

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

終了報告書（探索研究）

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 3 年 10 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日

§1. 研究実施体制

(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。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。さらに、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。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。劈開のメカニズムの解明にも切り込んだ。新規の物理的モデルを考案し、原子層劈開の指導原理構築を探究した。③探索研究での提案テーマを超えた発展として、原子層と原子層をファンデルワールス積層することによる物性の制御・創発に取り組んだ。

【代表的な原著論文情報】

“Dry pick-and-flip assembly of van der Waals heterostructures for microfocus angle-resolved photoemission spectroscopy”

Satoru Masubuchi, Masato Sakano, Yuma Tanaka, Yusai Wakafuji, Takato Yamamoto, Shota Okazaki, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Jincan Li, Hirotaka Ejima, Takao Sasagawa, Kyoko Ishizaka, Tomoki Machida

Scientific Reports **12**, 10936 (2022). [<https://doi.org/10.1038/s41598-022-14845-z>]

“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 Materials & Applications **6**, 44 (2022). [<https://doi.org/10.1038/s41699-022-00323-7>]

“All-dry flip-over stacking of van der Waals junctions of 2D materials using polyvinyl chloride”

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

Scientific Reports **12**, 21963 (2022). [<https://doi.org/10.1038/s41598-022-26193-z>]