

ニューラルネットによる High-k/SiO₂ 界面分極の予測能力

Prediction Ability of Neural Network for Dipole Moments at High-k/SiO₂ Interfaces

○中根 滉稀¹, 功刀 遼太¹, 富田 基裕^{1,2}, 渡邊孝信¹
(早大理工¹, 学振特別研究員 PD²)

○K. Nakane¹, R. Kunugi¹, M. Tomita^{1,2} and T. Watanabe¹
(Waseda Univ.¹, JSPS Research PD²)

E-mail: nakane_kouki@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【研究背景】

近年、計算シミュレーションや実験結果で得られる大量のデータに基づいて新材料開発の指針を見出す、いわゆる「マテリアルインフォマティクス」の取り組みが活発化しており、機械学習による発見的予測技術に関心が寄せられている。当グループでは、ニューラルネットワーク (NN) による予測能力が、物理モデルに基づく従来の計算科学の予測能力にどれほど匹敵し得るか調査している。前回、ナノスケールのデバイス特性の統計ばらつきの計算で NN の学習能力を評価した結果を報告した^[1]。今回は、High-k/SiO₂ 界面で生じる分極を再現する分子動力学(MD)シミュレーション^[2,3]で得られるデータを用いて、NN による学習・予測能力を評価した。

【シミュレーションおよび NN の方法】

Al, Mg, Sr, Ti の 4 種類の金属元素が混合した様々な組成の酸化物と SiO₂ の界面の MD 計算(Fig.1 参照)を行い、界面におけるイオンの偏移動によって生じたダイポールモーメントのデータを、NN で学習させた。単元酸化物同士であれば、両者の酸素原子密度差でダイポールモーメントの方向と大きさを予測できることが知られているが^[4]、MOSFET のゲートスタックで実際に用いられる多元 high-k 絶縁膜の界面ダイポールを系統的に予測できるモデルは確立していない。機械学習による予測が可能となれば、材料開発のスピードを大幅に向上する可能性がある。今回、120 種類の入力データを 4 種類の金属元素の組成比とし、ダイポールモーメントの値を出力とする、Fig.2 に示すような 4 層構造の NN を採用した。まず、MD シミュレーションで得られた結果を NN に学習させ、学習完了後、学習に用いたデータと未学習のテストデータを入力し、実際のシミュレーション結果と比較した。

【結果および考察】

Fig.3 は、MD 計算で得られたダイポールモーメントと、NN で学習・予測させたダイポールモーメントの相関図である。今回用いた非常に単純な NN モデルでもある程度学習に成功していることがわかる。Fig.4 は MD 計算と NN による学習結果を J チャートで比較したものである。マーカーの色がダイポールモーメントの大きさを表しており、かなり良い相関を示していることが分かる。ただし、NN による予測と MD 計算の間には現在のところ有意な相関がみられていない。今後、NN の層数や最適化アルゴリズム等の検討を進めていく。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)(15H03979)の支援を受けて行われた。

【参考文献】 [1] 古林せなみ 他, 応用物理学会春季学術講演会, 19a-S223-10 (2016). [2] R. Kuriyama, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 53, 08LB02 (2014). [3] K. Shimura, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55, 04EB03 (2016). [4] K. Kita et al., APL 94, p.132902 (2009).

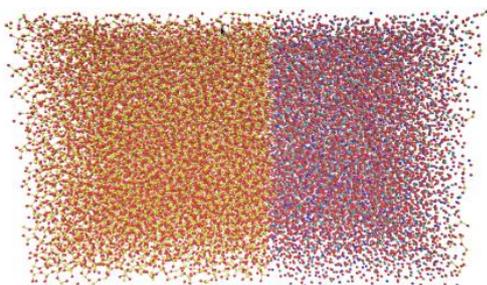


Fig.1 High-k/SiO₂ model
(Al:Mg:Sr:Ti = 2:1:1:1)

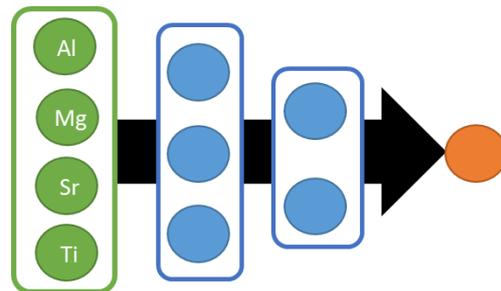


Fig.2 Construction of Neural Networks

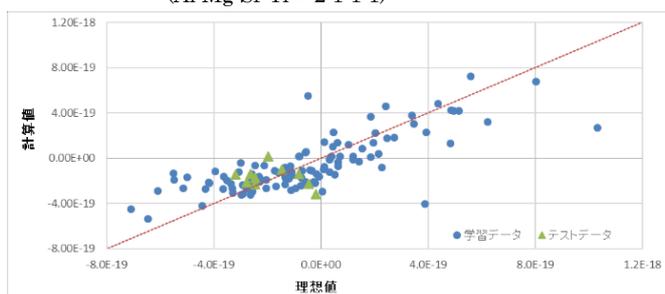


Fig.3 Result of Neural Networks

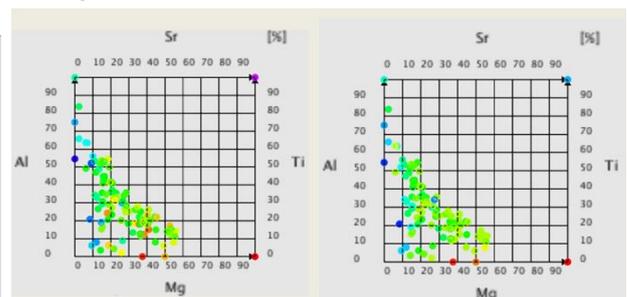


Fig.4 Result of J-chart between ideal value and calculated value

(Left figure: Ideal values, Right figure: Calculated values)