

令和 3 年 6 月 10 日現在

機関番号：12605

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01471

研究課題名(和文)FPGAに実装された人工知能の支援による原子接合の作製技術と量子状態の制御

研究課題名(英文)Fabrication of Au Atomic Junctions Using Artificial Intelligence Implemented on FPGA

研究代表者

白樫 淳一 (Shirakashi, Jun-ichi)

東京農工大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：00315657

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、人工知能(AI)を用いて金属細線でのエレクトロマイグレーション現象を制御し、金属原子を室温で一つずつ移動させることが可能な、AIに支援された原子の移動・操作技術の開発を行った。ここで、AIがフィードバック制御型エレクトロマイグレーション(FCE)法の実験パラメータを自律知能的に決定し、原子スケールの接点構造である原子接合や原子ギャップを作製し、原子1個～数個の島電極を有する“単原子”トランジスタの実現を目指す。これより、エレクトロマイグレーションを用いてAIに支援された原子スケールデバイス技法の開拓を行い、人間の経験に頼らない、AIを利用した単一原子機能の発現・制御手法を確立した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、AIが、人間の経験的な作業に依存することなく実験的な研究活動を自律的・知能的に行うことが可能な独自システムの開発を行った。近年のAIの進歩は目覚ましく、これまで人間が経験的に行ってきた知的作業の代表格である「研究」という活動にAIを利用できるのではないかと仮説した。一般に、ナノスケールで発現される量子現象の観測では、実験サンプルの作製から物性測定に至るまで、その実験制御パラメータは非常に膨大となり、長時間の試行錯誤のもと、人間が経験的に当該パラメータを決定していた。この作業をAIが代替できれば、人間よりも遥かに効率的かつ精緻に実験研究の進展が期待できる。

研究成果の概要(英文)：Recently, there has been much interest in the possibility of Ising spin model to solve combinatorial optimization problems. The Ising spin model is a statistical mechanics model of magnetism, and hardware implementations analogous to the Ising spin model have also been proposed. Here we showed that Ising machines can be used for the parameters optimization in experiments by direct mappings of parameters selection, which is one of a "combinatorial optimization problem", onto the Ising Hamiltonian. This study addresses a way of parameters optimization in feedback-controlled electromigration (FCE) method. We applied optimum parameters obtained by the ground-state searches of Ising spin model to FCE experiments. Further, we applied the system for fabrication of Au atomic junctions and gaps. Single-electron transistors (SETs) were also fabricated using the method. Korotzkov-Nazarov model exhibited a reasonable fit with SET properties.

研究分野：ナノエレクトロニクス、ナノテクノロジー

キーワード：人工知能 原子接合 エレクトロマイグレーション FPGA ナノデバイス

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

近年、人工知能 (Artificial Intelligence: AI) を実社会に活用し、人間の活動に伴う社会的・産業的な課題を最適化しようという試みが様々な分野で加速している。我々は、組み合わせ最適化に向けた AI 技術の一つとして、スピングラスの収束動作を用いたイジングスピンモデルに着目している。これまでの検討から、本モデルは膨大な解空間から高速に最適解または準最適解を導くことが可能であることを示してきた。そこで本研究では、多くの実験制御パラメータの存在によりそれらの組み合わせで表現される解空間が極めて膨大となる現実の実験系に対し、AI を適用することを試みる。具体的には、金属細線における原子接合やナノギャップの作製手法として知られている、フィードバック制御型エレクトロマイグレーション (FCE) 法への AI の適用を目指し、原子接合での量子化コンダクタンスの制御状態を評価する学習エンジンや評価エンジンに加え、最適な実験パラメータを設定する推論エンジンを新たに構築し、これら 3 つの AI システムを組み合わせることで自律的な FCE 制御の可能性について検討を行う。

### 2. 研究の目的

本研究では、AI を用いて金属細線でのエレクトロマイグレーション (EM) 現象を制御し、金属原子を室温で一つずつ移動させることが可能な、AI に支援された原子の移動・操作技術の開発を行う。具体的には、AI が実験パラメータを自律知能的に決定し、原子スケールの接点構造である「原子接合」や原子スケールのギャップ構造である「原子ギャップ」を作製する。これらの技術を応用し、原子 1 個～数個の島電極を有する単電子トランジスタである「単原子」トランジスタの実現を目指す。技術的には、Field-Programmable Gate Array (FPGA) に AI を実装したカスタムハードウェア (専用実験装置) を独自に構築する。本システムにより、AI が金属細線での EM の発現強度をその場フィードバック制御により調整し、単一原子を高速に移動制御する。これより、「エレクトロマイグレーション」という簡単な手法を用いて AI に支援された原子スケールデバイス技法の開拓を行い、人間の経験に頼らない、AI を利用した単一原子機能の発現・制御手法の確立を目指す。

### 3. 研究の方法

本研究での研究期間は 3 年である。まず、学習エンジン・評価エンジン・推論エンジンからなる AI システムを作製し、AI が自律的に実験パラメータを設定しながら原子を一個単位で制御可能な「原子接合」や「原子ギャップ」の作製技術を開発する。さらに、島電極が原子 1 個～数個分のサイズで形成された究極的な単電子トランジスタである「単原子トランジスタ」を開発する。具体的には、これらの解決課題 ~ を、以下の独自技術(✓)の開発をもって解決する。

(1) 解決課題 AI システム (学習・評価・推論エンジン) の構築と AI 支援型 FCE 法の開発  
✓ 金属細線における EM の発現強度を印加電圧のフィードバック手法により制御し、急激な EM の進行を抑制しながら徐々に金属原子を移動させる FCE 法を開発  
✓ AI により FCE 法を実行させるための学習エンジン・評価エンジン・推論エンジンを構築し、FPGA に実装した「AI 支援型 FCE カスタムハードウェア」を開発

(2) 解決課題 AI の支援による FCE 法を用いた原子接合や原子ギャップの作製  
✓ AI 支援型 FCE カスタムハードウェアにより、Au や Ni の金属細線に FCE 法を適用し、室温でのコンダクタンス量子化をその場で観測しながら原子を一つずつ移動させ、「原子接合」や「原子ギャップ」を作製

(3) 解決課題 AI の支援による FCE 法を用いた単原子トランジスタの作製  
✓ 「原子接合」や「原子ギャップ」の作製を精緻に制御することで、数ナノメートルのギャップ空間内に原子 1 個～数個をアイランド電極として配置し、「単原子トランジスタ」を作製  
✓ 断熱動作過程による、素子の電力・遅延積を熱限界まで低減可能な動作モードの検討

### 4. 研究成果

(1) 初年度 (平成 30 年度) では、AI システム (学習・評価・推論エンジン) の構築と AI 支援型 FCE 法の開発を行った。具体的には、金属細線における EM の発現強度を印加電圧のフィードバック手法により制御し、急激な EM の進行を抑制しながら徐々に金属原子を移動させる FCE 法を開発した。さらに、FCE 法での各種実験パラメータを AI に自律決定させるための学習エンジン・評価エンジン・推論エンジンを構築した。これら 3 種類の AI エンジンを FPGA に実装することで「AI 支援型 FCE カスタムハードウェア」を開発した。AI システムの学習サイクルは、学習エンジンが実験サンプルの FCE 波形データを収集しデータベース化→ 評価エンジンが FCE 波形データを評価関数により評価→ 推論エンジンが最適な実験パラメータの適用スケジューリングを推論して FCE 実験ヘリアルタイムに適用→新たな実験サンプルで を開始、となる。これより、新たに FCE 実験を行うたびにデータベースが強化され、推論エンジンの学習強

度が上がるため、実験を行えば行うほど、原子接合の形成により適した FCE 実験の実行が可能になる。

従来、FCE 法による原子接合や原子ギャップの作製では、各種・多量な実験パラメータの調整を人間の経験や試行錯誤的な作業に頼っていた。そこで、AI により FCE 実験パラメータの自律知能的な設定を行い、人間が介在せず、過去の実験データに基づいて機械 (AI) が自律的・知能的に研究や実験を遂行するシステム「AI 支援型 FCE カスタムハードウェア」を開発した。過去 50 サンプル分の実験データにより構成されたデータベースを用いた Au 原子接合の作製実験では、本システムにより、Au 細線のコンダクタンス  $G$  (量子化コンダクタンス  $G_0 (=2e^2/h)$  で規格化) が量子化しながら 200 ミリ秒以内に  $1G_0$  以下まで減少していることが確認された。本システムは FPGA に実装されており、AI の学習から FCE の実験制御までを高速なハードウェアタイミング分解能 (マイクロ秒) で実行できることが明らかとなった。

(2) 次年度 (令和元年度) では、AI 支援型 FCE カスタムハードウェアを用いて、AI がデータベースを基に実験パラメータを決定することで、実験の進行に伴い自律的に実験パラメータを最適化し、原子接合や原子ギャップを作製した。具体的には、組み合わせ最適化問題に対するイジング計算機を用いた機械学習手法を FCE 実験パラメータ探索へ適用し、Au 原子接合の作製に成功した。しかし、本手法ではデータベースの構築と AI の学習を行う必要があった。続いて、データベースを用いずに FCE 実験進行中にリアルタイムで実験パラメータを探索する機械学習手法として、遺伝的アルゴリズム (GA) とベイズ最適化 (BO) に着目した。これらより、様々な機械学習技術を用いることで、リアルタイムに実験パラメータが探索され、安定的な量子化コンダクタンスの制御と自律的な Au 原子接合の作製が可能であることが示された。大規模なデータベースを必要としない機械学習手法 (遺伝的アルゴリズム、ベイズ最適化) を新たに導入することで、より効率的に室温での Au 細線のコンダクタンス量子化をその場で観測しながら原子を一つずつ移動させることで原子接合の形成が確認された。

(3) 最終年度 (令和 2 年度) では、本手法による単電子トランジスタ (SET) の作製、AI の高性能化、自律知能的な FCE 実験パラメータ推定による Au 原子接合の移動操作技術の高度化を行った。まず、昨年度に開発した AI を用い、Au ナノギャップに対して本手法を適用し SET を作製した。室温および低温にてクーロンブロックードとゲート変調特性が確認され、これらの変調特性は Korotkov-Nazarov モデルで説明できた。帯電エネルギーからアイランド電極は 10nm 程度と見積もられ、原子スケールのアイランド電極作製にはより精緻な FCE 制御が必要であることが判明した。そこで、シミュレーテッド量子アニーリング機構を組み込んだイジングマシン上に AI を構成し、それを FPGA へ実装することで、FCE 実験専用カスタムハードウェアを新たに作製した。本ハードウェアを用いて自律知能的な FCE 実験パラメータの探索と実験への適用をリアルタイムで行い、一原子の移動を安定且つ高速に実行した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Yuma Iwata, Takuya Sakurai and Jun-ichi Shirakashi	4. 巻 10
2. 論文標題 Machine learning-based approach for automatically tuned feedback-controlled electromigration (Featured Article)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 65301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5143051	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Keita Sakai, Tomomi Sato, Riku Kiyokawa, Ryoya Koyama, Mamiko Yagi, Mitsuki Ito and Jun-ichi Shirakashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Gold nanogap-based artificial synapses (STAP Article)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 50601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab8168	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shotaro Sakai, Yosuke Hirata, Mitsuki Ito, Jun-ichi Shirakashi	4. 巻 9
2. 論文標題 Fabrication of atomic junctions with experimental parameters optimized using ground-state searches of Ising spin computing	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 16211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-52438-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Keita Sakai, Tomomi Sato, Soki Tani, Mitsuki Ito, Mamiko Yagi, Jun-ichi Shirakashi	4. 巻 9
2. 論文標題 Synaptic behaviors of electromigrated Au nanogaps	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 55317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5096817	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 櫻井拓哉、竹林敬太、平田鷹介、白樫淳一	4. 巻 119
2. 論文標題 GAを用いた実験パラメータ進化手法とAu原子接合の自動形成	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 電子情報通信学会技術研究報告	6. 最初と最後の頁 43-46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ito Mitsuki, Yagi Mamiko, Shirakashi Jun-ichi	4. 巻 8
2. 論文標題 Fabrication of single-electron transistors with electromigrated Ni nanogaps	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 075210 ~ 075210
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5031822	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ito Mitsuki, Yagi Mamiko, Shimada Moe, Shirakashi Jun-ichi	4. 巻 8
2. 論文標題 Simultaneous arrayed formation of single-electron transistors using electromigration in series-connected nanogaps	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 105005 ~ 105005
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5043449	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 岩田侑馬、酒井正太郎、沼倉憲彬、白樫淳一	4. 巻 117
2. 論文標題 人工知能により支援されたAu原子接合の作製と量子状態の観測	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 電子情報通信学会技術研究報告	6. 最初と最後の頁 45-50
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 8件）

1. 発表者名 K. Sakai, T. Miki, R. Kiyokawa, R. Koyama, K. Watanabe and J. Shirakashi
2. 発表標題 Information Processing Using Reservoir Computing with Dynamical Node of Electromigrated Au Nanogaps
3. 学会等名 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020), November 16-19, 2020, Okinawa, Japan. (Online Conference) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Miki, M. Shimada and J. Shirakashi
2. 発表標題 Spin Connection Topology and Multi-Bit Spin Interaction Coefficients of Ising Spin Model with Digital Logic Gates
3. 学会等名 2020 IEEE International Conference on Design & Test of Integrated Micro & Nano-Systems (IEEE DTS), June 7-10, 2020, Hammamet, Tunisia. (Online Conference) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Miki, M. Ito, Y. Hirata, Y. Kushitani, M. Shimada and J. Shirakashi
2. 発表標題 Computational Properties of Ising Spin Model on Spin Connection Parameters
3. 学会等名 19th IEEE International Conference on Nanotechnology (IEEE NANO 2019), July 22-26, 2019, Macao, China. (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Shimada, M. Ito, Y. Hirata, Y. Kushitani, T. Miki and J. Shirakashi
2. 発表標題 Calculation Behavior of 2D Ising Spin Computing with Different Spin Decision Logics
3. 学会等名 19th IEEE International Conference on Nanotechnology (IEEE NANO 2019), July 22-26, 2019, Macao, China. (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Sato, K. Sakai, K. Minami, S. Tani, M. Ito, M. Yagi and J. Shirakashi
2 . 発表標題 Synaptic Learning Behavior of Multiple-Connected Au Nanogaps Using Electromigration
3 . 学会等名 3rd International Conference on Applied Surface Science (ICASS 2019), June 17-20, 2019, Pisa, Italy. (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Sakurai, Y. Hirata, K. Takebayashi, Y. Iwata and J. Shirakashi
2 . 発表標題 Fabrication of Au Atomic Junctions Using Artificial Intelligence Implemented on FPGA
3 . 学会等名 AVS Pacific Rim Symposium on Surfaces, Coatings and Interfaces (PacSurf 2018), December 2-6, 2018, Waikoloa, HI, USA. (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 K. Minami, S. Tani, K. Sakai, T. Sato, M. Ito, M. Yagi and J. Shirakashi
2 . 発表標題 Electromigration-Induced Structural Modification of Series-Parallel-Connected Au Nanogaps
3 . 学会等名 AVS Pacific Rim Symposium on Surfaces, Coatings and Interfaces (PacSurf 2018), December 2-6, 2018, Waikoloa, HI, USA. (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Tani, M. Ito, M. Yagi, M. Shimada, K. Sakai, K. Minami and J. Shirakashi
2 . 発表標題 Single-Electron Tunneling Effects in Electromigrated Coulomb Island between Au Nanogaps
3 . 学会等名 13th IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference (IEEE NMDC 2018), October 14-17, 2018, Portland, OR, USA. (国際学会)
4 . 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 榎谷優希、白樫淳一	4. 発行年 2019年
2. 出版社 情報機構	5. 総ページ数 230
3. 書名 第7章 現場課題解決に向けた提案及び導入活用例、第10節 深層学習を用いた生体情報（手指関節）の動作予測	

〔産業財産権〕

〔その他〕

白樫研究室HP <a href="http://web.tuat.ac.jp/~nanotech/index.htm">http://web.tuat.ac.jp/~nanotech/index.htm</a>
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------