

# 溝口研究室

人工知能で物質を設計する

物質・環境系部門



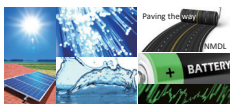
工学系研究科 マテリアル工学専攻

ナノ物質設計工学

<https://www.edge.iils.u-tokyo.ac.jp/>

## 1. マテリアルデザイン ～ 物質を設計する～

どのような構造？どのような機能？  
どのように機能発現？

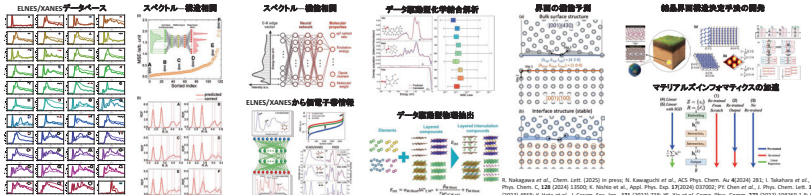


### “物質の構造機能相関を解明し物質設計を実現する”

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、劇的に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。

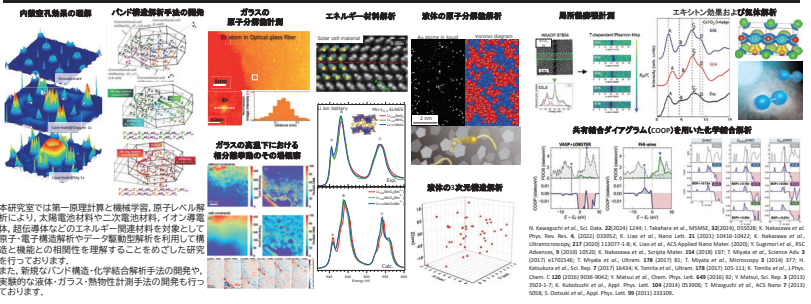
原子・電子構造と機能との相関、**構造機能相関**を理解した物質設計が実現すれば、物質開発が飛躍的に加速できると期待されます。構造機能相関の解明には、機能発現を担う局所領域の電子状態を明らかにし、機能発現のメカニズムを知る必要があります。溝口研究室では機能発現を担う原子・電子構造を透過型電子顕微鏡(TEM/STEM)、電子・X線吸収分光(ELNES/XANES)、第一原理計算、さらに人工知能技術(機械学習)を用いて多角的に分析・予測しています。

## 2. マテリアルズインフォマティクス ～ AI for 物質開発～



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、電子状態を反映して多様な形状を示す内殻吸収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活用するマテリアルズインフォマティクスの観点で、内殻吸収スペクトル構造などについての新規な体系的なデータベースの作成や、様々な機械学習手法の活用による構造機能相関の予測と理解に取り組んでいます。

## 3. 原子と電子の役割を知る ～ DFT計算および原子レベル解析 ～



本研究室では第一原理計算と機械学習、原子レベル解析により、太陽電池材料や二次電池材料、イオン導電体、超伝導体などのエネルギー関連材料を対象として原子・電子構造解析や原子レベル解析を利用して構造と機能との相関性を理解することをめざした研究を行っています。  
また、新規なナノ構造・化学結合解析手法の開発や、実験的な液体・ガラス・熟成性計測手法の開発も行っております。