

ナノスケール半導体中の電子の時間発展から不純物分布を予測するモデル化

Modeling to Predict Impurity Distribution
from Time Evolution of Electron in Nanoscale Semiconductors北海道科学大¹, 早大²○村口正和¹, 原田和輝¹, 小林祐貴¹, 伊藤佳卓¹, 須子統太²Hokkaido Univ. of Science¹, Waseda Univ.²,Masakazu Muraguchi¹, Kazuki Harada¹, Yuuki Kobayashi¹, Yoshitaka Itoh¹, Tota Suko²

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

時間依存シュレディンガー方程式を数値計算により解くことで得られる、波動関数および物理量の期待値の時間発展をナノスケールデバイスの設計に活かす方法を探索してきた[1]。その中で、電子密度の時間発展と不純物分布の関係を機械学習を用いてモデル化し、電子伝導過程から逆に不純物分布を予測することに取り組んでいる。所望の電流経路を先に設計すると、それに対応する不純物分布が得られることで、デバイス設計の自由度向上を期待している。これまでの研究では、初歩的な予測には成功していたものの、結果を平均2乗誤差などで評価すると、不純物のポテンシャル分布が平均的に散らばっている結果がもっとも良い精度となり、予測結果の精度を評価するのが困難だという課題があった[2]。

本報告では、逆問題を解いているという利点を活かし、予測結果として得られた不純物分布をハミルトニアンに取り込み、再度物理シミュレーションを行うことで、電子伝導過程および透過率を予測結果の評価指標として用いる方法を提案する。Fig.1 に提案手法の模式図を示す。これにより、従来の平均2乗誤差による画像の比較に加え、物理シミュレーションに基づく物理量を評価することで、物理的に妥当な予測結果を与えるモデル構築が容易となることを期待した。

Fig.2 に、予測された不純物分布の下での再計算により得られた電子の透過率と、正しい不純物分布の下での透過率の関係を散布図で示した。予測不純物分布の下で得られた透過率の方が全体的に低めの値となる傾向が得られた。これは提案手法により、従来の不純物分布間の比較だけでは困難であった、予測精度の詳細な評価に必要な指標が得られることを示す結果である。得られた結果をもとに、さらに精度の高いモデルを構築するための指針を検討した結果を報告する。

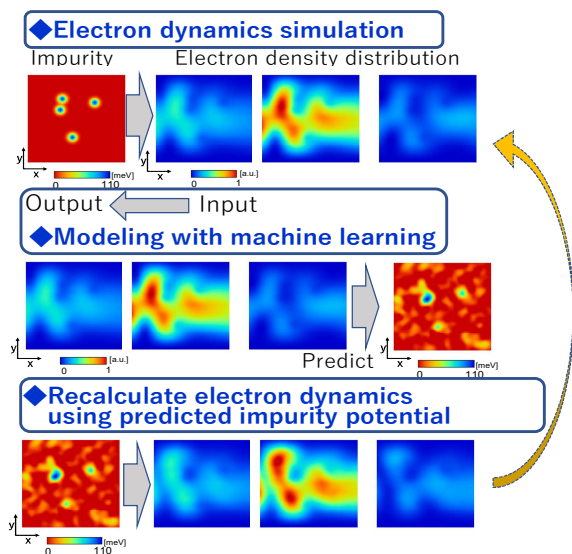


Fig.1 提案したモデル化とその評価方法の模式図

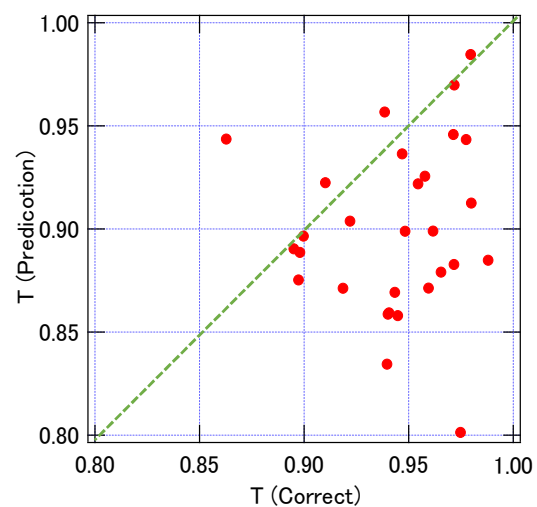


Fig. 2 予測した不純物分布および正しい不純物分布に対する電子透過率の関係

[1] M. Muraguchi et al, JJAP 61 (2022) 044001.

[2] K. Harada et al, 応用物理学会北海道支部大会 B-III-5 (2023)