

ランダム不純物分布を有するナノスケール半導体中での 電子透過率および時系列電子密度分布の機械学習によるモデル化

Modeling of electron transmission and time-development of electron density distribution in the nanoscale device under random impurity fluctuation with machine learning

北海道科学大¹, 早大² 中谷隆帆¹, 川原颯真¹,
伊藤佳卓¹, 須子統太², ○村口正和¹

Hokkaido Univ. of Science¹, Waseda Univ.², Ryuho Nakaya¹, Souma Kawahara¹,
Yoshitaka Itoh¹, Tota Suko², Masakazu Muraguchi¹

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

ナノスケールのデバイス設計に、機械学習によるモデル化を組み込むことで、煩雑な物理計算による計算コストの低減と、系の特微量の抽出などを通じた新たな設計手段への拡張が試みられている [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特微量を適切に選ぶ必要があり、その指針確立は未だ課題である。我々は、これまで量子効果を含む電子波動関数の時間発展計算に着目し、機械学習の適用を検討してきた。具体的には、半導体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での電子ダイナミクスの計算結果から、不純物分布を入力とし電子の透過率を予測できるモデルの作成を、ランダムフォレスト(RF)およびニューラルネットワーク(NN)を用いて行ってきた[3]。それぞれのモデルについて平均絶対誤差を比較し、不純物数個程度でその座標をベースとした入力の場合には、RFの方がより良い精度を与えるという結果を得ている。今回は、両者の比較から得られた知見を踏まえ、RFによる更なる高精度モデルの作成に取り組んだ結果と、NNの得意とする画像列の学習を、電子密度の時間変動に適用し、電子のダイナミクスから不純物分布を予測するモデル構築に取り組んだ結果を報告する。

RFによるモデルの高精度化のために、得られている学習データの性質の詳細な検討を行った (Fig. 1)。エネルギーごとの透過率の分布や、これまでに用いてきた不純物間の距離などの特微量と透過率間の相関を比較した結果、不純物密度の高い領域でのポテンシャルの局所的増大に起因する透過率のばらつきと相関のあるパラメーターの選択が、高精度化のために重要であることを明らかとした。

また、電子密度の時間発展の画像列から不純物分布を予測することを目指し、NNを用いたモデル化に取り組んだ (Fig. 2)。畳み込みNNによるモデル化を行い、画像列を個別に入力とした場合、画像列の平均を入力とした場合、さらに時系列の因果性を取り込んだ場合を比較した結果を報告する。

【引用文献】 1) A. Lopez-Bezanilla et al, Phys. Rev. B 89, 235411 2014. 2) S. Furubayashi, et al, JSAP Autumn Meeting 2017 19a-S223-10. 3) R. Nakaya et al, JSAP Autumn Meeting 2019

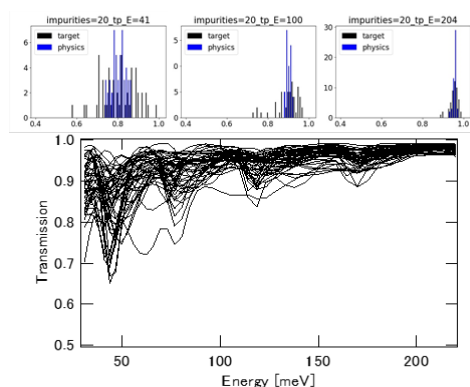


Fig. 1 予測データの透過率曲線 (50 データ) とエネルギーごとの透過率の分布と予測結果 (左から E=41, 100, 204 [meV])

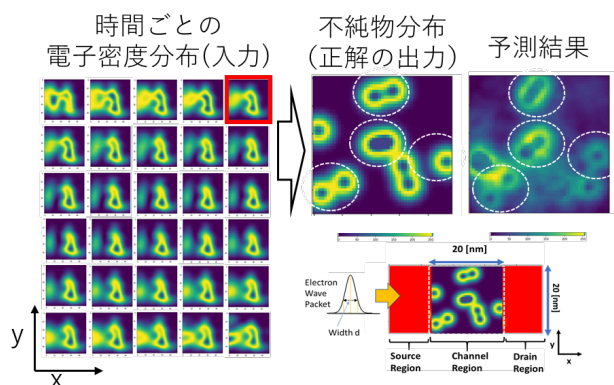


Fig.2 電子密度の時間発展 (左) と不純物分布 (中央) および、ある時刻の電子密度 (枠内) から予測された不純物分布 (右)。