

見積競争の公告

国立大学法人筑波大学において、次のとおり見積競争を実施します。

1. 見積競争に付する事項

- (1) 件名 ZrO₂ および HfO₂ に対する界面物性・ドーパントによる効果の第一原理計算・機械学習作業とそのとりまとめ
- (2) 業務内容 仕様書のとおり
- (3) 履行期限 令和7年3月14日
- (4) 履行場所 仕様書のとおり

2. 仕様書等関係書類交付方法

仕様書等関係書類は、本公告に添付する。

3. 見積書の提出場所等

- (1) 場所 茨城県つくば市天王台一丁目1番1
国立大学法人筑波大学財務部契約課
- (2) 連絡先 (担当) 齊藤 研也 電話番号 029-853-2171
- (3) 見積書提出期限 令和6年9月17日 15時00分
見積競争結果については、電話等により行う。

4. 見積の方法

- (1) 国立大学法人筑波大学契約事務取扱細則及び役務提供契約基準を熟知し、仕様書及び契約条項を承諾のうえ、見積るものとする。
- (2) 契約決定に当たっては、見積書に記載された金額に10パーセントに相当する額を加算した金額（当該金額に1円未満の端数があるときは、その端数金額を切り捨てるものとする。）をもって契約金額とするので、見積者は、消費税及び地方消費税に係る課税事業者であるか免税事業者であるかを問わず、見積もった契約金額の110分の100に相当する金額で見積るものとする。

5. 見積競争に参加する者に必要な資格

- (1) 国立大学法人筑波大学財務規則施行規程（以下「規程」という。）第46条の規定に該当しない者であること。なお、未成年者、被保佐人又は被補助人であって、契約締結のために必要な同意を得ている者は、同条中、特別の理由がある場合に該当する。
- (2) 規程第47条の規定に該当しない者であること。
- (3) 国の競争参加資格（全省庁統一資格）又は国立大学法人筑波大学の競争参加資格のいずれかにおいて令和6年度に関東・甲信越地域の「役務の提供等」の「A」、「B」、「C」又は「D」等級に格付けされている者であること、又は当該資格を有しない者であって、過去1年以内に本学との取引実績を有する者であること。
- (4) 契約担当役から取引停止の措置を受けている期間中の者でないこと。

6. 契約の方式

- (1) 最低価格の見積書を提出した者及び次順位者を契約予定者として、価格交渉を行う。

(2) 契約予定者との価格交渉により、本学の希望価格の範囲内において最低価格を提示した契約予定者を契約の相手方とし、契約金額を決定する。

以 上

令和6年9月6日

国立大学法人筑波大学
契約担当役
財務担当副学長 氷見谷 直紀

見積書提出の注意事項

- 1 見積書提出期限 令和6年9月17日 15時00分
(郵便(書留郵便に限る。))又は宅配便(以下、「郵送等」という。)で
発送する場合には提出期限までに必着のこと)
提出場所 〒305-8577
茨城県つくば市天王台一丁目1番1
国立大学法人筑波大学財務部契約課 齊藤 研也
電話番号:029-853-2171
- 2 見積書作成の注意
 - (1) 見積金額は算用数字を用いて明確に記入すること。
 - (2) 住所氏名を記入し押印すること。
 - (3) 日付を必ず記入すること。
- 3 上記注意事項に適合しない見積書は無効とすることがある。
- 4 契約決定に当たっては、見積書に記載された金額に当該金額の10パーセントに相当する額を加算した金額(当該金額に1円未満の端数があるときは、その端数金額を切り捨てるものとする。)をもって契約金額とするので、見積者は、消費税及び地方消費税に係る課税事業者であるか免税事業者であるかを問わず、見積もった契約金額の110分の100に相当する金額を見積書に記載すること。
- 5 いったん提出された見積書は引換え、変更、取消しをすることができない。
- 6 競争参加資格の確認のための書類
この見積競争に参加を希望する者は、競争参加資格の確認のための書類を見積書提出期限までに提出すること。
なお、本学職員から当該書類その他公告において求められた条件に関し、説明を求められた場合には、競争加入者又は代理人の負担において完全な説明をしなければならない。
 - ・令和6年度に係る一般競争(指名競争)参加資格審査結果通知書
(全省庁統一資格又は国立大学法人筑波大学の競争参加資格)の写し
または過去1年以内に本学との取引実績を有することを証明する書類……………1部
- 7 この契約に必要な細目は、以下によるものとする。
 - ・国立大学法人筑波大学契約事務取扱細則
<https://www.tsukuba.ac.jp/about/disclosure-ho-kisoku/s-03/>
 - ・役務提供契約基準
<https://www.tsukuba.ac.jp/about/bid-contract/#kijun>

仕様書

1. 件名 ZrO₂およびHfO₂に対する界面物性・ドーパントによる効果の第一原理計算・機械学習作業とそのとりまとめ
2. 内容 詳細は別紙のとおり
3. 完了期限 令和7年3月14日(金)
4. 納入場所 国立大学法人筑波大学計算科学研究センター207号室
5. 支払い 検査終了後、適法な請求書を受理した日から起算して40日以内に支払うものとする。
6. その他 (1)この契約に必要な細目は、国立大学法人筑波大学契約事務取扱細則及び役務提供契約基準によるものとする。
(2)その他詳細については、本学教員の指示によるものとする。

1. 概要

次世代の半導体ゲート絶縁膜用高誘電率材料（**high-k** 材料）として正方晶ジルコニア（ ZrO_2 ）及びハフニア（ HfO_2 ）が期待されているが、常温常圧では単斜晶をとるため、不純物ドーパなどの安定化技術が必要である。また、これらをベースとした薄膜において良好な強誘電特性を得るためには、強誘電特性を発現する結晶構造を基板表面で安定化させることが求められる。

これまでに、第一原理計算に基づく不純物ドーパによる ZrO_2 や HfO_2 の構造安定性の定量的評価を行い、各種ドーパ元素の組み合わせとドーパ元素の配置に対するデータセットを構築し、特徴量解析を通して、構造安定性を評価する特徴量を抽出した。また、TiN 基板上の薄膜成長機構を検討するために、 ZrO_2/TiN 界面について最適な界面モデルとその時の電子状態を第一原理計算により探索した。これらの結果から、**high-k** 材料の探索のためのデータ基盤が得られた。今後は、これらのアプローチを踏襲して、不純物ドーパによる ZrO_2 や HfO_2 の安定性の最適化と TiN 基板との界面構造を理解した構造モデルを提案することが **high-k** 材料の探索に結びつけることができると期待できる。

そこで、本作業では、これまでに得られたデータを整理し、バルク系ドーパの相安定化効果に関する機械学習を構築し、相安定化に向けたドーパ条件の提案を行う。また、 ZrO_2/TiN の界面モデルを最適化し、 ZrO_2 と整合する基板物質を選定する。得られた結果を基に、広範囲に **high-k** 材料に適する材料の探索を行う。

本仕様書は、上記第一原理計算と機械学習に関する仕様を定めるものとする。

2. 完了期限

令和7年3月14日

3. 納入場所

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1
筑波大学 計算科学研究センター 207 室

4. 納入物件

業務完了後、電子媒体で提出すること。

作業実施報告書	一式
ソースコード	一式
計算に用いた入力および出力データ	一式

5. 仕様

5.1 計算データの取得、機械学習モデルの構築、計算結果の精査と予備調査について

<検討事項>

- (1) これまでに得られている不純物ドーピングによる ZrO_2 や HfO_2 の構造安定性と TiN 基板上との界面構造の第一原理計算の結果を精査し、論文として投稿できるデータとしてとりまとめる。
- (2) ZrO_2 と HfO_2 結晶への不純物ドーピングの第一原理計算に対し、機械学習モデルの作成を行う。
- (3) 実験により得られている ZrO_2/TiN 界面構造のデータを基に、元素の混合を考慮した界面モデルを作成する。第一原理計算により最適な構造を探索し、電子状態を解析する。
- (4) High-k 材料の候補を探索するために、上記以外の high-k 関連材料に関して、第一原理計算や機械学習モデルの作成を行う。取り扱う物質は、最近の研究動向を考慮して行う。

5.2 評価

- (1) これまでに得られている不純物ドーピングによる ZrO_2 や HfO_2 の構造安定性と TiN 基板上との界面構造の第一原理計算の結果は、計算手法・条件や計算結果に間違いがないか精査する。また、論文として投稿できるデータとして図や表としてとりまとめる。
- (2) 機械学習モデルの作成は、組成等から相安定化効果を直接予測するモデルと、与えられた組成についてドーパント配置を生成し全エネルギーまたは最安定配置を予測するモデルを構築する。
- (3) 機械学習モデルの作成にはいくつかの機械学習アルゴリズムを試す。また、ベイズ最適化法を活用し、安定配置探索・ドーパント探索を効率化できるかどうか検証する。
- (4) 整合界面モデルの構造安定性と電子構造を評価する。安定性の指標として、分離時とのエネルギー差を主に用い、電子構造の指標として、状態密度を主に用いる。

5.3 その他事項

- (1) 具体的な計算対象や計算手法の選定、作業方針と作業実施内容については、計算コストや作業量を考慮し、発注者と受注者との間で緊密に意見を交換した上で作業を行うこと。
- (2) 第一原理計算には、平面波基底の密度汎関数計算コードを用いること。
- (3) 本業務遂行に資する計算データ・実験データについては、可能な範囲で受注者と共有すること。
- (4) 作業実施内容については、作業実施報告書にまとめて記載すること。
- (5) 計算の入出力ファイルおよび作業実施報告書を成果物として指定期限までに納品すること。
- (6) 本作業に必要な商用プログラムのライセンス・計算環境等は発注者が提供すること。
- (7) 月に1回のミーティングに参加し、進捗状況を報告すること。

6. 知的財産権

本件により新たに発生した知的財産権については、発注者に帰属することとする。

7. 秘密保持

この契約において作成され、また担当者から提出された資料等は、契約目的以外に使用しないこと。ただし、担当者の承認を得た場合にはこの限りではない。

8. 検査条件

本仕様書記載の要件を満たしているか、納入物件に対して仕様、数量、品質等の検査を行う。

9. 保証

保証期間は納入後1ヶ年とする。この保証期間内に納入物件に瑕疵が生じた場合は、無償で修正を行うこと。

10. その他

本仕様書に記載なき事項については、本学担当者との協議の上決定するものとする。

以上