

Si 表面上吸着再構成構造における RHEED パターンの機械学習解析 RHEED pattern analysis for Si surface superstructure using machine learning

東理大¹, 物材機構², JST-さがけ³, NEC⁴, 産総研⁵

○(B) 吉成朝子¹, 永村直佳^{1,2,3}, 岩崎悠真^{3,4,5}, 小嗣真人¹

Tokyo Univ. of Science¹, NIMS², PRESTO³, NEC⁴, AIST⁵

°Asako Yoshinari¹, Naoka Nagamura^{2,3}, Yuma Iwasaki^{3,4,5}, Masato Kotsugi¹

E-mail: 8217098@ed.tus.ac.jp

Si 単結晶の清浄表面は、1 原子層程度の異種原子吸着によって多彩な超構造を呈し、その表面電子状態はバルクと大きく異なる物性を示す。Si(111)上 In 吸着表面では、温度や吸着量の違いで擬一次元系金属状態の 4×1 ^[1]や超伝導転移を起こす $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ などの様々な表面超構造が形成され、超構造の作り分けや成膜プロセス最適化が応用の鍵となる。成膜条件探索には反射高速電子線回折(RHEED)による *in-situ* 解析が広く活用されているが、回折パターンの定量的評価は難しく、実験者の知識や勘に依存する要素が大きい。そこで本研究では、RHEED パターン画像の機械学習解析^[2]を Si(111)表面に In を蒸着する成膜過程に適用することで、In 吸着量によって変化する表面超構造の相転移の自動判定と、各表面超構造の最適成膜条件(蒸着時間)探索を試みた。

実験では、Si(111)基板上に、分子線エピタキシー法を用いて超高真空中において基板温度 450°C で In の蒸着を行いながら、 $[11\bar{2}]$ 方向の RHEED パターンの画像を 480 秒間で合計 375 枚得た。回折パターン範囲内の輝度を読み込んだのち、1 次元配列化したものをデータセットとして、階層的クラスタリング、非負値行列因子分解(NMF)を用いて解析を行った。

回折パターンでは目視でも In の吸着量増加に伴う数段階の構造変化が見えた。RHEED パターン画像の解析にワード法で階層的クラスタリング(Fig.1)を実行したところ、回折パターンは 5 つのクラスタに分類することが最適であるとの結果が得られ、 7×7 , $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$, $\sqrt{31}\times\sqrt{31}$, 4×1 (加熱中), 4×1 (室温) の合計 5 つの超構造を変遷するという経験的予測と一致した。本手法では、前提知識なく表面構造変化を把握することができた。また、NMF の結果(Fig.2)より、各構造が現れた基底の重み係数から、各構造の最適蒸着時間条件の見積もりを自動的に行うことができた。これは超構造スポット 1 点のみの輝度変化を追う従来手法と一貫した結果であった。例えば、Fig2.(a)で示される基底では加熱中の 4×1 構造のパターンが現れ、Fig.2(b)に示される係数の極大値から最適蒸着時間は 292 秒と見積もることが出来た。本手法は画像全体から情報を取得するため、従来手法と比較して計測ノイズに強く、経験的予測では想定できなかった相の発見も可能であると期待される。

当日は NMF 結果の詳細、その他の機械学習解析結果についても交えて議論を行う。

引用文献

[1] Takehide Shibasaki *et.al.*, PHYSICAL REVIEW B, 81,035314(2010)

[2] Rama K.Vasudevan *et.al.*, ACS NANO, VOL.8, NO.10, 10899-10908(2014)

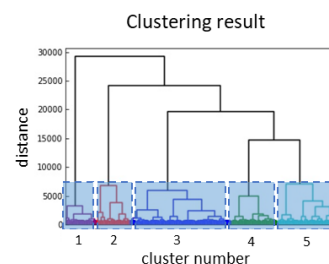


Fig.1 Clustering result
: Dendrogram of RHEED images

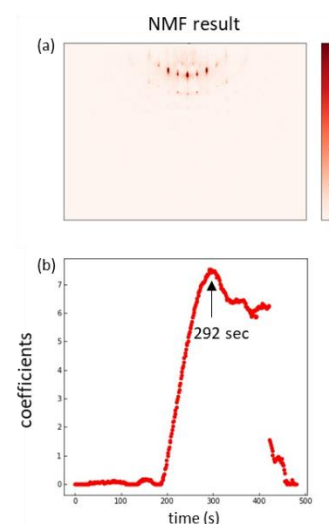


Fig.2 NMF result (a) component
(b) coefficient of component