

単層グラフェンの透過 THz 波の主成分解析評価及び機械学習の適用

日大 生産工（院） ○趙 立民

徳島大院 先端技術科学教育部 山内 俊

徳島大院 社会産業理工学研究部／徳島大 ポスト LED フォトニクス研究所 柳谷 伸一郎

徳島大院 社会産業理工学研究部 大野 恭秀

徳島大院 社会産業理工学研究部 永瀬 雅夫

日大 生産工 南 康夫

1. まえがき

テラヘルツ時間領域分光法 (THz-TDS) は、周波数 $0.1 \sim 10$ THzの電磁波を用いて物質の分光特性を非破壊で調べる技術である。この技術は、材料内部の特性評価や電子デバイスの特性解析、生体組織の分析など、様々な応用分野で注目されている。特にTHz波は、電磁波の透過性と光の直進性を有するため、従来の評価手法では得られなかった新たな視点から材料を評価できる特徴がある。

グラフェンは、炭素原子が六角形に結合した2次元のハニカム構造を持つ材料であり、極めて高い導電性、強度、柔軟性を備えている。これにより、エレクトロニクス、センサー、エネルギー貯蔵デバイスなど、幅広い応用が期待されている。特に単層グラフェンは、その特異な電子構造がTHz波領域においても興味深い物理的特性を示すため、THz-TDSを用いた評価は、グラフェンの新たな側面を明らかにする有効な手段と考えられている。

一方、材料の評価や分類には、近年、機械学習技術が広く用いられている。機械学習は、大量のデータをもとに規則性やパターンを学習し、新しいデータを分類・予測する技術である。特に主成分解析 (PCA) やランダムフォレスト (Random Forest) は、分光データの解析や分類に有効であり、次元削減を通じてデータの隠れた特徴を抽出し、材料特性を効率的に評価することが可能である。

本研究の目的は、THz-TDSを用いて単層グラフェン¹⁾の透過特性を評価し、そのデータを基に機械学習アルゴリズムを適用することで、材料の分類を行うことである。さらに、得られた手法を他の分光技術、特にTHz-TDSを組み合わせることで、より多様な評価手法が期待される。

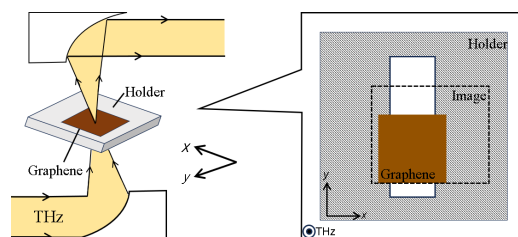


Fig. 1 Schematic of THz-wave transmission imaging arrangement.

2. 実験方法および測定方法

2.1 試料—単層グラフェン—

本研究で使用する試料は、SiC (炭化ケイ素) 基板上に成膜された単層グラフェンである。この試料は、徳島大学 永瀬・大野研究室でSiC基板を高温で熱分解することによって作製した^{2,3)}。試料のサイズは $10 \times 10 \text{ mm}^2$ である。

Van der Pauw法により試料のキャリア移動度とキャリア密度が測定したところ、キャリア移動度は $328 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 、シートキャリア密度は $5.13 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ であった。

2.2 THz波透過イメージング

THz波透過特性の測定には、市販のTHz-TDS装置 (TAS7500TS, Advantest) を用いた。試料を専用のホルダーにセットし、透過型の測定モードで実験を行った (Fig. 1)。測定は 1 mm 間隔で 15×15 点の格子状に設定し⁴⁾、各点におけるTHz波の時間領域波形を取得した。時間領域波形データをそれぞれフーリエ変換して各測定点でのパワースペクトルを算出した。

2.3 解析

上述の方法で得られた 15×15 点の波形を読み込み、フーリエ変換してパワースペクトル

PCA Evaluation of Transmitted THz Waves in Single Layer Graphene and Application of Machine Learning

Limin ZHAO, Suguru YAMAUCHI, Shin-ichiro YANAGIYA, Yasuhide OHNO, Masao NAGASE, and Yasuo MINAMI

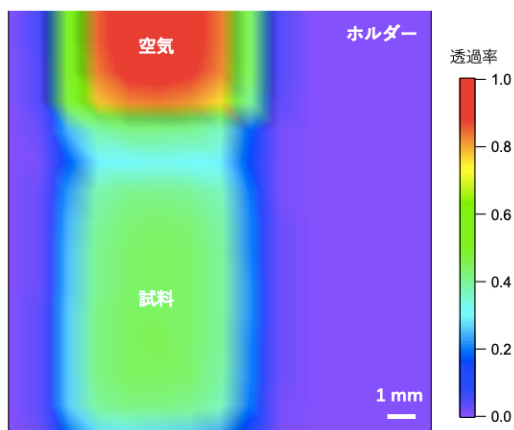


Fig. 2 Transmission THz image of graphene on SiC substrate.

を求め、対象とする周波数のパワーを算出する。空気のみを透過してきたTHz波のパワーで規格化して、試料のTHz波の透過率を算出し、試料全体の透過イメージを得た。

それぞれの点のパワースペクトルをPCAによって評価した。THz波の透過してきた点(ホルダー、乾燥空気、グラフェン、それぞれの中間領域)をそれぞれ色分けしてプロットしたところFig. 3のようになった。ホルダー、乾燥空気、グラフェンのみの点は集中し、中間領域でそれぞれ分散している。

2.4 機械学習の適用

2.3で得られた結果により、ランダムフォレスト (Random Forest) アルゴリズムを使用して分類モデルを構築した。データを訓練データとテストデータに分割し、THz波透過率データに基づいて分類を行ったところ、空気、ホルダー、グラフェンの各材料が高い精度で分類されることが確認された。各材料の分類結果は異なる色でプロットされ、材料ごとの明確な区別が視覚的に確認できた。

さらに、試料別にPrecision (精度)、Recall (再現率)の数値が得られており、これにより、THz波透過データに基づく機械学習を用いた材料分類の有効性が実証された。

3. 結果と考察

3.1 THz波透過イメージング

それぞれの位置でのTHz波のパワーを計算した。パワーが最大となったのは空気のみを透過してくる位置であった。この最大値でイメージ全体を規格化して得られたTHz波の透過率をイメージ化したものをFig. 2に示す。左端と

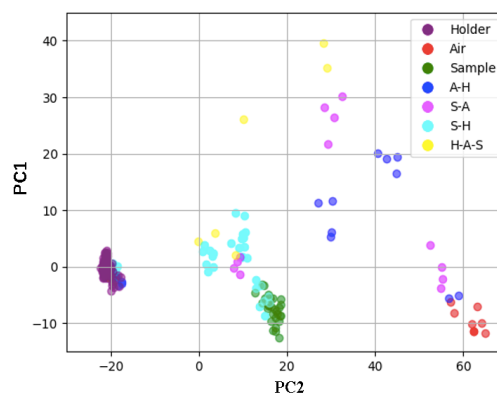


Fig. 3 PCA results at each point of THz imaging shown in Fig. 2. Abbreviations mean the intermediate regions between air and holder (A-H), sample and air (S-A), sample and holder (S-H), and holder, air, and sample (H-A-S), respectively.

右端に見られる透過率の低い領域は、金属製ホルダーがありTHz波が透過しない領域である。

3.2 主成分解析

各点で得られた周波数スペクトルの主成分解析を行い、225点をプロットしたものをFig. 3に示す。ホルダー、グラフェン、空気それぞれの領域を透過してきた点は集中し、2つ以上の領域を透過してきた点は分散していることがわかった。

3.3 機械学習による分類結果

ランダムフォレストを用いた機械学習による分類モデルの結果をFig. 4に示す。空気(赤)、

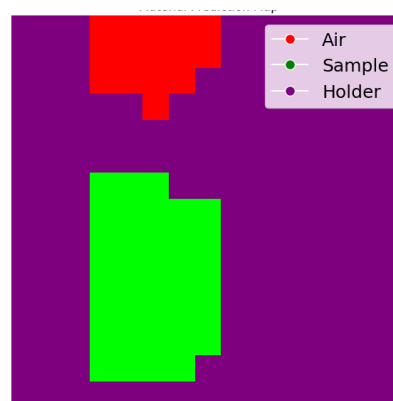


Fig. 4 Visualization of sample discrimination by machine learning (purple for the holder, red for the air, and green for the graphene).

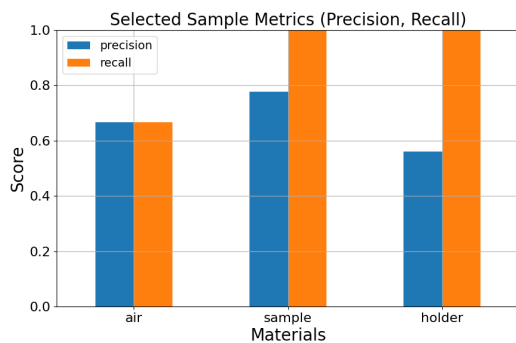


Fig. 5 Accuracy of each sample in machine learning.

ホルダー（紫）、グラフェン（赤）が視覚的に確認できる。

機械学習による分類での精度(Precision)、再現率(Recall)の数値をFig. 5に示す。特にグラフェンの分類においての精度が高いことが確認された。この結果は、THz-TDSで得られたデータを機械学習して試料が判別できることを示唆している。

THz波透過イメージングによる測定結果(Fig. 2)と機械学習による予測結果(Fig. 4)を重ねたものをFig. 6に示す。上述のように、機械学習による予測結果は、空気（赤）、ホルダー（紫）、グラフェン（赤）の領域はよく測定結果を再現しているが、空気と試料の間など、それぞれの領域の中間の領域は機械学習によってホルダーと認識されている。これは、教師データの数と種類が少ないことが原因だと考えられる。

以上により、本研究で用いた機械学習のモデルがTHz波のデータに基づいて材料を判定可能と期待される。

4. まとめ

本研究では、市販のTHz-TDS装置を用いて単層グラフェンの透過特性を評価し、得られたデータを基に機械学習アルゴリズムを適用して材料の分類を試みた。

まず、THz-TDSによりグラフェンの透過率が他の材料と顕著に異なることを確認し、主成分解析(PCA)によって材料の特性を視覚的に捉えた。PCAによってホルダー、空気、グラフェンの各材料を分離し、THz波透過特性を基に材料評価が有効であることを示した。さらに、ランダムフォレストを用いた機械学習モデルによる分類では、精度、再現率からホルダー、空気、グラフェンを分類した。THz波透過イメージングの測定結果と機械学習による予測結

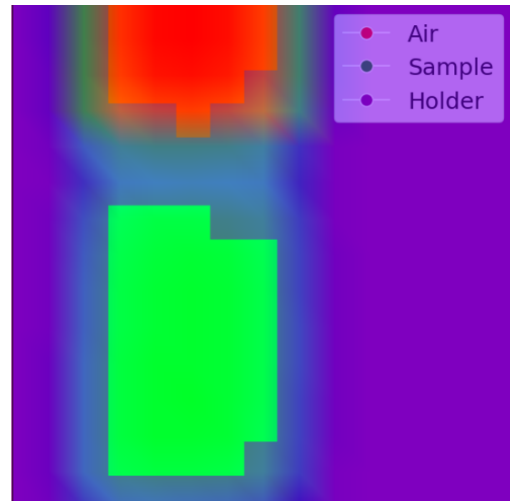


Fig. 6 Comparison of measured results from THz wave transmission imaging and predicted results from machine learning (purple for the holder, red for the air, and green for the graphene).

果を比較し、それぞれの領域におけるTHz波の透過データに基づく機械学習モデルの有効性を示した。

本研究の結果は、THz-TDSを用いた材料評価が機械学習と組み合わせることで、より効率的な材料分類が可能であることを示している。また、今回使用した手法は、THz波透過データだけでなく、ラマン分光法など他の分光法にも応用可能であり、THz-TDSとラマン分光法を組み合わせることで、より多角的な材料評価が可能になると考えられる。

参考文献

- 1) K. S. Novoselov *et al.*, Science **306**, 666 (2004).
- 2) K. Kobayashi *et al.*, Appl. Phys. Express **8**, 036602 (2015).
- 3) T. Aritsuki *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 06GF03 (2016).
- 4) S. Yamauchi *et al.*, Japan Society of Applied Physics Autumn Meeting 22p-P02-7, Proceedings p. 03-453 (2022) (in Japanese).