

# 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

**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

**研究開発代表者：** 町田 友樹 東京大学・生産技術研究所 教授

**共同研究機関：** 東京大学・大学院工学系研究科

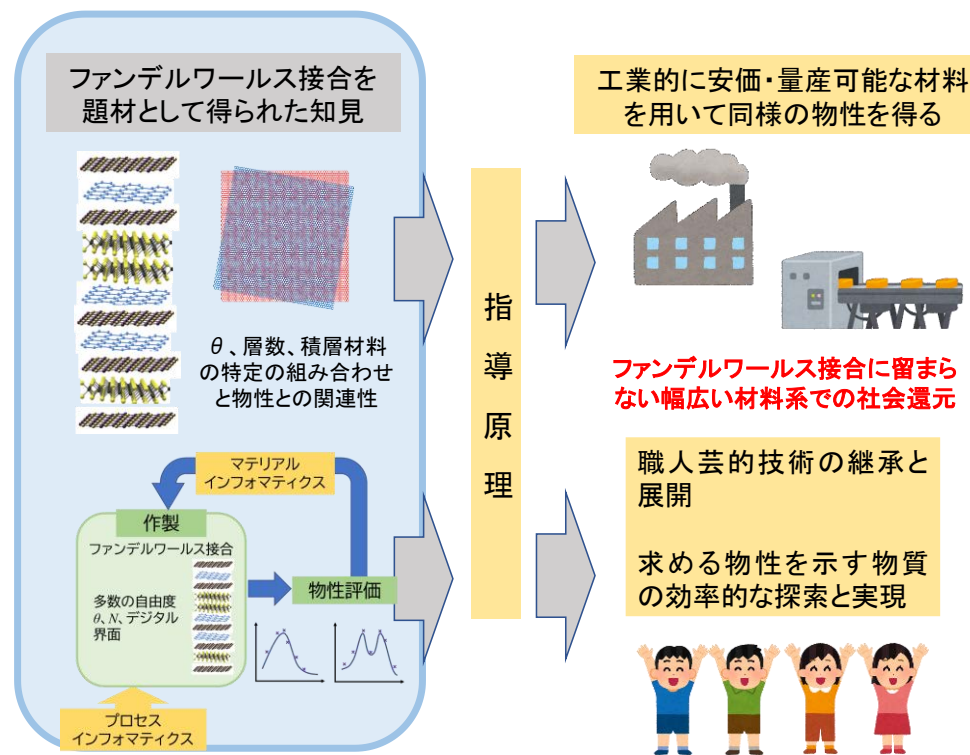


## 目的：

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する。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を導出する。

## 研究概要：

- ・ファンデルワールス超格子において、熱伝導が最小とな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・作製・評価して物性の設計と制御を実証する。
- ・二次元層状物質のメカニカル劈開において、作製条件および環境条件に対して、プロセスインフォマティクスを活用して最適化を行う。
- ・ファンデルワールス複合原子層は無数の組み合わせがある。物性を創発する実験ステージとしては理想的な一方、網羅探索的な物性創発を行うには探索空間が広すぎる。サイバーとフィジカルを組み合わせることで、効果的な物質創成の方法論やモデルを構築する。



# Realization of common platform technologies, facilities and equipment that create innovative knowledge and products

**R&D Project Title:** Application of material informatics and derivation of guiding principles in the material designing of van der Waals composite atomic layers

**Project Leader :** Tomoki Machida  
Professor, Institute of Industrial Science, University of Tokyo

**R&D Team :** School of Engineering, University of Tokyo



## Summary :

We utilize material and process informatics on the subject of van der Waals composite atomic layers. We aim to clarify the correlation between material properties and structure, deriving guiding principles for social implementation. There are infinite combinations of van der Waals composite atomic layers. Thus the van der Waals composite atomic layer is an ideal experimental stage for material discovery, on the other hand, the search space is too vast for exhaustive exploratory material discovery. By combining cyber and physical technologies, we will develop effective methodologies and models for material discovery.

