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 研究開発年次報告書

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]

[東京大学生產技術研究所·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3年10月1日~令和4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ッ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し、ファンデルワールス積層により超格子構造を作製した。時間領域サーモリフレクタンス法による熱伝導度測定を行い、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。基盤要素技術として、大面積二次元結晶の新規転写手法の開発と空間分解熱伝導度評価システムの構築も併せて推進した。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における結晶剥離の最終工程に着目して、ロボティック剥離制御システムを設計・構築した。単原子層結晶フレーク探索システムの最適化を進め、単原子層膜フレークサイズのヒストグラム解析を進めた。作製条件および環境条件をパラメータとして、単原子層フレーク作製に関してプロセスインフォマティクスを活用した条件最適化を行っている。この過程において、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した。最終的には、効果的な物質創成の方法論やモデル構築を行い、材料科学における指導原理を構築していく。

【代表的な原著論文情報】

該当なし