

機械学習による原子層バレー光物性の解析・予測手法の開拓

Machine learning analysis of opto-valley physics in atomically-thin semiconductors

京都大学 エネルギー理工学研究所

○田中 絢也, 八谷 健吾, Zhang Wenjin, 松田 一成, 宮内 雄平

Institute of Advanced Energy, Kyoto University

○Kenya Tanaka, Kengo Hachiya, Wenjin Zhang, Kazunari Matsuda, Yuhei Miyauchi

E-mail: tanaka.kenya.75c@st.kyoto-u.ac.jp

単層遷移金属ダイカルコゲナイド (1L-TMDCs) は、低温下で円偏光 (σ_+ , σ_-) を用いて特定のバレー (+K, -K) に励起子を選択的に励起することが可能な原子層半導体である[1]。近年、バレー自由度を情報キャリアとして利用するオプトバレートロンクスへの応用可能性が注目を集めている[2,3]。1L-TMDCs は比表面積の大きい2次元物質であるため、そのバレー光物性は、局所的な欠陥、ひずみ、キャリア密度、表面分子吸着などの影響を受けやすく、場所ごとに大きくゆらぐ。このような不均一性の存在は応用上問題であり、広範囲に渡って均一なバレー光物性を示す試料の実現が望まれている。しかしながら、現状では、不均一性をもたらす主要因は十分に明らかになっておらず、まずその原因の特定が強く求められている。

本研究では、代表的な1L-TMDCsである1L-WSe₂について、室温(300 K)および低温(15 K)の条件下で偏光分解フォトルミネッセンス(PL)スペクトルの空間マッピング測定を行った。まず、再結合時のPLの各円偏光成分の強度(I_{σ_+} , I_{σ_-})から、励起子のバレー情報の保持性能を表すバレー分極度 $\rho = (I_{\sigma_+} - I_{\sigma_-}) / (I_{\sigma_+} + I_{\sigma_-})$ を算出した。次に、機械学習により各位置における300 Kのスペクトル情報(強度、エネルギー、線幅、etc.)と15 Kで観測されるバレー分極(Fig. 1)との相関を解析することで、バレー分極の不均一性と関係の深いスペクトル情報の特定を試みた。教師あり機械学習アルゴリズムであるRandom Forestを採用し、学習データとして約3万のスペクトルを用いて学習を行った。予測には学習データに含まれない1L-WSe₂(未学習試料)の300 Kでの測定結果を入力情報として用いた。その結果、300 Kの未学習試料のスペクトル情報から、15 Kの空間的なバレー分極の不均一性を高精度で予測することに成功した。また、データ科学的に各スペクトル情報の重要度を分析し、不均一性の発現に最も寄与の大きい物性パラメータを特定した[4]。講演ではさらに、機械学習の結果に基づき、不均一性の原因を物性物理の観点から議論する。

[1] K. F. Mak *et al.*, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 494 (2012).

[2] Y. Miyauchi *et al.*, *Nat. Commun.* **9**, 2598 (2018).

[3] K. Shinokita *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* 1900260 (2019).

[4] K. Tanaka *et al.*, submitted.

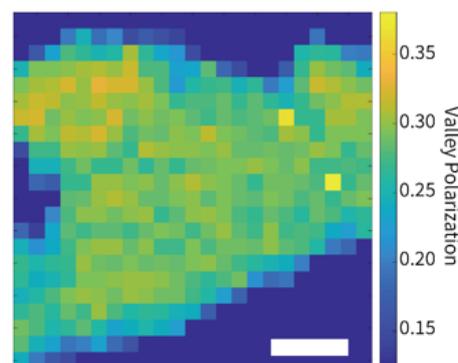


Fig.1 Valley polarization map of 1L-WSe₂ at 15 K. Scale bar indicates 3 μm .