

## マテリアルズインフォマティクスの視点からみた ALD と ALE

### How the materials informatics can be applied to ALD and ALE

物材研<sup>1</sup>、<sup>○</sup>知京豊裕<sup>1</sup>、木野日織

NIMS<sup>1</sup>、<sup>○</sup>Toyohiro Chikyow<sup>1</sup>、Hiori Kino<sup>1</sup>

E-mail: CHIKYO.toyohiro@nims.go.jp

近年、材料開発の分野でマテリアルズインフォマティクスが注目されている。ここでは、第一原理計算を自動で行った計算結果や文献値から集めたデータをデータセットとし、それを機械学習することで新材料の候補を見つけ出している。また、最近では、ハイスループット合成の条件探索にベイズ推定を使い、ハイスループット評価では、機械学習を使った効率的な解析が試みられている。結晶成長には流体方程式を解くための多様なパラメータがあるが、ここでも機械学習をつかうことでその計算時間を大幅に短縮できることが報告されている。

さて、このようなマテリアルズインフォマティクスで使われているデータや手法を ALD や ALE に適用するとその可能性が見えてくる。

例えば、ALD に欠かせない Precursor であるが、これは第一原理計算を使った自動計算でかなりの候補を集めることができる。この中から実際に存在している Precursor を見つけ出し、それを教師データとすることでより現実的な Precursor の設計が可能である。

また、表面での分解と製膜プロセスは複雑であるが、特定の表面、例えば  $\text{SiO}_2/\text{Si}(00)$  表面など極性がなく非晶質構造の表面を仮定してある温度での Precursor の分解過程を計算することは可能である。この中で分解や製膜を規定する記述子を見つけることで ALD プロセスの現実と仮想の比較が可能である。

ALE プロセスはあとに材料が残らないためにかかなり難しいが、Precursor の自動計算と表面反応の祖課程の理解から始めることで機械学習をつかうチャンスがある可能性がある。

当日の講演では、マテリアルズインフォマティクスでの現状を概観し、その中で ALE, ALD への適用の可能性に言及する。

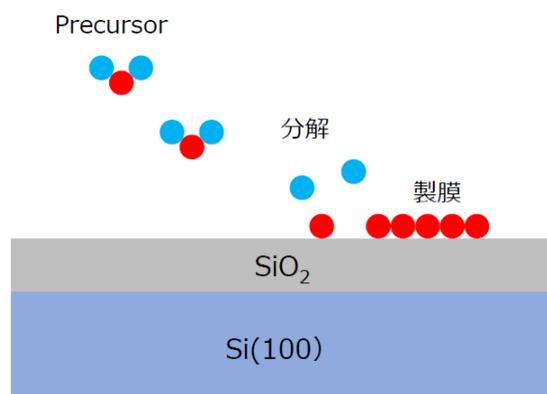


図 1 : ALD プロセスの概念図

Precursor の設計と分解過程に機械学習が適用可能である。