

2020年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

調査研究報告書(公開版)

【研究題目】 マテリアルインフォマティクスを用いた微細配線材料等の検討

【整理番号】 TK20-017

【代表機関】 東北大学

【調査研究代表者（氏名）】 本庄 弘明

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】 木野 日織

【TIA 外連携機関】 **(ある場合には記載)**

【報告書作成者】 本庄 弘明 【報告書作成年月日】 2021年4月15日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

マテリアルインフォマティクスを用いた微細配線材料の検討というテーマに関連して、第1原理計算と機械学習に関して材料研究機構の木野主任研究員、現状のスピントロニクス素子デバイスと下部コンタクト材料と最先端 CMOS の配線材料の調査を行った。この調査結果に基づいて、10nm ノード以降の STT-MRAM の下部コンタクト材料のパラメータ選定に関して東北大学で検討を行った。月1回の研究会等を通じて、各担当分野に関して発表および議論を行った。そして、この中で得られた調査および議論の結果を次のステップに進めるため、第一原理計算、機械学習方法と実験、評価方法について東京大学の福島准教授と東北大学の金田教授をメンバーに加えて、さらに議論を進めた。

上記活動内容を元に科研費の基盤A、「マテリアルズインフォマティクスを用いたスピントロニクスメモリ用微細配線材料の検討」というテーマで研究代表者：東北大学 本庄、研究分担者：国立研究開発法人物質・材料研究機構 木野日織、東京大学 福島 鉄也という体制で応募を行った。

【調査研究内容（実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果）】

当初の計画に従って下記の4項目について、調査、研究を行った。

1. 現状のスピントロニクス素子デバイスの下部コンタクト材料と先端 CMOS のコンタクト材料の調査

10nm ノード以降の先端 CMOS でのコンタクトビアのサイズ、材料に関して国内外の学会等を通じて調査を行った。

2. 10nm ノード以降の MRAM の MTJ 下部コンタクトに必要な特性パラメータ選定

1. で行った調査結果を元に 10nm ノード以降の MRAM に必要な下部コンタクト材料のサイズ、膜厚、また、必要な電気抵抗を算出した。

3. ハイエントロピー合金での磁性と電気伝導を例に、第一原理計算と機械学習による電気伝導網羅探索の検討)

ハイエントロピー合金（多種類の元素をほぼ等原子数ずつ混ぜ合わせて作製される新しい概念の合金）の約 7 万種類の元素組み合わせに関して第一原理計算を行い、その磁性、電気伝導を計算した。

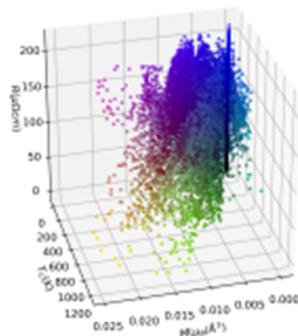


図 1 第 1 原理計算による磁性、電気伝導の計算結果

4. ハイエントロピー合金の半導体工程への応用可能性の調査、検討

2. で求めた STT-MRAM の下部ビアの特性パラメータと 3. のハイエントロピー合金の第 1 原理計算結果から、約 7 万通りの合金の組み合わせから候補となる合金を数十種類にまでに選別することができた。

【今後の活動予定】

TIA かけはしの調査研究を継続して、ハイエントロピー合金以外の合金、また、元素範囲を広げた計算の検討、また、下部コンタクト材料に必要な耐熱性、エレクトロンマイグレーション特性の計算方法に関する調査研究を続けてゆく予定。そして、この成果を元にして競争的資金の獲得を目指す予定である。そして、競争的資金が得られた場合は、実際に合金膜の成膜を行い、実験とマテリアルズインフォマティクス、機械学習を組み合わせる STT-MRAM に最適な Via 材料の研究開発を行きたいと考えている。

以上