

量子細線における不純物効果の深層学習による推定

Deep Learning Estimation of Impurity Effects in Quantum Wire

茨大工[○]児玉 陽一, 長谷川 伸, 野木沼 真海, 竹田 晃人, 青野 友祐

Ibaraki Univ.¹, [○]Youichi Kodama¹, Shin Hasegawa, Masami Noginuma,

Koujin Takeda, Tomosuke Aono

E-mail: 20nm619r@vc.ibaraki.ac.jp

【はじめに】

現代のコンピュータの計算能力の目覚ましい進歩により、近年、人工知能は車の自動運転や画像認識及び画像作成、自然言語処理など多くの分野で注目を浴びている。深層学習はその発展を支える技術の一つである。

本研究では量子細線に電流を流したときのデータをもとに深層学習を用いて不純物の位置の特定に取り組んだ。量子細線モデル 10000 個の電流データをニューラルネットワークで学習させ不純物の位置を分類させ、その時の精度について議論を行う。特に、学習途中で分類の結果を図示することで精度と学習過程を可視化する。

【量子細線モデル】

使用した量子細線モデルの模式図を Fig. 1 に示した。量子細線（青色の格子点）の一箇所に他の場所とは異なる不純物を置く。ナノメートルサイズの半導体構造中に不純物が含まれるとき、量子細線の電流特性は半導体中の不純物の場所に依存する。電流特性と不純物の位置を紐づけたデータセットを作成した。このとき不純物の位置を Fig. 2 のように 1-4 のカテゴリーに分類して、これを学習させることで電流特性データに対する分類問題を考える。

【機械学習モデル】

学習を行う前の前処理として、電流データに対して正規化を行った。機械学習モデルは全結合ニューラルネットワークで、三層構造である。入力層のノード数は、量子細線の電流特性のデータのサイズに合わせて 100 である。中間層のノード数は 20 で活性化関数は sigmoid 関数である。出力層はノード数が 4 個で活性化関数はソフトマックス関数である。オプティマイザは確率的勾配降下法で学習を行った。

【シミュレーション解析】

電流データを正規化し、上記の機械学習モデルで学習させ、不純物の位置を分類した。Fig. 3 にエポック数と学習精度及びテスト精度の関係を示した。精度は 0~100 エポックにかけて

急激に増加し、いずれも 90%以上となった。

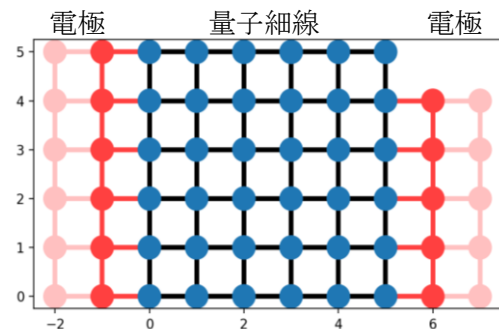


Fig. 1. Quantum Wire Model

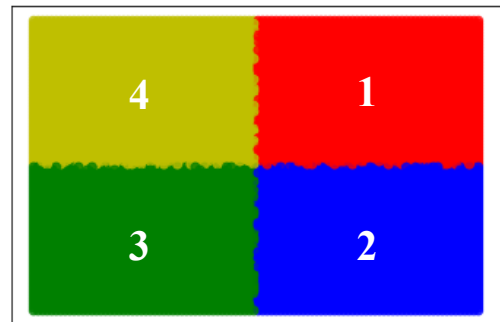


Fig. 2. Position Classification

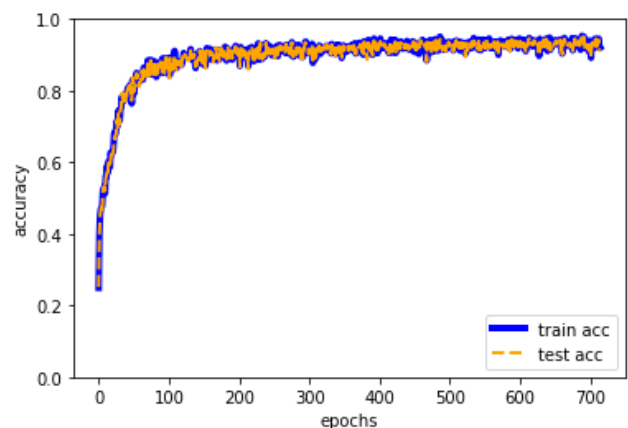


Fig. 3. Training accuracy and Test accuracy (1-4)

【まとめ】

カテゴリー分けした量子細線モデルに対し正規化した電流データをニューラルネットワークに学習させることで量子細線内部の不純物の位置を 90%以上の精度で分類することができた。