

ランダム不純物ばらつき下でのナノスケール電子伝導過程の機械学習によるモデル化
 Modeling of electron transmission process in the channel of nanoscale device under random
 impurity fluctuation with machine learning

北海道科学大¹, 早大² (B)中谷隆帆¹, (B)平田紘大¹, (B)川原颯真¹, 須子統太², [○]村口正和¹

Hokkaido Univ. of Science¹, Waseda Univ.², Ryuho Nakaya¹, Kouta Hirata¹, Souma Kawahara¹,

Tota Suko², Masakazu Muraguchi¹

E-mail: muraguchi-m@hus.ac.jp

【はじめに】

近年、数値計算で得られた大量のデータから、材料の物性や構造と電気的特性などとの関係を機械学習を用いてモデル化し、設計を効率化する手法の開発が進められている[1,2]。しかし、精度の良いモデル構築のためには、目的に応じて機械学習の手法やデータセットを適切に選ぶ必要があり、その指針の確立は未だ課題である。本研究では、ナノスケール半導体中での電子伝導過程について、ランダムな不純物分布から電子の透過率を予測するモデルを構築するための機械学習の手法を検討した。

【デバイスのモデルと方法】

まず、図1に示すような、ナノワイヤデバイス中のチャネル領域を模した2次元のポテンシャル場に、ポテンシャルの深さ、幅の異なる仮想的な不純物を複数個ランダムに配置し、それらの位置と電子波束の透過率の関係を、入射する電子波束のエネルギーを45通り変えて、1000セット取得した。得られたデータセットに対して、不純物分布と電子透過率の関係を機械学習を用いてモデリングした。機械学習の手法としては、重回帰分析やLasso回帰、ランダムフォレストなどの手法を検討した。また、説明変数としては、不純物の位置座標をそのまま利用するだけでなく、そこから物理的な特性を考慮した様々な特徴量を用いて検討を行った。

【結果と解析】

実験の結果、最も予測精度の高かったのは、機械学習手法がランダムフォレストで、チャネル領域を8×8の64領域に分割し、その中に不純物があれば1、なければ0と表現した特徴量の場合であった。このとき、平均2乗誤差は0.0180、平均絶対誤差は0.108であった。ある不純物分布の場合の透過率と予測結果の例を以下の図2で示す。

【引用文献】 A. Lopez-Bezanilla and O. A. Lilienfeld, Phys. Rev. B 89, 235411 2014.

S. Furubayashi, et al, JSAP Autumn Meeting 2017 19a-S223-10.

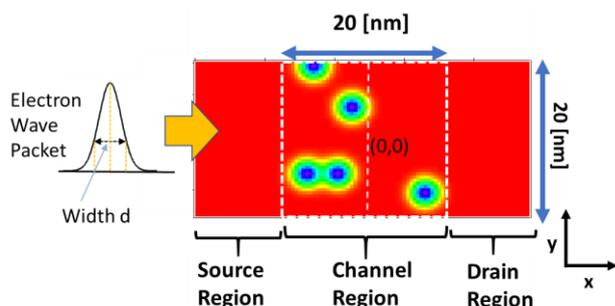


Fig.1 Model of nanowire channel with impurity

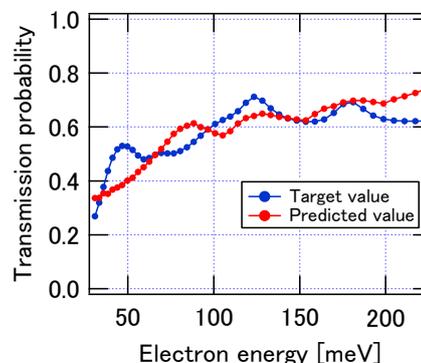


Fig.2 Examples of Target value and the Predicted value