

# 溝口研究室



## 顕微鏡と計算機と人工知能による物質理解

物質・環境系部門

ナノ物質設計工学

工学系研究科マテリアル工学専攻

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

### 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



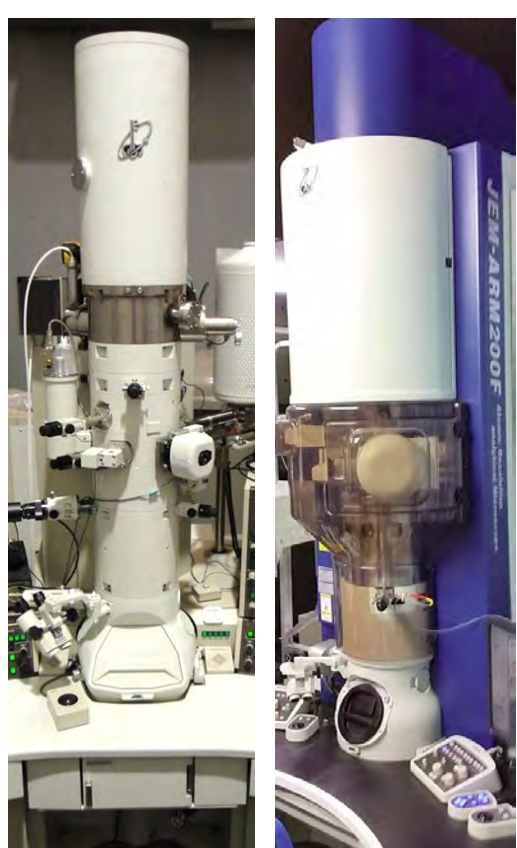
#### “物質の構造機能相関を解明し物質設計を実現する”

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。

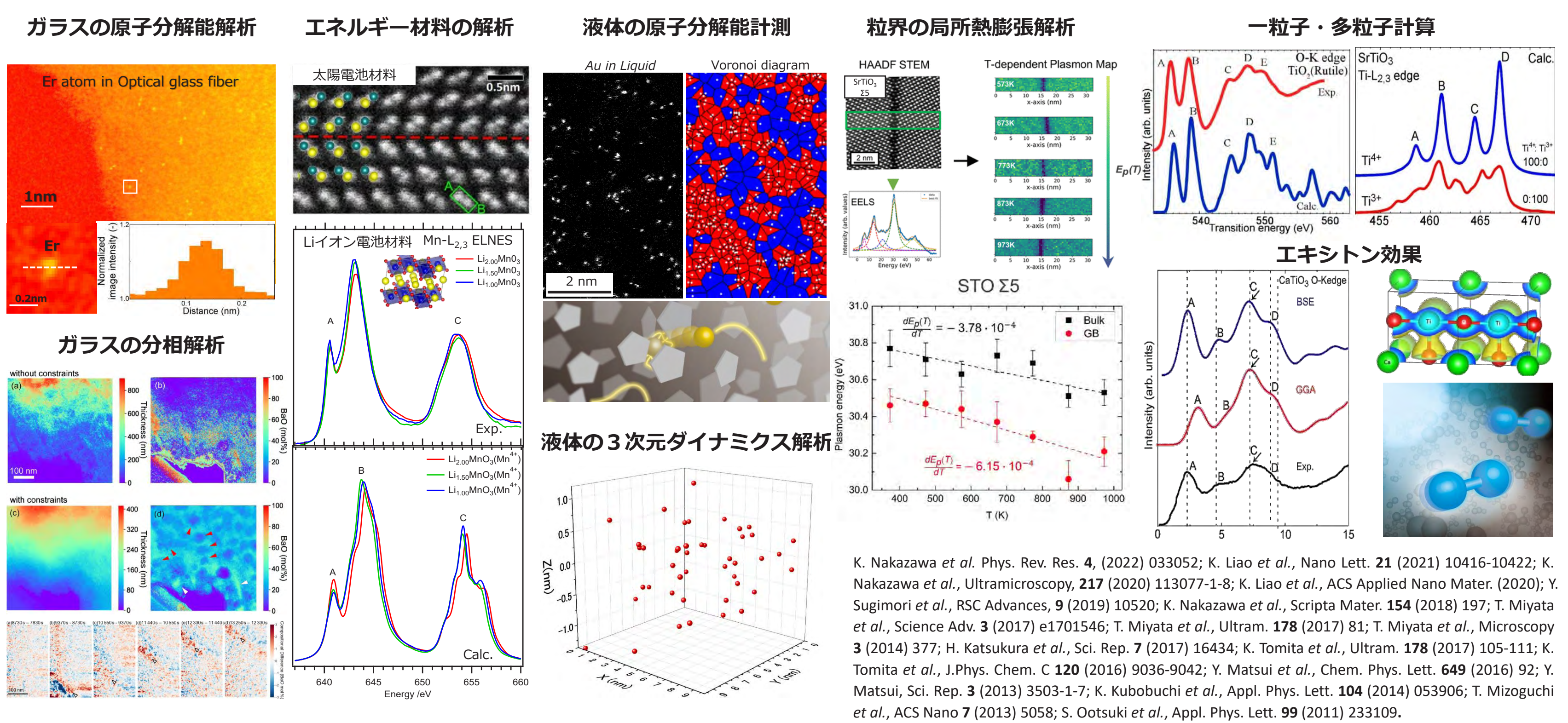
原子・電子構造の解析を通し役割を解明することで**物質設計**を実現し、太陽電池材料や光学材料、電池材料、イオン液体、ガラス等、先進材料の高性能化を目指しています。

### 2 原子をみて、結合をはかる

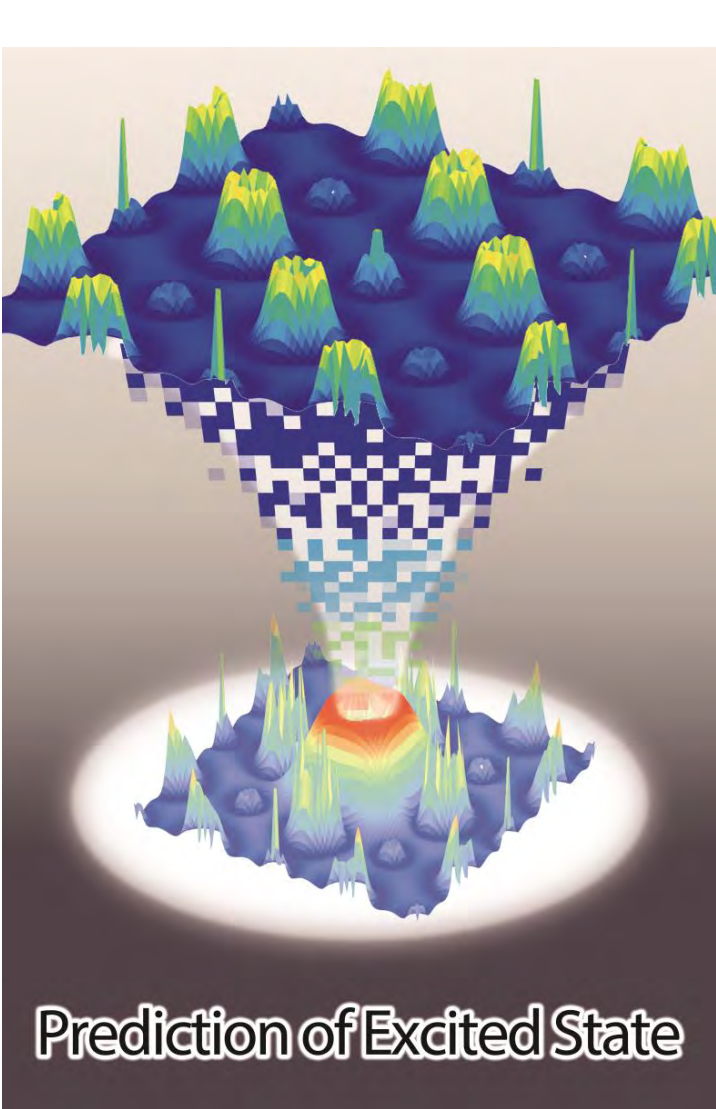


電子顕微鏡を用いたSTEM-ELNESは高い空間分解能と時間分解能、感度を有し、*Nature*誌に『The Ultimate Analysis 究極の分析法』と紹介されるほど強力な分析手法です。溝口研究室では内殻励起スペクトル(ELNES/XANES)の理論計算手法を世界に先駆けて確立し、一粒子・多粒子理論に基づく全構造・全元素・全吸収端の確立を目指して研究を行っています。

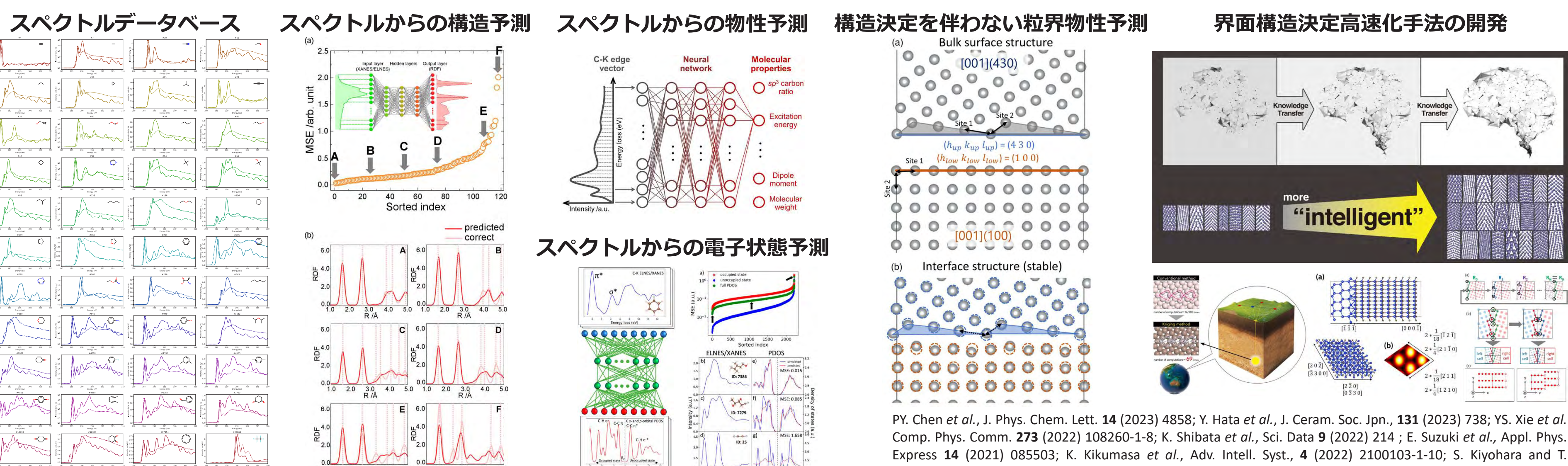
電子顕微鏡を用いた構造観察や『究極の分析法』と定量的理論計算とを組み合わせ、物質の原子・電子構造を精密解析しています。



### 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



Prediction of Excited State



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で、内殻励起スペクトルや界面などについての大規模かつ系統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。

