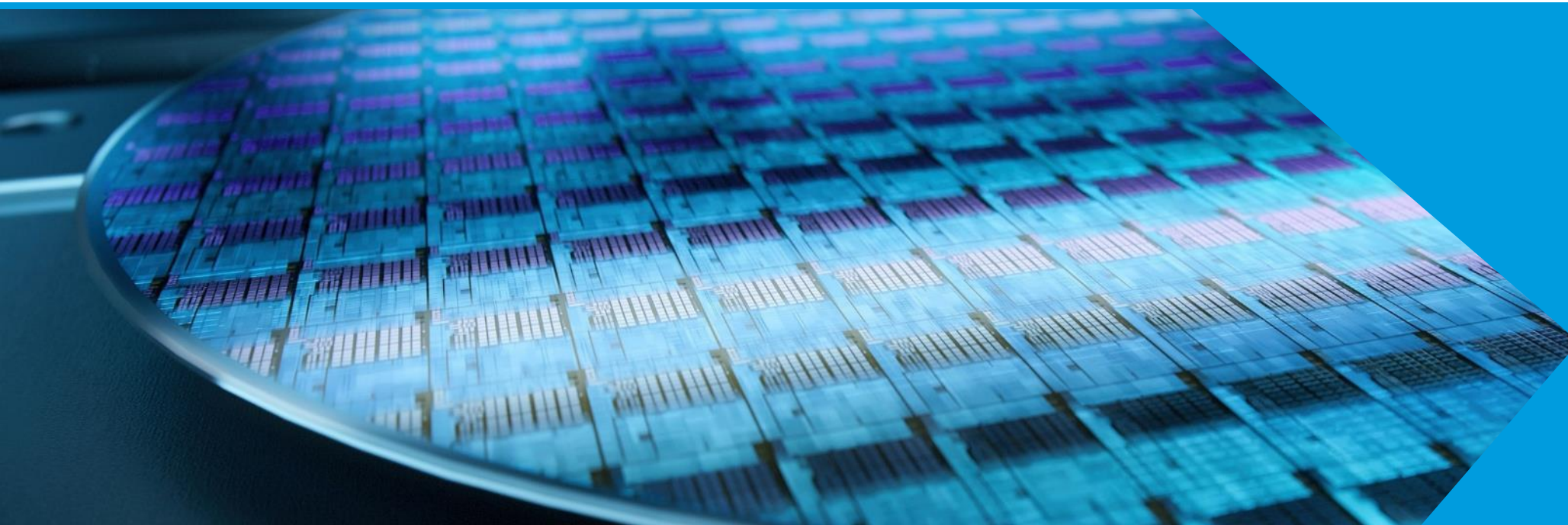




AIを用いたX線薄膜解析のハイスループット化

2026年9月4日

株式会社リガク XRD解析アプリケーション課

柴崎寿英



アウトライン

- **イントロダクション**

- X線薄膜解析 – 反射率と高分解能ロッキングカーブ
- フィッティング手法 – 大域最適化 vs. 局所最適化

- **AIによるフィッティング初期値推定**

- 基本概念、学習と推論の流れ、AIモデルの構造
- SmartLab Studio IIでの使用イメージ

- **マッピングデータによる評価結果**

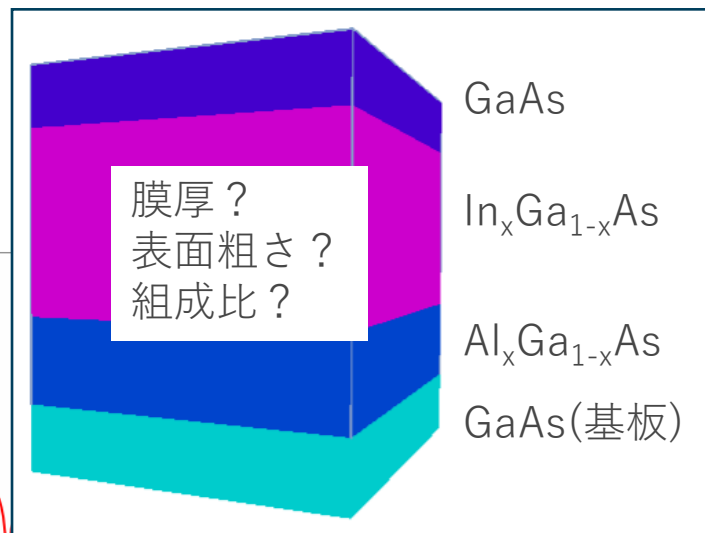
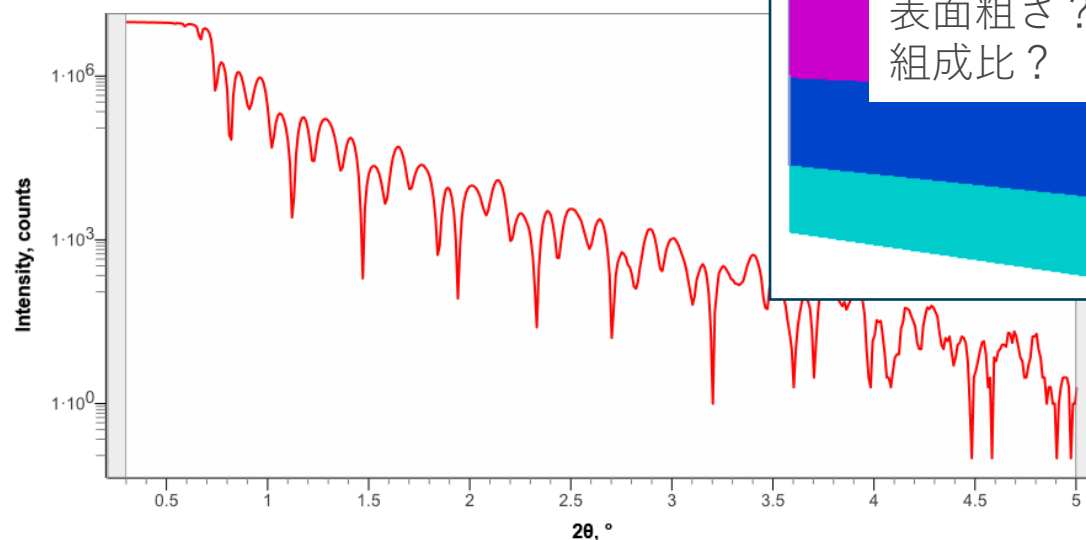
- 反射率、高分解能ロッキングカーブ
- 複雑な試料への適用 – 超格子、密度勾配



X線薄膜解析

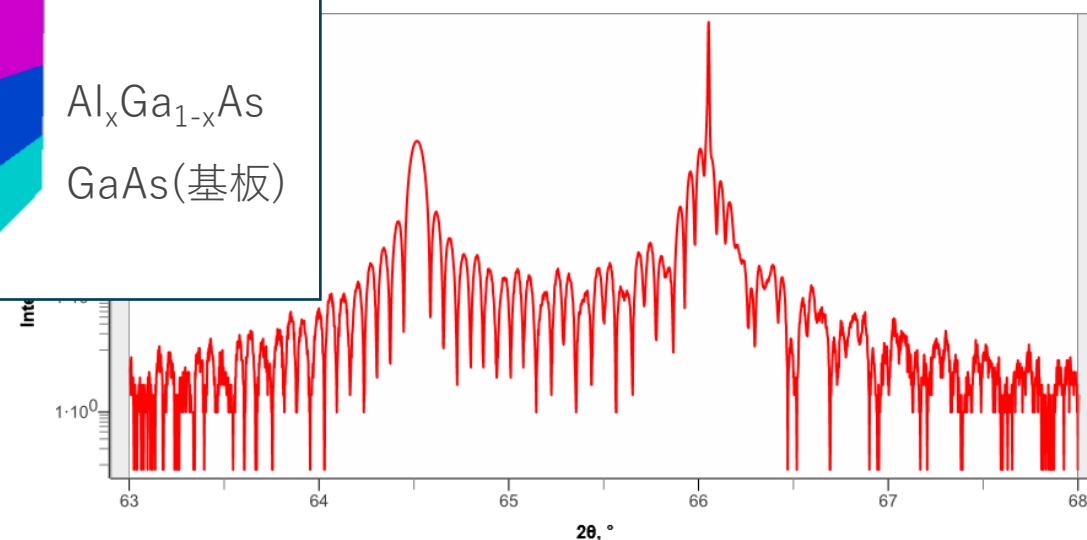
■ 反射率

試料表面・界面で
反射したX線の干渉を測定



■ 高分解能ロッキングカーブ

結晶内での多重散乱による
入射X線と回折X線の相互作用



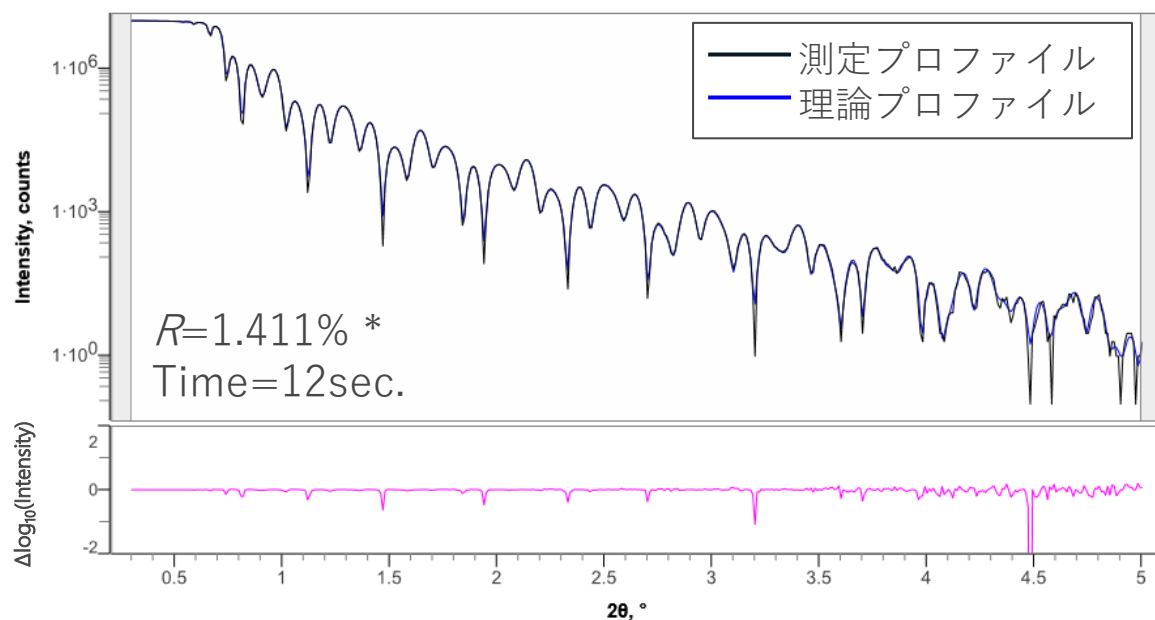
測定技術の向上により、解析のハイスループット化の重要性が高まっている

フィッティング手法 – 大域 vs. 局所

- 遺伝的アルゴリズム (GA)

✓ 大域解を見つけやすい

✗ 解析時間が長い

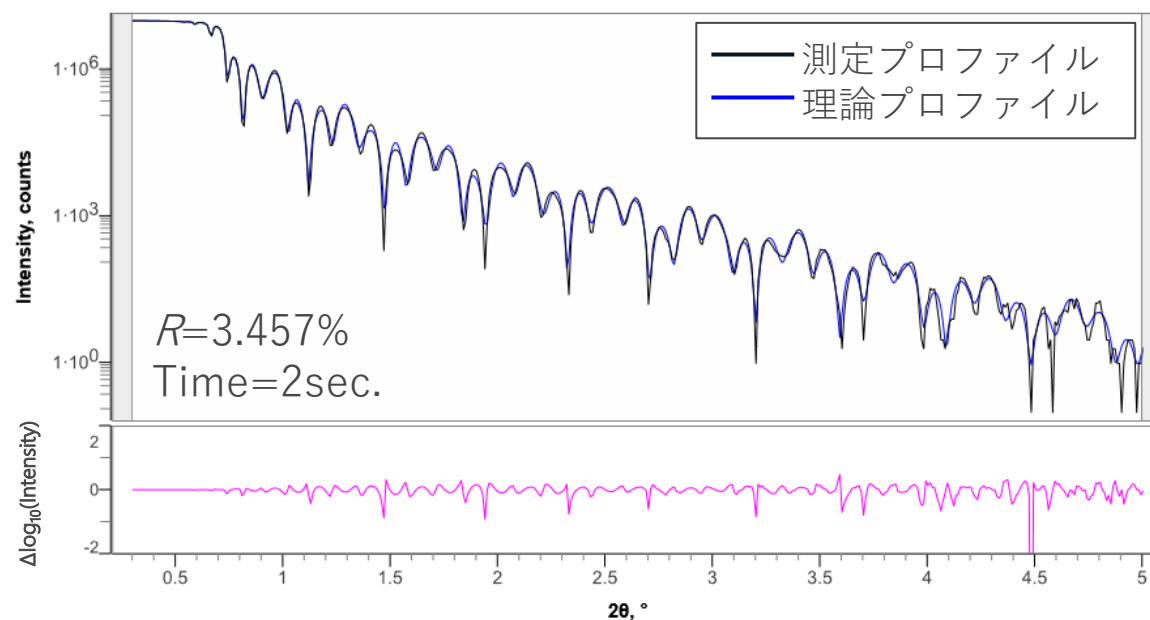


*R因子: 対数スケール強度の規格化残差

- 準ニュートン法 (QN)

✗ 局所解に陥りやすい

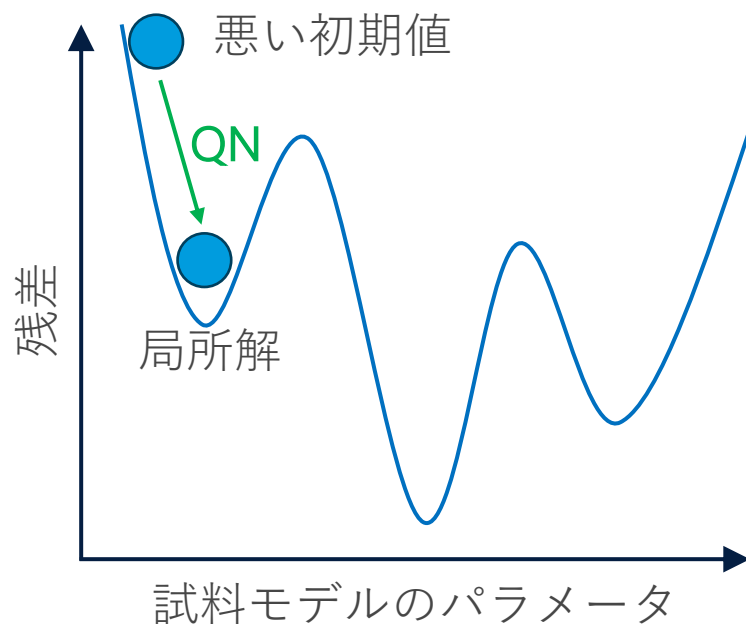
✓ 解析時間が短い



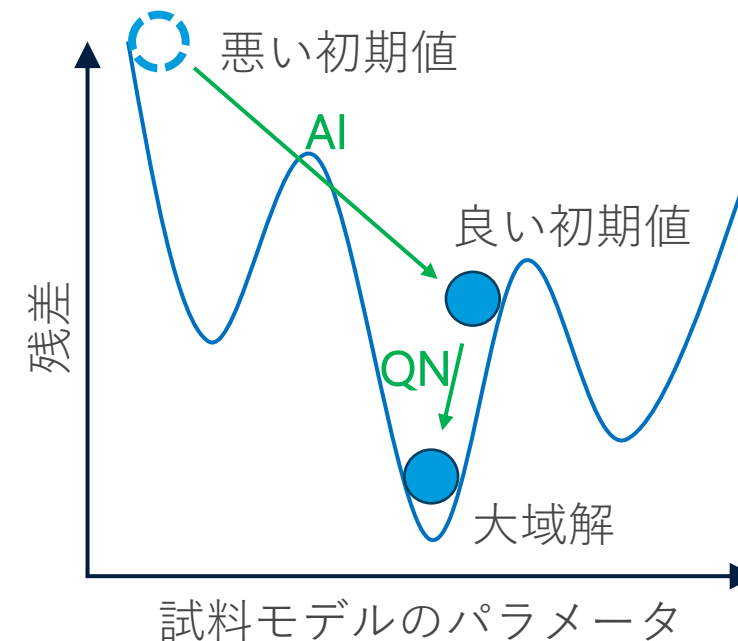
AIによる初期値推定 – 概念

- QNで大域解を得るには「良い」初期値が必要
→ AIが推論したパラメータを、フィッティングの初期値に用いる

QNのみ

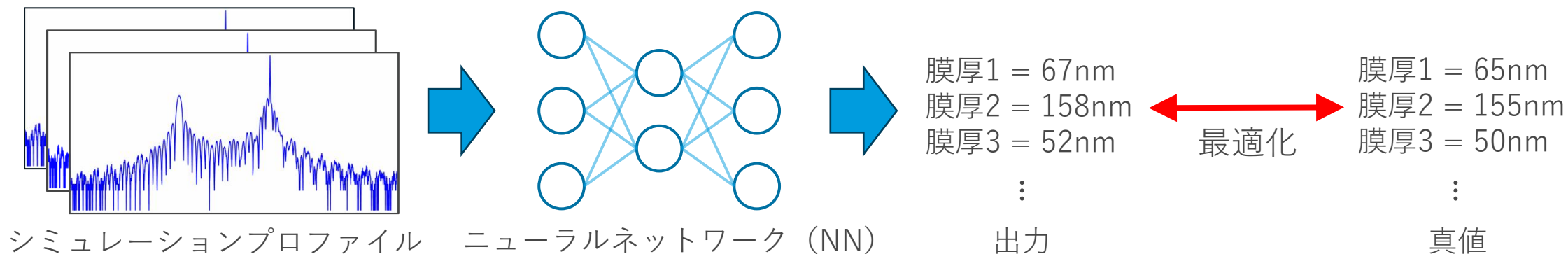


AI+QN

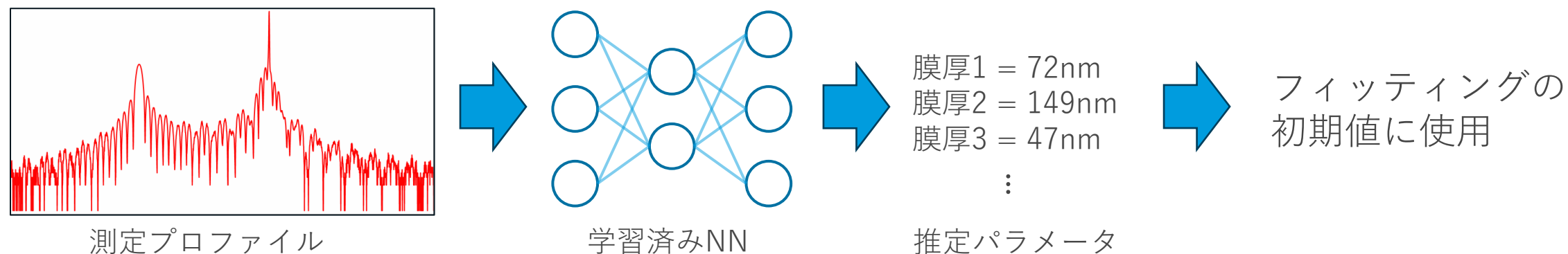


AIによる初期値推定 – 学習と推論

■ 学習の流れ



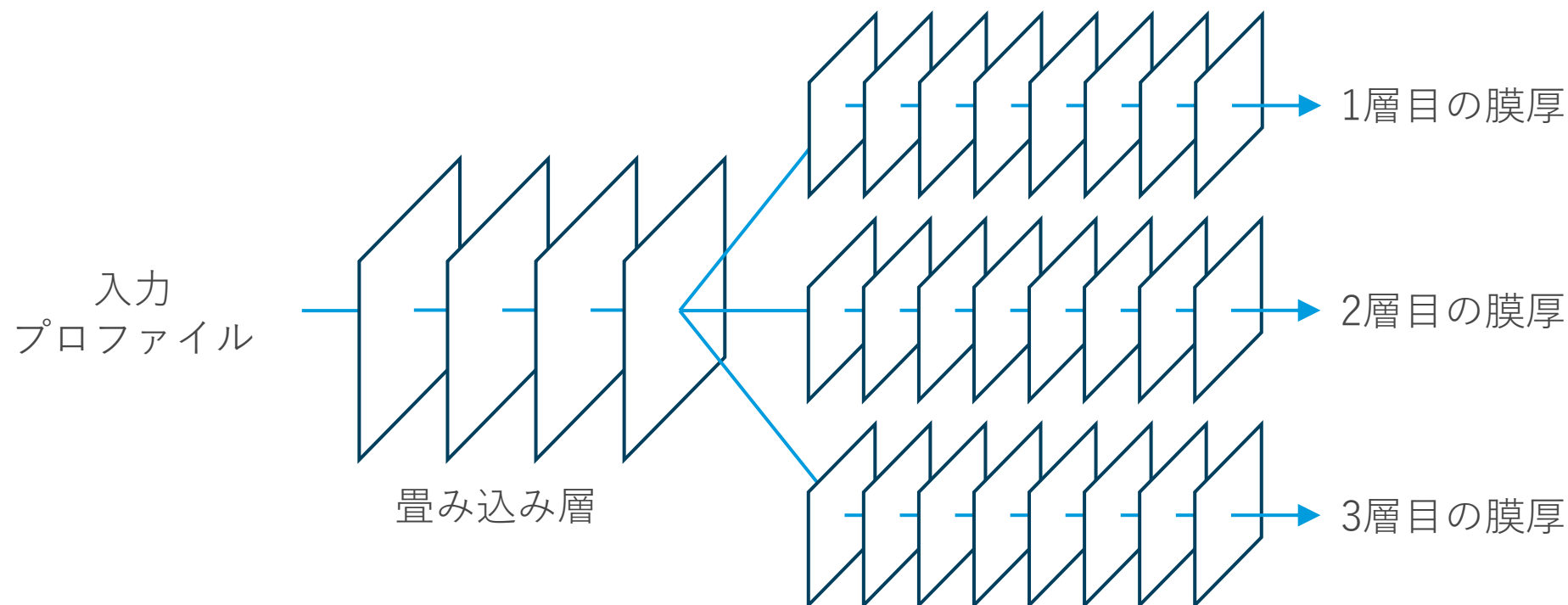
■ 推論の流れ



AIモデルの構造

[1] H. Dong et al., npj Comput. Mater., 7 (2021) 1–9.

- 各パラメータに対するブランチを持つ畳み込みニューラルネットワーク
 - cf. PQ-Net^[1]: 粉末XRDの定量用AI（弊社ソフトにて製品化済み）



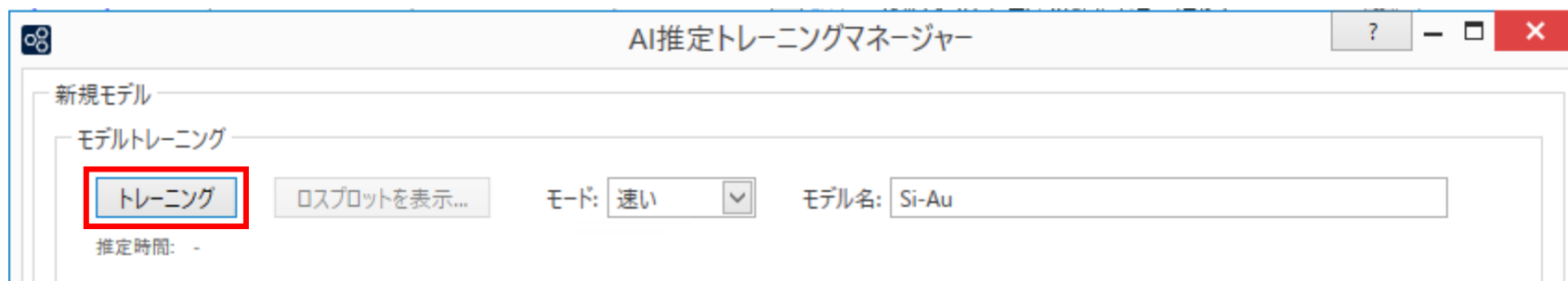
SmartLab Studio IIでの使用イメージ

1. AIの学習を行う

① 代表データをひとつ読み込み、試料モデルの**設計値**を入力する

使用	層番号	材料	膜厚(nm)<th>	密度 (g/cm ³)<d>	粗さ(nm)<rg>
☒	L1	Au	20.000 Const	19.30000 Const	0.500 Co...
			--- 精密化	--- 一最大 精密化	--- 精密化
☒	基板	Si	∞	2.32924 Const	0.500 Co...
					--- 精密化

② 学習を開始して、完了を待つ

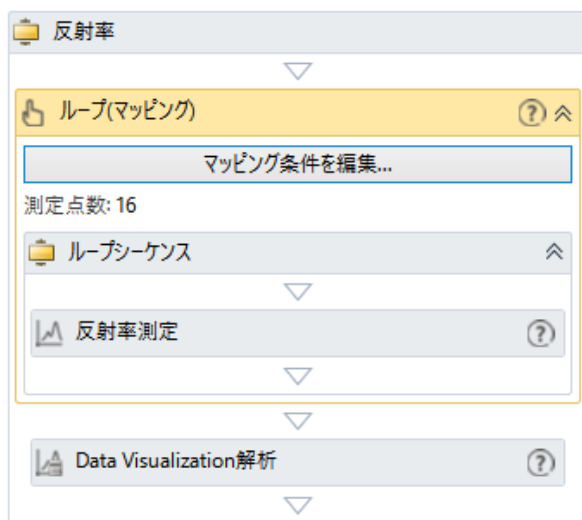


→ シミュレーションデータで学習するため、大量の実測データの準備は不要

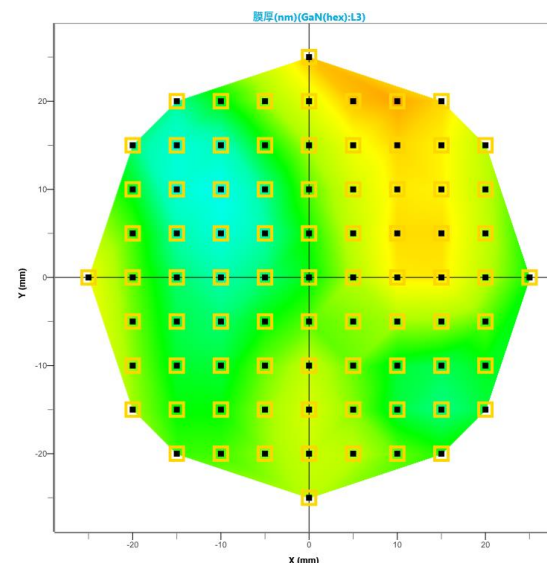
SmartLab Studio IIでの使用イメージ

2. 学習済みAIモデルを使って解析を行う

- ① AI推定+準ニュートンを用いた解析テンプレートを保存する
- ② 解析テンプレートにより、自動解析やマッピング解析を行う



反射率測定～自動マッピング解析フロー



マッピング解析例（ウェハ上の膜厚分布）

評価データ – 反射率

■ 試料モデル（設計値 ± 学習範囲）

	材料	膜厚 (nm)	粗さ (nm)	密度 (g/cm ³)
層3	GaN(hex)	20 ± 6	0.6 ± 0.3	6.08810
層2	AlN(hex)	50 ± 10	0.6 ± 0.3	3.26095
層1	InN(hex)	30 ± 9	0.6 ± 0.3	6.90903
基板	GaN(hex)	-	0.6 ± 0.3	6.08810

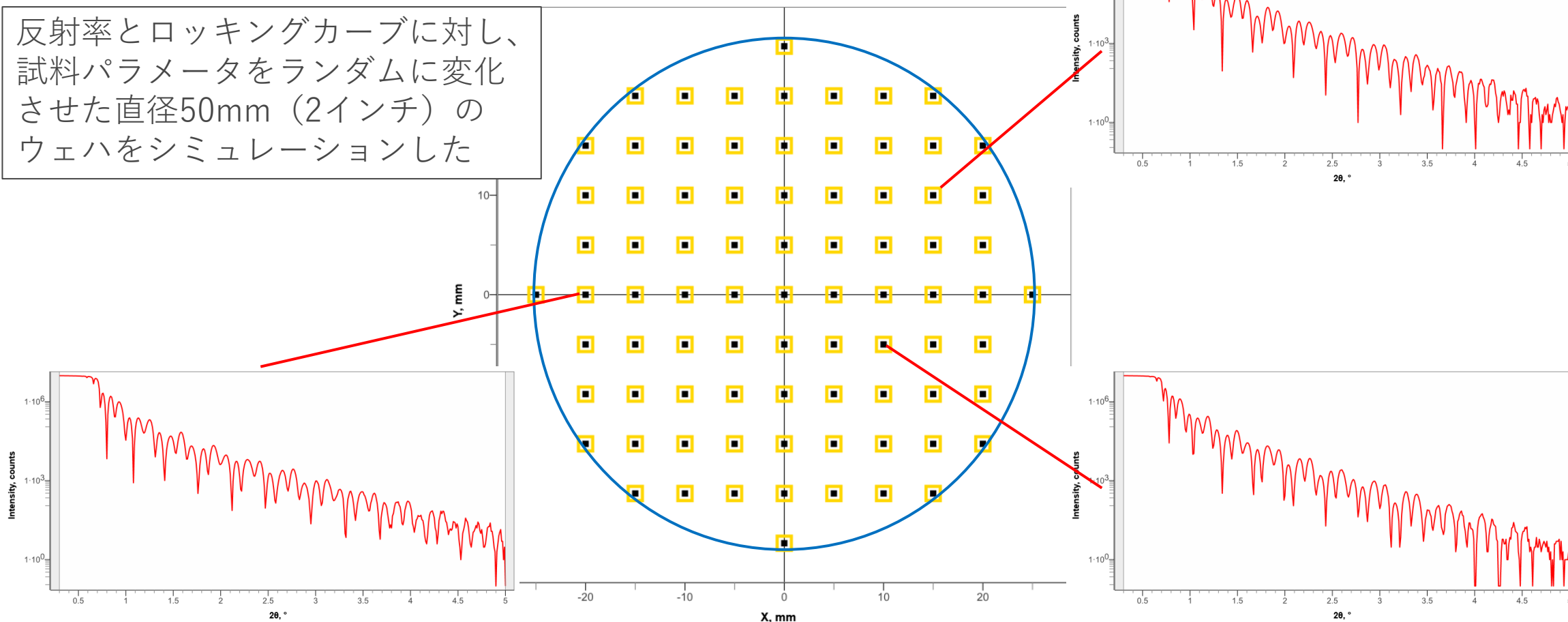
■ 学習データ

- データ件数 … 212,278件
- 学習時間 … 6時間（NVIDIA RTX A2000使用）

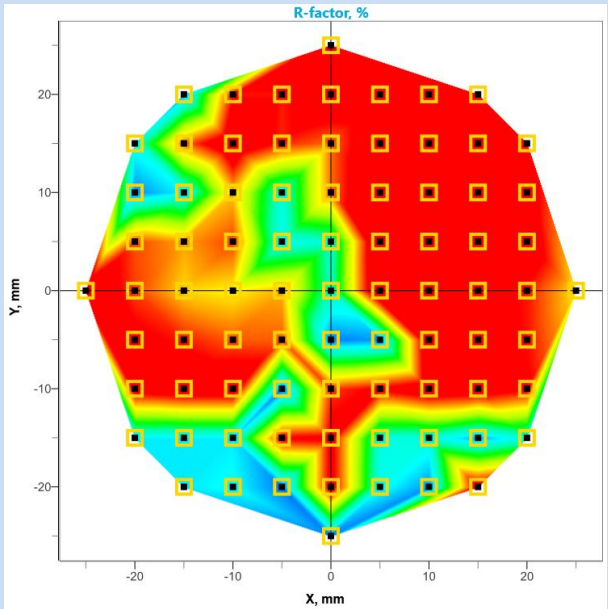
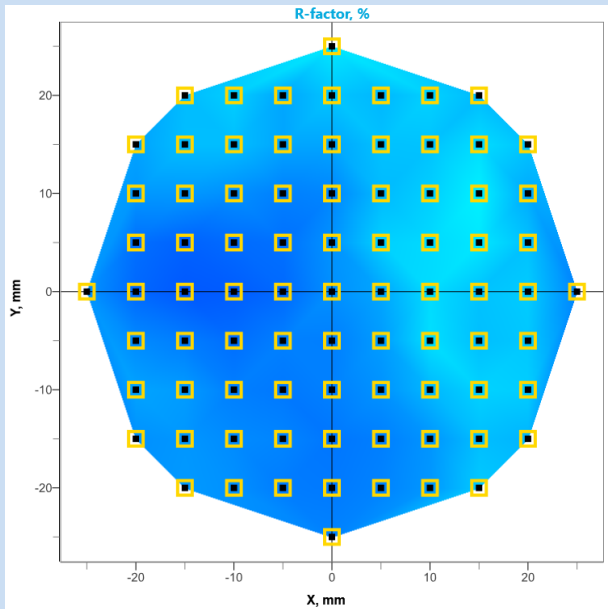
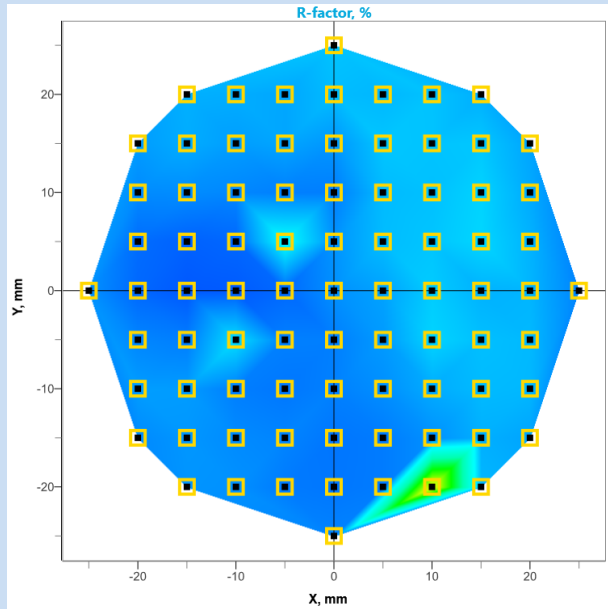
■ 評価データ … ウェハ上81点のシミュレーションマッピングデータ

評価用マッピングデータ

反射率とロックングカーブに対し、
試料パラメータをランダムに変化
させた直径50mm（2インチ）の
ウェハをシミュレーションした



評価結果 – 反射率

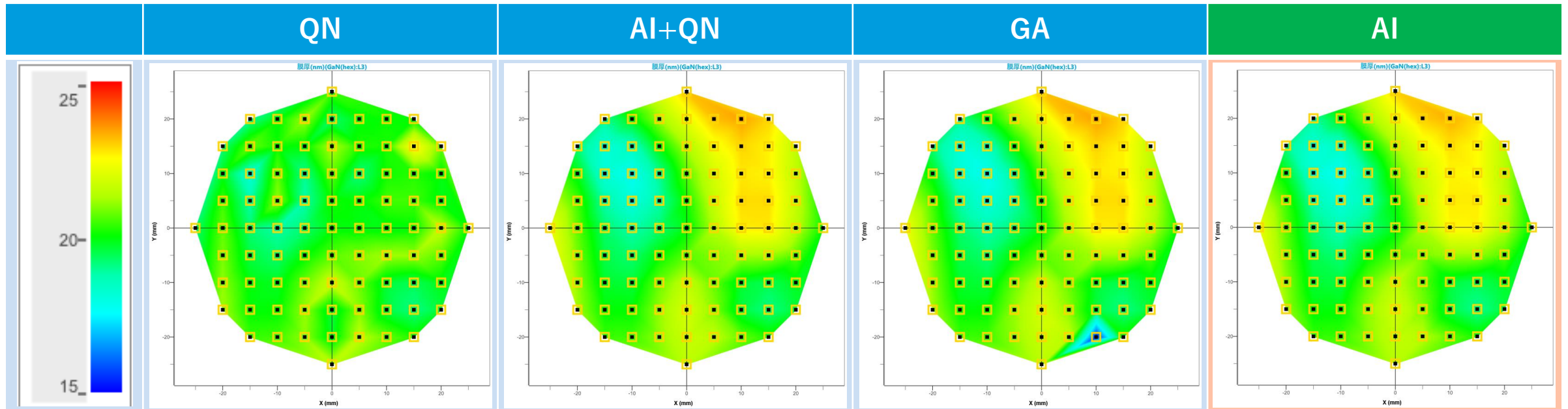
	QN	AI+QN	GA
時間	~1min	~1min	~7min
R因子	8.080%	1.588%	1.609%
			

→ AI+QNでは、短い解析時間で、ほぼ完璧な結果が得られた

マップ全面が青 ⇔ 全点で $R=0$

評価結果 – 反射率

- 解析結果：3層目の膜厚 (nm)



- GAでフィッティングに失敗した点では、膜厚の解析結果が極端に外れている
- AIによる推論値は、AI+QNの最終的な結果に近い

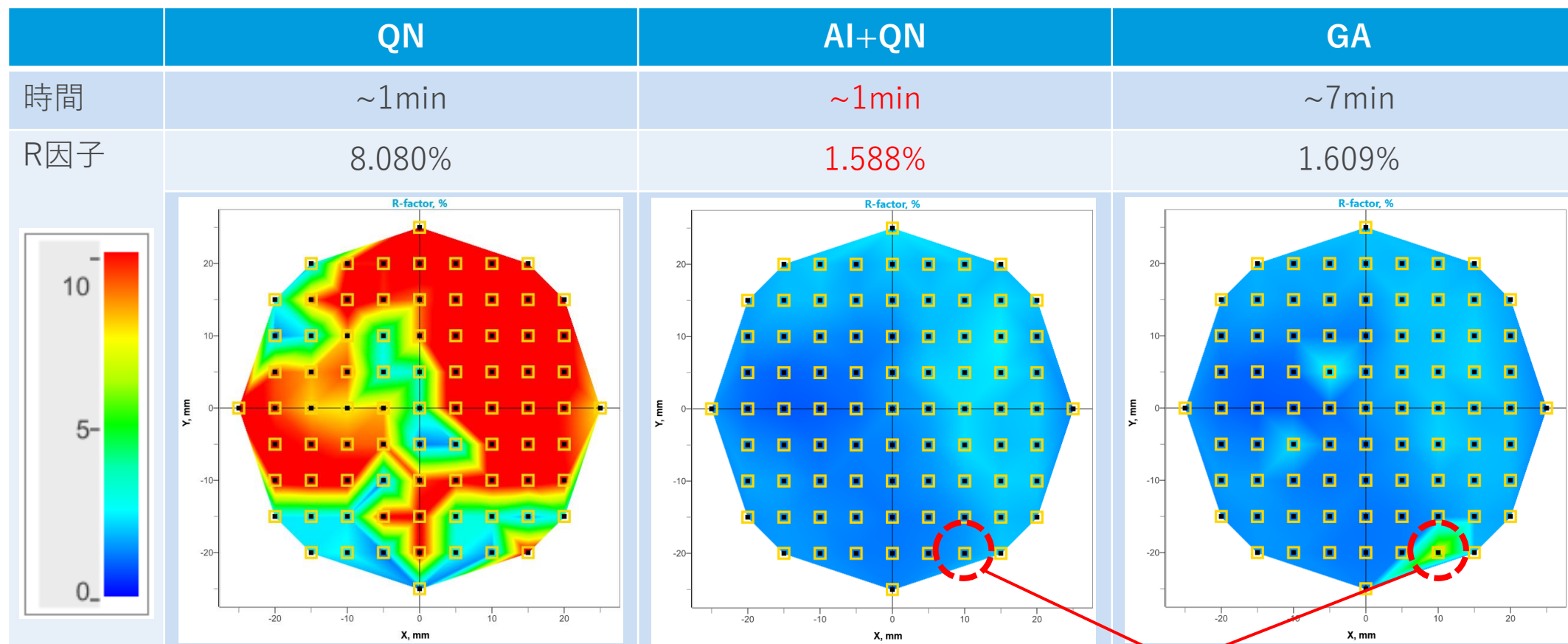
評価結果 – 反射率

- 各試料パラメータに対する平均絶対誤差 (MAE)

		QN	AI+QN	GA	AI*
層3: GaN(hex)	膜厚 (nm)	0.790	0.005	0.072	0.071
	粗さ (nm)	0.031	0.005	0.006	0.010
層2: AlN(hex)	膜厚 (nm)	2.967	0.006	0.072	0.105
	粗さ (nm)	0.108	0.005	0.009	0.015
層1: InN(hex)	膜厚 (nm)	1.724	0.016	0.252	0.099
	粗さ (nm)	0.215	0.011	0.010	0.023
基板: GaN(hex)	膜厚 (nm)	-	-	-	-
	粗さ (nm)	0.185	0.021	0.026	0.035
R因子 (%)		8.080	1.588	1.609	3.851

*AIはR因子でなく、試料パラメータに対するMAEを最小化するように学習している

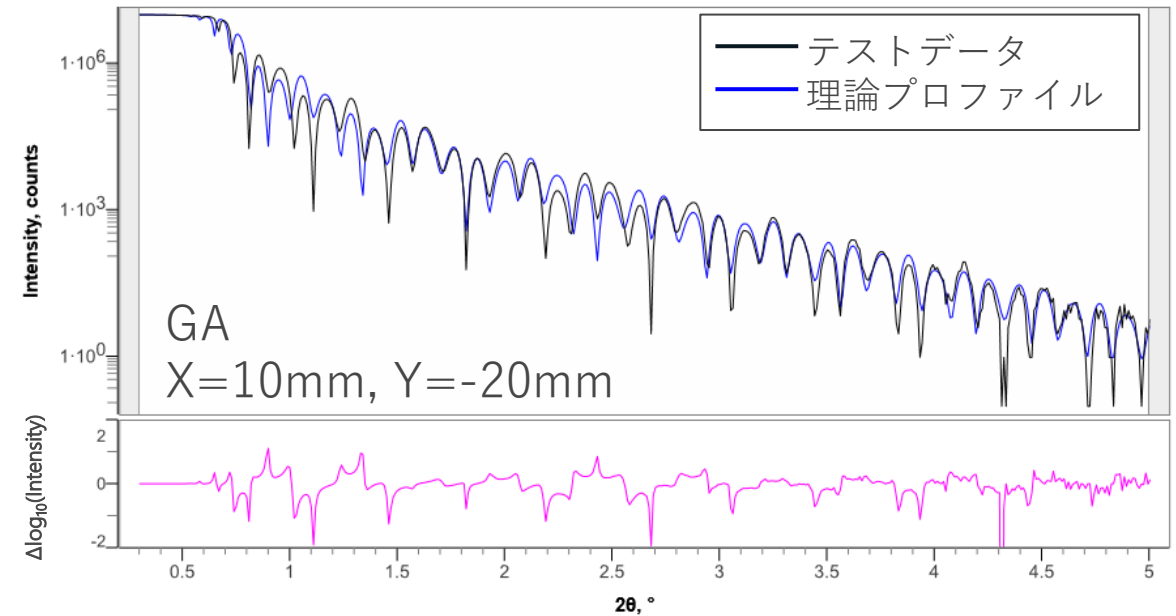
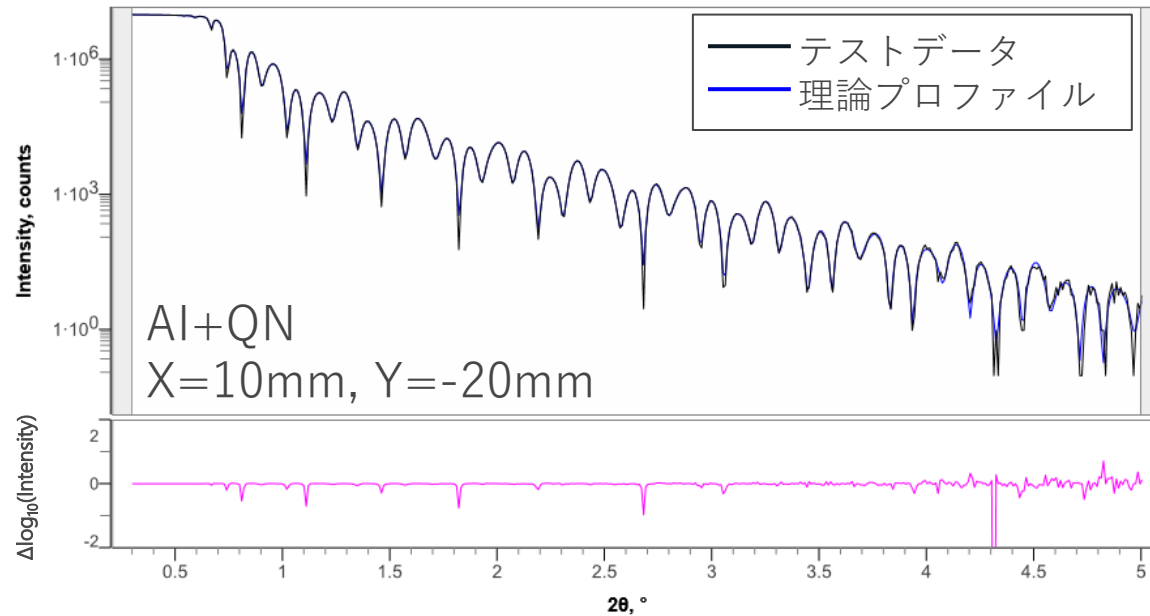
評価結果 – 反射率



このデータを比較

評価結果 – 反射率

- GAでは、一部のデータで局所解に陥ってしまうケースが確認された
- それらのデータに対しても、AI+QNではフィッティングに成功した



評価データ – 高分解能ロックングカーブ

■ 試料モデル（設計値 ± 学習範囲）

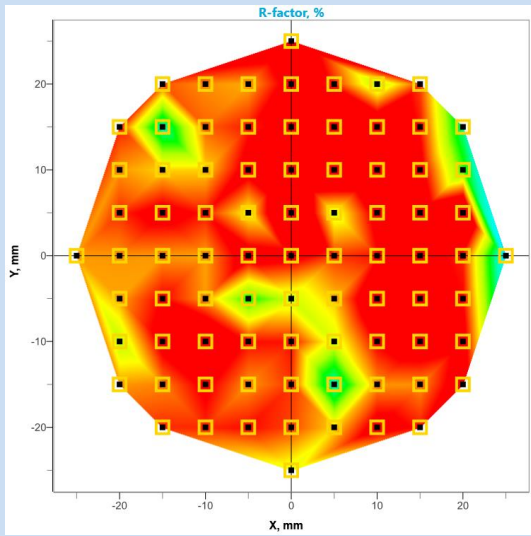
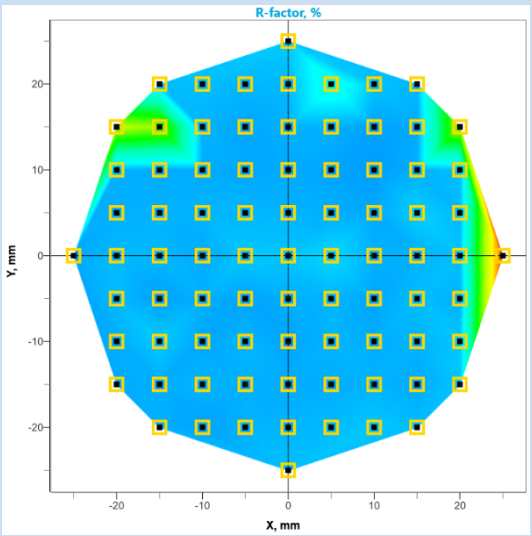
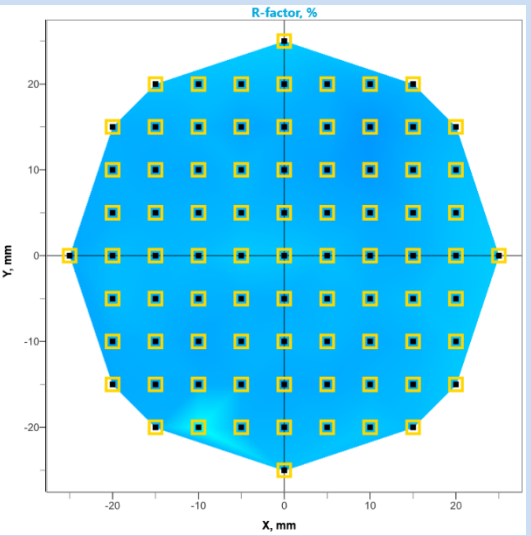
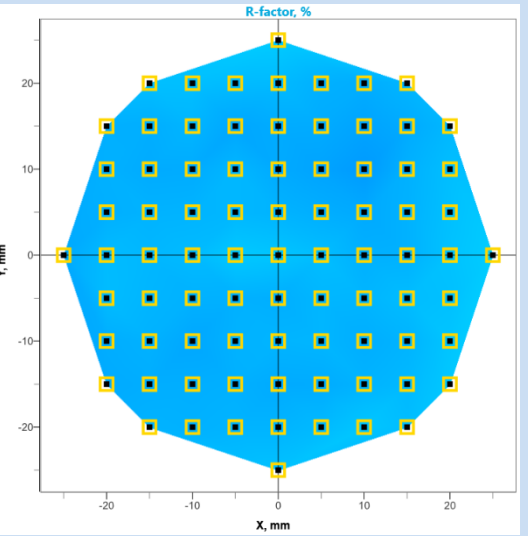
	材料	膜厚 (nm)	組成比	反射
層3	GaAs	50 ± 10	-	0 0 4
層2	In _x Ga _{1-x} As	150 ± 30	0.15 ± 0.05	0 0 4
層1	Al _x Ga _{1-x} As	70 ± 14	0.35 ± 0.05	0 0 4
基板	GaAs (001)	-	-	0 0 4

■ 学習データ

- データ件数 … 139,800件
- 学習時間 … 11時間（NVIDIA RTX A2000使用）

■ 評価データ … ウェハ上81点のシミュレーションマッピングデータ

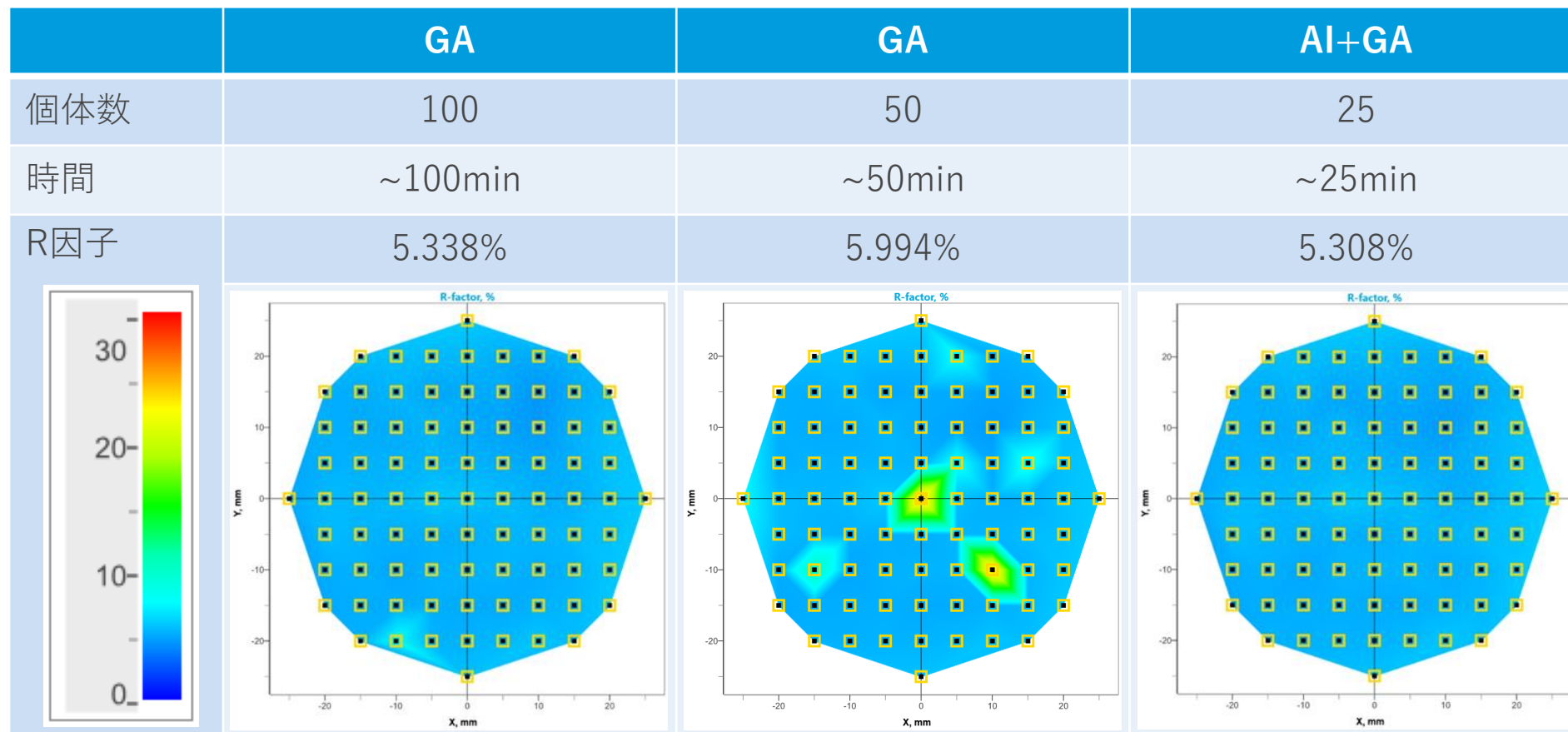
評価結果 – 高分解能ロッキングカーブ

	QN	AI+QN	GA	AI+GA
時間	~25min	~25min	~100min	~25min
R因子	27.866%	6.150%	5.338%	5.308%
				

→ AI+QNの結果は完璧でなかったが、
AI+GAではGA単体より短時間で最良の結果が得られた

マップ全面が青 ⇔ 全点で $R=0$

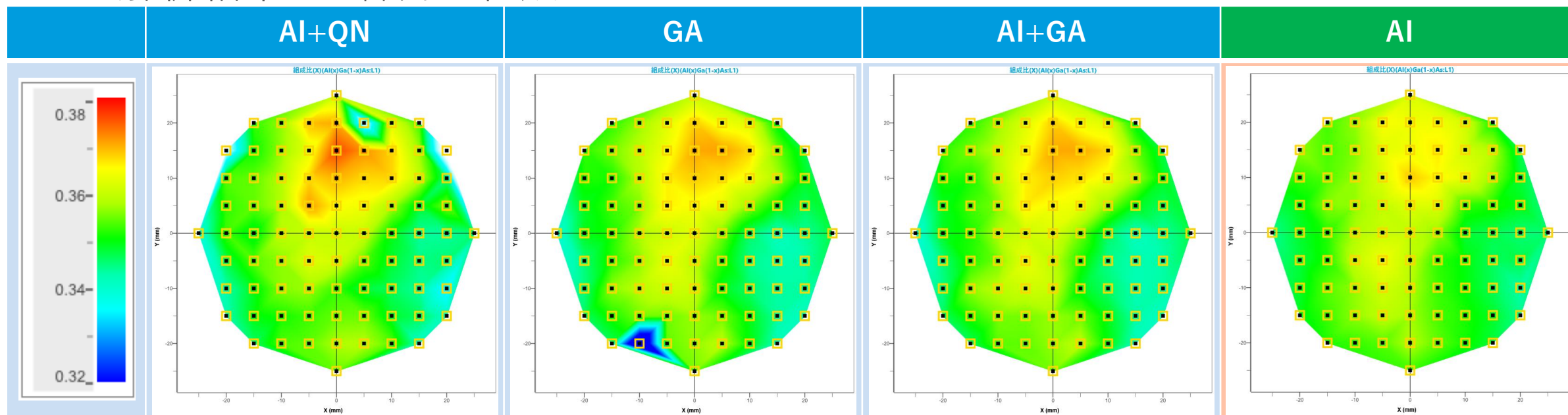
評価結果 – 高分解能ロッキングカーブ



→ AIによる初期値をGAに適用することで、個体数（ $\propto$ 解析時間）を1/4に削減できる

評価結果 – 高分解能ロッキングカーブ

■ 解析結果：1層目の組成比



- AI+QNとGA単体では、それぞれ組成比の解析結果が誤っている点が見られる
- このデータセットでは、組成比の違いによるR値の差が小さく、大域解を見つけにくかった

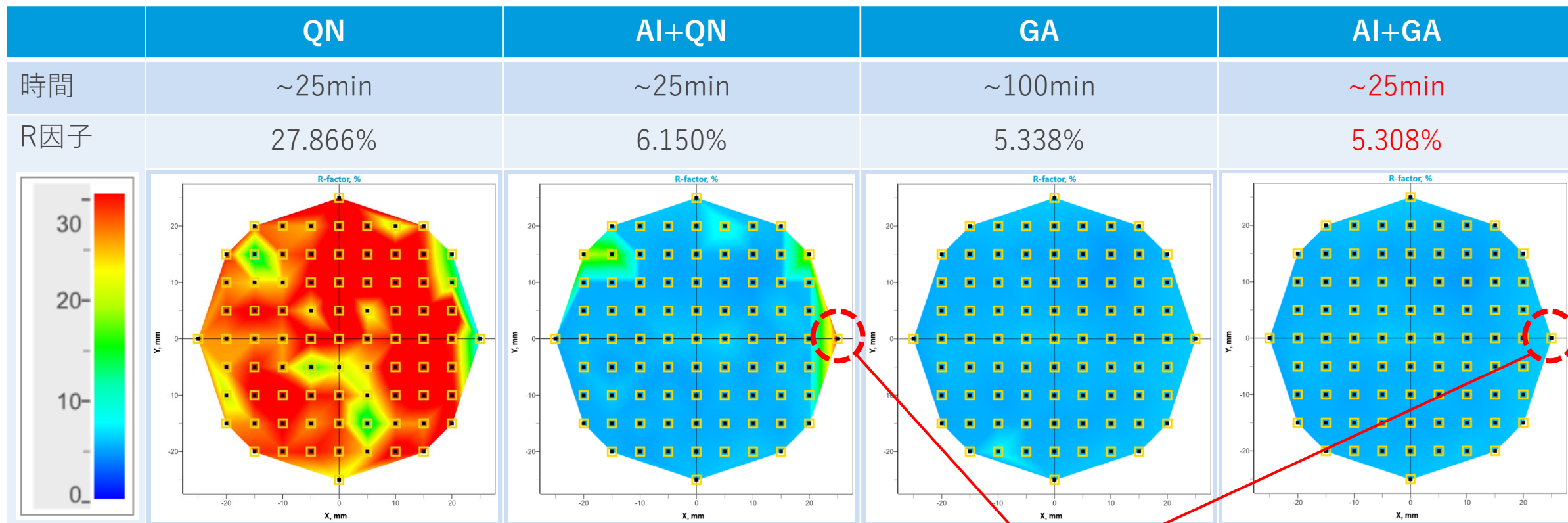
評価結果 – 高分解能ロックングカーブ

- 各試料パラメータに対する平均絶対誤差 (MAE)

		QN	AI+QN	GA	AI+GA	AI*
層3: GaAs	膜厚 (nm)	1.822	0.039	0.018	0.017	0.068
	組成比	-	-	-	-	-
層2: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	膜厚 (nm)	4.602	0.086	0.006	0.006	1.164
	組成比	0.0092	0.0001	0.0000	0.0000	0.0003
層1: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	膜厚 (nm)	2.232	0.172	0.217	0.060	0.185
	組成比	0.0340	0.0037	0.0019	0.0013	0.0016
基板: GaAs (001)	膜厚 (nm)	-	-	-	-	-
	組成比	-	-	-	-	-
R因子 (%)		27.866	6.150	5.338	5.308	16.405

*AIはR因子でなく、試料パラメータに対するMAEを最小化するように学習している

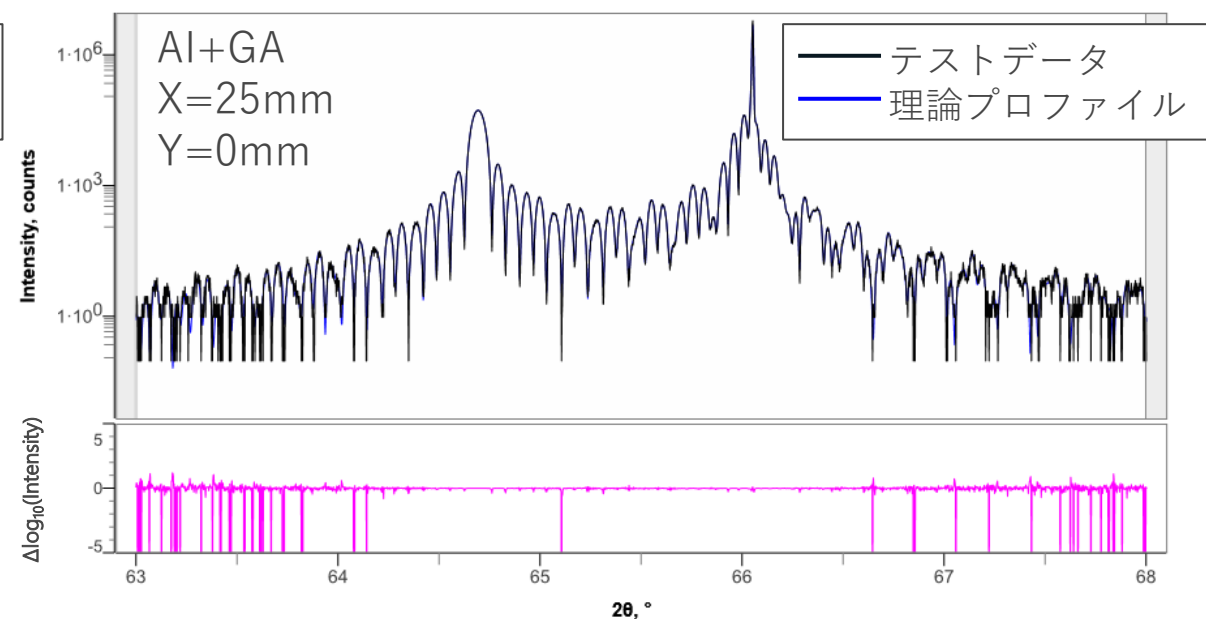
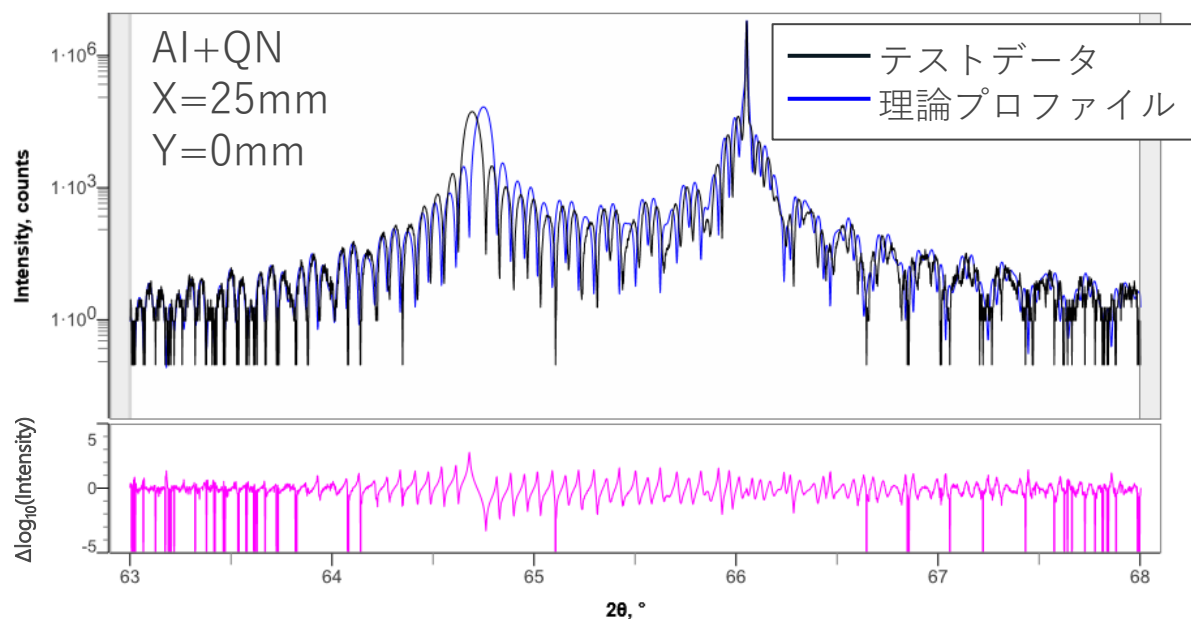
評価結果 – 高分解能ロッキングカーブ



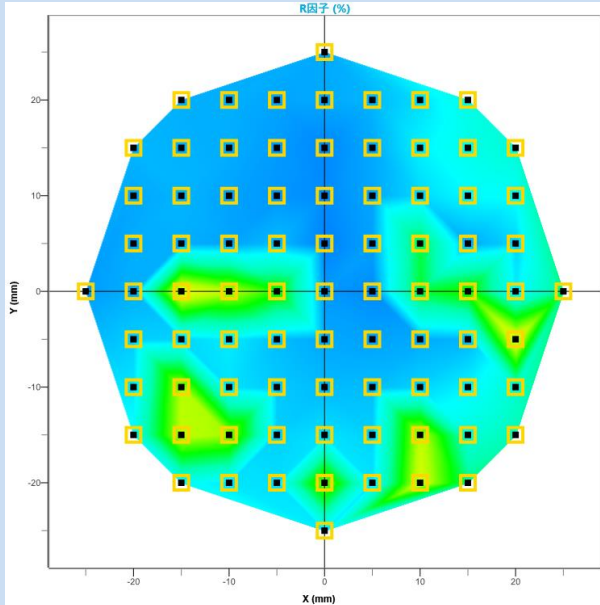
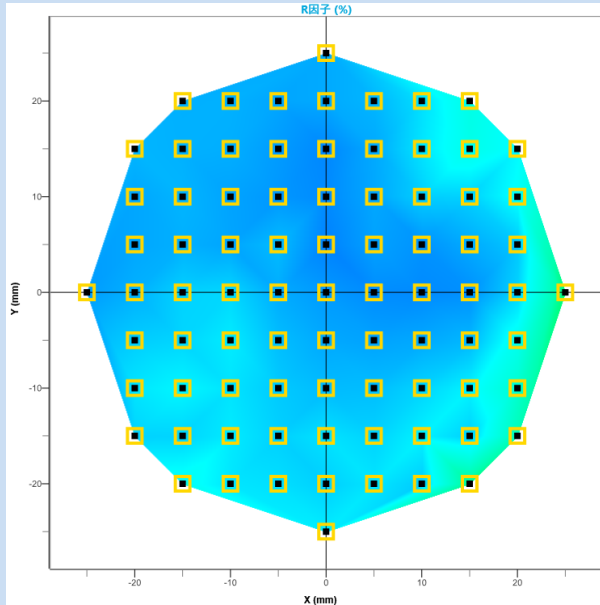
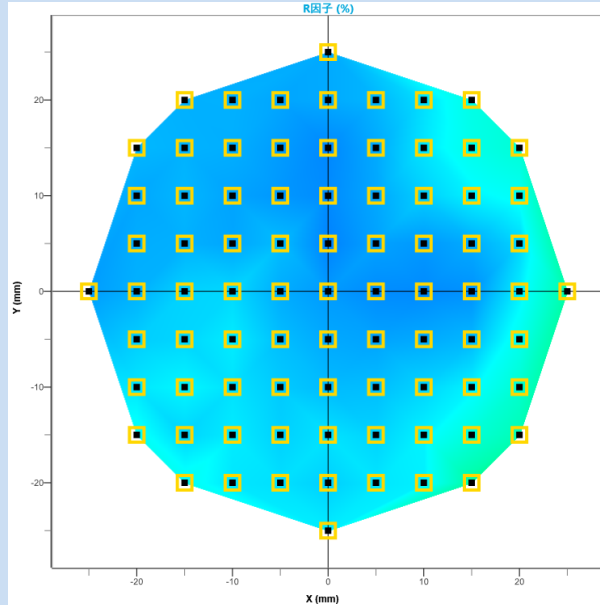
このデータを比較

評価結果 – 高分解能ロッキングカーブ

- プロファイルの振動の周期が短く、収束半径が小さかった
→ 一部のデータで、AIはQNに対して十分「良い」初期値を与えられなかった
- AIによる初期値をGAに適用することで、短時間でのフィッティングに成功



超格子の反射率解析

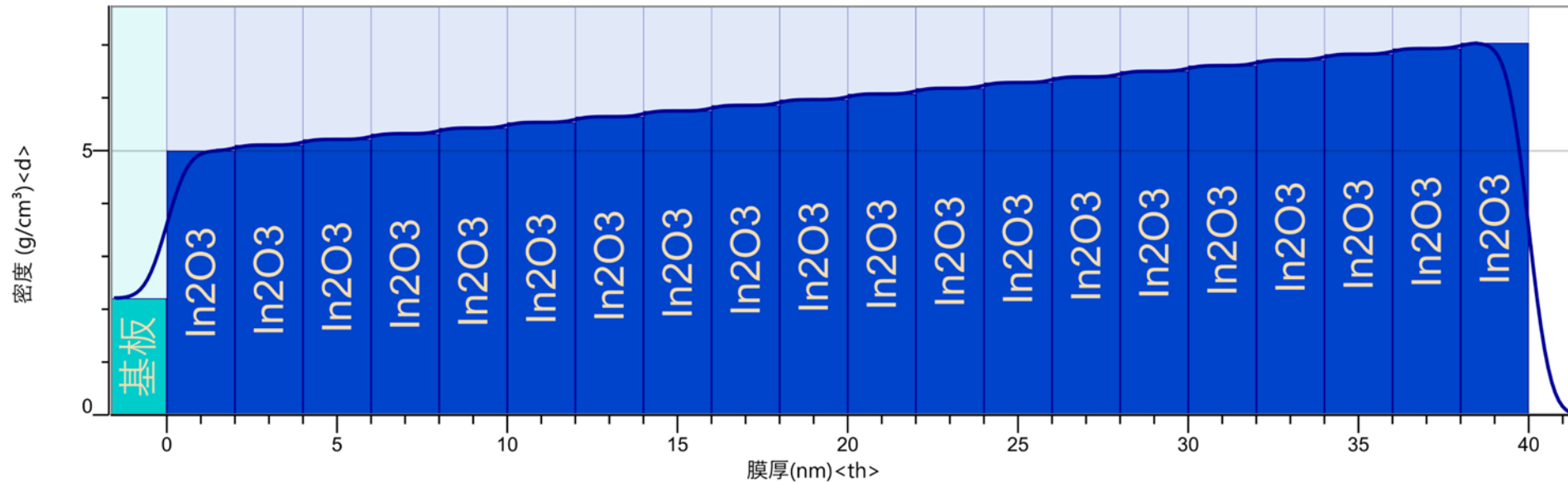
	QN	AI+QN	GA
時間	~7min	~6min	~11min
R因子	2.710%	2.016%	2.058%
			

→ 通常の試料ほどではないが、解析時間短縮の効果が得られた

マップ全面が青 ⇔ 全点で $R=0$

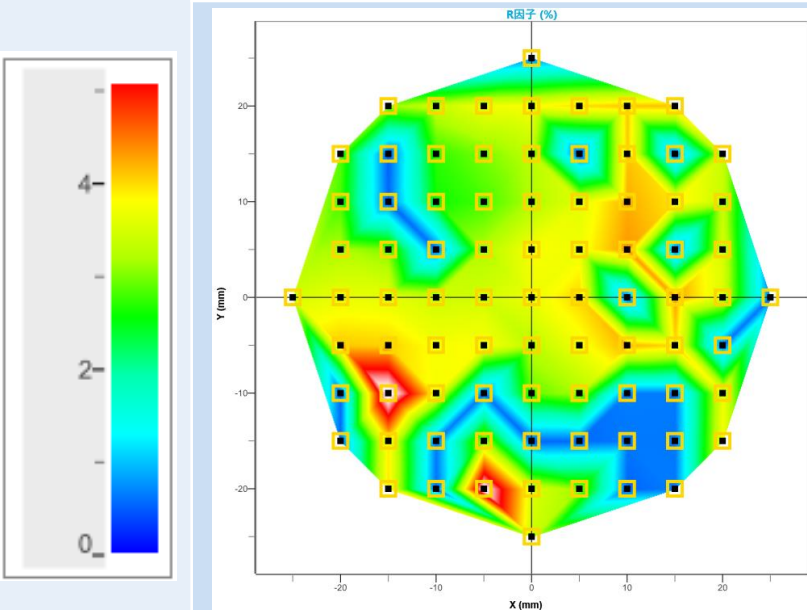
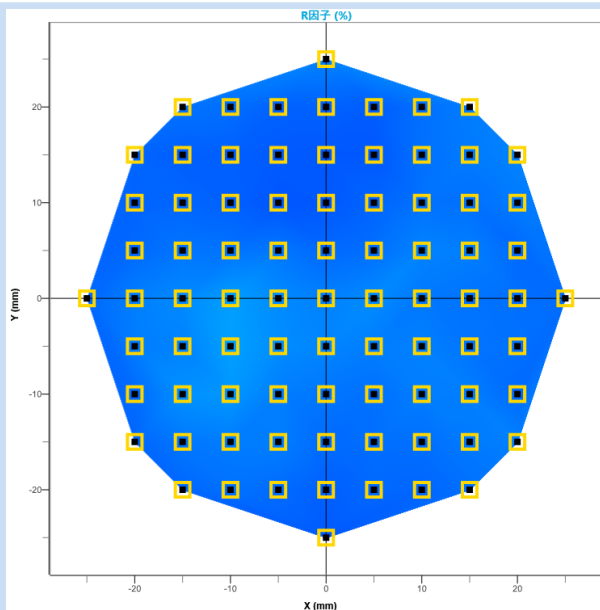
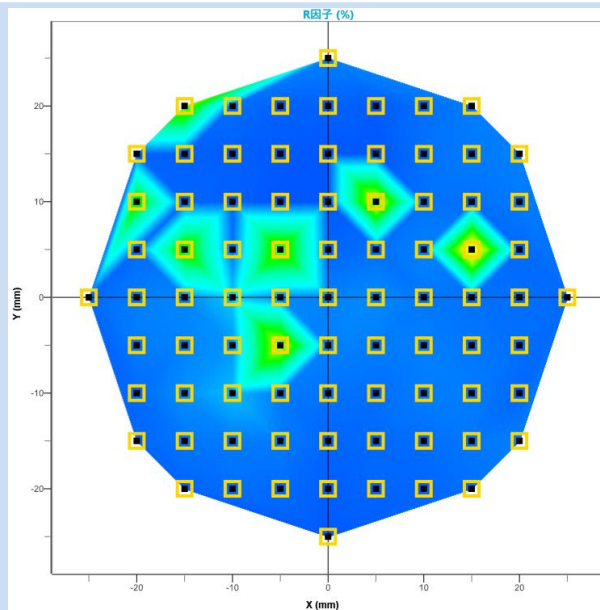
密度勾配がある試料の反射率解析

		材料	膜厚 (nm)	粗さ (nm)	密度 (g/cm ³)
層1 (上層)	20分割	In ₂ O ₃	40 ± 12	0.5 ± 0.5 -0.4	7.04 ± 0.00 -2.04
層1 (下層)					5.00 ± 0.00 -2.00
基板		Glass	-	0.5 ± 0.5 -0.4	2.21



密度勾配がある層を、
20分割して近似

密度勾配がある試料の反射率解析

	QN	AI+QN	GA
時間	~7min	~3min	~8min
R因子	2.722%	0.563%	0.792%
			

→ AI+QNでは、短い解析時間で、ほぼ完璧な結果が得られた

マップ全面が青 ⇔ 全点で $R=0$

まとめ

- X線反射率・高分解能ロッキングカーブの解析における、AIによるフィッティング初期値推定を紹介
 - ブランチ構造を持つ畳み込みニューラルネットワークを使用
 - 学習はシミュレーションデータにより実施
 - AI+QNにより、GAよりも短い解析時間で、より良い結果を得られた
 - AI+QNでは完璧な結果が得られないケースでも、AIによる初期値をGAに適用することで、解析時間を短縮できた
 - 超格子や深さ方向にパラメータ勾配があるなど、複雑な試料にも適用可能
- **AIによりX線薄膜解析のハイスループット化が可能**

製品紹介 – AIを用いた解析機能

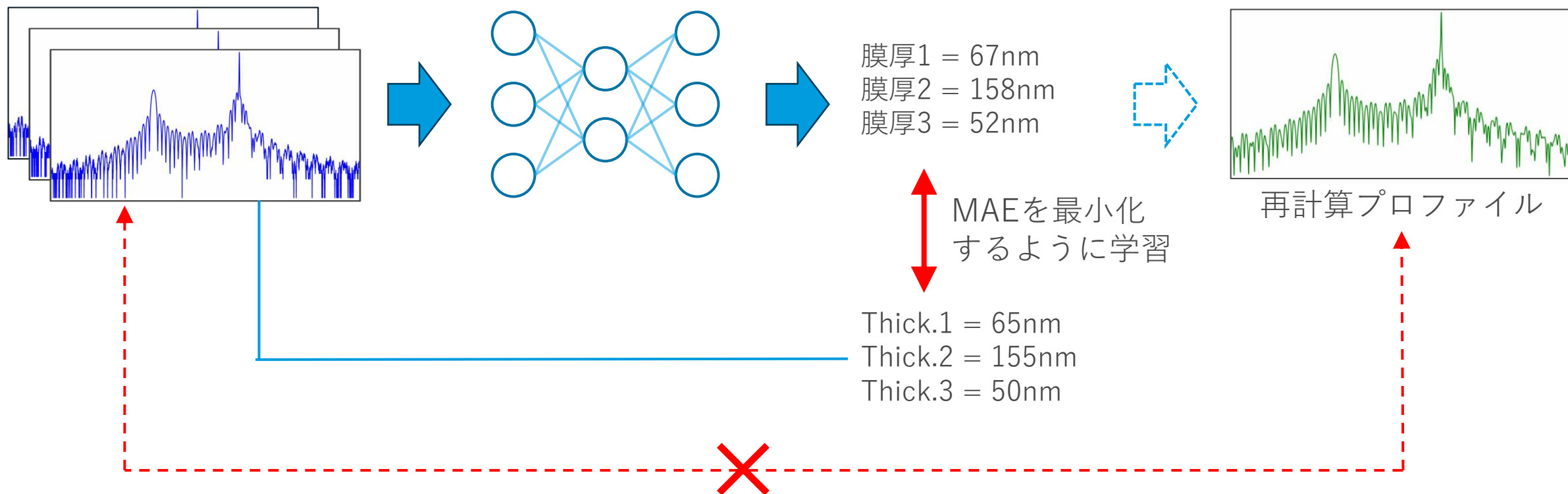
- AI搭載 薄膜解析初期値推定
 - AI初期値推定により、反射率・ロッキングカーブ解析の高速化を実現
- AI搭載 粉末XRD結晶相同定
 - AIにより、従来法を超える正確な結晶相同定を実現
- AI搭載 リートベルト解析初期値推定
 - AI初期値推定により、粉末XRDのリートベルト解析の高速化を実現



Appendix

AIの学習

■ なぜAIはR因子を知らないか？



AIにR因子を学習させるためには、入力・再計算プロファイル間の残差が最小となるようにDNNを最適化する必要がある。しかし、これは計算コストが高く実用的でない。



リガクウェブサイトの右上のボタン 「専門家に相談する」より お問い合わせください



何をおさがしですか？



日本語

専門家に相談する



製品

産業分野

分析手法

参考資料

修理・サポート

リガクについて

見るチカラで、世界を変える

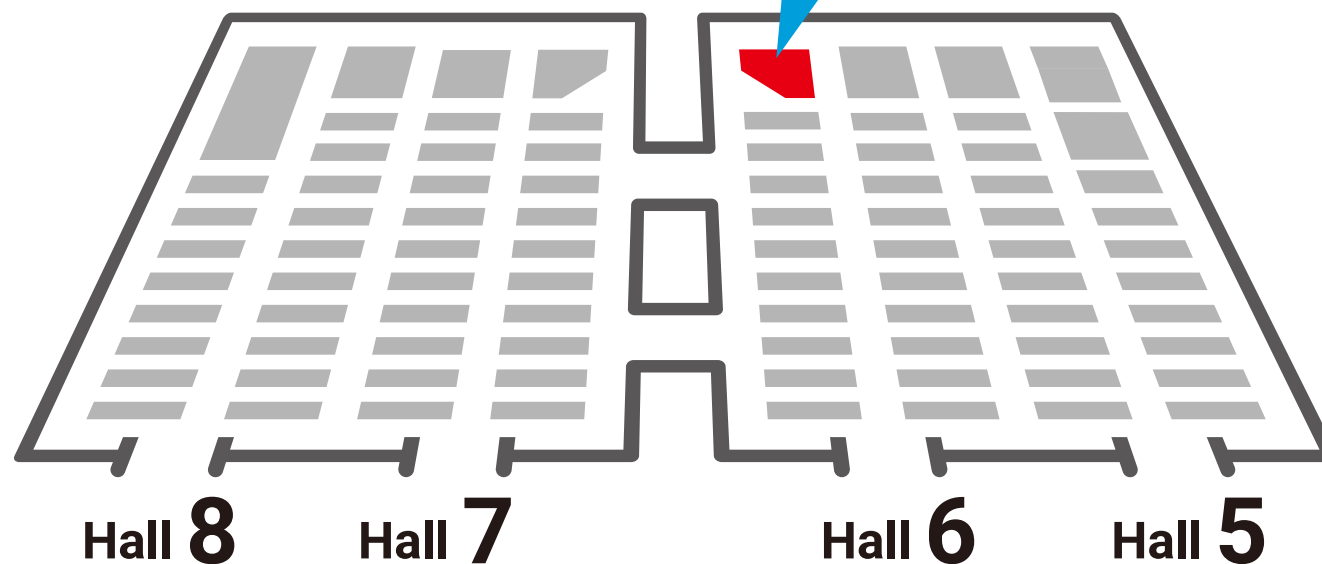
すべての製品をみる

リガクHDについて知る

材料分析の難しさを
理解しているから
わたしたちリガクは提供したい



ぜひ、リガクブースへ
お立ち寄りください！



 Rigaku

6 ホール 入って直進！

6B-1001

