

機械学習を用いた RHEED パターンの多カテゴリー分類

Multi-category classification of RHEED patterns using machine learning

東大ナノ量子機構, ◯權 晋寛, 荒川 泰彦

NanoQuine, Univ. Tokyo ◯Jinkwan Kwoen, Yasuhiko Arakawa

E-mail: jkkwoen@iis.u-tokyo.ac.jp

反射高速電子線回折 (Reflection High-Energy Electron Diffraction : RHEED) は MBE 成長中の試料表面挙動をその場観察できるため広く使われている。特に、RHEED パターンは試料の温度・材料の供給量および供給比などにより動的に変化するため、成長条件較正のマイルストーンとしても使われてきた。しかし、RHEED パターン解析は実施者の蓄積されたノーハウに依存し、その時間的な限界もあるため、実時間フィードバック制御などへの応用は困難であった。我々は Convolutional Neural Network (CNN) を用いた機械学習法で GaAs 基板上への GaAs の MBE 成長で RHEED 像を収集し、2つのパターンを分類するモデルを報告した [1, 2]。しかし、2つのパターンを分類するモデルは二進分類モデルであり、データの追加による拡張性に限界があった。今回我々は、3つ目の RHEED パターンデータを取得し、分類モデルを立てることで、多カテゴリーの分類に成功したので報告する。

RHEED 像は n 型 GaAs (001) 基板上 GaAs および InAs の MBE 成長で収集した。パイロメータで基板温度が 580° C で GaAs (2×4) パターンを、480° C で GaAs c(4×4) パターンを取った。更に、GaAs 上に InAs 成長を行い、量子ドット成長が行われた以降のスポットパターンを取得した。基板を 12 rpm で回転させながら、一回転で [110], [1 $\bar{1}$ 0], [$\bar{1}\bar{1}$ 0], [$\bar{1}$ 10] 方向からの RHEED パターンを得た。収集された RHEED イメージは Fig. 1 のように [110] + [1 $\bar{1}$ 0], [$\bar{1}\bar{1}$ 0] + [$\bar{1}$ 10] の横並びにスタックした。学習の結果、エポック数 (epoch, 学習繰り返し回数) の増加に伴い正解率 (accuracy) が単調増加し、損失関数の評価値 (loss) が単調低下し飽和されることで、未学習および過学習問題は回避できていると考えられる (Fig. 2)。この分類モデルを用いることで、RHEED パターンの実時間認識および、成長制御への応用が期待される。

本研究は、NEDO の超低消費電力型光エレクトロニクス実装システム技術開発により遂行された。

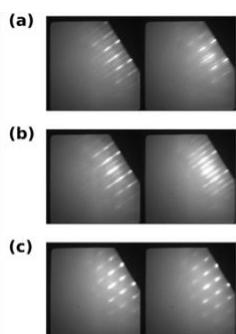


Fig. 1 Preprocessed RHEED images of (a) (2×4) (b) c(4×4) and (c) spot pattern

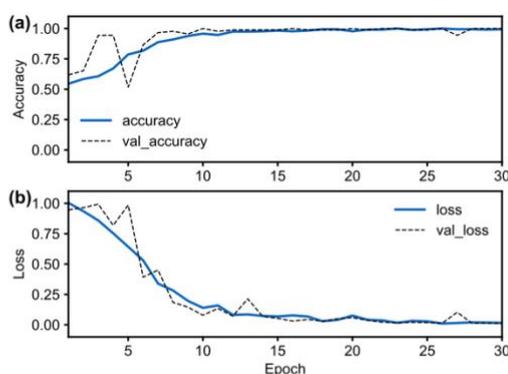


Fig. 2 Training epoch versus estimation (a) accuracy and (b) loss

[1] Y. Lecun, *et. al*, Proceedings of the IEEE **86**(11), 2278-2324 (1998).

[2] J. Kwoen and Y. Arakawa, Crystal Growth and Design **20**(8), 5289-5293 (2021).