arXiv:2303.03422v1 [physics.app-ph] 6 Mar 2023

QuickSim：高效且准确的硅悬挂键逻辑物理仿真

Jan Drewniok*、Marcel Walter*、Samuel Sze Hang Ng†、Konrad Walus†和 Robert Wille*‡

*慕尼黑工业大学设计自动化教席，德国 电子邮件：{jan.drewniok,marcel.walter, robert.wille}@tum.de

†不列颠哥伦比亚大学电气与计算机工程系，加拿大温哥华 电子邮件：{samueln, konradw}@ece.ubc.ca

‡哈根贝格软件能力中心有限公司，奥地利

摘要——硅悬挂键已成为后 CMOS 技术领域中一种前景广阔的竞争者。其集成密度以及在能量耗散方面相较于传统电路技术具有数个数量级优势的潜力，引起了学术界和工业界的共同关注。尽管制造能力正在迅速提升，且已有首批设计自动化方法问世，物理仿真的效率仍未能跟上发展步伐。该领域现有算法要么运行时间呈指数增长，要么准确度欠佳。本文提出一种基于统计方法的硅悬挂键系统物理仿新算法。详尽的实验评估表明，与最先进水平相比，该算法的求解时间优势超过一个数量级，准确度提升则超过三倍。

I. 引言与动机

近年来，学术界对硅悬挂键（SiDB）逻辑平台的科学兴趣日益浓厚——这是一种新兴的超越 CMOS 的计算纳米技术 [1]–[7]。其中尤为重要的是，其亚纳米级基本器件可使集成密度较当前 CMOS 制程节点提高几个数量级 [3], [4], [6]–[11]；此外，它还能够在不产生静电流的情况下，通过电荷之间的库仑斥力实现布尔逻辑运算 [4], [8]。因此，SiDB 逻辑有望实现超低能量耗散，并成为超越 CMOS 领域备受期待的绿色竞争者 [3], [8], [11]–[15]。此外，SiDB 逻辑还被提出作为量子计算机 [16],以及——由于 SiDB 同样制造于硅上——传统 CMOS 电路 [7]集成的候选方案。

受此启发，科学界已提出用于硅悬挂键逻辑的门与电路库 [17]–[23] ，以及设计自动化解决方案 [17], [19], [24] 。此外，这项技术在商业领域也日益受到关注，例如，近期成立的 *Quantum Silicon Inc.*便证实了这一点。该公司力争成为首批采用硅悬挂键的企业之一，并已为此获得数百万美元的投资 [25], [26]。

然而，随着这些进展，硅基脱氢位点制备能力迅速提升 [3]–[6] ，设计和仿真工具也面临着与之同步发展的压力。尤其是作为系统验证基础的物理仿真，颇具挑战性。要可靠地预测任意给定硅悬挂键系统的行为 n，必须求解一个高维优化问题，以捕捉所有物理相关效应。从本质上说，必须枚举电荷构型 3^n，检查其是否满足物理可行性，并仿真各自的能量，才能选出能量最低的构型——这是一个极具挑战性（事实上呈指数级复杂度）的问题。

迄今为止，文献中仅提出了两种解决这一问题的方法：*ExhaustiveGS* （ExGS） [18], [21], ，该方法对整个（指数级的）搜索空间进行穷举搜索；以及 *SimAnneal* [17], ，该方法采用概率抽样，因此提供了一种以完整性换取运行时间的启发式方法。因此，ExGS 的运行时间效率受到严重限制，而 SimAnneal 只能提供近似解，因此无法保证确定最优（即完全准确的）解。

本文提出了一种旨在兼顾效率和准确度的新型算法（*QuickSim*）。为此，我们借鉴了最大-最小多样性分布 [27]等统计方法中的思想，以实现有效的搜索空间剪枝。

全面的实验评估（涵盖常见逻辑运算、成熟门库的仿真，以及用于展示在未来布局上性能的随机实例）证实，该方法使求解时间缩短了一个数量级以上。同时，在随机生成的 SiDB 布局（已知这是最具挑战性的应用场景）上，其解的准确度超过 SimAnneal 的四倍；在成熟的门布局上则约为其三倍。

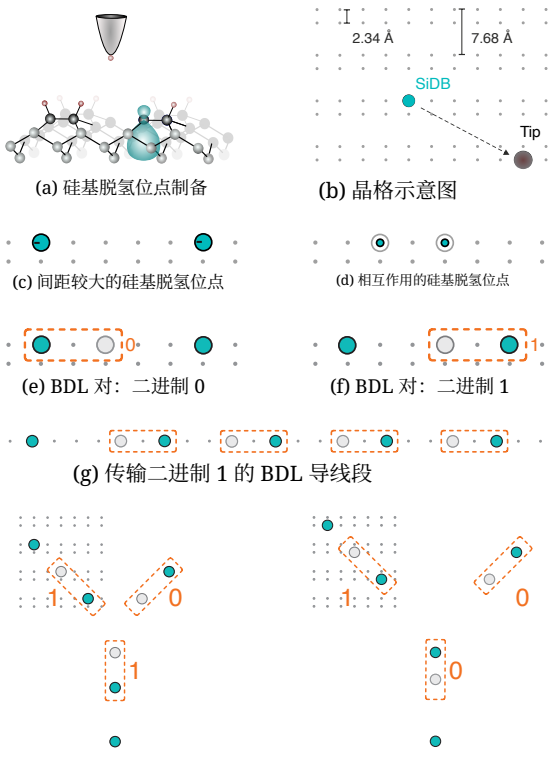
本文其余部分安排如下：为使本文成为一篇内容自洽的文章，第二节回顾 SiDB 系统的预备知识。第三节讨论现有的仿真方法。第四节详细介绍*QuickSim* 。第五节通过案例研究展示 *QuickSim* 相较于最先进水平的优势。最后，第六节总结全文。

II. 基础知识

本节首先概述硅悬挂键逻辑平台，随后详细阐述硅悬挂键的物理仿真。

A. 硅悬挂键逻辑平台

SiDB 制备于氢钝化硅（H-Si）表面。利用扫描隧道显微镜（STM）的原子级尖锐探针，可以施加电压，以原子级精度断开硅与氢之间的键 [4]–[6], [28]–[32]。随后，脱离的氢原子被解吸至探针上，并留下一个开放的、即悬挂的价键；这便形成了如图 1a 所示的 SiDB。图 1a 的俯视图如图 1b 所示，其中青绿色圆点表示 SiDB。图中还示意了制备 SiDB 布局的基本原理：生成第一个 SiDB 后，探针移动至新的硅二聚体处，解吸下一个氢原子，从而生成第二个 SiDB。以这种方式生成的每个 SiDB 都是化学性质相同的量子点，由于其sp^3轨道 [33], 最多可以束缚两个电子。因此，每个 SiDB 都处于负电、中性或正电三种状态之一。



(a) 硅基脱氢位点制备 (b) 晶格示意图

(c) 间距较大的硅基脱氢位点 (d) 相互作用的硅基脱氢位点

(e) BDL 对：二进制 0 (f) BDL 对：二进制 1

(g) 传输二进制 1 的 BDL 导线段

(h) 或门 (10) (i) 与门 (10)

图 1：基本 SiDB 逻辑组件

此外，SiDB 的电荷跃迁能级位于带隙内：直观地说，这意味着除非受到其他电荷的存在干扰，否则其状态是稳定的 [10], [34]。在具有近表面耗尽区的 n 型掺杂系统中，SiDB 能够保持其量子点特性，但由于费米能升高，往往带负电。人们正是利用这一特性，使 SiDB 能够用于构建逻辑元件，例如门 [8]。事实上，可以将 SiDB 成对创建为亚稳态构型，使一个 SiDB 的状态通过能带弯曲取决于并影响另一个 SiDB 的状态；这一概念被称为二进制点逻辑（BDL） [8]。

图 1b 至图 1i 展示了硅悬挂键的俯视图，它们以青绿色光晕表示，位于 H-Si 表面上；氢原子则以灰色圆点表示。在图 1c 中，两个硅悬挂键之间的间距为 ≈ 2nm，因此相互作用有限，且均处于负电荷态。相比之下，如图 1d 所示，若两个硅悬挂键之间仅隔着一个二聚体，它们便会强烈相互作用；由于对称性，若未受到外部激发，二者会以叠加态共享一个电子。然而，存在外部电荷时，为使系统的总静电势能最小化，电子会处于与该电荷距离最远的位置。图 1e 和 1f 展示了这一概念：分别在右侧和左侧放置另一个硅悬挂键，作为扰动体，对另外两个硅悬挂键施加库仑压力。由此形成一个具有离散电荷态的 BDL 对，实现二进制状态 0 和 1，如橙色矩形 [8], [17] 所示。

同样地，也可以实现导线和门。例如，如图 1g 所示的一系列 BDL 对可作为二进制导线，仅通过电场的排斥作用传输信息 [8]。利用同一概念还可以实现，例如，图 1h 所示的或门（此处以二进制输入 10 为例；排斥作用使输出为 1）。由八个 SiDB 组成的硅悬挂键导线以及或门（总尺寸小于 30nm^2）均已由 Huff等人在实验室中实现 [8]。此外，还可以利用这一概念实现其他门，例如图 1i 所示的与门。

B. 物理仿真

为了探索这项新兴技术并验证新型电路的设计，SiDB 布局的物理仿真具有极大的意义。要预测多个 SiDB 任意排列（即一种布局）所呈现的状态，必须进行静电势仿真。众所周知，在自由空间或介电材料中，两个实体之间的静电势能会随 $1/d$ 衰减（其中 d 表示距离）。

然而，对于 SiDB，还需在此基础上考虑一个额外的指数项。这是因为电荷会屏蔽静电场。更准确地说，位于位置 i 、状态为 $n_j \in \{-1, 0, 1\}$ 的 SiDB 在位置 j 产生的静电势 $V_{i,j}$由下式给出 [8], [29]

$$V_{i,j} = -\frac{q_e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \cdot \frac{e^{-\frac{d_{i,j}}{\lambda_{tf}}}}{d_{i,j}} \cdot n_j, \tag{1}$$

其中， λ_{tf} 表示托马斯-费米屏蔽长度， ϵ_r 表示介电常数，二者经实验测得分别为 5 nm 和 5.6 [8]。此外， ϵ_0、 q_e 和$d_{i,j}$ 分别表示真空介电常数、电子电荷（$q_e = -e$； e：元电荷）以及位置 i 和 j之间的欧几里得距离 。由式（1）可知，所有 SiDB 状态都会相互影响，从而形成一个相互交织的系统。随后，利用静电势的叠加原理计算布局的总静电势能 E ，即 [35],

$$E = -\sum_{i<j} V_{i,j} \cdot n_i \cdot q_e. \tag{2}$$

SiDB 布局的预期状态由能量最低的亚稳态电荷构型决定。因此，要确定该状态，必须对式 (2) 进行最小化，从而得到一个高维优化问题。

此外，为了确保仿真结果有效，还必须满足 亚稳性 这一物理约束。亚稳性可由两个标准共同描述，即布居稳定性 和构型稳定性。两者都必须满足，才能确保仿真结果有效。

a) 布居稳定性： 每个 SiDB 的电荷态必须与相对于费米能的能量电荷跃迁能级 μ_- 和 μ_+ 保持一致。位置 i 处 SiDB 的电荷跃迁能级能量取决于该位置的局部静电势 $V_{local,i}$，其定义为

$$V_{local,i} = \sum_{j,j\neq i} V_{i,j}. \tag{3}$$

直观而言，这意味着当相邻 SiDB 带负电时，某个 SiDB 最好保持电中性，反之亦然。该关系可通过以下条件正式表示：当 $\mu_- + V_{local,i} \cdot q_e < 0$时为 SiDB-，当 $\mu_+ + V_{local,i} \cdot q_e > 0$时为 SiDB+，其他情况下为 SiDB0。

b) 构型稳定性： 如果任意硅悬挂键之间不存在可行的单电子跃迁事件，能够使系统的总静电势能降低，则该电荷态满足构型稳定性。换句话说，如果不满足这一约束，系统将存在一个静电势能更低的状态，并会自发趋向于该状态。

满足时，将存在一个静电势能更低的状态，系统会自发收敛到该状态。

总的来说，静电势系统能量最低且在物理上有效（即满足亚稳性）的电荷构型，称为系统的基态。它代表给定硅悬挂键系统在低温下的电荷构型，因而也代表该系统的物理行为。因此，任何物理仿真技术的目标，都是确定给定硅悬挂键布局的上述基态。

III. 动机

本节首先回顾文献中的 SiDB 仿真方法。随后讨论在平衡这些算法的运行时间与准确度时遇到的障碍，并由此阐明本研究的动机。

A. 先前提出的仿真方法

如上所述，SiDB 逻辑的物理仿真是一个高维优化问题，由于其具有指数复杂度，在计算上难以处理。仿真是任何基于 SiDB 逻辑的设计自动化流程的核心能力，因此控制这一复杂度至关重要。然而，目前用于 SiDB 物理仿真的自动化方案寥寥无几；这些方案要么运行时间长、可扩展性差（由于搜索空间呈指数增长），要么准确度较低（由于采用了激进的近似方法）。目前最先进水平由两种方法代表：*ExhaustiveGS* (ExGS) [18], [21] 和*SimAnneal* [17]。

1) ExGS：由于每个硅悬挂键都可能带负电、中性或带正电，因此由 n 个硅悬挂键组成的布局可能呈现 3^n 种不同的电荷构型。ExGS 会枚举所有这些构型，判断其在物理上是否有效；若有效，则通过公式（2）计算该布局的静电势能。最终，这使得我们能够获得能量最低的电荷构型。

由于 ExGS 穷举了整个搜索空间，因此可以保证始终确定系统的基态。然而，这需要遍历整个指数级搜索空间，因此即使在最好的情况下，也需要指数级的运行时间。因此，ExGS 实际上仅适用于较小的布局。

2) SimAnneal：与 ExGS 不同，SimAnneal 是一种启发式算法，可生成近似结果。顾名思义，它采用模拟退火 [36]，策略，这是一种概率技术，用于近似给定目标函数的全局最优解；在此处，该目标函数为紧密排列的硅悬挂键的静电势能。更具体地说，该算法由两个部分组成，即表面跳跃 和种群控制。

在表面跳跃阶段，固定数量的电子和空穴可以跳跃到中性的硅悬挂键上。为此，每次跳跃都要经过类阿伦尼乌斯接受函数的判断，其中 ΔE 表示该跳跃导致的式（2）中的变化。在退火过程开始时，人工热能 $k_B T$ 处于较高值，并随退火周期的增加而降低。因此，随着时间推移，能量较高的电荷构型变得越来越不可能出现。最终，系统会锁定在某个电荷构型中。

然而，由于系统中的电子总数并非固定，而是需要由所述算法确定，因此仅靠表面跳跃不足以确定基态。因此，还需要布居控制阶段。在此过程中，电子在 SiDB 与一个假想的电子库之间移动，即硅体材料。电子从电子库移动至 SiDB，或反向移动的概率由费米-狄拉克统计 [37]描述。在退火计划结束时，将根据布居和构型稳定性评估所有模拟结果，并返回其中能量最低的结果。

SimAnneal 是一种强大的算法，能够正确确定许多布局中 SiDB 的电荷分布。此外，由于 SimAnneal 是一种受物理启发的算法，因此能够自然地捕捉 SiDB 的电荷构型。但其缺点是，这是一种概率启发式算法，需要经过许多模拟步数才能得到基态。尤其是当许多电荷构型对应的静电势所产生的系统能量都接近基态时，所需运行时间会很长。因此，SimAnneal 最大的缺陷是不会剪枝其搜索空间。尽管在运行期间，潜在状态的数量会随着人工热能的变化而减少，但陷入局部极小值的概率与输入规模直接相关。因此，必须采用较高的初始温度，这会对运行时间产生负面影响。

B. 由此产生的问题：效率与准确度之间的权衡

如上文所述，SiDB 布局物理仿真算法的目标是确定系统的基态。像 SimAnneal 这样的概率启发式算法，通常会针对同一输入运行多次，希望至少有一次能够确定基态。要评估它们在这方面的性能，可以将所需运行时间作为衡量指标。然而，在概率算法中，单次运行时间 t_s 与 结果准确度 $p_s(t_s)$密切相关，也就是说，增加 SimAnneal 等算法的单次运行次数，会提高确定某个布局基态的可能性，反之亦然。因此，仅凭单次运行时间并不能构成有意义的指标，因为还应考虑准确度。求解时间 （TTS）指标体现了这种权衡，它给出了获得具有特定置信水平 η [38]的解所需的总计 运行时间。更确切地说，TTS 定义为

$$TTS(t_s) = t_s \cdot R(t_s), \text{with} \tag{4}$$

$$R(t_s) = \begin{cases} \frac{\ln(1-\eta)}{\ln(1-p_s(t_s))} & p_s(t_s) \in (0, \eta) \\ 1 & p_s(t_s) \in [\eta, 1] \end{cases}. \tag{5}$$

ExGS 是这种权衡的极端情况：单次运行时间最长（因为会遍历整个 搜索空间），但所得准确度为 100%（因为考虑了所有可能性）。因此，与 SimAnneal 相比，ExGS 的 TTS 较大。相反，SimAnneal 的准确度低于 ExGS，但其单次运行时间则短了几个数量级。由于单次运行时间会影响准确度，运行时间较短会导致准确度较低，反之亦然。因此，为实现高效仿真，需要在这两个属性之间取得理想的权衡。总的来说，现有解法——ExGS 和 SimAnneal——都无法在效率与准确度之间实现令人满意的权衡。本文致力于弥补这一不足。

IV. 提出的算法 -*QuickSim*

本节提出一种用于物理仿真 SiDB 布局的新算法。我们首先从更抽象的层面概述其总体思路，随后进一步详细介绍并给出实现该思路的算法。

A. 总体思路

所提出的*QuickSim* 硅悬挂键物理仿真算法旨在显著改善单次

运行时间与结果准确度之间的权衡。为此，我们借鉴最大-最小多样性分布 [27]等统计方法中的理念，通过有效的搜索空间剪枝来实现这一目标。这带来了一种全新的模拟算法，其工作原理与最先进水平的算法有着根本性的不同。

更准确地说，以往提出的方法会在一次仿真过程中多次改变给定系统的电子数：对于 ExGS，会考虑所有可能的电荷构型；而对于 SimAnneal，则实际上是随机猜测构型。与此不同，我们提出根据物理原理提供的洞见，有目的地迭代分布电子。鉴于电子总是倾向于占据彼此距离最远的 SiDB（以尽可能降低静电势能），我们可以推断，给定数量的电子必须在 SiDB 上均匀间隔分布。换言之，当电子分布的多样性最大化时，系统的静电势能达到最小。

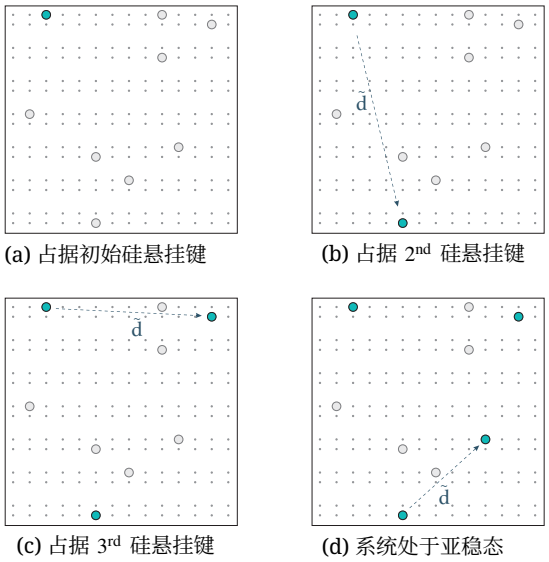
我们可以通过迭代地将电子填入已放置的 SiDB 来构造这种最大-最小多样性分布：从中性状态开始，每次引入的电荷都与其他电荷保持最大距离。以每个 SiDB 为起点各执行一次这种迭代，并在过程中计算系统的静电势能和亚稳性，即可得到一种比 SimAnneal 概率性更低、对超参数不那么敏感的算法。此外，要达到相同的准确度，该算法所需的模拟步数更少，从而显著缩短其 TTS。

例如，为了模拟图2a所示的布局（由九个 SiDB 组成），最坏情况下必须考虑总计 $3^9 = 19\,683$ 种电荷构型（如 ExGS 所做的那样）。SimAnneal 可以减少这一数量，但由于该方法本身具有概率性，仍需考虑数百种电荷构型。对于每种电荷构型，都必须分别确定系统的静电势能并检查其亚稳性条件，这会带来巨大的计算成本。相比之下，只关注包含距离最远的 SiDB 的电荷构型——正如本文提出的方法以及图2a至图2d所示——即可将这一

数量减少至仅 $9 \cdot 4 = 36$ 种电荷构型。也就是说，无需考虑数百种电荷构型，只需考虑其中的一小部分，同时几乎不会剪枝任何最优解——这显然是在效率与准确度之间实现了良好的权衡。

B. 实现细节

QuickSim 的具体细节通过算法 1 和算法2的伪代码加以说明，并再次在图 2 中展示。算法从空的电子分布 D 开始，即给定布局 L 中的所有硅悬挂键均设为不带电状态（算法 1，第 2 行）。以布局中的每个硅悬挂键为起点（算法 1，第 4 行），逐步分配电子，同时使多样性最大化。为此，给初始硅悬挂键 db 分配一个电子，即将其翻转为带负电状态（算法 1，第 5 行）。随后，迭代调用算法2（算法 1，第 7 行），以确定与所有带负电的硅悬挂键距离最大的其他硅悬挂键（算法2，第 1–2 行）。这些硅悬挂键会在由数值 α 确定的阈值范围内列出（算法2，第 3 行）。尽管 α 表示为介于 0 和 1 之间的变量因子，但研究发现，取值为 $\alpha = 0.7$时算法表现最佳。从可能的候选项中随机选择一个硅悬挂键（算法2，第 4 行），并为其分配一个电子（算法2，第 5 行）。利用布局 L 中由此产生的新电子分布 D，在物理参数 P下计算其静电势能 E，即 μ_-、 μ_+、 λ_{tf}和 ϵ_r（算法 1，第 8 行）。如果 D在物理上有效



(a) 占据初始硅悬挂键　(b) 占据 2nd 硅悬挂键

(c) 占据 3rd 硅悬挂键　(d) 系统处于亚稳态

图 2：一般思路示意图（$\mu_- = -0.15$eV）

算法 1： 物理仿真

输入： 由 n 个悬挂键组成的硅悬挂键布局 L
输入： 物理参数 $P = \{\mu_-, \mu_+, \lambda_{tf}, \epsilon_r\}$
输入： 循环次数 c
输出： 电子分布 D 和系统能量 E

1 $E^* \leftarrow \infty$
2 $D^* \leftarrow [D_0 = 0, \ldots, D_n = 0]$
3 **对于** $cycle \leftarrow 1$ **到** c **执行**
4 　**对每个** $db \in L$ **执行**
5 　　$D \leftarrow [db = -1]$
6 　　**对于** $i \leftarrow 1$ **到** $n-1$ **执行**
7 　　　$D \leftarrow$ 邻接搜索(L, D)
8 　　　给定 D 和 P 时 L 的能量　// 式 (2)
9 　　　**如果** 给定 P **且** D 和 $E < E^*$ 物理有效**则**
10 　　　　$D^* \leftarrow D$
11 　　　　$E^* \leftarrow E$
12 　　　　**中断**
13 　　　**结束如果**
14 　　**结束循环**
15 　**结束遍历**
16 **结束循环**
17 **返回** (D^*, E^*)

算法 2： 邻接搜索

输入： 由 n 个悬挂键组成的硅悬挂键布局 L
输入： 部分电子分布 D
输出： 扩展电子分布 D'

1 $d^* \leftarrow \{$最小值$_{p \in D}\ dist(u,\ p)\ \mid u \in L \setminus D\}$
2 　$\tilde{d} \leftarrow$ 最大值$_{d \in d^*}\ d$
3 $S \leftarrow \{u \mid u \in L \setminus D, d_u^* \geq \tilde{d} \cdot \alpha\}$
4 随机选择一个 $db' \in S$
5 **返回** $D \cup [db' = -1]$

在 P（参见第二节-B）条件下，且如果 E 小于迄今找到的最佳能量值（算法 1，第 9 行），则构成一个更优候选

对于整体仿真结果，因此， D 和 E 均保留为当前最佳值（算法 1，第 10–11 行）。

整个过程重复 c 次（算法 1，第 3 行），并返回找到的最佳结果（算法 1，第 17 行）。

V. 实验评估

为了展示*QuickSim*的适用性和性能，并将其与最先进水平进行比较，我们实现了*QuickSim* 并进行了全面的实验评估。本节总结并分析我们的研究结果。为此，我们首先介绍实验设置。随后，我们给出针对三种不同类别的硅悬挂键布局进行实验仿真所获得的结果，分别是：1）随机生成的布局，2）机器学习（ML）生成的布局，以及 3）文献中已有的布局。最后，我们讨论所得结果。

A. 实验设置

为了恰当地评估效率与准确度之间的权衡，并展示 *QuickSim* 如何解决这一问题，我们进行了求解时间 （TTS，定义见第三节-B）评估。为此，我们考虑了两种最先进的物理模拟算法（第三节-A 中介绍的 ExGS 和 SimAnneal），以及*QuickSim*。作为基准测试，我们考虑了多种硅悬挂键布局类别，具体内容将在下一节介绍。为了确定第三节-B 中引入的 $p_s(t_s)$，我们进行了 10000 次仿真，并收集成功次数（即正确仿真结果的次数）。因此，$p_s(t_s) = \#^{success}/_{10\,000}$。在整个评估中，置信水平设为 $\eta = 99.7\,\%$。

对比时，采用了*SiQAD* [17] 提供的 SimAnneal 实现，而 ExGS 和*QuickSim* 则为自定义实现。所有代码均基于***fiction*** 工具集实现，并使用 AppleClang 14.0.0 编译。所有结果均已公开发布在 GitHub 上。所有实验均在搭载 Apple Silicon M1 Pro SoC、配有 32 GB 集成主存的 macOS 12.6 机器上进行。

由于 SimAnneal 提供了一系列可针对具体问题实例调节的超参数，我们采用两种配置考察 SimAnneal 的 TTS 数据：默认，即开箱即用的设置；以及优化，即为提升其在所考虑的基准测试集上的 TTS 而手动调节的设置。因此，可以将*QuickSim* 的 性能与一种仿真性能甚至优于 [17] 所提供性能的设置进行比较。结果表明，退火周期数的变化与 TTS 密切相关。相比之下，其他超参数对 TTS 没有显著影响。因此，通过调节退火周期数来优化 TTS。对于这些基准测试布局，我们进行了手动调节，以获得最小的 TTS 值。可以得出结论，将退火周期数从 10 000（默认）降低一个数量级至 1 000（优化），即可得到优化后的 TTS 值，从而提供一个高度优化的基线，用于在本研究中与*QuickSim* 进行比较。对于 ExGS 和*QuickSim*，我们均采用默认参数；对 ExGS 而言，这意味着使用双态模拟[1]；对*QuickSim* $\alpha = 0.7$ 和 $c = 80$。

B. 考察的布局与获得的结果

在第一组评估中，我们考察了随机生成的门布局。尽管仿真现成门库具有更大的实际价值（因此也会在下文中加以考察），但这有助于展示相应仿真的性能，以及其对未来可能出现的、体现出广泛适用性的门库的潜在价值。为此，我们考察了近期在 [19] 中提出的 2 入 1 出和 2 入 2 出模板；这些模板被认为是适合制造的有前景的硅悬挂键候选方案。我们的基准测试集针对每种模板包含 114 个随机实现，每个布局包含 20 至 25 个 SiDB。[2]

表 I：随机生成布局的物理仿真

基准测试			物理仿真							
			EXGS [21]	SIMANNEAL [17]				*QuickSim*		
				默认		优化		默认		
Name	#SiDB	#实例	TTS	acc.	TTS	acc.	TTS	acc.	TTS	
2-1	20 − 23	114	172.31	40.6	29.59	25.8	11.43	82.6	1.18	
2-2	21 − 25	114	452.09	16.1	363.52	11.9	28.72	79.7	1.73	
Mean				28.4		18.9		**81.2**		
总计			624.40		393.11		40.15		**2.91**	

在第二组评估中，我们考察了采用 [24] 中提出的机器学习方法生成的硅悬挂键布局。与随机生成的实例不同，这些布局实现了与门、或门、与非门、或非门等常见逻辑运算。因此，这些实例为将物理仿真应用于新门库的评估提供了一个具有代表性的用例。该基准测试集共包含 148 个新颖的硅悬挂键布局。与上文一样，我们使用三种方法对它们进行仿真，并比较其 TTS。为此，每个门最多在五种配置下进行仿真：使用输入扰动器指定一种可能的 2^n 输入组合，以及完全不使用输入扰动器。不过，一些机器学习生成的门对物理参数的变化非常敏感，有时无法在所有输入组合（00、01、10、11）下正常工作。因此，我们还进行了一组进一步的评估。

在第三组评估中，我们对 [19] 中的全部 12 个门布局进行了仿真。它们构成了硅悬挂键领域中一套已建立的门库。仿真过程与评估机器学习生成的布局时完全相同。

所有获得的结果分别汇总于表 I、表 II 和表 III，分别对应随机生成的布局、机器学习生成的布局以及已有布局。在每张表中，前三列分别给出基准测试的名称、其硅悬挂键范围以及仿真布局的数量（实例数量）。随后列出所有所考虑的仿真方法（及其配置）的准确度和累计TTS值（单位：秒）。由于 ExGS 是一种精确算法，因此始终会返回基态，为避免冗余，表中未列出其准确度。此外，为了对 *QuickSim* 进行充分评估，除前文讨论的默认设置下 SimAnneal 的 TTS 外，还汇总了优化设置下的 TTS，从而建立一个高度优化的基线，以便我们据此比较*QuickSim*。表格的最后两行分别汇总了准确度的均值以及各项累计TTS之和。

C. 讨论

所有获得的结果都印证了第二节 III-B 中的讨论：ExGS 在单次运行中即可获得基态仿真结果，但同时也需要最长的运行时间。SimAnneal 的速度更快，但即使经过繁琐的调优，以最小化 SimAnneal 的TTS，仍然需要进行大量迭代

[1]无需进行三态仿真，因为基准测试集中没有布局的点间距为 < 7 nm，因此不会出现正电荷态。

[2]如上所述，为避免简并态和过饱和的势能景观，禁止将硅悬挂键间距设置为小于 7 nm。

表 II：机器学习生成的布局的物理仿真

基准测试			物理仿真							
			EXGS [21]	SIMANNEAL [17]				*QuickSim*		
Name	#SiDB	#实例	TTS	默认		优化		默认		
				acc.	TTS	acc.	TTS	acc.	TTS	
OR	19 − 23	68	2680.08	59.8	12.52	38.9	10.23	86.0	0.54	
AND	25	25	2086.82	18.1	27.59	15.0	21.47	66.4	1.60	
NOR	20 − 23	20	1312.83	26.0	10.55	15.4	2.72	99.6	0.05	
NAND	20 − 23	16	1300.58	45.7	7.79	37.3	22.12	94.9	0.07	
CX	29	4	577.00	21.5	21.45	13.2	12.52	29.0	0.56	
HA	31	4	433.91	17.8	20.03	15.1	3.98	17.5	4.45	
FO2	27	2	65.42	21.4	0.78	22.8	0.12	23.3	0.38	
XOR	21 − 23	5	4.49	30.0	2.09	32.4	0.28	95.0	0.02	
XNOR	25	4	2.97	20.4	6.54	25.0	8.94	72.8	0.16	
Mean				29.0		23.9		**65.0**		
总计			8464.07		109.34		82.38		**7.83**	

表 III：已建立门布局的物理仿真

基准测试 [19]			物理仿真						
			ExGS [21]	SimAnneal [17]				*QuickSim*	
Name	#SiDB	#实例	TTS	默认 优化				默认	
				准确率	TTS	准确率	TTS	准确率	TTS
双线	28 − 30	5	1149.21	2.3	35.80	1.9	4.87	65.2	0.30
CX	27 − 29	5	618.88	17.5	21.00	14.5	13.07	64.0	0.25
HA	24 − 26	5	54.82	2.8	4.27	2.2	0.38	96.3	0.04
AND	21 − 25	5	24.31	31.1	2.33	20.2	1.49	90.5	0.03
XOR	21 − 23	5	5.65	38.0	2.13	24.2	0.42	96.0	0.02
OR	21 − 23	5	5.57	61.4	0.71	41.8	0.14	97.7	0.01
XNOR	21 − 23	5	5.56	36.0	1.99	34.3	0.13	90.7	0.03
FO2	20 − 21	3	1.28	67.2	0.26	48.2	0.05	98.9	0.01
NOR	19 − 21	5	1.20	40.2	1.35	23.0	0.81	95.0	0.02
NAND	19 − 21	5	1.19	56.9	0.67	38.3	0.13	99.7	0.01
INV	18 − 19	6	0.53	78.1	0.35	52.7	0.09	83.6	0.01
Wire	15 − 17	6	0.08	84.0	0.24	39.0	0.13	86.9	0.00
Mean				43.0		28.4		**88.7**	
总计			1868.28		71.10		21.71		**0.73**

而且准确度远不能令人满意。总体而言：ExGS 的 TTS 较高，SimAnneal 的准确度较低。

相比之下，*QuickSim* 在仿真性能方面兼具出色的准确度和 TTS，在全部三项评估中均优于 ExGS 和 SimAnneal。与 SimAnneal 相比，*QuickSim* 的仿真准确度提高了三倍以上，同时 TTS 也提升了一个数量级以上，因为准确度的提高并未对其运行时间造成负面影响。与 ExGS 相比，其 TTS 降低了几个数量级，而仿真准确度仅略有下降，再次凸显了其克服效率与准确度之间权衡的能力。因此，*QuickSim*实现了优于当前最先进方法的准确度与单次运行时间之比。

VI. 结论

作为一种新兴的超越 CMOS 计算技术，硅悬挂键（SiDB）的设计自动化与制造能力近期取得了进展，这得益于科学界和商业界的关注。为了跟上这一领域的发展步伐，物理仿真是一项关键工具，因为它构成了任何设计验证流程的基础。

本文提出了一种用于硅悬挂键布局物理仿真的新算法 *QuickSim* ，其性能优于当前最先进的算法 SimAnneal：求解时间（TTS）缩短了一个数量级以上，准确度提高了三倍以上。

通过对三组不同的硅悬挂键布局进行全面的实验评估，得出了这些结果：1）随机生成的布局；2）由机器学习生成的布局；3）文献中已有的布局，共计 436 个测试用例。

为支持开放研究与开放数据，我们公开了该算法的实现、所有评估数据以及测试脚本。通过这种方式，我们使科学界能够在我们的研究成果基础上继续开展工作，并鼓励后续研究。

参考文献

[1] J. Croshaw 等人，“硅原子表面导线中的离子电荷分布”，Nanoscale，2021。[2] J. Wyrick 等人，“单个及少数掺杂原子量子器件的逐原子制造”，Advanced Functional Materials，2019。[3] M. B. Haider 等人，“室温下硅原子量子点的受控耦合与占据”，Physical Review Letters，2009。[4] T. R. Huff 等人，“原子级擦除：通过机械诱导单个氢原子与硅表面键合实现原子电路”，ACS Nano，2017。[5] N. Pavli˜cek 等人，“探针诱导的氢化 Si(100)-2×1表面悬挂键钝化”，Applied Physics Letters，2017。[6] R. Achal 等人，“用于稳健且可编辑原子尺度硅器件和存储器的光刻技术”，Nature Communications，2018。[7] R. A. Wolkow 等人，《硅原子量子点实现超越 CMOS 的电子学》。Springer，2014。[8] T. Huff 等人，“二进制原子硅逻辑”，Nature Electronics，2018。[9] X. Wang 等人，“供体器件中隧穿的原子尺度控制”，Communications Physics，2020。[10] J. L. Pitters 等人，“利用纳米尺度肖特基接触控制表面悬挂键的电荷”，ACS Nano，2011。[11] M. Rashidi 等人，“原子定义结构中单个电子演化的启动与监测”，Physical Review Letters，2018。[12] R. Landauer，“计算过程中的不可逆性与热生成”，IBM研究与开发杂志，1961。[13] R. W. Keyes 等人，“逻辑中的最小能量耗散”，IBM研究与开发杂志，1970。[14] C. S. Lent 等人，“量子点细胞自动机的贝内特时钟及二进制逻辑扩展的限制”，Nanotechnology，2006。[15] G. Toth 等人，“金属岛量子点细胞自动机的准绝热开关”，应用物理学杂志，1999。[16] A. S. Dzurak 等人，“硅基固态量子计算机的构建”，Quantum Information & Computation，2001。[17] S. S. H. Ng 等人，“SiQAD：原子硅量子点电路的设计与仿真工具”，TNANO，2020。[18] M. D. Vieira 等人，“用于原子硅量子点的三输入 NPN 类门库”，IEEE Design & Test，2022。[19] M. Walter 等人，“六边形才是最佳形状：硅悬挂键逻辑的设计自动化”，载于 DAC，2022。[20] “PoisSolver：硅悬挂键时钟网络建模工具”，载于 IEEE-NANO，H. N. Chiu 等人编，2020。[21] S. S. H. Ng，“原子硅量子点的计算机辅助设计及其计算应用”，硕士论文，不列颠哥伦比亚大学，2020。[22] H. N. Chiu，“场耦合量子点纳米结构时钟与控制的仿真和分析”，硕士论文，不列颠哥伦比亚大学，2020。[23] A. N. Bahar 等人，“原子硅量子点：原子逻辑电路的新设计范式”，TNANO。[24] R. Lupoiu 等人，“通过深度强化学习自动设计原子硅量子点电路”，arXiv，2022。[25] R. A. Wolkow 等人，“多硅原子量子点及其器件”，美国专利 10 937 959，2021。[26] R. Wolkow 等人，“原子定义结构中单个电子演化的启动与监测”，美国专利 11 047 877，2021。[27] M. G. Resende 等人，“最大–最小多样性问题的贪婪随机自适应搜索过程与路径重连”，Computers & Operations Research，2010。[28] M. Rashidi 等人，“自动化原子尺度制造”，美国专利，2022，17 429,443/。[29] T. R. Huff 等人，“移动量子点探测氢终止硅表面的静电势分布”，ACS Nano，2019。[30] R. Achal 等人，“利用 H-Si (100) 上的单分子结合事件检测与引导实现超高密度数据存储”，ACS Nano，2019。[31] J. Onoda 等人，“利用双探针扫描隧道显微镜实现二维纳米制造硅结构的欧姆接触”，ACS Nano，2021。[32] F. Altincicek，“P 型硅上的原子定义导线”，美国物理学会通报，2022。[33] M. Taucer，“硅悬挂键的非平衡动力学及其应用”，2015。[34] M. Rashidi 等人，“硅中单个掺杂原子的时间分辨电荷动力学”，Nature Communications，2016。[35] D. J. Griffiths，《电动力学导论》。剑桥大学出版社，2017，第 4 版。[36] S. Kirkpatrick 等人，“模拟退火优化”，Science，1983。[37] Y. Peter 等人，《半导体基础：物理与材料性质》。Springer Science & Business Media，2010。[38] T. Albash 等人，“量子退火机相对于模拟退火的尺度优势演示”，Physical Review X，2018。