

未来社会創造事業 探索加速型探索研究
事後評価結果

1. 領域

「共通基盤」領域

2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

3. 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

4. 研究開発代表者名（機関名および役職は評価時点）

町田 友樹（東京大学生産技術研究所 教授）

5. 評価結果

評点：S 特に優れている

総評：

本研究開発課題は、ファンデルワールス複合原子層を題材としてマテリアルインフォマティクス・プロセスインフォマティクスを活用し、物性と構造の相関を明らかにして、社会実装に向けた指導原理の導出を目指すものである。

探索研究期間では、二次元層状物質のメカニカル劈開と積層のロボティック化システムを構築し、職人芸に依存しない定量的な最適化が可能となった。非平衡分子動力学シミュレーションにより計算された熱伝導が極めて抑制される積層構造を試作し、時間領域サーモレフレクタンス法により測定したところ、空気と同程度の熱伝導値が観測され、ファンデルワールス超格子構造により物性制御するという基本コンセプトが立証され、系統的な材料探索のための基盤技術が構築できた。さらに、ツイスト角 0.1° 以下で精密に積層構造を制御しながら、その場でレーザー角度分解光電子分光 (ARPES) 法で評価することで、放射光施設を使うことなしにラボレベルでバンド構造を直接決定することが可能になり、サブバンドを利用した共鳴トンネル効果の観測に繋がった。量子カスケードレーザなど新しいオプトエレクトロニクスへの展開が期待される。

特に、構築したファンデルワールス複合原子層作製システムを科研費学術変革領域「2.5 次元物質科学」に参画する研究グループの共同研究拠点として運用開始したことは、今後この分野を大きく進展させるための特筆すべき成果であると認められる。

さらなる社会への貢献のためには、社会実装に向けた国内外の研究ファンドも視野に入

れ、その場評価を含む実験自動化プラットフォームへの拡充を推進していくとともに、既に複数の電機あるいは素材メーカーと開始している共同研究を発展させていくこと期待する。

以上