

ゲート式量子コンピューティングアルゴリズムを援用した ナノスケールデバイスシミュレーション手法の検討

A study on the development of nanoscale device simulation method based on the use of
gate-type quantum computing algorithm

神戸大院工 ○松尾 信吾, 石橋 拓也, 相馬 聡文

○Shingo Matsuo, Takuya Ishibashi, Satofumi Souma

Department of Electrical and Electronic Engineering, Kobe University

電界効果型トランジスタなどの種々の素子の性能向上に向けては、シミュレーションによる性能予測とそれに基づくデバイス設計が不可欠である。デバイス特性の定量的なシミュレーションのためには、非平衡グリーン関数法 (NEGF) やボルツマン輸送方程式、ドリフト拡散方程式等の輸送方程式に基づく非平衡空間電荷分布の計算とポアソン方程式に基づくポテンシャル分布の自己無撞着計算を行う必要があり、これらのシミュレーションの高速化に対する要求が高まっているが、近年ではニューラルネットワークなどの情報科学的な手法応用した高速化[1]も検討されているなど、数理科学と物質科学の相互作用は新たな展開を見せている。一方、近年の量子コンピューティング技術の進展、中でも IBM Q などのクラウドを経由した量子コンピュータの利用環境の劇的な進展により、小規模～中間規模の量子コンピュータ、いわゆる NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスの利用を前提とした応用事例の開拓に関する研究が近年盛んに行われている。そのような量子コンピュータの具体的な応用事例の開拓は物質科学シミュレーションから金融などの社会科学シミュレーションまで多岐に渡るが、いずれも、個々の分野において必要とされてきた具体的な方程式の解法やアルゴリズムの実行において量子コンピュータをどのように活用できるのか、という部分の検討が重要となる。

半導体デバイスシミュレーションにおいても、今後長期的な形で量子コンピューティングアルゴリズムの活用の可能性を検討する事が重要であると考えられる。本講演では、量子コンピュータ、特にゲート式量子コンピュータアルゴリズムのデバイスシミュレーションへの活用に関する初期段階の検討結果の幾つかについて報告する。その事例の一つとして、ポアソン方程式に基づくポテンシャル分布の計算において、量子位相推定アルゴリズムの応用の一つである HHL (Harrow-Hassidim-Lloyd) アルゴリズム[2,3] (Fig. 1)を用いる事が挙げられる。Fig. 2 に、Si ナノワイヤ pn 接合構造における半導体内ポテンシャル分布の計算に適用した結果を示す。講演ではアルゴリズムデザインの詳細とその結果への影響、デバイスシミュレーションへの他の適用事例についても述べる。

[1] S. Souma and M. Ogawa, IEICE Electronics Express, 17.20190739 (2020).

[2] A. W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd, Phys. Rev. Lett. 103, 150502 (2009).

[3] S. Wang, Z. Wang, W. Li, L. Fan, Z. Wei, and Y. Gu, Quantum Inf. Process. 19, 170 (2020).

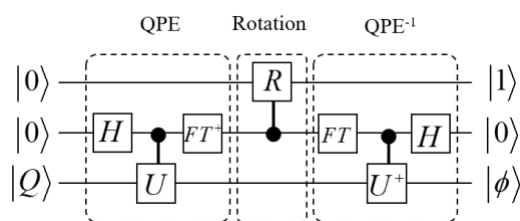


Fig. 1. Quantum gate circuit of HHL algorithm to solve matrix Poisson's equation $[C]\phi = Q$, where $[C]$ is capacitance matrix and is encoded in the unitary operation U . The quantum circuit is composed of Hadamard gate (H) quantum Fourier transformation (FT), rotation (R), and unitary operation (U).

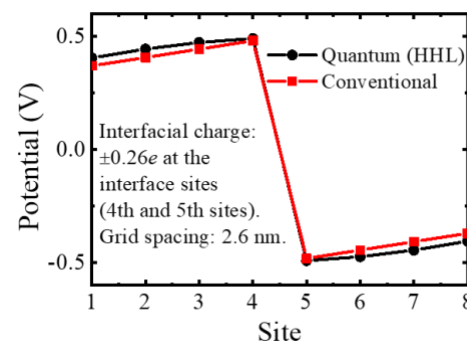


Fig. 2. Potential distribution in Si nanowire pn-junction. Results obtained by quantum (HHL) algorithm and conventional (LU decomposition) method are compared.