

Au 原子接合での量子化コンダクタンス制御における ベイズ最適化を用いたマルチ実験パラメータの探索

Search of Multi-Parameters Using Bayesian Optimization for Control of Quantized Conductance of Au Atomic Junctions

東京農工大 ◦櫻井拓哉、平田鷹介、島田萌絵、佐伯大地、白樫淳一

Tokyo University of Agriculture & Technology

◦T. Sakurai, Y. Hirata, M. Shimada, D. Saeki and J. Shirakashi

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

近年、機械学習における未知の目的関数を最大化する手法としてベイズ最適化が注目されている。ベイズ最適化は、複数のハイパーパラメータを効率的に探索することが可能であるため、様々な対象に応用されている[1, 2]。これまで我々は、量子スケールでの原子接合の作製手法として知られている、フィードバック制御型エレクトロマイグレーション(FCE)法[3]にベイズ最適化を適用してきた[4]。本手法では、ハイパーパラメータとして設定した電圧フィードバック量 V_{FB} (%) の探索をリアルタイムに行うことで、実験の進行に伴う実験パラメータの最適化を検討してきた。今回は、先の V_{FB} に加えて、閾値微分コンダクタンス G_{TH} (mS) をFCEプロセス中に同時に探索・適用することで、より自律的なAu原子接合の作製を検討した。

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。まず、初期値としてランダムに設定した実験パラメータの組合せ(V_{FB} , G_{TH})をAuナノワイヤに適用する。次に、得られたコンダクタンスの評価を行い、そのスコアの平均 μ と標準偏差 σ を算出する。最後に、 μ と σ を用いて獲得関数EIを計算し、その値が最大となる(V_{FB} , G_{TH})をAu原子接合の形成実験にリアルタイムに適用する。これらの手順を繰り返し行うことで、FCEプロセス中に評価関数を最大にする(V_{FB} , G_{TH})の探索が可能となる。図1に、ベイズ最適化を用いたFCE法をAuナノワイヤに適用した際のプロセス時間Tに対する(V_{FB} , G_{TH})の探索過程と、その際のコンダクタンス波形を示す。図1より、室温大気下においてFCE法の進行に伴い、(V_{FB} , G_{TH})の変動が確認でき、実験パラメータの探索が実行されていることがわかる。また挿入図から、探索された(V_{FB} , G_{TH})を用いることで、量子化コンダクタンスが観測された。以上より、ベイズ最適化を用いることでマルチパラメータの探索がリアルタイムに実行され、Au原子接合の作製が可能であることが示唆された。

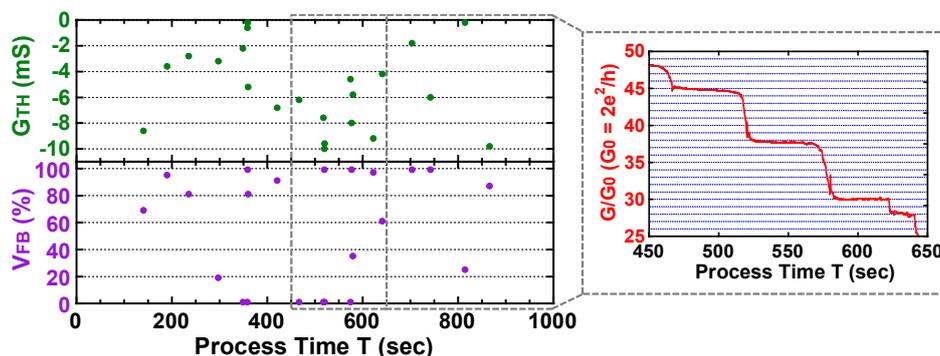


Fig. 1 Search of experimental parameters (V_{FB} , G_{TH}) using Bayesian optimization during FCE.

References

- [1] Y. Chen, A. Huang, Z. Wang, I. Antonoglou, J. Schrittwieser, D. Silver, and N. de Freitas, arXiv:1812.06855 (2018).
- [2] H. M. Torun, M. Swaminathan, A. K. Davis, and M. L. F. Bellaredj, IEEE Trans. Very Large Scale Integr. Syst. 26 4 (2018) 792.
- [3] 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.
- [4] 櫻井、平田、白樫: 第80回応用物理学会春季学術講演会 20p-F211-4 (2019).