

# 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

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）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）と電子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手で正確に判断するのは極めて困難である。このような画像をもとに、結晶構造の状態を正しく推定することができれば、結晶の評価をより容易に行うことが可能になると考えられる。

結晶構造の状態を解析する上で、計算機を用いた回折パターンシミュレーションがしばしば併用される。これは、結晶構造の状態を数値化した構造パラメータを入力とし、シミュレータにかけて画像を生成した後、実際の回折実験で得られた画像と比較するという方法（順問題）である。しかしながら、この方法では、構造パラメータを先に仮定しなければならないため、ある程度の技術と経験が必要であり、かつ相当の手間がかかる。一方、本研究では、画像を入力とし、構造パラメータの推定を行う。これは、上記問題の逆問題となっている。入力する画像は、実際の回折実験によって得られたデータであり、特別な技術や経験を必要としないという利点がある。また、著者の知る限り、同様の推定を行う手法はこれまで提案されていない。

提案手法として、本研究では Deep Learning の一種である畳み込みニューラルネットワーク（以下、CNN）を用いる。画像と構造パラメ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。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、それら誤差の（相加）平均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。

評価実験では、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。その際、CNN のモデル構造並びに損失関数の種類は固定、最適化手法のみを変更対象とし、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。加えて、上記 Adadelta のモデルに対し、畳み込み層の層数や全結合層のユニット数を変え、再度比較検証を行った結果、Adadelta を用いたモデルの中でも、特に精度の高い推定モデルを選定することができた。また、誤差の小さかった画像と大きかった画像をいくつか抽出することで、大まかだが双方における画像の特徴を捉えることができた。

（指導教員 鈴木伸崇）