

機械学習解析による二次元半導体の局所バレー分極決定要因の特定

Study on the Origin of the Local Variation in Valley Polarization of Two Dimensional Semiconductors Using Machine Learning Analysis

京大エネ研 [○]田中 絢也, 八谷 健吾, 張 文金, 松田 一成, 宮内 雄平

Kyoto Univ., [○]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) は光子スピン (σ_+ , σ_-) と励起子バレー状態 (+K, -K) を相互変換できる特異な光物性を利用した光バレートロニクス舞台として近年大きな注目を集めている [1-4]。1L-TMDCs は極めて大きな比表面積を持つため、局所的な欠陥密度、基板の影響によるひずみ、キャリア密度の不均一性、表面分子吸着などの影響を受けやすく、試料上の位置ごとに異なる光物性を示す。光バレートロニクス応用上重要なバレー分極も試料上の位置に依存してばらついた値を示す。しかしながら、局所的なバレー分極と、局所状態の指標となる様々な発光スペクトル特徴量 (強度、エネルギー、線幅など) との間には、これまで明確な相関は見つかっていない。バレー光物性の局所的なばらつきの要因を特定できていないことは、光バレートロニクスの基盤を確立する上で解決すべき重要な課題である。

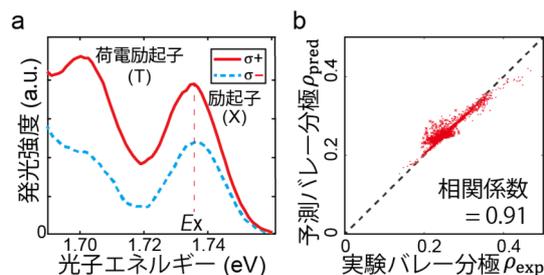
本研究では、1L-TMDCs の局所バレー分極を左右する要因を特定するため、発光スペクトルの位置ごとのばらつきを測定し、それを利用した機械学習解析を行った [4]。代表的な 1L-TMDCs である単層 WSe₂ について、室温 (300 K)・低温 (15 K) の偏光分解発光スペクトルの空間マッピング測定を行い、室温発光スペクトルから特徴量 (入力情報) を、低温の偏光分解発光スペクトル (Fig. 1a) から励起子バレー分極 ρ_{exp} (出力情報) を算出した。約 7000 点のデータセットを用いて、ランダムフォレスト機械学習モデルを構築したところ、モデルによる予測値 ρ_{pred} は実測値 ρ_{exp} をよく再現した (Fig. 1b)。そこで、機械学習モデルの変数重要度解析を行った。励起子有効寿命とキャリア密度に関連する特徴量が、バレー分極予測値への寄与が特に大きいことを示す結果が得られた (Fig. 1c)。この結果は励起子有効寿命とキャリア密度が励起子バレー分極を大きく左右することを示している。講演では、この結果が示唆する励起子バレー緩和機構 [2,4] について詳細に議論する。

[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.* **29**, 1900260 (2019).

[4] K. Tanaka *et al.*, *ACS Nano* **13**, 12687 (2019).



特徴量	相対重要度	関係する物理量
発光強度	1.0	励起子有効寿命
TX強度比	0.64	キャリア密度
Ex	0.43	歪み・基板
発光半値幅	0.26	不均一性・基板

Fig.1 (a)Polarization resolved photoluminescence spectra at 15 K. (b)Correlation plot of observed (ρ_{exp}) and predicted (ρ_{pred}) valley polarization. (c) Spectral features, variable importance, and related physical quantities.