

酸化亜鉛系ナノ結晶アレイを想定した 光応答特性シミュレーションの多層ニューラルネットワークによる学習 Multilayer neural network learning for optical response numerical analyses of assuming ZnO-based nanocrystal arrays

光野徹也¹(T. Kouno), 静岡大工¹(Shizuoka Univ.), E-mail: kono.tetsuya@shizuoka.ac.jp

ZnO はバンドギャップ ~ 3.4 eV、励起子束縛エネルギー ~ 60 meV の直接遷移型半導体であり、ZnO をベースとした MgZnO などの混晶により紫外域発光デバイスを担う光材料として期待されている。また、ZnO や ZnO をベースとした結晶は、ナノ構造の作製やこれらの特徴の応用に向けた研究報告が多数成されている。その一つとしてナノ結晶アレイは、フォトリソグラフィなどの特徴的な光現象により高いパフォーマンスの発光デバイス実現が期待され、我々も ZnO をベースとしたナノ結晶成長の制御によりナノ結晶のアレイ化に向け取り組んでいる[1]。このようなナノ構造に起因するフォトリソグラフィ現象の検討において 3 次元有限時間領域差分法などの数値シミュレーションは強力なツールであるが、多くの時間(或は計算資源)を費やしフィードバックに一定の課題がある。計算モデルの構造パラメータを多少なりとも変化させた場合に計算結果を容易に予想することは難しく、一連の計算結果からの推測が難しいケースもある。ここで、近年、技術開拓が著しいニューラルネットワークを多層化したディープラーニングに代表される機械学習の手法に注目した。これら機械学習のテクニックを用いれば、ある一定の計算モデルの構造パラメータと計算結果を繋ぐ複雑な関係を機械学習することにより、一定の計算モデルに対し計算結果を迅速に知る(予想する)ことができると期待される。

本研究では、ZnO をベースとしたナノ結晶アレイを想定した計算モデルを 3D-FDTD によりシミュレーションした結果を python により記述した多層ニューラルネットワーク(回帰モデル)を用いて学習し、この多層ニューラルネットワークから得られる推測値とシミュレーション結果とを比較しながら学習データの与え方、推測値の精度、ニューラルネットワークの構造などの関係について検討した(概要図 1)。

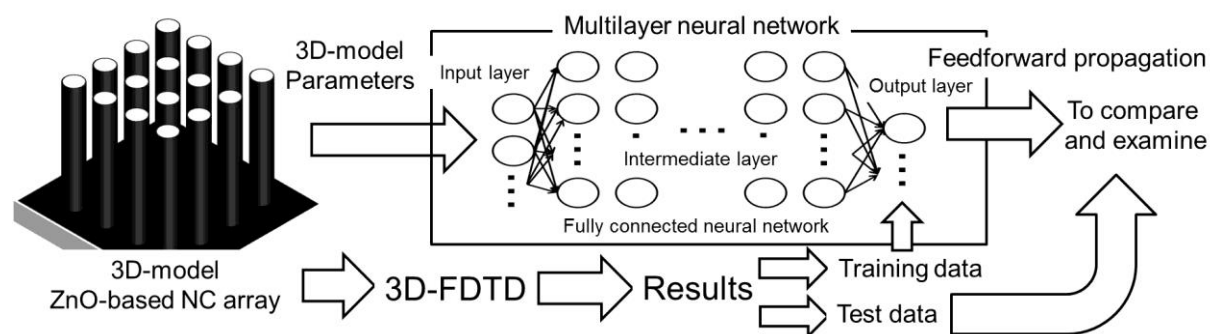


Fig. 1. Schematic illustration of our trial

引用文献 [1] 木村、光野他、第 66 回応用物理学会春季学術講演会 12a-PA3-1 (2019).