

リップマー研究室

Lippmaa Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 パルスレーザー堆積法による酸化物薄膜およびヘテロ構造の作製
Growth of thin oxide films and heterostructures by pulsed laser deposition
- 2 酸化物ナノ構造およびナノコンポジット薄膜の合成
Synthesis of nanostructures and nanocomposite thin films
- 3 光触媒におけるキャリアダイナミクス
Carrier dynamics in photocatalysts
- 4 薄膜のオートノマス合成
Autonomous synthesis of thin films



教授 リップマー ミック
Professor LIPPMAA, Mikk

専攻 Course

新領域物質系

Adv. Mat., Frontier Sci.



助教 田中 友晃
Research Associate
TANAKA, Tomoaki

新材料の薄膜合成には多くの合成制御パラメータの最適化が必要である。パルスレーザー堆積法の場合、パラメータ空間は6次元以上である。このパラメータ空間で最適点を見つけるプロセスを加速するために、薄膜の表面形態と構造の変化を検出するRHEEDによって結晶成長を観察する。機械学習を利用し、特定の格子パラメータを持つ結晶相や最良の表面平坦性など、目的の回折特性を最適化する結晶成長条件を自律的に選択する。回折画像のセマンティックセグメンテーションを使用して同様の回折特徴を抽出し(左図)、続いて周期性分析とパラメータクラスタリングを行うことで、膜の相組成と表面構造の品質係数が得られる。位相情報は、位相安定性マップを構築するために使用できる(右図)。ベイジアン最適化は、自律的な合成制御を取得して最適な成長条件を選択し、多次元パラメータ空間で目的の結晶相を迅速に取得するために使用される。

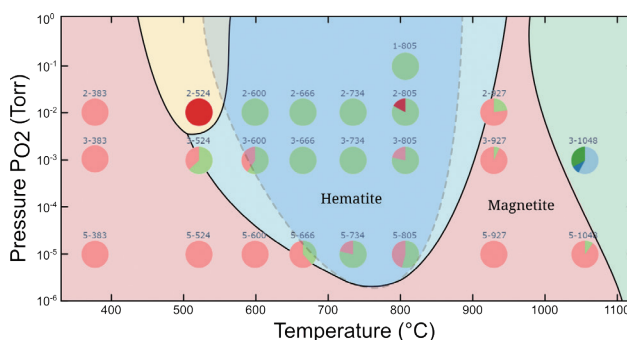
Thin film synthesis of new materials requires the optimization of many synthesis control parameters, such as pressure, temperature, growth rate, etc. For Pulsed Laser Deposition, the parameter space has 6 or more dimensions. To accelerate the process of finding the optimal point in this parameter space, we monitor the crystal growth by RHEED, which detects thin film surface morphology and structure changes. Several forms of machine learning are used to autonomously choose crystal growth conditions that optimize for the desired diffraction features, such as a crystal phase with a specific lattice parameter or the best surface flatness.

Semantic segmentation of the diffraction images is used to extract similar diffraction features (left figure), followed by periodicity analysis and parameter clustering, which gives the phase composition of the film and a quality factor for the surface structure. The phase information can be used to build a phase stability map (right figure). Bayesian optimization is used to obtain autonomous synthesis control to select the best growth conditions and to rapidly obtain the desired crystal phase in a multidimensional parameter space. This autonomous feedback operation is more than an order of magnitude faster than traditional manual parameter optimization.



回折パターンでトレーニングされたUNetニューラルネットワークを使用したRHEEDパターンからの回折ストリークとスポットの抽出。直接ビーム(元の画像の赤枠)は回折スポットと混同されない。

Diffraction streak and spot extraction from a RHEED pattern with a UNet neural network trained on diffraction images. The direct beam (red box in the original image) is not confused with diffraction spots.



温度と酸素圧力の関数としての、 Al_2O_3 上のヘマタイト (Fe_2O_3) とマグネタイト (Fe_3O_4) の自動薄膜成長相マッピング。

Automated thin film growth phase mapping of hematite (Fe_2O_3) and magnetite (Fe_3O_4) on Al_2O_3 as a function of temperature and oxygen pressure.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/lippmaa_group.html