

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

目的 Purpose

- ・スピントロニクス素子はSociety5.0を実現する低消費電力デバイスの有力候補である。その発展のためには素子の高性能・大容量化が必要である
- ・大容量化のためには、スピントロニクス素子固有のCMOS基盤技術である微細配線材料の開発が不可欠である。そこで、本研究ではマテリアルズインフォマティクスの手法を用いて効率的な材料探索方法を調査研究する。

方法 Method

- ・10nmノード以降の大容量磁気抵抗メモリ（MRAM）の下部コンタクトに必要な特性パラメータを選定した。
- ・下部コンタクトの磁性と電気伝導の第一原理計算による2~5元合金の網羅探索と機械学習を基に効率的な合金探索スキームを構築、候補を選出した。

展望 Prospect

- ・今回の調査研究結果で得られた、理論・実験・データ科学を組み合わせた微細配線材料探索手法の他の合金材料探索への応用可能性の検討
- ・今回の研究で得られた下部配線材料候補を実際に合成して、実用可能性を実証するための実験方法、資金獲得方法の検討

マテリアルズインフォマティクスを用いたMRAMの微細配線材料等の検討

・多数の理論データと少数の実験データを活かすための材料探索スキームの構築と合金材料候補の選出

・従来の手法では、電気伝導、磁性の第一原理計算には膨大な計算資源が必要となるため、多元の合金材料の効率的な下部配線材料の探索は困難であった。そこで、自動化網羅第一原理計算により作成したビッグデータを用いた予測回帰モデル[1]と材料工学の経験知、古典分子動力学により材料候補を実験可能な数まで選定した。加えて、実験とデータ同化と推薦システムの高度MI手法を繰返し行い材料候補の修正を加える、理論・実験・データ科学を組み合わせた材料探索スキームを構築した(図1)。

・このスキームでは、第一原理計算と機械学習を組み合わせることで効率的な物性の計算が可能となった。さらに半導体材料に関する経験知と古典動力学を用いた物性材料計算によって、材料候補を十数種類にまで絞り込んだ。

・さらに材料形態や実験条件などによる実験結果と理論値が一致しないという問題を解決するためにデータ同化によるモデル補正により、予測補正を行うことで、データの予測精度を上げることが可能となった。

・これらの計算、予測手法とコンビナトリアル実験を組み合わせることで従来手法では困難であった少数の実験データから目的の合金材料の探索を行うことが可能となった。本スキームは下部配線材料の探索だけでなく、他の磁性材料、合金材料の探索にも応用可能である。

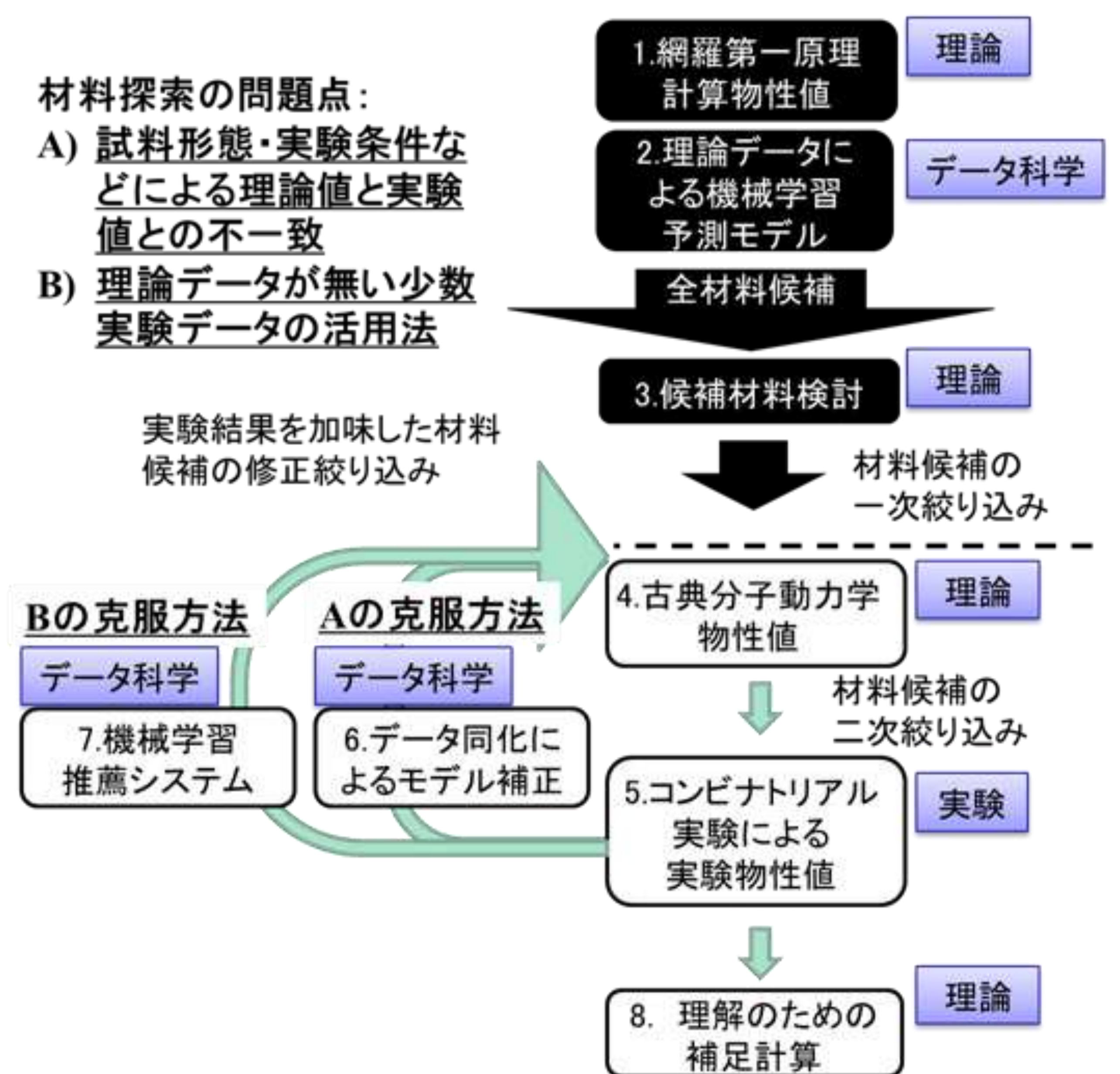


図1 多数の理論データと少数の実験データを活かすための材料探索スキーム。矢印の太さは候補数に相当

発表論文、学会発表、新聞発表

[1] T. Fukushima, H. Akai, T. Chikyow, and H. Kino, "Automatic exhaustive calculations of large material space by Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation method applied to equiatomic quaternary high entropy alloys", Phys. Rev. Materials 6, 023802 (2022).

[2] 木野日織、CASE STUDY IV (招待講演)、第40回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ、2022年2月21日 - 2月25日、オンライン<https://cmdworkshop.sakura.ne.jp/CMD40/index.html>

[3] 2022年2月18日 「電気抵抗法則 機械学習で発見」 日刊工業新聞