

畳み込みニューラルネットワークを用いた 半導体結晶における電子線回折画像の解析

鈴木 健太[†] 鈴木 伸崇^{††} 上杉 文彦^{†††} 石井 真史^{†††}

[†] 筑波大学情報学群知識情報・図書館学類

^{††} 筑波大学図書館情報メディア系

^{†††} 国立研究開発法人物質・材料研究機構

1. はじめに

半導体の結晶を評価する手法の一つに電子線回折法 (ED: Electron Diffraction) [1]が存在する。これは、結晶の表面に電子線を照射し、得られた画像 (電子線回折画像) と回折パターンから結晶構造の状態を解析するというものである。この画像は結晶構造の状態によって変化するが、画像のみから結晶構造の状態を人手で正確に判断するのは極めて困難である。本稿では、画像から結晶構造の状態を自動推定するために、Deep Learning の一種である畳み込みニューラルネットワーク [2] (以下, CNN) を用いた手法を提案する。

2. 電子線回折画像

電子線回折画像とは、結晶の表面に電子線を照射することで生じる電子回折パターンを、画像に落とし込んだものである (図 1 は「電子線の入射方位」がそれぞれ異なる)。図 1 のように、画像には黒色や灰色の斑点がいくつか写っている。これは回折スポットと呼ばれるものであり、ブラッグの条件 ($2d\sin\theta = n\lambda$) を満たした電子の回折波によって生成される。

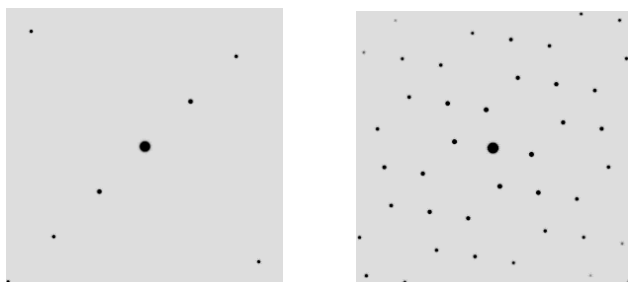


図 1. 電子線回折画像 (Si 単結晶) の例

3. 提案手法

本研究では、Deep Learning の一種である CNN を用いる。画像と構造パラメータ (結晶構造の状態を数値化したデータ) の対を正解データとし、CNN で学習を行った後、生成された推定モデルを用いて構造パラメータを推定する (図 2)。推定モデルの精度については、正解データとの誤差を各々算出し、全体の誤差が小さいものほど良質なモデルとする。また、構造パラメータは複数項目存在するが、今回の推定対象は電子線の入射方位とする。

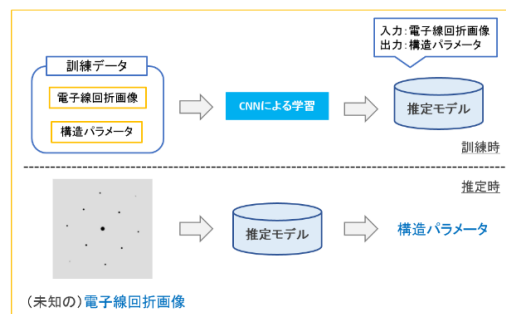


図 2. 提案手法の流れ

4. 評価実験及び結果

Si (シリコン) 単結晶の電子線回折画像 1000 枚を訓練用データ 800 枚, 検証用データ 200 枚に分け, 5-分割交差検証を行った。実験では, 各々の最適化手法における推定モデルの精度を比較検証した。その結果, 7 種類ある最適化手法の中で, Adadelta を用いたモデルが, 誤差が最も小さいことが判明した (図 3)。

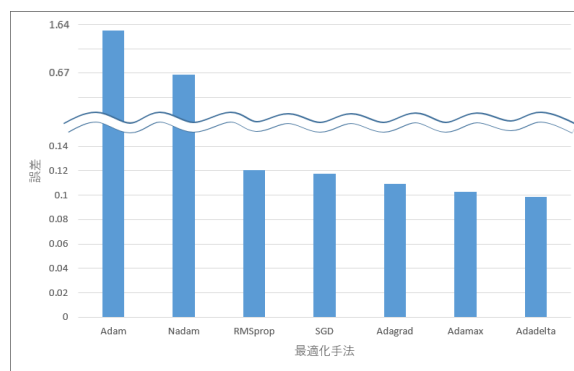


図 3. 最適化手法別推定モデルの精度

5. 今後の課題

Si以外の電子線回折画像についても、同様に推定モデルを生成する。最終的には、データセットを一つに統合し、「構造パラメータの推定」と「物質の分類」を同時に実行できるようなモデルの生成を目指す。

参考文献

- [1] 小山泰正, 松井良夫. これから電子顕微鏡を始める人へ(2) 電子回折の基礎 X線回折との違いを理解しよう. 日本結晶学会誌, Vol.39, No.4, pp.271-278, 1997.
- [2] Jiuxiang Gu, *et al.* Recent advances in convolutional neural networks. *arXiv preprint arXiv:1512.07108*, 2015.