

ベイズ最適化を用いた実験パラメータの探索による Au 原子接合の形成

Search of Experimental Parameters Using Bayesian Optimization

for Formation of Au Atomic Junctions

東京農工大 ○櫻井拓哉、平田鷹介、白樫淳一

Tokyo University of Agriculture & Technology

○T. Sakurai, Y. Hirata and J. Shirakashi

E-mail: s188050s@st.go.tuat.ac.jp

量子スケールでの原子接合の作製手法として、フィードバック制御型エレクトロマイグレーション(FCE)法が知られている[1]。FCE法は、数多くの実験パラメータが存在するため、その最適な組合せの決定には試行錯誤的な作業を要する。一方、未知の目的関数が最大となるハイパーパラメータを効率的に探索するための手法としてベイズ最適化が知られており、近年、様々な問題に適用されている[2, 3]。これまで我々は、遺伝的アルゴリズム(GA)を用いて実験パラメータの1つである電圧フィードバック量(V_{FB} %)の適用サイクルを1世代と捉え、複数の実験パラメータの組合せを染色体として進化させるFCEシステムを検討してきた[4]。今回は、ハイパーパラメータとして V_{FB} を設定し、ベイズ最適化を用いた V_{FB} の探索をリアルタイムに行うことで、Au原子接合の自律的な形成を検討した。

本実験では、ベイズ最適化における目的関数を、コンダクタンスの制御性をスコア化する評価関数と定義し、平均関数と共分散関数で規定されるガウス過程を想定した。図1に、構築したシステムの概要図を示す。まず、ランダムに設定した V_{FB} をAuナノワイヤに適用し、そのスコアから得られる平均 μ と標準偏差 σ を算出する(①)。次に、得られた μ と σ を使用して獲得関数EIを計算し、その値が最大となる V_{FB} を決定する(②)。最後に、EIから得られた V_{FB} を用いたFCE法をAuナノワイヤに適用する(③)。その後、①～③の手順を繰り返すことで、FCEプロセス中にリアルタイムで評価関数を最大にする V_{FB} の探索とAu原子接合の形成が可能となる。図2に、FCE法をAu原子接合の作製に適用した際のスコアとEIを示す。図より、4回目のフィードバック(FB) ($n=4$)で決定された V_{FB} をFCE法に適用した結果、5回目のFB ($n=5$)にて優れたスコアを獲得したことから、FCE法の進行に伴って評価関数を最大にする V_{FB} を探索している様子が確認できる。以上より、ベイズ最適化を用いることで、FCEプロセスの進行に伴いリアルタイムに実験パラメータが探索され、Au原子接合の形成が可能であることが示唆された。

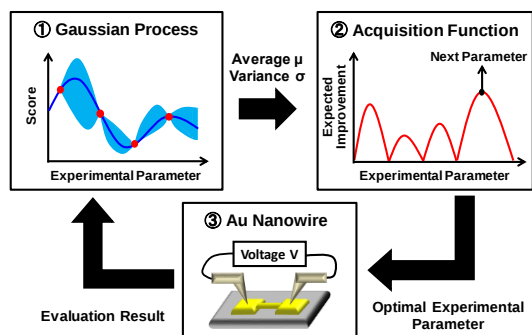


Fig. 1 Diagram of FCE for formation of Au atomic junctions using Bayesian optimization.

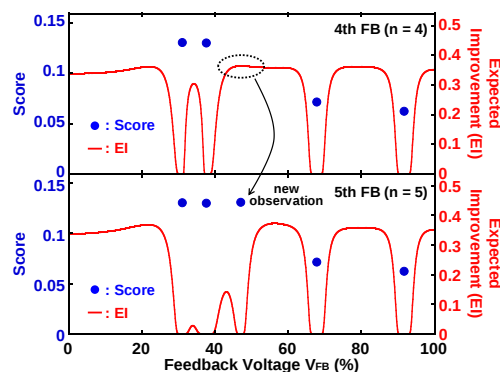


Fig. 2 Score and EI when 4th ($n=4$) and 5th ($n=5$) FBs.

References

- [1] D. R. Strachan, D. E. Smith, D. E. Johnston, T.H. Park, M. J. Therien, D. A. Bonnell and A. T. Johnson, Appl. Phys. Lett., 86 (2005) 043109.
- [2] Y. Chen, A. Huang, Z. Wang, I. Antonoglou, J. Schrittwieser, D. Silver and N. de Freitas, arXiv:1812.06855 (2018).
- [3] J. Snoek, H. Larochelle and R. P. Adams, In Advances in neural information processing systems, (2012) 2951.
- [4] 竹林、櫻井、平田、岩田、白樫: 第66回応用物理学会春季学術講演会 14a-W934-9 (2019).