

空間不均一性を利用した二次元半導体バレー光物性の機械学習解析

Machine Learning Analysis of Valley Optical Properties in Two Dimensional Semiconductors Using Spatial Valley Polarization Heterogeneity

京大エネ研 [○]田中 絢也, 八谷 健吾, Zhang Wenjin, 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) のバレー自由度の利用に向けた萌芽的な情報処理の概念オプトバレートロンクスが近年注目を集めている[1-3]。1L-TMDCs においては、円偏光 (σ_+ , σ_-) を用いて励起子を特定のバレー (+K, -K) に選択励起できるため[1]、円偏光と励起子のバレー情報を相互に変換可能である。これを用いることで、低消費エネルギーかつ高速な光情報デバイスの実現が期待されている。1L-TMDCs の光物性は、2次元物質特有の巨大な比表面積のため、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、顕著な空間不均一性 (Fig. 1) を示す。このような不均一性は応用上問題である一方、欠陥密度、ひずみ、キャリア密度等を光物性を左右する潜在的パラメータとみなせば、場所ごとに、異なるパラメータセットを持つ状況がコンビナトリアルに実現していると捉えることができる。

本研究では、未だその原因が明らかでない空間不均一性を含めた 1L-TMDCs のバレー光物性の完全解明を目指して、光物性の空間不均一性を積極利用した機械学習解析を行った[4]。典型的 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。室温 PL から、強度、励起子エネルギーなどのスペクトル情報を抽出し、低温での励起子バレー分極 ρ_X を、各円偏光成分の強度 (I_{σ_+} , I_{σ_-}) を用いて、関係式 $\rho_X = (I_{\sigma_+} - I_{\sigma_-}) / (I_{\sigma_+} + I_{\sigma_-})$ により算出した。機械学習の手法として教師あり機械学習アルゴリズムである Random Forest (RF) 法 (Fig. 1) を採用し、空間座標ごとの各種スペクトル情報を入力変数、バレー分極を目的変数として、機械学習を行なった。その結果をもとに、RF 法における変数重要度を抽出することで、バレー分極を左右する物性パラメータを特定した[4]。その結果、発光強度、励起子・荷電励起子発光強度比、励起子エネルギー、発光ピーク幅の順に、バレー分極の決定要因として重要であることが明らかとなった。講演では、この結果の物理的示唆について議論する。

- [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).

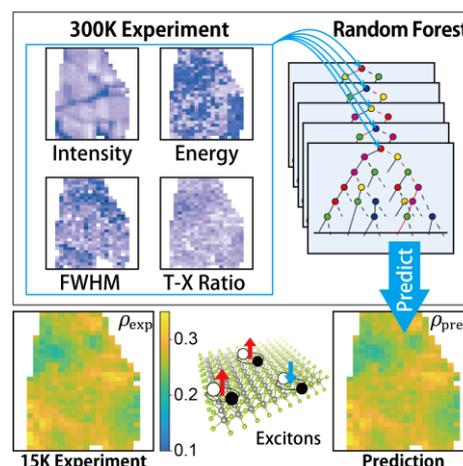


Fig. 1 The flow of experiment and machine learning procedure to predict and analyze valley polarization of excitons in 1L-WSe₂.