

電子密度の時間発展データを用いたナノスケール半導体中不純物分布の 畳み込みニューラルネットワークによるモデル化

Modeling of Impurity Distribution in Nanoscale Semiconductors Using Time
Evolution Data of Electron Density with Convolutional Neural Network

北海道科学大¹, 早大²

原田和輝¹, 小林祐貴¹, 伊藤佳卓¹, 須子統太², 〇村口正和¹

Hokkaido Univ. of Science¹, Waseda Univ.²,

Kazuki Harada¹, Yuuki Kobayashi¹, Yoshitaka Itoh¹, Tota Suko², Masakazu Muraguchi¹

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

量子ダイナミクスに基づくデバイス設計に機械学習を組み合わせることで計算効率の向上と、解析の精度向上を目指している。これまで、物理シミュレーションにより求めた、ナノ半導体中の電子密度の時間発展データと透過率の関係をモデル化することで、ランダム不純物下での電子の透過率を予測する手法を提案してきた[1]。これに加え、逆に電子密度の時間発展データから不純物分布を予測するモデル化による半導体デバイスの新たな設計手法に取り組んできた[2]。本研究では、この手法の課題であった、予測された不純物分布の評価を、物理シミュレーションを再帰的に行い、物理量を抽出することで実行する手法について報告する。

Fig. 1 に示すような $20\text{ nm} \times 20\text{ nm}$ の領域にランダムに不純物が分布する 2 次元半導体ナノワイヤを想定し、この系に電子波束が注入された場合の電子密度の時間発展を物理シミュレーション（時間依存シュレディンガー方程式を数値的に解くこと）で得た。電子密度を一定時間間隔で保存し、不純物分布と合わせ、学習データとした。電子波束のエネルギーとして、比較的散乱が起りやすく透過率のばらつきの大きいエネルギーを選び、900 個のデータを取得した。このうち 810 セットを学習データ、90 セットをテストデータとした。説明変数として、電子密度分布の時間発展データ、目的変数に不純物分布を設定し、畳み込みニューラルネットワークを用いたモデル化を行った。

得られたモデルを用いて未知の電子密度分布データから不純物分布を予測した。この予測結果を Fig.2(a) に示すように再度、物理シミュレーションに取り込んで計算を行い、透過率や電子密度の時間発展を求めた。得られた結果を正解データ[Fig.2 (b)]と比較した。その結果、誤差関数の評価では良い不純物分布となっている場合でも、時間発展データが大きく異なっている場合があることが明らかとなった。本提案の方法により、時間発展の途中データも含めた評価が可能となり、モデルの高精度化につながる。

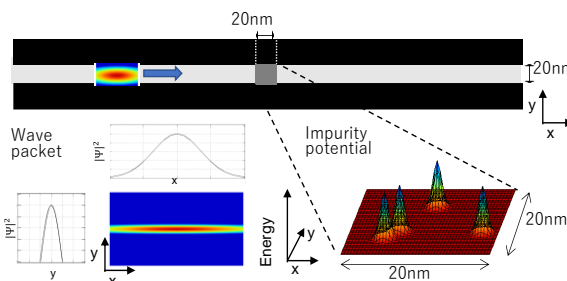


Fig. 1 系の模式図。ランダム不純物を有する 2 次元
ナノワイヤ中を電子波束が運動

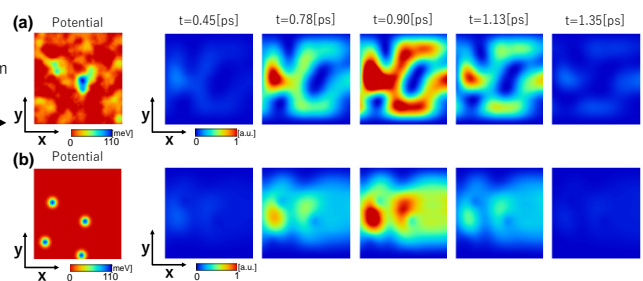


Fig.2 (a)予測された不純物分布とそれを初期条件とした物理
シミュレーションによる電子密度分布の時間発展。(b)
テストに用いた不純物分布とその電子密度の時間発展。

【引用文献】 [1] M. Muraguchi et al, JJAP 61 (2022) 0444001.

[2] 小倉佑斗 et al, 電気・情報関係学会北海道支部連合大会 A18, (2021).