

未来社会創造事業 探索加速型

「共通基盤」領域

年次報告書(探索研究期間)

令和3年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:町田 友樹]

[東京大学 生産技術研究所・教授]

[研究開発課題名:ファンデルワールス複合原子層の物性創発における
マテリアルインフォマティクス活用と指導原理導出]

実施期間 : 令和4年4月1日～令和5年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「町田」グループ(東京大学)

① 研究開発代表者:町田 友樹 (東京大学生産技術研究所、教授)

② 研究項目

・プロセスインフォマティクスを活用したファンデルワールス複合原子層の劈開定量制御

(2)「塩見」グループ(東京大学)

① 主たる共同研究者:塩見 淳一郎 (東京大学大学院工学系研究科、教授)

② 研究項目

・マテリアルインフォマティクスを活用したファンデルワールス複合原子層の熱伝導制御

§2. 研究開発成果の概要

ファンデルワールス複合原子層の作製と物性制御においてマテリアルインフォマティクス及びプロセスインフォマティクスを活用するための基盤要素技術を構築し、初期的な実証実験を推進した。具体的には、①グラフェン/MoS₂ ファンデルワールス超格子で熱伝導が抑制される構造をマテリアルインフォマティクスを活用して設計、ファンデルワールス積層により超格子構造を作製、時間領域サーモリフレクタンス法により熱伝導度を評価し、ファンデルワールス超格子構造において熱伝導が抑制されていることを確認した。今年度は特に、原子層ツイスト角度の影響を明らかにするとともに、様々な組み合わせのファンデルワールス複合原子層の熱伝導制御に展開している。②プロセスインフォマティクスを活用した劈開条件最適化を行うため、二次元層状物質のメカニカル劈開の全行程をロボティック操作可能にした。今年度は特に、ロボティック剥離制御システムと単原子層結晶フレーク自動探索システムを活用して、単原子層膜フレークサイズのヒストグラム解析を進め、単原子層フレーク作製の条件最適化を推進した。既存の手法より格段に大きな単原子層フレークを作製する手法を見出すに留まらず、劈開のメカニズムの解明に切り込んだ。新規の物理的モデルを考案し、原子層劈開の指導原理を構築している。本格研究に向けた展開を定めるための調査や予備実験も推進している。

【代表的な原著論文情報】

1) “Evaluation of polyvinyl chloride adhesion to 2D crystal flakes”

Yusai Wakafuji, Momoko Onodera, Satoru Masubuchi, Rai Moriya, Yijin Zhang, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Tomoki Machida

npj 2D Mater Appl **6**, 44 (2022),

<https://doi.org/10.1038/s41699-022-00323-7>