

Нейросетевая функциональность гексагональной полупроводниковой наноструктуры

Д.Е. Цуриков

Лаборатория Оптики спина, Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д. 1, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504.

DavydTsurikov@mail.ru

Теоретически предсказана нейросетевая функциональность в электрических характеристиках гексагональной полупроводниковой наноструктуры на базе двумерного электронного газа в GaAs, выражающаяся в возможности обучения системы операции сложения по модулю 2.

Введение

Искусственные нейронные сети широко применяются для решения неформализуемых задач: распознавания образов, кластеризации и т. д. Такую же функциональность мы можем получить на основе квантового электронного транспорта в полупроводниковых наноструктурах. Для его расчёта мы будем использовать модель *квантовой сети* [1], а для моделирования наноструктуры с нужной функциональностью — предложенную ранее схему [2].

Структура и эффективность

Обучение нейросети состоит в настройке её свободных параметров для достижения целевого отклика на основе внешних стимулов [3, с. 89]. Спроектируем полупроводниковую наноструктуру, которую можно обучить операции сложения по модулю 2 — исключающему «ИЛИ» (табл. 1).

Таблица 1. Операция сложения по модулю 2 (XOR).

бит 1	0	0	1	1
бит 2	0	1	0	1
бит 1 XOR бит 2	0	1	1	0

Согласно табл. 1 наноструктура может находиться в четырёх состояниях: «00», «01», «10», «11». Каждому из них соответствует значение выходного бита. В терминах электронного транспорта оно кодируется протекающим через систему током: $J^{(00)}$, $J^{(01)}$, $J^{(10)}$, $J^{(11)}$. Тогда операция сложения по модулю 2 запишется в виде:

$$J^{(00)} = J^{(11)}, \quad J^{(00)} \neq J^{(01)}, \quad J^{(10)} = J^{(01)} \quad (1)$$

Исследуем возможность выполнения соотношений (1) в гексагональной наноструктуре на базе двумерного электронного газа в GaAs: $m_e / m_0 = 0.063$

(рис. 1). Применим для неё следующую нейросетевую интерпретацию.

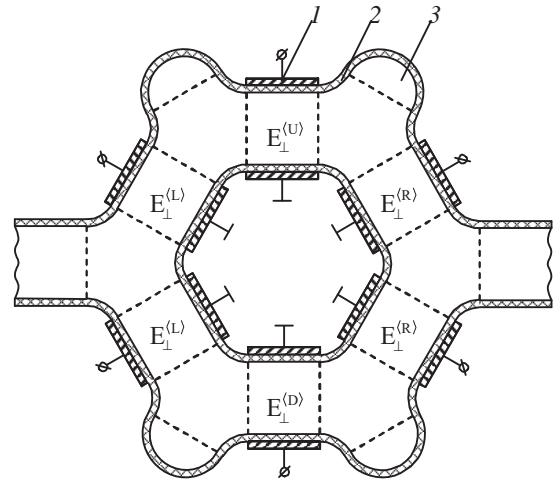


Рис. 1. Гексагональная наноструктура: 1 — металл, 2 — диэлектрик, 3 — полупроводник

Внешние стимулы. $E_{\perp}^{(u)}$ и $E_{\perp}^{(d)}$ — напряжённости электрического поля в кодирующих узлах. Они задают четыре возможных состояния системы

$$\{ |kl\rangle \mid E_{\perp}^{(u)} = E_{\perp}^{(k)}, E_{\perp}^{(d)} = E_{\perp}^{(l)} \}_{k,l=0,1} \quad (2)$$

где $E_{\perp}^{(0)}$ и $E_{\perp}^{(1)}$ — напряжённости электрического поля, кодирующие значения входных битов «0» и «1», соответственно.

Свободные параметры. E_F — уровень Ферми наноструктуры, $E_{\perp}^{(L)}$ и $E_{\perp}^{(R)}$ — напряжённости электрического поля в боковых узлах, $E_{\perp}^{(0)}$ и $E_{\perp}^{(1)}$.

Отклик системы. Протекающий через наноструктуру ток в четырёх возможных состояниях:

$$\{ J^{(kl)} \mid E_{\perp}^{(u)} = E_{\perp}^{(k)}, E_{\perp}^{(d)} = E_{\perp}^{(l)} \}_{k,l=0,1} \quad (3)$$

Симметрия системы даёт $J^{(10)} = J^{(01)}$. Соглашение $E_{\perp}^{(1)} < E_{\perp}^{(0)} = 0$ приведёт к $J^{(00)} \neq J^{(01)}$. Тогда, полагая

$J^{(00)} > J^{(01)}$, близость отклика системы к целевому (1) (эффективность) запишем как

$$\delta = [\min(J^{(00)}, J^{(11)}) - J^{(01)}] / \max(J^{(00)}, J^{(11)}) \quad (4)$$

Значения и диапазоны параметров

Есть два типа параметров наноструктуры: *фиксированные* и *варьируемые* (свободные). Для первых определим их значения, для вторых — диапазоны.

Наноструктура на рис. 1 — частный случай QIY-сети [1, разд. 4]. У неё фиксированы длины внутренних рукавов $\{A^k = 0 \text{ nm}\}^{k \in I}$, длины I-узлов $\{A^{(K)} = 10 \text{ nm}\}^{K \in I}$, ширины всех рукавов и сочленений $B^- = B^{(Q)} = B^{(I)} = B^{(Y)} = 10 \text{ nm}$, радиусы скруглений Q- и Y-узлов $R^{(Q)} = R^{(Y)} = 5 \text{ nm}$. Фиксируем также её температуру $T^- = 300 \text{ K}$, напряжение смещения $U_\square = 50 \text{ mV}$ и уровни Ферми резервуаров (внешних рукавов слева и справа на рис. 1) $E_F^0 = E_F + eU_\square / 2$ и $E_F^3 = E_F - eU_\square / 2$.

Для уровня Ферми наноструктуры выберем диапазон $E_F \in (E_{\pm 1}^-, E_{\pm 3}^-)$ на основе 1-го и 3-го уровней размерного квантования электрона поперёк рукавов $E_{\pm 1}^- = 0.060 \text{ eV}$ и $E_{\pm 3}^- = 0.537 \text{ eV}$, соответственно. Для напряжённостей электрического поля выберем диапазон $\{E_\perp^{(I)} = -7 \cdot 10^7 - 0 \text{ V/m}\}^{I=L,R,1}$.

Заданные значения и диапазоны размерных параметров наноструктуры позволяют получить их безразмерные аналоги, необходимые для расчётов [1].

Обучение наноструктуры

Обучение наноструктуры — поиск максимума эффективности (4) как функции свободных параметров. Найдём его с помощью *генетического алгоритма* [4] на основе расчёта электронного транспорта [1]: $E_F = 0.147 \text{ eV}$, $E_\perp^{(L)} = -1.80 \cdot 10^7 \text{ V/m}$, $E_\perp^{(R)} = -3.14 \cdot 10^7 \text{ V/m}$, $E_\perp^{(1)} = -3.32 \cdot 10^7 \text{ V/m}$, $\delta = 84 \%$.

На вольт-амперных характеристиках (ВАХ) наноструктуры (при $U_\square = 0-50 \text{ mV}$) с найденными выше параметрами $J^{(01)} = J^{(10)}$ (следствие симметрии), $J^{(00)} \approx J^{(11)}$ («побочный» эффект максимизации δ). При этом ВАХ близки к линейным, что позволяет применить приближение [1, (145)] (табл. 2).

Таблица 2. Приближённая проводимость наноструктуры (Рис. 1), обученной операции сложения по модулю 2

$E_\perp^{(L)}, \text{V/m}$	0	0	$-3.32 \cdot 10^7$	$-3.32 \cdot 10^7$
$E_\perp^{(R)}, \text{V/m}$	0	$-3.32 \cdot 10^7$	0	$-3.32 \cdot 10^7$
$\tilde{\sigma}^{30}, \text{S}$	$2.34 \cdot 10^{-5}$	$3.44 \cdot 10^{-6}$	$3.44 \cdot 10^{-6}$	$2.34 \cdot 10^{-5}$

Из сравнения табл. 1 и табл. 2 видно, что входные стимулы $E_\perp^{(L)}, E_\perp^{(R)} = 0 \text{ V/m}$ соответствуют логическому «0», а $E_\perp^{(L)}, E_\perp^{(R)} = -3.32 \cdot 10^7 \text{ V/m}$ — логической «1». Отклик системы определяется проводимостью наноструктуры: $\tilde{\sigma}^{30} = 2.34 \cdot 10^{-5} \text{ S}$ соответствуют логическому «0», а $\tilde{\sigma}^{30} = 3.44 \cdot 10^{-6} \text{ S}$ — логической «1». Ячейки, отвечающие логической «1», всюду для наглядности затенены.

Согласно использованной интерпретации в результате моделирования мы получили ожидаемую таблицу значений операции сложения по модулю 2. Это означает, что проведённый численный эксперимент позволил получить нужный отклик системы на внешние стимулы. Таким образом, гексагональная полупроводниковая наноструктура (рис. 1) обладает нейросетевой функциональностью.

Заключение

В силу использованных при расчётах приближений наша модель является оценочной. При этом современные эксперименты показали, что при комнатных температурах электрические характеристики наноструктуры качественно нечувствительны к её деталям [5]. Поэтому в реальном эксперименте у полупроводниковых наноструктур можно также ожидать, в том числе, и более сложную нейросетевую функциональность.

Благодарности

Автор благодарит Санкт-Петербургский государственный университет за исследовательский грант 73031758.

Литература

1. Tsurikov D.E. // e-print arXiv:2011.03094v3 [cond-mat.mes-hall] (2021).
2. Tsurikov D.E., Yafyasov A.M. // J. of Computational Electronics, V. 18, P. 1017–1024 (2019).
3. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс, 2-е изд. М.: Вильямс (2006).
4. Mitchell M. An Introduction to Genetic Algorithms. Cambridge–Massachusetts: MIT Press (1999).
5. Csontos D., Xu H.Q. // Physical Review B, V. 67, I. 23, № 235322. P. 2353221–23532210 (2003).