

機械学習を用いた μ ビーム X 線回折マッピングの特徴領域の効率的推定

Fast domain prediction in micro beam X-ray diffraction using machine learning

名工大院情報¹, 理研 AIP², 物材研³, 量研⁴, 名大院工⁵, 名大未来研⁶

○(M2) 穂積祥太¹, 沓掛健太郎^{2,6}, 松井孝太², 佐々木拓生⁴, 宇治原徹^{5,6}, 竹内一郎^{1, 2, 3}

NITech.¹, RIKEN², NIMS³, QST⁴, Grad. School Eng., Nagoya Univ.⁵, IMaSS, Nagoya Univ.⁶

Shota Hozumi¹, Kentaro Kutsukake^{2,6}, Kota Matsui², Takuo Sasaki⁴, Toru Ujihara^{5,6}, Ichiro

Takeuchi^{1, 2, 3}

E-mail: hozumi.s.mllab.nit@gmail.com

同一試料内で物性の異なる領域を複数持つ試料において、少ない測定点数で試料表面上の領域分布を特定することは、材料評価法で共通の課題である。我々は、機械学習手法の一つである Level set estimation(LSE)[1]を材料評価の領域特定に応用しており、これまでにシリコンウェハのライフタイム分布測定への応用を報告した[2]。本研究では、放射光実験施設 SPring-8 での μ ビーム X 線回折マッピングへの応用を報告する。多数の X 線回折パターンから教師なし機械学習によって、SiGe 薄膜試料の組成と配向を表す特徴量を抽出し（連続講演にて先に報告）、LSE によって特徴量が高い（低い）範囲を推定した。

LSE は、データ点上の関数（以下目的関数と呼ぶ。ここでは回折パターンから抽出された特徴量）の値が閾値を越えるかどうか、すなわち閾値境界の位置を、部分的な測定結果から統計的に推定する手法である。LSE では、関数値の不確実性を考慮するためにガウス過程により目的関数をモデル化し、境界の情報が最大となるような測定座標を逐次的に選択し、マッピングを行う。

本研究では、縦 $50\ \mu\text{m}$ 、横 $50\ \mu\text{m}$ のマッピング範囲において、特徴量の高い(低い)範囲の境界位置の推定を LSE で行った。実験では、特徴量の値が-0.45 を下回る値を閾値とし、F 値（完全一致 1, 完全不一致 0）で結果を評価した。LSE による推定結果を Figure 2 に示す。濃青は領域の分類に際し不確実性がまだ残っている領域を表している。従来のマッピングでは合計 2500 点の測定が必要となるが、LSE は 27 点の測定で上述の推定結果を得ることができた。LSE により、特徴量の高い（低い）範囲の推定が少ないマッピング点で実現できていることが分かる。

謝辞 本研究の一部は、科学研究費（17H00758, 16H06538）, JST CREST (JPMJCR1302, JPMJCR1502), 文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム (A-18-QS-0005) の QST 微細構造解析プラットフォーム, 理化学研究所革新知能統合研究センター, JST イノベーションハブ構築支援事業・情報統合型物質・材料開発イニシアティブの補助を受けて行われた。

[1] A. Gotovos, N. Casati, G. Hitz, and A. Krause, “Active learning for level set estimation” in Int. Joint Conf. Art. Intel., 2013. [2] 穂積他, 2019春応物, 9p-W321-14.

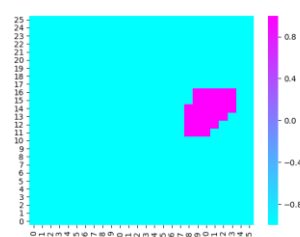


Figure 1 True zone

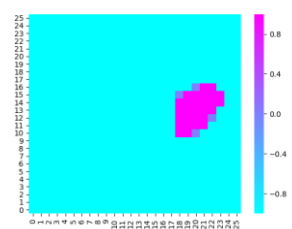


Figure 2 Estimated zone using LSE