

УДК 538.915

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

© 2022 г. К. П. Пчелинцев^{а, *}, Н. А. Ветрова^{а, **}, В. Д. Шашурин^а

^аМосковский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,
Москва, 105005 Россия

*e-mail: pkp@bmstu.ru

**e-mail: vetrova@bmstu.ru

Поступила в редакцию 31.05.2021 г.

После доработки 20.06.2021 г.

Принята к публикации 30.06.2021 г.

Приборы на основе наноразмерных нелинейных элементов с поперечным транспортом носителей заряда широко применяются в различных современных радиоэлектронных системах. Однако в настоящее время не разработан оптимальный (с точки зрения временной сложности и точности) подход для прогнозирования эксплуатационных параметров с учетом временного фактора и внешнего воздействия подобных устройств. В данной работе авторами предложен вариант решения задачи моделирования деградации гетероструктурных наноразмерных приборов с поперечным транспортом носителей заряда на основе искусственной нейронной сети прямого распространения. Использование нейросетевых подходов при моделировании резонансно-туннельных диодов позволяет значительно (на несколько порядков) повысить быстродействие таких моделей. Обучение разработанной искусственной нейронной сети данными, полученными в рамках испытаний на надежность низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурных диодов, позволяет в несколько раз повысить точность модели за счет учета влияния технологических погрешностей (возникающих при производстве), а также различных деградационных изменений (протекающих с течением времени и под воздействием внешних факторов в процессе эксплуатации резонансно-туннельных диодов).

Ключевые слова: гетероструктуры, терагерцовый диапазон, осциллятор, полупроводниковые эпитаксиальные слои, беспроводная связь, наноразмерная электроника, резонансно-туннельный диод, математическое моделирование, искусственные нейронные сети, персептрон, деградация.

DOI: 10.31857/S1028096022010137

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в современных радиоэлектронных системах в качестве нелинейного элемента широко применяется резонансно-туннельный диод (РТД). При изменении параметров слоев гетероструктуры РТД можно осуществлять управление формой вольтамперной характеристики, создавая диод, оптимальный для различных устройств [1], к примеру, осцилляторов [2] или смесителей [3] терагерцового диапазона. Однако на сегодняшний день является нерешенной задача обеспечения требуемого уровня надежности РТД при стабильном технологическом процессе изготовления [4]. Причиной сложившейся ситуации является отсутствие адекватных моделей деградации гетероструктурных устройств. При разработке подобных моделей необходимо выявить основные деградационные механизмы,

определить энергию активации и коэффициенты диффузии соответствующих процессов [5, 6]. Кроме того, в погрешность моделей неизбежно “закладываются” ошибки вычисления эмпирических поправочных коэффициентов комбинированных расчетно-экспериментальных моделей токопереноса [7, 8]. Достижимость высокого уровня точности и достоверности таких деградационных моделей, построенных на традиционных подходах, вызывает очевидные сомнения.

Авторами предложено использование искусственной нейронной сети (ИНС) [9, 10] для аппроксимации сложных, в том числе скрытых, функциональных зависимостей эксплуатационных характеристик РТД от конструкторско-технологических параметров с учетом временного фактора и внешнего воздействия.

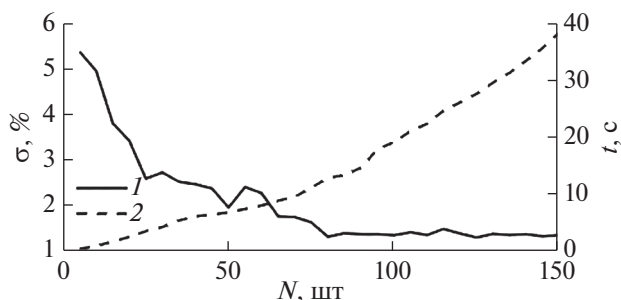


Рис. 1. Результаты моделирования: 1 – Зависимость усредненной ошибки обучения σ от числа нейронов на скрытом слое N , 2 – Зависимость времени обучения нейронной сети t от числа нейронов на скрытом слое N .

МЕТОДИКА

В общем случае искусственная нейронная сеть представляет собой систему соединенных и взаимосвязанных элементарных нелинейных вычислительных блоков, называемых нейронами. В соответствии с обобщенной аппроксимационной теоремой, с помощью линейных операций и каскадного соединения нелинейных элементов может быть установлена с заданной точностью и аппроксимирована любая непрерывная функциональная зависимость [11, 12]. Первым шагом при разработке ИНС является выбор структуры. Структурой или же топологией нейронной сети называют схему, описывающую модель соединения нейронов между собой. Авторами предложено использование многослойного персептрона, в качестве нелинейной функции активации подтверждена эффективность использования гиперболического тангенса.

В рамках решения задачи моделирования деградации РТД, в качестве конструкторско-технологических параметров выделены толщины гетерослоев, формирующих барьеры и яму, внешнее воздействие рассмотрено как повышение температуры в течение заданного времени. Соответственно, аппроксимируемая функциональная зависимость может быть формализована следующим образом:

$$J = F(d_w, d_b, T, t, V),$$

где d_w – толщина слоя, формирующего потенциальную яму; d_b – толщины слоев, формирующих потенциальные барьеры; T – величина температуры; t – длительность температурного воздействия; V – значения приложенного напряжения.

Число нейронов на входном слое определено числом независимых параметров аппроксимируемой характеристики РТД. На выходе сети один нейрон, принимающий значение плотности тока.

Значительное внимание при разработке нейронной сети было уделено выбору метода обучения нейронной сети. С математической точки зрения обучение ИНС представляет собой решение многопараметрической нелинейной оптимизационной задачи. Именно в процессе обучения нейронная сеть способна выявить и обобщить функциональную зависимость между входными и выходными данными. Обобщающая способность является важнейшим свойством ИНС, позволяющим модели отражать исходные данные в искомые результаты на всем множестве данных, а не только в тренировочных примерах. В качестве критерия выбора оптимального метода обучения использовано время обучения сети. Исследования, проведенные авторами на модельных структурах, показали, что алгоритм Левенберга–Марквардта является наиболее быстродействующим методом обучения ИНС. При оценке быстродействия алгоритмов обучения в качестве критерия их остановки принималось достижение заданной точности.

В настоящее время не существует универсального метода, используемого для определения гиперпараметров и структуры ИНС [13, 14]. При разработке нейронной сети проведены исследования влияния числа нейронов на скрытом слое на время и точность обучения. В качестве критерия при оценке точности выбрана ошибка обучения (величина расхождения прогнозируемого значения, полученного на выходе ИНС, и данными, использованными при формировании обучающей выборки). Анализ полученных результатов позволил получить точечную оценку числа нейронов на скрытом слое. Обобщенные результаты представлены на рис. 1.

Таким образом, в рамках разработки модели деградации РТД с использованием искусственных нейронных сетей, была получена структура сети, определена функция активации, осуществлен выбор числа нейронов на скрытом слое и выбран метод обучения сети, позволяющие с требуемой точностью установить и аппроксимировать искомую функциональную зависимость.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для верификации, разработанной нейросетевой модели выполнено сравнение электрических характеристик прибора на выходе ИНС с результатами, полученными с использованием квантово-механической модели токопереноса в гетероструктуре GaAs/AlGaAs с учетом времени и внешних факторов. В данной модели с целью учета изменений структуры с течением времени использована диффузионная модель, описывающая дрейф атомов алюминия из барьеров в яму и спейсеры (1). Зависимость коэффициента диффузии алюминия от температуры определена с

помощью модели Аррениуса (2). В рамках формализма волновых функций, прозрачность вычислялась как отношение амплитуд волн, падающих и прошедших через моделируемую структуру (3), определяемых из уравнения Шредингера (4), а расчет плотности тока, в рамках формализма Ландауэра, был сведен к интегрированию (5).

Таким образом, численная модель может быть представлена системой интегро-дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial X_{Al}(t)}{\partial t} = D_{Al}(T) \frac{\partial^2 X_{Al}(z)}{\partial z^2}, \quad (1)$$

$$D_{Al}(T) = D_0 \exp(-E_a/kT), \quad (2)$$

$$Tr(E) = \frac{|A_n|^2 K_n m_n^*}{|A_l|^2 K_l m_n^*}, \quad (3)$$

$$H\Psi = E\Psi, \quad (4)$$

$$J(V, t) = \frac{2m^*ekT}{(2\pi)^2\hbar^3} \int_0^\infty Tr(E) \ln \left(\frac{1 + e^{-\frac{E-E_F^L}{kT}}}{1 + e^{-\frac{E-E_F^R}{kT}}} \right) dE, \quad (5)$$

где $Tr(E)$ – прозрачность моделируемой гетероструктуры, k – постоянная Больцмана, T – температура, m^* – эффективная масса электрона, e – элементарный заряд, X_{Al} – доля замещения атомов галлия атомами алюминия, $D_{Al}(T)$ – коэффициент диффузии, D_0 – предэкспоненциальный множитель, E_a – энергия активации диффузионного процесса, $E_F^{L(R)}$ – энергия Ферми в левом (правом) резервуаре, A – амплитуды падающей и прошедшей волны, $K_i = \sqrt{2m_i^*(E - U_i)}/\hbar$ – волновое число электрона в i -ой точке, \hbar – постоянная планка, E – полная энергия электрона.

При формировании массива обучающих данных параметры были заданы на регулярной сетке. С целью оценки обобщающей способности полученной нейронной сети выборка разделена на две (первая использована для обучения, вторая для оценки ошибки обобщения, полученной при использовании входных данных, не участвовавших в обучении). Зависимости ошибки обучения и обобщения от величины приложенного напряжения представлены на рис. 2.

Итоговая ошибка обучения не превышает 2%, а максимальная ошибка обобщения составляет 2.5%, что позволяет сделать вывод о высокой точности нейросетевой модели. Кроме этого, сравнительный анализ времени вычислений полученной модели и квантовомеханической модели показал, что модель на основе обученной нейронной сети является более эффективной для

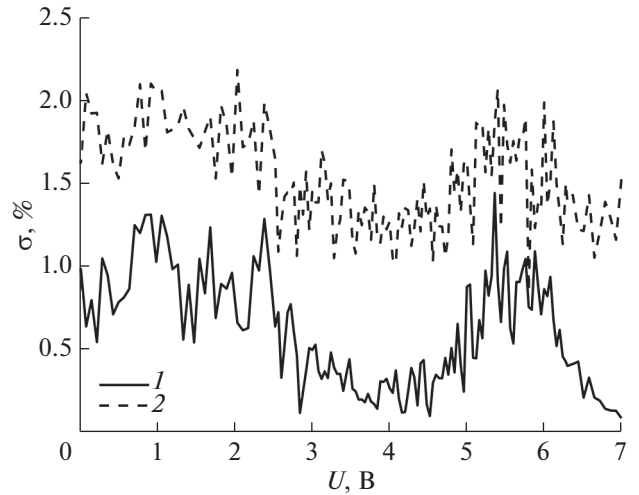


Рис. 2. Результаты моделирования: 1 – Зависимость ошибки обучения от величины приложенного напряжения, 2 – Зависимость ошибки обобщения от величины приложенного напряжения.

многоитерационных вычислений, так как осуществляет расчеты на несколько порядков быстрее.

В рамках валидации разработанной нейросетевой модели, для обучения использованы экспериментальные измерения ВАХ, соответствующие следующему набору параметров: $T = 300, 500, 550, 600$ К; $t = 0, 1, 2, 3, 4, 7, 14, 21, 28, 60, 72, 110, 145$ ч. Следует отметить, что вольтамперная характеристика получена не для всех возможных сочетаний параметров, то есть, фактически область обучения нерегулярна. Результаты моделирования при температурах 550 К и времени нагрева 14 и 21 ч, а также и их сравнение с экспериментальными данными представлены на рис. 3.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о высокой точности аппроксимации с помощью искусственных нейронных сетей нелинейной функциональной зависимости эксплуатационных характеристик РТД от конструкторско-технологических параметров с учетом времени и воздействия внешних факторов, и, как следствие, о перспективности развития нейросетевых методов при моделировании деградации приборов на основе низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур.

Показано, что нейронная сеть способна обучиться на основе выборки входных параметров с нерегулярным разбиением. В данный момент авторами ведутся исследования для оценки значимости и требуемого числа параметров, а также количества значений для каждого параметра. Последняя задача особенно важна при обучении ИНС с помощью экспериментальных данных, так как

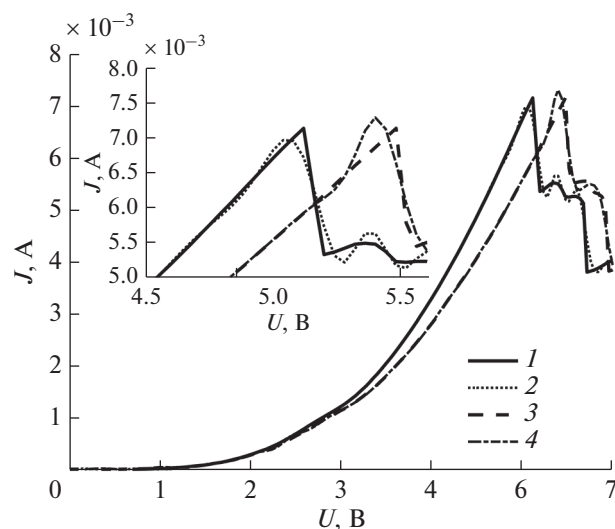


Рис. 3. Результаты моделирования: 1 – экспериментальные данные ($T = 550$ К, $t = 14$ ч), 2 – нейросетевая модель ($T = 550$ К, $t = 14$ ч), 3 – экспериментальные данные ($T = 550$ К, $t = 28$ ч), 4 – нейросетевая модель ($T = 550$ К, $t = 28$ ч).

изготовление и испытания низкоразмерных полупроводниковых структур требует значительных финансовых затрат.

Анализ результатов, полученных с использованием ИНС, обученной на основе экспериментальных данных, позволяет сделать вывод о возможности учета совокупного влияния технологических погрешностей и различных деградационных изменений. Что обеспечивает перспективность подобного подхода для решения прикладных задач проектирования современных радиоэлектронных приборов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлено использование современного нейросетевого подхода к моделированию характеристик РТД и их изменения с течением времени под воздействием внешних факторов. Разработанная модель на основе ИНС прямого распространения способна с высокой точностью оценить электрические характеристики РТД, что подтверждено на этапе верификации полученной нейросетевой модели численной квантовомеханической моделью (максимальная ошибка обучения не превышает 2%, а ошибка обобщения составляет не больше 2.5%). При обучении разработанной ИНС экспериментальными данными предложенная модель учитывает совокупное влияние технологических погрешностей и различных деградационных изменений, протекающих в приборе за время его эксплуатации. Как следствие, нет необходимости ввода дополнительных “поправочных” эмпирических коэффициентов, которые

имеются во всех известных и широко применяемых на сегодняшний день феноменологических моделях. Для оценки электрических параметров РТД с помощью, представленной нейросетевой модели требуется выделение значительно меньшего объема вычислительных ресурсов в сравнении с комбинированными квантовомеханическими моделями, что делает ее использование привлекательным для итерационного решения оптимизационной задачи обеспечения требуемого уровня надежности РТД.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang J., Al-Khalidi A., Zhang C., Ofiare A., Wang L., Wasige E., Figueiredo J.M.L. // 10th UK-Europe-China Workshop on Millimetre Waves and Terahertz Technologies. 2017. 1–4. <https://doi.org/10.1109/UCMMT.2017.8068497>
2. Kasagi K., Suzuki S., Asada M. // J. Applied Physics. 2019. V. 125. № 15. P. 151601. <https://doi.org/10.1063/1.5051007>
3. Yang F. // J. Computational and Theoretical Nanoscience. 2017. V. 14. № 4. P. 1766. <https://doi.org/10.1166/jctn.2017.6501>
4. Baba R., Stevens B.J., Mukai T., Hogg R.A. // IEEE J. quantum electronic. 2018. V. 54. № 2. P. 21. <https://doi.org/10.1109/JQE.2018.2797960>
5. Soboleva O.S., Yuferev V.S., Podoskin A.A., Pikhtin N.A., Zolotarev V.V., Golovin V.S., Slipchenko S.O. // IEEE Transactions on Electron Devices. 2020. V. 67. № 2. P. 438. <https://doi.org/10.1109/TED.2019.2960936>
6. Makeev M.O., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu. // IOP Conf. Series: J. Physics: Conf. Series. 2017. V. 917. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/917/9/092004>
7. Nadar S., Zaknoute M., Wallart X., Coinon C., Emilien P., Ducournau G., Gamand F., Thirault M. // IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology. 2017. V. 7. № 6. P. 780. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2017.2755503>
8. Anantram M.P., Lundstrom M.S., Nikonov D.E. // Proceedings of the IEEE. 2008. V. 96. № 9. P. 1511. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2008.927355>
9. Schmidhuber J. // Neural Networks. 2015. V. 61. P. 85. <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003>
10. Laudani A., Lozito G.M., Fulginei F.R., Salvini A. // Computational Intelligence and Neuroscience. 2015. V. 2015. P. 264. <https://doi.org/10.1155/2015/818243>
11. Dua V. // Computers & Chemical Engineering. 2011. V. 35. № 3. P. 545. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.06.005>
12. Jamili E., Dua V. // Computers & Chemical Engineering. 2019. V. 147. P. 107221. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.107221>
13. Vujicic T., Tripo M., Jelena L., Balota A., Sevarac Z. // Central European Conference on Information and Intelligent Systems. 2016. P. 219.
14. Gnana Sheela K., Deepa S.N. // Mathematical Problems in Engineering. 2013. V. 6. P. 965. <https://doi.org/10.1155/2013/425740>

Modeling of Degradation of Resonant-Tunnel Diodes Using Artificial Neural Networks

K. P. Pchelintsev^{1, *}, N. A. Vetrova^{1, **}, V. D. Shashurin¹

¹*Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005 Russia*

**e-mail: pkp@bmstu.ru*

***e-mail: vetrova@bmstu.ru*

Devices based on nanoscale nonlinear elements with transverse transport of charge carriers are widely used in various modern radio-electronic systems. However, at present, neither a time-optimal nor an accuracy-optimal approach has been developed for predicting the operating parameters with regard to the time factor and external influences of such devices. In this paper, the authors propose a variant of solving the problem of modeling degradation of a nanoelectronic device with transverse transport of carriers on the basis of an artificial neural network of forward propagation. The use of neural network approaches in the simulation of resonant-tunnel diodes can significantly (by several orders) increase the speed of such models. Training of the developed artificial neural network by the data obtained from the reliability tests of low-dimensional semiconductor heterostructure diodes allows to increase model accuracy by several times by taking into account influence of technological errors (occurring during manufacturing) and various degradation changes (occurring with time and under the influence of external factors during operation of resonant-tunnel diodes).

Keywords: heterostructures, terahertz range, oscillator, semiconductor epitaxial layers, wireless communication, nanoelectronics, resonant-tunnel diode, mathematical modelling, artificial neural networks, persep-tron, degradation.