

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。

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 Ti-L_{2,3} edge

ガラスの分相解析

without constraints

with constraints

Liイオン電池材料 Mn-L2,3 ELNES

Li-ion battery material Mn-L_{2,3} ELNES

液体の3次元ダイナミクス解析

液体の3次元ダイナミクス解析

エキシトン効果

エキシトン効果

K. Nakazawa *et al.* Phys. Rev. Res. **4**, (2022) 033052; 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

Prediction of Excited State

スペクトルデータベース

スペクトルからの構造予測

スペクトルからの物性予測

構造決定を伴わない粒界物性予測

界面構造決定高速化手法の開発

スペクトルからの電子状態予測

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。