

単層グラフェンの透過 THz 波データを用いた機械学習への応用

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

近年のテラヘルツ時間領域分光法(THz-TDS)は、周波数0.1 – 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。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。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。

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、そのデータをもと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。

2. 実験手法

2.1 試料

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10×10 mm²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 cm²/Vs、シートキャリア密度は 5.13×10^{12} cm⁻²であった。

2.2 THz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する。

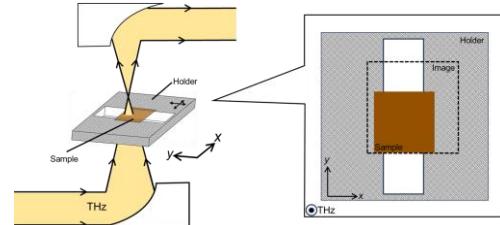


Fig.1 THz-TDS 透過システム

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る。

それぞれの点の時間波形をPCAによって評価する。THz波の透過してきた点(ホルダー、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する。

2.4 機械学習への応用

2.3で得られた結果により、ランダムフォレスト(Random Forest)、CNN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

Application of Single-Layer Graphene THz Wave Transmission Data to Machine Learning

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

タに基づいて分類を行う。空気、ホルダー、グラフェンの各領域を分類する。

3. 結果と考察

3.1 THz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。

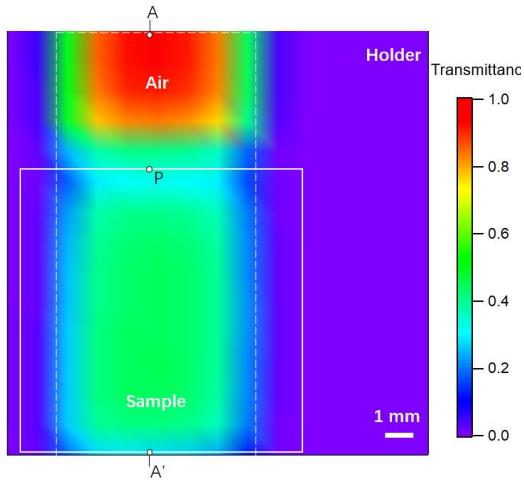


Fig.2 試料全体の透過イメージ

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。

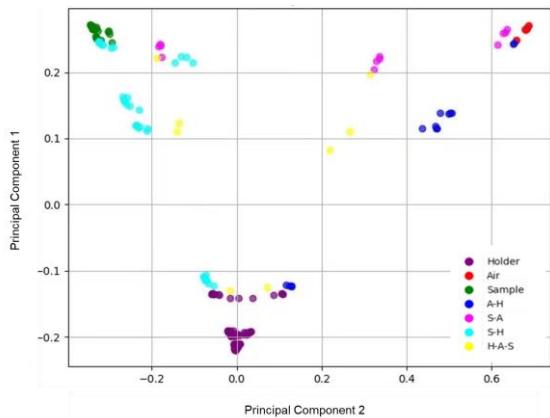


Fig.3 時間波形のPCA結果

3.3 機械学習による分類

3.2で得られた結果から、ランダムフォレスト(Random Forest)、CNNアルゴリズムを使用して分類モデルを構築し、測定データを空気、ホルダー、グラフェンの各領域を分類した。時間波形データ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)、ホルダー(紫)、グラフェン(赤)を示している。機械学習モデルを用いた分類での精度(Precision)、再現率(Recall)の数値をFig. 5に示す。いずれの領域の分類においても再現率、精度が高いことがわかる。

PCAの結果を、標準化を行わずに機械学習によって分類したものをFig. 6に示す。精度、再現率の数値をFig. 7に示す。PCAの結果を、標準化を行って機械学習によって分類したものをFig. 8に示す。精度、再現率の数値をFig. 9に示す。PCAの結果を利用して分類したものでは、空気、ホルダー、グラフェンの領域はよく測定結果を再現しているが、空気と試料の中間など、それぞれの領域の中間の領域は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。また、標準化の有無に依らず、グラフェンの分類においての精度が高いことがわかった。

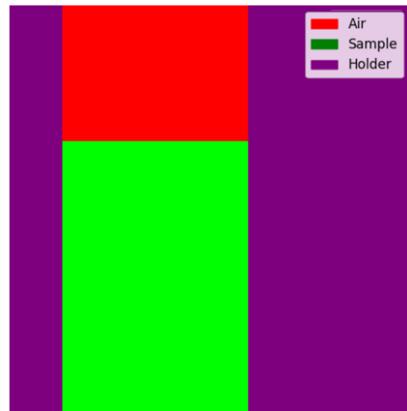


Fig.4 機械学習結果(時間波形データ)

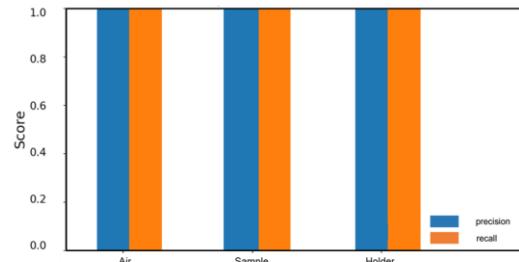


Fig.5 評価指標(時間波形データ)

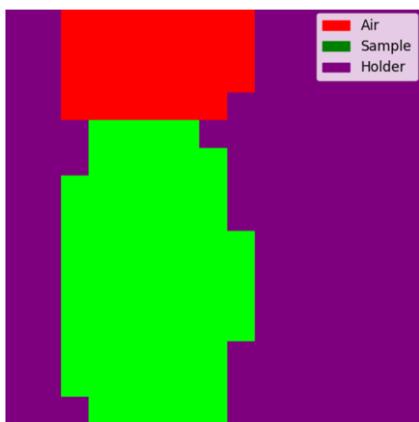


Fig.6 機械学習結果(PCA 標準化なし)

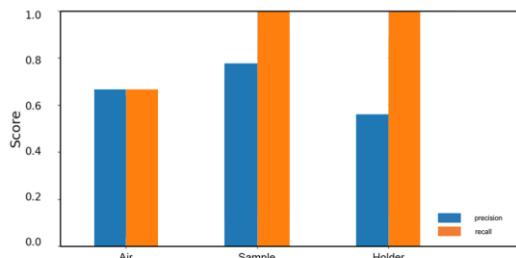


Fig.7 評価指標(PCA 標準化なし)

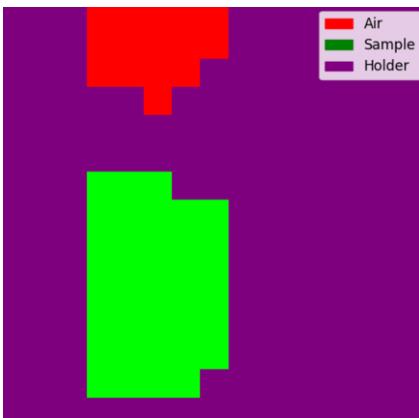


Fig.8 機械学習結果(PCA 標準化あり)

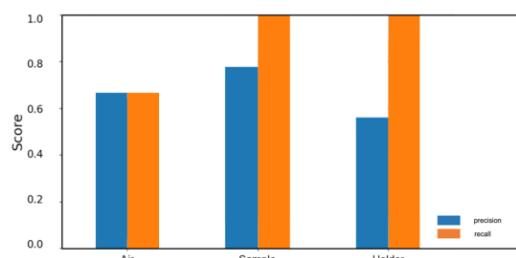


Fig.9 評価指標(PCA 標準化あり)

これらの結果から、THz-TDS で得られたデータを機械学習して試料を判別できることがわかった。

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、得られたデータをもとにPCAと機械学習アルゴリズムを適用した試料の分類を試みた。

PCAによってホルダー、空気、グラフェンの各試料を分離することができ、その有効性を示した。さらに、ランダムフォレスト及びCNN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、その有効性を示した。

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).