

マテリアルズインフォマティクスを用いた微細配線材料等の検討

Research on fine interconnect materials using materials informatics

調査研究代表：東北大学 国際集積エレクトロニクス研究開発センター

教授 本庄 弘明

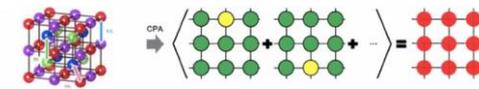
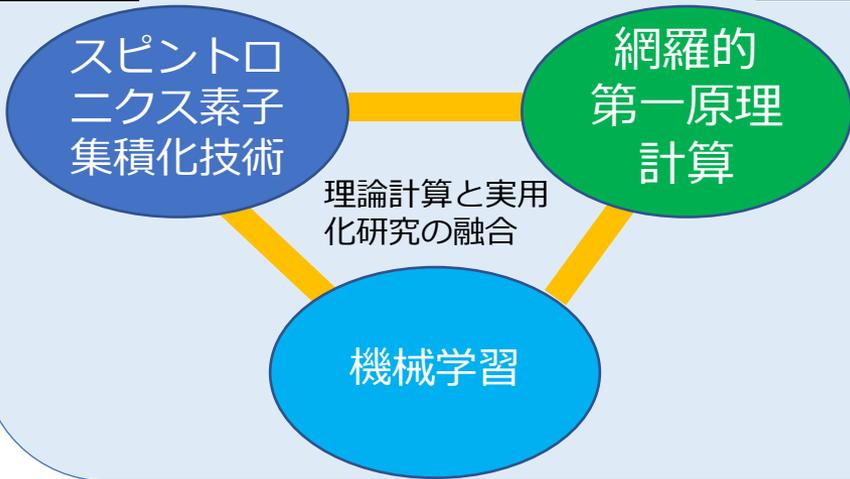
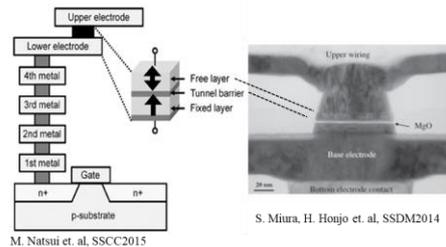
- 5nmノード以降のMRAMの下部コンタクトに必要な特性パラメータ選定
- 下部コンタクトの磁性と電気伝導を例に第一原理計算により電気伝導網羅探索
- 機械学習による効率的な合金探索実験方法の調査研究

東北大学
国際集積エレクトロニクス
研究開発センター



効率的な合金探索の
ための計算と実験方法の
調査研究

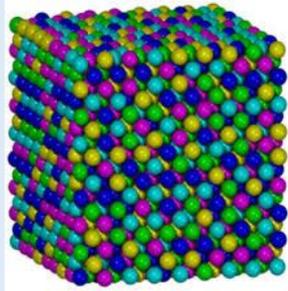
NIMS
統合型材料開発・情報基盤
部門 材料データ
科学グループ



KKR-ASA法による
合金特性の第一原理計算

東北大学で試作した
磁性体メモリ (MRAM)

前年度の成果



ハイエントロピー合金の
原子模型



東北大学 国際集積
エレクトロニクス研究開発センターで
試作したスピントロニクス素子
H, Sato et al., IEDM2018.

第一原理計算を用いた4元系ハイエントロピー合金の比抵抗、磁化の計算

ハイエントロピー合金（多種類の元素を混ぜ合わせて作製される新しい概念の合金）計14万件の全磁化（飽和磁化相当）、磁気相互作用の評価を通じた平均場近似による磁気相転移温度、Kubo-Greenwood公式による電気伝導を計算した。

ハイエントロピー合金のスピントロニクス素子への応用可能性の調査研究

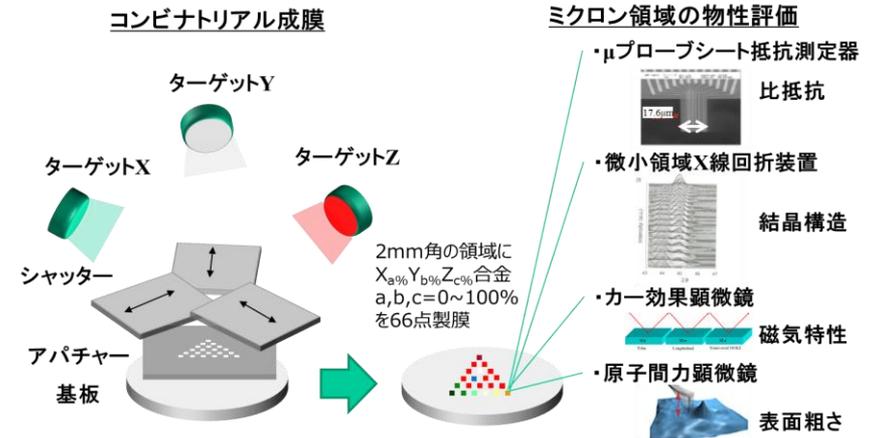
そこで、上のハイエントロピー合金の抵抗および磁化の大きさの第一原理計算の結果を解析し、約14万通りの4元の合金の組み合わせから室温で非磁性であり、抵抗が最も低くなる4元合金の候補を数十種類までに選別した。

今年度の活動展開

今年度は、より広い元素組成範囲、結晶構造の合金を第一原理計算と機械学習等で計算するとともに、耐熱性、エレクトロマイグレーション耐性等の配線材料に必要な特性の計算方法について調査、研究を行う。

今後の発展イメージ

本調査研究を元に競争的資金の獲得を目指す。



コンビナトリアル成膜とミクロン領域の物性評価技術を用いて、実際に合金の合成を行い特性評価を行う。

【年間活動計画】

6-9月 科研費応募検討

10-3月 活動発展検討

- 本調査研究は高密度MRAMの製造の要となる材料開発指針基盤構築に資する。加えて、本研究で得られた知見や手法は他の合金材料開発の加速にも応用可能である。