

機械学習による電界イオン顕微鏡像の結晶方位の同定

○山田 瑞貴, 岡澤 正将, 永井 滋一*, 畑 浩一

三重大学大学院工学研究科

Machine learning based determination of crystal orientation in field ion micrograph

○Mizuki Yamada, Tadasuke Okazawa, Shigekazu Nagai*, Koichi Hata

Graduate School of Engineering, Mie University

電界イオン顕微鏡(FIM)は、先端を数 10~100 nm に先鋭化させた試料表面の原子配列を観察できる顕微鏡である。そのため、FIM 像には原子分解能での表面原子配列、結晶構造、格子欠陥などの情報が含まれる。さらに、電界蒸発させながら連続で撮影した FIM 像を用いて、試料の原子配列の 3 次元再構成を行うことで、内部構造まで観察可能である。しかし、FIM 像は湾曲した試料表面の原子配列がスクリーン上に投影されるため、3 次元再構成時に放射投影に対する圧縮率で補正する必要がある。さらに、試料毎に先端形状は同一でなく、圧縮率が異なるため、試料の結晶方位、観察された結晶面を同定し、圧縮率の算出が必要である。そこで本研究では、種々のタングステン FIM 像の結晶方位を自動的に同定するため、機械学習を用いた手法について検討した。

FIM 像で観察される各結晶面の配置は、垂直投影図と対応するため、試料の結晶方位のもつ対称性と一致する。しかし、各結晶面は原子分解能で観察されるので、同一の像が観察されることは無い。そこで、以下の手順で同定する手法を提案した。まず、FIM 像中の{110}面および{112}面を物体検出モデル(YOLOv3)によって抽出し(図 1)、これらの幾何学的配置を垂直投影図の対称性と比較して結晶方位を同定した。結晶方位同定のプログラム開発環境には Colaboratory(Python3.7.11)を使用し、193 枚の FIM 像に対して、結晶方位同定の精度を評価した。

提案した手法を用いて結晶方位の同定に十分な数の{110}面および{112}面を検出できたデータ数は、全データの 90%に達した(表 1)。また、<001>方位の検出率が 83%と最も低く、<111>方位が 95%と最も高い結果となった。さらに、これらの結晶方位を同定した結果、全データ数の 88%に対して正しい結晶方位を出力できたことから、本手法が有効であることが示された。講演当日は{110}面および{112}面以外の結晶面を個々に同定する手法についても述べる予定である。

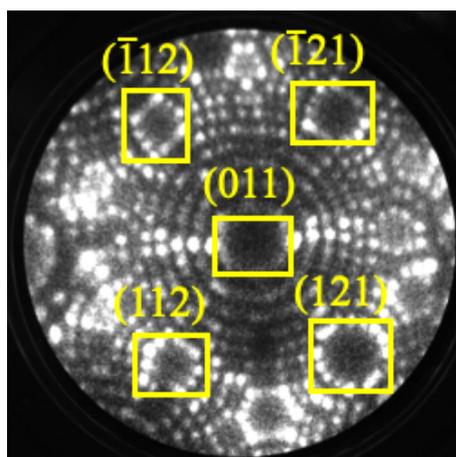


図 1. W tip<011>の FIM 像に対する {110}面と{112}面の検出結果

表 1. {110}面と{112}面の検出率と結晶方位同定の精度

結晶方位	<001>	<011>	<111>	平均
検出率 [%]	83	93	95	90
同定の精度 [%]	83	93	88	88

【謝辞】本研究は JSPS 科学技術研究費 基盤研究(C) (課題番号:20K05325) の補助を受けたものである。

*E-mail: nagai@elec.mie-u.ac.jp