

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7206025号
(P7206025)

(45)発行日 令和5年1月17日(2023.1.17)

(24)登録日 令和5年1月6日(2023.1.6)

(51)Int.Cl. F I
G 06 N 20/00 (2019.01) G 06 N 20/00

請求項の数 34 (全 60 頁)

(21)出願番号 特願2021-545347(P2021-545347)
 (86)(22)出願日 平成30年10月12日(2018.10.12)
 (65)公表番号 特表2022-515561(P2022-515561A)
 (43)公表日 令和4年2月18日(2022.2.18)
 (86)国際出願番号 PCT/RU2018/000679
 (87)国際公開番号 WO2020/076181
 (87)国際公開日 令和2年4月16日(2020.4.16)
 審査請求日 令和3年10月11日(2021.10.11)

(73)特許権者 596060697
 マサチューセツツ インスティテュート
 オブ テクノロジー
 アメリカ合衆国マサチューセツツ州021
 39ケンブリッジ、マサチューセツツ・ア
 ヴェニュー・77
 (73)特許権者 521151197
 スコルコヴォ インスティテュート オブ
 サイエンス アンド テクノロジー
 ロシア国 121205 モスクワ、ボ
 リショイ ブールバード 30, テリト
 リー オブ イノベーション センター
 “スコルコヴォ”，ビルディング 1

最終頁に続く

(54)【発明の名称】材料の弾性歪みエンジニアリング

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

方法であって、前記方法は、

少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、
 訓練データを取得することであって、前記訓練データは、前記歪み座標の範囲内の材料に
 関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、
 前記訓練データおよび前記歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを
 発生させることであって、前記第1のモデルは、前記材料のバンドギャップモデルおよび
 分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、

今後の使用のために、前記第1のモデルを記憶することと
 を含む、方法。

10

【請求項2】

前記第1のモデルは、前記バンドギャップモデルである、請求項1に記載の方法。

【請求項3】

前記第1のモデルは、前記分散エネルギーモデルである、請求項1に記載の方法。

【請求項4】

前記方法は、逆格子空間座標の範囲を取得することをさらに含み、前記第1の訓練された
 統計的モデルを発生させることは、k空間座標の範囲を使用して、前記第1の訓練された
 統計的モデルを発生させることを含む、請求項3に記載の方法。

【請求項5】

20

前記方法は、前記第1の訓練された統計的モデル、前記訓練データ、および前記歪み座標の範囲を使用して、第2の訓練された統計的モデルを発生させることをさらに含む、請求項1～4のいずれか1項に記載の方法。

【請求項6】

前記訓練データを取得することは、前記歪み座標の範囲内の前記バンドギャップおよび前記エネルギー分散データを計算することを含む、請求項1～5のいずれか1項に記載の方法。

【請求項7】

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、

少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、

訓練データを取得することであって、前記訓練データは、前記歪み座標の範囲内の材料に関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、

前記訓練データおよび前記歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させることであって、前記第1のモデルは、前記材料のバンドギャップモデルおよび分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、

前記材料の1つ以上の特性を決定することにおける今後の使用のために、前記第1のモデルを記憶することと

を含む方法を前記少なくとも1つのプロセッサに実施させる、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項8】

前記第1のモデルは、前記バンドギャップモデルである、請求項7に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項9】

前記第1のモデルは、前記分散エネルギーモデルである、請求項7に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項10】

前記方法は、逆格子空間座標の範囲を取得することをさらに含み、前記第1の訓練された統計的モデルを発生させることは、k空間座標の範囲を使用して、前記第1の訓練された統計的モデルを発生させることを含む、請求項9に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項11】

前記方法は、前記第1の訓練された統計的モデル、前記訓練データ、および前記歪み座標の範囲を使用して、第2の訓練された統計的モデルを発生させることをさらに含む、請求項7～10のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項12】

前記訓練データを取得することは、前記歪み座標の範囲内の前記バンドギャップおよび前記エネルギー分散データを計算することを含む、請求項7～11のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項13】

方法であって、前記方法は、

所望のバンドギャップを取得することと、

前記所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、

前記出力に基づいて、前記所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することと

を含み、

前記歪みは、少なくとも3自由度を有する、方法。

10

20

30

40

50

【請求項 14】

前記歪みを識別することは、最急降下歪み方向を辿ることに少なくとも部分的に基づいて前記歪みを識別することを含む、請求項13に記載の方法。

【請求項 15】

前記方法は、前記識別された歪みをユーザに出力することをさらに含む、請求項13～14のいずれか1項に記載の方法。

【請求項 16】

前記方法は、前記所望のバンドギャップを伴う歪み座標の組を発生させ、バンドギャップ等値面を形成することをさらに含む、請求項13～15のいずれか1項に記載の方法。

【請求項 17】

前記方法は、前記バンドギャップ等値面をユーザに出力することをさらに含む、請求項16に記載の方法。

【請求項 18】

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、

所望のバンドギャップを取得することと、

前記所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、

前記出力に基づいて、前記所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することと

を含む方法を前記少なくとも1つのプロセッサに実施させ、

前記歪みは、少なくとも3自由度を有する、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 19】

前記歪みを識別することは、最急降下歪み方向を辿ることに少なくとも部分的に基づいて前記歪みを識別することを含む、請求項18に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 20】

前記方法は、前記識別された歪みをユーザに出力することをさらに含む、請求項18～19のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 21】

前記方法は、前記所望のバンドギャップを伴う歪み座標の組を発生させ、バンドギャップ等値面を形成することをさらに含む、請求項18～20のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 22】

前記方法は、前記バンドギャップ等値面をユーザに出力することをさらに含む、請求項21に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項 23】

構成要素の特性を決定する方法であって、前記方法は、

前記構成要素の歪み状態を取得することであって、前記歪み状態は、少なくとも3自由度を有する、ことと、

前記構成要素の前記歪み状態を前記構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、前記構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む、方法。

【請求項 24】

前記方法は、前記構成要素のモデルをメッシュ化することをさらに含み、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、前記メッシュ化されたモデルの複数のメッシュ要素の歪み状態を取得することを含み、前記構成要素の前記出力バンドギャップは、前記複数のメ

10

20

30

40

50

ツシユ要素のバンドギャップを含む、請求項23に記載の方法。

【請求項25】

前記方法は、前記複数のメッシユ要素のバンドギャップパラメータを前記バンドギャップで更新することをさらに含む、請求項24に記載の方法。

【請求項26】

前記方法は、前記構成要素の前記バンドギャップの指示をユーザに出力することをさらに含む、請求項23～25のいずれか1項に記載の方法。

【請求項27】

前記構成要素は、アセンブリの一部であり、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、有限要素分析を使用して、前記構成要素を含む前記アセンブリの歪み状態を決定することを含む、請求項23～26のいずれか1項に記載の方法。

10

【請求項28】

前記方法は、今後の使用のために、前記構成要素の前記出力バンドギャップを記憶することをさらに含む、請求項23～27のいずれか1項に記載の方法。

【請求項29】

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、構成要素の特性を決定する方法を前記少なくとも1つのプロセッサに実施させ、前記方法は、

前記構成要素の歪み状態を取得することであって、前記歪み状態は、少なくとも3自由度を有する、ことと、

20

前記構成要素の前記歪み状態を前記構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、前記構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項30】

前記方法は、前記構成要素のモデルをメッシユ化することをさらに含み、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、前記メッシユ化されたモデルの複数のメッシユ要素の歪み状態を取得することを含み、前記構成要素の前記出力バンドギャップは、前記複数のメッシユ要素のバンドギャップを含む、請求項29に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

30

【請求項31】

前記方法は、前記複数のメッシユ要素のバンドギャップパラメータを前記バンドギャップで更新することをさらに含む、請求項30に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項32】

前記方法は、前記構成要素の前記バンドギャップの指示をユーザに出力することをさらに含む、請求項29～31のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【請求項33】

前記構成要素は、アセンブリの一部であり、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、有限要素分析を使用して、前記構成要素を含む前記アセンブリの歪み状態を決定することを含む、請求項29～32のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

40

【請求項34】

前記方法は、今後の使用のために、前記構成要素の前記出力バンドギャップを記憶することをさらに含む、請求項29～33のいずれか1項に記載の少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

50

開示される実施形態は、材料の弾性歪みエンジニアリングに関連する。

【背景技術】

【0002】

ナノ構造化された材料は、機械的緩和または故障を伴わずに、それらの従来の対応物よりはるかに高い引っ張りおよび／または剪断弾性歪みに耐えることができる。可能な歪みのこの範囲は、弾性歪みの適用を通して、材料特性のエンジニアリングのための膨大なパラメータ空間を広げる。例えば、歪みは、材料の化学的性質の操作と同様、種々の材料特性を調整するために使用することができる。例えば、材料の電子バンドギャップは、特定の歪みを用いて、開放または閉鎖し得、したがって、材料の電気、熱、光学、および／または磁気特性を改変し得る。しかしながら、可能な歪みの範囲全体および結果として生じる材料特性を予測および／または試験することに関連付けられた複雑性に起因して、材料の現在の歪みエンジニアリングは、歪ませたシリコン内に加えられているような単軸および双軸歪みに限定されている。10

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0003】

一実施形態において、方法は、少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、訓練データを取得することであって、訓練データは、歪み座標の範囲内の材料に関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、訓練データおよび歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させることであって、第1のモデルは、材料のバンドギャップモデルおよび分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、今後の使用のために、第1のモデルを記憶することとを含む。20

【0004】

別の実施形態において、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体は、プロセッサ実行可能命令を記憶し得、命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、訓練データを取得することであって、訓練データは、歪み座標の範囲内の材料に関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、訓練データおよび歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させることであって、第1のモデルは、材料のバンドギャップモデルおよび分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、材料の1つ以上の特性を決定することにおける今後の使用のために、第1のモデルを記憶することとを含む方法を少なくとも1つのプロセッサに実施させる。30

【0005】

さらに別の実施形態において、方法は、所望のバンドギャップを取得することと、所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、出力に基づいて、所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することであって、歪みは、少なくとも3自由度を有することとを含む。

【0006】

他の実施形態において、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体は、プロセッサ実行可能命令を記憶し得、命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、所望のバンドギャップを取得することと、所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、出力に基づいて、所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することであって、歪みは、少なくとも3自由度を有することとを含む方法を少なくとも1つのプロセッサに実施させる。40

【0007】

さらに別の実施形態において、構成要素の特性を決定する方法は、構成要素の歪み状態を取得することであって、歪み状態は、少なくとも3自由度を有する、ことと、構成要素の50

歪み状態を構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む。

【0008】

別の実施形態において、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体は、プロセッサ実行可能命令を記憶し得、命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、構成要素の歪み状態を取得することであって、歪み状態は、少なくとも3自由度を有する、ことと、構成要素の歪み状態を構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む方法を少なくとも1つのプロセッサに実施させる。

【0009】

いくつかの実施形態において、電気回路は、シリコンから形成された電気構成要素を含み、歪みテンソルが、シリコンに加えられ、歪みテンソルは、

【数1】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

10

20

であり、上記の歪みテンソルにおいて、 ε_{11} 、 ε_{22} 、および ε_{33} は、8.9%以上かつ9.5%以下である。

【0010】

別の実施形態において、電気回路は、シリコンから形成された電気構成要素を含み、歪みテンソルが、シリコンに加えられ、歪みテンソルは、

【数2】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

30

40

であり、上記の歪みテンソルにおいて、 ε_{11} は、0.25%以上かつ0.75%以下であり、 ε_{12} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{13} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{21} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{22} は、-1.0%以下かつ-1.5%以上であり、 ε_{23} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{31} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{32} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{33} は、-0.8%以下かつ-1.35%以上である。

50

【0011】

前述の概念および下記で議論される追加の概念は、任意の好適な組み合わせで配置され得、本開示は、この点において限定されないことを理解されたい。さらに、本開示の他の利点および新規特徴が、付随の図と併せて検討されるとき、種々の非限定的実施形態の以下の詳細な説明から明白となるであろう。

本発明は、例えば、以下を提供する。

(項目1)

方法であって、前記方法は、

少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、

訓練データを取得することであって、前記訓練データは、前記歪み座標の範囲内の材料に関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、 10

前記訓練データおよび前記歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させることであって、前記第1のモデルは、前記材料のバンドギャップモデルおよび分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、

今後の使用のために、前記第1のモデルを記憶することと
を含む、方法。

(項目2)

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも1つのプロセッサによって実行されると、 20

少なくとも3自由度を有する歪み座標の範囲を取得することと、

訓練データを取得することであって、前記訓練データは、前記歪み座標の範囲内の材料に関するバンドギャップおよびエネルギー分散データを含む、ことと、

前記訓練データおよび前記歪み座標の範囲を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させることであって、前記第1のモデルは、前記材料のバンドギャップモデルおよび分散エネルギーモデルの群から選択される少なくとも1つである、ことと、

前記材料の1つ以上の特性を決定することにおける今後の使用のために、前記第1のモデルを記憶することと

を含む方法を前記少なくとも1つのプロセッサに実施させる、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。 30

(項目3)

前記第1のモデルは、前記バンドギャップモデルである、項目1-2のいずれか1項に記載の方法または少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目4)

前記第1のモデルは、前記分散エネルギーモデルである、項目1-2のいずれか1項に記載の方法または少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目5)

前記方法は、逆格子空間座標の範囲を取得することをさらに含み、前記第1の訓練された統計的モデルを発生させることは、k空間座標の範囲を使用して、前記第1の訓練された統計的モデルを発生させることを含む、項目4に記載の方法または少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。 40

(項目6)

前記方法は、前記第1の訓練された統計的モデル、前記訓練データ、および前記歪み座標の範囲を使用して、第2の訓練された統計的モデルを発生させることをさらに含む、項目1-5のいずれか1項に記載の方法または少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目7)

前記第1の訓練された統計的モデルは、ニューラルネットワークモデルである、項目1-6のいずれか1項に記載の方法または少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。 50

(項目 8)

前記訓練データを取得することは、前記歪み座標の範囲内の前記バンドギャップおよび前記エネルギー分散データを計算することを含む、項目 1 – 7 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 9)

方法であって、前記方法は、

所望のバンドギャップを取得することと、

前記所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、

前記出力に基づいて、前記所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することと

を含み、

前記歪みは、少なくとも 3 自由度を有する、方法。

(項目 10)

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも 1 つのプロセッサによって実行されると、

所望のバンドギャップを取得することと、

前記所望のバンドギャップを材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、対応する出力を取得することと、

前記出力に基づいて、前記所望のバンドギャップに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う歪みを識別することと

を含む方法を前記少なくとも 1 つのプロセッサに実施させ、

前記歪みは、少なくとも 3 自由度を有する、少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 11)

前記歪みを識別することは、少なくとも部分的に最急降下歪み方向を辿ることに基づいて前記歪みを識別することを含む、項目 9 – 1 0 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 12)

前記方法は、前記識別された歪みをユーザに出力することをさらに含む、項目 9 – 1 1 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 13)

前記方法は、前記所望のバンドギャップを伴う歪み座標の組を発生させ、バンドギャップ等値面を形成することをさらに含む、項目 9 – 1 2 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 14)

前記方法は、前記バンドギャップ等値面をユーザに出力することをさらに含む、項目 1 3 に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 15)

前記モデルは、ニューラルネットワークモデルである、項目 9 – 1 2 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 16)

構成要素の特性を決定する方法であって、前記方法は、

前記構成要素の歪み状態を取得することであって、前記歪み状態は、少なくとも 3 自由度を有する、ことと、

前記構成要素の前記歪み状態を前記構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、前記構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む、方法。

10

20

30

40

50

(項目 1 7)

プロセッサ実行可能命令を記憶している少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体であって、前記命令は、少なくとも 1 つのプロセッサによって実行されると、構成要素の特性を決定する方法を前記少なくとも 1 つのプロセッサに実施させ、前記方法は、

前記構成要素の歪み状態を取得することであって、前記歪み状態は、少なくとも 3 自由度を有することと、

前記構成要素の歪み状態を前記構成要素の材料の訓練された統計的バンドギャップモデルに提供し、前記構成要素の対応する出力バンドギャップを取得することとを含む、少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

10

(項目 1 8)

前記方法は、前記構成要素のモデルをメッシュ化することをさらに含み、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、前記メッシュ化されたモデルの複数のメッシュ要素の歪み状態を取得することを含み、前記構成要素の前記出力バンドギャップは、前記複数のメッシュ要素のバンドギャップを含む、項目 1 6 – 1 7 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 1 9)

前記方法は、前記複数のメッシュ要素のバンドギャップパラメータを前記バンドギャップで更新することをさらに含む、項目 1 8 に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

20

(項目 2 0)

前記方法は、前記構成要素の前記バンドギャップの指示をユーザに出力することをさらに含む、項目 1 6 – 1 9 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 2 1)

前記構成要素は、アセンブリの一部であり、前記構成要素の前記歪み状態を取得することは、有限要素分析を使用して、前記構成要素を含む前記アセンブリの歪み状態を決定することを含む、項目 1 6 – 2 0 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

30

(項目 2 2)

前記方法は、今後の使用のために、前記構成要素の前記出力バンドギャップを記憶することをさらに含む、項目 1 6 – 2 1 のいずれか 1 項に記載の方法または少なくとも 1 つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体。

(項目 2 3)

電気回路であって、前記電気回路は、シリコンから形成された電気構成要素を備え、歪みテンソルが、前記シリコンに加えられており、前記歪みテンソルは、

【数 3 7】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

40

であり、 ε_{11} 、 ε_{22} 、および ε_{33} は、8.9 %以上かつ9.5 %以下の電気回路。

50

(項目 2 4)

ε_{11} 、 ε_{22} 、および ε_{33} は、9.2%にほぼ等しい、項目23に記載の電気回路。

(項目 2 5)

電気回路であって、前記電気回路は、

シリコンから形成された電気構成要素を備え、歪みテンソルが、前記シリコンに加えられており、前記歪みテンソルは、

【数38】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

10

であり、 ε_{11} は、0.25%以上かつ0.75%以下であり、 ε_{12} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{13} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{21} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{22} は、-1.0%以下かつ-1.5%以上であり、 ε_{23} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{31} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{32} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{33} は、-0.8%以下かつ-1.35%以上である、電気回路。

20

(項目 2 6)

ε_{11} は、約0.55%であり、 ε_{12} は、約1.69%であり、 ε_{13} は、約0.74%であり、 ε_{21} は、約1.69%であり、 ε_{22} は、約-1.26%であり、 ε_{23} は、約-1.92%であり、 ε_{31} は、約0.74%であり、 ε_{32} は、約-1.92%であり、 ε_{33} は、約-1.04%である、項目23に記載の電気回路。

30

(項目 2 7)

前記電気構成要素の特性長は、約1マイクロメートルより小さい、項目23-26のいずれか1項に記載の電気回路。

(項目 2 8)

前記電気構成要素の特性長は、約100nmより小さい、項目27に記載の電気回路。

【図面の簡単な説明】【0012】

付随の図面は、正確な縮尺で描かれることを意図するものではない。図面において、種々の図に図示される各同じまたはほぼ同じ構成要素は、同様の番号によって表され得る。明確性のために、全ての構成要素が、全ての図面において標識され得るわけではない。

40

【0013】

【図1A】図1Aは、非歪み材料内のバンドギャップを示す概略図である。

【0014】

【図1B】図1Bは、歪みが材料に加えられた後の図1Aのバンドギャップを示す概略図である。

【0015】

【図2】図2は、材料に加えられ得る歪みの概略図である。

【0016】

【図3】図3は、単位格子を変形させるように加えられている歪みの概略図である。

【0017】

50

【図4 A】図4 Aは、訓練された統計的バンドギャップモデルを決定するための適合プロセスの一実施形態である。

【0018】

【図4 B】図4 Bは、訓練された統計的バンドギャップモデルを決定するための適合プロセスの別の実施形態である。

【0019】

【図5】図5は、訓練された統計的エネルギー分散モデルを決定するための適合プロセスの一実施形態である。

【0020】

【図6 A】図6 Aは、バンドギャップ適合のためのニューラルネットワークの一実施形態 10
である。

【0021】

【図6 B】図6 Bは、バンド構造（すなわち、エネルギー分散）適合のためのニューラル
ネットワークの一実施形態である。

【0022】

【図7】図7は、所望のバンドギャップに関連付けられる歪み座標の組を決定するための
一実施形態のフロー図である。

【0023】

【図8】図8は、有限要素分析の間に歪まされた構成要素に関するバンドギャップを決定
するための一実施形態のフロー図である。 20

【0024】

【図9】図9は、エネルギー分散モデルを使用して材料のエネルギー分散および／または
1つ以上の材料特性を決定する一実施形態のフロー図である。

【0025】

【図10】図10は、本明細書に開示されるモデルを訓練および／または実装するための
システムの概略実施形態である。

【0026】

【図11】図11は、計算およびモデル適合された価電子バンドおよび伝導バンドエネル
ギーを比較するグラフである。

【0027】

【図12 A】図12 Aは、シリコンに関する直接バンドギャップ領域を示す卵形で包囲さ
れた領域を伴うシリコンに関するバンドギャップ対弾性歪みエネルギー密度のグラフである。

【0028】

【図12 B】図12 Bは、図12 Aにおける水平軸上の円形によって示されるゼロバンド
ギャップ状態に到達するための最急降下歪み方向に関する歪み対弾性歪みエネルギー密度
のグラフである。

【0029】

【図12 C】図12 Cは、図12 Bに示される変形に関連付けられるバンド構造のグラフ
である。 40

【0030】

【図13】図13は、歪みに対してプロットされるバンドギャップ等値面のグラフである

。

【0031】

【図14 A】図14 Aは、エネルギー分散モデルを用いて計算されるような第1の歪み下
のシリコンに関するバンド構造のグラフである。

【0032】

【図14 B】図14 Bは、エネルギー分散モデルを用いて計算されるような第2の歪み下
のシリコンに関するバンド構造のグラフである。

【0033】

10

20

30

40

50

【図14C】図14Cは、エネルギー分散モデルを用いて計算されるような第3の歪み以下のシリコンに関するバンド構造のグラフである。

【0034】

【図14D】図14Dは、図14A-14Cに示される3つの可能な伝導バンド最小値の競合を示すFermiエネルギーの周囲の拡大バンド構造である。

【0035】

【図15】図15は、ダイヤモンドに関するバンドギャップ対弾性歪みエネルギー密度のグラフである。

【発明を実施するための形態】

【0036】

本発明者らは、3つ以上の自由度を有する歪みを用いて歪みエンジニアリングされた材料の材料特性を予測および／または試験することが、調査され得るはるかに大きい少なくとも3次元の超空間に起因して、非常に困難であることを認識している。故に、材料に加えられ、その材料の特性を改変し得る可能な歪みのこの範囲全体を実験的に追求することは、非実践的である。特定の歪みにおける材料のバンドギャップおよびエネルギー分散を決定することに関わる算出上の複雑性にも起因して、歪みと材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散の可能な組み合わせの全てを計算することも、非実践的である。

10

【0037】

上記に照らして、本発明者らは、材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散と、3つ以上の（いくつかの事例において、少なくとも6自由度を有する）歪みとの間の関係を決定するための訓練された統計的モデルを開発することに関連付けられる利点を認識している。これは、材料への3次元および／または6次元の歪みテンソルの適用を含み得る。具体的に、材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散を計算する従来の方法は、所望の数の訓練データ点を取得するために行われ得る。代替として、いくつかの実施形態において、訓練データは、以前の実験および／または計算から利用可能なデータから取得され得る。この訓練データは、統計的モデルの中に、所望の歪み座標の範囲とともにに入力され、訓練された統計的モデルを発生させ得る。再び、これらの歪み座標は、少なくとも3以上の自由度、いくつかの実施形態において、6自由度を伴う歪みを含み得る。特定の実施形態に応じて、訓練された統計的モデルは、バンドギャップモデルまたはエネルギー分散モデルのいずれかであり得る。訓練された統計的モデルが、エネルギー分散モデルである事例において、訓練データおよび所望の歪み座標の範囲および対応する逆格子空間座標の範囲が、統計的モデルに提供され得、これは、所望の訓練された統計的モデルを出力し得る。

20

【0038】

歪みに関する材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散を予測するための統計的モデルを開発する上記で詳述される概念は、性質上、非常に一般的である。例えば、プロセスは、任意の数の異なるタイプの結晶および材料のために、および、例えば、3次元歪み、6次元歪み、および／または任意の適切な自由度を伴う任意の他の適切な歪みを含む加えられる歪みに関する任意の数の所望の自由度を伴う任意の数の異なる所望の歪みの範囲を横断して、使用され得る。

30

【0039】

訓練された統計的モデルが発生させられると、訓練された統計的モデルは、今後の使用のために記憶され得る。例えば、訓練された統計的モデルは、少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体上に記憶され得る。記憶されたモデルは、次いで、さらに下記で詳述されるように、歪み下で材料の特性を決定することに関連するいくつかの異なる用途のために使用され得る。これらの使用は、限定ではないが、所望のバンドギャップに関する材料の可能な歪み状態の決定、特定の歪み状態を伴う材料のバンド構造の可視化、直接-間接バンドギャップ遷移の識別、半導体-金属バンドギャップ遷移の識別、所望のバンドギャップを提供するための最低エネルギー密度歪み状態、歪ませられた材料のバンドギャップを決定するための有限要素分析モジュールとの使用、および／または、本

40

50

明細書に説明されるような任意の他の適切な使用を含み得る。

【0040】

統計的モデルの訓練、および／または訓練された統計的モデルの使用のいずれかのための本明細書に開示される歪みは、任意の所望の範囲の歪みに対応し得、別様に示されない限り、弾性歪みを指すと仮定され得ることを理解されたい。例えば、いくつかの実施形態において、訓練された統計的モデルに関連付けられた歪み座標の範囲は、モデル化されている材料の物理的弾性歪み限界に対応し得る。代替として、歪み座標の範囲は、この物理的に可能な範囲の一部であり得、それは、ユーザ、事前に設定された歪み座標の範囲、および／または、モデル化目的のために歪み座標の範囲を決定するための任意の他の適切な方法によって選択および決定されるようなものである。したがって、一実施形態において、歪みテンソルの成分の各々は、-20%、-15%、-10%、-5%、0%より大きい弾性歪み、および／または、任意の他の適切な歪みであるように、独立して選択され得る。対応して、歪みテンソルの各成分は、20%、15%、10%、5%より小さいように、および／または、任意の他の適切な歪みであるように独立して選択され得る。前述の組み合わせも、想定され、例えば、個々の歪み成分の各々は、-20%～20%、-10%～10%、および／または、任意の他の適切な範囲の歪みであり得る。個々の加えられる歪み成分に加え、加えられる歪みの全体的大きさは、1%～20%、1%～10%、5%～20%、5%～10%、および／または、任意の他の適切な範囲の歪みであり得、本開示は、そのように限定されない。

【0041】

本明細書に説明される種々の実施形態および例の目的のために、歪み、歪み座標、歪みテンソル、または他の類似用語は、例えば、3自由度（すなわち、3次元歪み空間）、6自由度（すなわち、6次元歪み空間）、および／または任意の他の適切な歪み、歪みテンソル、または任意の所望の数の自由度を用いて加えられる歪み座標を含む3以上の自由度を用いて材料に加えられている歪みを指し得る。加えて、これらの歪みは、弾性歪みを指し得る。例えば、無剪断弾性歪みが、3自由度を伴う3次元歪みテンソルを使用して加えられ得る一方、別の実施形態において、歪みテンソルが対称行列であることに起因して、非冗長歪みが、6次元歪みテンソルとして説明され得るもののもたらす6自由度を使用して定義され得る。故に、歪みは、3自由度歪み（3次元歪み）～6自由度歪み（6次元歪み）に及ぶ任意の適切な数の自由度を伴う任意の適切な歪みを使用して、開示される実施形態に関して説明され得るが、本開示は、このように限定されないことを理解されたい。

【0042】

本明細書に説明されるモデルを使用して、例においてさらに議論されるように、種々の材料特性遷移に関連付けられたシリコンの特定の歪み状態が、識別された。例えば、一実施形態において、シリコンを間接バンドギャップ材料から直接バンドギャップ材料に遷移させるための最小歪みエネルギー密度が、以下の歪みテンソルによって定義されるシリコン材料に加えられる3軸引っ張り歪みに関して、生じ得る：

【数3】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

ε_{11} 、 ε_{22} 、および ε_{33} は、8.9%以上かつ9.5%以下であり、いくつかの事例において、これらの歪み成分は、好ましくは、約9.2%であり得る。さらにいくつか

10

20

30

40

50

の実施形態において、歪み成分は、互いにほぼ等しくあり得る。

【0043】

別の実施形態において、シリコンにおける半導体／絶縁体－金属遷移を実現するために要求される最小エネルギーは、以下の弾性歪みテンソルを適用することによる。

【数4】

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

10

ε_{11} は、0.25%以上かつ0.75%以下であり、 ε_{12} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{13} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{21} は、1.45%以上かつ1.95%以下であり、 ε_{22} は、-1.0%以下かつ-1.5%以上であり、 ε_{23} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{31} は、0.5%以上かつ1.0%以下であり、 ε_{32} は、-1.65%以下かつ-2.15%以上であり、 ε_{33} は、-0.8%以下かつ-1.35%以上である。いくつかの実施形態において、これらの歪み成分は、より好ましくは、 ε_{11} が約0.55%であり、 ε_{12} が約1.69%であり、 ε_{13} が約0.74%であり、 ε_{21} が約1.69%であり、 ε_{22} が約-1.26%であり、 ε_{23} が約-1.92%であり、 ε_{31} が約0.74%であり、 ε_{32} が約-1.92%であり、 ε_{33} が約-1.04%であることに対応し得る。

20

【0044】

歪みエンジニアリングされたシリコンに関して上記の材料特性遷移によって与えられる望ましい特性に起因して、上記の歪み状態を伴う歪ませられたシリコンが電気回路内に含まれ得ることを理解されたい。例えば、電気回路の電気構成要素が、上で説明されるような歪みテンソルを用いて、シリコンから形成され得る。この電気構成要素は、電気回路の任意の他の適切な部分に電気的に接続され、限定ではないが、電気接点パッド、接合部、電気トレース、および／または回路の任意の他の適切な電気構成要素を含む回路の機能部分を形成し得、本開示は、そのように限定されない。

30

【0045】

いくつかの実施形態において、弾性的に歪ませた材料から作製される構成要素は、材料の弾性歪み限界を向上させるための特性長さスケールを有し得る。例えば、あるナノスケール材料は、より大きいバルク材料と比較して、向上させられた弾性歪み限界を示し得る。故に、本明細書に説明されるように、1つ以上の材料特性を修正するために弾性的に歪ませている材料から作製される構成要素は、約1μm、500nm、100nm、および／または任意の他の適切な長さスケール未満である厚さまたは他の適切な寸法等の特性長さスケールを有し得る。その材料特性を修正するために弾性的に歪ませ得る適切なタイプの材料は、限定ではないが、シリコン、ダイヤモンド、ガリウムヒ素(GaAs)、ゲルマニウム(Ge)、窒化ガリウム(GaN)、2次元／原子的に薄い材料、および／または任意の他の適切な材料を含み得る。当然ながら、上記のそれらより大きいおよびより小さい特性長さスケールを伴う構成要素のみならず、異なる材料を使用して作製される構成要素も、想定され、本開示は、このように限定されないことを理解されたい。

40

【0046】

本開示の目的のために、バンド構造とも称され得る材料のエネルギー分散は、材料内の電子が有し得るエネルギーの範囲（すなわち、エネルギーバンド、許容エネルギー状態、バンド、または他の類似用語）と、電子が占有しないエネルギーの範囲（すなわち、バンド

50

ギャップ)とを説明し得る。これらのエネルギー・バンドは、本明細書にさらに詳述されるように、材料の種々の特性を識別するために分析され得る。

【0047】

図に目を向けると、具体的非限定的実施形態が、さらに詳細に説明される。これらの実施形態について説明される種々のシステム、構成要素、特徴、および方法は、個々に、および／または任意の所望の組み合わせでのいずれかで、使用され得、本開示は、本明細書に説明される具体的実施形態のみに限定されないことを理解されたい。

【0048】

図1Aおよび1Bは、弾性歪みが材料に加えられたときの材料のバンド構造に対して生じ得るいくつかのタイプの変化を図示する。具体的に、図1Aは、伝導バンド100と、価電子バンド102と、バンドギャップ104とを含むグラフを描写する。図示される実施形態において、材料は、伝導バンドと価電子バンドとの間の直接バンドギャップを有する。図1Bは、弾性歪みが材料に加えられた後の同一材料に関する可能なバンド構造を図示する。図示される実施形態において、伝導バンドと価電子バンドとの間のバンドギャップは、減少させられている。加えて、伝導バンド最小値および価電子バンド最大値の相対位置付けは、シフトされており、それによって、材料は、ここでは、間接バンドギャップ材料である。故に、加えられる弾性歪みは、材料の特性を変化させるために使用されている。

しかしながら、上で記載されるように、数個を上回る隔離された歪み座標に関して、これらの特性が弾性歪みに伴って変化するであろう方法についての詳細を決定することは、歪みが少なくとも3次元歪み空間において加えられるとき（少なくとも3、6、または他の適切な数の自由度を有する歪みテンソルおよび／または座標が適用されるときを含む）のような問題を解決することに関わる複雑な算出に起因して、困難である。

【0049】

図2は、立方単位格子200を図示する。単位格子は、x、y、およびz軸に対応するそれぞれのダイヤモンドの立方結晶学的方向[100]、[010]、および[001]を有する。歪みテンソルは、単位格子に加えられ得る種々の垂直歪み成分および剪断歪み成分に対応し得る。典型的に、弾性歪みテンソルは、以下によって示され得る。

【数5】

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix}$$

ϵ_{11} 、 ϵ_{22} 、 ϵ_{33} は、それぞれ、[100]、[010]、および[001]結晶学的方向において、単位格子に対して垂直に加えられる歪み成分に対応する。残りの歪み成分は、図に示されるように、単位格子の種々の表面と平行な方向に加えられ、単位格子の表面と平行に加えられる剪断歪みに対応する。本開示の目的のために、本明細書に説明される種々の歪みテンソルは、上記の命名法に対応し得る。図3は、結晶構造の単位格子を非変形構成から変形構成に弾性的に変形させるように加えられている歪みテンソルを図示する。例えば、歪みテンソル

10

20

30

40

50

【数6】

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} 10\% & 0 & 0 \\ 0 & 10\% & 0 \\ 0 & 0 & 10\% \end{pmatrix}$$

10

は、材料の 10 % 3 軸引っ張りに対応する歪み座標を指し、

【数7】

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} 0 & 10\% & 0 \\ 10\% & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

20

は、材料に加えられている 10 % 純剪断歪みに対応する歪み座標である。

【0050】

図4 A-5 は、所望の範囲の歪みに対する材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散の統計的モデルを訓練する方法に関する実施形態を描写する。

【0051】

図4 A に図示される実施形態において、歪み座標の範囲が、第1の機械学習モジュールに入力され得る。歪み座標の範囲は、材料に加えられ得る弾性歪みの物理的に可能な範囲に対応し得る。代替として、ユーザは、材料のバンドギャップのモデルが所望される所望の範囲の弾性歪みを入力し得る。例えば、ユーザは、所望の弾性歪み大きさ、絶対歪みテンソル成分限界、および／または任意の他の望ましいそれらの組み合わせを提供し得、本開示は、このように限定されない。そのような実施形態において、歪み座標の範囲は、下記でさらに説明されるように、任意の適切な入力デバイスを使用して、ユーザによって提供され得る。しかしながら、歪み座標の範囲が統計的モデルを訓練することにおける使用のために事前に決定される実施形態も、想定される。

30

【0052】

歪み座標の範囲に加え、訓練データも、第1の機械学習モジュールに提供され得る。具体的に、所望の歪み座標の範囲全体を通して分散させられるバンドギャップおよびエネルギー分散訓練データが、取得され、第1の機械学習モジュールに提供され得る。この訓練データは、以前の実験および／または計算を使用して、任意の適切な方式において取得され得る。しかしながら、いくつかの実施形態において、訓練データを取得することは、訓練データを第1の機械学習モジュールに提供することに先立って、バンドギャップおよびエネルギー分散訓練データを取得するための第1原理計算に対応し得る。この訓練データを計算する算出上高価なプロセスに起因して、訓練データは、事前決定されたデータ点の数に限定され得る。例えば、訓練データは、500 個のデータ点～1,000 個のデータ点、500 個のデータ点～2,000 個のデータ点、および／または、任意の他の適切な数のデータ点に限定され得る。具体的数にかかわらず、これらの訓練データ点は、歪み座標の範囲全体を通して均一に分散させられた歪み座標の範囲および／または任意の他の適切な配置全体を通して、ランダムに選択され得、本開示は、このように限定されない。訓練

40

50

データ点が分散させられる方法にかかわらず、いくつかの実施形態において、訓練データは、G W (Greenの関数およびスクリーニングされたC o u l o m b相互作用を呼び出す)補正を伴う、またはハイブリッドH e y d - S c u s e r i a - E r n z e r h o f関数を伴う、および／または、任意の他の適切な方法論を伴う標準的密度関数理論を含む第1原理算出を使用して、計算され得るが、本開示は、バンドギャップおよびエネルギー分散訓練データ対所望の歪み空間が取得される方法に限定されない。

【0053】

図4 Aにも示されるように、バンドギャップおよびエネルギー分散訓練データおよび歪み座標の範囲は、第1の機械学習モジュール内の統計的モデルの中に入力される。これらの入力が、受信されると、第1の機械学習モジュールは、訓練データおよび歪み座標の範囲を使用して、訓練された統計的モデルを発生させ得る。第1の機械学習モジュールから結果として生じる出力は、図示される第1のバンドギャップモデルに対応し、それは、材料に加えられる歪みの関数としての材料のバンドギャップの訓練された統計的モデルである。第1のバンドギャップモデルは、さらに下記で詳述されるように、今後の使用のために、適切な非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体内に記憶され得る。

【0054】

いくつかの実施形態において、上で詳述されるような初期の訓練された統計的モデルを発生させるとき、機械学習モジュールは、比較的にあまり算出上高価ではなく、訓練された統計的モデルが合理的期間内で発生させられることを可能にする適合近似を実装し得る。しかしながら、これは、ある用途のために所望され得るものほど正確ではない訓練された統計的モデルをもたらし得る。そのような事例において、第2のタイプの適合近似を使用して、すでに訓練された統計的モデルをさらに精緻化し、より正確な第2の訓練された統計的モデルを発生させる第2の訓練された統計的モデルを発生させることが望ましくあり得る。このプロセスは、時として、デルタ機械学習および／またはデータ融合とも称され、以前に訓練されたモデルが、より正確かつ算出上複雑なモデルへの入力として使用され、より低い算出コストにおいて、より正確なモデルを提供する。そのような実施形態は、図4 Bに描寫され、第1のバンドギャップモデルに対応する第1の訓練された統計的モデルが、図4 Aに関して上記で詳述されたように、発生および記憶される。この第1のバンドギャップモデルは、次いで、以前に取得された訓練データおよび歪み座標の範囲とともに、第2の機械学習モジュールの中に入力され得る。第2の機械学習モジュールは、次いで、開始点として、かつより正確であり、対応して、より算出上高価または複雑な適合近似として、第1のバンドギャップモデルを使用して、訓練データを適合させ得る。適合プロセス後、第2の機械学習モジュールは、図示される第2のバンドギャップモデルに対応する第2の訓練された統計的モデルを出力し得る。上記のように、第2のバンドギャップモデルは、今後の使用のために記憶され得る。

【0055】

図5は、図4 A - 4 Bに関して説明されるそれらに類似するある実施形態を描寫する。しかしながら、この特定の実施形態において、エネルギー bandwidthをモデル化し、および／または種々の材料の特性を予測するために使用され得るエネルギー分散モデルの発生が、描寫される。上記の実施形態と同様、バンドギャップおよびエネルギー分散訓練データが、所望の範囲の歪み空間座標内で取得され得る。対応して、訓練データに関連付けられる逆格子空間座標の範囲および／または歪み空間座標の範囲も、取得され得る。本明細書に説明されるような逆格子空間座標の範囲は、いくつかの実施形態において、対応する歪み座標のフーリエ変換に対応し得る。訓練データおよび逆格子空間座標の範囲および歪み空間座標の範囲は、第1の機械学習モジュールの中に入力され得、これは、材料のエネルギー分散対歪みを適合させ得る。結果として生じる出力は、描寫されるエネルギー分散モデルに対応する訓練された歪みされた統計的モデルの発生であり、それは、今後の使用のために、適切な非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体上に記憶され得る。単一機械学習モジュールのみの使用が、図に描寫されるが、反復機械学習プロセスが実装される実施形態も、想定されることを理解されたい。例えば、いくつかの実施形態において、発生させら

10

20

30

40

50

れたエネルギー分散モデルは、第2のバンドギャップモデルに関して上で説明されるものに類似する第2のより精緻化されたエネルギー分散モデルを発生させるために、より複雑な適合近似を使用した第2の機械学習モジュールへの入力として提供され得る。

【0056】

本明細書に開示される訓練された統計的モデルは、任意の適切な統計的モデルを使用して発生させられ得ることを理解されたい。例えば図4 A-5に描写される、機械学習モジュールは、限定ではないが、人工ニューラルネットワーク（A N N）、勾配ブースティング回帰（G B R）、ランダムフォレスト回帰（R F R）、他のカーネルベースの適合方法、L a g r a n g e多項式適合、および／または任意の他の適切なタイプの適合方法を含む、所望の訓練された統計的モデルを発生させることが可能な任意の適切な適合方法に対応し得る。10

【0057】

上記の適合方法が所望の組み合わせのモデル正確度対算出費用を提供するように任意の適切なタイプの適合近似と組み合わせられ得ることも理解されたい。例えば、使用され得る適切な近似方法は、限定ではないが、G W理論、H S E 0 6、一般化勾配近似、局所密度近似、メタG G A、前述の組み合わせ、および／または任意の他の適切なタイプの近似を含むが、本開示は、このように限定されない。加えて、上で記載されるように、図4 Bに示されるように、反復訓練プロセスが使用される（すなわち、データ融合）、事例において、第1の統計的訓練モデルは、より低い算出コストを伴う第1の適合近似を使用し得、第2の統計的訓練モデルは、第1の適合近似より正確であるが、より算出上コストがかかる第2の適合近似を使用し得る。1つのそのような実施形態において、人工ニューラルネットワークは、P B E等の第1の適合近似を使用して、第1の訓練された統計的モデルを発生させ得、G W等の適合近似が、第1の訓練された統計的モデルを入力として使用しながら、人工ニューラルネットワークと使用され、第2の訓練された統計的モデルを発生させ得る。当然ながら、適合近似と開示される統計的モデルの任意の適切な組み合わせが、使用され得、本開示は、具体的に開示される組み合わせのみに限定されないことを理解されたい。20

【0058】

図6 Aおよび6 Bは、本明細書に開示される訓練された統計的モデルを発生させるために使用され得るニューラルネットワークの2つの可能な実施形態の構造を図示する。図6 Aは、4つの隠れ層を含む深層ニューラルネットワークを示す。層は、（6 4 - 1 2 8 - 2 5 6 - 2 5 6）構造を有する。図6 Bは、（5 1 2 - 2 5 6 - 2 5 6 - 2 5 6）構造を伴う4つの隠れ層を含む類似深層ニューラルネットワークを図示する。理論によって拘束されることを望むわけではないが、図6 Aに示される第1のニューラルネットワークは、3自由度を伴う歪み（すなわち、3次元歪みテンソル）を使用することにおける非剪断歪みに関するバンドギャップモデルを決定する等、より限定された範囲の歪みに関するモデルを開発するために好適であり得る。対照的に、図6 Bに示されるより複雑な人工新規ネットワークは、剪断歪みを含む材料のバンドギャップのモデル化、および3以上の自由度を伴う歪みテンソルを使用することにおいて歪まされる材料のバンドエネルギーを予測するためのエネルギー分散モデルを開発する複雑なタスク等、より複雑な問題との使用のために適切であり得る。特定の実施形態に応じて、図に描写される深層ニューラルネットワークは、活性化関数としての漏洩正規化線形ユニットを含むフィードフォワード構造人工ニューラルネットワークであり得る。描写される人工ネットワークは、A d a m確率論的最適化方法、直交加重初期化、およびドロップアウト技法も組み込み、過剰適合を防止し得る。当然ながら、上記のものを上回るおよびそれ未満のものの両方である任意の適切な数の隠れ層および／または層あたりの個々のニューロンを伴う人工ニューラルネットワークを含む人工ニューラルネットワークのための任意の適切な構造が、使用され得、本開示は、描写される人工ニューラルネットワークの使用のみに限定されないことを理解されたい。40

【0059】

図7-9は、材料に加えられる歪みの関数としての材料のバンドギャップおよび／またはエネルギー分散のいずれかを予測するために発生させられている訓練された統計的モデルのいくつかの可能な使用を描写する。当然ながら、訓練された統計的モデルのいくつかの可能な使用が、提供されるが、現在開示される訓練された統計的モデルは、これらの使用のみに限定されず、それらは、概して、材料に加えられる歪みの関数としてのそれに関連するバンドギャップ、バンド構造、および／または任意の他の適切な性質を予測することが望ましい任意の使用に適用可能であり得ることを理解されたい。

【0060】

上で記載されるように、いくつかの事例において、現在開示される訓練された統計的モデルが使用され得る材料は、約 $1\text{ }\mu\text{m}$ 未満の特性長さスケールを伴うナノ材料であり得る。ナノ材料は、マクロスケール材料と比較して、比較的により長い時間にわたって、可塑性および／または破壊を誘発せずに、比較的に大きい弾性歪みを支持することが可能であり得るが、依然として、より高い歪みおよび／または温度において、加えられる弾性歪みは、種々の緩和機構に起因して、緩和し得ることが可能である。物理的限界も、マイクロスケール材料に適用され得るが、支持され得る相対弾性歪みも、ナノスケール材料と比較して、対応して、より低くなり得る。故に、いくつかの実施形態において、最小の対応する量の弾性歪みエネルギー密度を伴う所望のバンドギャップを提供する可能な歪みの範囲内の弾性歪み座標を識別することが望ましくあり得る。これは、弾性歪みエンジニアリングされた材料の歪みの経時的破碎および／または緩和の可能性を低減させることに役立ち得る。

10

【0061】

図7は、訓練された統計的モデルを使用して、所望のバンドギャップを提供するためのそれに関連付けられた最低歪みエネルギー密度を伴う材料の歪みを識別する方法300の一実施形態を描写する。具体的に、302において、所望のバンドギャップが、取得される。このバンドギャップは、適切な入力デバイスを通したユーザからの入力によって取得され得るか、バンドギャップは、特定の用途のための設計パラメータとして提供され得るか、および／または、任意の他の適切な源であり得るかのいずれかであるが、本開示は、このように限定されない。304において、所望のバンドギャップは、次いで、材料の訓練された統計的バンドギャップモデルへの入力として提供され得、それは、上で記載されるように、バンドギャップおよび歪みの関数であり得る。訓練された統計的バンドギャップモデルは、306において、加えられると所望のバンドギャップを示す材料をもたらすであろう少なくとも1つの歪み座標（いくつかの事例において、組の歪み座標）を出し得る。いくつかの実施形態において、308において、最低の対応する歪みエネルギー密度を伴う歪み座標を識別することが望ましくあり得る。いくつかの事例において、これは、出力歪み座標に関連付けられた計算された歪みエネルギー密度の最急降下方向を辿ることを含む任意の適切な方法を使用して、歪み座標の組を評価することによって行われ得る。代替として、いくつかの実施形態において、モデルは、同一バンドギャップを伴う歪み座標によって形成される表面に関する勾配および／または曲率情報を提供するために使用され得る。

20

【0062】

最低歪みエネルギー密度および所望のバンドギャップを伴う弾性歪み座標の識別が遂行される方法にかかわらず、歪み座標を識別後、歪み座標の組および／または所望のバンドギャップに関する最低歪みエネルギー密度を伴う識別された歪み座標は、310において、今後の呼出および／または使用のために、非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体内に記憶され得る。加えて、いくつかの実施形態において、312において、歪み座標の組および／または識別された歪み座標は、ユーザに出力され得る。例えば、歪み座標の組は、ユーザによる可視化目的のために、表面上の各点が所望のバンドギャップを有する3次元歪み空間内の等値面としてプロットされ得る。そのようなグラフは、ユーザが所望の材料特性を伴う構成要素を設計するときにその中で作業し得る歪みに関する設計包絡線を可視化することに役立ち得る。代替として、および／または、このタイプの出力グラフと組み

30

40

50

合わせて、所望のバンドギャップに関する最低歪みエネルギー密度に対応する歪み座標は、同様に、数値的に、および／またはグラフィカル形態に、ユーザに出力され得る。

【0063】

マイクロ電子構成要素の設計およびの製造に関連付けられた複雑性およびコストに起因して、最初に製造されるとき、および／または動作中の両方において、それらの材料に加えられる応力および歪みに照らして、材料のバンドギャップおよび／または他の物理的パラメータを評価することが望ましくあり得る。故に、いくつかの実施形態において、動作に先立って、および／または動作中、材料に加えられる歪みに起因して、材料の結果として生じる特性を評価するための有限要素分析モジュールと組み合わせて、本明細書に説明される開示されるバンドギャップおよび／またはエネルギー分散モデルを使用することが望ましくあり得る。1つのそのような方法400が、有限要素分析モジュールとともに、訓練された統計的バンドギャップモデルの使用に関連して、図8に示される。しかしながら、エネルギー分散モデルを含む本明細書に開示される訓練された統計的モデルのいずれも、有限要素分析モジュールと組み合わせて使用され得、本開示は、そのように限定されないことを理解されたい。

10

【0064】

描写される方法400において、構成要素の幾何学形状および材料特性を含むモデルが、402において、取得され得る。加えて、動作中、構成要素の材料特性を評価することが望ましい事例において、構成要素および／または関連付けられるシステムの1つ以上の動作パラメータが、404において、取得され得る。適切なタイプの動作パラメータは、限
定ではないが、熱発生量、負荷、および／または適切な動作パラメータを含み得る。モデルは、406において、任意の適切なメッシュ方略を使用してメッシュ化され、複数のメッシュ要素を形成し得る。複数のメッシュ要素を含むメッシュ化されたモデルは、408において、提供される材料特性および動作パラメータとともに、関連付けられる有限要素分析モジュールに入力され得る。有限要素分析を行う任意の適切な方法が、使用され得、本開示は、このように限定されないことを理解されたい。いずれの場合も、個々のメッシュ要素に関する歪み状態が、410において、有限要素分析モジュールを使用して取得され得る。

20

【0065】

個々のメッシュ要素の歪み状態が、着目構成要素に関して取得されると、1つ以上の識別されたメッシュ要素のバンドギャップが、決定され得る。具体的に、1つ以上のメッシュ要素が、412において、有限要素分析が行われることに先立って、および／または、その後識別され得る。特定の実施形態に応じて、この識別は、適切な入力デバイスを使用してユーザによって手動で入力され得るか、および／または、歪みの適用に敏感な材料に対応すると示されたメッシュ要素が、材料特性対それらの要素に加えられる決定された歪み状態の評価に関して自動的に識別され得る。例えば、メッシュ化されたモデルは、1つ以上の要素が、シリコン等の歪みに敏感な材料から形成されることを示し得る。種々のメッシュ要素に関して加えられた歪み状態を決定後、シリコンまたは別の適切な歪みに敏感な材料に対応するメッシュ化されたモデルのそれらのメッシュ要素が、材料のバンドギャップまたは他の適切なパラメータを決定するために、自動的に識別され得る。

30

【0066】

バンドギャップを決定するための1つ以上のメッシュ要素が、識別されると、識別されたメッシュ要素に関する歪み状態が、414において、訓練された統計的バンドギャップモデルへの入力として提供され得る。個々のメッシュ要素に関する1つ以上の対応する出力バンドギャップが、416において、訓練された統計的バンドギャップモデルから出力され得る。種々のメッシュ要素に関する出力バンドギャップは、次いで、418において、今後の使用のために、適切な非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体内に記憶され得、および／または、出力バンドギャップは、個々の関連付けられるメッシュ要素のバンドギャップパラメータを更新するために使用され得る。いくつかの実施形態において、1つ以上のメッシュ要素のバンドギャップの指示が、任意の適切な方式において、ユーザに出力

40

50

され得る。例えば、決定されたバンドギャップ、メッシュ要素のバンドギャップの最小バンドギャップ、最大バンドギャップ、および／または任意の他の適切なメトリックが、テキストおよび／またはグラフィカル形態において、ユーザに提示され得る。代替として、構成要素モデルのグラフィカル表現が、色勾配および／または強度等の指示を使用して、バンドギャップの適切な指示とともに、オーバーレイされ、対応するバンドギャップをモデル化された構成要素の特定の部分内に示し得る。当然ながら、本開示は、情報がユーザに出力される方法に限定されず、いくつかの事例において、情報は、ユーザに出力されなくてよいことを理解されたい。

【0067】

单一構成要素が、上記の実施形態に関連して議論されているが、有限要素分析が、説明される構成要素を含む全体的アセンブリに適用される実施形態も、想定される。例えば、全体的アセンブリモデル内の構成要素モデルが、上で説明されるように、歪みに敏感な材料で作製されていると識別され得る。したがって、有限要素分析が、歪みに敏感な材料から作製される構成要素を含むアセンブリ内の種々のサブ部品に関する歪みを決定するとき、訓練された統計的モデルが、構成要素の1つ以上の特性を決定するために使用され得る。したがって、本開示は、種々の着目材料から作製される個々の構成要素および／または複数の構成要素を含むアセンブリ全体のいずれかに適用され得、本開示は、このように限定されない。

【0068】

再び、上記の方法は、訓練された統計的バンドギャップモデルの使用および用途に関して説明されているが、有限要素分析モジュールは、同様に、訓練された統計的分散エネルギー モジュールと組み合わせて使用され得る。例えば、エネルギー分散モデルによって提供される出力は、限定ではないが、材料の分散エネルギー、材料のバンド構造、異なる状態間の遷移、および／または任意の他の適切な材料特性を含み得る。

【0069】

上記の開示される方法は、構成要素に関する歪み状態および材料特性の対応する変化の両方の単純、迅速、かつ正確な決定を提供し、それらは、組み合わせて、弾性歪みエンジニアリングされた構成要素の設計目的のための有力なツールを提供する。

【0070】

図9は、材料の訓練された統計的エネルギー分散モデルを使用する方法500を図示する。描写される実施形態において、材料の歪み状態が、502において、取得され得る。再び、歪み状態に関する特定の歪み座標が、ユーザからの入力、有限要素分析モジュールを使用して決定された歪み状態、実験データ、および／または所望の情報の任意の他の適切な源を含む任意の適切な方式において取得され得る。歪み状態が取得される方法にかかわらず、504において、訓練された統計的エネルギー分散モデルに提供され得る。訓練された統計的エネルギー分散モデルは、506において、歪まされた材料のエネルギー分散を出力し得る。上で記載のように、材料のエネルギー分散は、材料のバンド構造とも称され得る。いくつかの実施形態において、歪まされた材料のエネルギー分散は、508において、将来的使用のために、非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体内に記憶され得るか、および／または材料のエネルギー分散は、ユーザに出力され得る。例えば、歪まされた材料のエネルギー分散は、ユーザによる歪まされた材料のバンド構造の可視化目的のために、グラフ上にプロットされ得る。代替として、いくつかの実施形態において、材料の出力エネルギー分散は、下記でさらに説明されるように、510において、歪まされた状態における材料の1つ以上の材料特性を識別するために使用され得る。1つ以上の識別された材料特性は、512において、将来的使用のために、非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体上に記憶され得、および／またはテキストおよび／またはグラフィカル提示のいずれかを使用して、ユーザに出力され得る。

【0071】

弾性歪みを受けた材料の上記のエネルギー分散、すなわち、バンド構造は、複数の状況において有用であり得る。例えば、可視化目的のために、単に、歪まされた材料のエネルギー

10

20

30

40

50

一分散をプロットし、それをユーザに出力することは、そのような可視化によって提供されるこの材料の第1原理理解を使用して、ユーザが、弾性的に歪まされた材料の電子挙動および特性を究明および追求することを可能にし得る。現在、そのようなプロセスは、全ての着目歪み状態に関して膨大な労力を伴わずに行われることが不可能である。対照的に、開示される方法は、本明細書に開示される訓練された統計的モデルを使用して、容易かつ迅速に、いくつかの異なる可能な歪み状態に関して遂行され得る。加えて、弾性的に歪まされた状態における材料に関連付けられるエネルギー分散データを発生させることによって、迅速かつ容易に、ある材料特性遷移および特性を識別することが、可能である。例えば、エネルギー分散データ内の伝導バンド最小値および価電子バンド最大値が位置する場所を調べることによって、材料のバンドギャップ、直接から間接へのバンドギャップの遷移を識別し、かつ材料のエネルギー分散の簡単な分析を通して、歪まされた材料の電子バンド、フォノンバンド、マグノンバンド、および他の適切な特性等の種々のバンド性質に関する情報を提供することが、可能である。再び、このタイプの分析および情報は、記憶されるか、および／またはユーザに出力されるかのいずれかであり得る。代替として、このタイプの分析情報は、有限要素分析および／または他の適切なタイプの分析と組み合わせられ、システムの設計および動作に関するユーザに利用可能な情報に対して向上させられた機能性を提供し得る。

【0072】

本明細書に説明される技術の上で説明される実施形態は、多数の方法のいずれかにおいて実装することができる。例えば、実施形態は、ハードウェア、ソフトウェア、またはそれらの組み合わせを使用して実装され得る。ソフトウェア内に実装されるとき、ソフトウェアコードが、单一コンピューティングデバイス内に提供されるか、または複数のコンピューティングデバイス間に分散させられるかどうかにかかわらず、任意の好適なプロセッサまたはプロセッサの集合上で実行されることができる。そのようなプロセッサは、C P Uチップ、G P Uチップ、マイクロプロセッサ、マイクロコントローラ、またはコプロセッサ等の名称によって当技術分野において公知の市販の集積回路構成要素を含む集積回路構成要素内に1つ以上のプロセッサを伴う集積回路として実装され得る。代替として、プロセッサは、A S I C等のカスタム回路網またはプログラマブル論理デバイスを構成することから生じる半カスタム回路網内に実装され得る。さらなる代替として、プロセッサは、市販、半カスタム、またはカスタムかどうかにかかわらず、より大きい回路または半導体デバイスの一部であり得る。具体的例として、いくつかの市販のマイクロプロセッサは、1つのコアまたはそれらのコアのサブセットがプロセッサを構成し得るように、複数のコアを有する。但し、プロセッサは、任意の好適なフォーマットにおける回路網を使用して実装され得る。

【0073】

さらに、コンピューティングデバイスは、ラック搭載型コンピュータ、デスクトップコンピュータ、ラップトップコンピュータ、またはタブレットコンピュータ等のいくつかの形態のいずれかで具現化され得ることを理解されたい。加えて、コンピューティングデバイスは、携帯情報端末（P D A）、スマートフォン、タブレット、または任意の他の好適なポータブルまたは固定電子デバイスを含む、概して、コンピューティングデバイスと見なされないが、好適な処理能力を伴うデバイス内に組み込まれ得る。

【0074】

コンピューティングデバイスは、1つ以上の入力および出力デバイスを有し得る。これらのデバイスは、とりわけ、ユーザインターフェースを提示するために使用されることができる。ユーザインターフェースを提供するために使用され得る出力デバイスの例は、出力の視覚的提示のためのディスプレイ画面と、出力の可聴提示のためのスピーカまたは他の音発生デバイスとを含む。ユーザインターフェースのために使用され得る入力デバイスの例は、キーボード、個々のボタン、およびマウス、タッチパッド、およびデジタル化タブレット等のポインティングデバイスを含む。別の例として、コンピューティングデバイスは、発話認識を通して、または他の可聴フォーマットにおいて、入力情報を受信し得る。

10

20

30

40

50

【0075】

そのようなコンピューティングデバイスは、企業ネットワークまたはインターネット等のローカルエリアネットワークまたは広域ネットワークとしてを含む任意の好適な形態における1つ以上のネットワークによって、相互接続され得る。そのようなネットワークは、任意の好適な技術に基づき得、任意の好適なプロトコルに従って動作し得、無線ネットワーク、有線ネットワーク、または光ファイバネットワークを含み得る。

【0076】

本明細書で概略された種々の方法またはプロセスは、種々のオペレーティングシステムまたはプラットフォームのうちの任意の1つを採用する1つ以上のプロセッサ上で実行可能なソフトウェアとしてコード化され得る。加えて、そのようなソフトウェアは、いくつかの好適なプログラミング言語および／またはプログラミングまたはスクリプトツールのいずれかを使用して書き込まれ得、そのようなソフトウェアも、フレームワークまたは仮想機械上で実行される実行可能機械言語コードまたは中間コードとしてコンパイルされ得る。

10

【0077】

この点において、本明細書に説明される実施形態は、1つ以上のコンピュータまたは他のプロセッサ上で実行されると、上で議論される種々の実施形態を実装する方法を実施する1つ以上のプログラムでエンコードされるコンピュータ読み取り可能な記憶媒体（または複数のコンピュータ読み取り可能な媒体）（例えば、コンピュータメモリ、1つ以上のフロッピー（登録商標）ディスク、コンパクトディスク（CD）、光学ディスク、デジタルビデオディスク（DVD）、磁気テープ、フラッシュメモリ、RAM、ROM、EEPROM、フィールドプログラマブルゲートアレイまたは他の半導体デバイス内の回路構成、または他の有形コンピュータ記憶媒体）として具現化され得る。前述の例から明白であるように、コンピュータ読み取り可能な記憶媒体は、十分な時間にわたって、情報を保持し、コンピュータ実行可能命令を非一過性形態において提供し得る。そのようなコンピュータ読み取り可能な記憶媒体または複数の媒体は、記憶されたプログラムまたは複数のプログラムが1つ以上の異なるコンピューティングデバイスまたは他のプロセッサ上にロードされ、上で議論されるような本開示の種々の側面を実装し得るように、可搬性であることができる。本明細書で使用されるように、用語「コンピュータ読み取り可能な記憶媒体」は、製造物（すなわち、製造品）または機械と見なされ得る非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体のみを包含する。代替として、または加えて、本開示は、伝搬信号等のコンピュータ読み取り可能な記憶媒体以外のコンピュータ読み取り可能な媒体として具現化され得る。

20

【0078】

用語「プログラム」または「ソフトウェア」は、本明細書において、上で議論されるような本開示の種々の側面を実装するようにコンピューティングデバイスまたは他のプロセッサをプログラムするために採用され得る任意のタイプのコンピュータコードまたはコンピュータ実行可能命令の組を指すための一般的意味において使用される。加えて、本実施形態の一側面によると、実行されると、本開示の方法を実施する、1つ以上のコンピュータプログラムは、單一コンピューティングデバイスまたはプロセッサ上に常駐する必要はなく、いくつかの異なるコンピュータまたはプロセッサ間にモジュール式方式で分散させられ、本開示の種々の側面を実装し得ることを理解されたい。

30

【0079】

コンピュータ実行可能命令は、1つ以上のコンピュータまたは他のデバイスによって実行される、プログラムモジュール等の多くの形態にあり得る。概して、プログラムモジュールは、特定のタスクを実施する、または特定の抽象データタイプを実装する、ルーチン、プログラム、オブジェクト、構成要素、データ構造等を含む。典型的に、プログラムモジュールの機能性は、種々の実施形態において、所望に応じて、組み合わせられる、または分散させられ得る。

40

【0080】

50

本明細書に説明される実施形態は、方法として具現化され得、その例は、提供されている。方法の一部として実施される行為は、任意の好適な方法で順序付けられ得る。故に、行為が図示されるものと異なる順序で実施される、実施形態が、構築され得、これは、例証的実施形態において順次行為として示されている場合でも、いくつかの行為を同時に実施することを含み得る。

【0081】

さらに、いくつかの作用は、「ユーザ」によって講じられるものとして説明される。「ユーザ」は、単一個人である必要はなく、いくつかの実施形態において、「ユーザ」に属する作用は、コンピュータ補助ツールまたは他の機構と組み合わせて、個人のチームおよび／または個人によって実施され得ることを理解されたい。

10

【0082】

図10を参照すると、本発明の側面を実装するための例示的システムは、コンピュータ610の形態における汎用目的コンピューティングデバイスを含む。コンピュータ610の構成要素は、限定ではないが、処理ユニット620と、システムメモリ630と、システムメモリを含む種々のシステム構成要素を処理ユニット620に結合するシステムバス621とを含み得る。システムバス621は、種々のバスアーキテクチャのいずれかを使用して、メモリバスまたはメモリコントローラ、周辺バス、およびローカルバスを含むいくつかのタイプのバス構造のいずれかであり得る。例として、限定ではないが、そのようなアーキテクチャは、業界標準アーキテクチャ（ISA）バス、マイクロチャネルアーキテクチャ（MCA）バス、拡張ISA（EISA）バス、Video Electronics Standards Association（VESA）ローカルバス、およびMezzanine busとしても知られる周辺構成要素相互接続（PCI）バスを含む。

20

【0083】

コンピュータ610は、典型的に、種々のコンピュータ読み取り可能な媒体を含む。コンピュータ読み取り可能な媒体は、コンピュータ610によってアクセスされ得、揮発性および不揮発性媒体のリムーバブルおよび非リムーバブル媒体の両方を含む任意の利用可能な媒体であることができる。例として、限定ではないが、コンピュータ読み取り可能な媒体は、コンピュータ記憶媒体および通信媒体を備え得る。コンピュータ記憶媒体は、コンピュータ読み取り可能な命令、データ構造、プログラムモジュール、または他のデータ等、情報の記憶のために、任意の方法または技術において実装される揮発性および不揮発性のリムーバブルおよび非リムーバブル媒体の両方を含む。コンピュータ記憶媒体は、限定ではないが、RAM、ROM、EEPROM、フラッシュメモリまたは他のメモリ技術、CD-ROM、デジタル多用途ディスク（DVD）または他の光ディスクストレージ、磁気力セット、磁気テープ、磁気ディスクストレージまたは他の磁気記憶デバイス、または所望の情報を記憶するために使用され得、コンピュータ610によってアクセスされ得る任意の他の媒体を含む。通信媒体は、典型的に、コンピュータ読み取り可能な命令、データ構造、プログラムモジュール、または他のデータを、搬送波または他のトランスポート機構等の変調されたデータ信号において具現化し、任意の情報送達媒体を含む。用語「変調されたデータ信号」は、その特性組のうちの1つ以上のものを有する、または信号内に情報をエンコードするような様式において変化させられる信号を意味する。例として、限定ではないが、通信媒体は、有線ネットワークまたは直接有線接続等の有線媒体、および音響、RF、赤外線、および他の無線媒体等の無線媒体を含む。上記のいずれかの組み合わせも、コンピュータ読み取り可能な媒体の範囲内に含まれるべきである。

30

【0084】

システムメモリ630は、読み取り専用メモリ（ROM）631およびランダムアクセスメモリ（RAM）632等の揮発性および／または不揮発性メモリの形態におけるコンピュータ記憶媒体を含む。立ち上げ中等、コンピュータ610内の要素間で情報を輸送することに役立つ、基本ルーチンを含む基本入力／出力システム633（BIOS）は、典型的に、ROM631内に記憶される。RAM632は、典型的に、処理ユニット620に

40

50

よって、直ちにアクセス可能であり、および／または、現在動作させられているデータおよび／またはプログラムモジュールを含む。例として、限定ではないが、図10は、オペレーティングシステム634、アプリケーションプログラム635、他のプログラムモジュール636、およびプログラムデータ637を図示する。

【0085】

コンピュータ610は、他のリムーバブル／非リムーバブルの揮発性／不揮発性コンピュータ記憶媒体も含み得る。例にすぎないが、図10は、非リムーバブルの不揮発性磁気媒体から読み取り、またはそれに書き込むハードディスクドライブ641と、リムーバブルの不揮発性磁気ディスク652から読み取り、またはそれに書き込む磁気ディスクドライブ651と、CD ROMまたは他の光学媒体等のリムーバブルの不揮発性光ディスク656から読み取り、またはそれに書き込む光ディスクドライブ655とを図示する。例示的動作環境内で使用され得る他のリムーバブル／非リムーバブルの揮発性／不揮発性コンピュータ記憶媒体は、限定ではないが、磁気テープカセット、フラッシュメモリカード、デジタル多用途ディスク、デジタルビデオテープ、ソリッドステートRAM、ソリッドステートROM等を含む。ハードディスクドライブ641は、典型的に、インターフェース640等の非リムーバブルメモリインターフェースを通して、システムバス621に接続され、磁気ディスクドライブ651および光ディスクドライブ655は、典型的に、インターフェース650等のリムーバブルメモリインターフェースによって、システムバス621に接続される。

【0086】

上記の図10に議論および図示されるドライブおよびその関連付けられるコンピュータ記憶媒体は、コンピュータ610のためのコンピュータ読み取り可能な命令、データ構造、プログラムモジュール、および他のデータのストレージを提供する。図10において、例えば、ハードディスクドライブ641は、オペレーティングシステム644、アプリケーションプログラム645、他のプログラムモジュール646、およびプログラムデータ647を記憶するように図示される。これらの構成要素は、オペレーティングシステム634、アプリケーションプログラム635、他のプログラムモジュール636、およびプログラムデータ637と同一であるか、または異なるかのいずれかであることができることに留意されたい。オペレーティングシステム644、アプリケーションプログラム645、他のプログラムモジュール646、およびプログラムデータ647は、ここにおいて、異なる数を与えられ、最低でも、それらが異なるコピーであることを図示する。ユーザは、キーボード662、および、一般に、マウス、トラックボール、またはタッチパッドと称される、ポインティングデバイス661等の入力デバイスを通して、コマンドおよび情報をコンピュータ610の中に入力し得る。他の入力デバイス（図示せず）は、マイクロホン、ジョイスティック、ゲームパッド、衛星放送受信アンテナ、スキャナ、または同等物を含み得る。これらおよび他の入力デバイスは、多くの場合、システムバスに結合されるが、パラレルポート、ゲームポート、またはユニバーサルシリアルバス（USB）等の他のインターフェースおよびバス構造によって接続され得るユーザ入力インターフェース660を通して、処理ユニット620に接続される。モニタ691または他のタイプのディスプレイデバイスも、ビデオインターフェース690等のインターフェースを介して、システムバス621に接続される。モニタに加え、コンピュータは、スピーカ697およびプリンタ696等の他の周辺出力デバイスも含み得、それらは、出力周辺インターフェース695を通して接続され得る。

【0087】

コンピュータ610は、遠隔コンピュータ680等の1つ以上の遠隔コンピュータへの論理接続を使用して、ネットワーク化された環境内で動作し得る。遠隔コンピュータ680は、パーソナルコンピュータ、サーバ、ルータ、ネットワークPC、ピアデバイス、または他の共通ネットワークノードであり得、典型的に、コンピュータ610に関して上で説明される要素の多くまたは全てを含むが、メモリ記憶デバイス681のみが、図10に図示されている。図10に描写される論理接続は、ローカルエリアネットワーク（LAN）

10

20

30

40

50

671と、広域ネットワーク（WAN）673とを含むが、また、他のネットワークを含み得る。そのようなネットワーキング環境は、オフィス、企業全体のコンピュータネットワーク、インターネット、およびインターネットに一般的である。

【0088】

LANネットワーキング環境において使用されるとき、コンピュータ610は、ネットワークインターフェースまたはアダプタ670を通して、LAN671に接続される。WANネットワーキング環境において使用されるとき、コンピュータ610は、典型的に、インターネット等のWAN673を経由して通信を確立するためのモデム672または他の手段を含む。内部または外部にあり得るモデム672は、ユーザ入力インターフェース660または他の適切な機構を介して、システムバス621に接続され得る。ネットワーク化された環境において、コンピュータ610に関して描写されるプログラムモジュールまたはその一部は、遠隔メモリ記憶デバイス内に記憶され得る。例として、限定ではないが、図10は、メモリデバイス681上に常駐するように遠隔アプリケーションプログラム685を図示する。示されるネットワーク接続は、例示的であって、コンピュータ間の通信リンクを確立する他の手段も、使用され得ることを理解されたい。10

【0089】

本明細書に概略される種々の方法またはプロセスは、任意の好適なハードウェア内に実装され得る。加えて、本明細書に概略される種々の方法またはプロセスは、種々のオペレーティングシステムまたはプラットフォームのうちの任意の1つを採用する1つ以上のプロセッサ上で実行可能なハードウェアおよびソフトウェアの組み合わせ内に実装され得る。20
例えば、種々の方法またはプロセスは、ソフトウェアを利用して、プロセッサに、1つ以上のアクチュエータをアクティブ化し、コンテナおよび／またはビルトプラットフォームの1つ以上の領域のモーション等、本明細書に説明されるもの等のモーションを実施するように命令し得る。そのようなアプローチの例は、上で説明される。しかしながら、ハードウェアおよびソフトウェアの任意の好適な組み合わせが、本明細書で議論される実施形態のいずれかを実現するために採用され得る。

【0090】

この点において、本発明の種々の概念は、1つ以上のコンピュータまたは他のプロセッサ上で実行されると、本発明の種々の実施形態を実装する、1つ以上のプログラムでエンコードされる少なくとも1つの非一過性コンピュータ読み取り可能な記憶媒体（例えば、コンピュータメモリ、1つ以上のフロッピー（登録商標）ディスク、コンパクトディスク、光学ディスク、磁気テープ、フラッシュメモリ、フィールドプログラマブルゲートアレイ内の回路構成、または他の半導体デバイス等）として具現化され得る。非一過性コンピュータ読み取り可能な媒体または媒体は、その上に記憶されるプログラムまたは複数のプログラムが、任意のコンピュータリソース上にロードされ、上で議論されるような本発明の種々の側面を実装し得るように、可搬性であり得る。30

【0091】

用語「プログラム」または「ソフトウェア」は、本明細書において、上で議論されるような本開示の種々の側面を実装するようにコンピュータまたは他のプロセッサをプログラムするために採用され得る任意のタイプのコンピュータコードまたはコンピュータ実行可能命令の組を指すための一般的意味において使用される。加えて、一側面によると、実行されると、本発明の方法を実施する1つ以上のコンピュータプログラムは、单一コンピュータまたはプロセッサ上に常駐する必要はなく、異なるコンピュータまたはプロセッサ間にモジュール式方式で分散させられ、本発明の種々の側面を実装し得ることを理解されたい40。

【0092】

コンピュータ実行可能命令は、1つ以上のコンピュータまたは他のデバイスによって実行される、プログラムモジュール等の多くの形態にあり得る。概して、プログラムモジュールは、特定のタスクを実施する、または特定の抽象データタイプを実装する、ルーチン、プログラム、オブジェクト、構成要素、データ構造等を含む。典型的に、プログラムモジ50

ユールの機能性は、種々の実施形態において、所望に応じて、組み合わせられる、または分散させられ得る。

【0093】

本発明の種々の概念は、1つ以上的方法として具現化され得、その例が、提供されている。例えば、訓練された統計的モデルを発生させ、使用するためのシステムおよび方法が、本明細書に提供されている。本明細書に説明される任意の方法の一部として実施される行為は、任意の好適な方法で順序付けられ得る。故に、行為が図示されるものと異なる順序で実施される、実施形態が、構築され得、これは、これらの行為が例証的実施形態において順次行為として示されている場合でも、いくつかの行為を同時に実施することを含み得る。

10

【0094】

(実施例：概要)

【0095】

下記で実証されるように、体系的機械学習は、算出上可能な6次元歪みの関数として材料の電子バンド構造を表す問題をもたらし得る。具体的に、第1原理計算からの限定される量のデータに依拠するバンド構造 $\varepsilon_n(k; \varepsilon)$ の代用モデル化のためのいくつかの一般的な方法が、十分な正確度を伴って、材料の特性を適合させるために使用されることができる。特に、下記で詳述される人工ニューラルネットワークは、19 meVの正確度内において、歪ませたシリコンのバンド構造を予測することが可能であった。訓練された統計的モデルも、歪み空間全体にわたって、シリコン内の間接／直接バンドギャップ遷移および半導体／半金属遷移を発見するために利用された。加えて、最初に、弾性歪みエネルギー密度の関数としての純シリコンバンドギャップ分布のチャートが、取得された。

20

【0096】

(実施例：方法論)

【0097】

以下の例に提示される第1原理計算は、密度関数理論(DFT)シミュレーションのためのPerdew-Burke-Ernzerhof(PBE)交換相関関数および射影補強波法(PAW)を使用して計算された。DFTシミュレーションは、Vienna第1原理シミュレーションパッケージ内で実装された。520 eVのエネルギーカットオフを伴う平面波基本セットが、電子波動関数を拡張するために採用された。Brillouiniゾーン統合が、 $13 \times 13 \times 13$ Monkhorst-Pack k点メッシュ(GW計算のための $7 \times 7 \times 7$)上で行われた。全ての構造内の原子座標が、最大残留力が 0.0005 eV A^{-1} を下回るまで緩和させられた。

30

【0098】

ニューラルネットワーク(NN)適合が、TensorFlowフレームワーク内で実装された。バンドギャップを予測するために、(64-128-256-256)構造を伴う4つの隠れ層を伴う深層ニューラルネットワークが、非剪断歪みの場合、使用され、(512-256-256-256)構造が、剪断歪みを伴う場合のために使用された。单一k点におけるバンドエネルギー予測のより複雑なタスクに関して、(512-256-256-256)のアーキテクチャが、使用された。漏洩正規化線形ユニットが、活性化関数として選定された。Adam確率論的最適化方法、直交加重初期化、およびドロップアウト技法が、過剰適合を防止するために使用された。

40

【0099】

ニューラルネットワークに加え、アンサンブルベースの機械学習方法も、ニューラルネットワークモデルとの比較目的のために使用された。アルゴリズムの大部分に関して、scikit-learn実装が、使用された。回帰タスクに関して、決定木上で2つのタイプのアンサンプリング、すなわち、ランダムフォレストアルゴリズムおよび勾配ブースティング回帰が、使用された。適合方法の大部分に関して、ハイパーパラメータが、訓練セット上の交差検証を使用して調整された。これは、これらのアンサンブル方法を向上させることに役立った。

50

【0100】

(実施例：シリコンのモデル化)

【0101】

シリコンのバンド構造 $\varepsilon_n (k; \varepsilon)$ が、モデル化され、 n は、バンドインデックスであり、 k は、波ベクトルであり、 ε は、結晶歪みテンソルである。このモデルは、機械学習モデルを第1原理を使用して取得された訓練データで訓練することによって、第1原理密度関数理論 (DFT) を使用して取得された。このアプローチの主要利点は、機械学習モデル（すなわち、統計的モデル）の訓練が、密格子第1原理計算等の他の方法よりもはるかに少ないデータを要求することによる低減させられた「データ飢餓」である。
下記でさらに詳述されるように、この方法は、データが収集され、モデルが訓練されると、歪み座標の任意の所望の組み合わせに関する高速評価時間と組み合わせて、合理的な正確度も提供した。したがって、可視化および最適化タスクを非常に急速に行うことが可能であった。

【0102】

モデル化目的のために、加えられる歪みが、間接／直接バンドギャップ遷移等の現象を識別する際に難点を生じさせる、より大きい超単位格子におけるバンド折畳の交絡効果を回避するために、 3×3 テンソル変換を完璧な Si 単純格子（2 個の原子）に適用することによって説明された。冗長算出を回避するために、結晶に加えられる各歪みは、明確に異なる変動に対して 1 対 1 対応を有することが確認された。結晶の一様な変形の非変換部分は、二次変形勾配テンソル F によって定義された。

【数 8】

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ 0 & F_{22} & F_{23} \\ 0 & 0 & F_{33} \end{pmatrix}$$

30 バンド構造は、結晶の回転時、変化しない。したがって、F が上三角であると仮定することによって、回転自由度を排除することが可能であった。対称歪みテンソル ε と F との間の関係は、以下によって与えられる。

【数 9】

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{2} (F + F^T) - I$$

【0103】

上記の仮定を使用して、非剪断変形 (ε^{3D}) の場合のバンドギャップ挙動が、主歪み方向に沿って加えられる歪み成分を用いて、究明された。訓練データセットを取得するための DFT 計算は、2 つの設定、すなわち、適合のための算出上安価な PBE-PAW 方法と、補正のための正確であるが、より算出上高価な GW モデル (G: Green の関数、W: スクリーニングされた Coulomb 相互作用) とに基づいた。勾配ブースティング回帰 (GBR) およびランダムフォレスト回帰 (RFR) および人工ニューラルネットワーク (ANN) を含む決定木分類子上でのアンサンブル方法が、上記で以前に詳述されるように、異なる機械学習適合方法を比較するために使用された。最良結果は、ニューラルネットワークモデルによって達成され、それは、より高速の評価時間も有していた。この

10

20

30

40

50

アプローチは、非消失オフ対角線剪断値を伴う 6 D 歪みテンソル (ϵ^{6D}) の場合に一般化され得ることは、強調に値する。対応するモデルは、弾性歪みエネルギー密度対バンドギャップの依存性に関して下記で議論されるように、0.07 eV の二乗平均平方根誤差を有していた。下記の表 1 は、計算された PBE 訓練データ (eV 単位) を使用して訓練されたバンドギャップ予測およびエネルギー予測タスクのための種々の機械学習アルゴリズムに関する二乗平均平方根誤差 (RMSE) をリストアップする。Lagrange 多項式 (degree 9) が、比較目的のために使用された。

【表 1】

表 1

10

| 機械学習入力 | | MLアルゴリズム | | | | ML標的 |
|-----------------------------------|----|----------|---------|--------|--------|---|
| | | Lagrange | GBR | RFR | ANN | |
| ϵ^{3D} | | 0.0150 | 0.0367 | 0.0247 | 0.0049 | バンドギャップ |
| ϵ^{6D} | | | -0.0743 | 0.0781 | 0.0264 | |
| \mathbf{k} 点および ϵ^{3D} | VB | | -0.1125 | 0.1078 | 0.0131 | エネルギー分散、 $\epsilon_n(\mathbf{k}; \epsilon)$ |
| | CB | | -0.1593 | 0.1555 | 0.0184 | |

【0104】

ニューラルネットワークによって、PBE-PAW データに関する非常に正確なモデルを取得後、このモデルと歪みおよび PBE バンドギャップの関数として GW によって計算されたデータとの間の差異が、第 2 のニューラルネットワークモデルを用いて適合され、実験データに匹敵する正確なモデルをもたらした。このアプローチは、デルタ機械学習またはデータ融合としても知られる。GW の極度に高い算出コストに起因して、Lagrange 補間（はるかに少ないデータ点を要求するため）が、他の機械学習アルゴリズムと比較された。ここにおいて、Lagrange 多項式 (degree 8) が、使用された。モデルは、別個に取得された GW 試験データセット上で検証された。 ϵ^{3D} 歪みの場合における GW バンドギャップが、8 meV の正確度内で近似され得ることが示された。下記の表 2 において、平均絶対誤差 (MAE) および二乗平均平方根誤差 (RMSE) が、GW データのみ (PBE データを伴わない) および PBE データと組み合わせられた GW データに基づいて、バンドギャップ対歪みに関する GBR、RFR、および ANN のための訓練された統計的モデルに関して示される。GW データ自体の使用は、類似するが、より低い正確度をもたらした。ANN の相対誤差も、表に提示され、相対誤差は、真の値と真の値のノルムによって除算される予測との間の差異のノルムである。使用されるデータ点の数を低減するために、可能性として、匹敵する正確度および実験の適応設計または能動的学习と併用されるデータ量を達成し得るガウスプロセス等の他のクラスのモデルを利用し得る。

【表 2】

表 2

20

30

30

| MLアルゴリズム | GW | | GW+PBE | |
|----------|--------|--------|--------|--------|
| | MAE | RMSE | MAE | RMSE |
| Lagrange | 0.0211 | 0.0274 | 0.0186 | 0.0241 |
| GBR | 0.0334 | 0.0521 | 0.0135 | 0.0209 |
| RFR | 0.0434 | 0.0596 | 0.0145 | 0.0215 |
| ANN | 0.0099 | 0.0144 | 0.0080 | 0.0118 |
| ANN相対誤差 | 1.72% | 2.78% | 1.38% | 2.05% |

40

50

【0105】

図11は、計算されるエネルギー分散データと、この訓練データを使用した適合モデルからの結果との間の比較を示す。具体的に、DFT-PBE計算データが、 $\varepsilon_1 = 7\%$ 、 $\varepsilon_2 = 4\%$ 、 $\varepsilon_3 = 4\%$ で変形させられたシリコンに関する最高価電子バンド（VB）および最低伝導バンド（CB）について実線で示される。結果として生じる訓練された統計的モデルからの高度に効果的適合は、破線として示される。図に示されるように、統計的モデルは、高正確度を例証する。

【0106】

弾性歪みエンジニアリング実験において、研究者は、多くの場合、以下のように定義される、ある弾性歪みエネルギー密度（h）において測定される犠牲を払う場合に達成され得る最高または最低バンドギャップについて関心がある。

【数10】

$$h(\varepsilon) = \frac{E(\varepsilon) - E^0}{V^0}, \quad (1)$$

式中、E（ε）は、歪みεによって変形させられる格子の総エネルギーであり、E⁰およびV⁰は、非変形格子の総エネルギーおよび体積である。ここにおいて、6D変形が、弾性歪みエネルギー密度の関数としてのバンドギャップ分布の機械学習を使用してモデル化される。h（ε）とバンドギャップとの間の多対多関係が、図12Aに示される。下記でさらに詳述されるように、図は、全体的変形空間内の種々の弾性歪みエネルギー密度hに関して到達可能なバンドギャップ値を描写する。歪ませたシリコンが直接バンドギャップを有する歪み領域は、細長い卵形によって囲まれる。水平軸上の遠景は、半導体／半金属遷移に関する最低エネルギーペナルティを示し、これは、 $\varepsilon_{11} = 0.55\%$ 、 $\varepsilon_{12} = 1.69\%$ 、 $\varepsilon_{13} = 0.74\%$ 、 $\varepsilon_{21} = 1.69\%$ 、 $\varepsilon_{22} = -1.26\%$ 、 $\varepsilon_{23} = -1.92\%$ 、 $\varepsilon_{31} = 0.74\%$ 、 $\varepsilon_{32} = -1.92\%$ 、および $\varepsilon_{33} = -1.04\%$ の変動に対応する。応力なし平衡状態において、シリコンは、1.1eVのバンドギャップを有する。しかしながら、歪みエネルギー密度の増加に伴って、種々の可能なバンドギャップが、サンプリングされ得る。0.2meV/Å³程度の低歪みエネルギー密度を伴うメタ安定シリコンさえ、したがって、応力なしシリコンと非常に異なる材料であろう。hがさらに増加するにつれて、図に図示される固定h下で到達可能な最大および最小バンドギャップの変化によって証明されるように、バンドギャップの許容可能範囲は、降下し、「包絡線」が、最終的に、形成される。

【0107】

図12Aにおける領域の陰影は、利用可能なバンドギャップの分布を反映する。数学的に、バンドギャップのキュムラント「状態の密度」（cDOB）は、以下のように定義され得る。

【数11】

$$c(E_g'; h') \equiv \int_{h(\varepsilon) < h'} d^6\varepsilon \delta(E_g' - E_g(\varepsilon)) = \int d^6\varepsilon \delta(E_g' - E_g(\varepsilon)) H(h' - h(\varepsilon)) \quad (2)$$

式中、

10

20

30

40

50

【数12】

$$d^6\varepsilon \equiv d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 d\varepsilon_4 d\varepsilon_5 d\varepsilon_6$$

は、6次元歪み空間内での測定値であり、 $\delta(\cdot)$ は、Dirac デルタ関数であり、 $H(\cdot)$ は、Heaviside ステップ関数である。 h' におけるバンドギャップの「状態の密度」(DOB) が、次いで、以下のように、 h' に対してキュムラントの導関数を求ることによって定義される。

10

【数13】

$$\rho(E_g';h') \equiv \frac{\partial c(E_g';h')}{\partial h'} = \int d^6\varepsilon \delta(E_g' - E_g(\varepsilon)) \delta(h' - h(\varepsilon)) \quad (3)$$

【0108】

DOB の意味は、以下の通りである。すなわち、

【数14】

20

$$(h - \frac{dh}{2}, h + \frac{dh}{2})$$

のエネルギー間隔内の弾性的に歪ませた状態を検討すると、これらの状態が提供する、バンドギャップの分布が、決定され得る。DOB 関数

【数15】

30

$$\rho(E_g;h)$$

は、どんなエネルギーコストでどんなバンドギャップが達することができるかの青写真をもたらす。電子バンドギャップに関してだけではなく、概して、任意のスカラー特性（例えば、熱伝導性、超伝導性温度等）に関してても、図12Aに示されるように、深層弾性歪みエンジニアリングのためのロードマップを提供する定義(3)を使用することができる。したがって、

【数16】

40

$$\rho(E_g;h)$$

に基づいて、上包絡関数

【数17】

$$E_g^{upper}(h)$$

50

および下包絡関数
【数18】

$$E_g^{lower}(h)$$

が、以下のように定義され得る。

【数19】

10

$$E_g^{upper}(h) \equiv \max supp_{E_g}(\rho(E_g;h)), \quad E_g^{lower}(h) \equiv \min supp_{E_g}(\rho(E_g;h)), \quad (4)$$

これは、図12Aにおける上および下点線としてレンダリングされ、したがって、バンドギャップの非ゼロ密度は、

【数20】

$$(E_g^{lower}(h), E_g^{upper}(h))$$

20

内に該当する。深層弾性歪みエンジニアリングにおいて、

【数21】

$$E_g^{lower}(h)$$

は、ある性能指数を取得するための6D最急降下歪み方向も示す。例えば、可能な限り高速で、または弾性エネルギーの最小コストを用いて、シリコンのバンドギャップを1.1eVから低減させることを所望する場合、図12Bは、このゼロバンドギャップ状態、すなわち、下包絡関数に到達するための最急降下歪み方向に沿った歪みを図示する。全体的バンドギャップ包絡線は、したがって、航空機に関する所与の大気密度（高度）における許容可能マッハ数を説明するために空気力学において使用される「飛行包絡線」に類似するように認められ得る。したがって、最初に、シリコンバンドギャップの形状、さらに、バンド構造自体が、可能な歪み範囲全体を横断して、本材料の弾性歪みエンジニアリングのために容易かつ迅速に利用可能である。

30

【0109】

上記の統計的モデルを使用して、また、シリコンを間接から直接バンドギャップ材料に遷移させるための最小エネルギーを決定することも可能である。特に、

【数22】

40

$$\begin{pmatrix} 9.2\% & 0 & 0 \\ 0 & 9.2\% & 0 \\ 0 & 0 & 9.2\% \end{pmatrix}$$

の歪みテンソルによって歪まされたシリコンは、間接から直接バンドギャップ材料に遷移

50

する。この歪みテンソルは、上で説明される x、y、および z 軸に沿って（すなわち、シリコン結晶学的 [100]、[010]、および [001] 方向に沿って）シリコンに同時に加えられる 9.2 % の等 3 軸引っ張り、すなわち、同時に全 3 つの方向における等量の拡張である。そのような実施形態の間、元のシリコンの立方対称性は、依然として、保持される。

【0110】

比較的に微量の機械的エネルギーを加えることで、純 Si バンドギャップの全体的分布が下向きにシフトすることが分かる。これは、歪み（剪断／引っ張り／圧縮）を複数の方向において調節することによって、シリコンが、応力なし状態と非常に異なる電磁スペクトルの部分を吸収する傾向となるであろうことを意味する。1. 35 meV / Å³において、バンドギャップがゼロに達し、全体的 6D 歪み空間内の半導体／半金属遷移のために要求される最小エネルギーに対応することも見出された（対応する歪みにおける予測されるバンド構造に関する図 12C 参照）。上記に照らして、深層弾性エンジニアリングは、材料バンドギャップを低減させる機会を提供する。加えて、光学用途に関して、別の疑問は、バンドギャップが直接または間接であるかどうかである。この直接バンドギャップ包絡線は、DOB 内に組み込まれるサブセットであろう。したがって、いくつかの実施形態において、直接バンドギャップの密度 (cDODB) が、(2)、(3)、(4) と並行して定義され得るが、Eg の代わりに、E_{directg} を用いて、

【数 23】

10

$$cDODB \rho_d(E_{directg}; h)$$

20

およびその境界

【数 24】

$$E_{directg}^{upper}(h), E_{directg}^{lower}(h)$$

30

を得る。直接バンドギャップが、任意の歪みに存在する場合、その歪みに関して、以下が存在するであろう。

【数 25】

$$(E_{directg}^{lower}(h), E_{directg}^{upper}(h)) \subseteq (E_g^{lower}(h), E_g^{upper}(h)). \quad (5)$$

40

【0111】

本明細書に説明される訓練された統計的モデルは、実験的に達することができる歪み範囲内で見出され、間接／直接バンドギャップ遷移が、シリコン内の高 h 領域内で生じ、1.5 meV / Å³ の最小歪みエネルギー密度

【数 26】

$$h_d^{\min}$$

が、直接バンドギャップが現れるために存在する（図 12A における卵形によって囲まれ

50

た領域) :

【数27】

$$h_d^{\min} = \min \text{supp}_h(E_{\text{directg}}^{\text{upper}}(h) - E_{\text{directg}}^{\text{lower}}(h)). \quad (6)$$

【0112】

提示される結果に照らして、異なる歪みが、同一バンドギャップをもたらし得ることが明白であり、特定のバンドギャップ値を求めるこ¹⁰とにおいて、より低いエネルギーを伴う歪み状態を選定することが所望し得る。例として、0.7 eVの同一PBEバンドギャップは、2.5%および7.3%の3軸歪みを加えることによって到達され得る。ここにおいて、より小さい歪み ($h = 1.31 \text{ meV}/\text{\AA}^3$ を伴う) が、実世界実験および/または設計において、より大きいもの ($h = 5.13 \text{ meV}/\text{\AA}^3$) より実装が容易であろう。

完全6D歪み空間内の到達可能バンドギャップ値の組は、明示的可視化を可能にしないが、可能な歪みが引っ張りおよび圧縮歪み ($\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0$) に制限される場合、直接、達することができる電子バンドギャップ範囲を追求することが可能である。図13は、0.9 eVのバンドギャップに関して3次元歪み空間に対してプロットされるバンドギャップ等値面を図示する。等値面は、高スループットの訓練されたニューラルネットワークモデルによって取得される異なるレベルに関してバンドギャップが所与の値に等しい歪み空間内の点の組を表す。結晶構造および変形テンソルの両方は、いくつかの対称性を有し、歪みの関数としてのバンドギャップが、それらのいくつかに対して不变であるので、等値面は、全ての歪みに関して、以下の対称構造を有する凸面多面体の形状を有するよう見える。

1. μ および χ 点は、 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ 線上にある。それらの座標は、したがって、それぞれ、(a, a, a) および (b, b, b) によって示される。

2. α_j ($j = 1, 2, 3$) 点は、正三角形を形成し、それは、 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ 線に直交する平面にある。それらの座標は、それぞれ、(c, d, d) (d, c, d) および (d, d, c) によって示される。

3. β_j ($j = 1, 2, 3$) 点も、正三角形を形成し、それは、 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ 線に直交する平面にある。それらの座標は、それぞれ、(e, e, g) (g, e, e) および (2, g, e) (d, d, c) によって示される。

【0113】

低バンドギャップ値に関して、 χ 点は、多面体自体の外側にあり、対応する頂点は、丸みを帯びている。この丸みを帯びた最も遠い点を χ^* と称する(図4参照)。より高い歪みの場合、 χ 点は、 χ_1, χ_2 および χ_3 点に割れ、それらは、正三角形を形成する。等値面のトポロジは、PBEおよびGWバンドギャップの両方に関して類似するが、実際の歪み値は、同一PBEおよびGWバンドギャップレベルに関して異なる。0 eVバンドギャップを取得するための最も簡単な無剪断方法(最小 h (ε^{3D}) を伴う)は、1つの

【数28】

$\langle 100 \rangle$

方向において、-3.86%、他の方向に沿って、4.36%の双軸変形を加えることであることが見出された。PBE+GWモデルに従って、シリコン歪みによって到達可能な最大限のバンドギャップは、1.24 eVであり、それは、3軸6.5%歪みによって実現される。そのような範囲まで歪ませたシリコンは、太陽電池に関するShockley-Queisser限界にほぼ到達し、シリコンベースの単一PN接合部への弾性歪みエンジニアリングの適用が、太陽電池の効率改良をもたらし得ることを示唆することに留

10

20

30

40

50

意されたい。

【0114】

バンドギャップは、価電子バンド最大値および伝導バンド最小値の相対位置に依存し、2つのバンドの異なる形状は、同一バンドギャップ値をもたらし得る。深層弾性歪みエンジニアリングは、バンドギャップ等値面の異なる面上の重要なトポロジ遷移特徴を探すことと関係する。1. 1 eV バンドギャップを伴う非変形シリコンに関して、その価電子バンド最大値 (VBM) は、 Γ 点に位置し、伝導バンド最小値 (CBM) は、直線を Γ から X への直線 (Δ 線) 上にあり、Brillouin ゾーン境界までの経路の約 85 % に位置付けられる。歪み空間において、VBM は、変形に関係なく、 Γ に留まる一方、CBM の位置は、外部歪みによって大幅に影響され得ることが見出された。CBM の 4 つのタイプの変化が、バンドギャップ等値面多面体のエッジを横断して起こり得、それは、CBM の相対 k 空間位置および多面体の幾何学形状によって識別された。具体的に、図 14 A-1 4 C は、深層弾性歪みエンジニアリングによって予測される k 空間遷移を図示する。遷移は、GW を用いて、DFT 計算によって照合された。図 14 A-1 4 B は、「 $\Delta-L$ 」遷移を表し、図 14 B-1 4 C は、間接／直接遷移を示す。CBM (矢印) は、図 14 A-1 4 C において、それぞれ、k 点 (0.433, 0.433, 0)、(0.5, 0, 0)、および (0, 0, 0) に位置する。図 14 D は、Fermi エネルギーの周囲の拡大バンド構造を描写し、これは、3 つの可能な CBM 位置の競合を示す。14 A-1 4 C に関する 3 つの非剪断歪み例は、(-0.23%, 1.84%, 3.45%)、(4.63%、8.23%、9.22%)、および (9.85%, 9.31%, 9.4%) であって、図 13 におけるバンドギャップ等値面の異なる面上の点に対応する。
10
20

【0115】

「 Δ 」切替が、 $\mu - \alpha_j$ のエッジを交差するときに生じ、CBM は、(k1, k1, 0)、(0, k1, k1)、または (k1, 0, k1) に近接する「 Δ 」型線に沿ってあり、 $k_1 = 0.425$ である。そのような状況において、加えられる歪みが、CBM は、依然として、非変形シリコンに関するものと同一位置にあるほど小さいと考え得、バンド極値に及ぼされる歪み効果を詳しく説明するための一次摂動理論に基づく、線形変形ポテンシャル理論を採用し得る。しかしながら、大変動において、有効質量上に及ぼされるバンド形状の変化の影響に起因して、固定化した CBM 假定は、もはや当てはまらず、「L- Δ 」遷移の発生は、多面体上の $\beta_i - \alpha_i$ エッジを横断して観察された。この場合、モデルは、「 Δ 」から「L」型点に沿った CBM の変化を捕捉することが可能であった（再び、図 14 A-1 4 D 参照）。歪み空間内の χ_2 に向かってさらに移動すると、CBM は、L に留まり、 $\chi_2 - \beta_j$ エッジの交差は、「L 切替」と称される。バンドギャップ等値面の上側先端の近傍において、間接／直接バンドギャップ遷移が、観察され、CBM は、図 14 C に示されるように、 Γ に現れる。一般に、歪みが増加するにつれて、
30

【数 29】

$$E_g^{\Gamma}$$

および

【数 30】

$$E_g^L$$

の両方は、減少し、2 つのシナリオ間の競合は、図 14 D に示される。高歪みの結果として、
50

【数3 1】

$$E_g^{\Gamma}$$

の減少は、

【数3 2】

$$E_g^L$$

10

より高速であり、最終的に、バンドギャップは、

【数3 3】

$$E_g^{\Gamma}$$

20

が

【数3 4】

$$E_g^L$$

より小さいとき、直接となる。フォノンの関与を排除し、吸収または放出を促進すると、歪ませた S_i は、非変形 S_i と比較して、基本吸収エッジの周囲のその光学遷移において有意な向上を有するであろう。

30

【0116】

上記の訓練されたニューラルネットワークモデルは、それらが、いくつかの訓練データセットから学習し、それを取り込み得るようにも実装され得る。この能力は、異なる研究からのデータを収集する材料特性データベースの拡散に伴って、ますます望ましくなりつつある。それを達成するために、訓練されたニューラルネットワークモデル (NNM) が、損失関数の同一局所最小値に至ることを回避するために、ドロップアウトレートおよび加重規則化係数等の増加させられる規則化パラメータを用いて、以前のパラメータの組を拡張データセット上で使用して作成された。これは、モデルが、追加の訓練をデータベースに追加の着信データ上でハンドリングするだけではなく、それを最初から行うよりもはるかに高速で行うことを可能にする。

40

【0117】

NNM上で行われた数値実験は、モデルのインクリメント適合が、事実上、新しいデータセットでの誤差を低減させたことを実証した（新しいデータのインクリメント適合に先立った、およびその後の両方のバンドギャップ予測誤差をリストアップする下記の表3参照）。そのようなインクリメント式に適合されたモデルは、したがって、バンドギャップ近似および種々の最適化タスクにも等しく適用可能である。さらに、これらのモデルは、NNMのパラメータ内に記憶される対称性、遷移、および極値例についての暗示的洞察が存在するので、Ge または GaAs 等の他の材料にシフトされるときも再使用され得る。 S_i に関する重みから開始して、他の材料に関するモデルを訓練することは、転移学習とも称され、知識転移に起因して、必要とされる時間およびデータ量を有意に低減させ、E

50

S Eのための多用途代用モデルの高速開発につながり得る。

【表3】

表3

| | 3D | | 6D | |
|------|---------|---------|---------|---------|
| | 前 | 後 | 前 | 後 |
| RMSE | 0. 0403 | 0. 0069 | 0. 0264 | 0. 0253 |
| MAE | 0. 0167 | 0. 0052 | 0. 0179 | 0. 0167 |

10

【0118】

シリコンに関する前述の結果に基づいて、開示される統計的モデルは、バンドワーピング、縮退リフティング、間接／直接バンドギャップ遷移、半導体／半金属遷移等の種々の物理的現象の研究および正確な弾性歪みエンジニアリング予測を可能にする電子バンド構造を表す効率的方法を提供する。これまで、バンドギャップエンジニアリングは、主として、1つのみ、または2つの歪み成分を調整することによって行われていた。対照的に、開示される方法は、従来の分析方法より効率的に追求されている電子的特性と6D歪みテンソルとの間に高度に非線形の関係を用いて、データ駆動方式において、目前の問題に適応することが可能である。この目的を達成するために、シリコンの電子バンド構造が、基準計算から学習された。深層ニューラルネットワークアルゴリズムを採用することで、Siのバンドギャップは、数ミリ電子ボルト正確度を伴って、歪みの関数として非常に正確に適合される。対照的に、平易なDFT計算を使用して、可視化および最適化を実施することは、膨大な時間量を要し、新しい最適化問題の解決は、毎回、最初から、全ての異なる歪み座標に関して繰り返されなければならない。開示される方法によって可能にされたリアルタイムでの高速かつ効率的バンド構造可視化は、したがって、弾性的に歪ませられた材料の高速意図的エンジニアリングにとって非常に有益である。

20

【0119】

(実施例：ダイヤモンド)

【0120】

最近、ナノスケールダイヤモンドが、破碎を伴わずに、9%歪みに到達し得ることが示された。したがって、開示される統計的モデルが、-5%～10%の高歪み下でダイヤモンド結晶内のバンド構造およびバンドギャップの歪み誘発変化を究明するために使用された。故に、ダイヤモンドに関するモデルが、シリコンに関する上で説明される同一方法を使用して訓練された。訓練されたニューラルネットワークモデルを使用して、バンドギャップ包絡線プロットが、開発され、それは、バンドギャップ対弾性歪みエネルギー密度のプロットとして、図15に示され、バンドギャップ包絡線の上側および下側エッジが、点線によって示される。開発されたモデルを使用して、5.87eVの最大バンドギャップが、調査される面積のエッジ上の $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = -5\%$ 歪みの歪み（すなわち、3軸圧縮）に関して識別された。5.87eVの最小バンドギャップが、同様に調査される面積のエッジ上で、 $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -5\% \sim \varepsilon_{33} = 15\%$ 歪みに関して到達された。3D歪みモデルは、基準として使用される対応するGWデータを用いて、2meV/Å³のRMSEを伴って、歪みエネルギー密度と、0.05eVのRMSEを伴って、バンドギャップを予測した。これは、再び、開示される方法およびモデルの正確度および一般的可用性を確認する。

30

【0121】

全ての定義は、本明細書で定義および使用されるように、辞書定義、参照することによって組み込まれる文書内の定義、および／または定義された用語の通常の意味に優先するものと理解されたい。

40

【0122】

不定冠詞「a」および「a n」は、本明細書で使用されるように、そうではないことが明

50

確に示されない限り、「少なくとも 1 つ」を意味するものと理解されたい。

【0123】

本明細書で使用されるように、語句「少なくとも 1 つ」は、必ずしもではないが、要素のリスト内で具体的に列挙されたあらゆる要素のうちの少なくとも 1 つを含み、要素のリスト内の要素の任意の組み合わせを除外しない、1 つ以上の要素のリストを参照する際、要素のリスト内の要素のうちの任意の 1 つ以上のものから選択された少なくとも 1 つの要素を意味するものと理解されたい。本定義はまた、具体的に識別されたそれらの要素に関連または関連しないかどうかにかかわらず、要素が、随意に、語句「少なくとも 1 つ」が指す、要素のリスト内で具体的に識別された要素以外に存在し得ることを可能にする。

【0124】

語句「および／または」は、明細書で使用されるように、そのように等値接続された要素、すなわち、ある場合には接続的に存在し、他の場合には分離して存在する、要素の「一方または両方」を意味するものと理解されたい。「および／または」とともに列挙された複数の要素は、同一方式で、すなわち、そのように等値接続された要素の「1 つ以上の」ものとして解釈されるべきである。他の要素が、随意に、具体的に識別されたそれらの要素に関連または関連しないかどうかにかかわらず、「および／または」節によって具体的に識別される要素以外にも存在し得る。したがって、非限定的例として、「A および／または B」の言及は、「c o m p r i s i n g (~を備える)」等の非制限的言語と併用されるとき、一実施形態において、A のみ（随意に、B 以外の要素を含む）、別の実施形態において、B のみ（随意に、A 以外の要素を含む）、さらに別の実施形態において、A および B の両方（随意に、他の要素を含む）等を指し得る。

10

【0125】

本明細書で使用されるように、「または」は、上記で定義されるような「および／または」と同一意味を有するものと理解されたい。例えば、リスト内のアイテムを分離するとき、「または」または「および／または」は、包含的であるものと解釈されるものとする、すなわち、少なくとも 1 つの含有であるが、また、要素のいくつかまたはそのリストのうちの 1 つを上回るものと、随意に、追加の列挙されないアイテムとを含む。「～のうちの 1 つのみ」または「～のうちの正確に 1 つ」等のそうではないことが明確に示される用語のみが、要素のうちのいくつかまたはそのリストのうちの正確に 1 つの要素の含有を指すであろう。一般に、用語「または」は、本明細書で使用されるように、その前に、「～のいずれか」、「～のうちの 1 つ」、「～のうちの 1 つのみ」、または「～のうちの正確に 1 つ」等の排他性の用語が置かれるときのみ、排他的代替（すなわち、「一方または他方であるが、両方ではない」）を示すものと解釈されるものとする。

20

【0126】

本明細書で使用される語法および専門用語は、説明の目的のためのものであって、限定と見なされるべきではない。「i n c l u d i n g (~を含む)」、「c o m p r i s i n g (~を備える)」、「h a v i n g (~を有する)」、「c o n t a i n i n g (~を含む)」、「i n v o l v i n g (~を伴う)」、およびその変形例の使用は、その後に列挙されたアイテムおよび追加のアイテムを包含することを意味する。

30

【0127】

本教示は、種々の実施形態および例と併せて説明されているが、本教示は、そのような実施形態または例に限定されることを意図するものではない。対照的に、本教示は、当業者によって理解されるであろうように、種々の代替、修正、および均等物を包含する。故に、前述の説明および図面は、一例にすぎない。

40

50

【図1A】

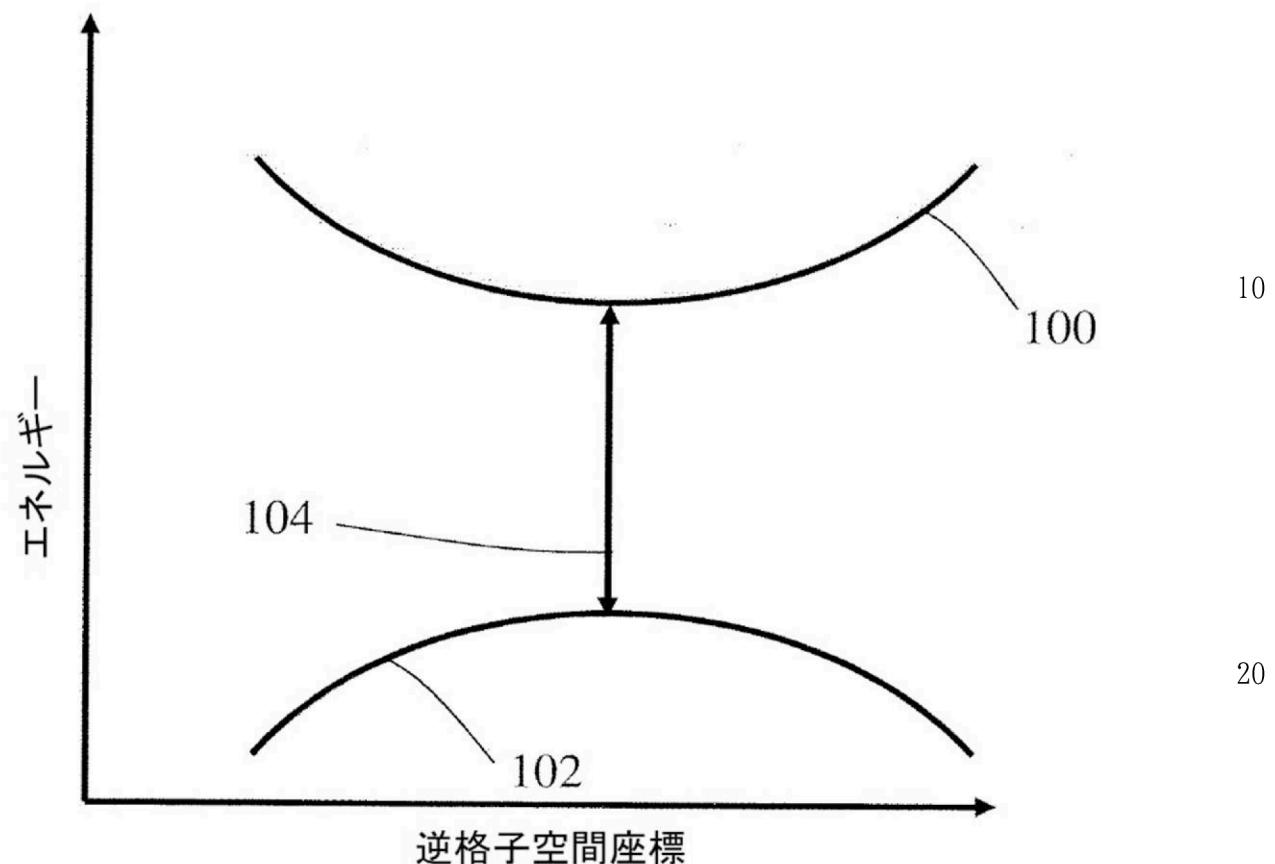


FIG. 1A

30

40

50

【図1B】

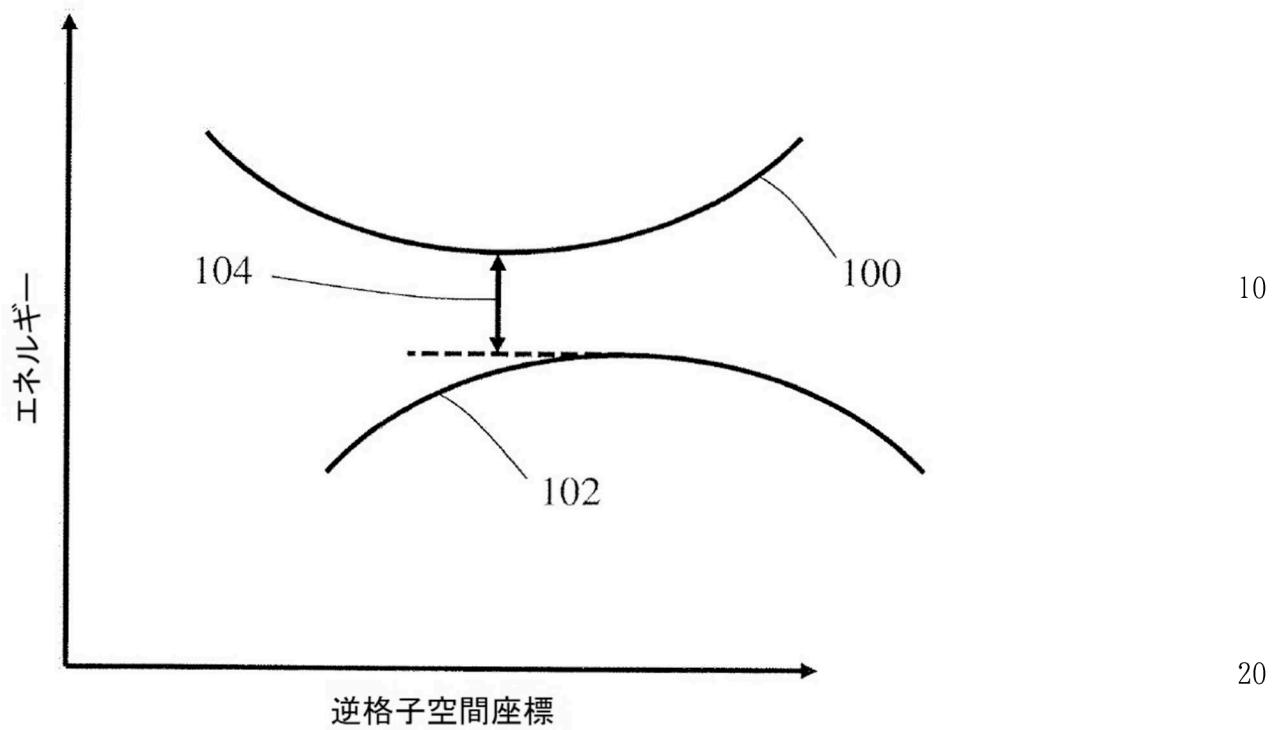


FIG. 1B

30

40

50

【図2】

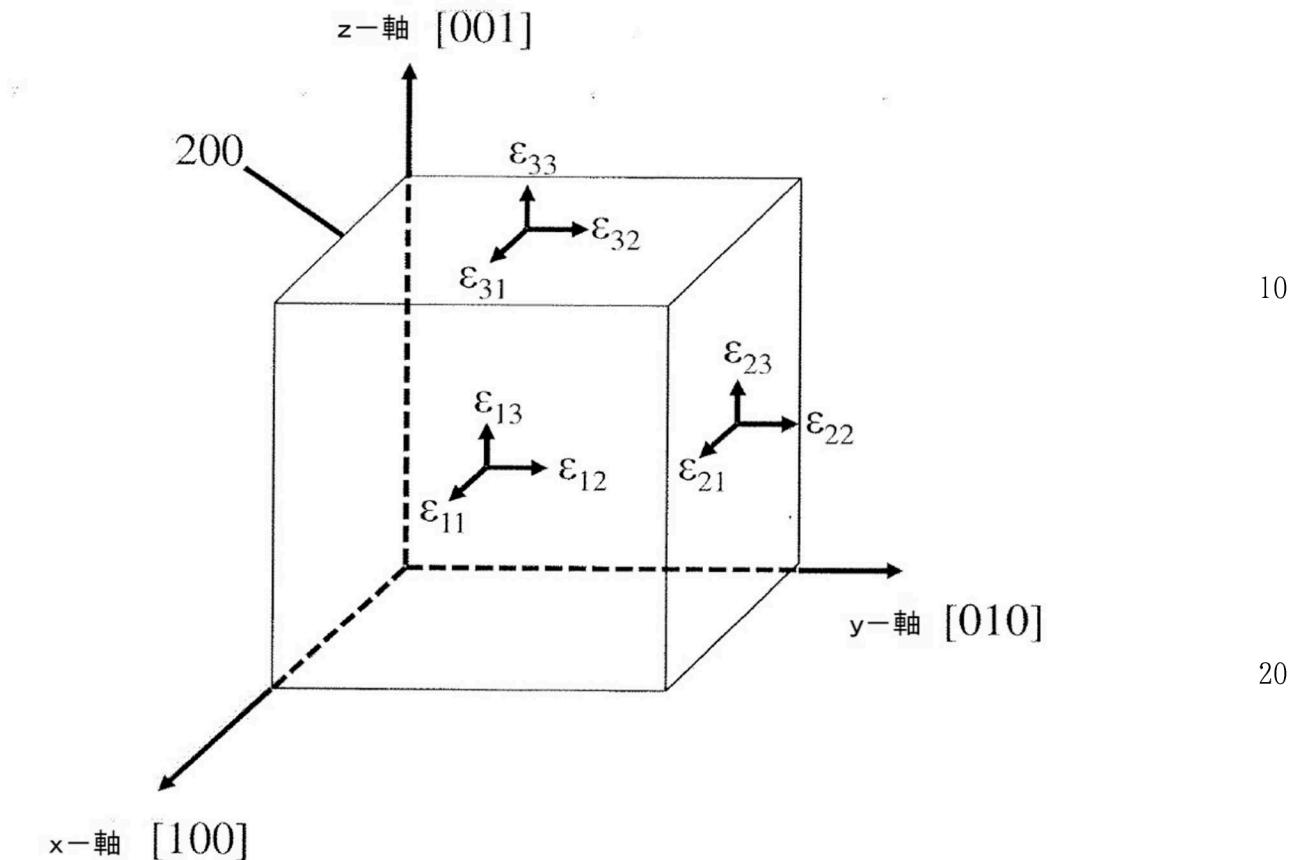


FIG. 2

【図3】

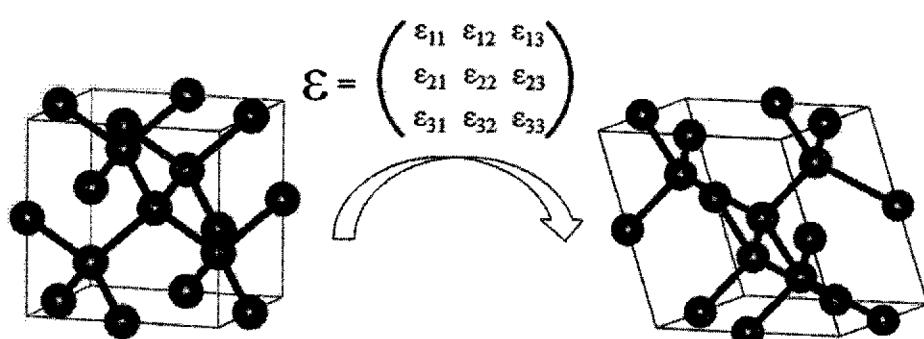


FIG. 3

【図4A】

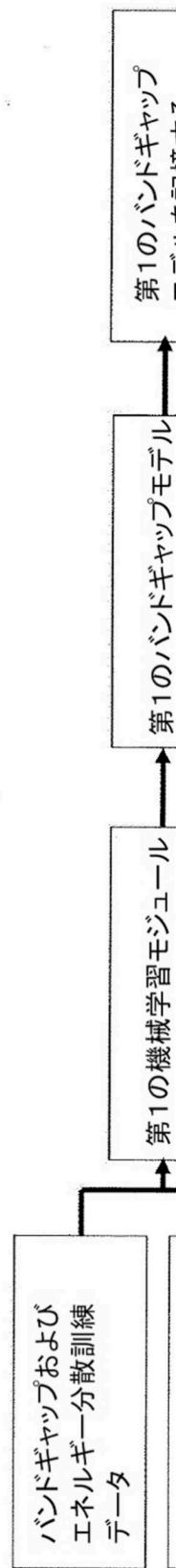


FIG. 4A

10

20

30

40

50

【図4B】

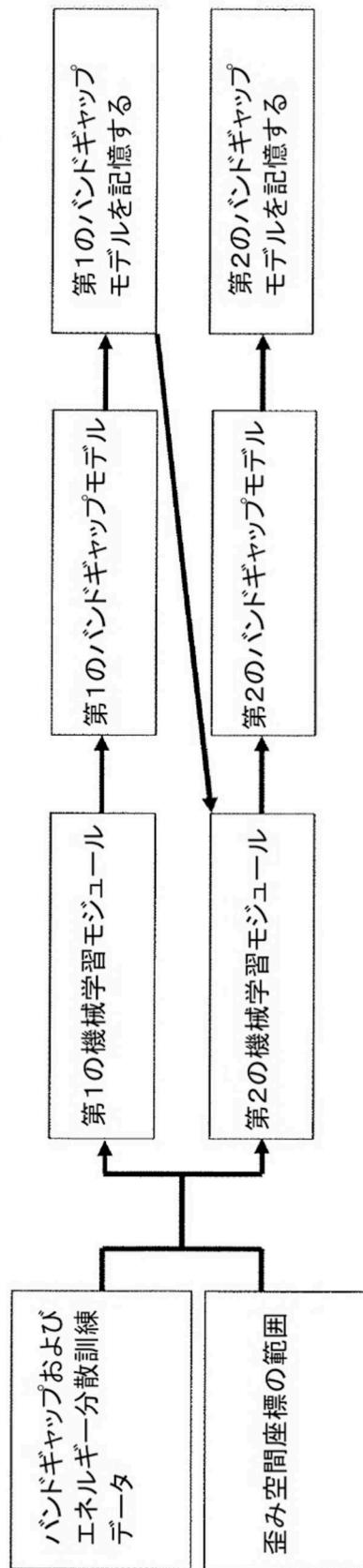


FIG. 4B

10

20

30

40

50

【図5】

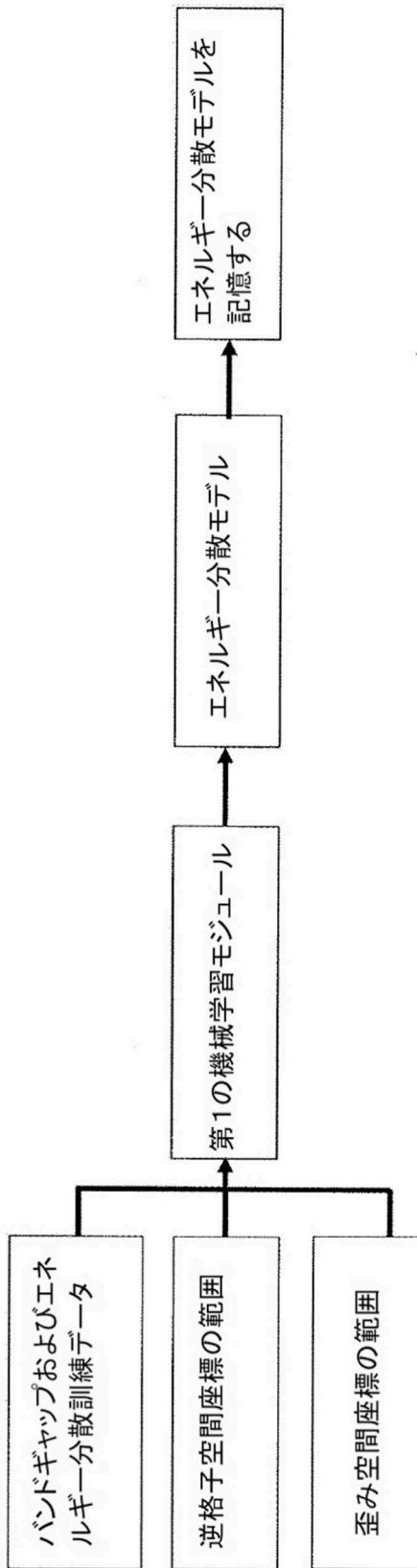


FIG. 5

10

20

30

40

50

【図 6 A】

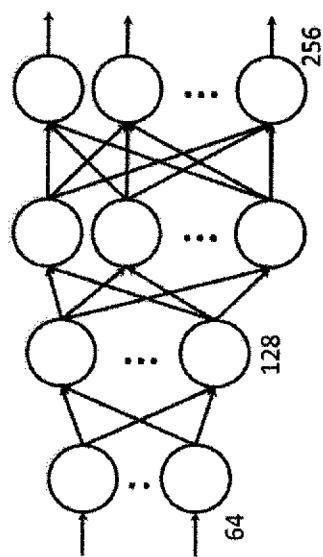


Fig. 6A

10

【図 6 B】

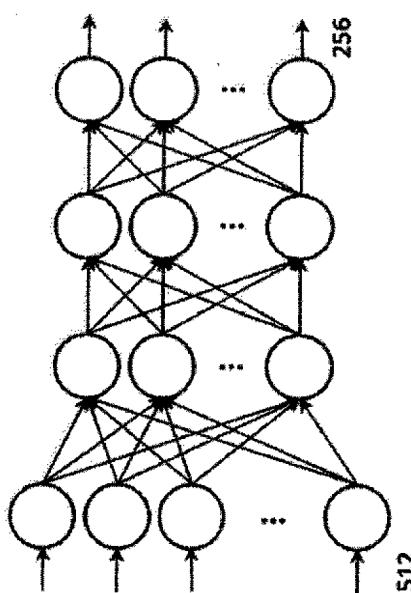


Fig. 6B

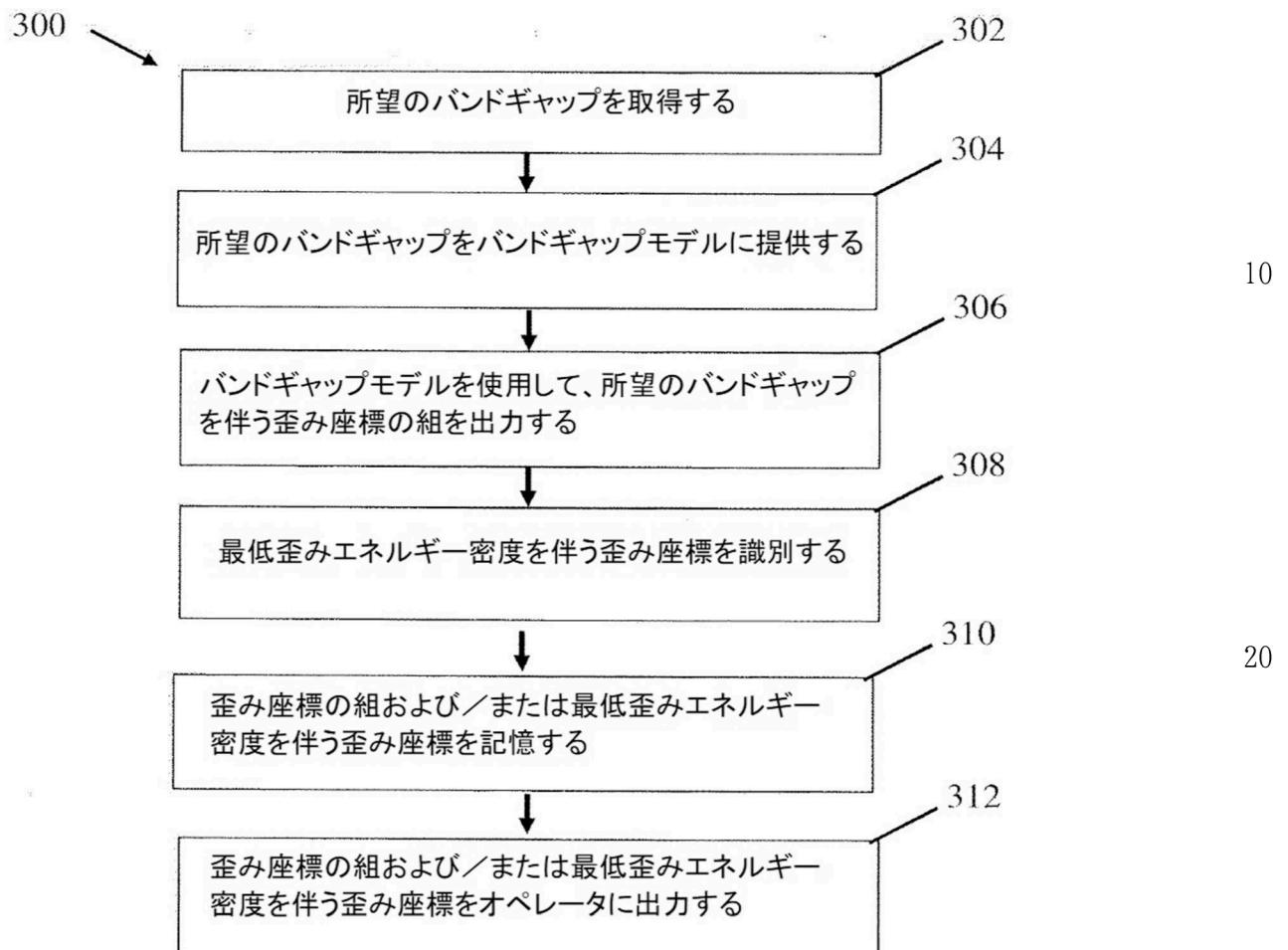
20

30

40

50

【図7】

Fig. 7
30

【図8】

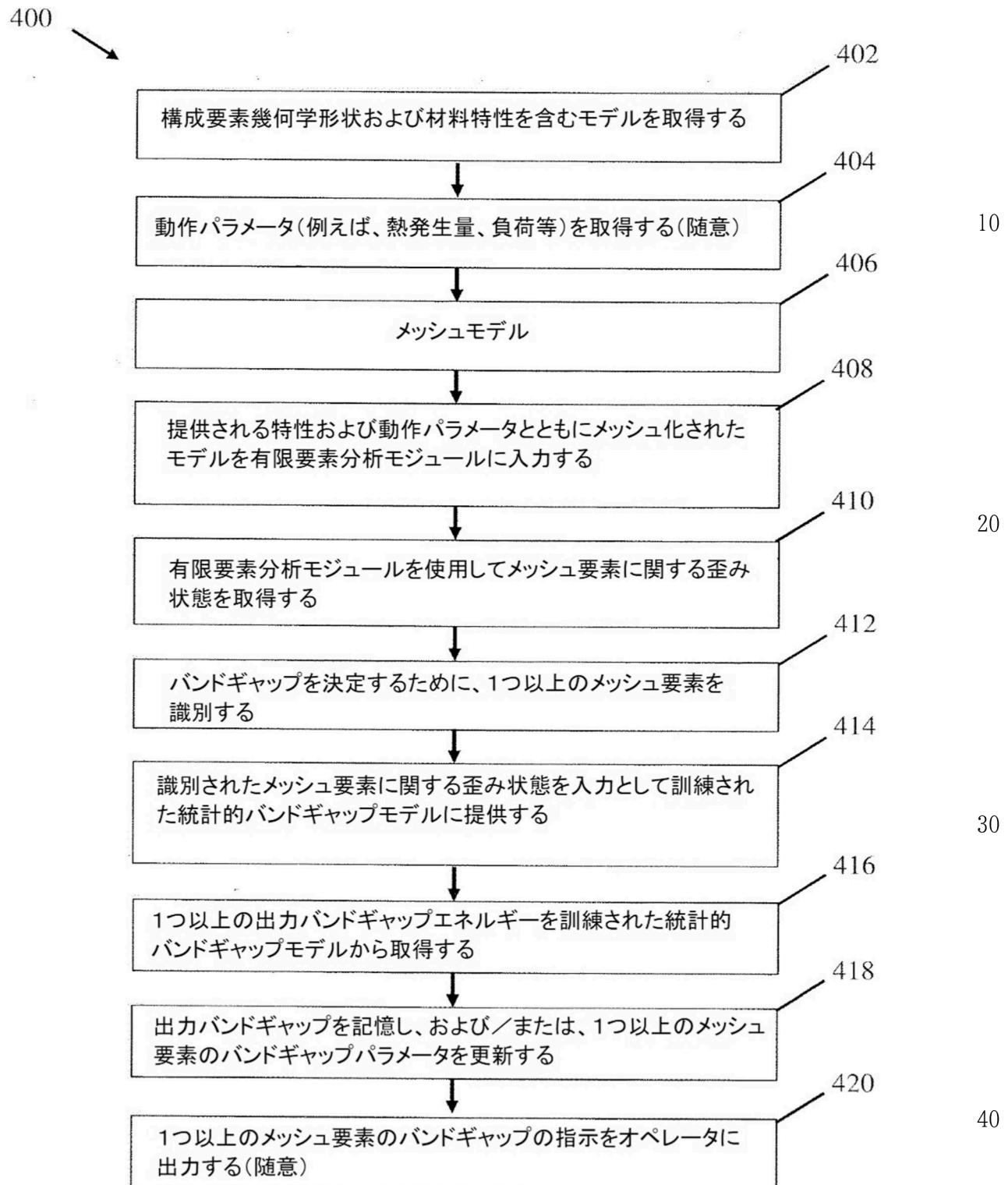


Fig. 8

【図9】

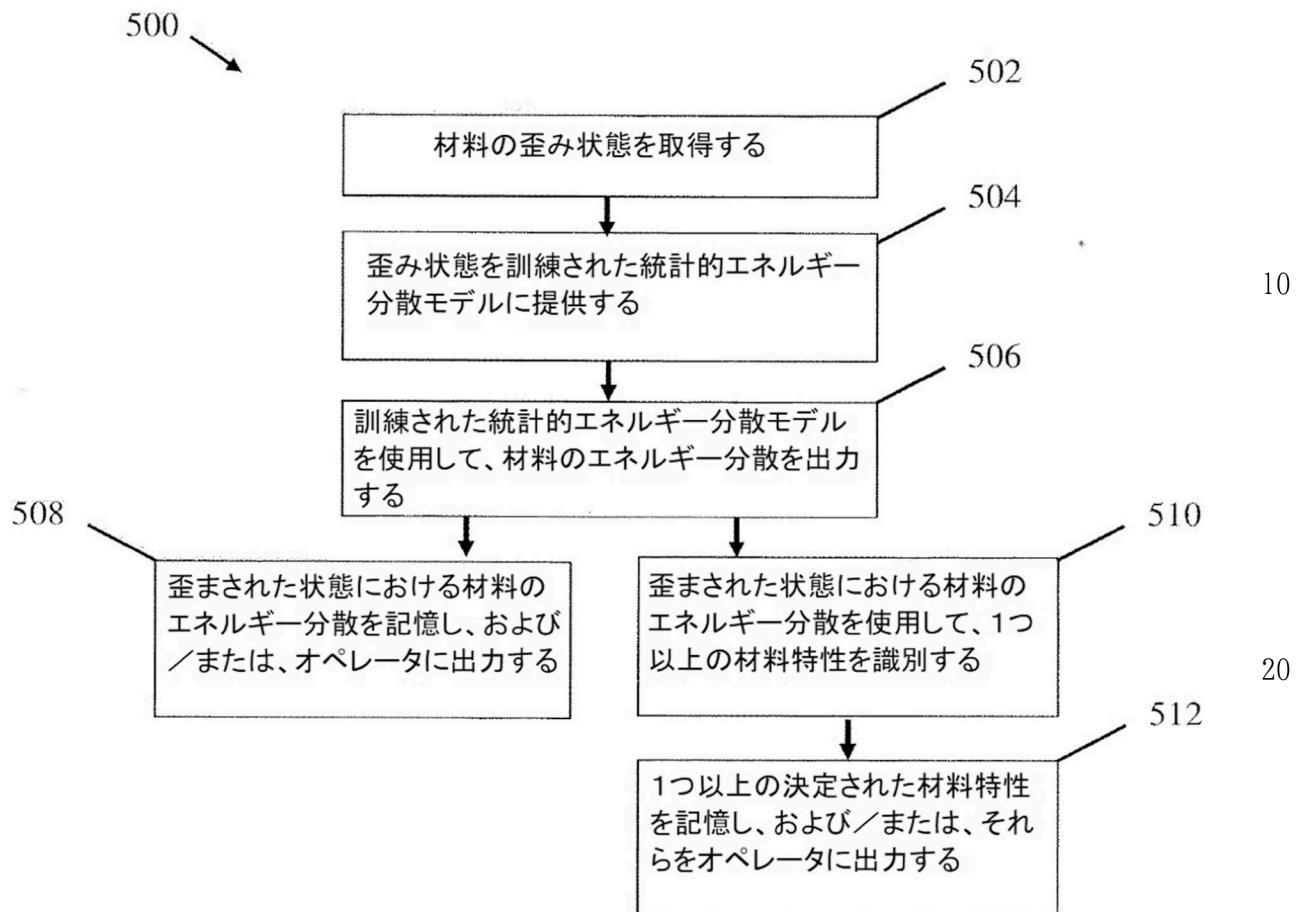


FIG. 9

30

40

50

【図10】

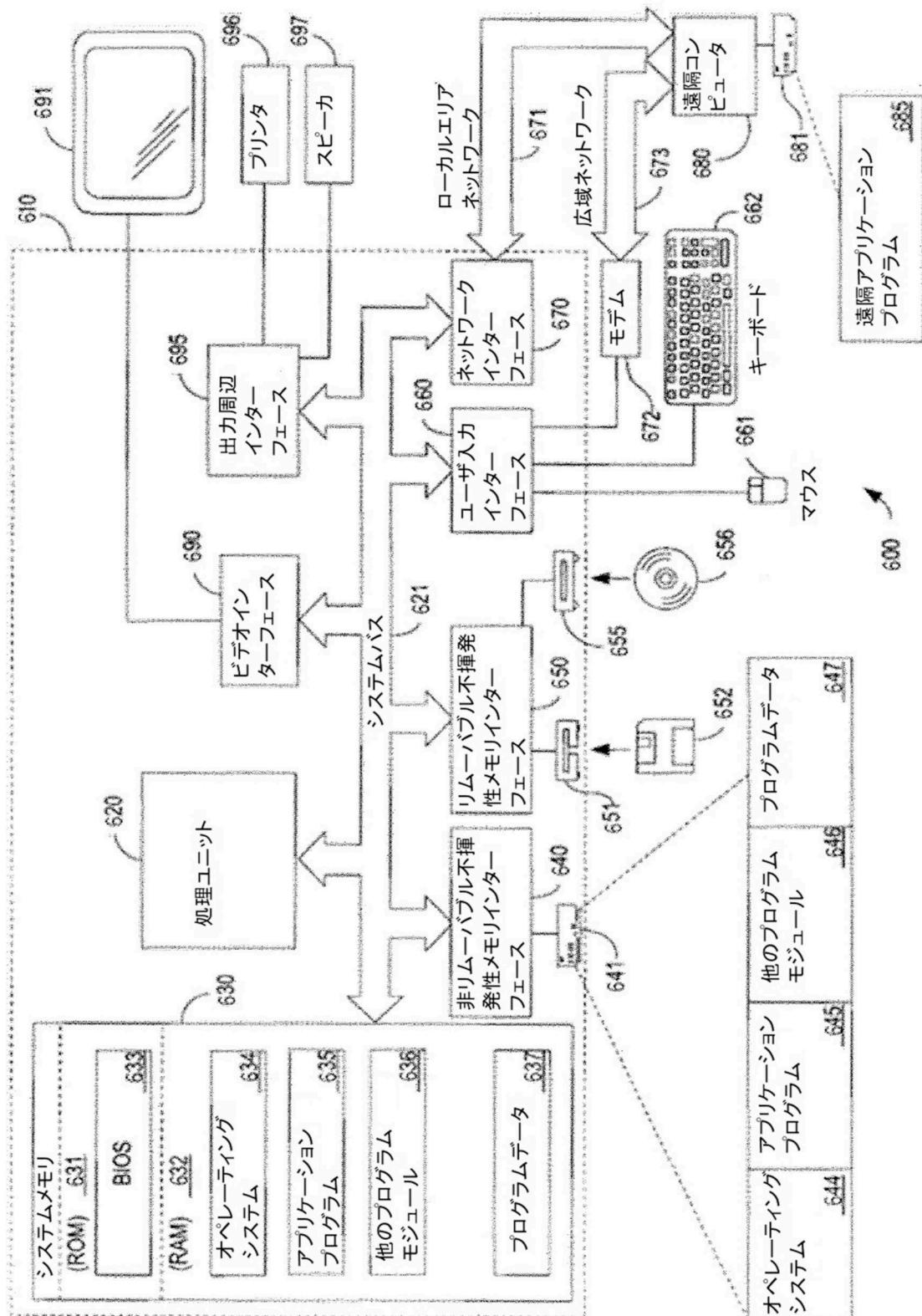


Fig. 10

10

20

30

40

50

【図 11】

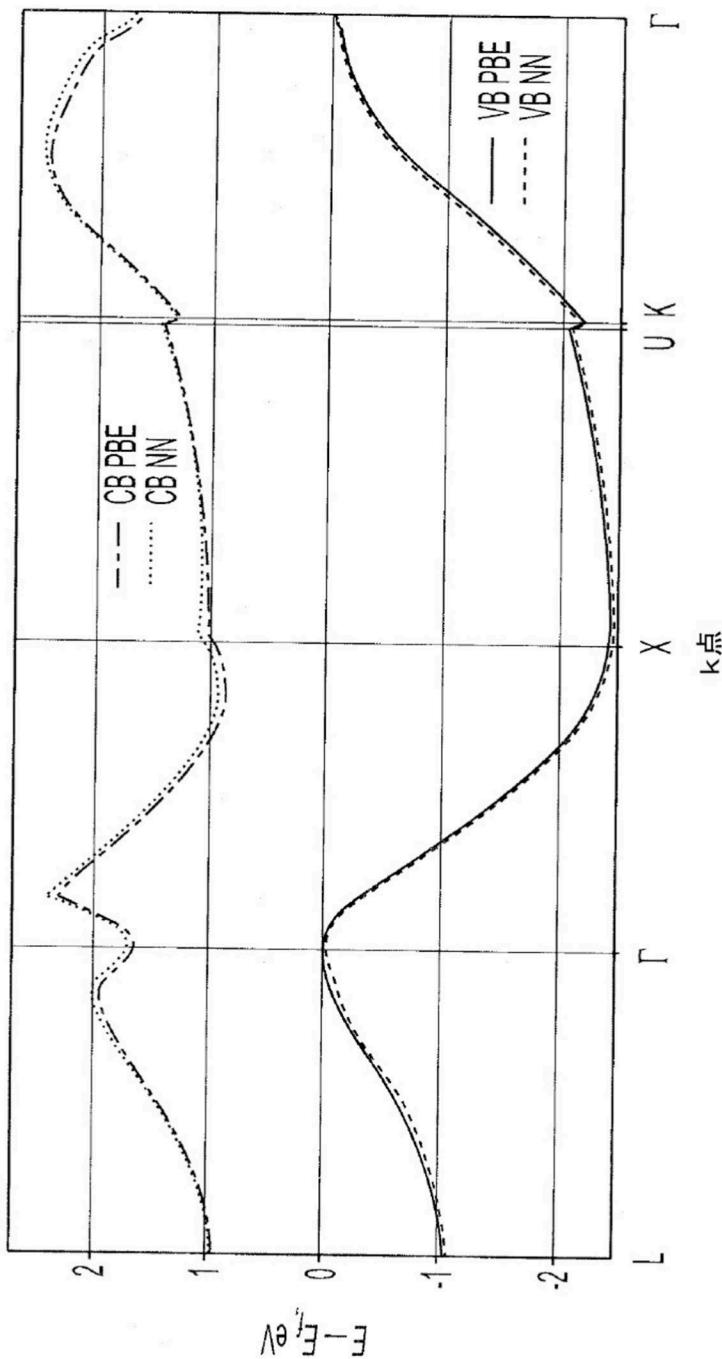


Fig. 11

10

20

30

40

50

【図12A】

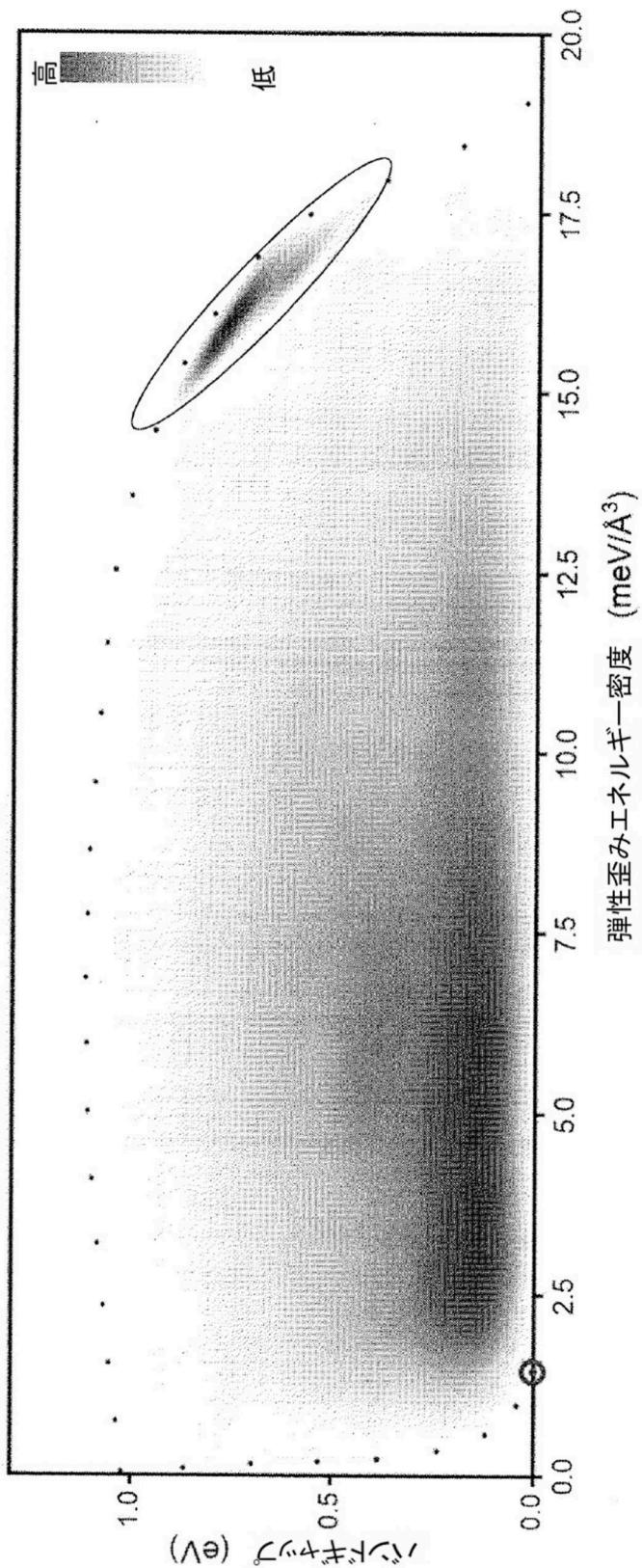


Fig. 12A

10

20

30

40

50

【図12B】

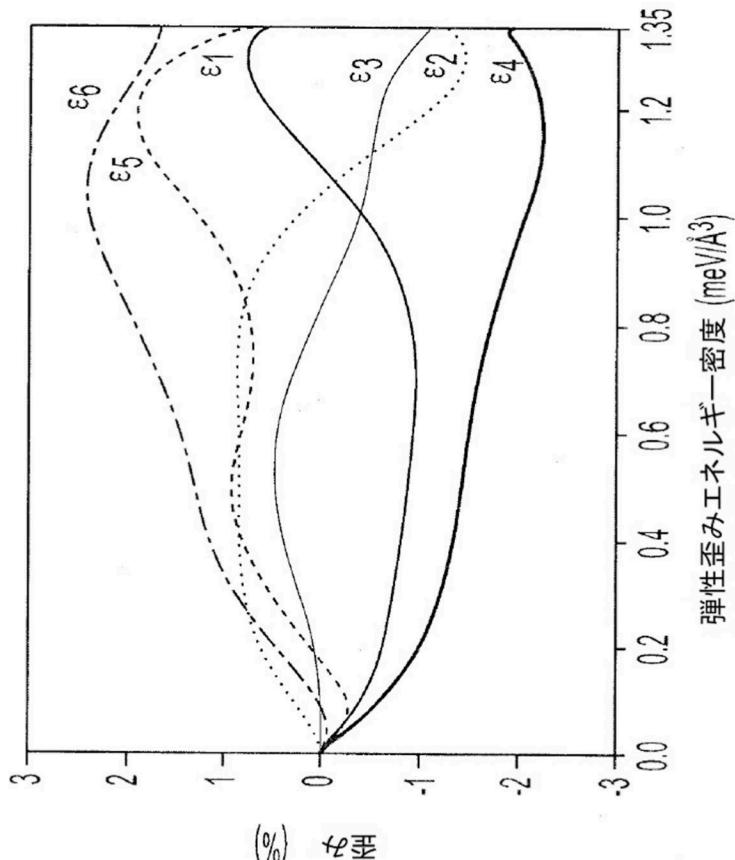


Fig. 12B

10

20

30

40

50

【図 1 2 C】

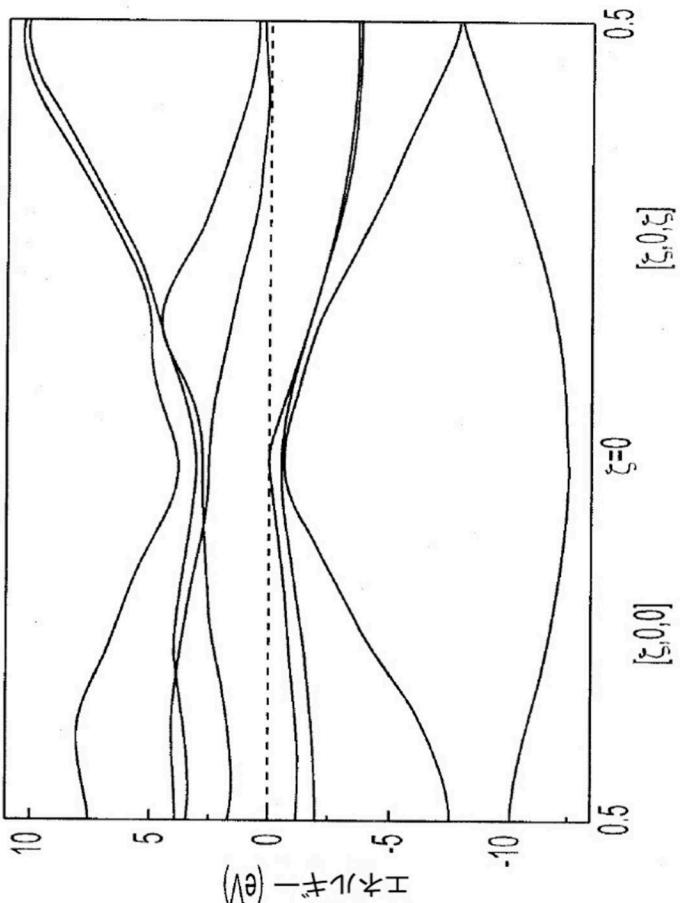


Fig. 12C

【図13】

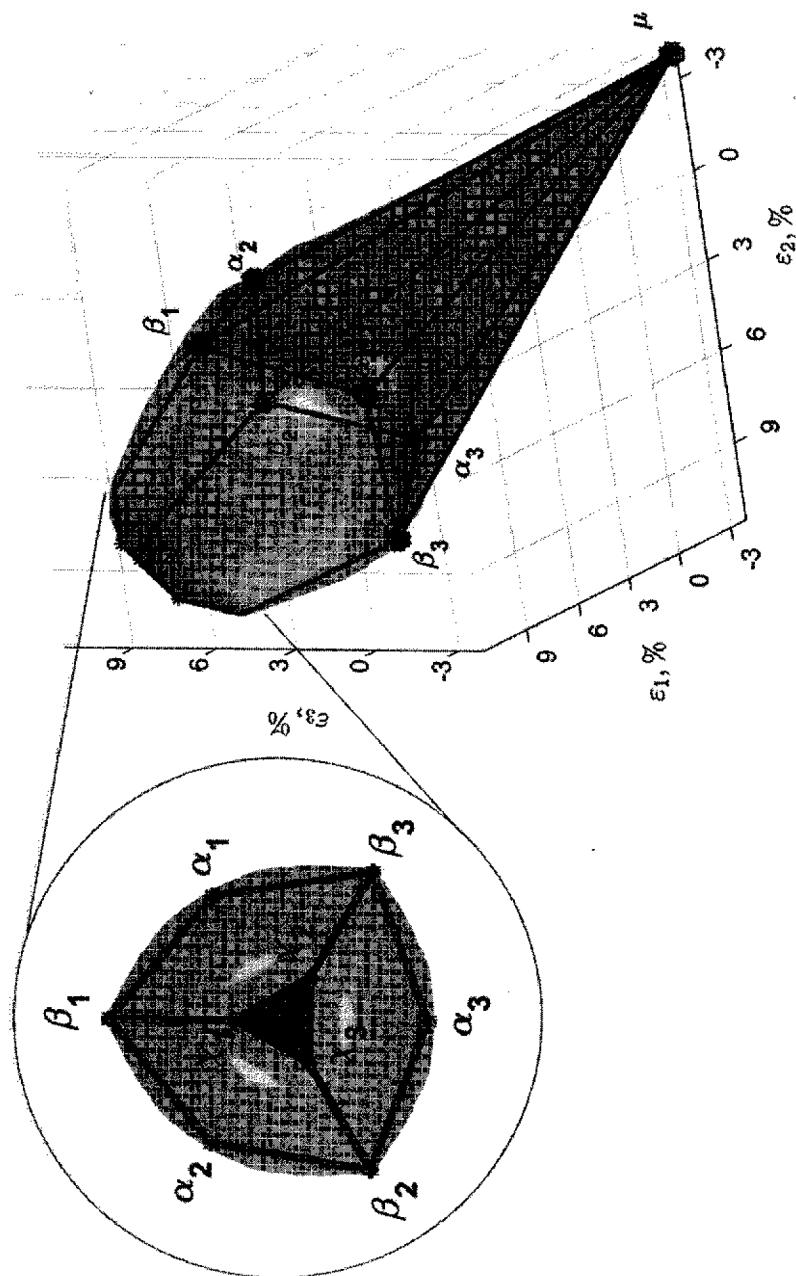


Fig. 13

10

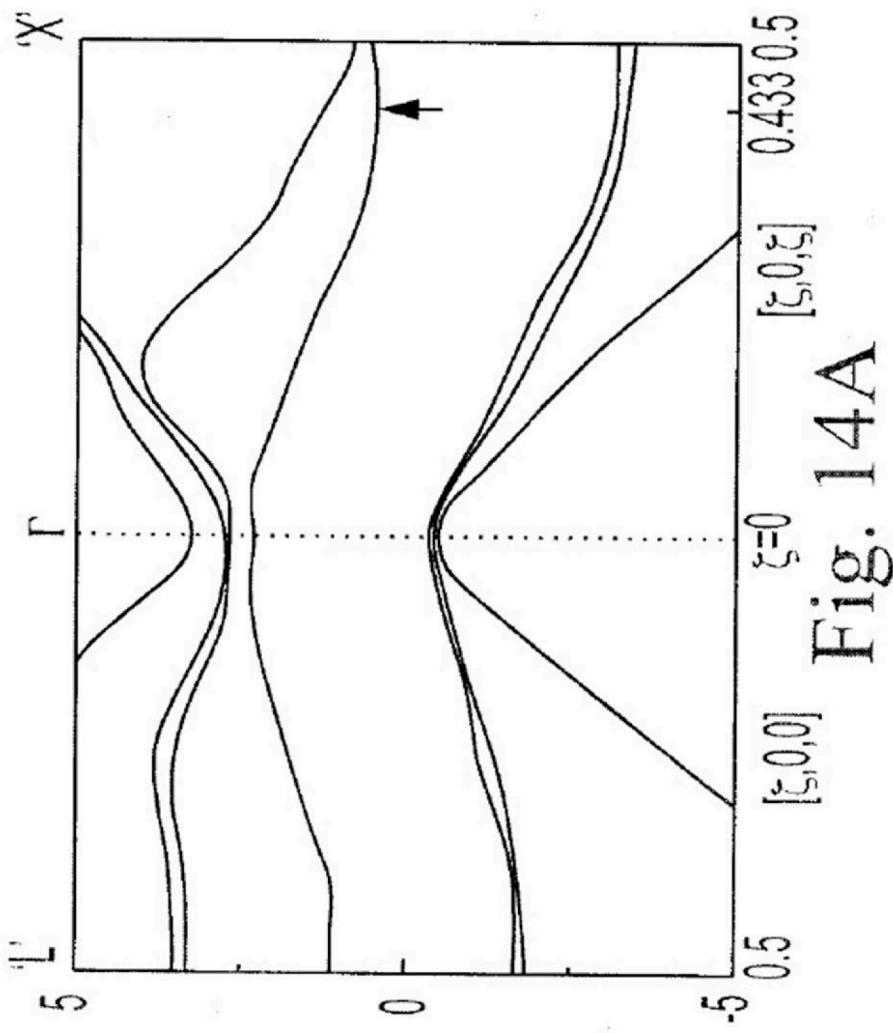
20

30

40

50

【図 1 4 A】



(10) \rightarrow 14A

10

20

30

40

50

【図14B】

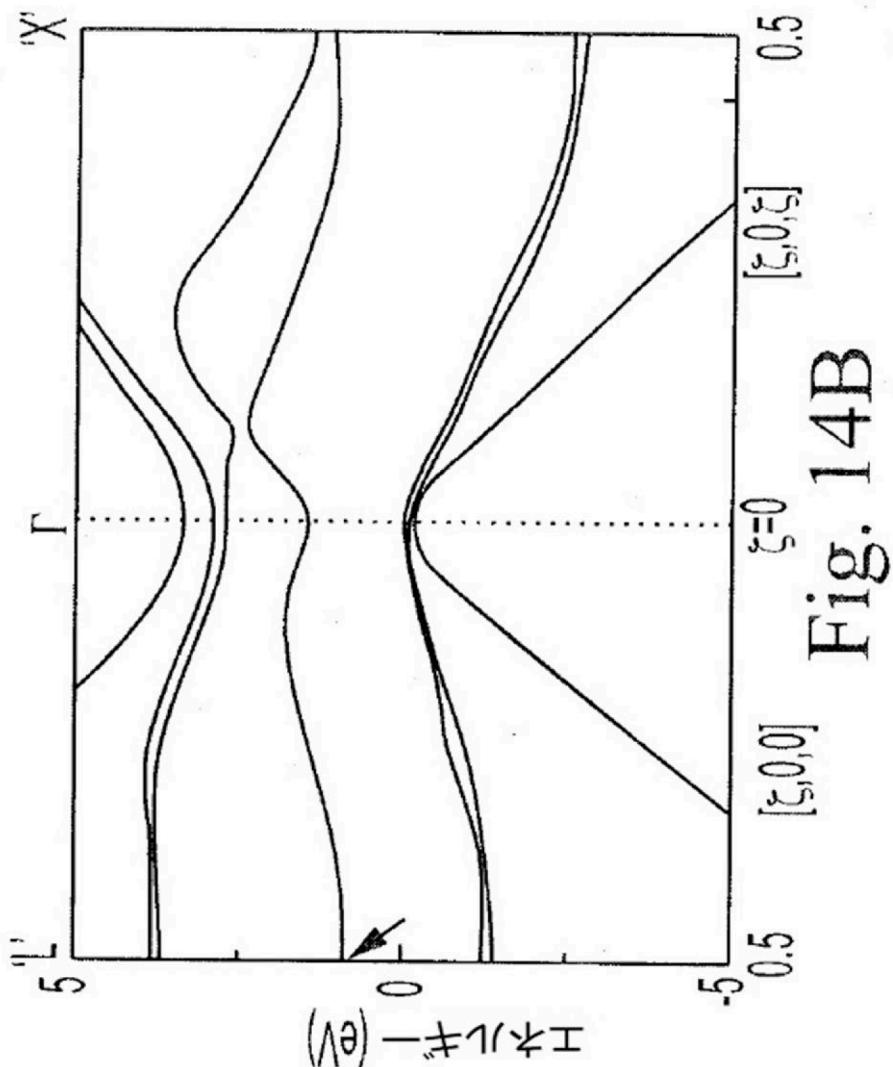


Fig. 14B

10

20

30

40

50

【図14C】

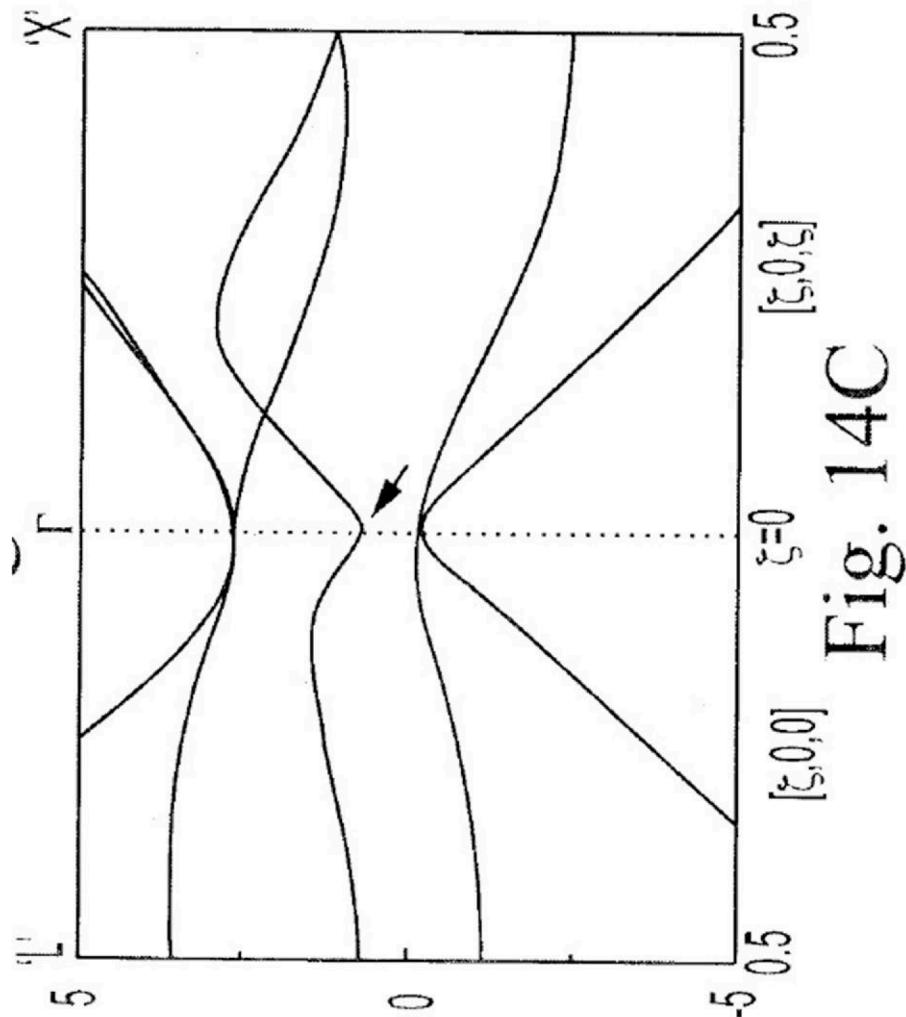


Fig. 14C

(18) \rightarrow 14C

10

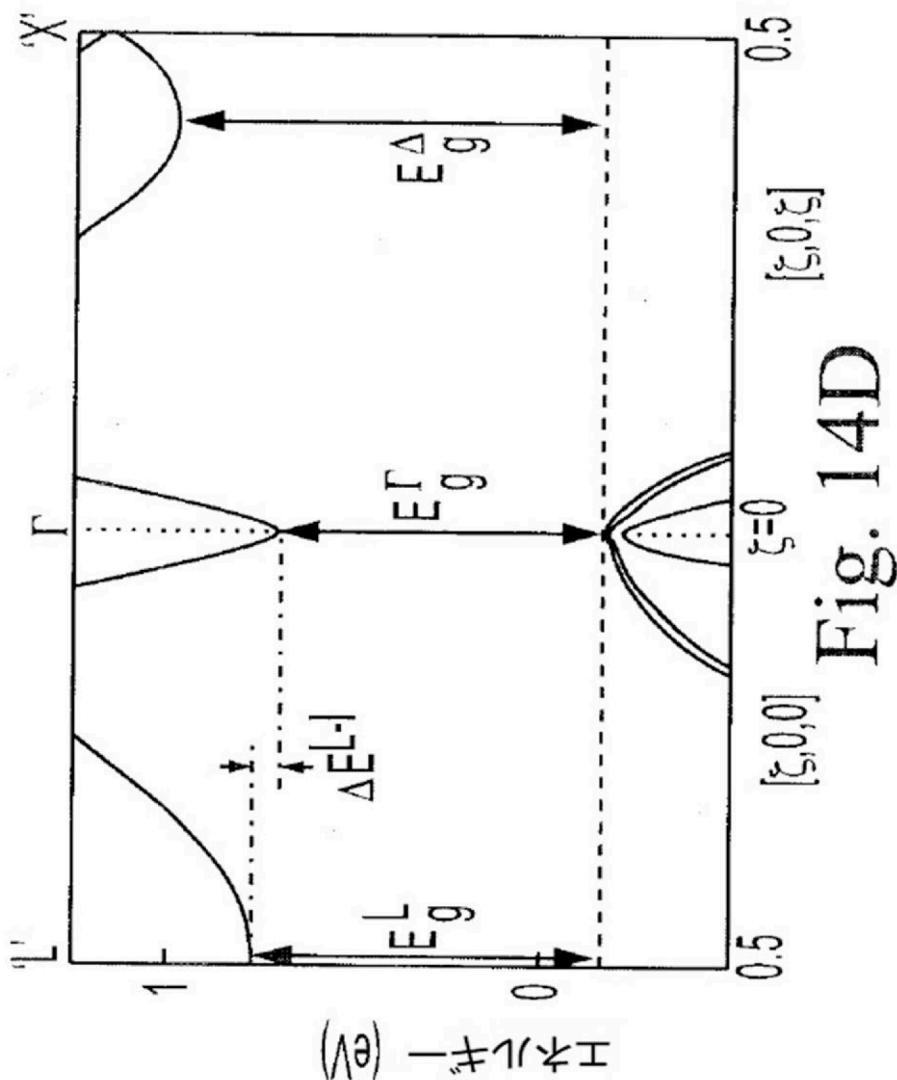
20

30

40

50

【図 14 D】



10

20

30

40

50

【図15】

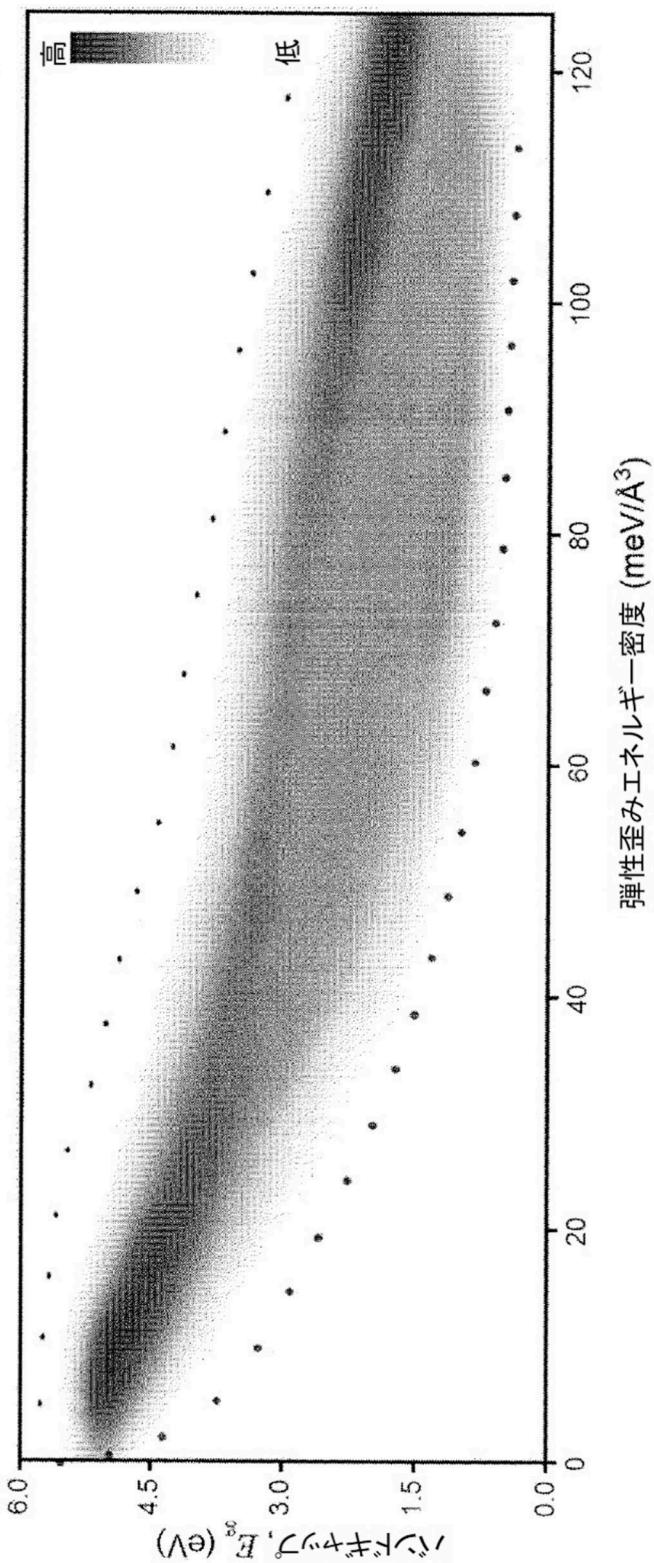


Fig. 15

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(73)特許権者 504161939

ナンヤン・テクノロジカル・ユニバーシティー
シンガポール国、シンガポール 639798、ナンヤン・アベニュー 50

(74)代理人 100078282

弁理士 山本 秀策

(74)代理人 100113413

弁理士 森下 夏樹

(72)発明者 ダオ, ミン

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02132, ウエスト ロックスベリー, ウッダード
ロード 27

(72)発明者 リー, ジュ

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02493, ウエ斯顿, ワイルドウッド レーン 1
1

(72)発明者 シ, ジエ

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02139, ケンブリッジ, フランクリン ストリート
129, アパートメント 419

(72)発明者 ツインパロフ, エフゲニー アレクセーザイチ

ロシア国 121108 モスクワ, ゲラシマ クリナ, 18, アパートメント 161

(72)発明者 シャペーフ, アレクサンドル ヴァシリエザイチ

ロシア国 143026 モスクワ, スヴォリキナ, 2ケ-1, アパートメント 19,
スコルコヴォ イノベーション センター

(72)発明者 サレシュ, スブラ

シンガポール国 639776 シンガポール, ナンヤン サークル 28

審査官 武田 広太郎

(56)参考文献 特開2008-142774 (JP, A)

国際公開第2003/071451 (WO, A1)

特開2013-190427 (JP, A)

菅野 翔平, マテリアルズインフォマティクスに基づくペロブスカイト太陽電池材料の大規模探索,
2018年 第79回 応用物理学会秋季学術講演会 [講演予稿集] Extended Abstracts
of The 79th JSAP Autumn Meeting, 2018 , 公益社団法人応用物理学会, 2018年09月05日

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G06N 20/00