

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18723

研究課題名（和文）介在ニューロン機能を有する人工シナプスクロスバーアレイメモリスタの構築

研究課題名（英文）Artificial synaptic crossbar array memristors with interneuron function

研究代表者

酒井 朗（Sakai, Akira）

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：20314031

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000 円

研究成果の概要（和文）：脳の高次機能を有するニューロチップの実現に向けて、ニューロモデュレーション機能を発現させる介在ニューロンを含むプラットフォームの創製を目指した。その結果、4端子人工シナプスメモリスタ素子を作製し、介在ニューロン信号入力による連合学習（パブロフ型条件付け）を達成した。また、メモリスタ内ドーパント分布のシミュレーション解析にあたり、拡散・ドリフトによる酸素空孔フラックスの温度依存性と熱拡散効果を考慮することで、実験結果の一部を忠実に再現することができた。さらに、クロスバーアレイメモリスタの設計・作製プロセスを構築し、同素子における介在ニューロン機能の実装に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の4端子人工シナプスメモリスタやクロスバーアレイメモリスタは、介在ニューロンをも有する脳神経回路を忠実に模倣する真のニューラルネットワーク（NN）である。従来のパーセプトロンからソフトウェア的に発展してきた機械学習アルゴリズムを、真の脳型ハードウェアを基盤とする新たなNNアルゴリズムに発展させる学術的な変革を生み出す可能性がある。介在ニューロンからの時間的連合入力によってシナプスの重みを他のシナプスとの相関性をもって遷移させる「パブロフの犬」を模倣する連合学習など、高度なシナプス機能による高次脳・神経機能の実現を目指しており、将来的に人工知能を発展させる研究として社会的にも意義深い。

研究成果の概要（英文）：To realize a neurochip with higher-order functions of the brain, we aimed to create a platform containing interneurons that express neuromodulation functions. As a result, we fabricated a 4-terminal artificial synaptic memristor device and achieved associative learning (Pavlovian conditioning) by inputting interneuron signals. In the simulation analysis of dopant distribution in the memristor, we were able to faithfully reproduce some of the experimental results by taking into account the temperature dependence of the oxygen vacancy flux due to diffusion and drift and the thermal diffusion effect. Furthermore, we developed a process for designing and fabricating crossbar array memristors and successfully implemented the interneuron function in these devices.

研究分野：半導体物性工学

キーワード：メモリスタ シナプス ニューラルネットワーク 介在ニューロン 酸素空孔 クロスバーアレイ 連合学習 パブロフ型条件付け

1. 研究開始当初の背景

人工知能 (AI) の中核をなすディープニューラルネットワーク (DNN) の演算を、従来のノイマン型コンピュータを用いたソフトウェアベースから、クロスバーアーキテクチャを用いたハードウェアベースに置き換えるニューロチップの開発が興隆している。また、抵抗変化型メモリ素子であるメモリスタは、ニューラルネットワークのハードウェアの基幹となる人工シナプス素子として成長期を迎えている。一方、DNNを始め、殆どのニューラルネットワークベースの機械学習アルゴリズムは、多元多層結合されたパーセプトロン上に実装されている。これはシナプス重みが入力特定のみで決まる信号伝達であり、生体では運動ニューロンの応答が感覚ニューロンのみで決定される最も単純な系である。しかし、生体シナプスは、感覚ニューロン信号のみならず、介在ニューロンが及ぼす種々のニューロモデュレーション効果も受けて伝達パラメータを自己調節し、出力を決定する高度な機能を有している。しかも知能的に優れる霊長類の大脳新皮質では、齧歯類や食肉類に比べ、介在ニューロンが豊富に存在することが最近明らかにされた (Krienen et al., Nature, 2020)。この事実は、現状のパーセプトロンベースのニューラルネットワークではその構造の単純性ゆえ機能拡充に限界があり、将来的に脳の高次機能を AI へ実装するには、そのプラットフォームの抜本的変革が必要であることを意味している。

2. 研究の目的

本研究においては、ニューラルネットワークベースの機械学習アルゴリズムが実装されている従来のパーセプトロン型プラットフォームを、ハードウェアの観点から変革することを試みる。脳の高次機能を有するニューロチップの実現に向けて、種々のニューロモデュレーション機能を発現させる介在ニューロンを含む新規のプラットフォーム (以下ニューラルプラットフォーム) を創製する。本研究において主に遂行した研究課題は以下の通りである。

- (1) 金属酸化物メモリスタの人工シナプス素子において、4端子アーキテクチャを構築し、介在ニューロンからのモデュレーション信号入力による高次脳・神経機能を発現させ、ニューラルプラットフォームとしての性能を実証する。
- (2) 人工シナプスの重み変調に係るメモリスタ内ドーパント分布の変遷メカニズムを実験、理論の両面から明らかにする。
- (3) クロスバーアレイアーキテクチャに基づく人工シナプス素子の実現を見据え、メモリスタ材料の選択から電極材料・構造の詳細に関わる設計・作製プロセスを構築し、同素子において介在ニューロン機能を実装する。

3. 研究の方法

(1) 4端子メモリスタ素子における介在ニューロンニューロモデュレーション機能の実証

パルスレーザー蒸着、電子ビーム蒸着、スパッタリング、フォトリソグラフィ等の成膜・加工技術を駆使し、還元性 TiO_2 (TiO_{2-x}) をメモリスタ材料とする 4端子人工シナプス素子を作製した。同素子における酸素空孔分布制御に基づき、一つのシナプス強度に相当する電極端子間のコンダクタンス値が、介在ニューロン端子から印加される信号によって如何に変調されるのかを、連合学習機能の実装を通して検証した。

(2) ドーパント分布変遷のシミュレーション解析

抵抗変化を誘引するメモリスタ素子中の酸素空孔 (n型ドーパント) とキャリア (電子) に着目し、有限要素法を用いたモデルシミュレーションを行った。ポアソン方程式とドリフト・拡散の連続の式を再帰的に解くことで、電流注入ならびに電圧印加条件下でのドーパント密度分布と素子のコンダクタンスならびにそれらの変遷機構を調査した。

(3) クロスバーアレイ作製プロセスの構築と介在ニューロン信号入力に基づく連合学習の実装

クロスバーアレイの作製にあたり、電子線リソグラフィを用いた微細パターン描画と、電極 (Pt, ITO)、メモリスタ (アモルファス GaO_x) の各材料の蒸着・リフトオフ技術を用いた。また、同素子に対して、介在ニューロン信号入力に基づく連合学習等を実現するアルゴリズムを探索した。

4. 研究成果

(1) 4端子メモリスタ素子における介在ニューロンニューロモデュレーション機能の実証

① 4端子メモリスタ素子における酸素空孔分布制御

本実験では 4端子メモリスタ素子における酸素空孔分布制御によるコンダクタンス変化を調査するため、電気特性評価と光学顕微鏡観察を行った。図 1 は電圧印加の際の測定模式図である。印加電圧は書込電圧 $V_{2,4}$ と読取電圧 V_{read} で構成され、それぞれは、 TiO_{2-x} 膜中の酸素空孔分布の制御と T1-T3 間コンダクタンス値 (G_{1-3}) の読み取りのための電圧である。図 2 に測定結

果を示す。初期の G_{1-3} は $V_{2,4}$ の上昇と共に増加して高コンダクタンス状態 (HCS) へ遷移した後、 $V_{2,4}$ を -8 V まで下降させると、 -6 V を閾値として急激に減少して低コンダクタンス状態 (LCS) となる。再度 $+8\text{ V}$ まで上昇させると $+6\text{ V}$ を閾値として再度 HCS となり、以後書込電圧印加によってこうしたコンダクタンスサイクル (以下ループ特性) が継続する。TiO_{2-x} 膜中の酸素空孔分布は電気着色現象によって光学顕微鏡で観測することができる。その結果、HCS では酸素空孔が T1-T3 間に、LCS では T2-T4 間に集積していることが確認され、電圧印加によってメモリスタ素子中の酸素空孔分布を精密に制御できることがわかった。

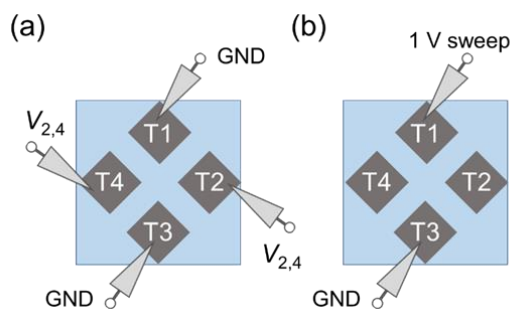


図 1 測定模式図 (a) $V_{2,4}$ による酸素空孔分布制御、(b) V_{read} による G_{1-3} 計測

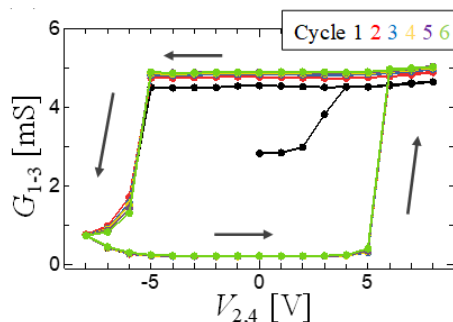


図 2 書込電圧 $V_{2,4}$ に依存するコンダクタンス G_{1-3}

② 連合学習機能 (パブロフ型条件付け) の実装

次に、同 4 端子メモリスタ素子へのパブロフ型条件付けの実装を試みた。パブロフ型条件付けとは、ベル音だけでは反応を示さなかった犬が、ベルと同時に餌を与える工程を繰り返すことで、ベル音のみで唾液を分泌するようになる一種の連合学習である。パブロフの犬を模倣するために、ベル音 (条件刺激) として T1 への入力信号を書込電圧 V_1 に、餌 (無条件刺激) として介在ニューロンから T4 への入力信号を書込電圧 V_4 に、唾液分泌 (無条件反応、条件反応) として T3 からの出力を T1-T3 間コンダクタンス値 G_{1-3} に見たてる。初期化工程により T1、T2 周辺の酸素空孔を T3、T4 側へ集積させ、T3 接地で読取電圧を T1 に印加し G_{1-3} を測定する。T1 には常にパルス状書込電圧 V_1 を印加し、10 回に 1 回の割合で V_1 と同時に V_4 を T4 に印加し、各書込電圧印加後は読取電圧によって G_{1-3} を測定する。測定結果を図 3 に示す。図 3(a),(b) それぞれの上段、中段はそれぞれベル音、餌に対応する電圧 V_1 、 V_4 印加工程であり、下段は反応の有無に対応する G_{1-3} である。緑縦棒は初期化工程後、青縦棒は V_1 (ベル音) 印加後、赤縦棒は V_1 と V_4 (ベル音と餌) の同時印加後の G_{1-3} を表す。工程初期には、 V_1 印加のみおよび 2 回目までの V_1 、 V_4 同時印加では G_{1-3} に顕著な変化は見られないが、3 回目の同時印加で G_{1-3} が急激に増加する。その後 V_1 のみの印加でも、 G_{1-3} は高い値を示した。この結果は、ベル音のみでは唾液分泌反応を示さなかった犬が、ベル音と餌を連合させることにより、ベル音のみで唾液分泌を行うよう学習した (条件付けされた) ことと等価である。このコンダクタンス変化は、 V_1 と V_4 の電位を同時に与えることにより T1-T4 間に大きな電位差が生じた結果、T4 周辺の酸素空孔が T1 周辺へドリフトし集積したためと考えられる。 G_{1-3} は、再度初期化工程を経ることで初期値まで戻り、同様な電圧印加工程の繰り返しによって、同様のコンダクタンス変化特性が得られる。図 3(a) と 3(b) を比較すれば、 V_1 と V_4 の振幅を変えることで、2 回目以降の条件付けの度合いも制御することができる。以上により、4 端子人工シナプスマモリスタ素子に介在ニューロンによるニューロモデレーション機能を付加することで連合学習の実装に成功した。

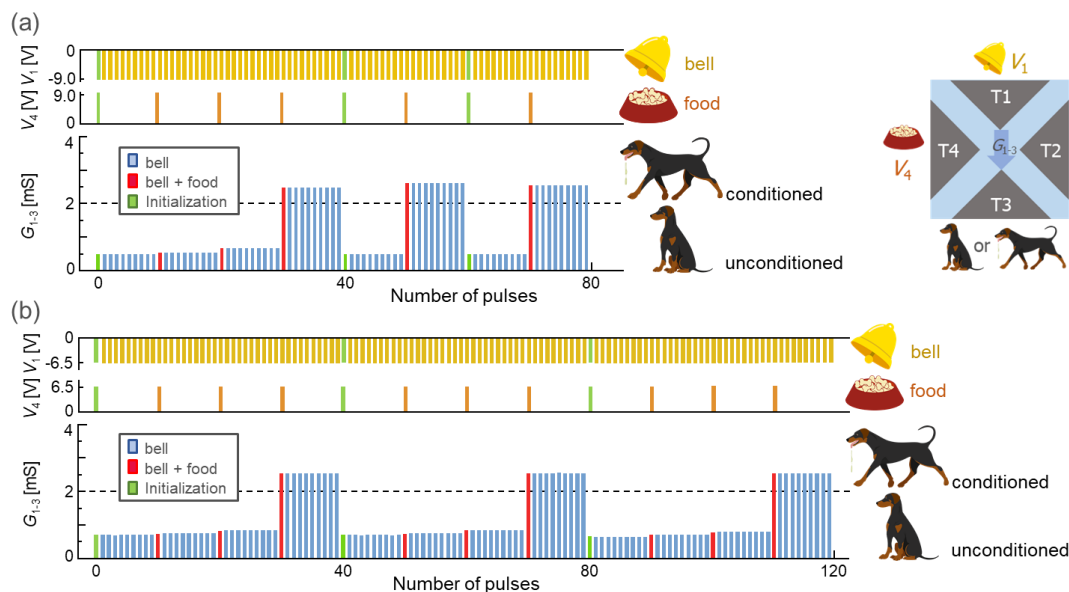


図 3 パブロフ型条件付けの実装 (a) $|V_1|=|V_4|=9.0\text{ V}$ (b) $|V_1|=|V_4|=6.5\text{ V}$ の場合

(2) ドーパント分布変遷のシミュレーション解析

図 2 に示した $V_{2,4}$ に依存する G_{1-3} の挙動をモデルシミュレーションによって解析した。ジュール熱による温度変化の無しと有りに対応する温度一定モデルと温度依存モデルを構築し、それぞれの結果を実験結果と比較検討した。

① 温度一定モデル

初期状態からループ特性 1 サイクル分の電圧印加に対して酸素空孔分布シミュレーションを行った結果を実験結果と並べて図 4 に示す。初期状態から正の $V_{2,4}$ 印加を行うと、T1、T3 付近が着色し酸素空孔が集積する。この状態から負の $V_{2,4}$ を印加すると、今度は T2、T4 付近が着色し酸素空孔が集積する。これらの実験結果とシミュレーション結果を比較すると、酸素空孔分布の変化が良く再現できていることがわかる。

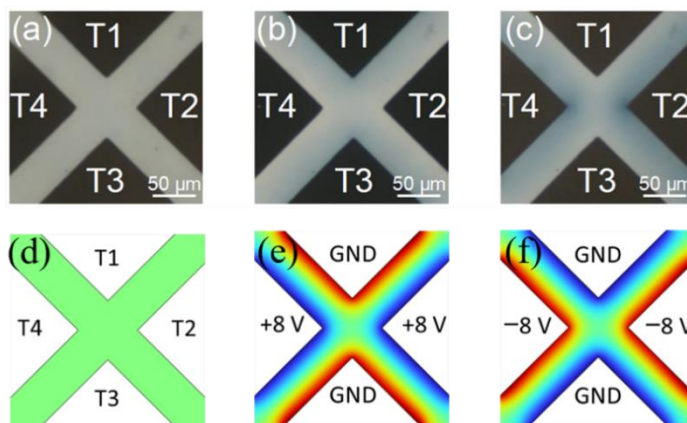


図 4 (a) 初期状態 (b) $V_{2,4}=+8V$ (c) $V_{2,4}=-8V$ 印加後の光学顕微鏡像と (d) 初期状態 (e) $V_{2,4}=+8V$ 印加後 (f) $V_{2,4}=-8V$ 印加後の酸素空孔分布シミュレーション結果

一方、 G_{1-3} の計算結果を実験結果と並べて図 5 に示す。シミュレーション (図 5(b)) では、ループ特性は得られているものの、実験結果 (図 5(a)) に見られるような閾值的挙動は再現できていない。また、コンダクタンスの取りうる範囲は実験結果と比較してかなり小さく、その分抵抗比も小さい。以上の結果から、温度一定モデルではコンダクタンスの閾值的変化や高い抵抗比を再現することは困難であった。

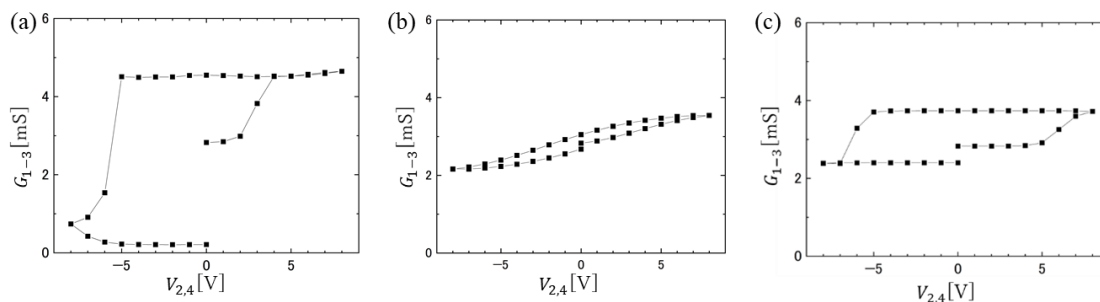


図 5 G_{1-3} の (a) 実験結果 (b) 温度一定モデルのシミュレーション結果 (c) 温度依存モデルのシミュレーション結果

② 温度依存モデル

温度依存モデルにおいては、拡散ならびにドリフトによる酸素空孔フラックス項に温度依存性を取り込み、かつ温度勾配によって濃度勾配が誘起される熱拡散効果 (ソレー効果) を考慮した。図 5(c) にシミュレーション結果を示す。初期状態から電圧を上昇させると、 $V_{2,4}=+5V$ 付近から G_{1-3} が急増する閾值的変化を示す。また、HCS と LCS におけるコンダクタンス値は閾値電圧以下では一定であり、図 5(a) の実験結果に近い抵抗変化特性を得ることに成功した。一方、実験とシミュレーションのコンダクタンス値の絶対値には未だ差異がある。本研究におけるコンダクタンス値の計算には導電率の積分を採用しているため、酸素空孔量の効果が色濃く反映されている。導電率ではなく電流密度などに基づく別の計算手法も今後導入してモデルを検討する必要がある。

(3) クロスバーアレイ作製プロセスの構築と介在ニューロン信号入力に基づく連合学習の実装

① クロスバーアレイ作製プロセスの構築

本研究で構築したクロスバーアレイ構造の作製プロセス条件の一水準を以下に示す。これらは電極幅 $10\ \mu\text{m}$ のクロスバーアレイメモリスタの作製に係る各層の成長方法・条件である。

- ・下部電極 Ti/Pt ($5\ \text{nm}/40\ \text{nm}$) : 電子ビーム蒸着 (真空、室温)
- ・メモリスタ層 GaO_x ($150\ \text{nm}$) : パルスレーザー蒸着 (Ar 分圧 $0.7\ \text{Pa}$ 、室温、蒸着時間 40 分)
- ・上部電極 ITO : $120\ \text{nm}$ 、パルスレーザー蒸着 (O_2 分圧 $3.5\ \text{Pa}$ 、室温、蒸着時間 12 分)

作製されたクロスバーアレイ素子の光学顕微鏡像を図 6(a),(b) に示す。また、図 6(c) に示した同素子に対する電気特性評価からは、負側で SET し、正側で RESET するような逆 8 の字型の電流-電圧ヒステリシスループが観測される。図 7 は同素子の $-3.0\ \text{V}$ の負電圧掃引後に得られる HCS と $1.8\ \text{V}$ の正電圧掃引後に得られる LCS のリテンション特性と、対応する on/off 抵抗比の結果である。最大 600 倍を超える抵抗比が確認され、1 時間以上経過してもおよそ 100 倍の抵抗比を維持していることがわかる。

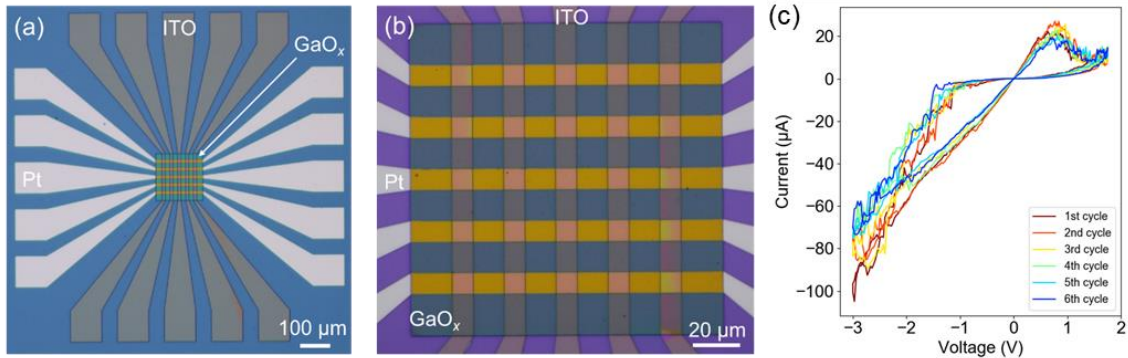


図 6 作製された電極幅 $10\ \mu\text{m}$ のクロスバーアレイメモリスタの (a) 低倍率 (b) 高倍率における光学顕微鏡像および (c) 同素子で得られた電流-電圧ヒステリシス特性

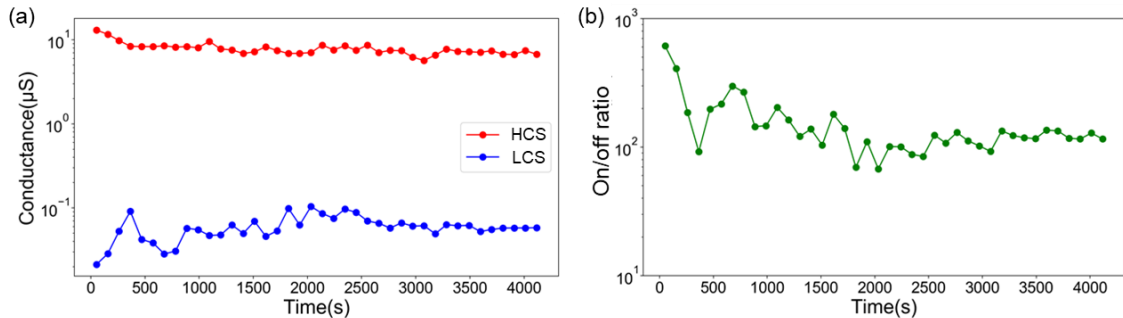


図 7 HCS および LCS の 4000 秒にわたる (a) リテンション特性 (b) On/off 比

② 介在ニューロン信号入力に基づく連合学習の実装

上記(1)②の 4 端子メモリスタ素子に実装した連合学習機能 (パプロフ型条件付け) を、本 GaO_x クロスバーアレイメモリスタにおいて、介在ニューロン信号入力によるトレーニングで模倣することを試みた。本実験では図 8 に示すように、介在ニューロン入力信号として餌の刺激を表す $-1.7\ \text{V}$ 、 $40\ \text{ms}$ の、ベル音の刺激を表す $-0.6\ \text{V}$ 、 $40\ \text{ms}$ のパルス電圧を使用した。またパルス電圧を印加した瞬間に流れる電流値 EPSC を犬の唾液分泌反応に対応させ、応答電流 $5\ \mu\text{A}$ を閾値としてその値を超えた場合に犬が反応したとみなした。まず、初期のベル

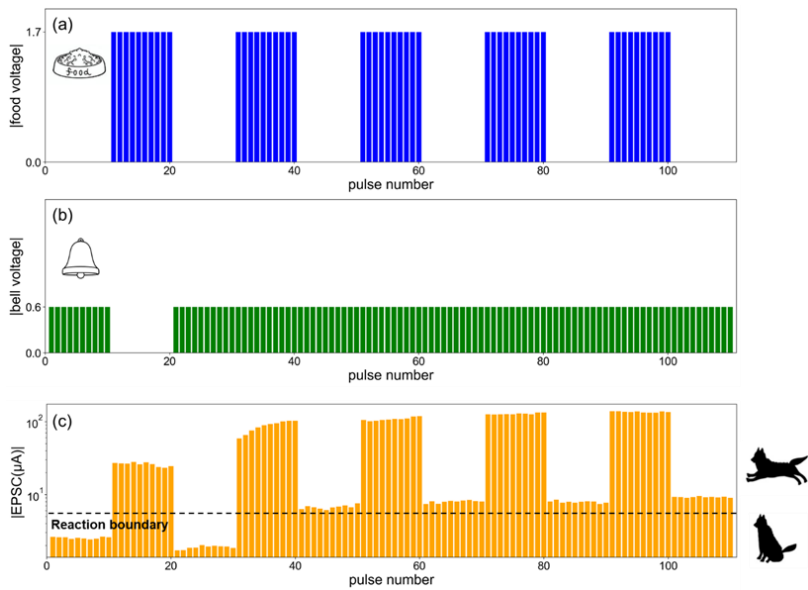


図 8 パプロフ型条件付けに用いた電圧印加プロトコル (a) 餌電圧 (b) ベル電圧 (c) 電圧印加時に検出された EPSC

電圧のみでは EPSC は小さく、反応がない。次の餌電圧のみでは閾値を大きく上回る EPSC が検出され、これは犬が餌を見て反応していることに対応する。引き続きベル電圧のみでは EPSC は閾値を越えず、餌電圧の印加だけでは条件付けされないことが確認された。次に、ベル電圧と餌電圧を同時に印加すると大きな EPSC が検出され、犬の反応が見られる。引き続きベル電圧のみを印加すると、同時印加前は閾値以下であった EPSC が閾値を越え、これはベル電圧のみで犬が反応したことを示している。すなわち、ベル電圧と餌電圧の同時印加による連合学習によって、犬はベル音を聞いただけで餌が与えられると連想して反応したとみなせる。また、同時印加の回数を重ねるほどベル電圧のみ印加の EPSC が大きくなり、犬がより強く反応している。これらの現象は、餌電圧もしくはベル電圧の単独印加ではメモリスタの抵抗変化に寄与しないが、これらの同時印加で与えられた $-2.3\ \text{V}$ のパルス電圧はメモリスタ層内の酸素空孔分布を変化させ、デバイスを低抵抗化させたためと考えられる。これら実験結果から、 GaO_x クロスバーアレイメモリスタにおいて、介在ニューロン信号入力を付加することで高次脳機能の一つである連合学習が達成されたといえる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Miyake Ryotaro, Nagata Zenya, Adachi Kenta, Hayashi Yusuke, Tohei Tetsuya, Sakai Akira	4. 巻 4
2. 論文標題 Versatile Functionality of Four-Terminal TiO ₂ -x Memristive Devices as Artificial Synapses for Neuromorphic Computing	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 2326 ~ 2336
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.2c00161	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 Ikeuchi Taishi, Hayashi Yusuke, Tohei Tetsuya, Sakai Akira	4. 巻 16
2. 論文標題 Gate-tunable plasticity in artificial synaptic devices based on four-terminal amorphous gallium oxide memristors	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 015509 ~ 015509
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acb0ae	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 Masaoka Naoki, Hayashi Yusuke, Tohei Tetsuya, Sakai Akira	4. 巻 62
2. 論文標題 Interface engineering of amorphous gallium oxide crossbar array memristors for neuromorphic computing	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1035 ~ SC1035
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acb060	査読の有無 有
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 Sato Kento, Hayashi Yusuke, Masaoka Naoki, Tohei Tetsuya, Sakai Akira	4. 巻 13
2. 論文標題 High-temperature operation of gallium oxide memristors up to 600 K	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 1261-1 ~ 1261-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-023-28075-4	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 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件／うち国際学会 3件）

1. 発表者名 R. Miyake, K. Adachi, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai
2. 発表標題 Pavlovian conditioning implemented in four-terminal TiO ₂ -x memristive devices
3. 学会等名 MEMRISYS 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Adachi, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai
2. 発表標題 Habituation and sensitization properties mimicked in four-terminal TiO ₂ -x memristive devices
3. 学会等名 MEMRISYS 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 酒井 朗、林 侑介、藤平哲也
2. 発表標題 酸素空孔分布制御型メモリスタを用いた多機能人工シナプス
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoki Masaoka, Yusuke Hayashi, Tetsuya Tohei, Akira Sakai
2. 発表標題 Amorphous GaO _x Crossbar Array Memristors for Artificial Synaptic Devices
3. 学会等名 2022 International Conference on Solid-State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

ホームページ
生体の脳・神経系により近い人工シナプス素子を開発 4 端子メモリスタ素子が高度な脳・神経機能を実現
URL : https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2022/20220428_1

報道情報
日本経済新聞 2023年3月26日付朝刊「サイエンス」AIにも革新

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
研究協力者	藤平 哲也 (Tohei Tetsuya)	大阪大学 (14401)	
研究協力者	林 侑介 (Hayashi Yusuke)	大阪大学 (14401)	

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
---------	---------