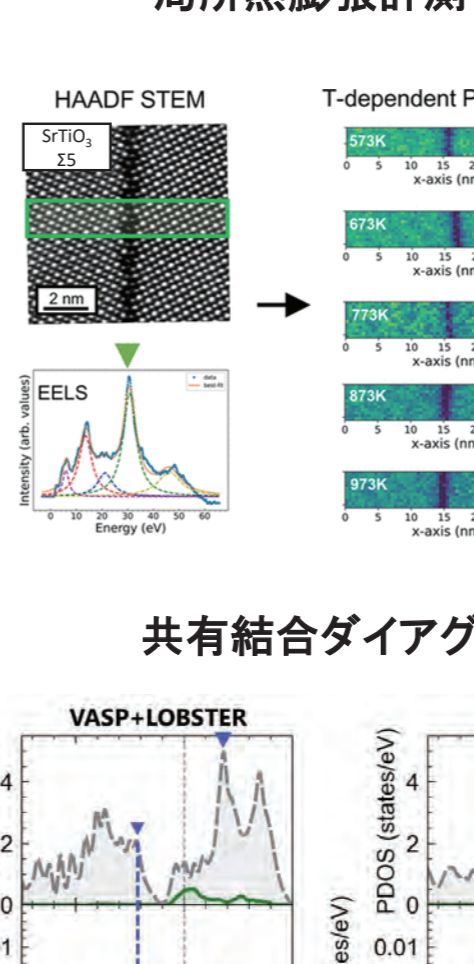
エネルギー材料解析



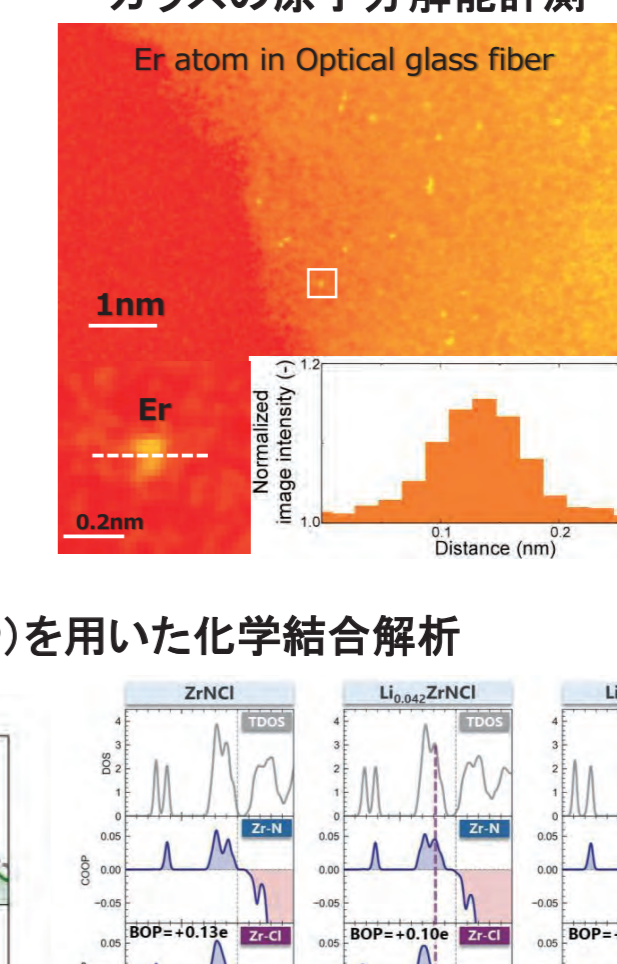
液体の原子分解能解析



局所熱膨張計測



ガラスの原子分解能計測



強誘電体・二次電池材料・超伝導体・半導体などの先端材料を対象に、化学結合レベルでの原子・電子構造解析を行っています。高精度なシミュレーションと原子レベル計測を組み合わせることで、「どこで・何がなぜ機能を生み出すのか」を定量的に解明することを目指しています。構造機能相関の理解を通し、逆設計による Designed Materials の実現に向けた知識基盤を構築しています。

共有結合ダイアグラム (COOP) を用いた化学結合解析

